



Coupling between permeability and damage in concrete

Stefano Dal Pont

► To cite this version:

Stefano Dal Pont. Coupling between permeability and damage in concrete. Engineering Sciences [physics]. Ecole des Ponts ParisTech, 2004. English. NNT : . pastel-00001001

HAL Id: pastel-00001001

<https://pastel.hal.science/pastel-00001001>

Submitted on 28 Jan 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



ECOLE NATIONALE DES PONTS ET CHAUSSEES

Laboratoire d'Analyse des Matériaux et Identification
(LAMI)

THESE DE DOCTORAT

Spécialité : Structures et Matériaux

Présentée par

Stefano Dal Pont

Titre :

**Lien entre la perméabilité et l'endommagement dans
les bétons à haute température**

Soutenue le 21 Septembre 2004

Devant le jury composé de :

J.M. Torrenti Président

F. Maceri Rapporteur

G. Pijaudier-Cabot Rapporteur

M. Brocato Examineur

A. Ehrlacher Directeur de Thèse

B.A. Schrefler Directeur de Thèse

Remerciements

Ce travail a été réalisé grâce à une collaboration entre le LAMI (Laboratoire d'Analyse des Matériaux et d'Identification) à l'École Nationale des Ponts et Chaussées (France) et le Département d'Ingénierie génie Civil à l'université de Padoue (Italie). Je désire donc en tout premier lieu adresser toute ma reconnaissance à mes directeurs de thèse, M. Alain Ehrlacher et M. Bernhard Schrefler pour m'avoir fait confiance et m'avoir dirigée pendant ces années. Je tiens tout particulièrement à les remercier pour leur patience tout au long de ce travail, ainsi que pour la richesse de leur idées, étayées par leur vastes connaissances en mécanique et une rigueur sans faille.

Ma gratitude va également à Monsieur Torrenti qui fut président du jury bienveillant et passionné. Messieurs Pijaudier-Cabot et Maceri ont eu la patience, malgré leurs nombreuses occupations, de disséquer ce manuscrit en tant que rapporteurs : qu'ils soient tous deux remerciés pour la richesse de leurs commentaires et pour l'indulgence dont ils ont bien voulu faire part.

Monsieur Brocato a bien voulu participer à ce jury et je l'en remercie vivement. Ses questions pertinentes sont toujours une source de réflexion et l'occasion d'explorer plus en profondeur nombre de points.

Je remercie également Didier Dupas, Horacio Colina et Didier Berg pour leur aide précieuse et leur conseils sans qui la partie expérimentale de ce travail n'aurait pu être aussi riche.

Merci aussi aux professeurs K. Sab et C. Majorana de m'avoir accueilli dans leur laboratoires et de m'avoir donné la chance de travailler avec des équipes si riches de qualités scientifiques.

Enfin, merci bien entendu aux amis que j'ai rencontré pendant ces années et qui m'ont soutenu pendant les périodes difficiles que j'ai traversé. Merci à Céline, Aziz, Laurent, Yahia, Tung, Saskia, Ali, Lucia, Walid, Alex, Marco, Bacco, ... et tous les membres du LAMI pour l'ambiance familiale qui y règne et pour les nombreux coups de main des uns et des autres ...

Enfin je voudrais adresser toute ma gratitude à mes parents pour leur soutien et pour m'avoir supporté et encouragé pendant ces années.

Résumé

Le béton est un matériau de construction qui trouve son champ d'utilisation dans pratiquement toutes les domaines du génie civil. Actuellement il est sans doute le plus utilisé pour les avantages économiques et techniques qu'il présente.

Cependant, bien que largement utilisé depuis presque deux siècles, il s'agit d'un matériau dont le comportement n'a pas encore été totalement compris. Sa microstructure poreuse rend son comportement difficilement prévisible, spécialement dans des conditions particulières comme, par exemple, pendant une élévation de température. Celle ci peut se produire essentiellement dans deux cas : des conditions accidentelles (par exemple un incendie) et des conditions normales d'utilisation (par exemple un stockage déchets nucléaires). Ce travail vise à apporter une contribution à l'étude des phénomènes mis en jeu dans une telle situation et, en particulier, vise à étudier l'évolution de la perméabilité intrinsèque en fonction de l'évolution des caractéristiques du béton. La caractérisation de la perméabilité intrinsèque (qui n'est pas facilement mesurable à chaud) est, en fait, indispensable pour décrire et modéliser de manière correcte les phénomènes de transport qui se produisent dans un milieu poreux.

Une étude expérimentale en collaboration avec le CEA a été menée sur une éprouvette cylindrique à échelle réelle pour la mesure de l'évolution des températures et des pressions du gaz dans le béton. Nous avons modélisé la maquette à l'aide de deux modèles mathématiques : un modèle thermo-hydro-chimique (THC) et un modèle thermo-hydro-chémo-mécanique (THCM). L'utilisation du modèle THC, implémenté à l'aide de la méthode des volumes finis, a permis une première étude, qualitative, du comportement du béton soumis à un chauffage. Cette modélisation, qui, par souci de simplicité, a négligé les effets liés à la mécanique, a permis une première description des phénomènes de transport, changement de phase, évolution de la microstructure auxquels le béton est sujet lorsqu'on élève la température. Ensuite, la modélisation a été complétée à l'aide du modèle THCM par éléments finis, implémenté dans le code de calcul Hitecosp (développé à l'université de Padoue). Ce code donne une description très complète du comportement du béton et prend en compte les effets liés à la mécanique à l'aide d'une loi de comportement du béton élastique-endommageable.

Grâce à une comparaison entre les résultats issus des analyses expérimentales et numériques, nous avons pu aboutir à la proposition d'une loi pour décrire l'évolution de la perméabilité intrinsèque en fonction de l'endommagement total.

Mots clés : béton, haute température, pression du gaz, expérimentation, modèle thermo-hydro-chimique, modèle thermo-hydro-chémo-mécanique, perméabilité, endommagement.

Abstract

Due to its technical and economical advantages, concrete is nowadays the most used building material in civil engineering.

Even if its use is known since nearly two centuries, its behavior has not been yet completely explained due to the complexity of its porous microstructure. This fact is quite evident under particular conditions such as, by instance, during an elevation of temperature. This condition can mainly occur in two cases : due to a casualty (e.g. a fire) or in normal use conditions (e.g. storage of nuclear rejects). This work aims at contributing to the study of the phenomena that can be observed in concrete exposed to high temperatures and, in particular, focuses on the study of the evolution of intrinsic permeability. The characterisation of permeability (which is hardly measurable in hot conditions) is necessary for describing and modelling transport phenomena which occur in porous media.

An experimental study has been made in collaboration with the CEA. A real-scale hollow cylinder has been instrumented with gauges for studying the evolution of temperature and gas pressure fields inside concrete. Later, the cylinder has been then numerically modelled by means of a thermo-hydro-chemical (THC) and a thermo-hydro-chemo-mechanical (THCM) model. The THC model, implemented by means of the finite volume method, has allowed a first, qualitative study of the behaviour of concrete submitted to high temperature. This model, which, for sake of simplicity, has neglected all mechanical effects, has allowed the description of the main phenomena occurring inside concrete : mass transport, phase changes, microstructure evolution. Later, the modelling has been completed by means of the THCM model using the Hitecosp code, implemented by means of the finite element method at the university of Padua. This code allows a very complete description of the phenomena occurring inside concrete and takes into consideration the mechanical behavior of concrete by means of an elastic constitutive law. Total damage is also taken into account.

A comparison between experimental data and numerical results has allowed the proposition of a law describing the evolution of permeability as a function of total damage.

Key words : concrete, high temperature, gas pressure, experiment, thermo-hydro-chemical model, thermo-hydro-chemo-mechanical model, permeability, damage.

Table des matières

Introduction	21
1 Généralités sur le béton et le béton à haute température	25
1.1 Introduction	25
1.2 Le béton et ses composantes	25
1.2.1 L'eau	25
1.2.2 Les agrégats	26
1.2.3 Le ciment	27
1.2.4 Les ajouts et les adjuvants	27
1.2.4.1 Les ajouts	27
1.2.4.2 Les adjuvants	28
1.3 Comportement à haute température	29
1.4 Conclusion	31
2 Équations du modèle	33
2.1 Description du problème	33
2.1.1 Hypothèses	33
2.1.2 Description du milieu poreux	34
2.1.3 Description de la phase liquide	34
2.1.4 Description du mélange gazeux	35
2.2 Établissement des équations du problème	35
2.3 Processus de moyenne	36
2.3.1 Choix du volume élémentaire représentatif	36
2.3.2 Opérateurs de moyenne	38
2.3.3 Équation générale de bilan microscopique	40
2.3.4 Équation générale de bilan macroscopique	41
2.4 Équations de bilan	42
2.4.1 Cinématique	42
2.4.2 Équations de bilan au niveau microscopique	45

2.4.3	Équations de bilan au niveau macroscopique	46
2.4.3.1	Équations macroscopiques de bilan de masse	46
2.4.3.2	Équation de bilan du moment linéaire	49
2.4.3.3	Équation de bilan du moment angulaire	50
2.4.3.4	Équation de bilan de l'énergie	50
2.4.3.5	Équation de bilan de l'entropie	51
2.5	Lois constitutives	52
2.5.1	Besoins expérimentaux	52
2.6	Conclusions	52
3	Description des phases fluides	55
3.1	Le rôle de l'eau dans le béton à haute température	55
3.2	Type d'eau dans le béton	56
3.3	Changements de phase de l'eau	57
3.4	Écoulement dans un milieu poreux	58
3.4.1	Loi de Darcy	58
3.4.2	Loi de Fick	59
3.4.3	Transport de l'eau adsorbée	61
3.5	Détermination du tenseur $\mathbf{K}^\pi$: première approche, écoulement dans un tube capillaire	62
3.5.1	Estimation de la perméabilité à la phase liquide dans le milieu poreux	64
3.5.2	Estimation de la perméabilité à la phase gazeuse dans le milieu poreux	67
3.6	La perméabilité des bétons	70
3.6.1	Fluide incompressible	71
3.6.2	Fluide compressible	72
3.6.2.1	Détermination de la perméabilité apparente	72
3.6.3	Écarts entre la perméabilité à l'eau et la perméabilité au gaz des bétons	75
3.6.3.1	Sous-évaluation de la perméabilité à l'eau	75
3.6.3.2	Surévaluation de la perméabilité au gaz	76
3.7	Équations d'état des fluides et loi de vaporisation	77
3.7.1	Pression de vapeur saturante	81
3.7.2	Enthalpie de vaporisation	82
3.7.3	Viscosité de l'air humide	82
3.7.4	Viscosité de l'eau liquide	83
3.7.5	Coefficient de diffusion de l'eau vapeur	84
3.8	Conclusion	85

4	Description du squelette du milieu poreux	87
4.1	Structure du ciment hydraté	87
4.2	Structure poreuse du béton	89
4.2.1	Détermination de la porosité	89
4.2.2	Distribution des pores	90
4.3	Description synthétique de la géométrie du volume poreux	91
4.3.1	Rayon propre et rayon d'accès	91
4.3.1.1	Définition du rayon propre et du rayon d'accès	91
4.3.1.2	Lien entre les rayons du volume poreux et les mouvements de fluide	92
4.3.2	Description à un seul paramètre	94
4.4	Conséquences de l'évolution de la température sur la géométrie du milieu poreux	95
4.4.1	La déshydratation	95
4.4.2	Évolution de la porosité n avec la température	97
4.4.3	Évolution du réseau poreux avec la température	98
4.4.4	Évolution de la relation $S(p^c)$ avec la température	98
4.5	Lois constitutives pour le milieu poreux et leur évolution avec la température	100
4.5.1	Conductivité thermique	100
4.5.2	Chaleur spécifique et capacité thermique	102
4.5.3	Perméabilités relatives k_{rg} et k_{rg}	102
4.6	Conclusions	103
5	Modèle Thermo-Hydro-Chimique	105
5.1	Introduction	105
5.2	Le modèle mathématique	105
5.2.1	Description de la microstructure	106
5.2.2	Équations pour la description des phénomènes chimiques	107
5.2.3	Équations d'état des fluides	108
5.2.4	Équations de conservation des masses	108
5.2.5	Équations de transport de masse	109
5.2.5.1	Loi de Darcy	109
5.2.5.2	Loi de Fick	110
5.2.6	Perméabilité	111
5.2.7	Équation de conservation de l'énergie	111
5.2.8	Équations de transport de l'énergie	114
5.2.9	Équilibre du ménisque	114

5.2.10	Viscosité dynamique	114
5.3	Le système final	115
5.3.1	Équations du modèle	115
5.3.2	Constantes et valeurs de référence	116
5.4	Méthode de discrétisation en espace	116
5.5	Méthode numérique de résolution	119
5.6	Conclusions	120
6	Modèle Thermo-Hydro-Chémo-Mécanique	121
6.1	Introduction	121
6.2	Le modèle mathématique	121
6.3	L'endommagement	122
6.3.1	Définition et mesure de l'endommagement	123
6.3.2	Approche thermodynamique	124
6.3.2.1	Potentiel thermodynamique	124
6.3.2.2	Potentiel de dissipation	126
6.3.3	Évolution de la variable endommagement : formulation non-locale . .	128
6.3.3.1	Formulation énergétique	129
6.3.3.2	Formulation en termes de déformation [Mazars89]	130
6.4	Endommagement thermo-chimique	131
6.5	Équations d'état pour la mécanique	132
6.5.1	Potentiel thermodynamique	133
6.5.2	Comportement élastique isotrope linéaire	134
6.5.3	Tenseur de contraintes effectives	136
6.6	Évolution des modules E , ν et des résistances à la compression et à la traction	136
6.6.1	Mesure des propriétés mécaniques	136
6.6.2	Résistance à la compression	137
6.6.3	Module de Young et coefficient de Poisson	137
6.6.4	Résistance à la traction	138
6.7	Comparaison entre les modèles THC et THCM	139
6.7.1	Cinétique de la déshydratation	139
6.7.2	Évolution de la porosité n	140
6.7.3	Évolution de la perméabilité intrinsèque	141
6.7.4	Les équations de conservation	142
6.8	Conditions initiales et aux limites pour le modèle THCM	145
6.9	Solution des équations du système	146

6.9.1	Discrétisation	146
6.9.2	Discrétisation du modèle dans le temps	147
6.9.3	Linéarisation du système	148
6.10	Conclusions	149
7	Résultats expérimentaux et numériques	151
7.1	Introduction	151
7.2	Description de l'essai	151
7.2.1	Choix de la géométrie	152
7.2.2	Confection du béton	153
7.2.2.1	Composition	153
7.2.2.2	Cure appliquée au béton	153
7.2.2.3	Caractéristiques mécaniques	153
7.2.3	Dispositif de mesure	153
7.2.3.1	Les capteurs	154
7.2.3.2	La centrale de mesure	156
7.2.4	Description de l'essai	156
7.3	Résultats expérimentaux	157
7.4	Modélisation numérique	159
7.4.1	Modèle THC	159
7.4.1.1	Discrétisation du cylindre	159
7.4.1.2	Conditions initiales et aux limites	159
7.4.1.3	Caractérisation du matériau	160
7.4.2	Modèle THCM	161
7.4.2.1	Conditions initiales et aux limites	161
7.4.2.2	Caractérisation du matériau	163
7.4.3	Mesure de la perméabilité au gaz	164
7.4.3.1	Protocole de mesure	165
7.4.3.2	Préconditionnement	165
7.5	Comparaison entre les résultats expérimentaux et numériques	166
7.6	Retour sur l'évolution de la perméabilité	172
7.6.1	Mesure de la perméabilité dans le béton chauffé	174
7.6.2	Comparaison des résultats	175
7.6.3	Considérations sur la loi d'évolution	175
7.7	Conclusions	177
	Conclusion et perspectives	179

ANNEXES	181
ANNEXE A	181
ANNEXE B	183
ANNEXE C	188
ANNEXE D	196
ANNEXE E	203

Table des figures

1.1	Mécanisme du spalling	30
2.1	Volume typique dv dans un milieu poreux	37
2.2	Moyenne de ζ en fonction de la taille du VER	38
2.3	Interprétation de la fonction d'observation et de la fonction de distribution [Gilbert87]	40
3.1	Diagramme température-volume spécifique	58
3.2	Distribution des capillaires rectilignes remplis de gaz et d'eau dans un milieu poreux	64
3.3	Écoulement visqueux	65
3.4	Distribution des capillaires rectilignes remplis d'eau dans un milieu poreux	65
3.5	Profil des vitesses d'un gaz dans un capillaire sous l'effet d'un gradient de pression	68
3.6	Distribution des capillaires rectilignes remplis de gaz dans un milieu poreux	69
3.7	Perméabilité relatives vs. saturation en liquide ([Genuchten80])	71
3.8	Schéma conditions au limite	72
3.9	Exemple et interprétation d'un graphe obtenu à partir des mesures expérimentales de perméabilité selon l'approche de Klinkenberg	75
3.10	Comparaison entre la pression de vapeur saturante de l'eau en tant que corps pur p_{sat} et p_{sat}^a	79
3.11	Volume molaire pour l'eau liquide et l'eau vapeur (données expérimentales [Haywood90]) vs. température	80
3.12	Volume molaire pour l'eau liquide et l'eau vapeur (données expérimentales [Haywood90]) vs. pression	80
3.13	Volume molaire pour l'eau vapeur (données expérimentales [Haywood90]) et l'eau vapeur comme gaz parfait vs. température	81
3.14	Pression de vapeur saturante selon la formulation de Hyland-Wexler et les données expérimentales [Haywood90]	82
3.15	Enthalpie de vaporisation selon la formule de Watson et les données expérimentales [Haywood90] vs température	83
3.16	Viscosité de l'air humide selon la formule 3.86	83

3.17	Viscosité de l'eau selon la formule 3.87	84
4.1	Structure du ciment durci selon le modèle de Feldman et Sereda [Feldman68]	89
4.2	Description du milieu poreux avec les trois phases	90
4.3	Description du milieu poreux. Le cercle (1) représente la sphère associée au rayon d'accès et le cercle (2) la sphère associée au rayon propre au point A	92
4.4	Imprégnation du milieu poreux ($S^l(A) < S^l(B) < S^l(C)$)	93
4.5	Séchage du milieu poreux ($S^l(A) > S^l(B) > S^l(C)$)	94
4.6	Relation $p^c(S)$ selon la formulation 4.2	95
4.7	Valeurs expérimentales et approximation selon la formule 4.7 pour différents bétons	97
4.8	Évolution de la porosité à température croissante (essai de porosité au mercure)	98
4.9	Isothermes de Bazant	99
4.10	Isothermes selon la formulation 4.15 en fonction de la pression capillaire (BO)	101
4.11	Isothermes selon la formulation 4.15 en fonction de la température (BO) . .	101
4.12	Isothermes selon la formulation 4.15 en fonction de la pression capillaire (BHP)	101
4.13	Isothermes selon la formulation 4.15 en fonction de la température (BHP) .	101
4.14	Perméabilités relatives pour un BO	102
4.15	Perméabilités relatives pour un BHP	102
5.1	Discrétisation 1D du domaine Ω	117
6.1	Schéma de la dissipation suite à l'écoulement plastique et à la croissance de l'endommagement [Mazars89]	128
6.2	Évolution de la résistance à compression pour le béton M100 [Pimienta03] .	137
6.3	Évolution du module de Young du béton M100 [Pimienta03]	138
6.4	Évolution de la résistance à traction pour un béton BHP [Hiteco]	138
6.5	Production d'eau par déshydratation selon les deux formulations THC et THCM	140
6.6	Evolution de la porosité selon les deux formulations THC et THCM	141
7.1	Schéma de la maquette	152
7.2	Résultats qualitatifs issus des capteurs de teneur en eau	155
7.3	Capteur de pression	156
7.4	Température vs rayon	157
7.5	Mise en évidence de la perte de masse aux alentours de 105°C : on remarque la fuite d'air/vapeur d'eau à travers une fissure et des macro-pores	158
7.6	Pression du gaz vs temps	158
7.7	Discrétisation 1D du domaine Ω	159
7.8	Maillage 2D	162

7.9 Dispositif expérimental de mesure de perméabilité au gaz : perméamètre à charge constante	164
7.10 Schéma de la cellule du perméamètre	164
7.11 Résultat d'un essai de perméabilité au gaz sur un échantillon vierge	166
7.12 Température vs rayon à $t=20h$	166
7.13 Température vs rayon à $t=40h$	167
7.14 Température vs rayon à $t=60h$	167
7.15 Pression numérique et expérimentale sur le capteur 1 (3cm)	168
7.16 Pression numérique et expérimentale sur le capteur 3 (16cm)	168
7.17 Pression numérique et expérimentale sur le capteur 4 (25cm)	169
7.18 Évolution de la porosité avec la température	169
7.19 Saturation en liquide pour les deux modèles	170
7.20 Distribution de la porosité : modèle THC et THCM	170
7.21 Évolution de la perméabilité intrinsèque avec la température ($\times 10^{-17}$)	171
7.22 Perméabilité vs. rayon	171
7.23 Endommagement total vs. rayon	171
7.24 Endommagement mécanique à $t=20h, 40h, 60h$	171
7.25 Endommagement total à $t=20h, 40h, 60h$	172
7.26 Extraction des disques	174
7.27 Comparaison entre l'évolution de perméabilité intrinsèque numérique et expérimentale ($\times 10^{-17}$)	175
7.28 Endommagement total et thermo-chimique	176

Liste des tableaux

2.1	Propriétés thermodynamiques pour l'équation de bilan générale microscopique	45
3.1	Caractéristiques physiques des gaz employés pour des mesures de perméabilité	73
4.1	Paramètres pour l'eq.4.2 à température ambiante	95
5.1	Constantes et valeurs de référence	116
7.1	Composition du béton étudié	153
7.2	Propriétés mécaniques pour le béton M100 à température ambiante	154
7.3	Conditions initiales THC	160
7.4	Conditions aux limites THC	160
7.5	Conditions initiales THCM	162
7.6	Conditions aux limites THCM	163
7.7	Valeurs des paramètres A_θ , A_θ^1 , A_θ^2 , A_p , A_D	173
7.8	Perméabilité intrinsèque dans le béton	175

Introduction

Le béton est un matériau de construction dont les origines remontent à l'aube de la civilisation européenne : il y a plus de mille ans les romains utilisaient comme liant la chaux vive obtenue par le chauffage du calcaire, et Vitruve, ingénieur militaire de César, faisait explicitement référence au béton dans ses célèbres "dix livres d'architecture". Mais c'est seulement au XIX siècle que, grâce aux travaux de Smeaton, Vicat (ingénieur des Ponts), Aspin et Lambot que la société moderne a connu un nouveau matériau de construction, économique, moulable, résistant aussi bien à la compression qu'à la traction : le béton armé. L'impact sur une société en pleine révolution industrielle est énorme : ce matériau a permis aux ingénieurs et architectes de libérer les formes et d'échapper aux restrictions imposées par la pierre. Dans l'esprit de l'époque la promesse était d'un grand avenir pour constituer artificiellement, par moulage, les moellons des futures maçonneries.

A distance de plus d'un siècle, il est clair que les espoirs des ingénieurs de l'époque sont devenus à peu près réalité. Le béton est un matériau qui trouve son champ d'utilisation dans pratiquement toutes les domaines de l'ingénierie civile : des coulages massifs pour les digues aux structures légères et fines comme, par exemple, la toiture du célèbre palais des Expositions à Turin (Italie) réalisé par Nervi.

Malgré sa longue histoire, le béton fait encore aujourd'hui l'objet de nombreuses études. Il s'agit en fait d'un milieu composite, formé par plusieurs espèces chimiques de grande complexité et dont le comportement n'a pas encore été clarifié de manière satisfaisante, spécialement dans des conditions d'utilisation particulières. Actuellement, de nombreux travaux sont en cours pour caractériser le comportement du béton hors conditions standards comme, par exemple, dans une ambiance agressive d'un point de vue chimique (e.g. la lixiviation) ou thermique.

En particulier, l'objet de ce mémoire est l'étude du comportement du béton soumis à une élévation de température. Celle-ci peut se produire essentiellement dans deux cas : suite à un incident (e.g. incendie dans un tunnel ou dans une centrale nucléaire) ou dans des conditions d'utilisation normale (e.g. dépôt pour déchets nucléaires). Dans les deux situations (qui, généralement, se distinguent par une vitesse de chauffage différente), l'élévation de température ne met pas seulement en jeu une dégradation des caractéristiques mécaniques du matériau mais aussi des réactions de grande complexité, le béton étant un liant hydraulique formé par différentes espèces (eau, ciment, sable, gravillons, ...). La microstructure du béton, formée des pores remplis d'eau liquide/vapeur et d'air, rend la description du comportement du béton encore plus complexe. Évidemment, une modélisation soignée doit prendre en compte la matrice cimentaire ainsi que les autres phases incluses dans la structure poreuse et les phénomènes qui les caractérisent : la migration du mélange gaz/liquide, l'évaporation et la condensation, la chaleur latente, la conductivité thermique, Toutes ces phénomènes sont ainsi compliqués par le couplage qui existe entre eux : par exemple, le transport de la

chaleur et du mélange gaz/liquide entraînent une dégradation mécanique du béton à travers la formation de microfissures. Celles-ci augmentent la conductivité du milieu et donc rendent les phénomènes de transport encore plus importants.

Cette problématique, dont la solution n'est pas évidemment banale, a tracé la voie pour un nouveau champ d'études, communément nommé "poromécanique", autrement dit, l'étude des milieux poreux en tant que matériaux caractérisés par une structure poreuse remplie de gaz et de liquide et dont l'étude requiert la prise en compte d'un comportement couplé.

Ce travail a pour objectif d'apporter une contribution à cette étude vis-à-vis des phénomènes de transport qui se produisent dans un milieu poreux et, en particulier, vise à établir une relation entre l'endommagement et la perméabilité.

Avant d'entrer dans les détails, on présente d'abord la structure et le contenu des chapitres qui forment ce mémoire de thèse.

Le chapitre 1 sera consacré à une brève description du béton. Il comprend sa composition, ses composantes ainsi qu'une description qualitative du comportement en température du matériau cimentaire.

Ensuite, le chapitre 2 nous permettra d'introduire un modèle mathématique général pour la description du comportement d'un milieu poreux quelconque. Nous définirons un système d'équations à l'échelle microscopique : on introduira ensuite des principes de moyenne qui nous permettront de définir les équations à l'échelle macroscopique. On aura donc un modèle général, qui nous permettra d'établir quels sont les différents paramètres et grandeurs dont on aura besoin pour décrire le comportement du béton à haute température.

Les besoins du modèle mathématique, soit expérimentaux, soit théoriques seront traités au chapitre 3, pour les phases fluides, et 4, pour la phase solide. Le comportement des trois phases présentes dans notre milieu poreux sera donc décrit, soit en terme de comportement soit en terme de lois constitutives. Le but de ces deux chapitres sera donc de donner les principes de base nécessaires pour caractériser les phases fluides (eau liquide, eau vapeur et air sec) ainsi que la phase solide.

La description détaillée du comportement des phases qui forment le béton, nous permettra d'introduire le chapitre 5, décrivant le modèle THC. Ce modèle prendra en compte les phénomènes couplés thermo-hydrauliques qui se produisent dans le béton suite à une augmentation de la température. En première approximation, les phénomènes liés à la mécanique seront négligés, le but du modèle étant d'établir une première modélisation, relativement simple, permettant de mettre en évidence l'importance des phénomènes de changement de phase ainsi que des phénomènes de déshydratation (et ses conséquences sur la microstructure du béton) et de transport.

Il faut toutefois remarquer que l'élévation de température engendre dans le béton des contraintes et des déformations. Il s'avère donc nécessaire de prendre en considération des phénomènes liés à la mécanique et, donc, le passage d'un modèle THC vers un modèle thermo-hydro-chémo-mécanique ou THCM. Ceci fera l'objectif de notre chapitre 6. En particulier, ce modèle permettra la prise en compte de l'endommagement. Il est évident que ceci est important vis-à-vis des phénomènes de transport ; la microfissuration de la pâte de ciment que l'on observe lorsqu'on chauffe le béton, a une forte influence sur la perméabilité et, en général, sur les phénomènes de transport qui ont lieu au sein du milieu poreux.

Enfin, le chapitre 7 présentera les travaux expérimentaux qui ont été réalisés dans le cadre de cette thèse ainsi que les résultats des simulations numériques issues des deux modèles THC et THCM. La comparaison entre les deux modèles ainsi que la comparaison avec les résultats expérimentaux permettra de mettre en évidence l'importance de l'endommagement pour une description plus soignée du comportement du béton à haute température. Les résultats obtenus de manière numérique et expérimentale nous permettront de proposer une nouvelle loi endommagement-perméabilité, prenant en compte la déshydratation de la pâte de ciment.

Une conclusion générale est enfin proposée pour faire le point sur les résultats obtenus à l'aide des deux modèles mathématiques et des résultats issus des expériences de laboratoire. De plus, les axes de développement et les perspectives seront abordés.

Chapitre 1

Généralités sur le béton et le béton à haute température

1.1 Introduction

Le matériau sur lequel se pose ce travail est le béton, et en particulier son comportement à haute température. Le béton est un matériau composite, formé du ciment, des agrégats (gravillons et sable), de l'eau et éventuellement des ajouts. En raison de son hétérogénéité, le béton s'avère un matériau particulièrement complexe et évolutif : il subit de profondes transformations physico-chimiques pas seulement lorsqu'il est soumis à une élévation de température, mais même à partir des instants qui suivent sa préparation (notamment la réaction d'hydratation et le phénomène de prise). Il est donc indispensable de bien comprendre tous les paramètres qui jouent un rôle dans le béton, pour pouvoir comprendre son comportement.

Le but de ce chapitre est de donner des informations de base et une description qualitative du matériau objet de la thèse. Dans la première partie du chapitre, on présente le matériau béton et ses différents ingrédients nécessaires à sa fabrication. Ces aspects seront aussi approfondis dans les chapitres suivants. En suite, on donnera une description du comportement du béton à haute température ; ceci nous permettra d'introduire les différents phénomènes qui sont entraînés lorsque le béton est soumis à des températures non-usuelles.

1.2 Le béton et ses composantes

1.2.1 L'eau

L'eau constitue le liant pour le ciment : elle est donc une composante essentielle pour la formation de chaque matériau cimentaire. Elle intervient dans toutes les phases de vie, en influençant toutes les propriétés du béton, soit à froid, soit, comme on verra plus loin, à chaud. L'eau a essentiellement deux fonctions : une fonction physique, qui confère au béton frais les propriétés rhéologiques d'un liquide (permettant donc son écoulement et le moulage), et une fonction chimique en tant que liant de la poudre de ciment. Elle sert aussi à mouiller les agrégats, et donc à assurer un bon lien avec la pâte de ciment. L'eau peut aussi présenter des caractéristiques négatives : celle qui reste en excès dans les pores est

responsable de certains phénomènes comme par exemple le retrait de dessiccation ou encore l'éclatement du béton en cas de gel. En général toutes les eaux potables peuvent être utilisées pour la production du béton ; l'eau de mer, même si elle est agressive vis-à-vis du ciment durci, peut être utilisée pour la fabrication d'un béton non armé. Par contre des agents en suspension (particules d'argile, micro-organismes, etc) ou des agents en solution dans l'eau provenant des agents en suspension, se révèlent fortement agressifs et interfère avec le durcissement du béton. En particulier, les substances organiques s'avèrent très agressives et dégradantes vis-à-vis la pâte de ciment [Colleparidi92].

L'eau dans la pâte de ciment hydraté est contenu sous différentes formes, notamment sous forme d'eau libre, adsorbée et liée. En particulier l'eau libre est constituée de la phase condensée qui n'est plus dans le champ d'influence des forces superficielles et qui est en équilibre avec la phase gazeuse par l'intermédiaire d'une surface [Moranville92]. L'existence de liaisons libres en surface entraîne la création d'une tension superficielle du solide et d'un effet de champ électrique. L'*adsorption* est le phénomène qui, par fixation de molécules ou d'ions du milieu extérieur, liquide ou gazeux, tend à réduire cette énergie libre superficielle. Suivant l'importance des énergies mises en jeu, on distingue l'adsorption physique et la chimisorption. Plus de détails sont donnés en 3.2.

1.2.2 Les agrégats

Les granulats constituent le squelette en principe inerte du béton. Le terme inerte signifie que l'agrégat n'a aucune interaction avec le ciment et est inaltérable par l'eau et l'air. Comme on le verra, cette classification n'est pas acceptable, d'où le terme plus générique d'agrégats. L'influence des agrégats est très forte sur le béton en terme de performances mécaniques : en général, les agrégats présentent de bonnes caractéristiques mécaniques, meilleures de celles de la pâte de ciment qui est donc le maillon faible du béton du point de vue de la résistance mécanique. Pour obtenir un béton avec de bonnes caractéristiques, le choix de l'agrégat s'avère alors très important. Il n'est pas suffisant de choisir un agrégat de bonne qualité, mais il faut aussi une granulométrie appropriée i.e. la distribution de taille des agrégats doit conduire à une réduction du volume des vides et à une optimisation de la compacité du béton. On introduit à ce propos la courbe de Fuller et Thompson [Fuller07] qui permet de trouver la plage idéale pour les agrégats :

$$p = \left(\frac{D_x}{D_{max}} \right)^{0.5} \times 100 \quad (1.1)$$

avec p la pourcentage d'agrégats qui passe à travers un tamis de diamètre plus petit que D_x et D_{max} le diamètre maximal du mélange d'agrégats.

En plus de la granulométrie, on peut classer les différents types d'agrégats selon leur origine (naturel ou artificiel), leur forme (plus ou moins arrondie), leur rugosité et bien entendu leur dimension. Comme pour l'eau, la présence de substances organiques ou argileuses sur la surface des agrégats s'avère importante : dans ce cas on peut avoir des effets nocifs sur la réaction d'hydratation et à l'interface pâte-granat i.e. on peut avoir une mauvaise adhésion de l'agrégat à la pâte de ciment.

En ce qui concerne les propriétés thermiques de l'agrégat, il faut remarquer qu'ils n'ont pas tous un bon comportement à haute température. En général on cherche des agrégats avec un faible coefficient d'expansion thermique. Dans le cas contraire, on peut générer des contraintes et donc des fissurations. De plus, les agrégats ont la capacité d'absorber

de la chaleur, spécialement lorsque les agrégats en question sont sujets à des transformations endothermiques à haute température : par exemple, les agrégats d'origine calcaire absorbent, entre 700°C et 900°C , 1420kJ/kg pour la décomposition du carbonate de magnésium et 1800kJ/kg pour la décomposition du carbonate de calcium [Colleparidi92]. Les agrégats peuvent donc interagir avec le processus de chauffage en ralentissant l'élévation de température dans le béton.

1.2.3 Le ciment

Le ciment est un liant hydraulique qui, mélangé avec l'eau, donne des produits avec une résistance mécanique et chimiquement stables même dans l'eau. Le ciment Portland, le plus répandu parmi les liants hydrauliques, est un mélange de gypse et clinker. Le clinker est un produit obtenu en cuisant vers 1450°C des mélanges appropriés de calcaire et d'argile. Le clinker du ciment Portland est donc un mélange de plusieurs constituants minéralogiques impurs [Colleparidi92]. Le clinker moulu en poudre très fine obtenu à l'aide d'adjuvants particuliers (on parle d'une surface spécifique de l'ordre de $3 - 4000\text{cm}^2/\text{kg}$) forme la poudre de ciment telle qu'on la connaît. La fonction du gypse dans le ciment Portland est d'éviter une prise trop rapide du clinker. À côté du ciment Portland on peut énumérer plusieurs types de ciment, dont l'utilisation est normalement laissée à des buts particuliers. On peut énumérer le ciment blanc (utilisés pour des exigences esthétiques/architectoniques), le ciment "Ferrari" (caractérisé par l'absence de C_3A et donc avec un chaleur d'hydratation très basse et une bonne résistance aux sulfates), le ciment pouzzolanique (obtenu en mélangeant du clinker et de la pouzzolane avec un coût sensiblement plus bas du produit final), le ciment allumineux (avec un fort pourcentage de composants allumineux et caractérisé par un durcissement très rapide) ou d'autres ciments dont l'utilisation est moins répandus (ciment coloré, ciment expansif, etc).

L'hydratation du ciment est l'ensemble de réactions chimiques qui se produisent entre le ciment et l'eau. Ces réactions vont commencer dès la mise en contact de ces deux phases : lorsque l'on ajoute de l'eau à la poudre de ciment, les produits anhydres vont progressivement se transformer en hydrates. Le produit principal de la réaction d'hydratation est le silicate de calcium hydraté, noté C-S-H. Plus de détails sur les réactions qui interviennent et la formation du C-S-H sont donnés au chapitre 4.

1.2.4 Les ajouts et les adjuvants

1.2.4.1 Les ajouts

Pour obtenir certaines caractéristiques ou simplement pour des raisons économiques, lors de la fabrication du ciment, il est possible de substituer ou d'intégrer une partie des constituants. Dans certains cas, les ajouts entraînent une augmentation de la durabilité par amélioration de la résistance chimique ou diminuent, par exemple, la chaleur dégagée par l'hydratation.

Les cendres volantes Elles sont produites dans les fourneaux à haute température, brûlant des charbons de basse qualité.

Les pouzzolanes naturelles Elles sont des cendres volcaniques dont l'utilisation et les propriétés liantes étaient connues à partir de l'époque romaine. Leur composition chimique est proche de celle des cendres volantes, mais elles sont produites à haute température par les éruptions volcaniques.

Les fumées de silice Elles ne sont pas généralement utilisées en tant qu'ajout, mais plutôt avec des dosages appropriés aux besoins. C'est un produit très efficace pour la fabrication de bétons à très haute performance.

1.2.4.2 Les adjuvants

Il s'agit de produits en faible dosage ajoutés au béton afin d'améliorer certaines qualités. En principe, l'effet produit par un adjuvant peut être obtenu en modifiant la composition du béton : la justification pour l'emploi d'un adjuvant est l'avantage qu'il apporte par rapport aux autres solutions. Par conséquent, même si ils ne sont pas indispensables, il s'avèrent nécessaires pour obtenir le meilleur béton possible.

Les adjuvants les plus courants sont :

Retardateurs/accélérateurs de prise Les retardateurs de prise sont des molécules organiques qui empêchent la nucléation du CSH. L'effet inverse est obtenu grâce aux accélérateurs de prise. On peut dans la même catégorie introduire les retardateurs/accélérateurs de résistance qui rendent plus lent ou rapide le développement des caractéristiques mécaniques.

Plastifiants Les plastifiants (ou fluidifiants) sont sans doute les adjuvants les plus utilisés dans la production du béton. Ils ont la propriété de rendre plus facile la maniabilité du béton, et donc, à maniabilité égale, de réduire fortement la quantité d'eau de gâchage et d'augmenter donc la résistance du béton (en diminuant le rapport e/c). Un plastifiant réduit le rapport eau/ciment de l'ordre du 5% ; lorsqu'il est nécessaire d'obtenir une réduction du rapport e/c de l'ordre de 20-40% on parle d'adjuvant super-plastifiant.

Les entraîneurs d'air Ils sont à base de molécules tensioactives qui permettent la formation, au moment du malaxage, d'un réseau uniforme de petites bulles d'air qui subsistent dans le béton durci. Ceci permet l'amélioration de la résistance au gel du béton : la présence des bulles d'air proches des pores capillaires remplis d'eau en train de se transformer en glace, permet la réduction de la pression hydraulique grâce au passage de l'eau du pore capillaire vers les bulles d'air. Au moment du dégel, l'eau rentre dans les pores capillaires par succion ; les bulles ont un diamètre de l'ordre de $100 - 500\mu m$, donc considérablement plus grand que le diamètre des pores capillaires. L'effet de protection par rapport au gel offert par les micro-bulles est préservé tant qu'elles sont remplies d'air et pas d'eau lorsque leur action est requise.

Les *waterproofers* (ou hydrofuges) Les adjuvants imperméabilisants sont des produits repoussant l'eau qui protègent le béton de la pénétration de l'eau pour des pressions très basses (comme c'est le cas lors de pluies).

1.3 Comportement à haute température

L'élévation de température entraîne des phénomènes très compliqués dans le béton, dont la prévision s'avère plutôt difficile à cause de son hétérogénéité. En particulier, la simple prise en compte des propriétés thermiques (conductivité thermique, chaleur spécifique) n'est pas suffisante pour décrire de manière satisfaisante le comportement du béton. Il est donc nécessaire de prendre en charge les écoulements des espèces fluides (air sec, eau liquide, eau vapeur), les transferts d'énergie ainsi que les phénomènes d'hydratation et de déshydratation. Un chauffage entraîne aussi dans le béton de forts changements au niveau de sa micro-structure, changements qui entraînent une modification des propriétés mécaniques et de transport.

Pour décrire de manière au moins qualitative les phénomènes qui ont lieu dans le béton suite à une élévation de température, on prend en considération une paroi en béton dans des conditions initiales standard i.e. température ambiante et pression atmosphérique. En général on peut imaginer de petites différences de température d'un côté à l'autre de la paroi (différence de température externe-interne), un taux d'humidité et d'hydratation le long l'épaisseur de la paroi non parfaitement homogène à cause de la chaleur relâchée pendant la maturation du béton i.e. on peut imaginer plus d'hydratation à l'intérieur du mur. Dans ce cadre, les phénomènes d'adsorption-désorption sont importants : à température ambiante l'adsorption règle le contenu d'eau dans le béton.

Lorsque l'on commence le chauffage, on observe une augmentation de la température du côté chaud. L'humidité dans le béton, sous forme d'eau liquide et d'eau vapeur, se déplace vers la zone froide de la paroi par diffusion. Lorsque on dépasse la température de 100°C , l'eau commence l'ébullition. La vapeur se déplace vers les zones froides : on peut observer de la condensation. La chaleur latente requise pour l'ébullition de l'eau retarde l'augmentation de température jusqu'à la complète ébullition de l'eau dans la portion de béton intéressée. En même temps, la vapeur qui condense dans la zone froide est absorbée par le béton qui est intéressé par une nouvelle hydratation : l'eau libre, en fait, peut se lier avec du ciment non-hydraté. Généralement dans cette phase on observe une amélioration des propriétés mécaniques du béton à cause de la formation de nouveaux C-S-H. L'adsorption-désorption est décrite à travers des courbes isothermes déterminées de manière expérimentale : ces courbes lient l'humidité adsorbée par le milieu poreux (principalement la saturation) à l'humidité de l'ambiance externe (i.e. à la pression capillaire comme on verra plus loin) à une certaine température.

L'augmentation de la température, entraîne aussi un autre phénomène dans le béton : la déshydratation. A partir de la température conventionnelle de 105°C , les liaisons chimiques qui forment le C-S-H commencent à se détruire, en transformant les produits hydratés en produits anhydres et eau. L'eau libre qui est relâché dans le béton se vaporise, en absorbant de la chaleur. La réaction de déshydratation concerne progressivement plusieurs produits hydratés qui forment le béton, selon la température atteinte : dès que la température augmente, on obtient de plus en plus d'eau libre dans le béton et donc de plus en plus d'eau qui se vaporise. La vaporisation, étant une réaction endothermique, influence le chauffage du béton tout en ralentissant la propagation de la chaleur.

Suite aux phénomènes de diffusion, l'eau libre a tendance à se déplacer vers les zones froides du béton. Comme le béton, et en particulier le béton à hautes performances (BHP), a une très faible perméabilité, le mélange eau liquide-vapeur ne peut pas s'échapper rapidement vers les zones froides. De plus, la formation d'eau suite à la déshydratation est plus rapide que la fuite du mélange eau liquide-vapeur. Le résultat de la combinaison de ces deux ef-

fets est que la pression dans les pores augmente et peut atteindre des valeurs de l'ordre de quelques atmosphères. On observe aussi que le pic de pression se déplace de plus en plus vers le côté froid de la paroi en augmentant progressivement sa valeur. L'augmentation de la pression du gaz dans les pores du béton est aussi à la base du phénomène du spalling (ou écaillage) qui cause le décollement de la couche externe du matériau (voir fig.1.1).

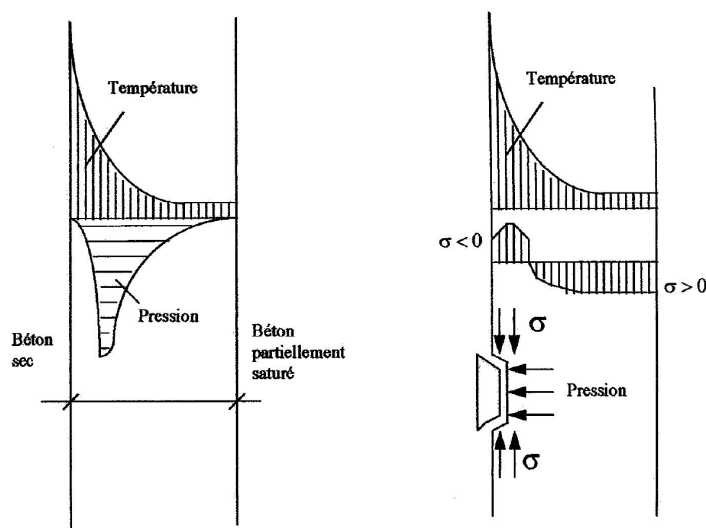


FIG. 1.1 – Mécanisme du spalling

Quand on atteint des températures suffisamment élevées, les agrégats ne se comportent plus comme "inertes". Par exemple, les agrégats à base de carbonate, entre environ 660°C et 980°C , passent du carbonate de calcium à l'oxyde de calcium et dioxyde de carbone. Pour le carbonate de magnésium on observe une réaction similaire entre 740°C et 840°C . Dans les deux cas, les réactions chimiques sont endothermiques et absorbent chaleur : le chauffage est donc retardé.

Transport Les propriétés de transport sont fortement affectées par l'élévation de température. La déshydratation entraîne une destruction chimique de la pâte de ciment, autrement dit les pores dans le béton augmentent de taille i.e. on augmente la porosité. En plus à cause des contraintes mécaniques, on observe de la micro-fissuration de la pâte de ciment. On obtient donc comme résultats un matériau moins dense, avec une perméabilité plus élevée et donc une modification des propriétés de transport de la chaleur et de la masse. En ce qui concerne les phénomènes de transport de masse, on a parlé de diffusion. Dans ce cas, les phénomènes sont réglés par la loi de Fick. Avec cette loi, un flux de masse est entraîné par un gradient de concentration unitaire et fait intervenir un coefficient de diffusion. Dès qu'on parle des flux causés par un déséquilibre de pression, on fait intervenir un autre concept, la notion de perméabilité. Dans ce cas, le phénomène est réglé par la loi de Darcy. En ce qui concerne le transport d'énergie, il faut prendre en compte le flux de chaleur et, dans la formulation la plus générale, l'enthalpie multipliée la dérivée de la masse i.e. la quantité de masse qui est échangée entre les phases dans l'unité de temps (voir chapitre 2).

1.4 Conclusion

Ce chapitre avait pour objectif de faire quelques rappels sur les généralités du béton et son comportement à haute température. Plus de détails sur chaque espèce (notamment les phases solides et liquides) qui forment le béton seront donnés dans les prochains chapitres. On a toutefois déjà remarqué que, suite à la grande complexité et hétérogénéité du béton, la description et la prévision de son comportement à haute température s'avèrent très compliquée.

Dans le prochain chapitre, on commence tout d'abord par introduire un modèle mathématique général pour la description de notre problème. On pourra aussi commencer à établir quels sont les besoins expérimentaux et/ou théoriques en terme de caractérisation des phases qui s'avèrent nécessaires pour la modélisation de notre milieu poreux.

Chapitre 2

Équations du modèle

L'ensemble des phénomènes qui ont lieu dans le béton (flux de matière dus aux effets capillaires et des gradients de pression/concentration, flux de chaleur, ainsi que les changements de phase) seront pris en compte, tant dans le modèle thermo-hydro-chimique (THC), que dans le modèle thermo-hydro-chémo-mécanique (THCM) [Schrefler98] développé dans la cadre du projet Hiteco et du logiciel Hitecosp [Hiteco].

Le but de ce chapitre est d'introduire un modèle mathématique général qui ensuite sera adapté tant au modèle THC, que au modèle THCM. Dans le premier paragraphe, nous donnerons une rapide description du problème et des hypothèses utilisées. Ensuite nous définirons le système d'équations à l'échelle microscopique nécessaires pour décrire le comportement d'un milieu poreux. On introduira ensuite le principe de moyenne : ceci nous permettra la définition des équations à l'échelle macroscopique. On aura donc un modèle général, qui nous permettra de définir quels sont les différents paramètres et grandeurs dont on aura besoin pour décrire le comportement du béton à haute température.

Les chapitres suivants complèteront la description du milieu poreux et donneront, de manière expérimentale ou théorique, l'ensemble des paramètres nécessaires pour compléter le modèle mathématique et la description de chaque phase.

2.1 Description du problème

Le cas qui nous concerne est celui d'un milieu poreux, le matériau cimentaire, partiellement ou totalement saturé en eau, pour lequel on considère les effets dus à un flux de chaleur et de masse de fluide.

Dans notre modèle, nous décrivons le milieu poreux comme la superposition de trois phases : solide, liquide et gazeuse. En particulier, la phase gazeuse est constituée d'un mélange d'air sec et de vapeur d'eau.

Chacun des constituants des phases liquide et gazeuse peut se mouvoir par diffusion et par mouvement Darcéen.

2.1.1 Hypothèses

Le milieu poreux est vu comme la juxtaposition de trois particules fluides (eau liquide, vapeur d'eau et air sec) et d'un squelette solide. Le squelette comprend une matrice solide

et un espace poreux connecté occupé par les fluides. Dans le cadre d'un modèle THC, on considère le squelette indéformable. Par contre le modèle THCM utilisé dans Hitecosp, prend en compte aussi la mécanique et donc la déformabilité (élastique-endommageable) du squelette. D'autres hypothèses viennent compléter la modélisation :

- la phase liquide est considérée comme de l'eau pure. Ceci n'est pas le cas des matériaux à base de ciment, car la solution interstitielle contient différentes espèces ioniques issues en particulier de la réaction d'hydratation du ciment. L'hypothèse est nécessaire pour ne pas devoir prendre en compte les perturbations induites par la présence de ces ions sur l'équilibre liquide-vapeur de l'eau, la masse volumique de l'eau ou encore sa viscosité.
- La phase liquide est supposée incompressible dans le cadre de la démonstration de certaines formules. Parfois, quand on utilisera des équations d'origine expérimentale, l'eau sera considérée comme un fluide compressible.
- A chaque instant la phase gazeuse est constituée d'un mélange d'air sec et de vapeur d'eau. Ces deux gaz sont supposés se comporter comme des gaz parfaits et le mélange est considéré comme un mélange idéal.
- A chaque instant on considère les différentes phases en équilibre thermodynamique.
- Nous choisissons de négliger les forces de gravité devant les forces capillaires. Cette hypothèse ne pose pas de problèmes pour la phase gazeuse et est d'autant plus réaliste pour la phase liquide que la saturation est faible. En outre, la perméabilité à l'eau étant maximale à saturation proche de 1, les effets de gravité pourront être négligés devant les forces dues aux pressions de liquide à forte saturation.

2.1.2 Description du milieu poreux

Les milieux poreux qui nous concernent sont des matériaux cimentaires à l'intérieur desquels la distribution des tailles des pores varie d'environ $5\text{\AA}$ à quelques μm . Les connections existant entre ces pores sont complexes et une description détaillée du volume poreux total est difficilement accessible. Pour en apporter toutefois une description simple et utilisable dans notre étude, nous supposons que la matrice solide peut être décrite à travers la porosité, définie comme le rapport du volume des pores sur le volume total. En plus, nous supposons qu'à chaque point du milieu poreux, nous pouvons associer une seule dimension caractéristique r . Si S est la fraction de volume du réseau poreux contenant les pores de taille caractéristique inférieure à r , une description de la géométrie du milieu poreux est apportée par la connaissance de la relation $r(S)$ pour S variant de 0 à 1.

2.1.3 Description de la phase liquide

L'eau est le liant du béton ; il est parfois difficile d'évaluer le degré de liaison de l'eau avec le solide. En général quatre degrés sont distingués :

- l'eau chimiquement liée : est l'eau consommée au cours de la réaction d'hydratation des composants anhydres et fait partie du C-S-H.
- l'eau intra-couche qui se trouve parmi les surfaces du C-S-H
- l'eau absorbée : est l'eau fixée à la surface de la matrice solide sous l'action des forces de type Van der Waals

- l'eau capillaire et l'eau libre : l'eau capillaire est l'eau condensée remplissant un capillaire. Un cas particulier de l'eau capillaire est l'eau libre contenue dans les pores les plus gros et qui ne subit pas une influence particulière des forces superficielles.

Une description de la phase liquide s'avère nécessaire pour l'établissement des modèles. Il nous faut donc une description précise de la phase liquide et des lois qui règlent son comportement.

Par la suite, la variable générique x relative à une phase quelconque, sera indiquée comme x^π , avec π le symbole utilisé pour indiquer une des phases.

2.1.4 Description du mélange gazeux

En général, le comportement des gaz de faible masse volumique, pour une faible pression, peut être décrit avec une bonne approximation par la loi des gaz parfaits dès que les forces d'interaction de Van der Waals entre molécules sont négligeables. En pratique, généralement on considère comme valable la loi des gaz parfaits [Schrefler98],[Gawin03]. On peut dire que, lorsqu'on dépasse une pression de 10MPa, quelques résultats de la théorie cinétique des gaz sont à évoquer. La phase gazeuse peut être décrite à travers les valeurs des pressions partielles de chacune des deux espèces (air et eau vapeur) : p^{gw} et p^{ga} . Elle peut être également décrite comme pour la phase π par des fractions volumique η^π , massique ω^π ou molaire c^π . Ces différentes grandeurs, ainsi que toutes les autres propriétés du mélange gazeux que nous serons amenés à rencontrer peuvent être reliées aux pressions partielles (p^{gw} , p^{ga}) et à la température T par le choix d'une équation d'état pour le gaz.

2.2 Établissement des équations du problème

Dans cette partie, nous partons des définitions précédentes relatives à la description des phases gazeuse et liquide ainsi que de la géométrie du milieu poreux pour définir l'ensemble des variables et des équations qui décrivent les différentes phases, l'interaction entre elles et l'évolution du système. L'approche que l'on propose est inspirée des travaux de [Gray79-1], [Gray79-2], [Gray80] ensuite reprise par [Schrefler98]. Cette approche nous permet d'introduire dans la suite les modélisations THC et THCM que ont été utilisées dans le cadre de cette thèse, ainsi que l'ensemble des besoins en terme de lois constitutives que le modèle nécessite.

On introduit les définitions suivantes :

- échelle microscopique : on prend en considération la vraie structure (non-homogène) du milieu poreux, i.e. une échelle du même ordre de grandeur que celle des pores ou des grains. D'un point de vue mathématique à l'échelle microscopique on s'intéresse à ce qui se passe à une phase seule. Les quantités microscopiques généralement ne sont pas mesurables i.e. cette échelle ne présente pas une utilité pratique.
- échelle macroscopique : le système multiphasique qui forme le milieu poreux est étudié à cette échelle par un modèle dans lequel les phases remplissent tout le domaine d'intérêt. On suppose donc avoir en chaque point toutes les phases au même instant. A ce niveau d'échelle généralement les milieux sont homogènes ; on peut toutefois retrouver des hétérogénéités (ex. matériaux multicouches).

Selon l'approche que l'on va présenter, on choisit donc d'imposer un système d'équations à l'échelle microscopique, valable donc pour une seule phase. Ensuite, à travers une procédure de changement d'échelle, l'ensemble des équations microscopiques seront étendues à l'échelle

macroscopique. De toute manière, il faut noter qu'il serait possible d'écrire directement les équations de bilan à l'échelle macroscopique. La description que l'on choisit nous semble plus appropriée pour décrire la vraie composition microscopique du système multiphasique.

2.3 Processus de moyenne

2.3.1 Choix du volume élémentaire représentatif

Le système que l'on prend en compte, est un système multiphasique, qui occupe un volume V , délimité par une surface A . Les constituants π occupent un volume V^π lié à V tel que :

$$\sum_{\pi} V^\pi = V$$

Le matériau étant hétérogène, la description au niveau microscopique s'avère trop complexe pour être prise en charge à travers un modèle. Dans notre analyse, on introduit donc un *Volume Élémentaire Représentatif* (VER) δV dont la surface est δA . Dans un système de coordonnées global, la position du centre du VER est définie par un vecteur position $\mathbf{x}$; la position d'un point est définie par un vecteur $\mathbf{r}$ (voir fig.2.1). On peut donc noter le volume du VER du centre $\mathbf{x}$, δV_x ; toutefois, pour simplifier on utilisera tout simplement la notation équivalente δV soit pour indiquer δV_x , soit pour en indiquer le module.

A travers la définition d'une fonction de distribution γ^π :

$$\gamma^\pi(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r} \in \delta V^\pi \\ 0 & \text{si } \mathbf{r} \in \delta V^\alpha \end{cases} \quad \forall \pi, \alpha \neq \pi \quad (2.1)$$

on peut définir le volume de la phase π dans le VER, δV^π :

$$\delta V^\pi(\mathbf{x}, t) = \int_{\delta V} \gamma^\pi(\mathbf{r}, t) dv \quad (2.2)$$

avec dv le volume microscopique de l'élément.

Aux interfaces $\gamma^\pi(\mathbf{r}, t)$ n'est pas défini. De tout manière les limites gauche et droite existent.

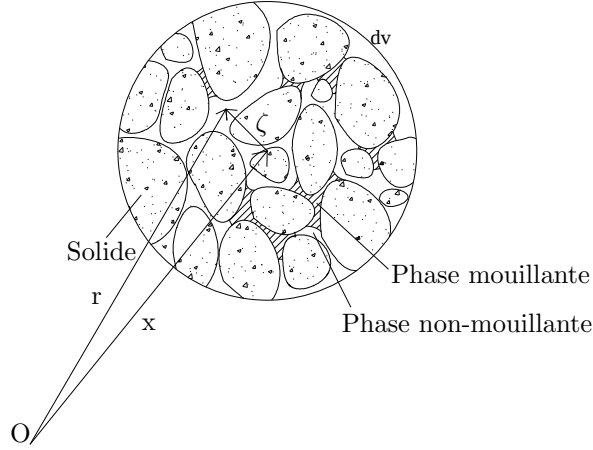
De la même manière, on peut obtenir δA^π i.e. la partie de δA du VER qui se trouve dans la phase π :

$$\delta A^\pi(\mathbf{x}, t) = \delta A \cap \delta V^\pi \quad (2.3)$$

$$\delta A^\pi(\mathbf{x}, t) = \int_{\delta A} \gamma^\pi(\mathbf{r}, t) da \quad (2.4)$$

avec da la surface microscopique de l'élément.

Il faut remarquer que en général δV^π et δA^π sont l'union de régions isolées connexes. On définit aussi $\delta A^{\pi\alpha}$ l'interface entre la phase π et la phase α dans le volume δV . De la

FIG. 2.1 – Volume typique dv dans un milieu poreux

même manière $\delta A^{\pi\alpha}$ est l'union de plusieurs régions isolées. Nous supposons que c'est une fonction continue dans l'espace et dans le temps.

La connaissance de δV^π nous permet de donner la définition de la fraction volumique de la phase π , η^π :

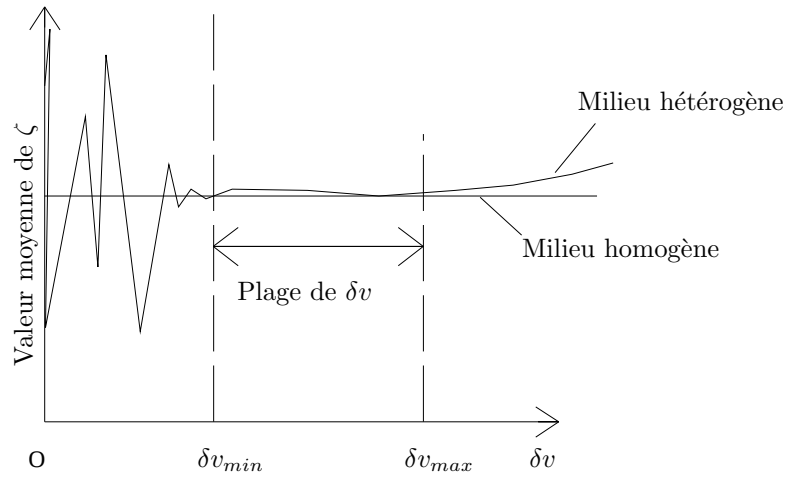
$$\eta^\pi(\mathbf{x}, t) = \frac{\delta V^\pi}{\delta V} = \frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \gamma^\pi(\mathbf{r}, t) dv \quad (2.5)$$

avec :

$$\sum_{\pi=1}^{\kappa} \eta^\pi = 1 \text{ et } 0 \leq \eta^\pi \leq 1 \quad (2.6)$$

Le VER permet la définition de la quantité macroscopique (pression, porosité, ...) comme la moyenne sur ce VER de la même quantité prise à l'échelle microscopique. La taille du VER s'avère un choix important, vu que le VER doit être suffisamment grand pour que les hétérogénéités présentes à l'échelle microscopique ne soient plus apparentes à l'échelle macroscopique [Bear79]. Si on note l le rayon de la boule servant de volume de référence pour la prise de moyenne, alors $l > l_{min}$. Ce rayon est limité par la dimension du milieu que l'on étudie ($l < L$). Selon [Bear91] il existe aussi une autre limite supérieure caractérisée par la distance à partir de laquelle la distribution spatiale d'une quantité, caractéristique de l'espace vide du milieu poreux, dévie d'un comportement linéaire $l < l_{max} < L$. Les deux limites sont présentées en figure 2.2, où on regarde la variation de la variable ζ (avec $\mathbf{r} = \mathbf{x} + \zeta$) en fonction du volume dv de la boule de rayon l .

Par la suite on suppose donc l'existence d'un VER. On peut alors obtenir les équations du modèle à l'échelle macroscopique par prise de moyenne sur le VER des équations données à l'échelle microscopique. Les règles de changement d'échelle micro-macro sont présentées dans la suite. Elle s'inspirent des travaux de [Gray79-1], [Gilbert87], [Daian88], [Bear91], [Schrefler98].

FIG. 2.2 – Moyenne de ζ en fonction de la taille du VER

2.3.2 Opérateurs de moyenne

Les quantités moyennes sont liées aux quantités microscopiques à travers des opérateurs de moyenne. A partir de considérations de type physique, [Gray79-1] propose des critères que l'on rappelle ici :

- I : si une opération de moyenne prévoit une intégration, la fonction intégrant multipliée par l'élément infinitésimal de l'intégration, doit être une quantité additive.
- II : les quantités macroscopiques doivent rendre compte exactement du total des propriétés microscopiques correspondantes.
- III : la signification physique originale doit être conservée dans la quantité macroscopique.
- IV : la valeur moyenne d'une quantité microscopique doit être la même fonction que normalement observée et mesurée dans un essai.

Pour respecter ces conditions, [Gray79-1] propose trois opérateurs de moyenne :

- moyenne du volume $\langle \rangle_\pi$ et moyenne du volume intrinsèque $\langle \rangle^\pi$ définies par :

$$\langle \zeta \rangle_\pi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \zeta(\mathbf{r}, t) \gamma^\pi(\mathbf{r}, t) dv \quad (2.7)$$

et :

$$\langle \zeta \rangle^\pi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\delta V^\pi} \int_{\delta V} \zeta(\mathbf{r}, t) \gamma^\pi(\mathbf{r}, t) dv \quad (2.8)$$

et donc à travers l'eq.2.5 on obtiens :

$$\langle \zeta \rangle_\pi(\mathbf{x}, t) = \eta^\pi(\mathbf{x}, t) \langle \zeta \rangle^\pi(\mathbf{x}, t) \quad (2.9)$$

- moyenne de masse $\bar{\zeta}^\pi$:

$$\bar{\zeta}^\pi(\mathbf{x}, t) = \frac{\int_{\delta V} \rho(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}, t) \gamma^\pi(\mathbf{r}, t) dv}{\int_{\delta V} \rho(\mathbf{r}, t) \gamma^\pi(\mathbf{r}, t) dv} \quad (2.10)$$

avec $\rho(\mathbf{r}, t)$ la densité de masse microscopique ; l'eq.2.10 avec l'eq.2.7 devient :

$$\bar{\zeta}^{\pi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\langle \rho \rangle_{\pi}(\mathbf{x}, t) \delta V} \int_{\delta V} \rho(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}, t) \gamma^{\pi}(\mathbf{r}, t) dv = \frac{\langle \rho \zeta \rangle_{\pi}(\mathbf{x}, t)}{\langle \rho \rangle_{\pi}(\mathbf{x}, t)} \quad (2.11)$$

– moyenne de surface $\bar{\bar{\zeta}}^{\pi}$:

$$\bar{\bar{\zeta}}^{\pi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \zeta(\mathbf{r}, t) \mathbf{n} \cdot \gamma^{\pi}(\mathbf{r}, t) da \quad (2.12)$$

avec $\mathbf{n}$ le vecteur normal sortant de la surface microscopique de l'élément da .

Selon les critères que l'on a défini plus haut, on peut écrire la fonction densité de masse macroscopique, définie comme la moyenne sur le volume de la fonction microscopique correspondante :

$$\langle \rho \rangle_{\pi}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \rho(\mathbf{r}, t) \gamma^{\pi}(\mathbf{r}, t) dv \quad (2.13)$$

Dans la suite, on obtiendra la moyenne de la vitesse, de la force externe, de l'apport externe de chaleur, de l'entropie interne, de l'apport externe d'entropie et de la production totale d'entropie de la même manière. Ces fonctions sont additives seulement sous la forme $\rho \zeta dv$. Les quantités moyennes sur le volume (eq.2.7), et sur la masse, (eq.2.10), sont identiques seulement dans le cas de densité de masse microscopique constante.

L'opérateur de moyenne sur la surface (eq.2.12) sera utilisé pour définir les termes de flux moyen (contrainte, chaleur et entropie).

A ce point, il est important de bien comprendre la signification et le principe qui sont à la base des méthodes de changement d'échelle. Ceci peut-être est plus clair si, au lieu de la fonction de distribution on utilise ce que d'autres auteurs [Gilbert87], [Tamagny96] appellent fonction d'observation, et qui est exprimée à travers une intégrale de convolution. La fonction d'observation est une fonction douce, assez régulière et supposée bornée. A la différence de la fonction de distribution, elle est définie sur la frontière. Au niveau intuitif, on peut dire que au voisinage du point x d'intérêt, la fonction d'observation privilégie dans la fenêtre de prise de vue les points les plus proches de x , puis intègre sur la fenêtre. Autrement dit, ceci correspond au calcul d'un temps de pose par un appareil photographique à mesure à travers l'objectif, qui détermine à chaque instant un niveau de gris moyen (fig.2.3).

A chaque temps de pose correspond un niveau de gris (i.e. une fonction de pondération) qui produit le résultat de substituer à des quantités discontinues ou variant très rapidement (par exemple la fonction densité de masse microscopique subit un saut en passant d'un grain à un pore contenant de l'eau) des quantités plus régulières opportunément choisies. L'intégrale de la fonction d'observation est choisie de façon à interpréter correctement un gris uniforme. Avec cette approche on peut aussi voir la fonction de distribution comme un type particulier de fonction d'observation, qui donne le même poids aux points au voisinage du point x choisi dans la fenêtre d'observation. De toute manière l'approche avec la fonction de distribution développée par [Gray79-1] sera conservée.

Il faut aussi remarquer qu'une quantité macroscopique n'est pas forcément égale à la moyenne de la quantité microscopique correspondante. En plus, la définition des quantités macroscopiques à travers la procédure de moyenne, introduit de nouvelles variables dans

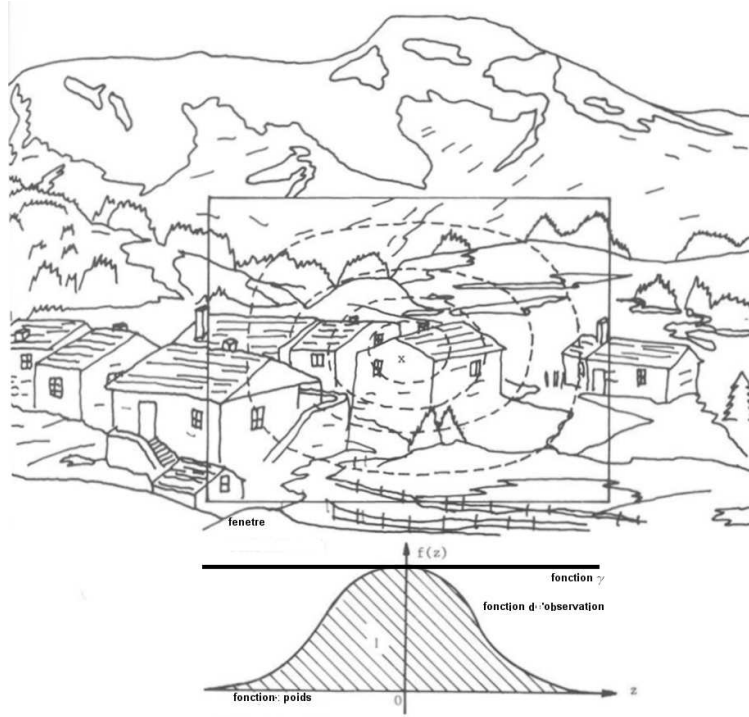


FIG. 2.3 – Interprétation de la fonction d’observation et de la fonction de distribution [Gilbert87]

les équations. Il nous faut alors introduire un certain nombre de théorèmes pour traiter les opérateurs mathématiques.

2.3.3 Équation générale de bilan microscopique

A l’échelle microscopique, un milieu poreux peut être vu comme la juxtaposition de toutes les phases π , chacune occupant un volume V^π , partie du volume total V . Les volumes V^π sont séparés par des interfaces ou surfaces. Les propriétés du matériau et les quantités thermodynamiques peuvent présenter des discontinuités aux interfaces. En général, on assume aussi la possibilité d’avoir des échanges de masse, moment ou énergie parmi les phases à travers les interfaces. Comme on a déjà remarqué plus haut, on assume à tout moment l’équilibre thermodynamique.

Pour obtenir un système d’équation général, on suivra la démarche proposée par Hassanzadeh et Gray ([Gray79-1], [Gray79-2]) : on impose donc une équation générale pour la description au niveau microscopique d’une variable conservative générique.

Pour une variable générale conservative massique, ψ , caractérisée par un vecteur de flux $\mathbf{i}$, une contribution externe b et la production de ψ , G , l’équation de conservation microscopique de la phase π devient :

$$\frac{\partial(\rho\psi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\psi\dot{\mathbf{r}}) - \text{div} \mathbf{i} - \rho b = \rho G \quad (2.14)$$

avec ρ la densité de masse, $\dot{\mathbf{r}}$ la vitesse du matériau présente au point spatial $\mathbf{r}$.

Selon [Gray79-2], on peut obtenir l'équation de bilan que l'on cherche, en faisant la substitution de ψ , $\mathbf{i}$, b et G avec la variable liée au phénomène que l'on veut décrire. L'eq.2.14 n'est pas valable en cas de discontinuité et à l'interface.

On peut compléter la relation 2.14 avec le théorème suivant :

Théorème de Kotchine : à l'interface $\alpha - \pi$, si les surfaces n'ont pas des propriétés thermodynamiques, on peut écrire :

$$[\rho\psi(\mathbf{w} - \dot{\mathbf{r}}) + \mathbf{i}]|_{\pi} \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} + [\rho\psi(\mathbf{w} - \dot{\mathbf{r}}) + \mathbf{i}]|_{\alpha} \cdot \mathbf{n}^{\alpha\pi} = 0 \quad (2.15)$$

avec $\mathbf{w}$ la vitesse de l'interface, $\mathbf{n}^{\pi\alpha}$ est le vecteur unitaire normal qui sort de la phase π et rentre dans la phase α et :

$$\mathbf{n}^{\pi\alpha} = -\mathbf{n}^{\alpha\pi} \quad (2.16)$$

La notation $|_{\pi}$ indique que le terme qui précède est calculé en fonction de la phase π .

Dans le cas d'une interface avec des propriétés thermo-mécaniques, le terme de droite est non-zéro. En théorie, à partir des relations constitutives appropriées, on peut obtenir une solution de l'équation 2.14 soumise aux conditions de l'eq.2.15. Le problème de toute manière se révèle très compliqué et pratiquement impossible à résoudre. En plus, il faudrait mesurer des quantités microscopiques. Comme seule la mesure de quantités moyennes est possible, une vérification expérimentale n'est pas réalisable.

2.3.4 Équation générale de bilan macroscopique

L'équation générale de bilan macroscopique obtenue à partir de l'équation générale de bilan microscopique 2.14, peut être exprimée à travers le théorème suivant :

Théorème : Une propriété macroscopique $\bar{\psi}^{\pi}$ relative à une phase π d'un corps hétérogène qui occupe un volume V qui ne contient pas de discontinuités et qui a une frontière A , est conservée à travers la relation de bilan suivante :

$$\begin{aligned} \int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle_{\pi} \bar{\psi}^{\pi}) \right] dV - \int_A [\langle \rho \rangle_{\pi} \bar{\psi}^{\pi} \bar{\mathbf{v}}^{\pi} \cdot \mathbf{n}] dA - \int_A [\mathbf{i}^{\pi} \cdot \mathbf{n}] dA - \\ \int_V [\langle \rho \rangle_{\pi} \bar{b}^{\pi}] dV - \int_V [\langle \rho \rangle_{\pi} (e^{\pi}(\rho\psi) + I^{\pi})] dV = \int_V [\langle \rho \rangle_{\pi} \bar{G}^{\pi}] dV \end{aligned} \quad (2.17)$$

soumise à :

$$\int_V \sum_{\pi} \langle \rho \rangle_{\pi} [(e^{\pi}(\rho\psi) + I^{\pi})] dV = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in V \quad (2.18)$$

avec $\mathbf{i}^{\pi}$ et $\bar{b}^{\pi}$ les vecteurs flux de surface et apport externe de $\bar{\psi}^{\pi}$, $e^{\pi}(\rho\psi)$ et I^{π} les échanges de $\bar{\psi}^{\pi}$ avec les autres phases et les interactions mécaniques et $\bar{G}^{\pi}$ la production de $\bar{\psi}^{\pi}$.

La démonstration de ce théorème est donnée dans l'annexe B. L'annexe A donne l'ensemble des théorèmes et relations qui seront utilisés par la suite.

Au lieu de l'eq.2.17, on utilisera la forme différentielle suivante de l'équation de bilan 2.17 :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi) + \text{div} (\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi \bar{\mathbf{v}}^\pi) - \text{div} \mathbf{i}^\pi - \langle \rho \rangle_\pi e^\pi (\rho \psi) - \langle \rho \rangle_\pi I^\pi - \langle \rho \rangle_\pi \bar{b}^\pi = \langle \rho \rangle_\pi \bar{G}^\pi \quad \forall \mathbf{x} \in V \quad (2.19)$$

soumise à la condition :

$$\sum_\pi \langle \rho \rangle_\pi [(e^\pi (\rho \psi) + I^\pi)] dV = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in V \quad (2.20)$$

Les équations générales de bilan à l'échelle microscopique 2.14 et à l'échelle macroscopique 2.19 sont formellement identiques. Comme on a déjà remarqué, ceci autorise l'écriture directe des équations de bilan macroscopique. De toute manière, il faut noter que les deux descriptions sont relatives à deux dimensions différentes, correspondant à la description locale (à l'échelle des constituants) et à la description semi-locale (à l'échelle macroscopique). Le changement d'échelle correspond aussi à un changement de variable par rapport à laquelle on dérive ou on intègre. A l'échelle micro on fait référence à la variable $\mathbf{r}$ et à l'échelle macro à la variable $\mathbf{x}$.

2.4 Équations de bilan

Dans la suite, à partir de l'équation de bilan macroscopique générale 2.19, on pourra obtenir les équations de bilan pour la masse, le moment linéaire, le moment angulaire, l'énergie et l'entropie. On a déjà remarqué que la méthode pour obtenir l'équation de bilan que l'on cherche sera d'introduire au lieu de la variable ψ , la variable adaptée au type d'équation que l'on cherche.

Pour l'obtention des équations macroscopiques de bilan, il s'avère nécessaire d'introduire et de décrire la cinématique d'un point.

2.4.1 Cinématique

On a déjà remarqué qu'un milieu poreux peut être vu comme la juxtaposition de toutes les phases π . En particulier, dans la configuration actuelle, chaque point spatial $\mathbf{x}$ est occupé en même temps par les points matériels $\mathbf{X}^\pi$ de toutes les phases. Le mouvement de chaque phase est toutefois décrit de manière indépendante. On peut donc donner une description de la cinématique d'un milieu poreux multiphasique.

Dans le cadre d'une description lagrangienne (ou matérielle), la position de chaque point matériel $\mathbf{x}^\pi$ au temps t est fonction de sa position par rapport à une configuration de référence, $\mathbf{X}^\pi$, et du temps actuel t :

$$\mathbf{x}^\pi = \mathbf{x}^\pi (\mathbf{X}^\pi, t) \quad (2.21)$$

la correspondance entre les deux configurations, doit rester bijective et continue à tout instant i.e. le Jacobien $\mathbf{J}$ de la transformation doit être strictement positif et différent de zéro. Le Jacobien est le déterminant du tenseur gradient de déformation $\mathbf{F}^\pi$:

$$\mathbf{F}^\pi = \text{Grad } \mathbf{x}^\pi (\mathbf{F}^\pi)^{-1} = \text{grad } \mathbf{X}^\pi \quad (2.22)$$

Comme la relation lagrangienne 2.21 est non-singulière, on peut écrire l'inverse i.e. la description eulerienne ou actuelle :

$$\mathbf{X}^\pi = \mathbf{X}^\pi (\mathbf{x}^\pi, t) \quad (2.23)$$

On fait généralement l'hypothèse que les fonctions qui décrivent le mouvement ont des dérivées continues. Si on connaît le parcours de la particule de la phase π i.e. on connaît la relation 2.21, on peut donner la vitesse et l'accélération en description lagrangienne :

$$\mathbf{V}^\pi = \frac{\partial \mathbf{x}^\pi (\mathbf{X}^\pi, t)}{\partial t} \quad (2.24)$$

$$\mathbf{A}^\pi = \frac{\partial^2 \mathbf{x}^\pi (\mathbf{X}^\pi, t)}{\partial t^2} \quad (2.25)$$

L'expression correspondante en coordonnées spatiales, peut être obtenue en introduisant eq. 2.23 dans 2.24 et 2.25. Si on donne seulement la description eulerienne pour la vitesse on obtient :

$$\mathbf{v}^\pi = \mathbf{v}^\pi (\mathbf{x}^\pi, t) \quad (2.26)$$

il faut évaluer sa dérivée en introduisant 2.21 dans 2.26 et appliquer la règle de différenciation :

$$\mathbf{a}^\pi = \frac{\partial \mathbf{v}^\pi}{\partial t} + \mathbf{v}^\pi \cdot \text{grad } \mathbf{v}^\pi \quad (2.27)$$

La dérivée matérielle de chaque fonction dérivable $f^\pi (\mathbf{x}, t)$, donnée en description spatiale et faite par rapport à une particule de la phase π , est :

$$\frac{D^\pi f^\pi}{Dt} = \frac{\partial f^\pi}{\partial t} + \mathbf{v}^\pi \cdot \text{grad } f^\pi \quad (2.28)$$

Si on utilise l'exposant α dans l'opérateur $\frac{D}{Dt}$:

$$\frac{D^\alpha f^\pi}{Dt} = \frac{\partial f^\pi}{\partial t} + \mathbf{v}^\alpha \cdot \text{grad } f^\pi \quad (2.29)$$

on connaît la dérivée par rapport au temps de la phase α en mouvement.

Si à l'eq.2.29 on enlève l'eq.2.28 on obtiens la relation suivante :

$$\frac{D^\alpha f^\pi}{Dt} = \frac{D^\pi f^\pi}{Dt} + \text{grad } f^\pi \cdot \mathbf{v}^{\alpha\pi} \quad (2.30)$$

avec :

$$\mathbf{v}^{\alpha,\pi} = \mathbf{v}^\alpha - \mathbf{v}^\pi \quad (2.31)$$

i.e. la vitesse de la phase α par rapport à la phase π . Ceci prend le nom de vitesse de diffusion [Gray80].

L'opérateur $\frac{D}{Dt}$ est un opérateur scalaire et peut être appliqué tant à une quantité scalaire, que à une quantité vectorielle. Si $\mathbf{f}^\pi$ est une propriété vectorielle par unité de volume relative à la phase π , la dérivé totale par rapport au temps de son intégrale sur un volume V , est donnée par :

$$\frac{d}{dt} \int_V \mathbf{f}^\pi dV = \int_V \left(\frac{\partial \mathbf{f}^\pi}{\partial t} + \mathbf{v}^\pi \cdot \text{grad } \mathbf{f}^\pi + \mathbf{f}^\pi \text{div } \mathbf{v}^\pi \right) \mathbf{J} dV = \int_V \left[\frac{\partial \mathbf{f}^\pi}{\partial t} + \text{div} (\mathbf{f}^\pi \otimes \mathbf{v}^\pi) \right] dV \quad (2.32)$$

De la même manière pour une quantité scalaire on obtient :

$$\frac{d}{dt} \int_V f^\pi dV = \int_V \left[\frac{\partial f^\pi}{\partial t} + \text{div} (f^\pi \mathbf{v}^\pi) \right] dV \quad (2.33)$$

Dans les équations que l'on a écrites, les vitesses et les accélérations sont des quantités moyennes. Il s'agit de quantités qui normalement sont mesurées lorsque l'on fait un essai. Dans le cadre de la théorie des milieux poreux, normalement l'écoulement des phases fluides est décrit en termes de vitesses (moyennes par rapport à la masse) relatives au squelette. Leur mouvement est pris en compte par rapport à la configuration actuelle du squelette du solide. Les vitesses et les accélérations de chaque particule fluide peuvent donc être écrites en faisant référence aux mêmes grandeurs écrites pour les points solides correspondant. Si on écrit l'équation 2.31 en spécifiant la notation π pour le solide s , la phase liquide w et le gaz g , on obtient :

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^{w,s} &= \mathbf{v}^w - \mathbf{v}^s \\ \mathbf{v}^{g,s} &= \mathbf{v}^g - \mathbf{v}^s \end{aligned} \quad (2.34)$$

Et les accélérations de l'eau et du gaz :

$$\mathbf{a}^w = \mathbf{a}^s + \frac{D^s \mathbf{v}^{w,s}}{Dt} + \mathbf{v}^{w,s} \cdot \text{grad } (\mathbf{v}^s + \mathbf{v}^{w,s}) \quad (2.35)$$

$$\mathbf{a}^g = \mathbf{a}^s + \frac{D^s \mathbf{v}^{g,s}}{Dt} + \mathbf{v}^{g,s} \cdot \text{grad } (\mathbf{v}^s + \mathbf{v}^{g,s}) \quad (2.36)$$

Le tenseur gradient de vitesse $\mathbf{L}^s$ du squelette, donné, dans une représentation spatiale, par [Chen92], [Molenkamp86] :

$$\mathbf{L}^s \equiv \text{grad } \mathbf{v}^s = \mathbf{D}^s + \mathbf{W}^s \quad (2.37)$$

La partie symétrique $\mathbf{D}^s$ est appelée taux de déformation ou *Eulerian strain rate tensor*, et la partie anti-symétrique $\mathbf{W}^s$ est le taux de rotation ou *spin tensor*.

Variable	Ψ	$\mathbf{i}$	$\mathbf{b}$	G
Masse	1	0	0	0
Moment linéaire	$\dot{\mathbf{r}}$	$\mathbf{t}_m$	$\mathbf{g}$	0
Moment angulaire	$\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}$	$\mathbf{r} \times \mathbf{t}_m$	$\mathbf{r} \times \mathbf{g}$	0
Énergie	$E + 1/2 \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}}$	$\mathbf{t}_m \dot{\mathbf{r}} - \dot{\mathbf{q}}$	$\mathbf{g} \cdot \dot{\mathbf{r}} + h$	0
Entropie	λ	Φ	s	φ

TAB. 2.1 – Propriétés thermodynamiques pour l'équation de bilan générale microscopique

2.4.2 Équations de bilan au niveau microscopique

Les équations de bilan sont donc obtenues en substituant à la variable générique ψ contenue dans l'équation de bilan microscopique générale les valeurs contenues dans le tableau 2.1.

Dans ce tableau on a :

- E : énergie intrinsèque spécifique
- λ : entropie spécifique
- $\mathbf{t}_m$: tenseur de contrainte microscopique
- $\mathbf{q}$: vecteur flux de chaleur
- Φ : flux d'entropie
- h : apport externe de chaleur intrinsèque
- s : apport externe d'entropie intrinsèque
- φ : augmentation d'entropie

L'entropie est une quantité non-conservative : il nous faut introduire la deuxième loi de la thermodynamique :

$$\int_V \rho \varphi dV \geq 0 \quad (2.38)$$

Une quantité est définie limitée si il existe un nombre fini M tel que :

$$|\psi| \leq M \quad (2.39)$$

Une quantité est dite objective si elle est indépendante du mouvement rigide du système de référence.

Les quantités suivantes sont limitées et objectives : ρ , $\mathbf{t}$, E, $\mathbf{q}$, h, S, φ , and λ .

Le vecteur de vitesse $\mathbf{v}$ et la force $\mathbf{g}$ ne sont pas objectives mais sont limités.

Normalement en thermodynamique on rappelle qu'on peut relier l'apport externe et le flux surfacique d'entropie à l'apport externe de chaleur et au flux de chaleur à travers la température θ :

$$s = \frac{h}{\theta} ; \Phi = \frac{q}{\theta} \quad (2.40)$$

2.4.3 Équations de bilan au niveau macroscopique

Les équations de bilan au niveau macroscopique sont obtenues en substituant à la variable générique ψ , contenu dans l'équation de bilan macroscopique générale (eq.2.19), la quantité que l'on cherche.

Dans la suite on présente l'ensemble des équations à l'échelle microscopique et macroscopique. En ce qui concerne l'équation de bilan de masse on présente les détails des calculs. En ce qui concerne les autres équations on ne donne que les équations finales. Plus de détails sont donnés en Annexe.

2.4.3.1 Équations macroscopiques de bilan de masse

Les variables microscopiques qu'il faut introduire dans l'équation générale 2.14 sont les suivantes :

$$\psi = 1, \mathbf{i} = \mathbf{0}, b = 0, G = 0 \quad (2.41)$$

on obtient donc la relation microscopique :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} (\rho \mathbf{r}) = 0 \quad (2.42)$$

L'équation moyenne de bilan de masse est obtenue en introduisant dans l'eq.2.19 les termes suivants :

$$\overline{\psi}^\pi \equiv 1, \mathbf{i}^\pi \equiv \mathbf{0}, \overline{b}^\pi \equiv 0, I^\pi \equiv 0, \overline{G}^\pi \equiv 0 \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle_\pi}{\partial t} + \text{div} (\langle \rho \rangle_\pi \overline{\mathbf{v}}^\pi) = \langle \rho \rangle_\pi e^\pi \quad (2.44)$$

et en particulier :

$$\overline{\mathbf{v}}^\pi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\langle \rho \rangle_\pi(\mathbf{x}, t) \delta V} \int_{\delta V} \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \gamma^\pi(\mathbf{r}, t) dv \quad (2.45)$$

On peut réécrire l'eq.2.44 sous la forme :

$$\frac{D^\pi \langle \rho \rangle_\pi}{Dt} + \langle \rho \rangle_\pi \text{div} \overline{\mathbf{v}}^\pi = \langle \rho \rangle_\pi e^\pi(\rho) \quad (2.46)$$

qui est facilement obtenue en rappelant que :

$$\frac{D^\pi \langle \rho \rangle_\pi}{Dt} = \frac{\partial \langle \rho \rangle_\pi}{\partial t} + \overline{\mathbf{v}}^\pi \cdot \text{grad} \langle \rho \rangle_\pi \quad (2.47)$$

et que :

$$\text{div} (\langle \rho \rangle_\pi \overline{\mathbf{v}}^\pi) = \langle \rho \rangle_\pi \text{div} \overline{\mathbf{v}}^\pi + \text{grad} \langle \rho \rangle_\pi \cdot \overline{\mathbf{v}}^\pi \quad (2.48)$$

On peut enfin introduire dans l'eq.2.46 la fraction molaire :

$$\frac{D^\pi \eta^\pi \langle \rho \rangle^\pi}{Dt} + \eta^\pi \langle \rho \rangle^\pi \operatorname{div} \bar{v}^\pi = \eta^\pi \langle \rho \rangle^\pi e^\pi(\rho) \quad (2.49)$$

On rappelle que la fraction molaire η^π est définie pour chaque constituant comme :

- solide $\eta^s = 1 - n$ avec $n = (\delta V^w + \delta V^g)/\delta V$ la porosité
 - eau $\eta^w = n S_w$ avec $S_w = \delta V^w/(\delta V^w + \delta V^g)$ la saturation en eau liquide
 - gaz $\eta^g = n S_g$ avec $S_g = \delta V^g/(\delta V^w + \delta V^g)$ la saturation en gaz
- Et que donc :

$$S_w + S_g = 1 \quad (2.50)$$

Phase solide Comme on a déjà remarqué dans le chapitre 1, la pâte de ciment est sujette à désagrégation lorsque le béton atteint de hautes températures. Il est évident que, comme l'on change la microstructure du béton, on change aussi sa densité. On peut alors spécifier immédiatement le terme d'échange de masse qui intervient dans l'équation de conservation. D'après [Schrefler98] on peut donc directement écrire :

$$\rho_s e^s(\rho) = \dot{m}_{dehydr} \quad (2.51)$$

avec $\dot{m}_{dehydr}$ le terme qui prend en compte l'effet de la déshydratation et qui sera spécifié plus loin, dans l'ensemble des équations constitutives.

L'équation finale pour la phase solide devient donc :

$$\frac{D^s \rho_s}{Dt} + \rho_s \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}}^s = \dot{m}_{dehydr} \quad (2.52)$$

En utilisant les densités moyennes :

$$\frac{D^s (1 - n) \rho^s}{Dt} + \rho^s (1 - n) \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}}^s = \dot{m}_{dehydr} \quad (2.53)$$

où on a noté par souci de simplicité $\rho^s = \langle \rho \rangle^s$.

Phase liquide : eau L'équation de bilan macroscopique pour l'eau liquide est obtenue de la même manière que pour la phase solide. Dans ce cas il faut aussi prendre en considération le changement de phase (évaporation-condensation) de l'eau. Le terme d'échange de masse devient alors :

$$\rho_w e^w(\rho) = -\dot{m}_{vap} - \dot{m}_{dehydr} \quad (2.54)$$

et l'équation 2.44 peut être écrite dans la forme :

$$\frac{\partial \rho_w}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_w \bar{\mathbf{v}}^w) = \rho_w e^w(\rho) = -\dot{m}_{vap} - \dot{m}_{dehydr} \quad (2.55)$$

On peut donc introduire la dérivée matérielle :

$$\frac{D^w \rho_w}{Dt} + \rho_w \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}}^w = -\dot{m}_{vap} - \dot{m}_{dehydr} \quad (2.56)$$

et, enfin, la densité intrinsèque moyenne de l'eau :

$$\frac{D^w n S_w \rho^w}{Dt} + n S_w \rho^w \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}}^w = -\dot{m}_{vap} - \dot{m}_{hydr} \quad (2.57)$$

Phases gazeuses : air sec et eau vapeur La phase gazeuse est une phase multicomposants constituée par deux différentes espèces, l'eau vapeur et l'air sec. On peut donc écrire la conservation de masse pour chacune des deux espèces de la même manière que l'on a vu plus haut, en négligeant les réactions chimiques entre les deux phases. Les deux espèces se mélangent entre elles. Elles ont donc la même fraction de volume $n S_g$. On a donc pour l'air sec :

$$\frac{\partial n S_g \rho^{ga}}{\partial t} + \operatorname{div} (n S_g \rho^{ga} \bar{\mathbf{v}}^{ga}) = 0 \quad (2.58)$$

et pour l'eau vapeur :

$$\frac{\partial n S_g \rho^{gw}}{\partial t} + \operatorname{div} (n S_g \rho^{gw} \bar{\mathbf{v}}^{gw}) = n S_g \rho^{gw} e_{gw}(\rho) = \dot{m}_{vap} \quad (2.59)$$

On peut donc obtenir l'équation de conservation de masse pour la phase gazeuse complète :

$$\frac{\partial n S_g \rho^g}{\partial t} + \operatorname{div} (n S_g \rho^g \bar{\mathbf{v}}^g) = \dot{m}_{vap} \quad (2.60)$$

avec :

$$\rho^g = \rho^{ga} + \rho^{gw} \quad (2.61)$$

et :

$$\bar{\mathbf{v}}^g = \frac{1}{\rho^g} (\rho^{ga} \bar{\mathbf{v}}^{ga} + \rho^{gw} \bar{\mathbf{v}}^{gw}) = c^{ga} \bar{\mathbf{v}}^{ga} + c^{gw} \bar{\mathbf{v}}^{gw} \quad (2.62)$$

avec :

$$c^\pi = \rho^\pi / \rho^g \quad (2.63)$$

la fraction massique du composant π .

On peut introduire la vitesse de diffusion comme : $\mathbf{u}^\pi$, avec $\pi = ga, gw$:

$$\mathbf{u}^\pi = \bar{\mathbf{v}}^{\pi g} = \bar{\mathbf{v}}^\pi - \bar{\mathbf{v}}^g \quad (2.64)$$

On peut introduire la dérivée matérielle :

$$\frac{D^g n S_g \rho^g}{Dt} + n S_g \rho^g \operatorname{div} (\bar{\mathbf{v}}^g) = \dot{m}_{vap} \quad (2.65)$$

et donc pour la phase vapeur :

$$\frac{D^{gw} n S_g \rho^{gw}}{Dt} + n S_g \rho^{gw} \operatorname{div} (\bar{\mathbf{v}}^{gw}) = \dot{m}_{vap} \quad (2.66)$$

qui à l'aide de 2.64 et de la définition de la dérivée matérielle devient :

$$\frac{D^g n S_g \rho^{gw}}{Dt} + \mathbf{u}^{gw} \operatorname{grad} (n S_g \rho^{gw}) + n S_g \rho^{gw} \operatorname{div} (\bar{\mathbf{v}}^{gw}) = \dot{m}_{vap} \quad (2.67)$$

Avec le développement de la divergence on obtient :

$$\frac{D^g n S_g \rho^{gw}}{Dt} + \text{div}(n S_g \rho^{gw} \mathbf{u}^{gw}) + n S_g \rho^{gw} \text{div}(\bar{\mathbf{v}}^g) = \dot{m}_{vap} \quad (2.68)$$

En introduisant la définition classique de flux du composent gw :

$$\mathbf{J}_g^{gw} = n S_g \rho^{gw} \mathbf{u}^{gw} \quad (2.69)$$

on a donc la forme définitive et générale de la conservation :

$$\frac{D^g n S_g \rho^{gw}}{Dt} + \text{div}(\mathbf{J}_g^{gw}) + n S_g \rho^{gw} \text{div}(\bar{\mathbf{v}}^g) = \dot{m}_{vap} \quad (2.70)$$

La démarche pour obtenir l'équation de conservation de l'air sec est la même, en faisant la substitution de gw avec ga .

2.4.3.2 Équation de bilan du moment linéaire

Les variables microscopiques à introduire dans l'équation générale 2.14 sont les suivantes :

$$\psi = \dot{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{i} = \mathbf{t}_m, \quad \mathbf{b} = \mathbf{g}, \quad \mathbf{G} = \mathbf{0} \quad (2.71)$$

avec $\mathbf{t}_m$ le tenseur microscopique de contrainte et $\mathbf{g}$ le moment externe lié aux effets gravitationnels.

L'équation microscopique du moment linéaire devient donc :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \dot{\mathbf{r}}) + \text{div}(\rho \dot{\mathbf{r}} \otimes \dot{\mathbf{r}}) - \text{div} \mathbf{t}_m - \rho \mathbf{g} = \mathbf{0} \quad (2.72)$$

L'eq.2.72 peut être réécrite à l'aide de l'équation de bilan de masse 2.42 :

$$\text{div} \mathbf{t}_m + \rho (\mathbf{g} - \ddot{\mathbf{r}}) = \mathbf{0} \quad (2.73)$$

Cette équation représente la forme usuelle de l'équation de bilan microscopique pour un matériau monophasique.

En ce qui concerne l'équation de bilan macroscopique, on donne l'expression générale suivante :

$$\text{div} \mathbf{t}^\pi + \rho_\pi (\bar{\mathbf{g}}^\pi - \bar{\mathbf{a}}^\pi) + \rho_\pi \left[\mathbf{e}^\pi \left(\rho \tilde{\dot{\mathbf{r}}} \right) + \hat{\mathbf{t}}^\pi \right] = 0 \quad (2.74)$$

Les détails du calcul sont donnés en annexe C.

2.4.3.3 Équation de bilan du moment angulaire

Si on prend en considération le moment angulaire, on utilise les variables microscopiques suivantes

$$\psi = \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{i} = \mathbf{r} \times \mathbf{t}_m, \quad \mathbf{b} = \mathbf{r} \times \mathbf{g}, \quad \mathbf{G} = \mathbf{0} \quad (2.75)$$

On obtient donc l'équation de moment angulaire microscopique :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}})] + \text{div} [\rho (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}) \otimes \dot{\mathbf{r}}] - \text{div} (\mathbf{r} \times \mathbf{t}_m) - \mathbf{r} \times \rho \mathbf{g} = \mathbf{0} \quad (2.76)$$

Après quelques transformations (voire annexe C) on obtient :

$$\left[\frac{D\rho}{Dt} + \rho \text{div} \dot{\mathbf{r}} \right] (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}) - \mathbf{r} \times [\text{div} \mathbf{t}_m + \rho (\mathbf{b} - \ddot{\mathbf{r}})] - \text{grad} \mathbf{r} \times \mathbf{t}_m = \mathbf{0} \quad (2.77)$$

2.4.3.4 Équation de bilan de l'énergie

En ce qui concerne l'équation de bilan de l'énergie, les quantités microscopiques à introduire dans l'équation générale 2.14 sont les suivantes :

$$\psi = E + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{i} = \mathbf{t}_m \dot{\mathbf{r}} - \mathbf{q}, \quad b = \mathbf{g} \cdot \dot{\mathbf{r}} + h, \quad G = 0 \quad (2.78)$$

avec $E(\mathbf{r}, t)$ l'énergie intrinsèque spécifique, $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$ le vecteur flux de chaleur et $h(\mathbf{r}, t)$ l'apport externe de chaleur volumique.

L'équation microscopique devient donc :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho E + \rho \frac{1}{2} \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} \right) + \text{div} \left[\rho \left(E + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} \right) \dot{\mathbf{r}} \right] - \text{div} (\mathbf{t}_m \dot{\mathbf{r}} - \mathbf{q}) - \rho (\mathbf{g} \cdot \dot{\mathbf{r}} + h) = 0 \quad (2.79)$$

Après quelques transformations (voire annexe C) on obtient :

$$\rho \frac{DE}{Dt} = \mathbf{t}_m : \mathbf{d} - \text{div} \mathbf{q} + \rho h \quad (2.80)$$

La forme macroscopique de l'équation de l'énergie peut être écrite :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_\pi \left(\bar{E}^\pi + \frac{1}{2} \bar{\mathbf{v}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi \right) \right] + \text{div} \left[\rho_\pi \left(\bar{E}^\pi + \frac{1}{2} \bar{\mathbf{v}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi \right) \bar{\mathbf{v}}^\pi \right] \\ & - \text{div} (\mathbf{t}^\pi \bar{\mathbf{v}}^\pi - \tilde{\mathbf{q}}^\pi) - \rho_\pi (h^\pi + \mathbf{g}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi) - \rho_\pi \mathbf{e}^\pi \left(\rho \tilde{\mathbf{r}}^\pi \right) \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi \\ & - \frac{1}{2} \rho_\pi e^\pi (\rho) \bar{\mathbf{v}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi - \rho_\pi e^\pi \left(\rho \hat{E} \right) - \rho_\pi \hat{\mathbf{t}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi - \rho_\pi Q^\pi = 0 \end{aligned} \quad (2.81)$$

Avec la quantité $\tilde{x}$ définie comme la déviation de la fonction x de la quantité moyenne sur la masse $\bar{x}^\pi$. Plus de détails sont donnés en annexe B.

Enfin, l'équation de l'énergie peut être transformée sous la forme :

$$\sum_{\pi} \rho_{\pi} \left[e^{\pi} (\rho \hat{E}) + \mathbf{e}^{\pi} (\rho \hat{\mathbf{r}}) \cdot \bar{\mathbf{v}}^{\pi} + \frac{1}{2} e^{\pi} (\rho) \bar{\mathbf{v}}^{\pi} \cdot \bar{\mathbf{v}}^{\pi} + \hat{\mathbf{t}}^{\pi} \cdot \bar{\mathbf{v}}^{\pi} + Q^{\pi} \right] = 0 \quad (2.82)$$

Physiquement cela signifie que le bilan total d'échange d'énergie entre toutes les phases est nul. Le changement de phase, par la suite, sera pris en considération seulement pour les phases fluides.

2.4.3.5 Équation de bilan de l'entropie

En ce qui concerne l'équation de bilan de l'entropie, les variables à introduire dans l'équation de bilan microscopique 2.14 sont les suivantes :

$$\psi = \lambda, \mathbf{i} = \Phi, b = s, G = \varphi \quad (2.83)$$

avec λ l'entropie spécifique, Φ le vecteur flux d'entropie, s une apport externe volumique d'entropie et φ la production d'entropie. L'équation de bilan devient alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \lambda) + \text{div} (\rho \lambda \hat{\mathbf{r}}) - \text{div} \Phi - \rho s = \rho \varphi \quad (2.84)$$

On peut transformer l'équation de la manière usuelle ; on obtient donc :

$$\rho \frac{D\lambda}{Dt} - \rho s - \text{div} \Phi = \varphi \quad (2.85)$$

En rappelant les relations entre Φ et le flux de chaleur $\mathbf{q}$ et s et l'apport externe volumique de chaleur h , on peut écrire :

$$\rho \frac{D\lambda}{Dt} - \frac{1}{\theta} \rho h + \text{div} \frac{1}{\theta} \mathbf{q} = \rho \varphi \quad (2.86)$$

Selon la deuxième loi de la thermodynamique, on peut écrire la relation suivante :

$$\rho \varphi \geq 0 \quad (2.87)$$

Ce principe permet donc d'écrire l'inéquation de l'entropie. Cette inéquation est souvent utilisée pour introduire une description thermodynamique rigoureuse du comportement du matériau.

On obtient donc l'inégalité de l'entropie valable pour un milieu monophasique à l'aide de l'eq.2.40 :

$$\rho \frac{D\lambda}{Dt} - \frac{1}{\theta} \rho h + \text{div} \frac{1}{\theta} \mathbf{q} \geq 0 \quad (2.88)$$

Enfin, on rappelle la forme finale macroscopique de l'inéquation de l'entropie :

$$\sum_{\pi} \left[\rho_{\pi} \frac{D^{\pi} \bar{\lambda}^{\pi}}{Dt} + \rho_{\pi} e^{\pi} (\rho) \bar{\lambda}^{\pi} + \text{div} \left(\frac{1}{\theta^{\pi}} \mathbf{q}^{\pi} \right) - \frac{1}{\theta^{\pi}} \rho_{\pi} h^{\pi} \right] \geq 0 \quad (2.89)$$

2.5 Lois constitutives

Les équations de bilan qu'on a écrit sont susceptibles de s'adapter au problème en introduisant les équations constitutives ; une forme générale a été présentée. Le modèle générique est donc complété par l'introduction des lois constitutives qui décrivent chaque phase. De manière schématique on peut énumérer les relations suivantes :

- Équations d'état pour la description des phases gazeuses
- Équation d'état pour l'eau
- Equilibre de sorption (eau liquide-eau vapeur) et équation de Clausius-Clapeyron
- Description du réseaux poreux
- Lois de description de l'écoulement (loi de Fick et de Darcy)
- Loi de Fourier

2.5.1 Besoins expérimentaux

Le modèle général que l'on a présenté requiert un grand nombre de paramètres qui sont donnés par la théorie, par la bibliographie, et, si cela devient nécessaire, par des essais expérimentaux.

besoins expérimentaux pour le liquide et pour le gaz Le liquide et le gaz utilisés sont de compositions connues mais sont utilisés dans des conditions de température et de pression qui ne sont pas usuelles. Par contre, la littérature propose un grand nombre de grandeurs numériques et de modèles adaptés à notre problème pour décrire les différentes caractéristiques nécessaires énumérées plus haut relatives aux mélanges liquide et gazeux. Cependant, comme on le verra, les modèles décrivant l'évolution de certaines caractéristiques sont de nature semi-empirique, ce qui signifie qu'ils font intervenir un ou plusieurs paramètres qui ne peuvent être déterminés que par l'expérience.

besoins expérimentaux pour le milieu poreux Les besoins concernant le milieu poreux seul sont de type géométrique et sont indépendants du ou des fluides de notre problème. On pourra donc utiliser des résultats de la littérature concernant la détermination de la structure interne à l'aide d'autres fluides (mercure, eau...).

besoins expérimentaux pour les interactions entre le milieu poreux et les fluides Ces caractéristiques doivent a priori être déterminées en utilisant le milieu poreux et le liquide de notre problème : dans la littérature, le problème d'interaction de l'eau et du mélange air-eau vapeur est bien traité, avec des relations de nature semi-empirique et l'utilisation d'un certain nombre de paramètres.

2.6 Conclusions

Ce chapitre a permis de présenter brièvement un système d'équations générale pour la description d'un milieu poreux et les différents besoins de notre modèle en termes de caractérisation. En particulier, on a présenté une équation générale de conservation à l'échelle microscopique. A travers les principes de moyenne, on a obtenu l'ensemble d'équations à

l'échelle macroscopique nécessaires pour la description d'un milieu poreux. Etant le système absolument générale, il nous faut la définition d'un ensemble de lois constitutives nécessaires pour adapter les équations au cas d'un milieu poreux soumis à haute température.

Les chapitres suivants permettront d'apporter des réponses (expérimentales et/ou théoriques) aux différents besoins énoncés plus haut. Nous apporterons tout d'abord une description plus complète de la géométrie du milieu poreux et des phases constituant notre matériau.

Chapitre 3

Description des phases fluides

On a établi au chapitre 2 les besoins du modèle mathématique, soit expérimentaux, soit théoriques. On a donc remarqué la nécessité de décrire les phases fluides présentes dans notre milieu poreux, soit en terme de comportement soit en terme de lois constitutives. Le but de ce chapitre est donc de donner les principes de base nécessaires pour caractériser les phases fluides (eau liquide, eau vapeur et air sec).

On présente tout d'abord les différents rôles de l'eau dans le béton soit à température ordinaire soit à haute température. Ensuite on fera des rappels sur la théorie de l'écoulement d'un fluide dans un pore et on introduira donc la notion de perméabilité. Enfin, on complétera la description des phases fluides avec la présentation des lois constitutives nécessaires au modèle mathématique.

3.1 Le rôle de l'eau dans le béton à haute température

L'eau est un composant fondamental dans le béton, étant en première lieu le liant du ciment (voir chapitre 4). La pâte de ciment est aussi caractérisée par une structure colloïdale très fine avec une surface spécifique très élevée [Collepardi92] : ceci donne une grande sensibilité à la teneur en eau soit à température ambiante soit à haute température. Le C-S-H (voir chapitre 4) est lié par des liaisons chimiques et des forces secondaires de cohésion de type Van der Waals. Normalement les forces de Van der Waals sont beaucoup plus faibles que les liaisons chimiques, mais grâce à l'importance de la surface spécifique ($250\text{m}^2/\text{g}$ contre $0.3\text{m}^2/\text{g}$ pour le ciment non hydraté) et à la proximité de ces surfaces (quelque Å), elles jouent un rôle très important dans la définition des caractéristiques mécaniques du béton (jusqu'à 50% selon [Collepardi92]). Les forces de cohésion sont aussi dépendantes des propriétés diélectriques du milieu (eau, air) et diminuent lorsque l'eau est adsorbée. On peut alors imaginer une explication partielle des conséquences que la déshydratation entraîne dans le béton. Le changement de contenu d'eau dans les pores de la pâte de ciment (i.e. la déshydratation) a certainement une influence sur les forces de cohésion [Cism03].

Enfin, en ce qui concerne l'eau contenue dans les pores des agrégats, elle peut avoir une certaine influence sur la chaleur latente, les propriétés thermiques et le spalling.

Dans le cadre d'un béton à haute température, l'eau (soit libre soit chimiquement liée) joue aussi un rôle supplémentaire :

- **Propriétés** L'eau a une influence sur le béton à température ambiante en étant en première lieu l'une des composantes de la réaction chimique de formation du C-S-H. Lorsque on dépasse 100°C , l'eau libre ou évaporable quitte le béton avec une influence sur certaines caractéristiques (ex. conductivité, expansion thermique, ...). A partir de la température conventionnelle de 105°C , on considère que toute l'eau libre a quitté le béton, et que la réaction de dissociation de la pâte de ciment commence (déshydratation) : ceci entraîne toute une série de modifications dans le béton en affectant toutes ses propriétés (mécaniques, de transport, ...).
- **Spalling** (ou écaillage) La pression dans les pores, avec la vaporisation de l'eau, monte et contribuerait au phénomène de spalling. Dans le cadre de ce processus, la perméabilité joue un rôle très important.
- **Absorption de chaleur** La chaleur latente est absorbée pendant la phase de vaporisation, en retardant la montée en température du béton. On a déjà remarqué que cet effet positif se retrouve lorsque on atteint par exemple la température de 400°C , quand on observe la désagrégation du $\text{Ca}(\text{OH})_2$, ou encore à environ 650°C , quand on observe la désagrégation du CaCO_3 .
- **Protection de radiations** La présence d'éléments légers dans l'eau, notamment l'hydrogène, joue un rôle dans la propagation des radiations nucléaires en ralentissant leur diffusion.
- **Rôle de l'eau après refroidissement** L'eau libre supplémentaire que l'on retrouve dans le béton, se lie au ciment anhydre. Par contre, la réhydratation du CaO forme de l'ettringite secondaire, avec une augmentation significative du volume qui détruit la pâte de ciment.

3.2 Type d'eau dans le béton

L'eau dans la pâte de ciment hydraté est contenue sous différentes formes [Cism03] :

- **Eau vapeur libre** contenue dans les pores capillaires ou de plus grande taille
- **Eau liquide libre** contenue dans les pores capillaires ou de plus grande taille
- **Eau adsorbée** contenue à la surface des micro-pores
- **Eau intra-couche** contenue entre les couches du C-S-H
- **Eau chimiquement liée** qui forme le C-S-H et fait partie du solide

Une classification des pores qui caractérisent la micro-structure du béton est donnée au chapitre 4. L'eau capillaire est généralement décrite comme eau libre : généralement, dans le cadre de la description du comportement d'un milieu poreux, on s'intéresse à son écoulement. En ce qui concerne l'eau adsorbée et l'eau intra-couche, on considère leur comportement influencé par l'action des forces de surface. Le chauffage du béton change le contenu de l'eau dans les pores : l'eau sous ses différentes formes quitte le béton selon l'ordre décrit plus haut.

Par simplicité, très souvent on décrit les différents "types" d'eau selon deux catégories : l'eau évaporable et l'eau non-évaporable [Cism03] :

Eau évaporable C'est l'eau qui, à l'équilibre, quitte le béton lorsque on atteint la température conventionnelle de 105°C à 1Atm de pression. A température ambiante, environ 50% du volume de la pâte de ciment saturé est occupé par l'eau évaporable. Il est à noter que la température de 105°C est purement conventionnelle. La déshydratation commence à des températures bien inférieures : le calcium sulfoalluminate et le tetracalcium hexagonal

d'alluminates commencent à perdre de l'eau d'hydratation vers le $70 - 80^\circ\text{C}$. En tout cas, vu la complexité et la difficulté de classification des phénomènes qui ont lieu, une séparation et distinction précise entre l'eau chimique et l'eau non-chimique reste très difficile voir impossible.

Eau non évaporable C'est l'eau qui quitte la pâte de ciment au delà de la température conventionnelle de 105°C et qui est considérée comme de l'eau purement chimique. En augmentant la température, il y a de plus en plus d'hydrates qui se transforment en anhydres avec une grande quantité d'eau libre relâchée dans le béton. Il faut remarquer que la production d'eau n'est pas instantanée, mais le processus de destruction des liaisons chimiques et donc du passage d'hydrates à anhydres prend du temps [Ferraille00], [DalPont04]. Pour un ciment bien hydraté, l'eau non évaporable est environ 18% de la masse du matériau anhydre ; ce pourcentage monte à environ le 23% pour un ciment complètement hydraté [Cism03]. La proportion entre la quantité d'eau non évaporable et le volume solide de la pâte de ciment peut être utilisée pour mesurer la quantité de gel de ciment i.e. le niveau d'hydratation.

3.3 Changements de phase de l'eau

Considérons une quantité d'eau supposée pure. Le but de cette section est de décrire les changements d'état qui se produisent lorsqu'on élève la température, sous trois conditions bien distinctes :

- volume V fixe
- pression p fixe
- température θ fixe

Volume fixe Considérons un récipient fermé (on fixe donc le volume) partiellement rempli d'eau liquide à la température θ . L'eau vapeur sature complètement le volume non occupé par l'eau liquide et la surface de séparation eau liquide-vapeur est plane. L'eau liquide et l'eau vapeur sont donc à la même pression, i.e. la *pression de vapeur saturante* du corps pur, $p_s(\theta)$. En augmentant la température, on arrive jusqu'à 374°C à une pression de 22.064MPa i.e. le point critique. A cette température et pression, la distinction entre l'eau liquide saturée et l'eau vapeur saturée disparaît. Au point critique on a donc une *température critique*, une *pression critique* et une *volume spécifique critique*. Au delà du point critique on ne peut plus reconnaître de changement de phase ; on parle généralement de *vapeur surchauffée*. On appelle *liquide saturé* un liquide qui vaporise.

Pression fixe On sait bien que la température d'ébullition est fonction de la pression. A une pression donnée, la température de changement de phase θ_s est appelée *température de saturation*. Si l'on fixe la pression à la valeur p et si l'on augmente la température, l'ébullition commence à la température $\theta_s(p)$ et cette température n'évolue plus jusqu'à l'évaporation complète de l'eau.

Température fixe A une température donnée, la pression à laquelle on a le changement de phase est celle qu'on a appelée pression de vapeur saturante. Si l'on fixe la température

à la valeur θ et si l'on diminue la pression, l'ébullition commence à la pression $p_s(\theta)$ et cette pression n'évolue plus jusqu'à l'évaporation complète de l'eau.

Dans les deux derniers cas, l'expansion volumique continue, tandis que le niveau d'eau liquide diminue.

Les processus que l'on a décrit sont représentés généralement à travers des diagrammes de changement d'état. On représente en figure 3.1 un exemple de diagramme de changement de phase température-volume.

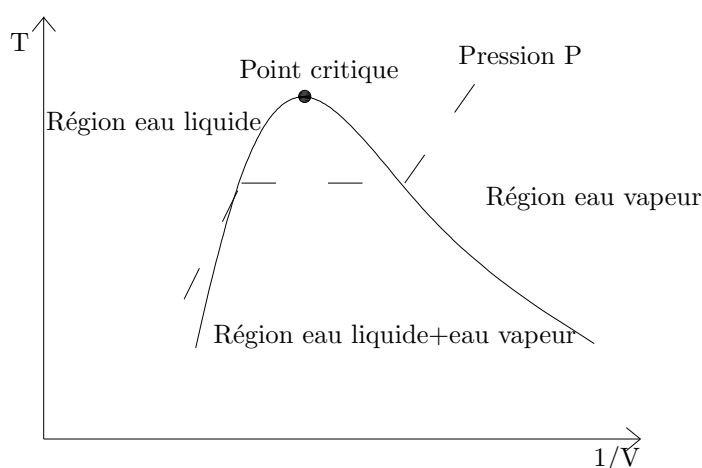


FIG. 3.1 – Diagramme température-volume spécifique

3.4 Écoulement dans un milieu poreux

Le but de ce paragraphe est d'introduire, tout d'abord de manière simplifiée, le phénomène d'écoulement dans un milieu poreux. On donnera donc les lois qui règlent le phénomène, avec une attention particulière à la loi de Darcy et de Fick. Ensuite on présentera une description des différents types d'écoulement qu'on peut observer lorsqu'on introduit un fluide, soit liquide soit gazeux, dans un milieu poreux. Dans ce cadre on décrira aussi l'écoulement d'un fluide dans un pore rectiligne i.e. un réseau poreux élémentaire.

3.4.1 Loi de Darcy

Un écoulement est dit darcéen s'il est produit par un gradient de pression. La relation de Darcy (1856) est une application de la loi de Hagen-Poiseuille au milieu poreux. À l'origine elle vise une application à l'écoulement d'eau dans un milieu granulaire et est basée sur les hypothèses suivantes :

- Les forces d'écoulement dues à la viscosité prédominent sur les forces d'inertie
- Les écoulements du fluide sont supposés laminaires
- Le fluide d'infiltration est inerte vis-à-vis du milieu poreux, c'est à dire que il n'y a aucune interaction chimique ou physique entre le fluide et le matériau

Dans notre modèle nous avons une phase liquide et une phase gazeuse. La loi de Darcy peut être écrite pour chaque phase π et fait intervenir un tenseur d'une quantité que l'on

appellera $\mathbf{K}^\pi$, qui permet de relier le volume du fluide V traversant une unité de surface par unité de temps au gradient de pression. On peut donc écrire :

$$V = nS_\pi \mathbf{v}^\pi = -\mathbf{K}^\pi \mathbf{grad} p^\pi \quad (3.1)$$

avec n la porosité, S_π la saturation de la phase π , $\mathbf{v}^\pi$ (ms^{-1}) la vitesse macroscopique de la phase π définie dans l'eq.2.45 (on a noté simplement $\mathbf{v}^\pi$ au lieu de $\bar{\mathbf{v}}^\pi$) et $\mathbf{grad} p^\pi$ le gradient de pression de la phase ($Pa \cdot m^{-1}$). $\mathbf{K}^\pi$ ($m^2 Pa^{-1} s^{-1}$) dépend principalement de la microstructure, du niveau de saturation et de la viscosité de la phase que l'on considère.

On remarque que si l'on tient compte des forces de gravité, il convient remplacer dans l'eq.3.3 la pression p^π avec la pression piézométrique $p^{\pi*}$ définie par la relation suivante :

$$p^{\pi*} = p^\pi + \rho^\pi g z \quad (3.2)$$

où ρ^π est la masse volumique de la phase π et z est la cote verticale comptée positivement vers le haut.

Dans le cadre de notre travail, les mesures de pression se font à des côtes très voisines telles qu'on puisse négliger les forces de gravité.

Le tenseur $\mathbf{K}^\pi$ est la grandeur qui décrit la pénétration d'un gaz ou d'une liquide à travers le milieu poreux suite à un gradient de pression. Les gaz et les liquides ont bien entendu un comportement différent dans le béton. Cet aspect sera repris et mieux développé dans les paragraphes suivants.

L'application de la loi de Darcy est envisagée par la suite en considérant un fluide de percolation liquide, puis gazeux. Dans ce dernier cas, la prise en compte du mouvement de la phase gazeuse en milieu poreux est nécessaire pour la détermination de la perméabilité. Dans le cadre de l'utilisation de la loi de Darcy, [Gray80] et puis [Schrefler98] ont démontré que sous certaines conditions (écoulement lent et effet de viscosité à la compression négligeables), la loi de Darcy peut être dérivée de l'équation générale de conservation de moment linéaire et peut donc être appliquée pour la description de l'écoulement d'un gaz.

On introduit aussi une écriture massique de la loi de Darcy, le vecteur débit massique noté J^π (en $kgm^{-2}s^{-1}$) défini de la manière suivante :

$$J^\pi = -\rho^\pi V \quad (3.3)$$

3.4.2 Loi de Fick

Un autre mécanisme de transport du fluide dans le milieu poreux se produit dans les phases constituées d'un mélange des composants. Les gradients de concentration d'un constituant dans la phase mélange sont les moteurs d'un mouvement relatif d'un constituant par rapport au mouvement de la phase. Cet écoulement est dit fickien. Dans le cas qui nous intéresse, il se produit suite à un gradient de concentration d'air sec ou d'eau vapeur dans le gaz : ce phénomène est aussi connu sous le nom de diffusion.

Considérons le constituant α en train de diffuser dans la phase π . On peut définir le flux relatif de diffusion d'un constituant α dans le mélange π :

$$\mathbf{J}_\pi^\alpha = c^{\alpha,\pi} (\mathbf{v}^\alpha - \mathbf{v}^\pi) \quad (3.4)$$

avec $\mathbf{J}_\pi^\alpha$ (m/s) le flux relatif de diffusion de α dans π et $c^{\alpha,\pi}$ la concentration du composant α dans π .

La définition de concentration est sujet de discussion dans la littérature. En général les auteurs donnent à la concentration trois définitions : volumique, massique et molaire. Des études récentes [Mainguy98], basées sur des considérations de type thermodynamique, font apparaître que le choix le plus convenable est celui d'une définition molaire. Il nous semble de toute manière que le choix en faveur d'une définition ou d'une autre est pratiquement indifférent. Dans le cadre de notre modèle THC la choix a été en faveur d'une formulation de type molaire. Par contre la formulation proposée par [Schrefler98], utilisée dans le modèle THCM, s'appuie sur une formulation de type massique. C'est donc cette formulation que l'on présente dans la suite.

Si on prend donc en considération une définition massique de la concentration, on peut écrire les relations suivantes pour la vitesse de la phase π

$$\mathbf{v}^\pi = \sum_{\alpha} c^{\alpha,\pi} \mathbf{v}^\alpha \quad (3.5)$$

et on peut démontrer que :

$$\sum_{\alpha} \mathbf{J}_\pi^\alpha = 0 \quad (3.6)$$

On défini $c^{\alpha,\pi}$ comme :

$$c^{\alpha,\pi} = \frac{c^\alpha}{c^\pi} = \frac{\rho^\alpha}{\rho^\pi} \quad (3.7)$$

La relation suivante est valable :

$$\sum_{\alpha} \rho^\alpha = \rho^\pi \quad (3.8)$$

On donne aussi la définition de flux de diffusion massique J_π^α ($kgm^{-2}s^{-1}$) comme :

$$J_\pi^\alpha = -\rho^\pi \mathbf{J}_\pi^\alpha \quad (3.9)$$

Généralement on décrit la diffusion de Fick à travers la loi suivante :

$$\mathbf{J}_\pi^\alpha = -\mathbf{D}_\pi^\alpha \mathbf{grad} c^{\alpha,\pi} \quad (3.10)$$

avec $\mathbf{D}_\pi^\alpha$ (m^2s^{-1}) le coefficient de diffusion du constituant α dans la phase π . Si le matériau est isotrope on peut donc écrire le tenseur $\mathbf{D}_d^{bw}$ comme :

$$\mathbf{D}_\pi^\alpha = D_\pi^\alpha \mathbf{I} \quad (3.11)$$

L'équation 3.10 est valable pour les mélanges biphasiques, mais peut être formulée aussi pour des mélanges multi-composants. En explicitant les termes de concentration on peut réécrire la loi de Fick de la manière suivante :

$$J_\pi^\alpha = -\rho^\pi \mathbf{D}_\pi^\alpha \mathbf{grad} \left(\frac{\rho^\alpha}{\rho^\pi} \right) \quad (3.12)$$

Si on explicite l'eq.3.12 pour l'air et l'eau vapeur on obtient les relations suivantes :

$$\begin{aligned} J_g^{ga} &= -\rho^g \mathbf{D}_g^{ga} \mathbf{grad} \left(\frac{\rho^{ga}}{\rho^g} \right) \\ J_g^{gw} &= -\rho^g \mathbf{D}_g^{gw} \mathbf{grad} \left(\frac{\rho^{gw}}{\rho^g} \right) \end{aligned} \quad (3.13)$$

En appliquant les lois des gaz parfaits (on rappelle que $\rho^g = \rho^{ga} + \rho^{gw}$) :

$$\mathbf{grad} \left(\frac{\rho^{ga}}{\rho^g} \right) = \mathbf{grad} \left(\frac{\rho^g - \rho^{gw}}{\rho^g} \right) = -\mathbf{grad} \left(\frac{\rho^{gw}}{\rho^g} \right) \quad (3.14)$$

Suite à l'eq.3.6, on peut écrire :

$$\mathbf{D}_g^{ga} = \mathbf{D}_g^{gw} = \mathbf{D}_g \quad (3.15)$$

Si l'on suppose que l'équation des gaz parfaits est valable, on peut écrire :

$$\frac{\rho^\alpha}{\rho^\pi} = \frac{p^\alpha}{p^\pi} \quad (3.16)$$

et on obtient la relation suivante :

$$\begin{aligned} J_g^{ga} &= -\rho^g \mathbf{D}_g \mathbf{grad} \left(\frac{p^{ga}}{p^g} \right) \\ &= \rho^g \mathbf{D}_g \mathbf{grad} \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) = -J_g^{gw} \end{aligned} \quad (3.17)$$

3.4.3 Transport de l'eau adsorbée

On peut identifier un troisième mode de transport dans le milieu. Il s'agit du transport d'eau adsorbée à la surface des couches qui forment le squelette du C-S-H. Ce type d'eau se trouve sous forme des couches ; lorsqu'on il y a un gradient i.e. une variation du nombre de couches déposées le long une certaine direction, on peut observer le transport. Le moteur du phénomène est donc lié au gradient du nombre des couches d'eau qui est lié au gradient du niveau de saturation de l'eau adsorbée.

On admet généralement que l'eau adsorbée fait partie de l'eau liquide contenue dans le béton. Ce phénomène de transport devient d'importance dans deux conditions :

- lorsqu'on atteint un niveau de saturation très faible (inférieure à la saturation irréductible S_{ssp} , de l'ordre du 0.1%) i.e. la seule eau liquide présente dans le béton est l'eau adsorbée
- lorsqu'on est proche du point critique de l'eau i.e. la quantité d'eau adsorbée est comparable à la quantité d'eau capillaire restante

Si la saturation en liquide est supérieure à la saturation irréductible, le transport de l'eau adsorbée devient un phénomène négligeable devant les phénomènes de transport de l'eau capillaire liés aux gradients de pression.

On écrit alors la loi suivante [Gawin03] :

$$J_d^{bw} = -\rho^w \mathbf{D}_d^{bw} \mathbf{grad} S_b \quad (3.18)$$

avec $J_d^{bw} (kgm^{-2}s^{-1})$ le flux massique d'eau adsorbée, $\mathbf{D}_d^{bw} (m^2s^{-1})$ le tenseur de transport de l'eau dans le squelette et S_b le niveau de saturation de l'eau adsorbée qui peut s'exprimer en fonction du niveau de saturation en liquide S :

$$\begin{aligned} S_b &= S \text{ si } S \leq S_{ssp} \\ S_b &= S_{ssp} \text{ si } S > S_{ssp} \end{aligned} \quad (3.19)$$

Le matériau est considéré isotrope ; on peut donc considérer le tenseur $\mathbf{D}_d^{bw}$ comme :

$$\mathbf{D}_d^{bw} = D_d^{bw} \mathbf{I} \quad (3.20)$$

Certains auteurs parlent du phénomène de transport de l'eau adsorbée comme d'une diffusion. Toutefois il nous semble plus approprié d'utiliser la terminologie plus générale de "transport".

On montrera plus loin que le niveau de saturation de l'eau adsorbée est lié à la pression capillaire $S_b(p^c)$. Cette dernière étant une variable d'état, on réécrit la formule 3.18 en fonction de la pression capillaire [Gawin03] :

$$J_d^{bw} = -\rho^w \mathbf{D}_d^{bw} \frac{\partial S_b}{\partial p^c} \mathbf{grad} p^c \quad (3.21)$$

On a remarqué plus haut qu'au-delà du point critique l'interface eau liquide-vapeur disparaît et il devient donc impossible de distinguer entre l'eau en phase liquide et l'eau en phase vapeur : la pression capillaire p_c perd donc sa signification physique. [Gawin96] propose une extension de la théorie en introduisant un potentiel énergétique que l'on appelle p_c ; cette astuce permet de garder la formulation mathématique avec la pression capillaire même au delà du point critique, mais bien entendu avec une signification différente. L'eq.3.21 peut être donc utilisée.

De toute manière, dans le cadre de cette thèse, vu les températures relativement basses qui nous intéressent, le transport de l'eau adsorbée peut être considéré comme un phénomène négligeable.

3.5 Détermination du tenseur $\mathbf{K}^\pi$: première approche, écoulement dans un tube capillaire

La description de l'écoulement dans un milieu poreux tel que le béton s'avère particulièrement difficile vu la complexité de son réseau poreux. En première approximation on décrit alors l'écoulement laminaire dans un tube capillaire cylindrique rectiligne qui peut être considéré comme un réseau poreux élémentaire de percolation.

On considère l'écoulement dans notre capillaire élémentaire d'un fluide visqueux. On définit le fluide visqueux comme un fluide pour lequel il existe une relation entre le déviateur $\boldsymbol{\tau}$ de son tenseur de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ et la partie déviatorique du gradient de vitesse $\mathbf{grad} v$. Si cette relation est linéaire (et c'est le cas si le gradient que l'on considère est assez petit), elle peut être exprimée à l'aide d'une constante caractéristique que l'on appelle viscosité μ (Pas). On suppose généralement aussi une relation entre la partie isotrope de $\boldsymbol{\sigma}$ (i.e. la pression) et la variation de volume.

La viscosité est la propriété d'un fluide en vertu de laquelle se produisent des forces internes d'interaction opposées à la déformation de cisaillement du fluide pendant l'écoulement. On peut, par exemple, exprimer la composante τ_{xy} du déviateur $\boldsymbol{\tau}$ de la manière suivante :

$$\tau_{xy} = \frac{1}{2} \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) \quad (3.22)$$

avec τ_{xy} l'effort tangentiel ou la force de traction entre deux couches de fluide glissant l'une sur l'autre dans la direction e_x et dans la direction perpendiculaire e_y et μ la viscosité dynamique (ou absolue). La viscosité est donc le coefficient de proportionnalité entre le gradient de vitesse et l'effort tangentiel $\tau_{yx} = \tau_{xy}$ s'opposant au mouvement relatif du fluide. Pour un liquide la viscosité est liée aux forces d'attraction entre les molécules (qui diminuent avec la température). Pour un gaz les forces d'attraction entre molécules sont négligeables : c'est donc le phénomène d'échange de quantité de mouvement entre les molécules du gaz qui détermine la viscosité. Ceci est influencé par la température (contrairement aux liquides, la viscosité augmente avec la température), la pression, la taille des pores percolés.

Dans le cas particulier d'un écoulement dans un pore/capillaire de révolution de rayon R_0 , longueur l avec son axe le long la direction x , nous faisons l'hypothèse que la seule composante non nulle de la vitesse est $\mathbf{v}_x$ et que $\mathbf{v}_x$ ne dépend que de x et r . Dans ce cas, l'eq.3.22 peut se réécrire :

$$\tau_{xr} = \mu \frac{\partial \mathbf{v}_x}{\partial r} \quad (3.23)$$

On suppose ensuite que la vitesse $\mathbf{v}_x$ est fonction de la distance r de l'axe et que la densité $\rho(x, r)$, ainsi que la pression $p(x, r)$, sont fonctions de la seule variable x i.e. la pression est constante sur la section perpendiculaire à l'axe du pore. Le problème est de nature axisymétrique : on considère l'écoulement d'un cylindre creux de fluide de rayon interne r et rayon externe $r + dr$, contenu entre deux section x et $x + dx$. Le fluide est sujet à une force opposée à la direction de l'écoulement due à l'effet de la viscosité que l'on peut écrire :

$$-\frac{d}{dr} \left(\mu \frac{d\mathbf{v}_x}{dr} 2\pi r dx \right) dr \quad (3.24)$$

Dans un écoulement stationnaire, la force de frottement introduite dans l'eq.3.24, doit être équilibrée par la différence des pressions normales aux faces de la section du capillaire que l'on a considérée :

$$-\frac{dp}{dx} dx 2\pi r dr \quad (3.25)$$

On peut donc écrire :

$$-\frac{d}{dr} \left(\mu \frac{d\mathbf{v}_x}{dr} 2\pi r dx \right) dr = -\frac{dp}{dx} dx 2\pi r dr \quad (3.26)$$

i.e.

$$\frac{d}{dr} \left(r \frac{d\mathbf{v}_x}{dr} \right) = \frac{dp}{dx} \frac{r}{\mu} \quad (3.27)$$

Cette expression peut être intégrée :

$$r \frac{d\mathbf{v}_x}{dr} = \frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} r^2 + A \quad (3.28)$$

Une intégration ultérieure donne la vitesse $\mathbf{v}_x$:

$$\mathbf{v}_x = \frac{1}{4\mu} \frac{dp}{dx} r^2 + A \ln r + B \quad (3.29)$$

On peut donc imposer les conditions au limite pour la détermination des constantes A et B .

La vitesse au centre du capillaire ($r = 0$) doit être une quantité finie i.e. on peut imposer tout de suite $A = 0$.

En ce qui concerne la détermination de la constante B , il faut faire une distinction selon le type de fluide qui coule dans notre milieu poreux.

En général, lorsqu'on observe un écoulement dans un milieu poreux le niveau de saturation en liquide ou en gaz est compris entre 0 et 1 i.e. on peut observer l'écoulement du liquide et du gaz en même temps. On fait l'hypothèse que le liquide occupe par capillarité les pores de taille plus petit d'un certain rayon r dépendant du niveau de saturation en liquide S_w (voir fig.3.2).

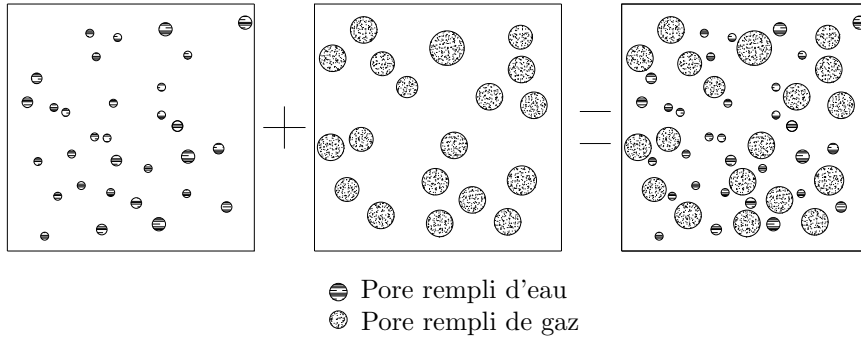


FIG. 3.2 – Distribution des capillaires rectilignes remplis de gaz et d'eau dans un milieu poreux

Tout d'abord il nous semble donc nécessaire d'introduire une description des différents types d'écoulement qu'on peut observer lorsqu'on prend en considération, séparément, un liquide et un gaz.

3.5.1 Estimation de la perméabilité à la phase liquide dans le milieu poreux

L'écoulement visqueux se produit sous l'effet d'un gradient de pression totale du fluide. On suppose généralement qu'un fluide visqueux adhère à la paroi. La vitesse de contact est donc nulle (voir fig.3.3). On peut donc imposer cette condition pour la détermination de la constante B dans l'eq.3.29. On obtient donc la forme finale de l'écoulement d'un liquide dans un capillaire de rayon R_0 :

$$\mathbf{v}_x(x, r) = -\frac{1}{4\mu_w} \frac{dp}{dx} (R_0^2 - r^2) \quad (3.30)$$

La définition de la vitesse d'écoulement dans un capillaire nous permet de donner une première définition du tenseur $\mathbf{K}^w$. On considère donc un écoulement dans un cube de matériau de section S . On suppose un réseau poreux formé par n_w capillaires élémentaires, saturés de liquide, parallèles à la direction de l'écoulement, de section élémentaire S_i et de rayon R_0^i (voir fig.3.4). Nous supposons que, dans le cube, la pression (et donc aussi la masse

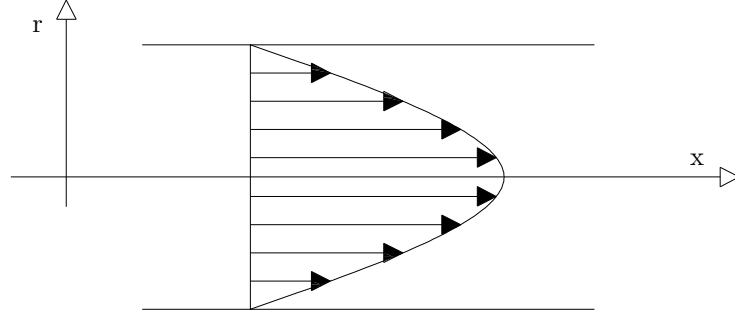


FIG. 3.3 – Écoulement visqueux

volumique) est uniforme dans chaque section perpendiculaire i.e. p et ρ ne dépendent que de x et à x donné p et ρ sont les mêmes dans chaque capillaire.

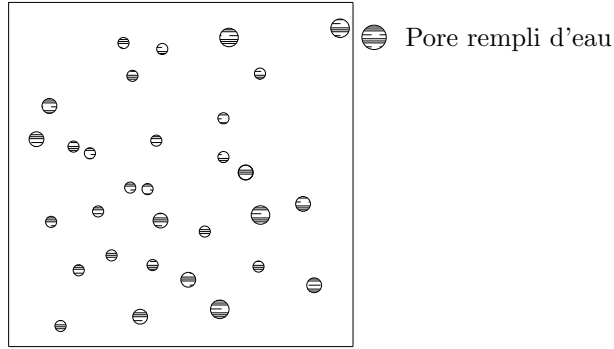


FIG. 3.4 – Distribution des capillaires rectilignes remplis d'eau dans un milieu poreux

On peut alors calculer, en fonction du champ de vitesse d'écoulement $\mathbf{v}_x^i(x, r)$ du liquide dans chaque capillaire, le débit massique par unité de surface en sommant les débits massiques élémentaires dans chaque capillaire :

$$J^w = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^{n_w} \int_{S_i} \rho^w(x) \mathbf{v}_x^i(x, r) dS = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^{n_w} \int_{S_i} \rho^w(x) \mathbf{v}_x^i(x, r) r dr d\theta = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^{n_w} \int_{S_i} 2\pi r \rho^w(x) \mathbf{v}_x^i(x, r) dr \quad (3.31)$$

En régime permanent, la conservation de la masse impose que le débit massique ne dépend pas de la position x . Si on fait l'hypothèse que la viscosité du liquide μ_w est constante sur r et sur tout les pores, on peut donc écrire :

$$J^w = -\frac{1}{S} \sum_{i=1}^{n_w} \int_0^{R_0^i} \frac{2\pi \rho^w(x) r}{4\mu_w} \frac{dp}{dx} ((R_0^i)^2 - r^2) dr = -\frac{\pi \rho^w(x) \sum_{i=1}^{n_w} (R_0^i)^4}{8\mu_w S} \frac{dp}{dx} \quad (3.32)$$

n_w est le nombre des capillaires rectilignes saturés de liquide à travers lequel on a l'écoulement du liquide.

La loi de Darcy massique nous donne la masse de liquide qui passe à travers notre section dans l'unité de temps. On peut donc écrire :

$$-\frac{\pi \rho^w \sum_{i=1}^{n_w} (R_0^i)^4}{8\mu_w S} \frac{dp}{dx} = -\rho^w \mathbf{K}^w \frac{dp}{dx} \quad (3.33)$$

avec n la porosité.

L'eq.3.33 nous permet d'écrire le tenseur $\mathbf{K}^w$ ($m^2 Pa^{-1} s^{-1}$) :

$$\mathbf{K}^w = \frac{\pi \sum_{i=1}^{n_w} (R_0^i)^4}{8S\mu_w} \quad (3.34)$$

Cette expression nous permet de donner une première approximation du tenseur $\mathbf{K}^w$. Toutefois, l'eq.3.34 contient des variables microscopiques, notamment le rayon R_0^i du pore i ; il nous faut donc développer ultérieurement l'expression 3.34.

Il nous faut réécrire l'eq.3.34 de manière à pouvoir passer à une distribution continue de la taille des pores. On rappelle que la saturation nous donne la proportion de pores occupés par le liquide. On peut établir une relation entre la saturation S et la taille caractéristique r des pores entièrement remplis lorsque la saturation est de S . On peut donc définir $S(r)$ comme la probabilité pour laquelle la taille caractéristique du pore soit inférieure ou égale à r .

On peut donc écrire l'équation 3.34 de la manière suivante :

$$\mathbf{K}^w = \frac{\pi \int_0^{r(S_w)} r^4 S'(r) dr}{8\mu_w S} \quad (3.35)$$

avec $S'(r)dr$ la probabilité pour laquelle la taille caractéristique du pore soit comprise entre r et $r+dr$. Les intégrales dans l'eq.3.35 prennent en considération les rayons des pores dans la plage $0-r(S_w)$ i.e. le pore de plus grande taille rempli de liquide selon le niveau de saturation S_w .

Si on considère le milieu complètement saturé en liquide, $S_w = 1$, on peut écrire les intégrales sur tous les pores et on peut définir la quantité suivante :

$$\mathbf{K} = \frac{\pi \int_0^\infty r^4 S'(r) dr}{8S} \quad (3.36)$$

On appelle la variable $\mathbf{K}$ (en m^2) perméabilité intrinsèque i.e. une propriété propre du matériau poreux ne dépendant que de la microstructure.

Muskat et Meres [Muskat36] proposent alors de considérer le tenseur $\mathbf{K}^\pi$ (en $m^2 Pa^{-1} s^{-1}$) comme isotrope et réécrite de la manière suivante pour chaque phase π :

$$\mathbf{K}^\pi = \frac{\mathbf{K} k_{r\pi}}{\mu_\pi} \quad (3.37)$$

En particulier $\mathbf{K}$ est la perméabilité intrinsèque et $k_{r\pi}$ est une quantité que l'on appelle perméabilité relative de la phase π considérée.

Selon la définition que l'on a donnée on peut donc exprimer la perméabilité relative de la manière suivante :

$$k_{rw}(S_w) = \mu_w \frac{\mathbf{K}^w}{\mathbf{K}} = \frac{\frac{\pi \int_0^{r(S_w)} r^4 S'(r) dr}{8S}}{\frac{\pi \int_0^\infty r^4 S'(r) dr}{8S}} = \frac{\int_0^{r(S_w)} r^4 S'(r) dr}{\int_0^\infty r^4 S'(r) dr} \quad (3.38)$$

k_{rw} est le terme qui prend en compte la phase traversant le milieu et est donc dépendante du niveau de saturation. En particulier si le milieu poreux est complètement saturé par le liquide, $k_{rw} = 1$ et, vice-versa, si le milieu n'est pas saturé par la phase liquide w , $k_{rw} = 0$.

On rappelle que l'éq.3.35 a été obtenue en faisant l'hypothèse que tous les pores sont rectilignes et parallèles ; il est clair que cette hypothèse simplifie la vision de la microstructure du milieu poreux. On peut éventuellement introduire un coefficient correctif $\alpha[0,1]$ pour prendre en compte le fait que les pores ne sont pas tous rectilignes ni connectés. On peut donc réécrire l'éq.3.35 de la manière suivante :

$$\mathbf{K}^w = \alpha \frac{\pi \int_0^{r(S_w)} r^4 S'(r) dr}{8\mu_w S} \quad (3.39)$$

On remarque aussi que si l'on considère un "vrai" milieu poreux, suite à la complexité du réseau poreux, on observe que la perméabilité relative vaut zéro même si la saturation en liquide n'est pas nulle. Pour cette raison, très souvent on utilise, au lieu des courbes proposées par Van Genuchten, les relations de Brooks et Corey ([Corey57] et [Brooks66]).

3.5.2 Estimation de la perméabilité à la phase gazeuse dans le milieu poreux

Si on prend comme fluide de percolation un gaz, la description de l'écoulement s'avère plus complexe par rapport au cas du liquide. Le gaz est sujet à plusieurs types d'écoulement. On en donne dans la suite une description.

Écoulement visqueux L'écoulement visqueux se produit sous l'effet d'un gradient de pression totale du fluide et produit un mouvement d'ensemble du gaz sans distinction de ses éventuelles différences de composants moléculaires.

Écoulement par glissement Écoulement par glissement est le terme général qui désigne l'écoulement liée au phénomène de non-adhérence du gaz au contact de la paroi des capillaires. Cet effet provient de la collision de molécules de gaz avec les parois du pore, contrairement à la viscosité qui résulte de la collision des molécules de gaz entre elles. Le phénomène de collision a comme effet que la vitesse de contact à la paroi est non-nulle : on l'appelle vitesse de glissement. Le schéma du profil des vitesses est en figure. 3.5.

Si v_s est la vitesse de glissement du fluide aux parois du capillaire, l'équation 3.29 permet de calculer le profil des vitesses dans le tube. En coordonnées cylindriques d'axe x (l'axe du tube) la vitesse du gaz sur une section droite est une fonction de sa coordonnée radiale r et est égale à sa composante axiale $\mathbf{v}_x(x, r)$ telle que :

$$\mathbf{v}_x(x, r) = -\frac{dp}{dx} \frac{1}{4\mu} (R_0^2 - r^2) + v_s \quad (3.40)$$

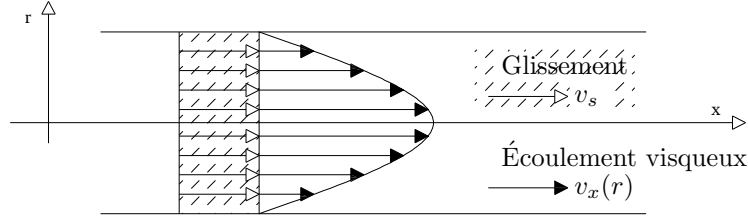


FIG. 3.5 – Profil des vitesses d'un gaz dans un capillaire sous l'effet d'un gradient de pression

Il nous faut donc donner une définition de v_s : pour ceci on retient l'approche proposée par Klinkenberg [Klinkenberg41]. On suppose qu'il existe une couche très fine en contact avec la paroi. Cette couche est plus petite que le libre parcours moyen des molécules i.e. dans la couche il n'y a pas de collisions entre molécules mais seulement avec la paroi. C'est donc dans l'épaisseur de cette couche qu'a lieu l'écoulement par glissement. Après la collision avec la paroi, la molécule doit parcourir une distance proportionnelle au libre parcours moyen avant une deuxième collision. Cette distance on peut donc s'écrire $c\bar{\lambda}$. La vitesse est donc proportionnelle à la distance de la paroi et la vitesse de glissement au libre parcours moyen de molécules.

Il est aussi évident que la vitesse de glissement est liée au rayon R_0 du capillaire.

Klinkenberg [Klinkenberg41] montre aussi que la contribution de l'écoulement par glissement (ou slip flow) est d'autant plus significative que la perméabilité du milieu et la pression sont faibles. Il montre que l'application de la théorie de Kundt et Warburg à l'écoulement dans un capillaire rectiligne permet d'exprimer l'équation (3.40) par la relation suivante :

$$\mathbf{v}_x(r) = -\frac{dp}{dx} \frac{1}{4\mu} (R_0^2 - r^2 + 2c\bar{\lambda}R_0) \quad (3.41)$$

où c est une constante proche de 1 et $\bar{\lambda}$ est le libre parcours moyen des molécules de gaz défini comme la distance moyenne entre deux collisions intermoléculaires consécutives :

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{n_m \Sigma_m \sqrt{2}} = \frac{RT}{p N_A \Sigma_m \sqrt{2}} = \frac{\alpha}{p} \quad (3.42)$$

où n_m est le nombre de molécules par unité de volume, Σ_m la section efficace vis-à-vis des collisions telle que $\Sigma_m = 4\pi r_m$ avec r_m le rayon de la molécule de gaz conformément au modèle des sphères rigides et N_A est le nombre d'Avogadro. La définition de la vitesse d'écoulement dans un capillaire nous permet de donner une première définition du tenseur $\mathbf{K}^g$. On considère donc un écoulement dans un cube de matériau de section S . On suppose un réseau poreux formé par n_g capillaires élémentaires saturés de gaz parallèles à la direction de l'écoulement de section élémentaire S_i et de rayon R_0^i (voir fig.3.6). Nous supposons que dans le cube la pression (et donc aussi la masse volumique) dans chaque section perpendiculaire est uniforme i.e. p et ρ ne dépendent que de x et à x donné p et ρ sont les mêmes dans chaque capillaire.

On peut alors calculer, en fonction du champ de vitesse d'écoulement $\mathbf{v}_x^i(x, r)$ du gaz dans chaque capillaire, le débit massique par unité de surface en sommant les débits massiques

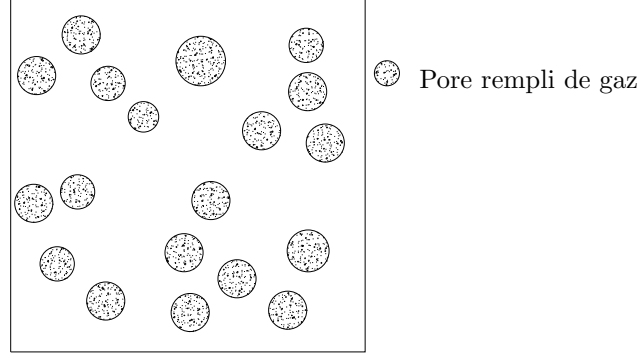


FIG. 3.6 – Distribution des capillaires rectilignes remplis de gaz dans un milieu poreux

élémentaires dans chaque capillaire :

$$J^g = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^{n_g} \int_{S_i} \rho^g(x) \mathbf{v}_x^i(x, r) dS = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^{n_g} \int_{S_i} \rho^g(x) \mathbf{v}_x^i(x, r) r dr d\theta = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^{n_g} \int_{S_i} 2\pi r \rho^g(x) \mathbf{v}_x^i(x, r) dr \quad (3.43)$$

avec S_i la surface de chaque capillaire i . Si on fait l'hypothèse que le gradient de pression est le même pour toutes les pores et que μ_g est constante, on peut donc écrire :

$$\begin{aligned} J^g &= -\frac{1}{S} \sum_{i=1}^{n_g} \int_0^{R_0^i} \frac{2\pi r \rho^g(x)}{4\mu_g} \frac{dp}{dx} [(R_0^i)^2 - r^2 + c\bar{\lambda}r] dr = \\ &= -\frac{\pi \rho^g(x)}{8\mu_g S} \frac{dp}{dx} \sum_{i=1}^{n_g} (R_0^i)^4 \left[1 + \frac{4c\bar{\lambda} \sum_{i=1}^{n_g} (R_0^i)^3}{3 \sum_{i=1}^{n_g} (R_0^i)^4} \right] = \\ &= -\frac{\pi \rho^g(x)}{8\mu_g S} \frac{dp}{dx} \sum_{i=1}^{n_g} (R_0^i)^4 \left[1 + \frac{4c\alpha \sum_{i=1}^{n_g} (R_0^i)^3}{3p \sum_{i=1}^{n_g} (R_0^i)^4} \right] \end{aligned} \quad (3.44)$$

Si on introduit la loi de Darcy massique on peut écrire :

$$-\frac{\pi \rho^g}{8\mu_g S} \frac{dp}{dx} \sum_{i=1}^{n_g} (R_0^i)^4 \left[1 + \frac{4c\alpha \sum_{i=1}^{n_g} (R_0^i)^3}{3p \sum_{i=1}^{n_g} (R_0^i)^4} \right] = -\rho^g \mathbf{K}^g \frac{dp}{dx} \quad (3.45)$$

avec n la porosité et $S_g = 1 - S_w$ la saturation en gaz. L'équation précédente nous permet d'écrire le tenseur $\mathbf{K}^g$:

$$\mathbf{K}^g = \frac{\pi}{8\mu_g S} \sum_{i=1}^{n_g} (R_0^i)^4 \left[1 + \frac{4c\alpha \sum_{i=1}^{n_g} (R_0^i)^3}{3p \sum_{i=1}^{n_g} (R_0^i)^4} \right] \quad (3.46)$$

Il nous faut réécrire l'eq.3.46 de manière à pouvoir passer à une distribution continue de la taille des pores ; on peut donc exprimer l'équation de la manière suivante :

$$\mathbf{K}^g = \frac{\pi}{8S\mu_g} \int_{r(S_w)}^{\infty} r^4 S'(r) dr \left[1 + \frac{4c\alpha \int_{r(S_w)}^{\infty} r^3 S'(r) dr}{3p \int_{r(S_w)}^{\infty} r^4 S'(r) dr} \right] \quad (3.47)$$

avec $S'(r)dr$ la probabilité pour laquelle la taille caractéristique du pore soit comprise entre r et $r + dr$.

Les intégrales dans l'eq.3.47 prennent en considération les rayons des pores dans la plage $r(S_w)-\infty$. $r(S_w)$ est le pore de plus grande taille remplie de liquide selon le niveau de saturation S_w i.e. le pore de plus petite taille rempli de gaz.

Si on considère le milieu complètement saturé en gaz, $S_g = 1$, on peut écrire les intégrales sur tous les pores et on peut définir la quantité suivante :

$$K_{app} = \frac{\pi}{8S} \int_0^\infty r^4 S'(r) dr \left[1 + \frac{4c\alpha \int_0^\infty r^3 S'(r) dr}{3p \int_0^\infty r^4 S'(r) dr} \right] \quad (3.48)$$

Cette variable n'est pas seulement fonction de la microstructure du milieu poreux, mais prend aussi en considération l'effet de glissement : on l'appelle alors perméabilité apparente. Cette expression peut être réécrite de la manière suivante :

$$K_{app} = \mathbf{K} \left(1 + \frac{b}{p} \right) \quad (3.49)$$

b est donc un coefficient qui prend en considération le rôle de la microstructure, défini comme :

$$b = \frac{4c\alpha \int_0^\infty r^3 S'(r) dr}{3 \int_0^\infty r^4 S'(r) dr} \quad (3.50)$$

Selon la définition du tenseur $\mathbf{K}^g$ d'après Muskat et Meres [Muskat36] on peut écrire :

$$\mathbf{K}^g = \frac{\mathbf{K} \left(1 + \frac{b}{p} \right) k_{rg}}{\mu_g} \quad (3.51)$$

On peut donc écrire la perméabilité relative k_{rg} dépendante de S_g (et supposée indépendante de p , à vérifier expérimentalement) de la manière suivante, selon la définition que l'on a donnée :

$$k_{rg}(S_g) = \mu_g \frac{\mathbf{K}^g}{\mathbf{K} \left(1 + \frac{b}{p} \right)} \quad (3.52)$$

A travers la perméabilité relative il est donc possible d'évaluer l'importance d'un type d'écoulement sur l'autre en fonction du niveau de saturation ainsi que des caractéristiques du fluide de percolation. Ce qui ne change pas dans les deux cas c'est la microstructure i.e. le réseau poreux à travers lequel a lieu l'écoulement. La définition des perméabilités relatives est faite à l'aide des formulations d'origine expérimentale (es. Van Genuchten [Genuchten80], voir fig.3.7).

Tout d'abord, il nous faut donc calculer la perméabilité intrinsèque $\mathbf{K}$. On présente donc dans la suite l'approche théorique qui nous donnera les bases pour pouvoir déterminer la perméabilité intrinsèque expérimentalement.

3.6 La perméabilité des bétons

Le chapitre précédant nous a permis d'identifier tout d'abord le tenseur $\mathbf{K}^\pi$ et, ensuite, ses composantes i.e. la perméabilité intrinsèque et la perméabilité relative. Nous nous intéressons donc au calcul et à la détermination expérimentale de la perméabilité intrinsèque, qui ne dépend que de la microstructure du milieu poreux.

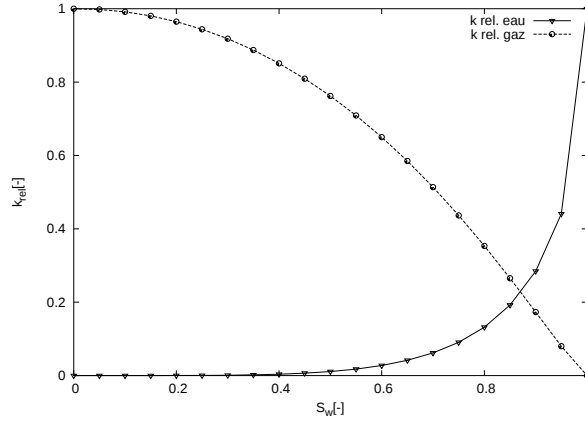


FIG. 3.7 – Perméabilité relatives vs. saturation en liquide ([Genuchten80])

3.6.1 Fluide incompressible

La relation de Darcy peut être appliquée directement si on considère la percolation d'un fluide purement visqueux (typiquement l'eau) à travers le milieu poreux saturé par ce fluide. On introduit donc la définition massique de la loi de Darcy :

$$J^w = -\rho^w \mathbf{K}^w \mathbf{grad} p^w \quad (3.53)$$

En particulier, la relation peut être réécrite si l'on tient compte du fait que le milieu est saturé en liquide i.e. $S_w = 1$ et donc $k_{rw} = 1$:

$$J^w = -\frac{\mathbf{K}}{\mu_w} \mathbf{grad} p^w \quad (3.54)$$

Lorsqu'on fait un essai de perméabilité, il faut tout d'abord établir un régime permanent. Lorsque le régime permanent est établi J^w ne dépend plus du temps. La conservation de la masse implique qu'il ne dépend pas non plus de x . Dans l'éq. 3.54 le liquide est considéré comme incompressible ; $\mathbf{grad} p$ est donc indépendant de x . On peut donc mesurer la différence de pression à l'entrée et à la sortie de l'échantillon et réécrire la loi de Darcy de la manière suivante :

$$J^w = -\rho^w \frac{\mathbf{K}}{\mu_w} \frac{\Delta p}{L} \quad (3.55)$$

avec Δp la différence de pression entre les deux cotés de l'éprouvette et L la longueur de matériau traversé par le fluide. Enfin, la quantité que l'on mesure est le débit massique Q (en kg s^{-1}) :

$$Q = J^w S \quad (3.56)$$

avec S la section du matériau poreux traversé.

La relation de Darcy peut être alors normalement écrite comme :

$$Q = -\rho^w \frac{\mathbf{K}}{\mu_w} S \frac{\Delta p}{L} \quad (3.57)$$

On peut donc obtenir la relation qui nous permet de calculer la perméabilité intrinsèque :

$$\mathbf{K} = -\frac{Q \mu_w L}{\rho^w S \Delta p} \quad (3.58)$$

3.6.2 Fluide compressible

Dans le cas d'un fluide compressible (gaz) la loi de Darcy doit être appliquée de manière telle à prendre en compte l'effet de glissement à la paroi du capillaire. Il nous faut donc utiliser la formulation de la loi de Darcy que l'on a présentée à la section 3.5.2 qui considère le glissement à l'aide d'un terme additif.

Tout d'abord, on suppose le milieu poreux complètement saturé en gaz i.e. le fait d'imposer $S_g = 1$ nous permet de rechercher directement la perméabilité intrinsèque étant la contribution de la perméabilité relative nulle ($k_{rg} = 1$).

Dans le cas de la percolation d'un gaz à travers un échantillon de matériau poreux, la première condition est d'utiliser un gaz inerte vis à vis de la structure poreuse. L'air humide pose donc des problèmes ainsi que le dioxyde de carbone CO_2 , en raison de son interaction avec les composés de la pâte de ciment hydratée (carbonatation notamment).

Comme un régime permanent s'établit, la vitesse varie à l'intérieur de l'échantillon en tout point. Par contre le débit massique reste constant en tout point.

Si on suppose le matériau homogène selon la direction d'écoulement (x) et que l'on arrive au régime permanent, on peut donc dire que la pression du gaz ne dépend que de la variable spatiale x.

Si on prend un disque en béton de longueur L, section S, avec une pression d'entrée p_1 , une pression de sortie p_2 (3.8) on peut donc écrire les équations qui gèrent l'écoulement.

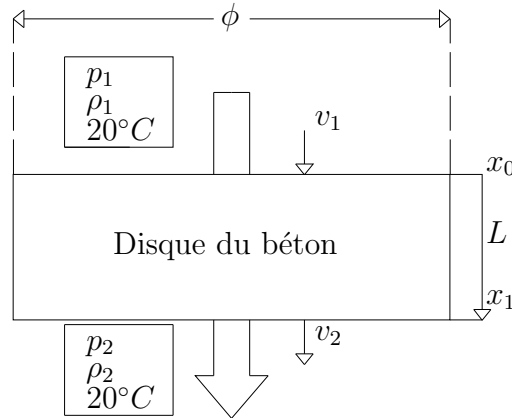


FIG. 3.8 – Schéma conditions au limite

Les fluides les plus utilisés sont l'azote (N_2) et l'oxygène (O_2), dont les caractéristiques sont rappelées en tableau tab.3.1. Ces caractéristiques peuvent être approchées selon les formules précédemment présentées, mais il s'agit de valeurs d'origine expérimentale [ASHRAE]. Dans le cadre de cette thèse, l'azote est utilisé comme fluide de percolation pour toutes les mesures de perméabilité au gaz.

3.6.2.1 Détermination de la perméabilité apparente

La conservation de la masse impose que le débit massique par unité de surface J^g soit constant i.e. :

$$J^g(x) = \text{const. } \forall x \quad (3.59)$$

	N_2	O_2
M (g/mol)	28.01	32
Température critique (K)	126.2	154.8
Rayon r_m (Å)	1.67	1.5
$\bar{\lambda}$ (nm) si p=1atm	65	70
μ (Pa · s) si p=1atm et T=20°C	$1.76 \cdot 10^{-5}$	$2.02 \cdot 10^{-5}$

TAB. 3.1 – Caractéristiques physiques des gaz employés pour des mesures de perméabilité

Lorsqu'on fait un essai de perméabilité on peut imposer une différence de pression aux deux cotés de l'échantillon et mesurer le débit massique Q , que l'on peut écrire en fonction de la quantité J^g que l'on a définie plus haut.

On commence tout d'abord à étudier l'écoulement d'un gaz en appliquant directement la loi de Darcy, selon la formulation que l'on a présentée au paragraphe 3.5.2. On peut donc écrire :

$$J^g = -\rho_g(x) \frac{\mathbf{K} \left(1 + \frac{b}{p(x)}\right)}{\mu_g} \frac{dp}{dx} \quad \forall x \quad (3.60)$$

Dans le cadre des pressions utilisées dans les essais, le gaz peut être considéré comme parfait ; on obtient donc :

$$\rho_g(x) = \frac{M_g}{RT} p(x) \quad (3.61)$$

avec M_g la masse molaire du gaz utilisé lors de la percolation, R la constante des gaz parfaits et T la température.

L'équation 3.60 peut être réécrit :

$$J^g = -\frac{M_g}{RT} \frac{\mathbf{K} \left(1 + \frac{b}{p(x)}\right)}{\mu_g} p(x) \frac{dp}{dx} \quad (3.62)$$

et donc :

$$J^g dx = -\frac{M_g}{RT} \frac{\mathbf{K} \left(1 + \frac{b}{p(x)}\right)}{\mu_g} p(x) dp \quad (3.63)$$

Dans cette équation il nous faut donc identifier la perméabilité intrinsèque $\mathbf{K}$ et le paramètre b que l'on a défini plus haut. On peut donc intégrer l'expression selon les conditions aux limites de la figure 3.8.

Si on suppose l'écoulement isotherme et on considère la viscosité μ_g indépendante de la pression, on peut donc écrire :

$$J^g L = -\frac{M_g}{RT} \frac{\mathbf{K}}{\mu_g} \int_{p_1}^{p_2} p \left(1 + \frac{b}{p}\right) dp \quad (3.64)$$

Avec p_1 et p_2 respectivement la pression d'injection et la pression de sortie.

Si on introduit le débit volumique, $Q = J^g S$ (voir fig.3.8), on peut écrire l'expression finale :

$$Q = \frac{M_g S}{RT} \frac{\mathbf{K}}{2L\mu_g} (p_1^2 - p_2^2) \left(1 + \frac{b}{\bar{p}}\right) \quad (3.65)$$

i.e. :

$$\frac{RT}{M_g S} \frac{2Q\mu_g L}{p_1^2 - p_2^2} = \mathbf{K} \left(1 + \frac{b}{\bar{p}} \right) \quad (3.66)$$

avec $\bar{p}$ défini de la manière suivante :

$$\bar{p} = \frac{p_1 + p_2}{2} \quad (3.67)$$

A partir de l'eq.3.66 il est possible de déterminer expérimentalement $\mathbf{K}$ et b à condition de faire des essais à différents valeurs de $\bar{p}$ (i.e. à différentes pressions d'injection p_1). Pour cela il suffit de déterminer pour différentes valeurs de $\bar{p}$ le terme :

$$\frac{RT}{M_g S} \frac{2Q\mu_g L}{p_1^2 - p_2^2} \quad (3.68)$$

et de le tracer sur un graphique en fonction de $\frac{1}{\bar{p}}$ (voir fig.3.9 par exemple).

On vérifie bien expérimentalement que ces points, pour de faibles valeurs de pression d'injection, s'alignent sur une droite. En extrapolant cette droite pour la valeur $\frac{1}{\bar{p}} = 0$, on trouve la valeur de la perméabilité intrinsèque $\mathbf{K}$.

Il faut remarquer que $\bar{p} \rightarrow \infty$ correspond à faire tendre vers 0 le libre parcours moyen, $\bar{\lambda}$; l'effet de glissement à la paroi tend donc à disparaître i.e. le gaz tend vers une phase condensée (liquide). De cette manière on se ramène donc au cas de l'écoulement purement visqueux d'un liquide.

En traçant la droite de la manière que l'on a décrite, il est possible, à partir de la pente, de calculer la valeur de la variable b que l'on cherche. On constate expérimentalement sur différents matériaux que le coefficient b est fonction de la perméabilité intrinsèque et du gaz infiltré et augmente avec la perméabilité du milieu.

Si le rayon moyen des pores du milieu poreux augmente, la part des écoulements par glissement décroît. Le paramètre b est significative de la finesse du réseau poreux pendant l'écoulement du gaz. Il est intrinsèque au matériau, pour un état de saturation donné. Toutes les valeurs dépendent en fait du degré de saturation du matériau lors des essais, car en changeant la saturation, on change le réseaux poreux disponible pour l'écoulement du gaz.

Remarque Beaucoup d'auteurs considèrent, lorsqu'ils interprètent des essais de perméabilité au gaz, que la relation à utiliser est l'eq.3.63 sans le terme qui prend en compte l'effet de glissement $(1 + \frac{b}{\bar{p}})$ et avec le terme de perméabilité indépendant de la pression. Par intégration de cette équation ils aboutissent à une équation du type :

$$\mathbf{K} = \frac{RT}{M_g S} \frac{2Q\mu_g L}{p_1^2 - p_2^2} \quad (3.69)$$

qui devrait être indépendante de $\bar{p}$.

Les essais indiquent clairement que cette hypothèse est fautive (les valeurs mesurées sont proportionnelles à $\frac{1}{\bar{p}}$); ils commettent l'erreur de ne pas revenir sur l'hypothèse initiale et proposent un discours assez confus dans lequel apparaît une dépendance en fonction de $\frac{1}{\bar{p}}$ qui remet en question leur intégration dans l'expression 3.63. Ils omettent généralement de corriger cette erreur. Cependant tout en s'appuyant sur un raisonnement faux à la base ils fournissent un résultat similaire à celui donné ici et donc utilisable dans la pratique.

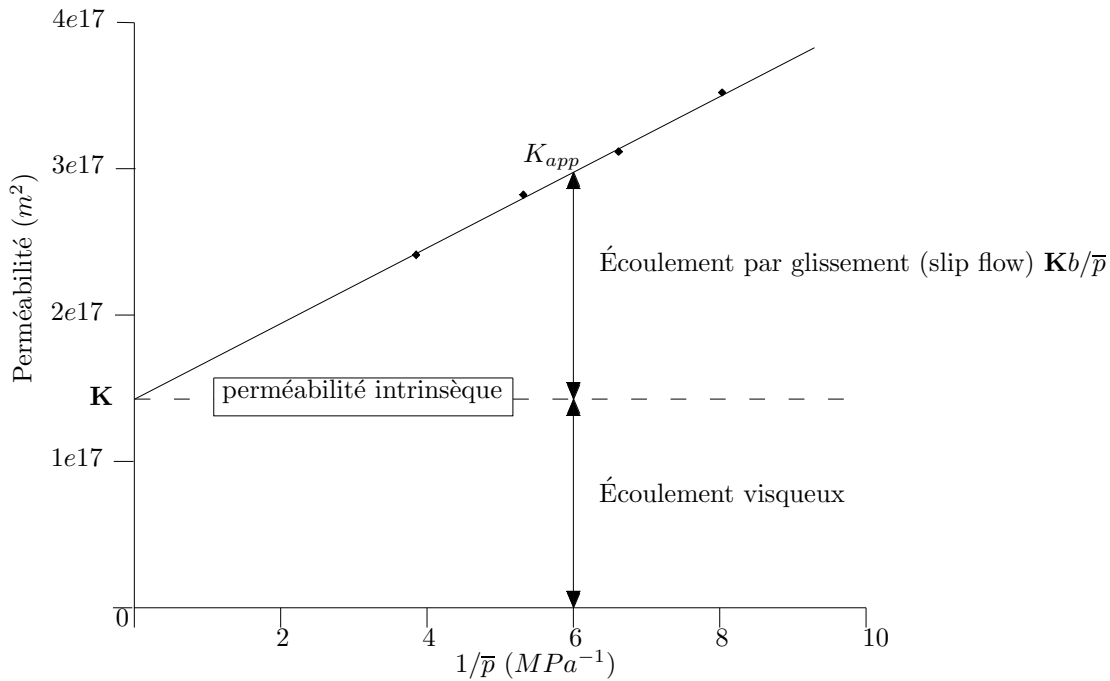


FIG. 3.9 – Exemple et interprétation d'un graphe obtenu à partir des mesures expérimentales de perméabilité selon l'approche de Klinkenberg

3.6.3 Écarts entre la perméabilité à l'eau et la perméabilité au gaz des bétons

Dans les conditions d'application de la loi de Darcy, la perméabilité intrinsèque est théoriquement indépendante de la nature du fluide (voir la section précédente, eq.3.58 et eq.3.66). C'est effectivement ce que l'a constaté sur certains matériaux insensibles à la présence eau, par exemple Klinkenberg [Klinkenberg41]. Par contre, lorsqu'on fait des mesures expérimentales de perméabilité sur des bétons, on peut obtenir des mesures de perméabilité intrinsèque qui divergent fortement lorsque l'essai est effectué avec du gaz ou avec du liquide. Par exemple, une mesure de perméabilité intrinsèque sur des bétons couvrants (de résistance caractéristique en compression à 20 jours de 30MPa) peut donner des résultats de l'ordre de $10^{-16} - 10^{-17} m^2$ en faisant la mesure avec un gaz tel que l'azote ou l'oxygène, et de l'ordre de $10^{-18} - 10^{-19} m^2$ en faisant les mesures avec l'eau.

On présente dans la suite quelles sont les hypothèses les plus communes qui peuvent expliquer une telle différence de résultats entre les mesures avec l'eau et avec le gaz.

3.6.3.1 Sous-évaluation de la perméabilité à l'eau

Lors de mesures de perméabilité à l'eau, deux raisons peuvent conduire à une sous-évaluation de la perméabilité du béton testé :

- La réactivité du fluide vis à vis du milieu poreux
- Les difficultés de mesure de débits très faibles, et/ou l'application de gradients de pression importants

En pratique la perméabilité à l'eau présente l'avantage d'être plus représentative du matériau en service. Cependant, le principal inconvénient de la perméabilité à l'eau réside dans le fait que l'eau n'est pas totalement inerte vis à vis de la pâte de ciment [Alarcon03]. Les composés

hydratés de la pâte de ciment forment un milieu basique prononcé. La plus grande partie des milieux fluides présentent ainsi un comportement acide vis à vis du béton. Les milieux acides agressifs pour le béton débutent par les eaux pures, s'étendent aux eaux douces peu ou beaucoup chargées en dioxyde de carbone, puis aux pluies acides, pour s'achever aux acides minéraux et organiques [Duval92]. Les interactions entre l'eau et la matrice cimentaire se traduisent entre autres par un phénomène de dissolution de la portlandite et par un phénomène de précipitation de carbonate de calcium, très peu soluble, qui accroît momentanément la compacité du béton en diminuant la section des pores [Duval92],[Edvarsen99].

Avec le terme "autogenous healing" on décrit l'achèvement de l'hydratation de certains composés anhydres (clinker) qui a lieu lorsqu'on a un écoulement d'eau et qui est souvent à l'origine de la diminution rapide et importante du débit d'eau traversant un échantillon de béton durant les premières heures des essais de perméabilité. Ce phénomène est particulièrement présent dans des échantillons fissurés [Edvarsen99].

La réduction du flux est aussi induite par des phénomènes mineurs tel que [Hearn99] :

- gonflement des hydrates (C-S-H)
- obturation des pores par des particules en suspension ...

Ces types de phénomènes produisent un véritable changement de la géométrie de la micro-structure du milieu poreux et donc, forcément, ont une conséquence sur la mesure de la perméabilité intrinsèque.

La réactivité du fluide conduit alors à une sous-évaluation de la perméabilité du béton. Pour limiter cette influence il convient de considérer la perméabilité au tout début de l'essai ; cependant, le fait que la saturation de l'échantillon soit alors très souvent incomplète, constitue un autre facteur de sous-évaluation de la perméabilité [Hearn99]. Edvarsen [Edvarsen99] soutient que pour des échantillons fissurés, la diminution du débit d'eau dans le temps sous un gradient de pression constant est surtout sensible au début des essais, dans les 200 premières heures. D'autres études considèrent la perméabilité du béton relative uniquement à l'eau liquide pour une percolation à long terme. La perméabilité est alors déterminée pour des mesures de débit plus stables, entre 14 et 20 jours [Aldea99-1],[Aldea99-2]. Il existe divers dispositifs expérimentaux permettant la mesure de la perméabilité à l'eau d'échantillons de bétons ordinaires relativement perméables ou des bétons fissurés et endommagés (ex. [Aldea99-1]). Par contre pour les bétons à faible perméabilité, notamment les BHP, il se révèle particulièrement difficile de mesurer avec précision les débits d'eau très faibles qui traversent l'échantillon.

3.6.3.2 Surévaluation de la perméabilité au gaz

On trouve encore parfois dans la littérature l'erreur qui consiste à confondre la perméabilité intrinsèque K et la perméabilité que l'on a appelée apparente $K\left(1 + \frac{b}{p}\right)$ qui prend en compte l'effet de glissement du gaz sur la paroi. Bamforth [Bamforth87] montre que les écoulements par glissement qui s'opèrent dans un béton pour des pressions moyennes d'injection inférieures à 5MPa peuvent alors conduire à des écarts importants.

Mais l'une des raisons les plus importants qui expliquent la différence de mesure de perméabilité intrinsèque au gaz et au liquide, réside dans le fait que un préconditionnement des éprouvettes est nécessaire avant la mesure de la perméabilité. Il est donc nécessaire de faire subir aux échantillons un séchage préalable. D'ailleurs le séchage peut faire varier la

perméabilité au gaz des bétons de plusieurs ordres de grandeur : il est donc très important de savoir quel séchage il convient d'appliquer pour évacuer uniquement l'eau libre des échantillons. La difficulté réside dans le fait qu'il faut établir quel est le séchage qui modifie ou dégrade au minimum la structure poreuse du matériau.

En résumé, la microstructure poreuse du matériau béton est différente lors d'une mesure de perméabilité à l'eau et lors d'une mesure de perméabilité au gaz. C'est sans doute là l'explication principale de la différence de ces mesures. Il est donc prudent dans la modélisation des phénomènes de transport (soit dans le modèle THC, soit dans le modèle THCM), de considérer que la perméabilité au gaz et au liquide soit deux grandeurs indépendantes ($\mathbf{K}^g$ et $\mathbf{K}^l$). Il est nécessaire de les déterminer toutes les deux de manière expérimentale.

3.7 Équations d'état des fluides et loi de vaporisation

L'équation d'état générique pour les phases fluides est une équation qui lie les variables température et la pression : l'enthalpie est la fonction énergétique qui admet ces deux variables comme variables naturelles.

La détermination des enthalpies est de toute manière difficile, il nous faut donc introduire un certain nombre d'hypothèses simplificatrices. Pour le gaz on admet généralement que son comportement est proche à celui d'un gaz parfait. Dans le cas d'un liquide on considère généralement valable l'hypothèse d'incompressibilité.

Les enthalpies de l'eau vapeur et de l'eau liquide sont alors déterminées à une fonction de la température θ près. Pour la détermination de la loi d'état pour le liquide on prend donc en considération le changement de phase liquide $\rightarrow$ vapeur (vaporisation) ou vapeur $\rightarrow$ liquide (condensation) en admettant que ce changement de phase se produit sans dissipation d'énergie. On peut alors établir l'égalité des enthalpies libres de l'eau liquide et de l'eau vapeur. Notons g^w l'enthalpie libre de l'eau liquide et g^{gw} l'enthalpie libre de l'eau vapeur. Selon la définition d'enthalpie, On sait que la dérivée partielle de g^π par rapport à la pression p^π est égal à l'inverse de la masse volumique de la phase π :

$$\frac{\partial}{\partial p^\pi} g^\pi(p^\pi, \theta) = \frac{1}{\rho^\pi(\theta)} \quad (3.70)$$

Selon les hypothèses que l'on a fait plus haut, en intégrant, on obtient :

- hypothèse du liquide incompressible

$$g^w(p^w, \theta) = \frac{p^w}{\rho^w} + C_1(\theta) \quad (3.71)$$

- hypothèse de gaz parfait

$$g^{gw}(p^{gw}, \theta) = \frac{R\theta}{M_w} \text{Log}(p^{gw}) + C_2(\theta) \quad (3.72)$$

avec $C_1(\theta)$ et $C_2(\theta)$ deux fonctions de la température.

Sous l'hypothèse d'absence de dissipation pendant le changement de phase, on peut écrire l'égalité des enthalpies libres et on obtient donc la relation suivante :

$$\frac{p^w}{\rho^w} - \frac{R\theta}{M_w} \text{Log}(p^{gw}) + C_1(\theta) - C_2(\theta) = 0 \quad (3.73)$$

Il nous faut donc déterminer les deux fonctions $C_1(\theta)$ et $C_2(\theta)$.

La relation 3.73 est valable dans toutes les situations de coexistence d'eau liquide et vapeur. On peut alors imaginer une situation particulièrement simple i.e. un récipient fermé partiellement rempli d'eau. L'eau vapeur sature complètement le volume non occupé par l'eau liquide et la surface de séparation eau liquide-vapeur est plane. Eau liquide et eau vapeur sont donc à la même pression, i.e. la pression de vapeur saturante du corps pur. On peut alors déduire la relation générale entre la pression de liquide et la pression de vapeur :

$$p^w = p_{sat}(\theta) + \frac{\rho_w R \theta}{M_w} \text{Log} \left(\frac{p^{gw}}{p_{sat}(\theta)} \right) \quad (3.74)$$

On appelle cette équation comme la relation de Clapeyron généralisée, valable aussi pour les phénomènes capillaires autant que on considère la vapeur comme un gaz parfait.

La relation 3.74 est proche à la relation de Kelvin, que peut être obtenu à partir de l'eq.3.73 en imposant des différentes conditions aux limites. L'état de référence de la loi de Kelvin est celui où la pression du gaz est à la pression atmosphérique : si l'on note p_{sat}^a la pression de vapeur saturante en présence d'air sous la pression de gaz égale à la pression atmosphérique, on obtient la bien connu loi de Kelvin :

$$p^w = p_{atm} + \frac{\rho_w R \theta}{M_w} \text{Log} \left(\frac{p^{gw}}{p_{sat}^a(\theta)} \right) \quad (3.75)$$

On peut donc obtenir facilement le lien entre les deux pressions de vapeur saturante p_{sat} et p_{sat}^a (voir fig.3.10) en remplaçant dans la relation de Clapeyron généralisée p^w par p_{atm} et p^{gw} par p_{sat}^a :

$$p_{sat}^a(\theta) = p_{sat}(\theta) \times \exp \left[\frac{M_w}{\rho_w R \theta} (p_{atm} - p_{sat}(\theta)) \right] \quad (3.76)$$

La relation de Kelvin est très souvent écrite en fonction de la pression capillaire p^c ; on peut donc obtenir :

$$p^c = -\frac{\rho_w R \theta}{M_w} \text{Log} \left(\frac{p^{gw}}{p_{sat}^a(\theta)} \right) \quad (3.77)$$

Sous cette forme, la relation de Kelvin n'est valable que si la pression de gaz reste très voisine de pression atmosphérique (on a en fait écrit $p^c = p^w - 1 \text{Atm}$). Ceci n'est pas le cas lorsque on parle d'un béton à haute température. De toute manière, selon [Ferraille00] l'équation de Kelvin est valable jusqu'à la température critique. D'autres auteurs dans la littérature valident cette hypothèse [Gawin96] (on peut observer en fig.3.10 que la différence entre p_{sat} et p_{sat}^a est presque négligeable jusqu'à environ 550K). Il faut aussi remarquer que les équation de Clapeyron et de Kelvin ont été calculées sous l'hypothèse d'eau en tant que corps pur ; il est évident que l'eau contenue dans le béton n'est pas pure vu la présence des plusieurs espèces ioniques en solution.

La description de la vaporisation de l'eau a été faite avec l'hypothèse de gaz parfait. En particulier, l'air humide présent dans les pores du milieu, est généralement considéré comme un mélange parfait de deux gaz idéaux i.e. l'air sec et l'eau vapeur. On considère donc comme valable la loi des gaz parfaits, qui lie la pression partielle $p_{g\pi}$, des espèces π , la concentration massique, $\rho^{g\pi}$, des espèces π et la température absolue θ .

On écrit donc l'équation d'état pour un gaz parfait appliqué à l'air sec (ga), vapeur (gw) et l'air humide (g) :

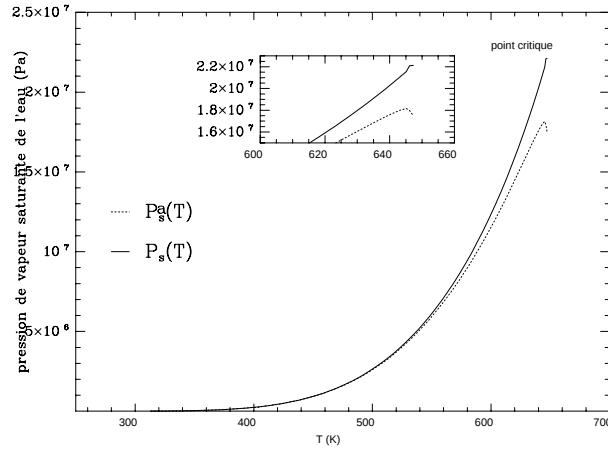


FIG. 3.10 – Comparaison entre la pression de vapeur saturante de l'eau en tant que corps pur p_{sat} et p_{sat}^a

$$\begin{aligned} p^{ga} &= \rho^{ga} \frac{\theta R}{M_{ga}} \\ p^{gw} &= \rho^{gw} \frac{\theta R}{M_{gw}} \end{aligned} \quad (3.78)$$

$$\begin{aligned} \rho^g &= \rho^{ga} + \rho^{gw} \\ p^g &= p^{ga} + p^{gw} \\ M_g &= \left(\frac{\rho^{gw}}{\rho^g} \frac{1}{M_{gw}} + \frac{\rho^{ga}}{\rho^g} \frac{1}{M_{ga}} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (3.79)$$

avec M_π la masse molaire du constituant π et R la constante universelle des gaz ($8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$). La troisième des eq.3.79 représente la loi des mélanges parfaits ou loi de Dalton. On verra plus loin que l'approximation d'un gaz à un gaz parfait n'est pas toujours légitime dans le cas où on atteint des hautes températures. Comme on a déjà dit, les hypothèses que l'on a faites sont sans doute valables pour des conditions proches des conditions normales ($T = 20^\circ\text{C}$ et $p^g = 1 \text{ atm}$) ; dans le cadre d'un béton à haute température la situation change. Quand la température est proche de la température critique, on constate une incrémentation de la teneur en eau suite à l'augmentation de volume d'eau. En plus, au-delà d'environ 160°C le comportement de l'eau vapeur commence à s'éloigner du comportement d'un gaz parfait (voir fig.3.11, 3.12) ; en particulier, au-delà d'environ 300°C les différences entre le vrai comportement de la vapeur et le comportement d'un gaz parfait sont significatives (voir fig.3.13). L'utilisation de la loi des gaz parfaits devient donc discutable. Il faudrait donc prendre en considération un coefficient correctif pour le volume molaire $\bar{v}^{gw}$ et la densité ρ^{gw} du vapeur :

$$\begin{aligned} v^{gw} &= v^{gw}(\theta, p^{gw}) = \left[\frac{R\theta}{p^{gw}} + \Delta v^{gw} \right] \text{ pour } \theta_{ref} < \theta < \theta_{crit} \\ \rho^{gw} &= \rho^{gw}(\theta, p^{gw}) = \left[p^{gw} \frac{M_w}{R\theta} + \Delta \rho^{gw} \right] \text{ pour } \theta_{ref} < \theta < \theta_{crit} \end{aligned} \quad (3.80)$$

avec θ_{ref} la température de référence (environ $160^\circ C$) Δv^{gw} et $\Delta \rho^{gw}$ sont les termes correctifs fonctions de la température (Figure 3.11).

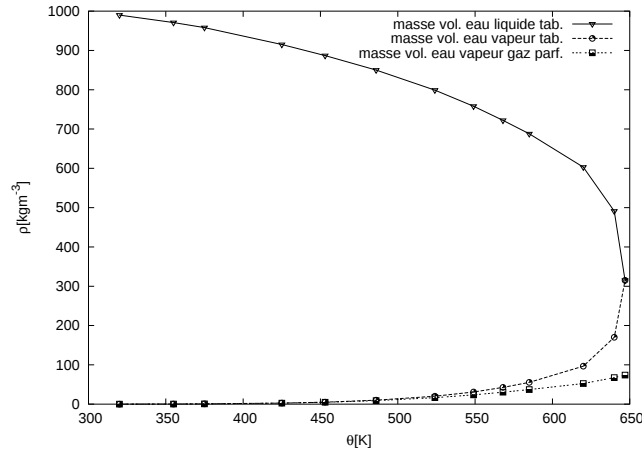


FIG. 3.11 – Volume molaire pour l'eau liquide et l'eau vapeur (données expérimentales [Haywood90]) vs. température

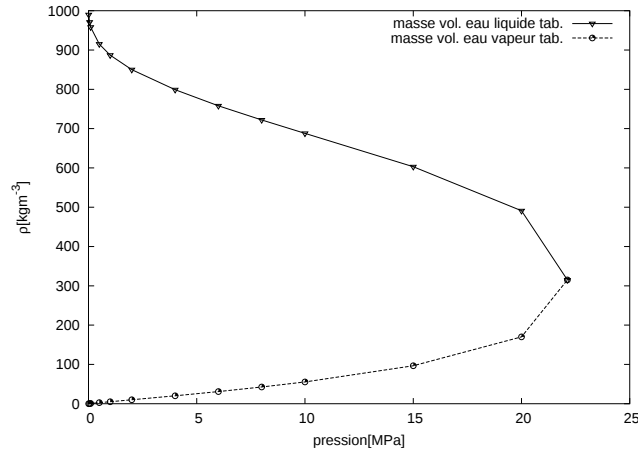


FIG. 3.12 – Volume molaire pour l'eau liquide et l'eau vapeur (données expérimentales [Haywood90]) vs. pression

Toutefois, l'approximation du comportement des gaz comme des gaz parfaits est généralement acceptée dans la littérature ; en particulier dans la plage de températures qui nous intéressent l'approximation est acceptable et sera donc gardée dans le cadre des modèles développés. De toute manière les équations que l'on a présentées sont valables jusqu'à la température critique ; au-delà une extension de la théorie s'avère nécessaire.

Interprétation énergétique de la pression capillaire Au-delà de la température critique, une distinction entre l'eau liquide et l'eau vapeur devient impossible. On ne peut plus avoir un changement de phase et la pression capillaire perd sa signification. Dans ces conditions, le gaz est présent dans les pores comme eau adsorbée ou en forme de gaz. Dans ce dernier cas, on considère toujours valable l'hypothèse des gaz parfaits : comme les données

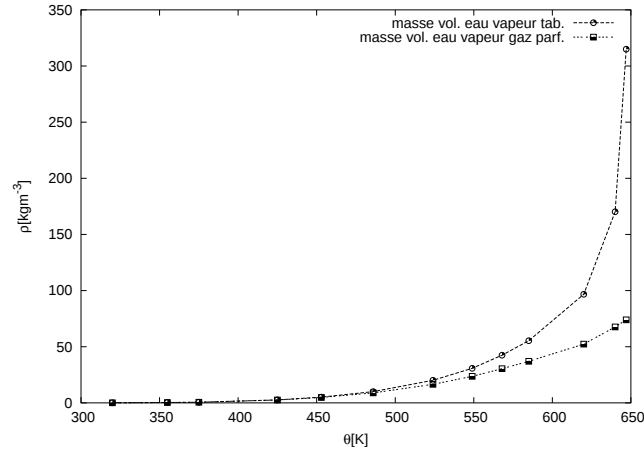


FIG. 3.13 – Volume molaire pour l'eau vapeur (données expérimentales [Haywood90]) et l'eau vapeur comme gaz parfait vs. température

sur le comportement du gaz sont défailantes, on préfère considérer l'hypothèse comme valable. On considère aussi valable l'équilibre entre l'eau adsorbée et la phase gazeuse de l'eau à travers l'expression suivante [Baggio97], [Baggio93] :

$$\Psi = \frac{R\theta}{M_w} \ln \left(\frac{p^{gw}}{p^{gws}} \right) \quad (3.81)$$

avec $\Psi = -\Delta H_{ws} / M_w$ le potentiel de l'eau, ΔH_{ws} l'enthalpie d'adsorption de l'eau, p^{gw} la pression de vapeur et p^{gws} la pression de vapeur d'équilibre. Au dessous du point critique, la relation entre la pression capillaire et le potentiel d'eau est :

$$p^c = -\Psi \rho^w \quad (3.82)$$

avec ρ_w la densité de l'eau liquide.

De la même manière, on peut décrire le transport de l'eau adsorbée selon la formulation présentée à la section 3.4.3.

Avec la position de ces dernière équations, on peut donc écrire les phénomènes de transport et de capillarité, soit au-dessous de la température critique, soit au delà avec des équations identiques dans la forme. La signification physique est par contre différente dans les deux cas. Plus de détails pour l'implémentation et la solution du problème mathématique sont donnés en [Gawin99], [Pesavento00].

3.7.1 Pression de vapeur saturante

La pression de vapeur saturante, dont la définition a été donnée plus haut, est généralement obtenue à travers l'équation de Clausius-Clapeyron comme fonction de la seule température :

$$p^{gws} = p^{gws0} \exp \left[-\frac{M_w \Delta H_{gw}}{R} \left(\frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta_0} \right) \right] \quad (3.83)$$

avec θ_0 la température de référence, p^{gws0} la pression de vapeur saturante à la température de référence et ΔH_{gw} l'enthalpie d'évaporation. Cette loi est généralement acceptée pour

décrire l'augmentation de la pression de vapeur saturante avec la température. Par contre elle est seulement valable dans une plage de température proche de celle de référence. L'enthalpie de vaporisation n'est pas constante mais est fonction de la température. On trouve alors dans la littérature très souvent utilisée la formulation empirique de Hyland-Wexler [Hyland83] :

$$p^{gws}(T) = \exp [C_1/\theta + C_2 + C_3\theta + C_4\theta^2 + C_5\theta^3 + C_6\ln(\theta)] \quad (3.84)$$

avec : $C_1 = -5800.2206$, $C_2 = 1.3914993$, $C_3 = -4.8640293 \times 10^{-2}$, $C_4 = 4.1764768 \times 10^{-5}$, $C_5 = -1.4452093 \times 10^{-8}$, $C_6 = 6.5459673$.

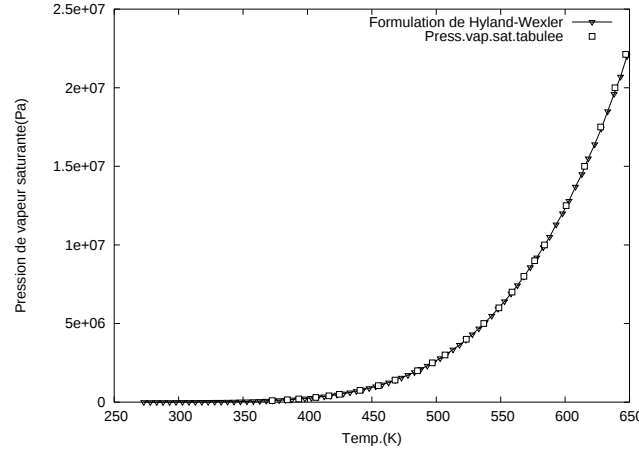


FIG. 3.14 – Pression de vapeur saturante selon la formulation de Hyland-Wexler et les données expérimentales [Haywood90]

3.7.2 Enthalpie de vaporisation

L'enthalpie de vaporisation est fonction de la température ; on l'approche à travers la formule de Watson [Reid87], [Forsyth91] :

$$\Delta H^{gw} = 2.672 \cdot 10^5 (\theta_{cr} - \theta)^{0.38} \quad (3.85)$$

avec $T_{cr} = 647.3K$ la température critique, de l'eau. En figure 3.7.2 on présente une comparaison entre les données expérimentales et la formule de Watson.

3.7.3 Viscosité de l'air humide

La viscosité dynamique de l'air humide, fonction de la température et de la proportion entre la pression du vapeur et du gaz, peut être approchée à travers la formule suivante [Pesavento00] :

$$\mu^g = \mu^{gw} + (\mu^{ga} - \mu^{gw}) \left(\frac{p^{ga}}{p^g} \right)^{0.608} \quad (3.86)$$

avec :

– $\frac{p^{gw}}{p^g}$ la fraction molaire de l'air sec dans le gaz,

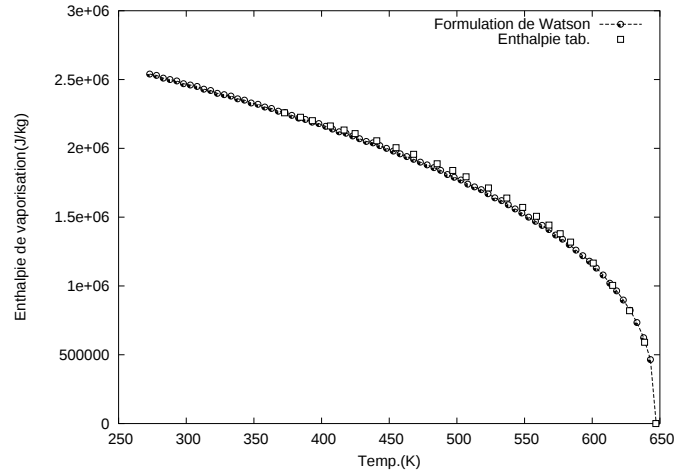


FIG. 3.15 – Enthalpie de vaporisation selon la formule de Watson et les données expérimentales [Haywood90] vs température

- $\mu^{gw} = \mu^{gw0} + \alpha_v (\theta - \theta_0)$ la viscosité dynamique de la vapeur, $\mu^{gw0} = 8.85 \cdot 10^{-6}$ Pa·s, $\alpha_v = 3.53 \cdot 10^{-8}$ Pa·s·K⁻¹,
- $\mu^{ga} = \mu^{ga0} + \alpha_a (\theta - \theta_0) + \beta_a (\theta - \theta_0)^2$, la viscosité dynamique de l'air sec,
- $\mu^{ga0} = 17.17 \cdot 10^{-6}$ Pa·s, $\alpha_a = 4.73 \cdot 10^{-8}$ Pa·s·K⁻¹, $\beta_a = 2.22 \cdot 10^{-11}$ Pa·s·K⁻².

En figure 3.16 on présente la formule 3.86.

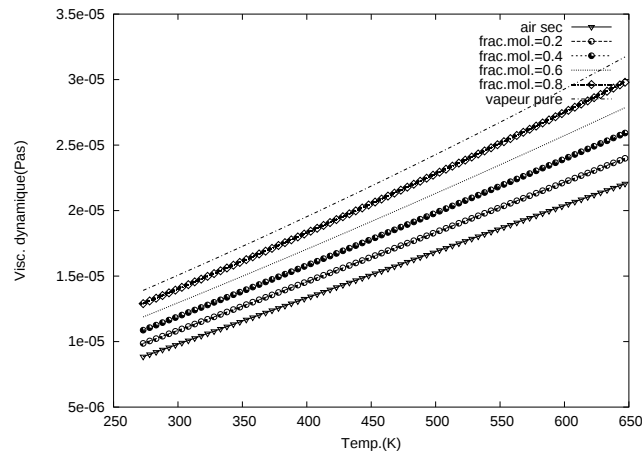


FIG. 3.16 – Viscosité de l'air humide selon la formule 3.86

3.7.4 Viscosité de l'eau liquide

La viscosité de l'eau liquide est fortement dépendante de la température [Reid87] et peut être approchée avec la formule suivante [Thomas95] :

$$\mu^w = 0.6612 \cdot (\theta - 229)^{-1.562} \quad (3.87)$$

En figure 3.17 on présente la formule 3.87.

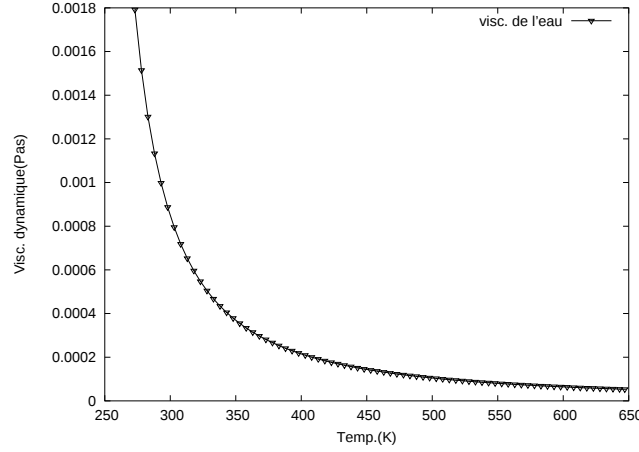


FIG. 3.17 – Viscosité de l'eau selon la formule 3.87

3.7.5 Coefficient de diffusion de l'eau vapeur

On a déjà vu que la diffusion d'un gaz dans un mélange est réglé par la loi de Fick :

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_g^{ga} &= -\frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{ga} \text{grad} \left(\frac{p^{ga}}{p^g} \right) = \\ &= \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \text{grad} \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) = -\mathbf{v}_g^{gw} \end{aligned} \quad (3.88)$$

avec $\frac{1}{M_g} = \frac{\rho^{gw}}{\rho^g} \frac{1}{M_w} + \frac{\rho^{ga}}{\rho^g} \frac{1}{M_a}$ et $\mathbf{D}_g^{ga} = \mathbf{D}_g^{gw} = D_{eff}$ le coefficient de diffusion effectif dans le milieu poreux.

Le coefficient de diffusion effectif peut être décrit à travers la loi suivante, fonction de la température, de la saturation et de la pression du gaz [Perre90], [Baggio93], [Herbst89] :

$$D_{eff} = n (1 - S)^{A_v} f_S D_{vo} \left(\frac{\theta}{\theta_o} \right)^{B_v} \frac{p_o}{p^g} \quad (3.89)$$

avec $D_{vo} = 2.58 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ le coefficient de diffusion de la vapeur dans l'air à la température de référence $T_o = 273.15 \text{ K}$ et pression $p_o = 101325 \text{ Pa}$ [Perre90], A_v est une constante, comprise entre 1 et 3 [Forsyth91], [Daian88], B_v est une constante qui pour la valeur $B_v = 1.667$ donne une bonne corrélation avec les résultats expérimentaux à plusieurs températures [Mason65], et f_S est le coefficient de structure, utilisé à la place de la tortuosité [Pesavento00].

Le réseau poreux dans le béton est très complexe et a une forte influence sur la diffusion de la vapeur. La manière la plus simple de prendre en compte cet effet est à travers la tortuosité (es.[Bazant72]), qui prend en compte l'augmentation du parcours moyen des molécules dans le réseaux poreux. Durant la diffusion de la vapeur dans le milieu poreux, le nombre de collisions des molécules d'eau avec le solide est non négligeable par rapport au nombre de collisions avec les molécules d'air : l'effet Knudsen devient alors important. En plus, le problème devient plus compliqué dès qu'on augmente la température. Dans ce cas, comme on verra plus loin, le réseaux poreux du béton change, avec une augmentation de la porosité et du libre parcours moyen des particules.

L'effet Knudsen ainsi que le changement des connections parmi les pores et l'influence que ces phénomènes ont sur la diffusion du vapeur, sont pris en compte par le coefficient de structure (voir : [Pesavento00]).

Remarque : coefficient de transport de l'eau adsorbée Si l'on voulait prendre en considération le transport de l'eau adsorbée que l'on a introduit en 3.4.3, la loi qui décrit le phénomène, est la suivante :

$$\mathbf{J}_d^{bw} = -\mathbf{D}_d^{bw} \text{grad} S_b \quad (3.90)$$

Il reste donc à décrire le coefficient de diffusion de l'eau adsorbée ; on fait donc référence à [Perre90] et on retient la loi :

$$D_d^{bw} = D_{d_0}^{bw} \exp \left(-2.08 \frac{S}{S_{ssp}} \frac{\theta}{\theta_0} \right) \quad (3.91)$$

avec $D_{d_0}^{bw} = 1.57 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ et la température de référence $T_0 = 295 \text{ K}$.

On a toutefois remarqué plus haut que ce type de transport, dans le cadre de cette thèse, sera négligé.

3.8 Conclusion

Le but de ce chapitre a été de décrire dans les détails les phases fluides (eau liquide, eau vapeur et air sec) dans le béton. Dans la première partie, on a apporté la description de l'écoulement d'une espèce fluide à travers un milieu poreux et on a donné l'ensemble des équations qui seront utilisées par la suite dans le cadre de l'étude expérimentale qui a été menée. On a donc proposé une approche rigoureuse pour la détermination de la perméabilité intrinsèque, mesurée à l'eau et au gaz. On a ensuite introduit les lois d'état pour le gaz et le liquide. Enfin, on a donné l'ensemble des lois, soit d'origine expérimentale, soit théorique, nécessaires pour la description des phases fluides et l'alimentation du modèle mathématique.

Chapitre 4

Description du squelette du milieu poreux

Nous avons établi parmi les besoins de notre modèle dans le chapitre 2 la nécessité de décrire le milieu poreux et en particulier la géométrie de sa microstructure. Nous allons d'abord définir plus précisément l'ensemble des réactions chimiques qui forment la pâte de ciment (partie 4.1), pour donner ensuite une description plus approfondie de la structure poreuse du béton. On introduira alors deux grandeurs, le rayon propre et le rayon d'accès, qui seront utilisés pour la description du volume poreux. En suite, on complètera la description en introduisant pour ce milieu poreux la relation entre la saturation S et r , taille caractéristique des pores entièrement remplis lorsque la saturation est de S . On remarquera que la structure poreuse du béton est en évolution avec la température ; on introduira donc une description des lois nécessaires pour prendre en compte cet effet. Enfin on donnera l'ensemble des lois constitutives nécessaires pour la description de la phase solide du milieu poreux.

4.1 Structure du ciment hydraté

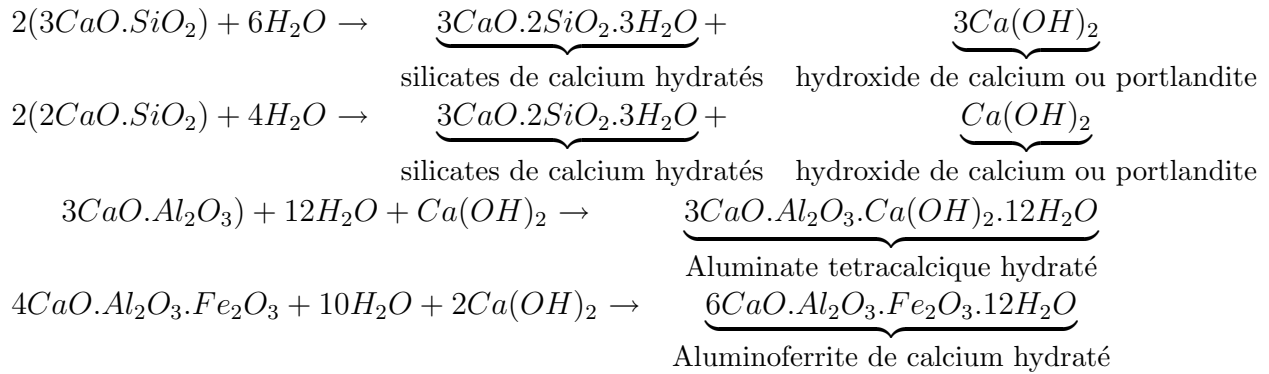
Le ciment Portland Le ciment est l'ingrédient essentiel pour la formation du béton. Mélangé avec de l'eau, il forme la pâte de ciment et donc la matrice du béton. Le ciment le plus classique est le ciment de type Portland, obtenu en réduisant en poudre le clinker. Le clinker est un matériau hydro-actif obtenu d'un mélange de calcaires et argiles cuites à une température d'environ $1500^{\circ}C$ constitué essentiellement de silicates de calcium hydrauliques auxquels on ajoute du sulfate de calcium (gypse). Le diamètre moyen d'une particule de ciment est d'environ $10\mu m$. Le ciment Portland est donc un mélange de nombreux composants :

Silicate tricalcique	C_3S	$3CaO.SiO_2$
Silicate bicalcique	C_2S	$2CaO.SiO_2$
Aluminate tricalcique	C_3A	$3CaO.Al_2O_3$
Aluminoferrite tetracalcique	C_4AF	$4CaO.Al_2O_3.Fe_2O_3$

Ces quatre composants forment environ 90% de la masse de ciment et les C_3S et C_2S représentent à eux seuls environ 75% de la masse du ciment. Les caractéristiques de résistance

sont données essentiellement par le C_3S . Le gypse contenu dans le ciment Portland sert à réguler la réaction de prise du ciment par la formation d'un film de cristaux d'ettringite ($C_3A.3CaSO_4.32H_2O$) à la surface des grains de C_3A , qui se révèlent très actifs à l'eau. En ralentissant l'hydratation de C_3A on évite le phénomène de la fausse prise. Les bétons à très hautes performances sont obtenus en cherchant à étendre le spectre des mélanges granulaires. On utilise donc des éléments ultra-fins de l'ordre de $0.1\mu m$ destinés à remplir les micro-vides de l'empilement des grains en améliorant la compacité du mélange. L'utilisation d'éléments ultra-fins est toujours combinée à l'emploi des superplastifiants pour améliorer la capacité de manipulation du béton et réduire la quantité d'eau nécessaire à ce but. Les ajouts cimentaires sont des matériaux qui, combinés au ciment Portland, contribuent aux propriétés du béton durci par action hydraulique ou pouzzolanique ou les deux à la fois. Une pouzzolane est un matériau siliceux ou alluminosiliceux qui, finement divisé et en présence d'humidité, réagit avec l'hydroxide de calcium libéré par l'hydratation du ciment Portland pour former des composés avec des propriétés liantes.

L'hydratation du ciment Portland Le ciment Portland est un liant hydraulique, c'est à dire que sa prise et son durcissement ont lieu en combinaison avec l'eau. Les qualités liantes de la pâte de ciment sont donc dues à la réaction chimique entre le ciment et l'eau appelée d'hydratation. De manière très schématique, on peut présenter les réactions des différents composés du ciment Portland en écrivant les relations suivantes :



Une fois hydratée, la pâte de ciment forme une structure cristalline; il est à remarquer que les C_3S et C_2S donnent la même famille d'hydrates dans le C-S-H; ils sont aussi l'agent liant le plus important, soit par les proportions, soit par les caractéristiques mécaniques qu'ils confèrent au matériau durci. Le C-S-H se présente sous la forme de feuillets très minces qui s'enroulent sur eux même en formant des tubes creux. D'un point de vue morphologique, le gel du C-S-H est un micro-cristal lamellaire, la lamelle étant composée de 2-3 feuillets très minces (voir fig.4.1) [Feldman68], [Colleparidi92]. L'excès de calcium, libéré par les réactions d'hydratation du liant, se retrouvent sous forme de portlandite $Ca(OH)_2$ cristallisée sous forme de plaquettes hexagonales empilées entre les grains de ciment partiellement hydratés. On trouve une forte concentration de cristaux de $Ca(OH)_2$ dans la zone (auréole) de transition à l'interface pâte de ciment-granulat ou en bordure des bulles d'air.

Pour la fabrication des BHP on ajoute des éléments ultra-fins qui réagissent avec l'hydroxide de calcium pour former les liants, ce dernier est nettement moins présent dans le BHP que dans le béton ordinaire [Colleparidi92].

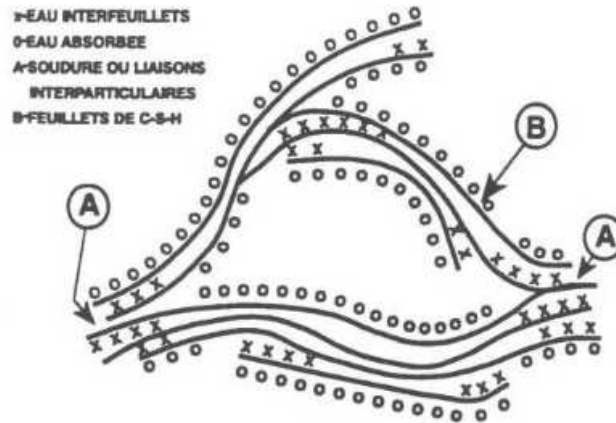


FIG. 4.1 – Structure du ciment durci selon le modèle de Feldman et Sereda [Feldman68]

4.2 Structure poreuse du béton

On a donc vu que le béton est un matériau composite caractérisé par une microstructure poreuse avec des pores de différentes tailles et de distribution aléatoire. La structure poreuse et la distribution des pores au sein du béton jouent un rôle très important non seulement sur la résistance mécanique, mais aussi sur les phénomènes de transport et d'interaction avec le milieu extérieur. Cette interaction a lieu à travers les pores interconnectés. Le réseau poreux est aussi le récipient de l'eau liquide, de l'eau en forme de vapeur et de l'air sec (fig.4.2). Pour ces raisons, la porosité (et sa distribution) devient un paramètre très important pour la caractérisation du béton. La forme et la taille des pores changent dans chaque type de béton. L'eau en excès, utilisée pour la fabrication du béton et la manipulation que l'on fait lors de sa fabrication, forme des bulles d'air dans le béton. Ces bulles constituent le premier squelette du réseau poreux. Ensuite, le contenu et le type du ciment ainsi que les agrégats, contribuent à la taille et à la distribution du réseaux poreux. Les conditions du béton pendant sa maturation ont une influence très forte sur le réseaux poreux. Dans la pâte de ciment, les parois d'un pore sont formées essentiellement par le C-S-H, mais dans les pores on trouve aussi de l'ettringite et de la portlandite.

4.2.1 Détermination de la porosité

La porosité (ou le volume poreux) est définie comme le volume cumulé des pores par unité de volume de milieu poreux. Sa détermination est généralement une technique destructive. Les techniques les plus usuelles utilisées sont :

- *Porosité à l'eau* : la porosité totale est mesurée avec cette méthode. Elle permet de connaître la quantité d'eau totale contenu dans le béton après le séchage et la saturation de l'échantillon.
- *Porosité au mercure* : permet de connaître la porosité en poussant du mercure à travers les réseaux de pores ouverts du béton. La quantité de mercure qui entre dans le béton à différentes pressions permet de lier la pression aux différentes tailles des pores et d'obtenir donc la distribution de la taille des pores. Avec cette méthode on peut explorer des pores de tailles $50\text{\AA}$ – $100\mu\text{m}$ c'est à dire la région des pores capillaires.

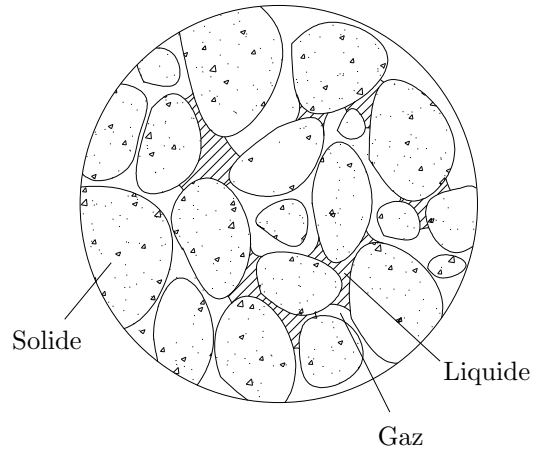


FIG. 4.2 – Description du milieu poreux avec les trois phases

La principale limite des méthodes de détermination de la porosité est liée au fait que, indépendamment du fluide utilisé pour la percolation, tous les pores ne vont pas être remplis par la phase mouillante. En plus, il faut aussi prendre en compte le fait que certains liquides (notamment l'eau) ne sont pas inertes vis-à-vis de la matrice cimentaire i.e. ils entraînent un changement de la microstructure. L'utilisation de la technique de pénétration au mercure est alors très répandue vu le fait que la plage des pores qui sont remplis par ce fluide correspond aux pores capillaires i.e. les pores qui sont les plus concernés par les phénomènes de transport et qui, donc, nous intéressent pour l'étude du matériau béton.

4.2.2 Distribution des pores

La porosité n , définie comme le rapport du volume des pores sur le volume total, est le paramètre normalement utilisé pour la caractérisation du réseau poreux du béton. Mais ce paramètre n'est pas suffisant car c'est plutôt la distribution des pores qui influence les propriétés physiques du milieu, notamment la résistance mécanique et la perméabilité. On définit comme courbe porosimétrique $S(r)$ la courbe donnant la proportion de volume poreux dont la taille caractéristique de pore est inférieure à r . En particulier, on peut donner une classification des pores selon leur taille de la manière suivante :

- *Micropores* : avec un diamètre $< 26\text{\AA}$. Ces pores de très petite taille n'ont pas une influence négative sur la durabilité du béton, mais peuvent avoir une influence sur le fluage et le retrait.
- *Mésopores* : ou pores capillaires, avec une diamètre de $26\text{-}500\text{\AA}$. Le volume total du mélange ciment-eau ne change pas de manière significative pendant l'hydratation. Par contre, la place occupée au début par l'eau et le ciment est remplacée progressivement par les produits hydratés. L'espace qui n'est pas occupé par les hydrates et le ciment anhydre forme le réseaux poreux. La porosité capillaire dépend donc du rapport eau/ciment (e/c) et du degré d'hydratation du ciment. En ce qui concerne les capillaires, on peut faire une distinction supplémentaire entre les petits pores capillaires ($< 50\text{\AA}$) et les grands pores capillaires ($50\text{-}500\text{\AA}$). Les pores capillaires sont généralement considérés comme les plus importants dans la microstructure du béton : du point de vue de la durabilité, l'influence qu'ils ont sur les mécanismes de transport est très importante.

- *Macropores* : ou pores d’air, avec une diamètre $>500\text{\AA}$. Typiquement, ces pores ont une forme sphérique, et leur présence dans le béton est due à deux causes :
 - Ils se produisent pendant le malaxage
 - Ils se forment à cause de l’utilisation d’additifs particuliers, qui gardent de l’air pour améliorer certaines caractéristiques (ex. la résistance au gel et au feu)

Les micro-pores sont souvent considérés comme faisant partie de la structure du C-S-H. Les meso- et macro-pores sont décrits comme la partie capillaire des pores. Une différenciation supplémentaire s’avère nécessaire pour la description du réseau poreux : il faut donc distinguer entre porosité ouverte et porosité fermée. La porosité ouverte désigne l’ensemble des pores qui sont connectés l’un à l’autre et qui permettent le transport du liquide/gaz (ex. pores capillaires). Au contraire, les pores fermés ne sont pas connectés (ex. pores d’air) et clairement n’ont aucune influence sur les phénomènes des transports.

4.3 Description synthétique de la géométrie du volume poreux

Le milieu poreux qui nous intéresse est le matériau cimentaire, à l’intérieur duquel la distribution des tailles des pores est très étendue. Les connections entre les pores sont complexes et il s’avère difficile de donner une description détaillée du volume poreux. En particulier on a vu plus haut l’importance de la porosité ; la description que l’on donne sera complétée dans la suite à travers l’association de deux grandeurs caractéristiques à chaque point du réseau poreux, le rayon propre et le rayon d’accès.

4.3.1 Rayon propre et rayon d’accès

Comme on a vu, la connaissance de la seule porosité n n’est pas suffisante pour décrire de façon satisfaisante la microstructure du béton. Il nous faut une quantité adaptée à la description de la distribution des pores : si on considère la relation $r(S)$, où S est la fraction de volume du réseau poreux contenant les pores de taille caractéristique inférieure à r , on obtient la relation cherchée.

Il nous faut donc pouvoir apporter une définition précise au rayon de pore r . Nous allons voir qu’à chaque point du réseau poreux, nous pouvons associer deux grandeurs caractéristiques pour notre problème.

La figure 4.3 présente un réseau poreux caractéristique et la manière dont nous choisissons de le décrire dans notre modèle. La matière solide est caractérisée par le squelette (en noir). Le réseaux poreux par des espaces vides (en blanc). Un point du réseaux poreux peut être caractérisé par deux paramètres : son “rayon” propre et son “rayon” d’accès. Nous choisissons un point A quelconque du réseau poreux.

4.3.1.1 Définition du rayon propre et du rayon d’accès

Rayon propre Considérons l’ensemble $\mathcal{S}$ des sphères contenant le point A et incluses totalement dans le réseau poreux. Il est évident que les rayons de ces sphères constituent un intervalle borné de R^+ . Nous notons $R_p(A)$ la limite supérieure de cet intervalle, c’est à dire

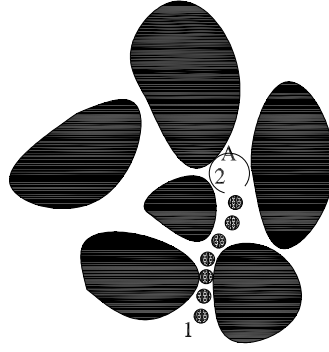


FIG. 4.3 – Description du milieu poreux. Le cercle (1) représente la sphère associée au rayon d'accès et le cercle (2) la sphère associée au rayon propre au point A

le rayon de la plus grande sphère contenant le point A et incluse totalement dans le réseaux poreux.

Nous appellerons $R_p(A)$ le rayon propre du réseau poreux au point A .

Rayon d'accès Considérons maintenant une sphère de rayon R placée à l'extérieur du réseau poreux. Nous la déplaçons en lui faisant parcourir tout l'espace poreux qu'elle peut atteindre. L'ensemble des rayons de sphères pouvant atteindre le point A constitue un segment borné de R^+ . Nous notons $R_a(A)$ la limite supérieure de cet ensemble, c'est à dire le rayon de la plus grande sphère pouvant atteindre A à partir de l'extérieur du réseaux poreux.

$R_a(A)$ est appelé le rayon d'accès du réseau poreux au point A .

Conclusions A tout point du réseau poreux A nous pouvons associer deux longueurs caractéristiques : le rayon d'accès R_a et le rayon propre R_p , dont les définitions ont été indiquées précédemment.

Ces deux longueurs caractéristiques n'interviennent cependant pas de la même manière dans les processus de mouvement de fluide qui nous intéressent ici. Notons que $R_a(A) < R_p(A)$

4.3.1.2 Lien entre les rayons du volume poreux et les mouvements de fluide

Comportement lors de la sorption Lorsque le liquide pénètre le milieu poreux, la saturation augmente progressivement. Nous supposons que cette pénétration se fait à une vitesse suffisamment lente pour permettre à un équilibre thermodynamique entre les phases liquide et gazeuse de s'établir en tout point à tout instant. La relation de Laplace décrit cet équilibre en liant la différence de pression entre la phase liquide et la phase gazeuse à un rayon de ménisque r qui est lié au rayon caractéristique de la géométrie locale du réseau poreux.

$$p^g - p^w = \frac{2\sigma \cos \theta_m}{r}$$

Pour simplifier nous supposons ci-dessous que la mouillabilité est parfaite. Si l'on suppose les deux phases (liquide et gazeuse) suffisamment connectées pour pouvoir transmettre instantanément sur une petite distance (de l'ordre de la dimension du pore) les pressions correspondantes, on déduit de la relation précédente que le volume poreux d'eau saturé sera celui constitué de l'ensemble des points dont le rayon propre R_p est inférieur à r .

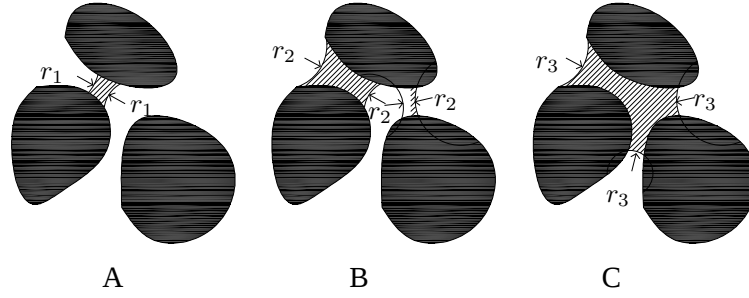


FIG. 4.4 – Imprégnation du milieu poreux ($S^l(A) < S^l(B) < S^l(C)$)

La figure 4.4 illustre le remplissage progressif au voisinage du point A. On peut donc associer à une valeur de r une mesure du volume de pore occupé par le liquide, par exemple S . Dans la figure 4.4, on peut voir progressivement le volume se remplir.

- en A, le rayon du ménisque est r_1 . Les points dont le rayon propre est telle que $R_p < r_1$ sont remplis.
- en B, r continue à croître ($r_2 > r_1$). Seuls les points du réseaux poreux dont le rayon propre est plus faible que r_2 sont remplis.
- en C, $r_3 > R_p$, le point du réseaux poreux considéré est rempli.

Par conséquent, lors de la sorption, les points du réseaux saturés sont tels que $r = R_p$. C'est donc le rayon propre qui gouverne le processus de sorption.

Comportement lors de la désorption La figure 4.5 illustre le séchage progressif du point A. Cette fois, la saturation diminue.

- en A, le rayon du ménisque est r_4 . Le rayon saturé est constitué des points tels que $R_a < r_4$ du voisinage.
- en B, r continue à décroître ($r_5 < r_4$) mais reste supérieur à R_a . Par conséquent, le réseaux poreux considéré n'est pas vidé.
- en C, $r_6 < R_a$. Il n'est plus possible de créer un ménisque dans le canal principal avec une courbure de $1/r_6$. Ce canal va donc se vider et avec lui, brutalement, le volume central. Au niveau des autres canaux d'accès, un ménisque de courbure $1/r_6$ reste formé.

Lors du séchage, c'est donc le rayon d'accès qui détermine les points qui restent dans la zone saturée.

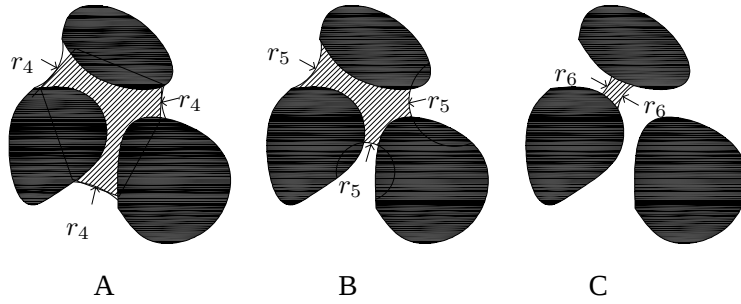


FIG. 4.5 – Séchage du milieu poreux ($S^l(A) > S^l(B) > S^l(C)$)

Comportement d'hystérésis Le remplissage des pores peut ne pas être identique pour un même degré de saturation comme le montrent les explications précédentes. C'est là une source du phénomène d'hystérésis observé lors des essais de sorption-désorption dans un milieu poreux.

Conclusions Le fait d'associer au volume poreux deux grandeurs, le rayon propre et le rayon d'accès, permet d'avoir une description complète et satisfaisante des phénomènes de sorption et désorption ainsi que de l'hystérésis. De toute manière vue la complexité de cette vision, le manque de données expérimentales et le fait que, normalement, on ne considère que l'adsorption et la désorption séparément, la formulation à un rayon a été conservée. Au volume poreux on associe donc une seule grandeur, le rayon propre à travers lequel on prend en considération le lien avec la saturation i.e. $S = S(r)$.

4.3.2 Description à un seul paramètre

Comme on a vu plus haut, la relation $S(r)$ s'avère nécessaire pour la connaissance et la description du volume poreux de notre matériau. Il faut toutefois remarquer que la mesure du rayon propre r est difficile : à l'aide de la relation de Laplace, on peut donc établir un lien entre le rayon r et la pression capillaire p^c , définie comme $p^c = p^g - p^w$. La mesure de la pression capillaire est plus facile dans la pratique que la mesure du rayon propre i.e. la relation $S = S(p^c)$ est la plus usuelle dans la littérature. La saturation est une variable que l'on peut déterminer expérimentalement comme une fonction soit du degré de remplissage des pores soit de la température : il faut remarquer que l'équilibre du ménisque eau liquide-gaz est fonction non seulement de la géométrie du pore mais aussi de la température θ .

En fonction des variables principales qui ont été choisies, la saturation sera donc fonction de la teneur en eau (et donc de la pression capillaire p^c) et de la température absolue θ :

$$S = S(p^c, \theta) \quad (4.1)$$

En particulier, Baroghel-Bouny [Baroghel94] propose une formulation expérimentale dépendant du type de béton que l'on considère. Dans cette formulation on établit la relation suivante entre la pression capillaire et la saturation pour un béton ordinaire et pour

un béton hautes performances :

$$p^c = p^c(S) = a (S^{-b} - 1)^{(1-\frac{1}{b})} \quad (4.2)$$

où les coefficients a and b dans l'eq. (4.2) sont liés aux matériaux en table 4.1. (B) et (M) sont représentatifs du béton et du mortier, (O)rdinaire ou à (H)aute performance.

Coefficients	Matériau cimentaire			
	BO	BHP	MO	MH
a [MPa]	18.6237	46.9364	37.5479	96.2837
b [-]	2.2748	2.0601	2.1684	1.9540

TAB. 4.1 – Paramètres pour l'eq.4.2 à température ambiante

La fig.4.6 donne une représentation graphique, en échelle logarithmique, de la relation 4.2.

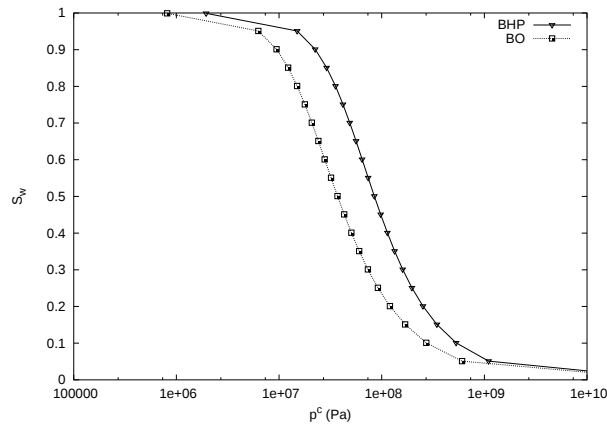


FIG. 4.6 – Relation $p^c(S)$ selon la formulation 4.2

4.4 Conséquences de l'évolution de la température sur la géométrie du milieu poreux

4.4.1 La déshydratation

La déshydratation est l'un des phénomènes importants entraînés par l'élévation de température dans la pâte de ciment. Au paragraphe 4.1 on a vu les réactions chimiques qui sont à la base de l'hydratation de la poudre de ciment. Il est donc évident que, si on fournit de l'énergie (chaleur), les liaisons qui forment les hydrates vont se détruire : le résultat est donc la transformation des hydrates en anhydres plus eau. Comme on a déjà plusieurs fois remarqué, le béton se présente toujours partiellement saturé en eau. Généralement on n'accepte la simplification qu'à partir de la température conventionnelle de 105°C . L'eau libre a quitté complètement le béton et que aucune réaction de déshydratation n'a encore eu lieu. A partir

de cette température limite, par convention, on considère que l'eau quittant le béton était initialement chimiquement liée. La perte d'eau et la destruction des hydrates sont donc à la base d'un certain nombre de phénomènes dont l'importance n'est pas négligeable. On a déjà vu que la porosité et, en général, le réseau poreux, sont fortement influencés par une augmentation de la température. La déshydratation transforme les hydrates en anhydres ; le volume d'anhydres étant inférieur à celui des hydrates, on observe une augmentation de la porosité et donc une évolution de la microstructure et du réseau poreux dans le béton. Comme conséquences directes de l'augmentation de la porosité on a une baisse de la raideur et de la résistance à la compression du matériau et une augmentation de la perméabilité suite à l'augmentation de la dimension des pores. La déshydratation a aussi une influence sur la cinétique du chauffage : le fait d'être une réaction endothermique et de produire de l'eau liquide qui, suite à la haute température passe en phase vapeur, a comme conséquence de ralentir le chauffage du béton.

La destruction des liaisons chimiques qui forment le C-S-H n'est pas un phénomène instantané : lorsqu'on atteint une certaine température, il faut attendre un temps suffisamment long par que les réactions aient lieu. Par conséquence la déshydratation n'est pas un phénomène instantané et sa cinétique devient importante [Ferraille00], [Pasquero02], [DalPont03], [DalPont04]. En particulier la masse d'eau limite produite par déshydratation à une certaine température est décrite par une valeur $m_{eq}(T)$, masse d'eau à l'équilibre par unité de volume dans la configuration de référence. La valeur de $m_{eq}(T)$ est trouvée expérimentalement et est donnée par la relation suivante [Pasquero02] :

$$\begin{aligned} m_{eq}(T) = & \exp[-\exp(-0.2662\ln(T - 105) + 2.1478)]H(T - 105) + \\ & \exp[-\exp(-0.1574\ln(T - 300) + 2.2545)]H(T - 300) + \\ & \exp[-\exp(-0.4364\ln(T - 373) + 2.8452)]H(T - 373) \end{aligned} \quad (4.3)$$

avec H la fonction de Heaviside et T la température en degré Celsius. La formulation présentée est valable pour une pâte de ciment et les coefficients sont liés à la maturation de la pâte. La perte de masse totale peut alors être décrite par une relation du type :

$$\Delta m(T) = f_a m_{eq} c \quad (4.4)$$

avec f_a un facteur (entre 0 et 1) qui prend en compte l'âge de la pâte de ciment et c le contenu total de ciment dans le béton. Ferraille [Ferraille00] a montré que la décroissance de la masse à chaque palier de température peut être approchée grâce à une fonction exponentielle qui prend donc en charge la cinétique chimique non instantanée de la déshydratation. La loi de perte de masse devient alors de la forme suivante :

$$\dot{m}(T) = \frac{1}{\tau} [m - m_{eq}(T)] \quad (4.5)$$

avec τ un temps caractéristique de la décroissance de la masse. Il a été montré expérimentalement que τ n'est pas fonction de la température et que sa valeur est à peu près constante pour chaque palier de température [Ferraille00] :

$$\tau = 10800s \quad (4.6)$$

Le travail a été repris en profondeur par [Pasquero04] qui montre qu'une description fine de la cinétique de la déshydratation nécessite de distinguer de nombreuses espèces chimiques

caractérisées par leur température de décomposition et le temps caractéristique de cette décomposition. Cette démarche est très lourde et par la suite nous retiendrons la relation approchée 4.5 proposée par [Ferraille00].

La loi décrite grâce à l'eq.4.5 est présentée sous une forme valable soit pour la déshydratation soit pour la réhydratation du ciment : dans ce dernier cas, la loi n'a pas été vérifiée expérimentalement mais on peut supposer que cette propriété est fautive. On peut bien supposer que les temps caractéristiques de réaction pour la déshydratation et la réhydratation ne soient pas les mêmes. La loi 4.5 reste donc valable pour le cas de déshydratation.

4.4.2 Évolution de la porosité n avec la température

On a donc plusieurs fois remarqué que la géométrie du volume poreux change lors d'un chauffage suite à la déshydratation. On a vu plus haut que la déshydratation est un processus qui détruit la pâte de ciment : la porosité est donc en évolution dès que la taille des pores augmente [Herbst89]. Il faut donc déterminer expérimentalement soit la porosité en conditions de référence, nommée n_0 (à $\theta = \theta_0$), soit la porosité en évolution avec la température. [Herbst89] propose une formulation qui a été retenue par [Gawin03], i.e. une dépendance linéaire de la porosité avec la température :

$$n = n_0 + A_n(\theta - \theta_0) \quad (4.7)$$

avec A_n une constante dépendante du type de béton. En particulier, dans le cadre du projet Hiteco [Hiteco], la formule 4.7 donne les résultats en figure 4.7.

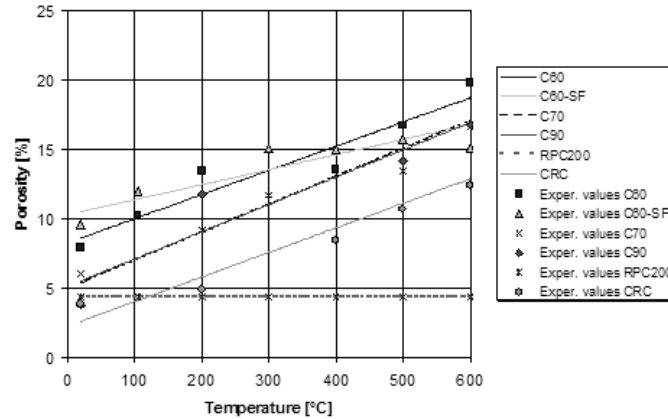


FIG. 4.7 – Valeurs expérimentales et approximation selon la formule 4.7 pour différents bétons

De toute manière, on a vu que le changement de la microstructure et, en particulier, de la porosité, est un phénomène directement lié à la déshydratation. Il nous semble donc plus approprié d'établir une relation directe entre la porosité n et la déshydratation m_{des} . Au moins dans le cadre de notre modélisation THC, on retiendra alors la relation proposée par [Ferraille00], [Tamagny01], [DalPont03], [DalPont04], [Alarcon03] :

$$n = n_0 + \beta \cdot 10^{-3} m_{des} \quad (4.8)$$

avec β un facteur dont la valeur, si l'on tient en compte la contraction de Le Chatelier [Folliot82], est de 0.28. Ceci n'est valable que lors de l'hydratation du ciment et non pour le phénomène de déshydratation. [Alarcon03] détermine le coefficient β de manière expérimentale. Si on se place dans le cas de l'hydratation du ciment, les hydrates se transforment en anhydres. Ces anhydres vont créer une nouvelle porosité; le coefficient β doit être donc plus faible que celui prévu dans l'hypothèse de Le Chatelier. De toute manière, on considère cette variation comme presque négligeable, on utilisera donc par la suite la valeur $\beta = 0.72$.

4.4.3 Évolution du réseau poreux avec la température

La perte de stabilité des phases solides du béton lorsque on atteint des hautes températures influence fortement la structure poreuse. Les changements physiques et chimiques dans la phase solide changent la porosité et la distribution des pores. La technologie actuelle ne permet pas la mesure de la porosité à chaud; il faut donc attendre le refroidissement de l'échantillon pour pouvoir mesurer la porosité résiduelle. Le changement de structure peut être donc déterminé seulement dans le cas de phénomènes irréversibles.

Les différents phénomènes qu'on peut observer dans le réseau poreux, sont liés à la température maximale atteinte. A des températures pas trop élevées, jusqu'à environ la température de 300°C , la variation des pores est due à la décomposition de la pâte de ciment suite à la déshydratation. Au-delà de cette température, et en particulier lorsqu'on dépasse 500°C , le changement de porosité est lié aussi à la désintégration des agrégats calcaires. La porosité est aussi affectée par le changement de volume : en général, on peut observer une expansion de la pâte de ciment entre $20 - 200^\circ\text{C}$. Au delà de 200°C on observe une expansion des granulats limitée par le retrait de la pâte de ciment.

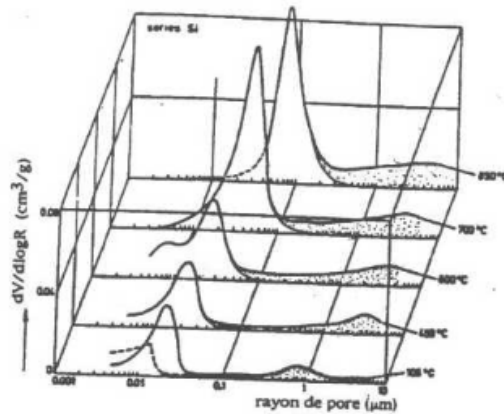


FIG. 4.8 – Évolution de la porosité à température croissante (essai de porosité au mercure)

4.4.4 Évolution de la relation $S(p^c)$ avec la température

Le changement de la microstructure avec la température entraîne forcément une évolution de la relation saturation-pression capillaire. Il nous faut donc définir une relation fonction non seulement de la pression capillaire mais aussi de la température θ , i.e. $S = S(p^c, \theta)$.

Par contre, il s'avère très difficile d'obtenir la courbe de saturation en laboratoire avec une augmentation de la température. Forcément, chaque courbe de saturation, pour une température donnée, est fonction de la seule pression capillaire : les phénomènes d'hystérésis ne peuvent pas être pris en compte dans le modèle que nous avons utilisé. Un exemple de prise en compte de l'hystérésis est donné en [Gawin01], où l'hystérésis est prise en charge grâce à l'application d'un modèle de réseau neuronal. Les isothermes de sorption sont généralement données comme des courbes saturation vs. humidité relative. La saturation en liquide peut être calculée à partir de la masse d'eau m_w à travers la relation suivante :

$$S = \frac{m_w}{n\rho_w} \quad (4.9)$$

avec n la porosité. En utilisant la relation de Kelvin (voir par.3.7.1) on peut établir une relation entre la pression capillaire p^c et l'humidité relative HR , définie de la manière suivante :

$$HR = \frac{p^{gw}}{p^{gws}(\theta)} \quad (4.10)$$

avec $p^{gws}(\theta)$ la pression de vapeur saturante fonction de θ .

On peut donc donner une représentation graphique des isothermes de sorption.

Un exemple de la relation $S = S(p^c, \theta)$, peut être obtenu avec une formulation proposée par Bazant [Bazant78], [Bazant79] :

$$S = S(p^c, \theta) = \{HR(p^c, \theta)\}^{1/m(\theta)} \quad (4.11)$$

avec m est une fonction de θ obtenue de manière expérimentale :

$$m(T) = 1.04 - \frac{T'}{22.34 + T'}, \quad T' = \left(\frac{T + 10}{T_0 + 10} \right)^2 \quad (4.12)$$

avec T la température en Celsius.

La représentation graphique de l'expression 4.11 est donnée en figure 4.9 comme fonction de la pression capillaire.

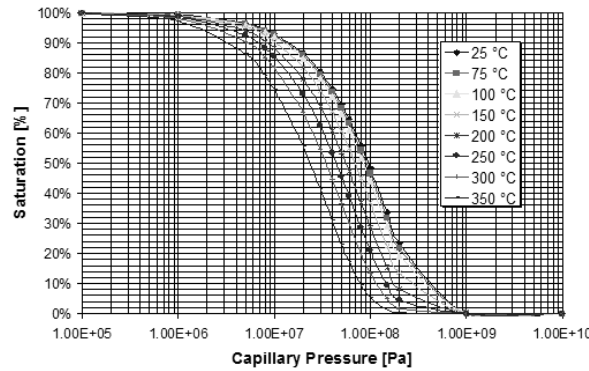


FIG. 4.9 – Isothermes de Bazant

Le modèle de Bazant ne prend pas en compte trois phases distinctes, mais utilise une unique phase liquide. Pour un modèle de ce type il est donc possible d'oublier le point critique de l'eau tout simplement en gardant une petite quantité d'eau au delà de la température

critique. Il est donc évident que dans les isothermes de Bazant, pour une température plus basse que la température critique, l'eau est liquide et que lorsque on dépasse la température critique, l'eau est considérée en phase gazeuse. Comme dans notre modèle THC ou THCM on utilise une approche micro-mécanique avec trois phases clairement distinctes les courbes proposées par Bazant se révèlent insatisfaisantes. Il nous faut donc une formulation selon le modèle proposé par Baroghel-Bouny [Baroghel94], présenté plus haut et résumé à travers la relation 4.2.

En particulier, Pesavento [Pesavento00] a changé la formulation 4.2 :

$$p^c = p^c(S) = a (S^{-b} - 1)^{(1-\frac{1}{b})} \quad (4.13)$$

pour prendre en compte aussi les effets à haute température. Le paramètre b (voir tab.4.1) est gardé constant, mais le paramètre a change en fonction de la température si $\theta > 373K$:

$$a = \frac{a_0}{E(\theta)} \quad (4.14)$$

avec $E(\theta) = 1$ si $\theta < 373K$

En inversant la relation 4.2, la saturation peut être alors écrite de la manière suivante :

$$S = \left[\left(\frac{E(\theta)}{a_0} p^c \right)^{\frac{b}{b-1}} + 1 \right]^{(-1/b)} \quad (4.15)$$

[Pesavento00] propose la formulation suivante pour $E(\theta)$:

$$E(\theta) = \left[\frac{\theta_{crit} - \theta_0}{\theta_{crit} - \theta} \right]^N \quad \text{si } \theta < \theta_{crit}$$

$$E(\theta) = \frac{N}{z} E_0 \theta + \left[E_0 - \frac{N}{z} E_0 (\theta_{crit} - z) \right] \quad \text{si } \theta > \theta_{crit} \quad (4.16)$$

avec θ_0 la température ambiante, N un paramètre > 1 et z un paramètre qui permet la transition au delà de la température critique $\theta_{crit} = 647K$.

Les isothermes résultant de la formulation présentée sont données dans les figures suivantes, soit pour un béton ordinaire, soit pour un béton à hautes performances [Pesavento00].

4.5 Lois constitutives pour le milieu poreux et leur évolution avec la température

4.5.1 Conductivité thermique

La conductivité thermique est prise en compte à travers la formule suivante [Baggio93] :

$$\chi_{eff} = \chi_d(\theta) \left(1 + \frac{4n \rho^w S}{(1-n) \rho^s} \right) \quad (4.17)$$

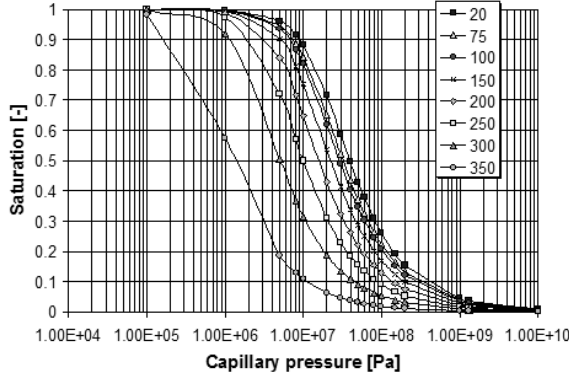


FIG. 4.10 – Isothermes selon la formulation 4.15 en fonction de la pression capillaire (BO)

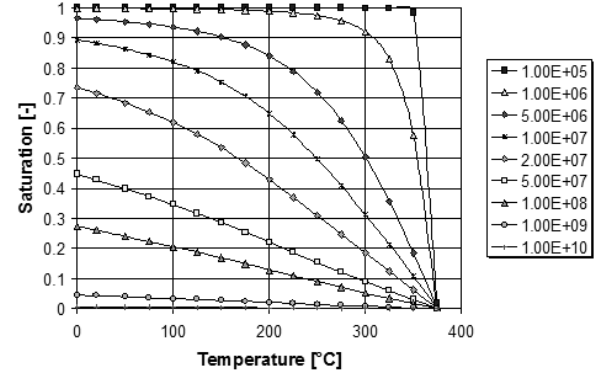


FIG. 4.11 – Isothermes selon la formulation 4.15 en fonction de la température (BO)

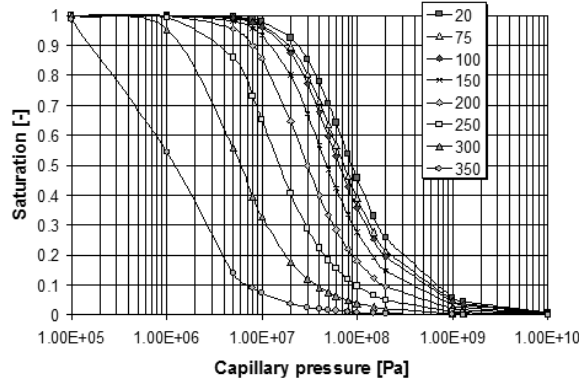


FIG. 4.12 – Isothermes selon la formulation 4.15 en fonction de la pression capillaire (BHP)

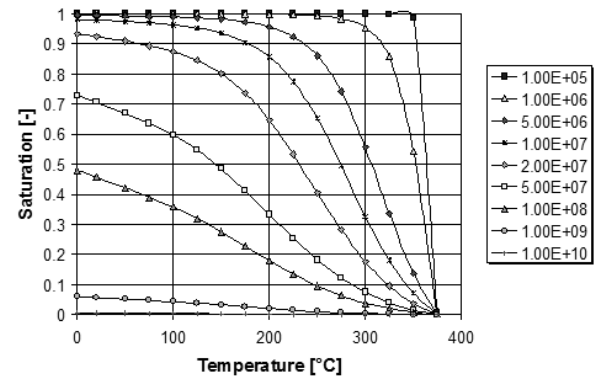


FIG. 4.13 – Isothermes selon la formulation 4.15 en fonction de la température (BHP)

avec $\chi_d(\theta)$ la conductivité thermique du matériau sec, qui dépend de la température de manière linéaire [Harmathy70] :

$$\chi_d = \chi_{do} [1 + A_\chi (\theta - \theta_0)] \quad (4.18)$$

D'autres formules sont aussi couramment utilisées pour la description de la conductivité thermique, notamment celle proposée par l'Eurocode 4 (qui prend en compte aussi l'effet du à la chaleur latente de vaporisation) :

$$\chi(\theta) = 2 - 0.24 \left(\frac{\theta - 273}{120} \right) + 0.012 \left(\frac{\theta - 273}{120} \right)^2 \quad (4.19)$$

La formule 4.19 est valable pour une température allant jusqu'à 1473K [Eurocode4].

La dépendance de 4.19 en fonction de la température est sensée recouvrir la dépendance en fonction de la géométrie. La dépendance de la saturation en liquide est par contre considérée comme négligeable, vue la faible saturation que l'on trouve à haute température.

4.5.2 Chaleur spécifique et capacité thermique

La capacité thermique d'un béton en saturation partielle est exprimée comme une combinaison des capacités thermiques de ses constituants [Schrefler98], [Gawin96] :

$$\rho C_p = (1 - n) \rho^s C_{ps} + n [S \rho^w C_{pw} + (1 - S) (\rho^g C_{pga} + \rho^{gw} (C_{pgw} - C_{pga}))] \quad (4.20)$$

Par simplicité, les capacités thermiques des espèces fluides ont été prises constantes. On a donc $C_{pw} = 4186 JK^{-1}$, $C_{pgw} = 1805 JK^{-1}$ et $C_{pga} = 1005.7 JK^{-1}$.

En ce qui concerne la capacité thermique du solide ρC_{ps} on peut l'approcher à travers une relation linéaire, fonction de la température :

$$\rho C_{ps} = \rho C_{pso} [1 + A_c (\theta - \theta_o)] \quad (4.21)$$

avec $\rho C_{pso} = 940 JK^{-1}$ la capacité thermique du solide à la température de référence θ_o et A_c un coefficient lié au type de ciment utilisé et déterminé expérimentalement.

4.5.3 Perméabilités relatives k_{rw} et k_{rg}

L'expression de la relation pression capillaire-saturation peut être utilisée pour calculer les expressions des perméabilités relatives à l'eau et au gaz. Van Genuchten [Genuchten80] propose l'expression suivante pour décrire la perméabilité relative à l'eau :

$$k_{rw} = \sqrt{S_w} \left(1 - (1 - S_w^{1/m})^m \right)^2 \quad (4.22)$$

avec $m = 1/b$ et b le paramètre présenté dans le tab.4.1. A l'origine, la relation 4.22 était utilisée pour les sols. [Savage97] a montré que cette formulation est applicable aussi aux matériaux à base de ciment. Pour la perméabilité au gaz, on utilise l'expression donnée par [Parker87] :

$$k_{rg} = \sqrt{S_g} (1 - S_w^{1/m})^{2m} \quad (4.23)$$

Les courbes de perméabilités relatives pour les bétons à l'eau et au gaz obtenues respectivement à l'aide des expressions 4.22 et 4.23 et des paramètres issus du tableau 4.1 sont représentés en figure 4.14, 4.15

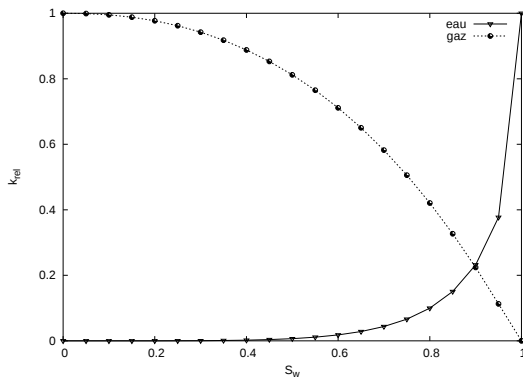


FIG. 4.14 – Perméabilités relatives pour un BO

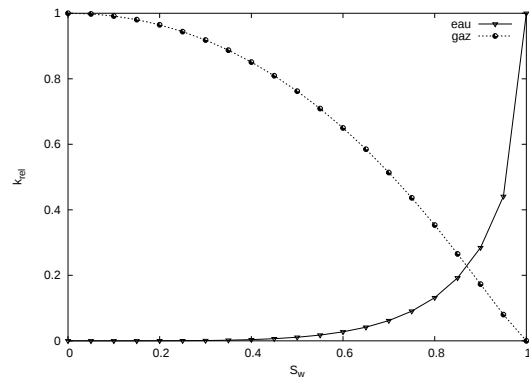


FIG. 4.15 – Perméabilités relatives pour un BHP

On peut remarquer sur ces figures un comportement presque linéaire de la perméabilité relative au gaz en fonction de la saturation en liquide pour chaque matériau. En revanche, la perméabilité relative à l'eau est fortement non-linéaire. En particulier on remarque que les mouvements d'eau liquide deviennent difficiles, voir impossibles, en dessous d'une saturation en eau liquide inférieure d'environ 0.4. Cette dernière valeur peut ainsi être interprétée comme la valeur de la saturation en eau liquide à partir de laquelle la phase liquide devient discontinue dans le milieu poreux.

4.6 Conclusions

Le but de ce chapitre a été de décrire dans les détails la phase solide constituant le béton. Dans la première partie, on a apporté une description synthétique de l'ensemble des réactions chimiques qui sont à l'origine de la formation de la pâte de ciment. Ensuite, la structure poreuse du béton a été décrite à l'aide de deux grandeurs caractéristiques, le rayon propre et le rayon d'accès. La vision a été finalement simplifiée, en revenant à un concept moins compliqué et plus classique de courbe porosimétrique associant une seule taille caractéristique à chaque point du réseau poreux. On a ensuite donné une description de l'évolution de la structure poreuse avec la température ainsi que l'ensemble des lois nécessaires à ce but. On a enfin complété le chapitre en donnant les lois constitutives nécessaires pour la description de la phase solide du milieu poreux. En ce qui concerne les lois liées à la description du comportement mécanique du béton, elles seront données au sein du chapitre 6.

La description de notre milieu poreux à ce point est donc complète. A partir du prochain chapitre, on introduira le modèle mathématique qui a été développé pour décrire et étudier le comportement du béton lors qu'il est soumis à de hautes températures.

Chapitre 5

Modèle Thermo-Hydro-Chimique

5.1 Introduction

Comme on a vu dans les chapitres précédents, les phénomènes mis en jeu lors du chauffage du béton sont divers et complexes. Lors d'une augmentation de la température du béton il se produit tout d'abord une évaporation de l'eau liquide suivie, dans un deuxième temps, par la déshydratation chimique de la pâte de ciment. Ceci a pour conséquence l'apparition d'une source d'eau dans les pores ainsi qu'une évolution de la géométrie du réseau poreux. Par conséquent les propriétés de transport dans le matériau sont affectées soit en terme de transport de masse soit en terme de transport de chaleur. L'élévation de température entraîne aussi des déformations et donc des contraintes dans le squelette qui se traduisent en endommagement de type mécanique et, dans des cas extrêmes, en éclatement explosif. En première approximation, les phénomènes liés à la mécanique sont négligés : le modèle THC que l'on va présenter prend donc en compte tout les phénomènes de transport ainsi que l'évolution des caractéristiques des trois espèces qui forment notre milieu poreux. Le modèle présenté dans ce chapitre est inspiré des travaux réalisés au LAMI [Ferraille00], [Tamagny01] et dont la formulation a été présentée dans [DalPont03], [DalPont04].

5.2 Le modèle mathématique

Le modèle mathématique traite le béton comme un matériau poreux multiphasique, dont les pores sont considérés totalement saturés soit d'eau liquide soit de gaz. En ce qui concerne les équations du modèle, on retrouve un système algebrico-différentiel selon le schéma général proposé au chapitre 2. La simplification de ce système permet d'obtenir un système décrivant le problème ; en particulier on peut distinguer quatre équations différentielles, (conservation de la masse d'air sec, de la masse d'eau et de l'énergie et une équation de description de la cinétique de déshydratation) et des équations algébriques qui prennent en compte la description des phases à l'aide de lois soit constitutives soit d'état.

Le canevas du modèle est inspiré de la formulation proposée par [Mainguy99], complété par les équations nécessaires à la description du béton à haute température. La validation du modèle n'est pas présentée, car, si on néglige ces termes additifs, on obtient des résultats comparable à [Mainguy98] et [Mainguy99].

Comme on a déjà remarqué dans le chapitre 2, toutes les développements sont faits en

faisant l'hypothèse de l'existence d'un VER, qui rend possible une représentation moyenne des phénomènes. Le milieu poreux est vu au niveau macroscopique comme la superposition de quatre espèces continues : le squelette solide, considéré comme rigide, l'eau liquide et le gaz, sous forme d'air sec et d'eau vapeur.

5.2.1 Description de la microstructure

Dans le milieu poreux, l'eau est normalement présente sous forme de liquide condensé ainsi que de vapeur. Les deux phases sont bien séparées et sont supposées non-miscibles. On peut donc écrire pour ce système biphasique des équations d'équilibre qui nous permettent d'établir une relation entre la pression du liquide et de la pression de vapeur (voir la section 3.7.1). En particulier on peut bien définir la pression capillaire comme la différence de la pression du gaz et la pression de la phase liquide :

$$p^c = p^{ga} + p^{gw} - p^w \quad (5.1)$$

L'équation d'équilibre entre la phase liquide et le gaz est ensuite donnée par l'équation de Laplace bien connue :

$$p^g - p^w = 2\sigma(\theta)\chi \quad (5.2)$$

avec χ la courbure de l'interface eau capillaire-gaz dans les pores. Grâce à la courbure et à la tension superficielle de l'interface, la pression de vapeur d'eau à l'équilibre est différente de la pression d'eau liquide : la relation dans ce cas peut être obtenue grâce à l'équation de Kelvin. En gardant l'hypothèse de phase liquide incompressible et gaz parfait, on peut obtenir l'équation comme fonction de la pression saturante d'eau pure (voir eq.5.3) :

$$p^w = p_{sat}(\theta) + \frac{\rho^w R \theta}{M^w} \ln \left(\frac{p^g}{p_{sat}(\theta)} \right) \quad (5.3)$$

La courbure du ménisque est donc dépendante de la teneur en eau i.e. la saturation en liquide. La tension de surface est en plus fonction de la température : lorsque on augmente la température, l'équilibre des phases change.

Il est donc clair qu'une relation qui va lier la pression capillaire p^c avec la saturation S^w et la température θ , s'avère très importante pour la description de la microstructure du milieu poreux. La courbe capillaire est donc la courbe qui nous convient, et qui va décrire le comportement hygro-thermique du béton. Cette relation est en fait l'équation qui, dans le milieu poreux, va lier la taille du pore le plus grand avec la teneur en eau. En particulier cette relation est d'origine expérimentale et est obtenue pour chaque type de béton à l'aide des tests de sorption-désorption (voir [Baroghel94]). Il est aussi clair qu'en augmentant la température, le réseau poreux au sein du béton change et qu'il faut obtenir des relations $p^c - S^w$ pour plusieurs paliers de température. Dans le cadre du modèle THC, l'évolution avec la température a été négligée. En première approximation, et donc dans l'esprit de cette modélisation, il nous a paru suffisant de retenir la relation suivante, valable pour des bétons ordinaires et à haute performance à températures ordinaires :

$$p^c = \frac{\sigma(\theta)}{\sigma(\theta_0)} a (S_w^{-b} - 1)^{(1-\frac{1}{b})} \quad (5.4)$$

avec a and b des coefficients d'origine expérimentale [Baroghel94] (voir chapitre 4). Comme on a déjà remarqué (voir sec.4), dans un milieu poreux comme le béton, les courbes de sorption et désorption ne sont pas identiques car l'on peut observer un phénomène d'hystérésis. Dans le cadre de notre modélisation, ce phénomène a été négligé. La prise en compte de l'hystérésis est toutefois possible en prenant en compte une modélisation plutôt complexe et numériquement coûteuse (voir [Ferraille00]) ou à l'aide de la méthode du réseau neuronal (voir [Gawin01]).

De toute manière, même si le squelette solide est considéré comme rigide et la relation saturation-pression capillaire n'évolue pas, la géométrie du système change lors de la déshydratation. Comme on a déjà plusieurs fois remarqué, la déshydratation est un processus qui détruit la pâte de ciment : la porosité est donc en évolution, et la taille des pores augmente [Herbst89]. Il faut donc déterminer expérimentalement soit la porosité (nommée n) en conditions de référence, soit la porosité en évolution avec la température, ou, mieux, en évolution avec la déshydratation. En particulier dans le cadre de notre modélisation THC la relation proposée par [Ferraille00], [Tamagny01], [DalPont03], [DalPont04], prenant en compte la contraction de Le Chatelier [Folliot82], a été retenue :

$$n = n_0 + 0.72 \cdot 10^{-3} m_{des} \quad (5.5)$$

5.2.2 Équations pour la description des phénomènes chimiques

L'ensemble des phénomènes chimiques qui ont lieu dans le béton lors d'un chauffage a été déjà présenté dans le chapitre 3. On a donc vu que si on maintient un échantillon de pâte de ciment pendant un temps suffisamment long à un palier de température θ donné, la masse d'eau produite atteint une limite que l'on appelle m_{des}^{eq} . Cette valeur est indépendante de la vitesse de montée en température et est considérée comme fonction de la seule température du palier. Il faut donc évaluer de manière expérimentale cet valeur d'équilibre : en particulier le travail de [Pasquero02] a été retenu :

$$\begin{aligned} m_{des}^{eq}(T) = & \exp[-\exp(-0.2662\ln(T - 105) + 2.1478)]H(T - 105) + \\ & \exp[-\exp(-0.1574\ln(T - 300) + 2.2545)]H(T - 300) + \\ & \exp[-\exp(-0.4364\ln(T - 373) + 2.8452)]H(T - 373) \end{aligned} \quad (5.6)$$

avec T la température en Celsius. Si l'on considère une élévation rapide de la température, l'équilibre chimique ne peut pas s'établir et par conséquence $m_{des} \neq m_{des}^{eq}$. Il s'avère donc nécessaire de prendre en compte la cinétique de la réaction chimique c'est à dire de déterminer une loi permettant de déterminer l'évolution de la déshydratation en fonction de l'histoire de température. Encore une fois une relation de ce type est déterminable de manière expérimentale ; on décide alors une fois de plus de retenir une relation proposée par [Ferraille00] :

$$\dot{m}_{des} = -\frac{1}{\tau}(m_{des} - m_{des}^{eq}(T)) \quad (5.7)$$

avec τ le temps caractéristique de la perte de masse dont la valeur a été identifiée à $\tau = 10800s$.

5.2.3 Équations d'état des fluides

La fonction énergétique admettant les variables θ et p comme variables naturelles est l'enthalpie libre. La définition la plus générale possible des équation d'état passe donc à travers la définition de l'enthalpie libre massique pour l'air sec, l'eau vapeur et l'eau liquide. On admet donc généralement un certain nombre d'hypothèses simplificatrices pour éviter de devoir déterminer la formulation complète (et complexe) des enthalpies libres. En ce qui concerne les gaz, on définit des équations d'état en faisant l'hypothèse de gaz parfait. Pour la phase gazeuse π on peut alors écrire :

$$p^\pi = \frac{\rho^\pi \theta}{M_\pi n(1 - S^w)} \quad (5.8)$$

En ce qui concerne la phase liquide, on fait l'hypothèse que l'eau est une substance pure incompressible. On peut donc écrire l'équation d'état pour l'eau liquide à travers l'équation de Kelvin, en faisant l'hypothèse d'égalité des enthalpies libres de l'eau liquide et de l'eau vapeur au moment de la vaporisation ou de la condensation (voir section 3.7.1) :

$$p^{gws} = p^{gws0} \exp \left[-\frac{M_w \Delta H_{gw}}{R} \left(\frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta_0} \right) \right] \quad (5.9)$$

Cette relation est valable dans le cas des phénomènes capillaires i.e. la phase liquide et la phase gazeuse co-existent dans un état d'équilibre.

5.2.4 Équations de conservation des masses

On introduit dans la suite les équations de conservation de masse pour les différentes espèces. On définit tout d'abord la masse par unité de volume de squelette, en faisant l'hypothèse que le solide est complètement saturé par les phases fluides. La masse volumique d'une phase est donc fonction de la porosité et de la saturation de la phase considérée. On obtient donc pour la masse d'eau liquide l'expression suivante :

$$m^w = \rho^w n S_w \quad (5.10)$$

De même la masse d'eau vapeur et la masse d'air peuvent s'écrire :

$$m^{ga} = \rho^{ga} n(1 - S_w) \quad (5.11)$$

$$m^{gw} = \rho^{gw} n(1 - S_w) \quad (5.12)$$

Les équations de conservation de masse font intervenir les champs vecteur flux de masse par unité de surface dans la configuration de référence. En particulier l'équation de conservation de la masse d'eau est importante. Suite à la déshydratation, une quantité appréciable d'eau libre liquide est relâchée dans le béton. Cette quantité doit être prise en compte car il s'agit d'un terme de source d'eau (voir chapitre 3). On peut donc écrire pour la phase liquide :

$$\dot{m}^w - \dot{m}_{des} + \text{div}(J^w + J_g^{gw}) = 0 \quad (5.13)$$

avec m^w l'eau totale par unité de volume de squelette et J_π^α le flux de diffusion massique du constituant α dans la phase π . En ce qui concerne la conservation de l'air sec on peut écrire de la même manière :

$$\dot{m}^{ga} + \text{div}(J_g^{ga}) = 0 \quad (5.14)$$

avec m^{ga} la masse d'air totale par unité de volume de squelette. Comme on a déjà remarqué, le transport des espèces fluides est réglé par la loi de Fick et de Darcy (voir chapitre 3)

5.2.5 Équations de transport de masse

On a déjà vu (chapitre 3) que le transport des fluides est régi par la loi de Darcy (suite à un gradient de pression) et par la loi de Fick (suite à un gradient de concentration de chaque espèce dans un mélange).

5.2.5.1 Loi de Darcy

On rappelle tout d'abord la relation de Darcy tel que l'on a présentée plus haut (eq.3.3) :

$$V = nS_\pi \mathbf{v}^\pi = -\mathbf{K}^\pi \mathbf{grad} p^\pi \quad (5.15)$$

avec V le volume du fluide traversant une unité de surface par unité de temps au gradient de pression p , n la porosité, S_π la saturation de la phase π , $\mathbf{v}^\pi$ (ms^{-1}) la vitesse macroscopique de la phase π et $\mathbf{grad} p^\pi$ le gradient de pression de la phase ($\text{Pa} \cdot \text{m}^{-1}$) et $\mathbf{K}^\pi$ le tenseur défini au chapitre 3.

On peut donc écrire la vitesse de la vapeur en fonction du flux massique :

$$\mathbf{v}^{gw} = J_g^{gw} \left[\frac{1}{\rho^{gw} n (1 - S^w)} \right] \quad (5.16)$$

et la vitesse de l'air :

$$\mathbf{v}^{ga} = J_g^{ga} \left[\frac{1}{\rho^{ga} n (1 - S^w)} \right] \quad (5.17)$$

En ce qui concerne le choix de la formulation (molaire ou massique), la plupart des auteurs ne considèrent pas essentiel le choix en faveur d'une formulation plutôt qu'a d'une autre. [Mainguy99] utilise des considérations de type thermodynamique pour le choix en faveur d'une formulation de type molaire : dans le cadre de cette modélisation on va donc retenir cette dernière formulation. La vitesse moyenne du mélange des gaz $\mathbf{v}^g$ est donnée par une combinaison linéaire de vitesses de l'air et de la vapeur. Si on définit la concentration de l'espèce π dans le gaz par :

$$\frac{p^\pi}{p^{ga} + p^{gw}} \quad (5.18)$$

on peut définir la vitesse moyenne :

$$\mathbf{v}^g = \frac{p^{ga}}{p^{ga} + p^{gw}} \mathbf{v}^{ga} + \frac{p^{gw}}{p^{ga} + p^{gw}} \mathbf{v}^{gw} \quad (5.19)$$

Si on relie les vitesses π aux flux de masses respectifs :

$$\mathbf{v}^\pi = J_\pi^\alpha \left[\frac{1}{\rho^\pi n(1 - S^w)} \right] \quad (5.20)$$

on obtient la loi de Darcy pour le mélange en fonction des flux de masses :

$$\frac{J_g^{ga}}{\rho^{ga}} \frac{p^{ga}}{p^{ga} + p^{gw}} + \frac{J_g^{gw}}{\rho^{gw}} \frac{p^{ga}}{p^{ga} + p^{gw}} = -\mathbf{K}^g \mathbf{grad}(p^{ga} + p^{gw}) \quad (5.21)$$

qui peut réécrite de la manière suivante (voir chapitre 3) :

$$\frac{J_g^{ga}}{\rho^{ga}} \frac{p^{ga}}{p^{ga} + p^{gw}} + \frac{J_g^{gw}}{\rho^{gw}} \frac{p^{ga}}{p^{ga} + p^{gw}} = -\frac{\mathbf{K} k_{rg}}{\eta_g} \mathbf{grad}(p^{ga} + p^{gw}) \quad (5.22)$$

La perméabilité $\mathbf{K}$ et son évolution avec la température est à déterminer de manière expérimentale.

5.2.5.2 Loi de Fick

Dans le cas de la loi de Fick, le moteur est le gradient de concentration du constituant dans le mélange. Le flux relatif de l'air dans le mélange par unité de surface du matériau par unité de temps est $\frac{p^{ga}}{p^{ga} + p^{gw}} n(1 - S^w)(\mathbf{v}^{ga} - \mathbf{v}^g)$. On peut donc écrire la loi de Fick comme :

$$\frac{p^{ga}}{p^{ga} + p^{gw}} n(1 - S^w)(\mathbf{v}^{ga} - \mathbf{v}^g) = -D_a \mathbf{grad} \frac{p^{ga}}{p^{ga} + p^{gw}} \quad (5.23)$$

avec D_a le coefficient de diffusion. En remplaçant avec les flux de masse on peut réécrire :

$$\frac{J_g^{ga}}{\rho^{ga}} - \frac{J_g^{gw}}{\rho^{gw}} = \frac{(p^{ga} + p^{gw})^2}{p^{ga} p^{gw}} D_a \mathbf{grad} \frac{p^{ga}}{p^{ga} + p^{gw}} \quad (5.24)$$

Le coefficient de diffusion D_a est à déterminer de manière expérimentale. En particulier, il peut être considéré comme fonction de la température, de la pression du gaz ainsi que de la saturation, et peut être décrit à travers la relation suivante [Perre90], [Baggio93], [Herbst89], [Selih96] :

$$D_a = n(1 - S^w)^{A_v} D_0 \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^{B_v} \frac{p_0}{p^g} \quad (5.25)$$

avec $D_0 = 2.55 \times 10^{-5} m^2 s^{-1}$, $A_v = 1$ et $B_v = 1.667$. Dans un milieu poreux il faut faire intervenir un autre terme dans la loi de Fick. L'espace poreux étant très complexe, il influence fortement le processus de diffusion. La manière la plus simple de prendre en compte cet effet est à travers d'un coefficient de structure g . Il prend en charge le libre parcours moyen des molécules en diffusion qui augmente à cause de la tortuosité. L'expression proposée par Millington [Millington59] est donc repropagée de la manière suivante :

$$g = n^{1/3} (1 - S^w)^{7/3} \quad (5.26)$$

Un effet "structure" est présent aussi dans l'eq.5.25 : le terme $n(1 - S^w)^{A_v}$ (si on prend $A_v = 1$) peut être interprété comme la partie de volume du matériau occupée par le gaz. L'eq.(5.26) peut donc être interprétée comme le seule terme qui prend en charge le parcours tortueux des molécules en diffusion dans l'espace poreux.

5.2.6 Perméabilité

La perméabilité est la grandeur qui décrit la pénétration d'un gaz ou d'un liquide à travers le milieu poreux suite à un gradient de pression. Gaz et liquide ont bien entendu un comportement différent dans le béton. D'après Muskat and Meres [Muskat36], la perméabilité doit être considérée comme isotrope et réécrite de la manière suivante pour chaque phase π :

$$\underline{k}_\pi = \mathbf{K} k_{r\pi} \quad (5.27)$$

En particulier on appelle $\mathbf{K}$ perméabilité intrinsèque (voir chapitre 3). La perméabilité intrinsèque est une propriété propre du matériau poreux, généralement déterminée grâce à des essais expérimentaux de percolation d'un liquide ou, plus couramment, d'un gaz (voir chapitre 3). Dans le cadre de l'utilisation de la perméabilité dans un modèle mathématique, nous ne sommes pas seulement intéressés par sa valeur en conditions de référence, mais aussi par son évolution avec les caractéristiques du milieu poreux. Il faut donc déterminer une loi qui prend en charge ces variations structurales du béton qui affectent les phénomènes de transport. En général on peut dire que, suite à la dégradation du béton lorsque l'on a une élévation de température, la perméabilité intrinsèque augmente [Herbst89].

On peut bien imaginer que l'évolution de la perméabilité intrinsèque est alors liée à la température : [Herbst89] Schneider and Herbst ont présenté des résultats dans ce sens sur quatre types de béton. Selon [Herbst89], la perméabilité du béton augmente aussi avec l'augmentation de la pression, dans le sens que les micro-fissures qui se forment au sein du béton sont élargies par la pression du gaz qui augmente. Ceci laisse aussi penser que dans la description de l'augmentation de la perméabilité il faut aussi prendre en charge un paramètre décrivant la formation des fissures. Toutefois, dans le cadre de notre modèle THC, les effets liés à la mécanique ne sont pas pris en charge. Pour l'instant on se contente donc des résultats de [Herbst89], approchés par [Gawin99] avec la relation suivante :

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_0 \cdot 10^{A_\theta(\theta - \theta_0)} \left(\frac{p^g}{p_0} \right)^{A_p} \quad (5.28)$$

avec A_θ et A_p des constantes dépendant du type de béton.

En ce qui concerne le terme de perméabilité relative $k_{r\pi}$ introduit dans l'eq.5.27, sa valeur est liée, comme dans la plupart des milieu poreux, à la saturation. On retient la description proposée par Van Genuchten [Genuchten80] :

$$k_{rw}(S^w) = \sqrt{S^w} \left[1 - (1 - S_w^{1/m})^m \right]^2 \quad (5.29)$$

$$k_{rg}(S^w) = \sqrt{1 - S^w} (1 - S_w^{1/m})^{2m} \quad (5.30)$$

avec m un paramètre d'origine expérimentale (voir e.g.[DalPont04]).

5.2.7 Équation de conservation de l'énergie

L'équation de l'énergie retenue pour la formulation THC dérive directement du schéma présenté au chapitre 2 :

$$\dot{e} + \text{div} (h^{ga} J^{ga} + h^{gw} J^{gw} + h^w J^w + \underline{q}(\theta)) = 0 \quad (5.31)$$

h^π étant l'enthalpie définie de la manière suivante :

$$h^\pi = e^\pi + \frac{p^\pi}{\rho^\pi} \quad (5.32)$$

Il nous faut donc donner une définition de l'énergie interne. Nous allons distinguer dans notre matériau les constituants élémentaires : l'air, l'eau vapeur, l'eau liquide, les hydrates, les anhydres et les granulats. On fait donc le choix de définir l'énergie interne par unité de volume du solide comme la somme des énergies internes massiques de chaque constituant fois la masse du constituant.

$$e = m^{ga}e^{ga}(\theta) + m^{gw}e^{gw}(\theta) + m^we^w(\theta) + m_{hyd}e_{hyd}(\theta) + m_{an}e_{an}(\theta) + m_{ag}e_{ag}(\theta) \quad (5.33)$$

On appelle m_{an}^0 et m_{hyd}^0 les masses par unité de volume des anhydres et des hydrates à l'état de référence à la température θ_0 , et m_{an} et m_{hyd} à l'état actuel. m_{an} et m_{hyd} peuvent être exprimés en fonction de la déshydratation : normalement on considère que pour l'hydratation de 100g de ciment on a besoin de 20g d'eau [Folliot82] ; on peut donc écrire :

$$m_{hyd} = m_{hyd}^0 - 6m_{des} \quad (5.34)$$

$$m_{an} = m_{an}^0 + 5m_{des} \quad (5.35)$$

Si dans l'eq.5.33 on introduit les expressions 5.34 et 5.35, on obtient l'équation finale pour l'énergie :

$$e = m^{ga}e^{ga}(\theta) + m^{gw}e^{gw}(\theta) + m^we^w(\theta) + (m_{hyd}^0 - 6m_{des})e_{hyd}(\theta) + (m_{an}^0 + 5m_{des})e_{an}(\theta) + m_{ag}e_{ag}(\theta) \quad (5.36)$$

Cette expression demande la connaissance de l'énergie interne à l'état de référence : comme cette valeur ne peut pas être directement mesurée, il nous faut développer plus loin l'équation 5.36.

Dans le cas de l'évaporation, on a une création de masse d'eau vapeur et, par conséquent, une variation de l'énergie interne :

$$\Delta e = \Delta m_{gw}(e^{gw}(\theta) - e^w(\theta)) \quad (5.37)$$

Si on prend en compte aussi la déshydratation Δm_{des} , on sait que l'eau libre relâchée se transforme soit en eau liquide (Δm^w), soit en eau vapeur (Δm^{gw}) ; l'énergie interne se transforme dans la forme suivante :

$$\Delta e = \Delta m^{gw}e^{gw}(\theta) + (\Delta m_{des} - \Delta m^{gw})e^w(\theta) - 6\Delta m_{des}e_{hyd} + 5\Delta m_{des}e_{an} \quad (5.38)$$

On peut donc réécrire l'équation de l'énergie dans la forme suivante :

$$\begin{aligned} e = m^{ga}e^{ga}(\theta) + m^{gw}e^{gw}(\theta) + m^we^w(\theta) + m_{hyd}^0e_{hyd}(\theta) + m_{an}^0e_{an}(\theta) + m_{ag}e_{ag}(\theta) \\ + m_{des}[-6(e_{hyd}(\theta) - e_{hyd}(\theta_0)) + 5(e_{an}(\theta) - e_{an}(\theta_0)) + e^w(\theta_0)] \\ - m_{des}[6e_{hyd}(\theta_0) - 5e_{an}(\theta_0) - e^w(\theta_0)] \end{aligned} \quad (5.39)$$

Il nous faut la définition des énergies internes des agrégats, des hydrates et des anhydres. On rencontre toutefois le même problème avec la mesure de l'énergie interne à l'état de référence. On néglige tout d'abord l'énergie interne à l'état de référence des agrégats. La différence entre l'énergie interne des hydrates et l'énergie interne des anhydres à l'état de référence donne une constante δ qui peut être déterminée de manière expérimentale [Ferraille00] :

$$\delta = 6e_{hyd}^0 - 5e_{an}^0 - e_0^w = 2.5 \times 10^6 Jkg^{-1} \quad (5.40)$$

δ est donc la quantité d'énergie pour la déshydratation du CSH à température ambiante.

On peut donc écrire la forme finale de l'équation de l'énergie interne :

$$e = m^{ga}e^{ga}(\theta) + m^{gw}e^{gw}(\theta) + m^we^w(\theta) + m_{hyd}^0e_{hyd}(\theta) + m_{an}^0e_{an}(\theta) + m_{ag}e_{ag}(\theta) + m_{des}[-6(e_{hyd}(\theta) - e_{hyd}(\theta_0)) + 5(e_{an}(\theta) - e_{an}(\theta_0)) + e^w(\theta_0)] - m_{des}\delta \quad (5.41)$$

Cette équation est définie à une constante près; la définition de la constante n'est pas nécessaire car nous ne sommes intéressés qu'aux variations de l'énergie interne.

Il nous faut donc définir les énergies internes de chaque espèce formant le béton. Les énergies internes de l'air sec et de l'eau vapeur sont définies en faisant l'hypothèse du gaz parfait :

$$e^{ga}(\theta) = C_{ga}\theta \quad (5.42)$$

$$e^{gw}(\theta) = C_{gw}\theta \quad (5.43)$$

L'énergie interne de l'eau liquide est définie selon [Harmathy70] :

$$\begin{aligned} e^w(\theta) = & 4480(\theta - \theta_0) - 5.86 \times 10^{-7} \left(\frac{1}{\theta - 715} - \frac{1}{\theta_0 - 715} \right) \\ & + 2.652 \times 10^5 \ln \left(\frac{\theta - 715}{\theta_0 - 715} \right) + e_0^w \end{aligned} \quad (5.44)$$

Harmathy [Harmathy70] donne une expression approchée et pour la chaleur massique des composantes des hydrates/anhydres/aggrégats du béton. En faisant l'hypothèse d'un hydrate composé par 75% de CSH par 25% de portlandite [Baroghel94], on peut obtenir les expressions suivantes :

$$e_{hyd}(\theta) = 946.6(\theta - \theta_0) + \frac{0.453}{2}(\theta^2 - \theta_0^2) - 150 \times 10^5 \left(\frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta_0} \right) + e_{hyd}^0 \quad (5.45)$$

L'anhydre est considéré formé par C_2S [Ferraille00]. On peut donc écrire :

$$e_{an}(\theta) = 838.9(\theta - \theta_0) + \frac{252 \times 10^{-4}}{2}(\theta^2 - \theta_0^2) - 14.13 \times 10^6 \left(\frac{1}{\theta} - \frac{1}{\theta_0} \right) + e_{an}^0 \quad (5.46)$$

Baroghel [Baroghel94] donne enfin une expression pour un agrégat :

$$e_{ag}(\theta) = 180(\theta - \theta_0) + \frac{0.09}{2}(\theta^2 - \theta_0^2) + e_{ag}^0 \quad (5.47)$$

5.2.8 Équations de transport de l'énergie

Nous avons introduit dans l'équation de bilan d'énergie interne la grandeur flux de chaleur $\mathbf{q}$ par unité de surface de la configuration de référence. Nous proposons comme la plupart des auteurs de retenir la loi de conduction de Fourier :

$$\mathbf{q} = -\chi \mathbf{grad} \theta \quad (5.48)$$

La conductivité thermique du matériau χ est à déterminer expérimentalement. Par simplicité, dans le cadre de notre modèle THC, χ est considérée comme fonction de la seule température, et en particulier on retient la loi proposée par l'[Eurocode2] :

$$\chi(\theta) = 2 - 0.24 \left(\frac{\theta - 273}{120} \right) + 0.012 \left(\frac{\theta - 273}{120} \right)^2 \quad (5.49)$$

Cette expression est considérée valable pour tous les bétons ; bien sûr il faudrait utiliser des expressions plus spécifiques pour le type de béton que on a utilisé. De toute manière, même avec une expression si générale, on a pu obtenir des résultats acceptables en ce qui concerne la température.

5.2.9 Équilibre du ménisque

L'équilibre du ménisque est caractérisé par un angle de mouillage ainsi que par une tension superficielle. En ce qui concerne l'angle de mouillage on accepte généralement un angle de mouilliance égal à 0 (voir aussi chapitre 3). En ce qui concerne la tension superficielle $\sigma(\theta)$, sa valeur est à déterminer expérimentalement. On retient donc l'expression suivante [Neindre93] :

$$\sigma(\theta) = \sigma_0 \left(1 - \frac{\theta}{\theta_{cr}} \right)^{n_\sigma} \quad (5.50)$$

avec $\sigma_0 = 155.8 \cdot 10^{-3} \text{ Nm}^{-1}$, $\theta_{cr} = 647.3 \text{ K}$, $n_\sigma = 1.26$. Ces valeurs, valables pour l'eau pure, ont été utilisées aussi pour l'eau dans le milieu poreux : selon [Moranville83] l'eau dans le béton est une solution concentrée en sodium, potassium, ions OH^- et Ca^{2+} . On retient toutefois comme acceptable la formulation originale.

5.2.10 Viscosité dynamique

Le système d'équations est enfin complété par des équations décrivant la viscosité dynamique pour chaque espèce fluide.

En ce qui concerne la viscosité dynamique de l'eau liquide, elle est considérée comme fonction de la température [Reid87], [Pezzani92], et est approchée grâce à l'équation de Watson [Thomas95] :

$$\mu_w(\theta) = 0.6612 (\theta - 229)^{-1.562} \quad (5.51)$$

En ce qui concerne le gaz (soit sous forme d'air sec, soit sous forme d'eau vapeur), on fait l'hypothèse d'une dépendance avec la température [Pezzani92], [Ferraille00] :

$$\mu_g(\theta) = 3.85 \times 10^{-8} \theta \quad (5.52)$$

5.3 Le système final

Dans cette section nous rassemblons l'ensemble des équations principales précédemment établies de façon à pouvoir introduire aussi la méthode de résolution ainsi que les conditions initiales et aux limites requises par le système. Ensuite on présentera l'ensemble des constantes et des valeurs de référence qui ont été utilisées dans le modèle.

5.3.1 Équations du modèle

Dans le cadre du modèle on a retenu 11 variables : m_{des} , m^{ga} , e , m^{gw} , m^w , p^{gw} , p^{ga} , p^w , n , S^w et θ .

Le nombre peut être facilement réduit par substitution : on décide toutefois, pour la simplicité de lecture de ne pas réduire le système. Ceci permet aussi assez facilement de remplacer une équation par une autre en cas de nécessité. Dans la définition des conditions initiales et aux limites il n'est toutefois pas nécessaire de donner des valeurs pour toutes les variables : on choisit donc comme variables primaires θ , m_{des} , p^g , p^c . Les autres variables sont assez facilement calculées par substitution.

$$\dot{e} + \text{div} (h^{ga} J^{ga} + h^{gw} J^{gw} + h^w J^w + \underline{q}(\theta)) = 0 \quad (5.53)$$

$$\dot{m}^{ga} + \text{div}(J^{ga}) = 0 \quad (5.54)$$

$$\dot{m}^w - \dot{m}_{des} + \text{div}(J^w + J^{gw}) = 0 \quad (5.55)$$

$$\dot{m}_{des} = -\frac{1}{\tau}(m_{des} - m_{des}^{eq}(\theta)) \quad (5.56)$$

$$e = m^{ga} e^{ga}(\theta) + m^{gw} e^{gw}(\theta) + m^w e^w(\theta) + m_{hyd}^0 e_{hyd}(\theta) + m_{an}^0 e_{an}(\theta) + m_{ag} e_{ag}(\theta) + m_{des} [-6(e_{hyd}(\theta) - e_{hyd}(\theta_0)) + 5(e_{an}(\theta) - e_{an}(\theta_0)) + e^w(\theta_0)] - m_{des} \delta \quad (5.57)$$

$$n = n_0 + 0.72 \cdot 10^{-3} m_{des} \quad (5.58)$$

$$p^c = \frac{\sigma(\theta)}{\sigma(\theta_0)} a_c (S_w^{-b_c} - 1)^{(1-\frac{1}{b_c})} \quad (5.59)$$

$$m^{ga} = \rho^{ga} n (1 - S^w) \quad (5.60)$$

$$m^{gw} = \rho^{gw} n (1 - S^w) \quad (5.61)$$

$$m^w = \rho^w n S^w \quad (5.62)$$

$$p^{gw} = p^{gws}(\theta) \times HR = p^{gws}(\theta) \exp\left(-\frac{p^c M_w}{\rho^w R \theta}\right) \quad (5.63)$$

5.3.2 Constantes et valeurs de référence

Dans cette section, on résume les valeurs des constantes qui ont été utilisées dans les équations du modèle (tableau 5.1).

Constant	Description	Valeur	Référence
α	coefficient d'échange de chaleur	$8[Wm^{-2}K^{-1}]$	-
$A_\theta; A_p$	coefficients de perméabilité	$0.025[-]; 0.368[-]$	[Gawin99]
$A_v; B_v$	coefficients de diffusion	$1[-]; 1.667[-]$	[Forsyth91], [Daian88], [Mason65]
$a_c; b_c$	coefficients des courbes capillaires	$46.9364[MPa]; 2.0601[-]$	[Baroghel94]
C_{ga}	constante énergie de l'air	$717[Jkg^{-1}K^{-1}]$	[ASHRAE]
C_{gw}	constante énergie de l'eau vapeur	$1418[Jkg^{-1}K^{-1}]$	[ASHRAE]
D_0	coefficient de diffusion	$2.55 \times 10^{-5}[m^2s^{-1}]$	[Gawin99]
δ	énergie de déshyd. à l'état de réf.	$2.5 \times 10^6[Jkg^{-1}]$	-
ΔH	enthalpie spécifique d'évaporation	$39583.85[Jmol^{-1}]$	[ASHRAE]
K_0	perméabilité intrinsèque	$2 \times 10^{-17}[m^2]$	-
$m_{hyd}^0; m_{an}^0$	masse par unité de volume	$420[kgm^{-3}]; 0[kgm^{-3}]$	[Baroghel94]
m_{ag}^0	masse par unité de volume	$1400[kgm^{-3}]$	[Baroghel94]
m_{eq}	masse d'eau à équilibre par déshyd.	$210[kgm^{-3}]$	[Ferraille00]
$M_w; M_{gw}$	masse molaire	$0.018[kgmol^{-1}]$	[ASHRAE]
M_{ga}	masse molaire	$0.029[kgmol^{-1}]$	[ASHRAE]
n_0	porosité initiale	$0.1[-]$	-
n_k	constante de la perméabilité relative	$0.51[-]$	[Genuchten80]
n_σ	coefficient de la tension surface	$1.26[-]$	[Neindre93]
p_{atm}	pression atmosphérique	$101325[Pa]$	-
R	constante universelle des gaz parfaits	$8.317[Jmol^{-1}K^{-1}]$	[ASHRAE]
HR	humidité relative	$0.5[-]$	-
ρ_0^w	densité de l'eau à l'état de réf.	$998[kgm^{-3}]$	[ASHRAE]
σ_0	tension de surface à l'état de réf.	$155.8 \times 10^{-3}[Nm^{-1}]$	[Neindre93]
τ	temps carac. de deshydratation	$10800[s]$	[Ferraille00]
θ_∞	température à distance ∞	$293.15[K]$	-
θ_{cr}	temperature critique	$647.15[K]$	-

TAB. 5.1 – Constantes et valeurs de référence

5.4 Méthode de discrétisation en espace

Différentes méthodes de résolution numérique sont envisageables pour résoudre le système algebrico-différentiel d'équations que l'on a présenté : éléments finis, différences finies et volumes finis. Dans le cadre de notre modèle 1D une modélisation aux volumes finis a été choisie. Cette méthode présente l'avantage de respecter parfaitement les équations de conservation et en plus s'adapte assez facilement à des problèmes en deux ou en trois dimensions. La résolution du problème est inspirée de [Mainguy98].

Méthode des volumes finis On note Ω le domaine de calcul 1D représentant l'éprouvette que nous souhaitons étudier. La figure 5.1 illustre la discrétisation de Ω : le domaine est recouvert par un nombre fini de segment p_i que nous appelons par la suite des volumes de contrôle. Les centres x_i des volumes de contrôle sont les points où sont localisées les inconnues discrètes de notre problème. La demi-longueur des volumes de contrôle aux extrémités de Ω permet de garder un pas constant entre les centres x_i .

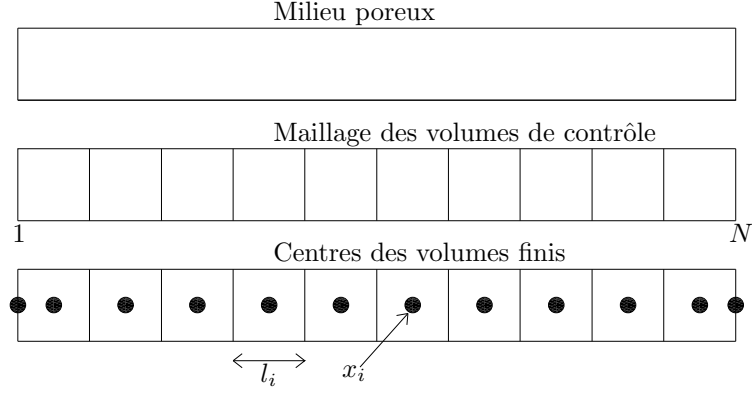


FIG. 5.1 – Discrétisation 1D du domaine Ω

Les conditions aux limites sont imposées sur ces deux volumes de contrôle situés aux extrémités. Pour un volume de contrôle p on introduit les notations suivantes :

- l_i la longueur de volume de contrôle p_i
- N_p le nombre des volumes finis et donc le nombre des centres des volumes finis
- si p_j est un volume de contrôle adjacent à p_i on appelle $v_{ij} = |x_i - x_j|$ la distance entre les centres de ce deux volumes

Les inconnues θ , m_{des} , p^{ga} , p^{gw} , p^c localisées au point x_i du volume de contrôle p_i appartenant au milieu poreux sont notées respectivement θ_i , d_i , p^{ga}_i , p^{gw}_i , p^c_i .

Écriture du schéma de résolution en espace

En tout point du milieu $2 \leq i \leq N_p - 1$ Nous choisissons de procéder à une résolution explicite du système d'équations. Ce choix nous permet de transformer les équations différentielles en un système discrétisé pour $2 \leq i \leq N_p - 1$:

$$\begin{aligned}
 -v\dot{u}_i &= S_{i,i+1}\tilde{h}_{i,i+1}^{ga}J_{i,i+1}^{ga} - S_{i-1,i}\tilde{h}_{i-1,i}^{ga}J_{i-1,i}^{ga} + \\
 &\quad S_{i,i+1}\tilde{h}_{i,i+1}^{gw}J_{i,i+1}^{gw} - S_{i-1,i}\tilde{h}_{i-1,i}^{gw}J_{i-1,i}^{gw} + \\
 &\quad S_{i,i+1}\tilde{h}_{i,i+1}^wJ_{i,i+1}^w - S_{i-1,i}\tilde{h}_{i-1,i}^wJ_{i-1,i}^w + \\
 &\quad S_{i,i+1}q_{i,i+1} - S_{i-1,i}q_{i-1,i}
 \end{aligned} \tag{5.64}$$

$$-v\dot{m}_i^{ga} = S_{i,i+1}J_{i,i+1}^{ga} - S_{i-1,i}J_{i-1,i}^{ga} \tag{5.65}$$

$$\begin{aligned}
 -v(\dot{m}^{ga} - \dot{m}_{des})_i &= S_{i,i+1}J_{i,i+1}^{gw} - S_{i-1,i}J_{i-1,i}^{gw} + \\
 &\quad S_{i,i+1}J_{i,i+1}^w - S_{i-1,i}J_{i-1,i}^w
 \end{aligned} \tag{5.66}$$

$$\dot{m}_{des} = -\frac{1}{\tau}((m_{des})_i - m_{eq}(T)) \quad (5.67)$$

avec S_i la surface de la l'interface i . Les flux massiques sont donnés par les relations suivantes :

$$J_{i,i+1}^{ga} = -\tilde{\rho}_{i,i+1}^{ga} \left[\frac{\tilde{k}_{i,i+1} \tilde{k}^{rg}(S_w)_{i,i+1}}{\tilde{\eta}_{i,i+1}^g} \frac{p_{i+1}^g - p_i^g}{v} + \left(1 + \frac{\tilde{p}_{i,i+1}^{gw}}{\tilde{p}_{i,i+1}^{ga}} \right) g \tilde{D}_{i,i+1} \left(\frac{\tilde{p}_{i,i+1}^{ga}}{\tilde{p}_{i,i+1}^g} \right) \right] \quad (5.68)$$

$$J_{i,i+1}^{gw} = -\tilde{\rho}_{i,i+1}^{gw} \left[\frac{\tilde{k}_{i,i+1} \tilde{k}^{rg}(S_w)_{i,i+1}}{\tilde{\eta}_{i,i+1}^g} \frac{p_{i+1}^g - p_i^g}{v} + \left(1 + \frac{\tilde{p}_{i,i+1}^{ga}}{\tilde{p}_{i,i+1}^{gw}} \right) g \tilde{D}_{i,i+1} \left(\frac{\tilde{p}_{i,i+1}^{ga}}{\tilde{p}_{i,i+1}^g} \right) \right] \quad (5.69)$$

$$J_{i,i+1}^w = -\tilde{\rho}_{i,i+1}^w \left[\frac{\tilde{k}_{i,i+1} \tilde{k}^{rw}(S_w)_{i,i+1}}{\tilde{\eta}_{i,i+1}^w} \frac{p_{i+1}^w - p_i^w}{v} \right] \quad (5.70)$$

$$q_{i,i+1} = -\lambda \frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{v} \quad (5.71)$$

avec $\tilde{x}_{i,i+1} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$.

Conditions initiales et aux limites Le système algebrico-différentiel que l'on a écrit requiert l'imposition de conditions initiales et aux limites pour pouvoir être résolu. Les conditions initiales pour tous les volumes de contrôle sont donc imposées sur les variables principales :

$$\theta^i = \theta_0 \quad (5.72)$$

$$p_0^{ga} + p_0^{gw} = p_0^g \quad (5.73)$$

$$p_0^{ga} = HR \times p_{sat}(\theta_0) \quad (5.74)$$

$$m_{des} = m_{des}^0 \quad (5.75)$$

avec l'indice 0 indiquant les valeurs des variables à l'instant initial.

Les valeurs des autres variables, comme on a déjà remarqué, sont calculées à partir de ces variables par substitution dans les autres équations algébriques.

En ce qui concerne les conditions aux limites, pour le volume 1, i.e. le plus proche de la source de chauffage, on peut écrire des conditions de type Dirichlet pour le gaz (air sec et vapeur), tant pour la face chauffée, que pour la face froide du cylindre. En ce qui concerne la condition aux limites pour l'énergie (i.e. la température), sur la face chauffée on a imposé tout simplement la courbe de montée en température expérimentale :

$$\theta^i = \theta_0 + \dot{\theta} t \quad (5.76)$$

$$p^{ga} + p^{gw} = p_0^g \quad (5.77)$$

$$p^{gw} = HR \times p_{sat}(\theta) \quad (5.78)$$

Pour le volume N , i.e. le volume en contact avec la face froide du cylindre, les conditions aux limites restent les mêmes à l'exception de la condition sur la température : on impose

dans ce cas un échange convectif avec l'ambiante extérieure (condition aux limites de type Cauchy) :

$$q_{n,ext} = \alpha(\theta^i - \theta_{infly}) \quad (5.79)$$

$$p^{ga} + p^{gw} = p_{atm} \quad (5.80)$$

$$p^{gw} = HR \times p_{sat}(\theta) \quad (5.81)$$

α est le coefficient d'échange convectif, dont la valeur a été choisie égale à $8Wm^{-2}K^{-1}$.

5.5 Méthode numérique de résolution

On pose d'abord les notations suivantes. $\underline{X}$ représente ici un vecteur de dimension $N = N_S + 1 + 5 * N_p$ contenant les N variables de notre problème : les N_S valeurs de c_i^j aux noeuds N_j de la couche de surface (j variant de 1 à N_S), la position de la surface $\underline{X}$ et les valeurs des 5 variables $\{\theta\}_i(t)$, $\{d\}_i(t)$, $\{p^{ga}\}_i(t)$, $\{p^{gw}\}_i(t)$ et $\{p^c\}_i$ aux N_p centres des N_p volumes de contrôle dans le milieu poreux (i variant de 1 à N_p).

$\underline{X}' = \frac{d\underline{X}}{dt}$ et $\underline{G}$ sont également des vecteurs de dimension N .

Choix d'une méthode numérique Notre problème complet et son évolution au cours du temps se décrivent à travers 5.82

$$\underline{G}(t, X, X') = 0 \quad (5.82)$$

et à travers les conditions initiales à $t = 0$:

$$\underline{X}(t = 0) = \underline{X}_0 \text{ et } \underline{X}'(t = 0) = \underline{X}'_0$$

Nous devons donc résoudre un système d'équations aux dérivées partielles. Ce système fait intervenir des coefficients fortement non-linéaires. Une méthode logique dans ce cas de figure consiste à utiliser un schéma implicite de type Newton-Raphson pour la discrétisation en temps et il faut pouvoir calculer analytiquement la matrice jacobienne du système, chose qui n'est pas aisée dans notre cas vu le nombre de paramètres de formulation complexe intervenant dans les équations (η^w , D^w , ...)

Nous avons donc choisi d'utiliser un algorithme de résolution souvent employé dans ce cas de figure ([Price97]) : la procédure DASSL (Differential Algebraic System Solver) qui a été développée en langage FORTRAN par [Petzold83] intégrant à la fois le calcul numérique de la matrice jacobienne et la détermination automatique du pas de temps.

Présentation de la méthode DASSL [Gear71] propose d'utiliser la formule de différenciation arrière pour obtenir une approximation de X' dans 5.82. Par exemple, la formule d'ordre 1 (formule d'Euler arrière) s'écrit avec un pas de temps $dt_{n+1} = t_{n+1} - t_n$,

$$\underline{G}\left(t_{n+1}, \underline{X}_{n+1}, \frac{\underline{X}_{n+1} - \underline{X}_n}{dt_{n+1}}\right) = 0 \quad (5.83)$$

Cette relation doit être résolue en $\underline{X}_{n+1}$ à chaque pas. La solution de 5.83 est unique si la matrice jacobienne

$$\frac{\partial \underline{G}}{\partial \underline{X}'} + dt_{n+1} \frac{\partial \underline{G}}{\partial \underline{X}}$$

n'est pas singulière.

DASSL utilise des formules de différenciation similaires ou en augmentant l'ordre de l'incrément (jusqu'à l'ordre 5) et choisit la formule et le pas de temps les plus adaptés à l'évolution de la solution $\underline{X}$. Une variante de la méthode de Newton est utilisée pour résoudre le système d'équations 5.83 à chaque pas de temps. Après avoir fait un choix initial pour $\underline{X}_{n+1}^{(0)}$, on détermine la valeur à l'incrément $m+1$ par $\underline{X}_{n+1}^{(m+1)} = \underline{X}_{n+1}^{(m)} + c d\underline{X}_{n+1}^{(m)}$, où $d\underline{X}_{n+1}^{(m)}$ est la solution de la relation 5.83 appliquée en $\underline{X}_{n+1}^{(m+1)}$ et qui fait intervenir la matrice jacobienne $\underline{J}$ (calculée par différence finie).

$$\underline{G} d\underline{X}_{n+1}^{(m)} = F \left(t_{n+1}, \underline{X}_{n+1}^{(m)}, \frac{\underline{X}_{n+1}^{(m+1)} - \underline{X}_n}{dt} \right) = 0$$

c est enfin un scalaire permettant l'accélération du processus.

Le choix d'une solution est alors fait par rapport à un critère de convergence fondé sur la norme du vecteur et sur le poids relatif à accorder à chaque composante du vecteur $\underline{X}$. L'utilisateur doit préciser deux scalaires $RTOL_i$ et $ATOL_i$ qui représentent respectivement les erreurs relative et absolue tolérable sur la composante X_i . Il est d'usage de définir $RTOL_i = 10^{-(k_i+1)}$ où k_i est le nombre de chiffres significatifs souhaité pour la composante X_i et $ATOL_i$ comme la valeur pour laquelle on peut négliger $|X_i|$.

Des précisions supplémentaires sur les techniques numériques utilisées par DASSL peuvent être trouvées dans [Lee93].

5.6 Conclusions

Le travail que l'on a présenté dans ce chapitre a nous permis d'introduire une première approche au problème d'un béton en température. Le modèle de type THC nous a permis de donner une première description qualitative des phénomènes qui ont lieu dans le béton lorsqu'il est soumis à une élévation de température. Le transfert de chaleur, le transport d'eau liquide/vapeur et d'air sec ainsi que les changements de phase et les phénomènes capillaires ont été pris en charge. La variation des propriétés des différentes espèces qui forment le béton avec la température, a été prise en compte à travers des expressions de type phénoménologique validées dans la littérature. Ceci nous a permis d'aboutir à une description de notre milieu poreux qui, comme on le verra au chapitre 7, s'accorde bien aux résultats expérimentaux.

Le pas suivant dans notre étude sera donc d'introduire l'ensemble des phénomènes liés à la mécanique et en particulier les effets liés à l'endommagement ainsi qu'une implémentation des équations aux éléments finis. Ceci sera donc le but du chapitre suivant.

Chapitre 6

Modèle

Thermo-Hydro-Chémo-Mécanique

6.1 Introduction

Dans les chapitres précédents on a plusieurs fois mis en évidence l'ensemble des phénomènes qui ont lieu dans le béton lorsqu'il y a une élévation de température. Dans le chapitre 5, à l'aide d'un modèle THC, on a souligné l'importance des phénomènes de changement de phase ainsi que des phénomènes de déshydratation (et donc les conséquences sur la microstructure du béton) et de transport. Il faut toutefois remarquer que l'élévation de température engendre dans le béton des contraintes et des déformations. Il s'avère donc nécessaire de prendre en considération des phénomènes liés à la mécanique et, donc, le passage d'un modèle THC vers un modèle thermo-hydro-chémo-mécanique ou THCM. Le modèle que l'on propose dans la suite prendra donc en compte les effets liés aux phénomènes mécaniques à l'aide d'une loi constitutive élastique endommageable. En particulier, en ce qui concerne l'endommagement, celui-ci est proposé comme une combinaison entre l'endommagement mécanique (selon la formulation classique de Mazars) et un endommagement que l'on appellera thermo-chimique, lié à la dégradation de la pâte de ciment suite aux réactions chimiques qui se produisent. Il est évident que l'endommagement est important vis-à-vis des phénomènes de transport ; la microfissuration de la pâte de ciment que l'on observe lorsqu'on chauffe le béton, a une forte influence sur la perméabilité et, en général, sur les phénomènes de transport qui ont lieu au sein du milieu poreux.

Le modèle présenté dans ce chapitre est inspiré des travaux réalisés par [Schrefler98], [Gawin02], [Gawin03], développés dans le cadre du projet BRITE Euram III "HITECO" EU [Hiteco].

6.2 Le modèle mathématique

Le béton est un matériau poreux multiphasique dont les vides sont remplis d'eau et d'air. La phase liquide est formée par de l'eau liée (appelée aussi eau adsorbée) présente dans tout le milieu et par de l'eau capillaire (appelée aussi eau libre). La phase gazeuse est un mélange supposé idéal d'air sec et d'eau vapeur (condensable) ; pour les deux espèces on garde l'hypothèse d'un gaz parfait.

Le modèle mathématique est basé sur des équations de bilan : de masse du squelette, de masse d'air sec, de masse d'eau (soit sous forme liquide, soit sous forme gazeuse), d'enthalpie (avec la prise en compte des effets chaleur latente et des effets de l'hydratation) et d'équilibre du moment linéaire. L'équation de bilan de la masse d'eau prend aussi en compte les phénomènes de changement de phase i.e. évaporation-condensation, adsorption-désorption, hydratation-déshydratation. Le système d'équations que l'on présentera dans la suite est basé sur le système général que l'on a introduit au chapitre 2. On avait déjà remarqué que le système était d'une validité générale pour la description d'un milieu poreux quelconque ; il nous faut donc introduire des équations d'état et des équations phénoménologiques pour la description du matériau béton.

Les équations locales du modèle sont, bien entendu, données en fonction des variables d'état que l'on a choisies. Ce choix est particulièrement important : d'un point de vue pratique il faut être capable de mesurer les variables assez facilement. D'un point de vue théorique, les variables doivent décrire de manière unique l'état thermodynamique local du milieu poreux. En plus, elles doivent garantir une bonne performance numérique du code de calcul. Pour le modèle THCM nous commençons par retenir les mêmes variables d'état que le modèle THC, la température θ , la pression capillaire p_c , la pression du gaz p_g , la déshydratation m_{des} , auxquelles il faut ajouter des variables d'état pour décrire l'état mécanique du squelette. La première variable que l'on retient est la déformation ϵ du squelette ; on verra dans la suite que la définition d'autres variables internes s'avère nécessaire pour la description du comportement élasto-endommageable.

Avant de présenter les équations du système, on introduit tout d'abord des notions qui nous permettront d'introduire et d'étudier l'endommagement dans le béton ainsi que de décrire le comportement mécanique du béton.

6.3 L'endommagement

On définit comme endommagement le phénomène qui désigne la détérioration plus ou moins progressive d'un matériau due à l'apparition et au développement de micro-vides et micro-fissures. La théorie de l'endommagement a été proposée à l'origine par [Kachanov58] et [Rabotnov68] : d'après eux, la détérioration d'un matériau peut être prise en compte à travers la description de la variation des seules caractéristiques élastiques du matériau. En d'autres termes, les variations de rigidité élastique sont les indicateurs du niveau d'endommagement au sein du matériau. La mécanique de l'endommagement a été ensuite développée notamment par [Lemaitre78] pour les matériaux métalliques, par [Lemaitre82], [Mazars84] et [Mazars89] pour les bétons et encore par [Lavedeze86] pour les matériaux multi-couches. Dans tout les cas, le matériau peut être décrit à l'aide d'un système de variables et d'un potentiel thermodynamique. Il faut donc choisir de manière adéquate les variables d'endommagement et le potentiel.

Étant donné la complexité des modèles d'endommagement anisotrope, comparés aux modèles isotropes (soit d'un point de vue de la calibration du modèle, soit d'un point de vue de l'implémentation numérique), on prendra en compte l'endommagement en tant que variable scalaire (isotrope). Il est important de noter que ce choix ne compromet pas la prise en compte d'un comportement différent en traction et en compression.

Par la suite nous allons développer les aspects suivants :

- Définitions et mesures de l'endommagement
- Description (thermodynamique) du comportement mécanique du matériau endommagé
- Formulation et évolution des variables qui définissent l'endommagement

6.3.1 Définition et mesure de l'endommagement

En premier lieu il nous faut définir la variable endommagement. La difficulté de sa définition repose sur le fait que l'endommagement n'est pas directement mesurable : il nous faut donc tout d'abord introduire des procédures pour sa mesure ; à partir de la méthode d'évaluation, on pourra donner une définition de l'endommagement. D'après [Mazars89] on peut indiquer les définitions suivantes :

- Observation de la microstructure : on peut donner une définition de l'endommagement à partir de l'observation de défauts irréversibles. Les problèmes que l'on rencontre lorsqu'on utilise cette définition, sont liés au fait que ces mesures sont destructives, que l'observation des défauts est complexe et que la quantification doit être faite en fonction des variables macroscopiques utilisables dans les calculs. D'un point de vue mécanique, on peut quantifier à travers l'estimation de la surface effective i.e. la surface résistante, sujette à une réduction à cause de l'augmentation des défauts. On peut alors écrire l'endommagement associé à la direction n :

$$D_n = \frac{S_D}{S} \quad (6.1)$$

avec S_D la surface effective et S la surface du matériau vierge, perpendiculairement à n . D_n est égal à 0 pour le matériau vierge et égal à D_{cr} la rupture (pour les métaux, par exemple, $0.2 < D_{cr} < 0.8$).

- Changement de paramètres physiques : on peut encore définir la variable endommagement à travers la mesure du changement de certaines variables. En particulier :
 - Changement de densité
 - Changement de conductibilité électrique
 - Changement de la vitesse de propagation d'ondes ultra-sonores
 - Changement du comportement mécanique : ce type de mesure est particulièrement important car il permet d'introduire le concept de contrainte effective. "Un volume de matériau endommagé et sujet à la contrainte σ , montre la même réponse que le matériau vierge soumis à la contrainte effective $\tilde{\sigma}$ " [Mazars89], où :

$$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{1 - D} \quad (6.2)$$

La mesure de l'endommagement à travers le concept de contrainte effective a été utilisée sous plusieurs conditions, et en particulier dans le cas d'une rupture ductile [Lemaitre85]. En ce qui concerne ce dernier cas, on peut donner une définition de l'endommagement en se reportant à la variation du module de Young E . On peut donc écrire :

$$\sigma = \tilde{E} \epsilon_e \quad \tilde{\sigma} = E \epsilon_e \quad (6.3)$$

on obtient donc :

$$\tilde{\sigma} = \frac{E}{\tilde{E}} \sigma = \frac{\sigma}{1 - D} \rightarrow D = 1 - \frac{\tilde{E}}{E} \quad (6.4)$$

6.3.2 Approche thermodynamique

On présente dans le paragraphe l'approche proposée par [Mazars89], dérivée de la formulation générale de [Lemaitre85] sous les hypothèses des petites déformations et d'écrouissage isotrope. La variable d'endommagement est le scalaire D , qui sera considéré comme une variable d'état. La loi d'évolution de D , qui sera présentée au paragraphe 6.3.2.2, est classiquement déduite d'une approche à l'aide d'un potentiel de dissipation local. On considère la loi d'évolution locale généralement inadaptée à la description de l'endommagement. Dans le paragraphe 6.3.3 une approche non locale pour la description de l'évolution de l'endommagement sera donnée.

6.3.2.1 Potentiel thermodynamique

Ayant défini les variables d'état, on postule l'existence d'un potentiel thermodynamique duquel dérivent les lois d'état. On peut choisir différents potentiels ; d'après [Lemaitre85] on choisit d'introduire le potentiel énergie libre spécifique ¹ Ψ qui dépend des variables d'état observables et des variables internes :

$$\Psi = \Psi(\epsilon, \epsilon^p, \theta, D, m_{des}, V_k) \quad (6.5)$$

avec ϵ^p la déformation plastique et V_k désignant les autres variables internes comme les variables d'écrouissage par exemple. La prise en compte de la déshydratation m_{des} parmi les variables d'état complique considérablement l'expression. On fait alors l'hypothèse que l'on a un équilibre chimique à tout moment i.e. $m_{des} = m_{eq}(T)$ (voir chapitre 3). Le potentiel 6.5 peut être donc écrit comme $\Psi = \Psi(\epsilon, \epsilon^p, \theta, D, V_k)$. On admet ici pour simplifier que la dépendance de Ψ en ϵ et ϵ^p ne se fait que par l'intermédiaire de $\epsilon^e = \epsilon - \epsilon^p$ (on admet en outre que l'expression de Ψ par rapport à ϵ^e est symétrique sur les composantes ϵ_{ij}^e et ϵ_{ji}^e).

Le deuxième principe de la thermodynamique implique que la dissipation totale Φ soit toujours positive, ou, pour un processus réversible, égale à 0. On peut alors écrire :

$$\Phi = \sigma : \dot{\epsilon} - \rho s \dot{\theta} - \rho \dot{\Psi} + \frac{\mathbf{q}}{\theta} \cdot \mathbf{grad} \theta \geq 0 \quad (6.6)$$

On peut généralement distinguer la dissipation totale comme somme de deux termes, la dissipation intrinsèque Φ_1 :

$$\Phi_1 = \sigma : \dot{\epsilon} - \rho s \dot{\theta} - \rho \dot{\Psi} \quad (6.7)$$

et la dissipation thermique Φ_2 :

$$\Phi_2 = \frac{\mathbf{q}}{\theta} \cdot \mathbf{grad} \theta \quad (6.8)$$

On peut alors écrire :

$$\Phi_1 + \Phi_2 \geq 0 \quad (6.9)$$

De manière classique, on fait l'hypothèse que chaque terme de l'inégalité 6.9 est positif, i.e. :

$$\Phi_1 \geq 0 \quad \Phi_2 \geq 0 \quad (6.10)$$

L'inégalité 6.9, qui résulte des deux principes de la thermodynamique, est le point de départ de la formulation des lois de comportement du milieu poreux. Elle est appelée l'inégalité fondamentale de Clausius-Duhem.

¹spécifique signifie *par unité de masse*

Si on exprime la variation du potentiel Ψ de la manière suivante :

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi}{\partial \epsilon^e} : \dot{\epsilon}^e + \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} : \dot{\theta} + \frac{\partial \Psi}{\partial D} : \dot{D} + \frac{\partial \Psi}{\partial V_k} : \dot{V}_k \quad (6.11)$$

on peut écrire, à l'aide de l'inégalité de Clausius-Duhem la relation suivante, qui nous permet d'exprimer les lois de comportement du milieu :

$$\left(\sigma - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \epsilon^e} \right) : \dot{\epsilon}^e + \sigma : \dot{\epsilon}^p - \rho \left(s + \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) : \dot{\theta} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial D} : \dot{D} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial V_k} : \dot{V}_k - \frac{\mathbf{q}}{\theta} \cdot \mathbf{grad} \theta \geq 0 \quad (6.12)$$

pour toute évolution possible de $\dot{\epsilon}^e$, $\dot{\epsilon}^p$, $\dot{\theta}$, $\dot{V}_k$, $\mathbf{q}$.

Si on considère la dissipation intrinsèque, le jeu de variables d'état étant supposé indépendant, on peut imaginer une transformation, par exemple, élastique, à température constante ($\dot{\theta} = 0$), qui ne modifie ni la déformation plastique ($\dot{\epsilon}^p = 0$) ni les variables internes ($\dot{V}_k = 0$, $\dot{D} = 0$). L'inégalité de Clausius-Duhem doit être vérifiée quel que soit $\dot{\epsilon}^e$; cela implique :

$$\sigma = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \epsilon^e} \quad (6.13)$$

Classiquement, de manière similaire, on obtient :

$$s = - \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \quad (6.14)$$

La variable duale Y associée à l'endommagement D est donc définie comme :

$$Y = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial D} \quad (6.15)$$

Enfin, par analogie, on définit les variables duales forces thermodynamiques associées aux variables internes V_k par :

$$A_k = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial V_k} \quad (6.16)$$

De manière classique, on peut faire l'hypothèse de découplage entre les effets représentés par les variables V_k et les effets d'élasticité associés à l'endommagement. On peut alors écrire le potentiel de la manière suivante :

$$\Psi = \Psi_e(\epsilon^e, \theta, D) + \Psi_p(\theta, V_k) \quad (6.17)$$

En particulier, d'après [Lemaitre85] on peut, dans le cadre de l'élasticité linéaire, exprimer le potentiel Ψ_e de la manière suivante :

$$\Psi_e = \frac{1}{2\rho} (1 - D) \mathbf{\Lambda} : \epsilon^e : \epsilon^e \quad (6.18)$$

avec $\mathbf{\Lambda}$ le tenseur d'ordre 4 de rigidité du matériau vierge. La donnée de ce potentiel permet d'écrire les lois de thermo-élasticité du matériau endommagé. En particulier :

$$\sigma = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \epsilon^e} = (1 - D) \mathbf{\Lambda} : \epsilon^e \quad \text{ou} \quad \sigma = \tilde{\mathbf{\Lambda}} : \epsilon^e \quad (6.19)$$

La variable Y associée à l'endommagement D est définie comme :

$$Y = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial D} = -\frac{1}{2} \mathbf{\Lambda} : \boldsymbol{\epsilon}^e : \boldsymbol{\epsilon}^e \quad (6.20)$$

En particulier, [Lemaitre85] montre que la quantité $-Y$ peut être reliée à l'énergie élastique w_e engendrée par une variation d'endommagement à contrainte et température constantes à travers la relation suivante :

$$-Y = \frac{w_e}{1 - D} \quad (6.21)$$

La variable Y peut être spécifiée dans des cas particuliers. On nomme $\boldsymbol{\sigma}^d$ et $\boldsymbol{\epsilon}_e^d$ les déviateurs de $\boldsymbol{\sigma}$ et $\boldsymbol{\epsilon}_e$, σ_H et ε_H la contrainte et la déformation hydrostatiques (on rappelle que par exemple $3\sigma_H = \text{tr}(\boldsymbol{\sigma})$) et on introduit les lois d'élasticité linéaire couplée à l'endommagement :

$$\boldsymbol{\epsilon}_e^d = \frac{1 + \nu}{E} \frac{\boldsymbol{\sigma}^d}{1 - D} \quad \varepsilon_t = \frac{1 - 2\nu}{E} \frac{\sigma_H}{1 - D} \quad (6.22)$$

Si on rappelle les relations 6.20 et 6.21, on peut définir l'énergie de déformation élastique totale w_e de la manière suivante :

$$w_e = \frac{1}{2} \left(\frac{1 + \nu}{E} \frac{\boldsymbol{\sigma}^d : \boldsymbol{\sigma}^d}{1 - D} + 3 \frac{1 - 2\nu}{E} \frac{\sigma_H^2}{1 - D} \right) \quad (6.23)$$

Si on introduit la contrainte équivalente de Von Mises ($\sigma_{eq} = (\frac{3}{2} \boldsymbol{\sigma}^d : \boldsymbol{\sigma}^d)^{1/2}$), on peut écrire une expression pour Y :

$$-Y = \frac{\sigma_{eq}^2}{2E(1 - D)^2} \left[\frac{2}{3} (1 + \nu) + 3 (1 - 2\nu) \left(\frac{\sigma_H}{\sigma_{eq}} \right)^2 \right] \quad (6.24)$$

Il faut maintenant compléter la loi constitutive en donnant une relation permettant de déterminer les taux d'évolution des variables internes $\dot{D}$, $\dot{V}_k$ et le flux de chaleur $\mathbf{q}$. Ci-dessous on présentera l'approche classique pour obtenir ces lois d'évolution dans un cadre de comportement local. Mais on sait bien que cette hypothèse de type local est mal adaptée à la description de l'évolution de l'endommagement. Dans le paragraphe 6.3.3 nous présenterons donc des propositions pour une loi d'évolution non-locale de D .

6.3.2.2 Potentiel de dissipation

Si on suppose que la loi d'évolution de l'endommagement est locale, on peut utiliser l'approche classique à l'aide de la dissipation intrinsèque φ_d , fonction scalaire convexe des variables flux, les variables d'état pouvant intervenir comme paramètres :

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p - Y \dot{D} - A_k \dot{V}_k - \varphi_d(\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p, \dot{V}_k, \dot{D}) = 0 \quad (6.25)$$

Remarque Compte tenu des lois d'état et sous l'hypothèse du découplage entre dissipation intrinsèque et thermique, le second principe de la thermodynamique impose que la dissipation intrinsèque soit positive pour chaque évolution possible i.e. $\varphi_d > 0$. On admet que le phénomène d'écoulement plastique peut intervenir sans endommagement, de même le phénomène d'endommagement peut intervenir sans écoulement plastique ; on peut alors séparer les contributions et écrire :

$$-Y\dot{D} > 0 \quad (6.26)$$

$-Y$ étant positive, on peut écrire $\dot{D} > 0$. L'endommagement tel qu'on l'a écrit ne peut donc que croître ou rester constant.

De manière classique, on peut faire l'hypothèse de l'existence d'un potentiel de dissipation (ou pseudo-potentiel) $\varphi(\dot{\epsilon}^p, \dot{V}_k, \dot{D})$. Cette fonction convexe à valeur scalaire est fonction de toutes les variables flux, les variables observables intervenant comme paramètres.

Remarque La dissipation et le pseudo-potentiel coïncident dans le cas où la dissipation est une fonction positivement homogène de degré 1 des variables $\dot{\epsilon}^p, \dot{D}, \dot{V}_k$ (autrement dit : les phénomènes qui sont mis en cause ne sont pas dépendants du temps i.e. on néglige la viscosité). La puissance dissipée est alors un pseudo-potentiel et on peut obtenir l'évolution des variables en faisant varier de manière indépendante les variables flux pour obtenir les lois complémentaires relatives à la dissipation. Supposons que l'on remplace, par exemple, $\dot{\epsilon}^p$ admissible par $\dot{\epsilon}^p + \delta\dot{\epsilon}^p$ admissible ($\forall \delta > 0$). La relation 6.26 peut s'écrire :

$$\sigma : \dot{\epsilon}^p - Y\dot{D} - A_k\dot{V}_k - \varphi(\dot{\epsilon}^p, \dot{V}_k, \dot{D}) + \left(\sigma - \frac{\partial\varphi}{\partial\dot{\epsilon}^p}\right)\delta\dot{\epsilon}^p = 0 \quad (6.27)$$

On obtient alors la relation suivante :

$$\sigma = \frac{\partial\varphi}{\partial\dot{\epsilon}^p} \quad (6.28)$$

De la même manière, on peut imaginer une variation des autres variables flux ; on peut donc obtenir :

$$A_k = -\frac{\partial\varphi}{\partial\dot{V}_k} \quad Y = -\frac{\partial\varphi}{\partial\dot{D}} \quad (6.29)$$

La transformation de Legendre-Fenchel partielle permet d'associer à une fonction $f(x)$ une fonction duale $f^*(X)$ définie de la manière suivante :

$$f^*(X) = xX - f(x) \quad (6.30)$$

avec X la variable duale de x , définie comme $X = \frac{\partial f}{\partial x}$. Si la fonction f^* est dérivable, le théorème affirme que :

$$x = \frac{f^*(X)}{X} \quad (6.31)$$

L'association des variables $\dot{\epsilon}^p, \dot{V}_k, \dot{D}$ aux variables duales σ, A_k, Y , nous permet donc de passer du potentiel $\varphi(\dot{\epsilon}^p, \dot{V}_k, \dot{D})$ au potentiel dual $\varphi^*(\sigma, A_k, Y)$:

$$\varphi^*(\sigma, A_k, Y) = \sigma : \dot{\epsilon}^p - Y\dot{D} - A_k\dot{V}_k - \varphi(\dot{\epsilon}^p, \dot{V}_k, \dot{D}) \quad (6.32)$$

Il s'en suit que, si la fonction φ^* est dérivable, on peut exprimer l'évolution des variables dissipatrices de la manière suivante :

$$\dot{\epsilon}_p = \frac{\partial \varphi^*}{\partial \sigma} \quad \dot{V}_k = -\frac{\partial \varphi^*}{\partial A_k} \quad \dot{D} = -\frac{\partial \varphi^*}{\partial Y} \quad (6.33)$$

Le bilan des puissances dissipées peut être illustré par un cycle de contrainte de traction selon le schéma en figure 6.1. En particulier, la courbe OA'B' représente l'évolution de l'écroutissage A_k pendant l'écoulement plastique OAB. Les parties AB et BC sont respectivement le fluage plastique et l'augmentation de la déformation élastique pendant le processus d'endommagement (on suppose une contrainte constante). L'énergie totale dissipée se divise en :

1. l'énergie accumulée par le système à travers l'écroutissage $A_k dV_k$
2. l'énergie dissipée sous forme de chaleur
3. l'énergie libérée par le système pendant l'endommagement $Y \delta D$

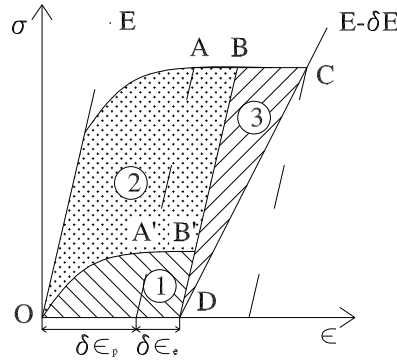


FIG. 6.1 – Schéma de la dissipation suite à l'écoulement plastique et à la croissance de l'endommagement [Mazars89]

L'énergie accumulée par le système est le travail fait à partir du point limite d'élasticité : ceci est une conséquence des hypothèses simplificatrices que l'on a choisies (écrouissage isotropique). D'après [Lemaitre85] si l'on considère une formulation plus complète, on trouve de l'énergie additionnelle qui est convertie en chaleur.

6.3.3 Évolution de la variable endommagement : formulation non-locale

D'après [Bazant87], il est envisageable de donner une formulation moyenne de la loi d'évolution de l'endommagement présentée ci-dessus. Une formulation de ce type s'avère en fait plus appropriée pour la description de la localisation de la fissuration dans un matériau élastique. Une variable non-locale est en fait mieux adaptée pour décrire les changements de la microstructure par rapport à une variable locale. [Bazant87] propose donc une relation constitutive qui prévoit une moyenne de la variable qui contrôle l'endommagement au lieu d'une moyenne de l'endommagement.

Dans la suite on présente deux modèles scalaires non-locaux qui s'adaptent bien à la description du comportement du béton et qui décrivent l'évolution de la variable endommagement. En particulier, on fera l'hypothèse que le matériau garde un comportement élastique et isotrope. Les différences entre les deux relations constitutives concernent les différentes définitions de la fonction de charge et de la définition de la variable qui contrôle l'endommagement.

6.3.3.1 Formulation énergétique

Dans ce première modèle, on considère l'endommagement contrôlé par le taux d'énergie libérée. On ne considère pas une distinction entre l'endommagement en traction et en compression : le module de la résistance du matériau est donc le même soit en traction soit en compression.

On définit donc de la manière suivante la fonction de charge f :

$$f(\bar{Y}, D) = \int_0^{\bar{Y}} F(z) dz - D \quad (6.34)$$

avec F une fonction du tenseur de déformation, déduite de manière phénoménologique. On souligne que la fonction de charge ne dépend pas simplement du taux d'énergie locale relâchée $Y(x)$: la dépendance est par rapport au taux d'énergie relâchée moyen $\bar{Y}(x)$, l'énergie moyenne libérée suite à l'endommagement à la position x :

$$\bar{Y}(x) = \frac{1}{V_r(x)} \int_V \Psi(x-s) Y(s) dv \quad \text{avec} \quad V_r(x) = \int_V \Psi(x-s) dv \quad (6.35)$$

avec V le volume du solide. $\Psi(x-s)$ est la fonction poids à travers laquelle on peut obtenir la moyenne :

$$\Psi(x-s) = \Psi_0 \exp\left(-\frac{\|x-s\|^2}{2l_c^2}\right) \quad (6.36)$$

$Y(s)$ est le taux d'énergie locale relâchée suite à l'endommagement au point s :

$$Y(s) = \frac{1}{2} \epsilon(s) : E : \epsilon(s) \quad (6.37)$$

l_c est la longueur caractéristique de support de Ψ (autrement dit : la dimension de la fenêtre d'observation, voir chapitre 2) et Ψ_0 est un facteur de normalisation. Ce dernier est choisi de façon telle que si on considère un corps infini, on obtient $V_r(x)=1$. La longueur caractéristique de support de Ψ est fonction des hétérogénéités dans le matériau : généralement on considère $l_c \approx 3d_a$ avec d_a est la taille maximale de l'agrégat du béton.

Il nous faut donc définir une loi d'évolution de l'endommagement. Dans le cas d'un béton, [Pesavento00] propose la relation suivante :

$$F(\bar{Y}) = \frac{b_1 + 2b_2 (\bar{Y} - Y_0)}{\left[1 + b_1 (\bar{Y} - Y_0) + b_2 (\bar{Y} - Y_0)^2\right]^2} \quad (6.38)$$

avec $b_1 = 605 \text{ MPa}^{-1}$, $b_2 = 5.24 \times 10^4 \text{ MPa}^{-l}$, $Y_0 = 60 \times 10^{-6} \text{ MPa}$.

6.3.3.2 Formulation en termes de déformation [Mazars89]

Dans ce cas, on considère que l'endommagement est contrôlé par la déformation. A l'aide de cette formulation, il est possible de décrire un comportement différent en traction et en compression. Ce modèle se révèle donc particulièrement adapté pour la description du comportement du béton.

On présente donc dans la suite ce modèle, basé sur la formulation proposée par [Mazars89], et son extension pour aboutir à une formulation non-locale. Les déformations positives contrôlent la croissance de l'endommagement. On définit tout d'abord la déformation équivalente de la manière suivante :

$$\tilde{\varepsilon} = \sqrt{\sum_{i=1}^3 (\langle \varepsilon_i \rangle_+)^2} \quad (6.39)$$

avec $\langle \varepsilon_i \rangle_+ = 0$ si $\varepsilon_i < 0$ et $\langle \varepsilon_i \rangle_+ = \varepsilon_i$, si $\varepsilon_i \geq 0$; et $\varepsilon_i (i \in [1, 3])$ sont les déformations principales. La variable non-locale $\bar{\varepsilon}$, qui représente la moyenne de la déformation équivalente sur le volume représentatif, est la variable qui contrôle la croissance de l'endommagement :

$$\bar{\varepsilon}(x) = \frac{1}{V_r(x)} \int_V \Psi(x-s) \tilde{\varepsilon}(s) dv \quad (6.40)$$

avec V le volume, $V_r(x)$ le volume représentatif au point x , et $\Psi(x-s)$ est la fonction poids, dont la définition a été donnée à travers la relation 6.36. L'évolution de l'endommagement est sujette aux conditions suivantes :

$$\begin{aligned} f(\bar{\varepsilon}) &= \bar{\varepsilon} - \kappa \\ \text{avec} \\ \text{si } f(\bar{\varepsilon}) &= 0 \text{ et } \dot{f}(\bar{\varepsilon}) = 0 \text{ alors } D = F(\bar{\varepsilon}) \text{ (voir 6.38)} \\ \text{si } f(\bar{\varepsilon}) < 0 \text{ ou } f(\bar{\varepsilon}) = 0 \text{ et } \dot{f}(\bar{\varepsilon}) < 0 \text{ alors } D &= 0 \end{aligned} \quad (6.41)$$

avec κ le paramètre de relaxation qui prend la valeur la plus grande atteinte par $\bar{\varepsilon}$. Comme condition initiale, on impose $\kappa = \kappa_o$, avec κ_o la seuil de l'endommagement. κ_o est la déformation en traction à laquelle l'endommagement commence : ceci a lieu quand la tension atteint la valeur maximale f_t , calculée à l'aide des essais de traction. On peut donc écrire :

$$\kappa_o = \frac{f_t}{E_o} \quad (6.42)$$

La loi d'évolution écrite dans la relation 6.41 est une fonction de la déformation. Si l'on décompose l'endommagement en deux parties, un terme qui prend en compte l'endommagement en traction D_t , et un terme qui prend en compte l'endommagement en compression D_c , on peut écrire l'endommagement D de la manière suivante :

$$D = \alpha_t D_t + \alpha_c D_c \quad (6.43)$$

avec α_t et α_c définis de manière telle que dans le cas d'une traction uniaxiale on a $\alpha_t = 1$, $\alpha_c = 0$, et $D = D_t$ et, en cas de compression uniaxiale $\alpha_t = 0$, $\alpha_c = 1$, et $D = D_c$. [Pesavento00] propose les variables d'endommagement comme fonctions de la déformation moyenne équivalente :

$$\begin{aligned} D_t &= 1 - \frac{\kappa_o(1-A_t)}{\bar{\varepsilon}} - \frac{A_t}{\exp(-B_t(\bar{\varepsilon}-\kappa_o))} \\ D_c &= 1 - \frac{\kappa_o(1-A_c)}{\bar{\varepsilon}} - \frac{A_c}{\exp(-B_c(\bar{\varepsilon}-\kappa_o))} \end{aligned} \quad (6.44)$$

avec A_c , B_c , A_t , B_t des constantes qui caractérisent la réponse du béton. [Pesavento00] propose les coefficients α_t et α_c en fonction des déformations principales :

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_i \rangle_+ &= \varepsilon_{ti} + \varepsilon_{ci} \\ \alpha_t &= \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\varepsilon_{ti} \langle \varepsilon_i \rangle_+}{\bar{\varepsilon}^2} \right)^\beta \quad \alpha_c = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\varepsilon_{ci} \langle \varepsilon_i \rangle_+}{\bar{\varepsilon}^2} \right)^\beta \end{aligned} \quad (6.45)$$

avec ε_{ti} la déformation positive suite aux contraintes positives et ε_{ci} la déformation positive suite aux contraintes négatives (effets de Poisson). Le coefficient β est utilisé pour réduire l'effet sur l'endommagement du cisaillement par rapport à l'effet due à la tension. Généralement $\beta \approx 1.05$.

[Pesavento00] adopte les valeurs suivantes pour le modèle :

$$E_o = 23400 \text{ MPa}; \nu_o = 0.2; \beta = 1.05$$

$$A_t = 1., B_t = 15000, A_c = 1.2 B_c = 649$$

6.4 Endommagement thermo-chimique

La haute température produit une dégradation irréversible des propriétés du béton et, en particulier, du module d'élasticité. On introduit donc un endommagement supplémentaire que l'on appelle thermo-chimique. En fait, la cause de ce type de dégradation est soit thermique (la charge thermique entraîne des micro-fissures provoquées, par exemple, par l'expansion thermique différente de la pâte de ciment et de l'agrégat), soit chimique (la déshydratation provoque une dégradation de la structure poreuse et donc la diminution des propriétés mécaniques du béton). Dans une vision macroscopique des phénomènes, ce comportement est généralement décrit par une dépendance du module d'élasticité en fonction de la température : $E = E(\theta)$. L'endommagement thermo-chimique peut être défini à partir de la relation liant la variation du module d'élasticité à la température θ , d'une manière analogue à celle utilisée pour définir l'endommagement mécanique de telle sorte que :

$$V = 1 - \frac{E_o(\theta)}{E_o(\theta_a)} \text{ avec } \begin{cases} \dot{V} > 0 \text{ si } \dot{\theta} > 0 \\ \dot{V} = 0 \text{ si } \dot{\theta} \leq 0 \end{cases} \quad (6.46)$$

avec $\theta_a = 20^\circ C$.

L'hypothèse que l'on fait à travers l'eq.6.46 est sans doute simplificatrice car le module d'élasticité du béton ne dépend pas seulement de la seule température mais aussi d'autres paramètres tels que la vitesse de chauffage ou la teneur en eau.

Il est donc possible de compléter la théorie de l'endommagement (mécanique) que l'on a présenté plus haut. On peut en fait obtenir le module de Young E à partir de l'endommagement mécanique D et du module du matériau non-endommagé à la même température $E_0(\theta)$:

$$E(\theta) = (1 - D)E_0(\theta) \quad (6.47)$$

L'effet d'endommagement total peut alors être écrit de la manière suivante :

$$D_t = 1 - \frac{E(\theta)}{E_0(\theta_a)} = 1 - \frac{E(\theta)}{E_0(\theta)} \frac{E_0(\theta)}{E_0(\theta_a)} = 1 - (1 - D)(1 - V) \quad (6.48)$$

Ce qui peut se réécrire :

$$1 - D_t = (1 - D)(1 - V) \quad (6.49)$$

On souligne le fait que l'endommagement total est donc une fonction multiplicative (et pas additive) des endommagements mécanique et thermo-chimique i.e. la probabilité d'avoir en même temps les deux types d'endommagement est en fait une propriété multiplicative.

6.5 Équations d'état pour la mécanique

La démarche que l'on suivra pour la définition des variables et des lois d'état pour la description du comportement mécanique du squelette est la même que celle que l'on a vue au paragraphe précédent et qui nous a permis d'aboutir à la description du comportement endommageable d'un milieu continu. Dans le cas élastique, on considérera la dissipation liée au squelette nulle et on ne prendra en compte aucune variable interne i.e. l'endommagement est pour l'instant négligé. Par la suite, l'introduction de l'endommagement dans les équations d'état de la mécanique sera presque immédiate en utilisant les résultats de la section précédente.

Tout d'abord on introduit des relations qui nous seront utiles pour la définition des lois constitutives que l'on cherche. On a déjà vu que le milieu poreux est caractérisé par un squelette solide rempli en partie par de l'eau liquide et en partie par du gaz formé par de l'eau vapeur et de l'air. Le niveau de saturation en eau liquide S_w est le rapport entre le volume rempli d'eau liquide et le volume total des vides :

$$S_w = \frac{dv^w}{dv^w + dv^g} \quad (6.50)$$

De la même manière, la saturation en gaz S_g est définie comme le rapport entre le volume rempli de gaz et le volume total des vides :

$$S_g = \frac{dv^g}{dv^w + dv^g} \quad (6.51)$$

avec donc une complète saturation du milieu poreux i.e. $S_w + S_g = 1$.

On rappelle que la porosité eulérienne n est définie comme le rapport entre le volume des vides et le volume totale du VER considéré :

$$n = \frac{dv^w + dv^g}{dv} \quad (6.52)$$

On introduit aussi la notion de porosité lagrangienne ϕ définie par :

$$\phi = \frac{dv^w + dv^g}{dv_0} \quad (6.53)$$

Elle est donc le volume actuel de l'espace poreux par unité de volume de squelette de la configuration initiale. Les porosités lagrangienne et eulérienne sont donc liées par la relation suivante :

$$\phi = Jn \quad (6.54)$$

avec J le Jacobien de la transformation (sous l'hypothèse de petites déformations $J \simeq 1$).

Dans la suite on introduira aussi la trace de ϵ qui représente la variation relative d'un volume matériel élémentaire dv_t :

$$tr(\epsilon) = \frac{dv_t - dv_0}{dv_0} \quad (6.55)$$

et la déformation volumique du constituant solide ε_s :

$$\varepsilon_s = \frac{dv_t^s - dv_0^s}{dv_0^s} \quad (6.56)$$

avec dv_t^s le volume solide. On peut aussi définir le volume élémentaire dv_t comme la somme du volume solide dv_t^s et du volume poreux $dv_t^p = \phi dv_0$, soit :

$$dv_t = dv_t^s + \phi dv_0 \quad (6.57)$$

en particulier dans l'état initial de référence on a :

$$dv_0^s = (1 - \phi_0) dv_0 \quad (6.58)$$

La combinaison des relations précédentes nous permet de définir alors :

$$tr(\epsilon) = (1 - \phi_0)\varepsilon_s + \phi - \phi_0 \quad (6.59)$$

6.5.1 Potentiel thermodynamique

On postule l'existence d'un potentiel thermodynamique duquel dérivent les lois d'état. On peut choisir différents potentiels ; on choisit d'introduire le potentiel énergie libre spécifique Ψ . L'énergie libre admet comme variables naturelles les variables ϵ, ϕ, θ . On peut donc écrire :

$$\Psi = \Psi(\epsilon, \phi, \theta) \quad (6.60)$$

D'après [Coussy04] il est envisageable d'utiliser, au lieu du potentiel 6.60, un potentiel G_s défini de la manière suivante :

$$G_s = \Psi - p\phi \quad (6.61)$$

Sous l'hypothèse de petites déformations, l'application de l'inégalité de Clausius-Duhem (voir paragraphe 6.3.2.1), nous permet d'écrire la relation suivante :

$$\sigma : d\epsilon - \phi dp - S d\theta - dG_s = 0 \quad (6.62)$$

Avec S l'entropie du squelette. La relation précédente nous permet d'obtenir les équations d'état sous la forme :

$$G_s = G_s(\epsilon, p, \theta) \quad \sigma = \frac{\partial G_s}{\partial \epsilon} \quad \phi = -\frac{\partial G_s}{\partial p} \quad S = -\frac{\partial G_s}{\partial \theta} \quad (6.63)$$

La différenciation des relations précédentes permet d'écrire :

$$\begin{aligned} d\sigma &= \mathbf{D} : d\epsilon - \mathbf{B}dp - \mathbf{D}\beta_s d\theta \\ d\phi &= \mathbf{B} : d\epsilon + Ndp - 3\beta_\phi d\theta \\ dS &= \mathbf{D}\beta_s d\epsilon - 3\beta_\phi d\theta + C_p \frac{d\theta}{\theta} \end{aligned} \quad (6.64)$$

étant $\mathbf{D}$, $\mathbf{B}$, N des propriétés du squelette, β_s le coefficient de dilatation thermique, β_ϕ la dilatation thermique volumique liée à la porosité et C_p la capacité thermique volumique.

En particulier, $\mathbf{D}$ est le tenseur d'ordre 4 d'élasticité mesuré lors d'une expérience à pression et température constante (tenseur d'élasticité drainé). Le tenseur $\mathbf{B}$ caractérise la relation entre la variation de contrainte et de pression lors d'une expérience où les déformations et la température sont constantes. Enfin, N caractérise la relation entre les variations de porosité et de pression lors d'une expérience où les déformations et la température sont constantes. Les deux premières équations dans 6.64 définissent le comportement mécanique (souvent appelé poroélastique) d'un milieu poreux. On rappelle aussi que, généralement, la contrainte pour le solide est définie positive s'il s'agit d'une contrainte de traction ; pour les fluides on assume la positivité dans le cas de compression.

6.5.2 Comportement élastique isotrope linéaire

Le comportement isotrope est caractérisé par l'absence de directions privilégiées. Le potentiel G_s ne dépend donc que du tenseur de déformations qu'à travers ses trois invariants. De plus, la linéarité impose que le potentiel soit un invariant quadratique du tenseur de déformations, c'est à dire, une combinaison linéaire du carré du premier invariant et du second invariant. En absence de contrainte et de pression initiales, dans le cas d'une transformation isotherme, le comportement élastique isotrope linéaire est caractérisé par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \sigma &= \lambda_0 \text{tr}(\epsilon) \mathbf{I} + 2\mu \epsilon - \alpha p \mathbf{I} \\ \delta\phi &= \alpha \text{tr}(\epsilon) + Np \end{aligned} \quad (6.65)$$

avec $\delta\phi = \phi - \phi_0$, λ_0, μ les coefficients de Lamé drainés, α et N caractérisent l'augmentation respectivement de la contrainte moyenne et de la porosité lors de la mise en pression du fluide dans un échantillon maintenu à déformation volumique nulle. α est communément appelé coefficient de Biot.

Des relations 6.65, on obtient les relations finales qui expriment la réponse volumique du milieu poreux :

$$\begin{aligned} \epsilon_t &= \frac{1}{K_0} (\sigma_H + \alpha p) \\ \delta\phi &= \frac{1}{K_p} (\sigma_H + \alpha_p p) \end{aligned} \quad (6.66)$$

avec $\varepsilon_t = \text{tr}(\boldsymbol{\epsilon})$ et $\sigma_H = \frac{1}{3}\text{tr}(\boldsymbol{\sigma})$. En particulier, on appelle $K_0 = \lambda_0 + \frac{2}{3}\mu$ le coefficient de compressibilité drainé, K_p le module de compressibilité du réseau poreux et α_p un coefficient sans dimension, tel que :

$$\begin{aligned} K_p &= \frac{K_0}{\alpha} \\ \alpha_p &= \alpha + \frac{NK_0}{\alpha} \end{aligned} \quad (6.67)$$

Le modèle de comportement du squelette défini plus haut, est construit à l'échelle macroscopique sans faire référence au comportement à l'échelle microscopique. On montrera dans la suite qu'il existe des relations de compatibilité entre le comportement microscopique de chaque phase et le comportement macroscopique du solide. En général, dans le cas d'un écoulement de deux phases non-miscibles, la pression du fluide p est une combinaison de la pression du liquide et du gaz. Un processus de moyenne est alors requis pour le calcul de la pression du fluide (que l'on appellera p^s) [Schrefler98]. On peut donc écrire :

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{\sigma}} &= \frac{1}{dv} \int_{dv} \boldsymbol{\sigma} dv_m = \frac{1}{dv} \left[\int_{dv} \boldsymbol{\sigma} dv_m + \int_{dv^f} \boldsymbol{\sigma} dv_m \right] \\ &= \frac{dv^s}{dv} \boldsymbol{\sigma}^s + \frac{dv^f}{dv} \left[\frac{dv^w}{dv^f} \boldsymbol{\sigma}^w + \frac{dv^g}{dv^f} \boldsymbol{\sigma}^g \right] \\ &= (1 - \phi_0) \boldsymbol{\sigma}^s + \phi_0 [S_w \boldsymbol{\sigma}^w + S_g \boldsymbol{\sigma}^g] \end{aligned} \quad (6.68)$$

avec $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ le tenseur de contrainte total macroscopique et $\boldsymbol{\sigma}^\pi$ le tenseur de contrainte moyen de la phase π .

Pour les phases liquides on peut écrire la relation suivante :

$$\boldsymbol{\sigma}^\pi = \boldsymbol{\tau}^\pi - \mathbf{I}p \quad (6.69)$$

avec $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur de cisaillement qui est considéré négligeable pour un fluide. On peut alors écrire :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = (1 - n) \boldsymbol{\sigma}^s - \phi_0 \mathbf{I} [S_g p^g + S_w p^w] \quad (6.70)$$

En notant p^s le dernier terme, la pression moyenne des phases fluides :

$$p^s = S_g p^g + S_w p^w \quad (6.71)$$

On souligne que cette définition de la pression p^s (connue aussi comme pression interstitielle de Bishop) néglige les termes qui proviennent des tensions superficielles liées à l'énergie des interfaces. [Coussy03] et [Dangla02] montrent que la prise en compte de ces termes est de toute manière nécessaire pour une formulation poroélastique correcte.

Si on note K_s le module de compressibilité du solide, tel que $\boldsymbol{\sigma}^s = K_s \boldsymbol{\epsilon}^s$ et on rappelle la relation 6.59, on peut exprimer la variation de porosité de la manière suivante :

$$\phi - \phi_0 = \left(1 - \frac{K_0}{K_s} \right) \varepsilon_t + \frac{\alpha - \phi_0}{K_s} p^s \quad (6.72)$$

i.e. si on rappelle la relation $\phi - \phi_0 = \alpha \varepsilon_t + Np$ on a nécessairement :

$$\begin{aligned} \alpha &= 1 - \frac{K_0}{K_s} \\ N &= \frac{\alpha - \phi_0}{K_s} \end{aligned} \quad (6.73)$$

La relation 6.73 nécessite la connaissance des modules de compressibilité. En particulier, on montre que le coefficient de Biot est nécessairement inférieur à 1 et qu'il n'atteint l'unité que pour un solide incompressible. Par ailleurs, comme K_0 est nécessairement inférieur à K_s , le coefficient de Biot est toujours positif et compris entre 0 et 1.

6.5.3 Tenseur de contraintes effectives

Si on exprime l'équation poroélastique avec $\mathbf{B}=1$ et $\mathbf{N}=0$, on peut introduire le tenseur des contraintes effectives. On peut alors écrire :

$$d\boldsymbol{\sigma}' = \mathbf{D} : d\boldsymbol{\epsilon} \quad (6.74)$$

avec $\boldsymbol{\sigma}'$ donné par $\boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{\sigma} + p\mathbf{I}$. Ce tenseur est gouverné uniquement par le tenseur de déformations. Pour cette raison, il est appelé tenseur des contraintes effectives. Le concept de contraintes effectives a été introduit par [Terzaghi25] suite à des observations de type expérimental. Suite au commentaire que l'on a présenté plus haut, ceci n'est qu'une hypothèse de comportement relatif au constituant solide. Cette hypothèse n'est pas acceptable pour certains matériaux (par exemple les roches) pour lesquels le coefficient de Biot α prend des valeurs strictement inférieures à 1.

6.6 Évolution des modules E , ν et des résistances à la compression et à la traction

Le comportement du béton soumis aux effets thermiques met en jeu des phénomènes physiques complexes et requiert, pour la modélisation, un nombre important de données spécifiques pour définir le comportement du béton.

Ces données sont suggérées aussi par les normes. En particulier, l'Eurocode 2 [Eurocode2] définit l'action du feu sur les éléments en béton à travers une modification de ses caractéristiques thermo-physiques (ex. la conductivité). Ces lois d'évolution sont très générales ; par exemple, la loi de variation de certaines caractéristiques du béton en fonction de la température (comme par exemple la dilatation) est donnée seulement en fonction du type de granulat (et pas du type de béton) ou la loi d'évolution des résistances caractéristiques n'est donnée que pour un béton de granulat siliceux.

Il s'avère donc nécessaire de donner, pour chaque type de béton que l'on veut modéliser, l'évolution de ses paramètres mécaniques caractéristiques, obtenus à travers des essais spécifiques de laboratoire. En particulier, dans le cadre de cette thèse, le béton qui a été utilisé est un béton de type M100, dont les caractéristiques sont présentées dans le cadre du projet BHP2000 [BHP2000]. Ce béton est constitué de granulats calcaires et de sables silico-calcaires (de Seine) et calcaire (Boulonnais). Plus de détails seront donnés dans le chapitre 7. On présente donc dans la suite les résultats expérimentaux dont on dispose pour les grandeurs mécaniques que l'on cherche.

6.6.1 Mesure des propriétés mécaniques

La mesure des propriétés mécaniques du béton est généralement obtenue à partir des essais de compression. La description de ce type d'essais peut être facilement trouvée dans

la littérature (par exemple [Phan00] ou [Cism03]). Il faut remarquer que en général les essais que l'on peut faire sont généralement réalisés sur des échantillons cylindriques, soit à haute température (comportement à chaud), soit après refroidissement (comportement résiduel).

- Comportement à chaud : l'échantillon est mis dans un four spécial, chauffé à la température nominale et, après un certain temps à cette température (de 1 à 5h selon les auteurs), chargé jusqu'à l'écrasement. Cette technique requiert l'utilisation de fours à haute température dont très peu de laboratoires disposent.
- Comportement résiduel : l'échantillon est chauffé dans un four traditionnel, ensuite refroidi, instrumenté et chargé jusqu'à l'écrasement. Cette technique permet l'utilisation d'appareils d'utilisation commune : il s'agit donc d'un essai relativement facile à réaliser.

Plusieurs auteurs (par exemple [Xiao04]) ont mis en évidence les différences des résultats obtenus en faisant des essais à chaud et résiduels. En général les bétons refroidis sont beaucoup moins performants que les bétons à chaud. Il est donc évident que, pendant la phase de refroidissement, on obtient une dégradation artificielle du béton. Il serait donc utile de disposer de données à chaud pour la simulation et la modélisation numérique du béton à haute température.

6.6.2 Résistance à la compression

La résistance à la compression d'un béton du type M100 vierge à la température de 20°C est de l'ordre de $95 - 103\text{MPa}$. [Pimienta03] présente des résultats à chaud pour différents types de bétons (dont le M100) additionnés ou non de fibres organiques. En figure 6.2 on présente l'évolution de la résistance à la compression du béton M100.

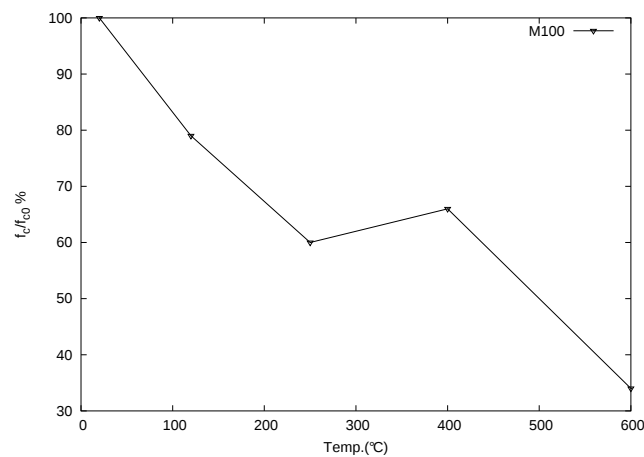


FIG. 6.2 – Évolution de la résistance à compression pour le béton M100 [Pimienta03]

6.6.3 Module de Young et coefficient de Poisson

Le module de Young est déduit à partir des courbes contrainte/déformation. Le module d'un béton du type M100 vierge à la température de 20°C est de l'ordre de 86GPa . En figure 6.3 on présente l'évolution du module de Young du béton M100.

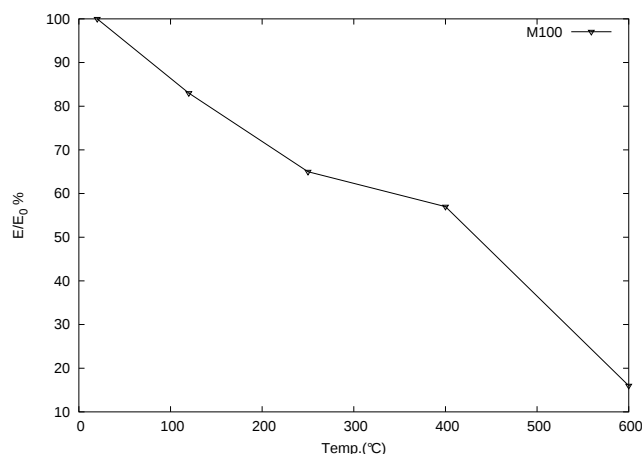


FIG. 6.3 – Évolution du module de Young du béton M100 [Pimienta03]

En ce qui concerne le coefficient de Poisson ν , selon [Khoury85] ou [William03] la variation du coefficient de Poisson avec la température est négligeable : on le garde donc constant, égal à sa valeur à la température ambiante ($\nu = 0.18$)

6.6.4 Résistance à la traction

En ce qui concerne la résistance à la traction des bétons à hautes performances, le comportement de différents types de béton ne diffèrent pas de manière significative. En ce qui concerne le cas de notre M100, l'indisponibilité de données expérimentales nous a obligé à utiliser la courbe d'évolution de la résistance à la traction calculée dans le cadre du projet [Hiteco] (voir fig.6.4). La résistance à la traction d'un BHP à la température ambiante est de l'ordre de 6MPa.

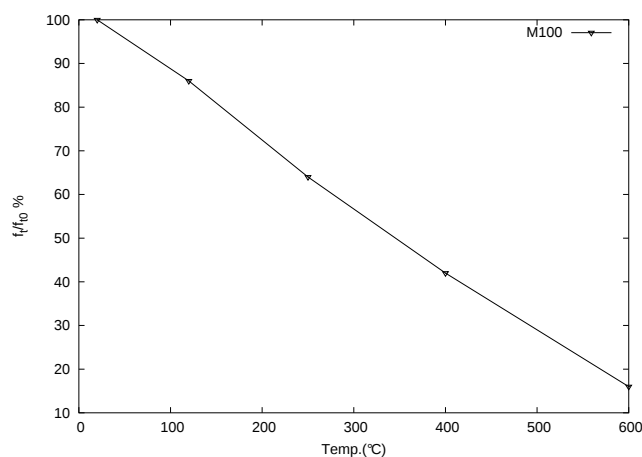


FIG. 6.4 – Évolution de la résistance à traction pour un béton BHP [Hiteco]

En résumé, les essais de détermination des caractéristiques mécaniques d'un béton et de leur évolution avec la température, représentent une tâche assez difficile pour l'expérimentateur. De toute manière, la connaissance de ces grandeurs est nécessaire pour la simulation numérique

d'un béton lorsqu'on veut étudier la mécanique. Il faudrait connaître les données à chaud pour chaque type de béton que l'on veut étudier. La création d'une base de données est en fait un des buts de certains projets tels que Hiteco ou BHP2000.

6.7 Comparaison entre les modèles THC et THCM

Le modèle thermo-hydro-chimique que l'on a présenté au chapitre 5 néglige bien entendu les effets que le chauffage entraîne d'un point de vue mécanique sur le béton i.e. les déformations du squelette ainsi que l'endommagement et ses conséquences sur les phénomènes de transport. En outre dans la partie THC commune, on peut observer un certain nombre de différences dans les deux modélisations. Le but de ce paragraphe est donc de souligner et mettre en évidence les différentes approches qui ont été menées dans la définition de certaines grandeurs.

6.7.1 Cinétique de la déshydratation

Les travaux de [Ferraille00] et [Pasquero04] ont permis de mettre en évidence le fait que la déshydratation n'est pas un phénomène instantané et que sa cinétique est à prendre en compte. On a donc vu que si on maintient un échantillon de pâte de ciment pendant un temps suffisamment long à un palier de température θ donné, la masse d'eau produite atteint une limite que l'on appelle m_{des}^{eq} . Cette valeur est indépendante de la vitesse de montée en température et est considérée comme fonction de la seule température du palier. Si l'on considère une élévation rapide de la température, l'équilibre chimique ne peut pas s'établir et par conséquence $m_{des} \neq m_{des}^{eq}$. Il s'avère donc nécessaire de prendre en compte la cinétique de la réaction chimique c'est-à-dire de déterminer une loi permettant de déterminer l'évolution de la déshydratation en fonction de l'histoire de température.

Dans le cadre du modèle THCM, la cinétique a été négligée i.e. la déshydratation a été prise en compte comme un phénomène instantané. La relation suivante a donc été utilisée :

$$\Delta m_{des} = f_s m c f(T) \quad (6.75)$$

avec f_s un facteur stœchiométrique, m un paramètre qui prend en compte l'âge du béton et $f(T)$ une fonction de la température (en Celsius) donnée par la relation suivante :

$$f(T) = \begin{cases} 0 & \text{avec } T < 105^\circ C \\ \frac{[1 + \sin(\pi/2(1 - 2\exp(-0.004(T - 105)))]}{2} & \text{avec } T > 105^\circ C \end{cases} \quad (6.76)$$

Les deux courbes en fig.6.5, bien que différentes d'allure, donnent des résultats qui ne diffèrent pas de manière significative jusqu'à la température d'environ $220^\circ C$ i.e. l'utilisation d'une courbe ou de l'autre est indifférente dans la pratique. Dans le cas qui nous concerne, la vitesse de chauffage du béton est très lente (de l'ordre de $0.1K/min$) i.e. la cinétique de déshydratation joue un rôle mineur et peut être négligée. De toute manière la prise en compte de la cinétique entraîne, non seulement d'un point de vue mathématique (ajout d'une équation différentielle) mais aussi d'un point de vue physique une grande complexité. Ce travail a été mené en profondeur par [Pasquero04] qui montre qu'une description fine de la cinétique de la déshydratation nécessite de distinguer de nombreuses espèces chimiques

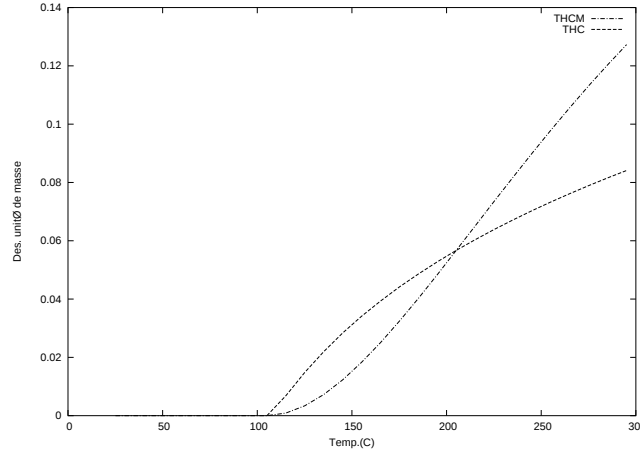


FIG. 6.5 – Production d’eau par déshydratation selon les deux formulations THC et THCM

caractérisées par leur température de décomposition et le temps caractéristique de cette décomposition. Cette démarche est très lourde et pour l’instant encore prématurée pour être introduite dans un code de calcul. D’une façon générale, tout ce qui dans le modèle THC est fonction de la perte de masse m_{des} , on le retrouve dans le modèle THCM comme fonction de la température.

6.7.2 Évolution de la porosité n

Dans le cadre de notre modélisation THC, la relation qui a été proposée lie la porosité à l’évolution de la déshydratation à travers la contraction de Le Chatelier (voir la relation 5.58).

Dans le cadre du modèle THCM, le changement de porosité et son évolution ont été pris en compte par [Gawin03] à l’aide de la relation proposée par [Herbst89]. En particulier, d’après [Herbst89] la porosité dépend directement de la température à l’aide de la relation suivante :

$$n = n_0 + A_n(\theta - \theta_0) \quad (6.77)$$

avec A_n une constante à déterminer de manière expérimentale selon le type de béton et $\theta_0 = 20^\circ\text{C}$ la température de référence.

Il nous semble que la relation 5.58 donne mieux le sens physique des phénomènes qui se produisent dans le béton lors d’un chauffage et qui conduisent à une évolution de la microstructure. On a déjà bien souligné le fait que l’élévation de la température a comme conséquence principale de détruire les liaisons chimiques qui forment la pâte de ciment et de transformer les hydrates en anhydres. Ce phénomène, qui a comme conséquence de libérer de l’eau, a été appelé déshydratation. L’évolution de la taille des pores est donc une conséquence directe de la déshydratation. Il nous semble donc préférable de prendre en compte l’évolution de la porosité en fonction de la variable déshydratation plutôt que de la température. De plus, la relation 6.77 prend en compte une augmentation de porosité à partir de la température de référence θ_0 . Il faut aussi souligner le fait que la déshydratation (et donc l’évolution de la porosité) n’est pas un phénomène instantané mais nécessite un certain temps pour avoir lieu.

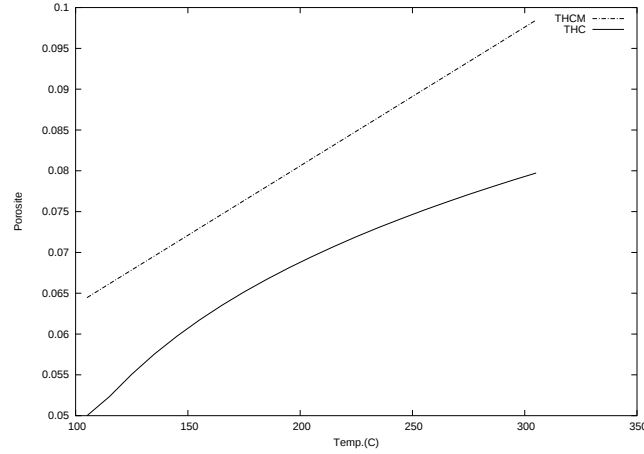


FIG. 6.6 – Evolution de la porosité selon les deux formulations THC et THCM

La relation 6.77 donne des résultats qui ne diffèrent pas de manière significative de la relation 5.58 utilisée dans le cadre du modèle THC (voir fig.6.6). De plus, la cinétique de déshydratation a été négligée dans le modèle THCM. Compte tenu de ces raisons, la formulation du modèle THCM proposée par 6.77, a été retenue.

6.7.3 Évolution de la perméabilité intrinsèque

La perméabilité intrinsèque $\mathbf{K}$ est une propriété propre du matériau poreux (voir chapitre 3), généralement déterminée grâce à des essais expérimentaux de percolation d'un liquide ou, plus couramment, d'un gaz (voir chapitre 3). On a déjà remarqué au chapitre 5 que dans le cadre de l'utilisation de la perméabilité dans un modèle mathématique, nous ne sommes pas seulement intéressés par sa valeur en conditions de référence, mais aussi par son évolution avec les caractéristiques du milieu poreux. Il faut donc déterminer une loi qui prend en compte ces variations structurales du béton qui affectent les phénomènes de transport.

La dépendance de la perméabilité intrinsèque avec la température et la pression du gaz a déjà été mise en évidence dans le chapitre précédent. A cause des considérations que l'on a faites plus haut, il est naturel de penser que la perméabilité intrinsèque est aussi fonction de l'endommagement i.e. la variable qui prend en compte la formation des microfissures dans le béton. On peut donc penser que la formation des microfissures au sein du béton est responsable (avec l'évolution de la microstructure) de la forte augmentation de la perméabilité que l'on observe lorsqu'on chauffe le béton. On peut de manière raisonnable supposer que $\mathbf{K}=\mathbf{K}(\theta, p^g, D)$. Dans le cadre du programme [Hiteco], l'importance de l'endommagement vis-à-vis de la microstructure a été confirmé grâce à l'observation au MEB de différents types de béton chauffés à haute température. D'après [Pesavento00] ou [Gawin03] on peut écrire la relation suivante :

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_0 \cdot f(\theta) \left(\frac{p^g}{p_0} \right)^{A_p} 10^{A_D D} \quad \text{formulation THCM} \quad (6.78)$$

avec A_p et A_D des constantes et $f(\theta)$ une fonction dépendant du type de béton. [Pesavento00] montre que l'endommagement joue le rôle majeur dans l'évolution de la perméabilité intrinsèque à travers la relation 6.78. [Gawin03] propose deux formulations pour la fonction

$f(\theta) :$

$$\begin{aligned} f(\theta) &= 10^{A_\theta(\theta-\theta_0)} \\ f(\theta) &= 10^{A_\theta^2(\theta-\theta_0)^2 + A_\theta^1(\theta-\theta_0)} \end{aligned} \quad (6.79)$$

D'après [Gawin03] la deuxième formulation donne un comportement meilleur d'un point de vue numérique si elle est associée à l'endommagement total.

Remarque Soulignons que les paramètres A_θ et A_p ne sont pas les mêmes que ceux que l'on a utilisés au chapitre 5 (voir la relation 5.28 rappelée ci-dessous), vu la présence du terme qui prend en compte l'effet lié à l'endommagement :

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_0 \cdot 10^{A_\theta(\theta-\theta_0)} \left(\frac{p^g}{p_0} \right)^{A_p} \quad \text{formulation THC}$$

i.e. dans la formule du modèle THC les paramètres doivent tenir compte de manière implicite de l'endommagement pour pouvoir donner une évolution correcte de la perméabilité intrinsèque. Le modèle THCM se montre alors beaucoup mieux adapté que le modèle THC vu l'importance que l'endommagement joue sur les phénomènes de transport.

La perméabilité intrinsèque dépend de l'endommagement de manière exponentielle. Cette dépendance a été mise en évidence par les travaux de [Bary96] et [Picandet01]. Dans ces travaux, des disques de différents types de béton ont été soumis à un chargement mécanique à température ambiante à l'aide d'une presse. Les disques de béton ont donc été endommagés. Ensuite, le niveau d'endommagement a été évalué à travers l'interprétation des courbes contrainte-déformation. Enfin, la mesure de la perméabilité à travers un perméamètre a permis d'établir une relation de type phénoménologique perméabilité-endommagement.

Il est donc évident que les conditions auxquelles notre béton est soumis sont plutôt différentes des conditions qui ont permis d'aboutir à la relation 6.78. La perméabilité d'un béton soumis à une élévation de température est en fait affectée par l'action conjointe de la température, de la pression du gaz et de la formation de microfissures. Il serait donc envisageable de mesurer le niveau d'endommagement (au moins résiduel) d'un béton soumis à un chauffage, pour pouvoir tirer une relation perméabilité-endommagement. Ceci se révèle de toute manière assez compliqué d'un point de vue expérimental et le manque de moyens techniques porte à une approche simplifiée telle qu'on l'a présentée.

La structure poreuse aléatoire du béton ainsi que les différences entre un type de béton et l'autre, nous amène à la conclusion qu'un lien endommagement-perméabilité à travers une formule de type phénoménologique peut être difficilement généralisé. Il nous semble donc envisageable de rechercher une réponse à travers d'autres méthodes, telles que, par exemple, des techniques d'homogénéisation ou encore des modèles de fissuration diffusée.

6.7.4 Les équations de conservation

Le modèle mathématique traite le béton comme un matériau poreux multiphasique, dont les pores sont considérés totalement saturés soit d'eau liquide soit de gaz. En ce qui concerne les équations du modèle, on retrouve un système algébrique-différentiel selon le schéma général proposé au chapitre 2. Les équations de conservation sont obtenues à partir

des équations à l'échelle microscopique, réécrites à l'échelle macroscopique à travers des règles et des théorèmes de moyenne (voir chapitre 2).

Dans le modèle THCM les équations de conservation ne diffèrent pas de manière significative par rapport aux équations que l'on a présentées pour le modèle THC, l'origine des équations étant la même. Il faut cependant indiquer des différences que l'on peut observer de manière systématique dans chacune des équations. Dans le modèle THCM, [Schrefler98] transforme les relations présentées à la fin du chapitre 2 en intégrant les lois constitutives typiques de chaque espèce dans les équations de conservation. Ceci permet d'obtenir une forme finale des équations très compacte et qui se révèle très efficace en vue d'une implantation des équations dans un code de calcul. Le modèle THC tel qu'on l'a présenté au chapitre précédent, s'avère donc moins efficace d'un point de vue numérique (un nombre plus grand d'équations se traduit en un temps de calcul plus long) mais garde une plus grande souplesse et simplicité i.e. dans le modèle THC, il s'avère très simple, si l'on veut, de changer une des équations constitutives. Enfin, on remarque que le modèle THC, logiquement, ne prend pas en compte les équations de conservation de la masse du solide et de bilan du moment linéaire, celles-ci étant des équations liées à la mécanique du solide.

En ce qui concerne le modèle THCM, par souci de simplicité, on ne présente dans la suite que la forme finale des équations macroscopiques de conservation. L'ensemble des passages mathématiques qui mènent à ces équations à partir des équations générales présentées au chapitre 2 est donné par [Pesavento00], [Schrefler98] ou encore [Gawin03].

On rappelle enfin que l'on a pris comme hypothèse de négliger les forces d'inertie devant les forces capillaires, ainsi que le flux convectif du solide. On prend en considération le principe des contraintes de Bishop, on considère les grains du solide incompressibles $\alpha = 1$, $1/K_s = 0$ ainsi que l'eau $1/K_w = 0$. On obtient donc :

conservation de masse de l'air sec et du solide

$$\begin{aligned}
 & -n\rho^{ga} \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) + (1 - S_w) n \left(\frac{\partial \rho^{ga}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{ga}}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{ga}}{\partial p^g} \frac{\partial p^g}{\partial t} \right) \\
 & -div \left[\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{ga} \mathbf{grad} \left(\frac{p^{ga}}{p^g} \right) \right] + div \left\{ \rho^{ga} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} [-\mathbf{grad} p^g + \rho^g \mathbf{g}] \right\} \\
 & -\beta_s \rho^{ga} (1 - n) (1 - S_w) \frac{\partial \theta}{\partial t} + (1 - S_w) \rho^{ga} div \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \\
 & -\frac{\rho^{ga}}{\rho^s} (1 - S_w) \left[\dot{m}_{dehydr} + (1 - n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right] = 0
 \end{aligned} \tag{6.80}$$

On peut facilement montrer que l'équation de conservation de la masse d'air sec définie pour le modèle THC est équivalente à l'équation que l'on vient de présenter. Si on considère l'équation 5.55, on rappelle la relation 5.60 et on injecte les relations de Fick (3.88) et de Darcy (3.3), on obtient la relation précédente (en négligeant l'expansion thermique de l'air et les termes liés au solide i.e. les trois derniers termes de l'équation ci-dessus).

De la même manière on peut passer de l'équation de conservation de la masse d'eau du modèle THC à l'équation équivalente pour le modèle THCM.

conservation de masse de l'eau et du solide

$$\begin{aligned}
& n(\rho^w - \rho^{gw}) \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) + [\rho^w S_w + \rho^{gw} (1 - S_w)] \operatorname{div} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \\
& + (1 - S_w) n \left(\frac{\partial \rho^{gw}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{gw}}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) - \operatorname{div} \left[\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \mathbf{grad} \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \right] \\
& + \operatorname{div} \left\{ \rho^{gw} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} [-\mathbf{grad} p^g + \rho^g \mathbf{g}] \right\} - \beta_{swg}^* \frac{\partial \theta}{\partial t} \\
& + \operatorname{div} \left\{ \rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} [-\mathbf{grad} p^g + \mathbf{grad} p^c + \rho^w \mathbf{g}] \right\} = \\
& + \frac{\rho^w S_w + \rho^{gw} (1 - S_w)}{\rho^s} \left[(1 - n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{D^s \Gamma_{dehydr}}{Dt} + \dot{m}_{dehydr} \right] - \dot{m}_{dehydr}
\end{aligned} \tag{6.81}$$

$$\text{avec } \beta_{swg}^* = \beta_s (1 - n) [\rho^{gw} (1 - S_w) + \rho^w S_w] + n \beta_w \rho^w S_w$$

conservation de l'enthalpie

$$\begin{aligned}
& (\rho C_p)_{eff} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho^w C_p^w \left\{ \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} [-\mathbf{grad} p^g + \mathbf{grad} p^c + \rho^w \mathbf{g}] \right\} \cdot \mathbf{grad} \theta \\
& + \rho^g C_p^g \left\{ \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} [-\mathbf{grad} p^g + \rho^g \mathbf{g}] \right\} \cdot \mathbf{grad} \theta - \operatorname{div} (\chi_{eff} \mathbf{grad} \theta) \\
& = -\dot{m}_{vap} \Delta H_{vap} + \dot{m}_{dehydr} \Delta H_{dehydr}
\end{aligned} \tag{6.82}$$

avec

$$(\rho C_p)_{eff} = \rho_s C_p^s + \rho_w C_p^w + \rho_g C_p^g \tag{6.83}$$

et le terme de production d'eau lié à la vaporisation :

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{vap} = & -\rho^w S_w \operatorname{div} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \beta_{sw}^* \rho^w \frac{\partial \theta}{\partial t} - \rho^w n \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) \\
& - \operatorname{div} \left[\rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\mathbf{grad} p^g + \mathbf{grad} p^c + \rho^w \mathbf{g}) \right] + \\
& - \left(\dot{m}_{dehydr} + (1 - n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right) \frac{\rho^w S_w}{\rho^s} + \dot{m}_{dehydr}
\end{aligned} \tag{6.84}$$

L'équation de conservation de l'enthalpie du modèle THCM est équivalente à l'équation de conservation de l'énergie du modèle THC en injectant dans la relation 5.53, l'équation 5.57 (et ses termes définis au paragraphe 5.2.7) ainsi que les relations de Fick (3.88), de Darcy (3.3) et la loi de Fourier (5.48).

équation de bilan du moment linéaire

$$\operatorname{div} \{ \boldsymbol{\sigma}' - \mathbf{I} (p^g - S_w p^c) \} + \rho \mathbf{g} = 0 \tag{6.85}$$

avec :

$$\rho = (1 - n) \rho^s + n S_w \rho^w + n S_g \rho^g \tag{6.86}$$

Dans les équations qu'on a présentées on a introduit le paramètre Γ . Ceci représente le niveau d'hydratation, fonction de la température, défini de la manière suivante :

$$\Gamma(\theta) = \frac{\rho_s(\theta_0) - \rho_s(\theta)}{\rho_s(\theta_0)} \quad (6.87)$$

6.8 Conditions initiales et aux limites pour le modèle THCM

Un système d'équations tel qu'on l'a défini requiert la définition des conditions initiales et aux limites. Comme pour les équations de conservation, l'imposition des conditions initiales et aux limites garde la même structure, dans le modèle THC et dans le modèle THCM i.e. il faut imposer une valeur initiale et des conditions au bord pour chaque variable principale qui forme le système d'équations.

En particulier, les conditions initiales donnent les valeurs des variables à l'instant $t = 0$ sur le domaine Ω et sur sa frontière Γ , ($\Gamma = \Gamma_\pi \cup \Gamma_\pi^q$) :

$$\begin{aligned} p^g(t=0) &= p_o^g, \\ p^c(t=0) &= p_o^c, \\ \theta(t=0) &= \theta_o, \\ \mathbf{u}(t=0) &= \mathbf{u}_o, \end{aligned} \quad \mathbf{x} \in (\Omega \cup \Gamma) \quad (6.88)$$

En ce qui concerne les conditions aux limites, on peut donner des conditions du premier type ou à la Dirichlet sur Γ_i ($i = g, c, \theta, u$) :

$$\begin{aligned} p^g(t) &= \hat{p}^g(t), & \mathbf{x} &\in \Gamma_g \\ p^c(t) &= \hat{p}^c(t), & \mathbf{x} &\in \Gamma_c \\ \theta(t) &= \hat{\theta}(t), & \mathbf{x} &\in \Gamma_\theta \\ \mathbf{u}(t) &= \hat{\mathbf{u}}(t), & \mathbf{x} &\in \Gamma_u \end{aligned} \quad (6.89)$$

du deuxième type ou à la Neumann sur Γ_i^2 :

$$\begin{aligned} -(\rho_{ga}\mathbf{v}^g - \rho^g\mathbf{v}_d^{gw})\mathbf{n} &= q^{ga} \quad \text{sur } \Gamma_g^2, \\ -(\rho_{gw}\mathbf{v}^g + \rho_w\mathbf{v}^w + \rho^g\mathbf{v}_d^{gw})\mathbf{n} &= q^{gw} \quad \text{sur } \Gamma_c^2, \\ -(\rho_w\mathbf{v}^w\Delta H_{vap} - \chi_{eff}\nabla\theta)\mathbf{n} &= q^\theta \quad \text{sur } \Gamma_\theta^2, \\ \sigma \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{t} \quad \text{sur } \Gamma_u^2 \end{aligned} \quad (6.90)$$

et du troisième type ou à la Cauchy sur Γ_i^3 :

$$\begin{aligned} (\rho_{gw}\mathbf{v}^g + \rho_w\mathbf{v}^w + \rho^g\mathbf{v}_d^{gw})\mathbf{n} &= \beta_c(\rho^{gw} - \rho_\infty^{gw}) \quad \text{sur } \Gamma_c^3, \\ (\rho_w\mathbf{v}^w\Delta H_{vap} - \chi_{eff}\mathbf{grad}\theta)\mathbf{n} &= \alpha_c(\theta - \theta_\infty) + e\sigma_0(\theta^4 - \theta_\infty^4) \quad \text{sur } \Gamma_\theta^3, \end{aligned} \quad (6.91)$$

avec la frontière $\Gamma = \Gamma_i^1 \cup \Gamma_i^2 \cup \Gamma_i^3$, $\mathbf{n}$ est le vecteur unitaire normale, q^{ga} , q^{gw} , q^w et q^θ sont le flux d'air imposé, le flux de vapeur imposé, le flux de liquide imposé et le flux de chaleur imposé, $\mathbf{t}$ est la traction imposée, ρ_∞^{gw} et θ_∞ sont la densité de masse d'eau vapeur et la température à grande distance, e est l'émissivité de l'interface, σ_0 est la constant de Stefan-Boltzmann, α_c et β_c sont les coefficients de chaleur convective et de transport de masse.

S'il y a un flux de la variable i , on peut réécrire les équations 6.90 et 6.91 en considérant toute la frontière i.e. $\Gamma_i^q = \Gamma_i^2 \cup \Gamma_i^3$ et les lois de Fick et de Darcy [Schrefler98] :

$$\left[\rho^{ga} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\mathbf{grad} p^g + \rho^g \mathbf{g}) + \rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \mathbf{grad} \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \right] \cdot \mathbf{n} = q^{ga} \quad \mathbf{x} \in \Gamma_g^q \quad (6.92)$$

$$\left[\begin{aligned} & \rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\mathbf{grad} p^g + \mathbf{grad} p^c + \rho^w \mathbf{g}) + \\ & + \rho^{gw} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\mathbf{grad} p^g + \rho^g \mathbf{g}) - \rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \mathbf{grad} \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \end{aligned} \right] \cdot \mathbf{n} \quad (6.93)$$

$$= q^w + q^{gw} + \beta_c (\rho^{gw} - \rho_\infty^{gw}) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_c^q$$

$$\left(\rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\mathbf{grad} p^g + \mathbf{grad} p^c + \rho^w \mathbf{g}) \Delta H_{vap} - \chi_{eff} \mathbf{grad} \theta \right) \cdot \mathbf{n} \quad (6.94)$$

$$= q^\theta + \alpha_c (\theta - \theta_\infty) + e \sigma_0 (\theta^4 - \theta_\infty^4) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_\theta^q$$

$$\sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t} \quad \mathbf{x} \in \Gamma_u^q \quad (6.95)$$

Le flux de chaleur convective et le transfert de masse sont des phénomènes analogues dans le sens qu'ils sont reliés par des équations du même type [Incropera90]. Ceci implique que les coefficients de convection de chaleur et de transfert de masse sont liés. Pour l'air humide à la température d'environ $20^\circ C$, on peut écrire la relation suivante :

$$\frac{\beta_c}{\alpha_c} = \frac{D_g}{\lambda_g} \cong \frac{2.6 \cdot 10^{-5} [m^2/s]}{2.63 \cdot 10^{-2} [W/m \cdot K]} \cong 10^{-3} [(K \cdot m) / J] \quad (6.96)$$

i.e. si on connaît un des deux coefficients de transfert on peut facilement calculer l'autre à l'aide de cette relation.

6.9 Solution des équations du système

6.9.1 Discrétisation

Le modèle mathématique THCM sera discrétisé sous une forme variationnelle à travers la méthode des résidus pondérés. Ceci permet l'écriture des équations sous forme faible, prêtes pour l'application de la méthode des éléments finis. Cette méthode est appliquée à travers

la procédure standard de Galerkin pour la discrétisation en espace. Les variables principales sont donc classiquement exprimées à l'aide des fonctions de forme sur le noeud. Les détails de cette démarche sont présentés en annexe E.

Ceci permet d'aboutir à l'écriture finale des équations, sous forme matricielle :

$$\begin{aligned}
\mathbf{C}_{gg} \frac{\partial \bar{\mathbf{p}}^g}{\partial t} + \mathbf{C}_{gc} \frac{\partial \bar{\mathbf{p}}^c}{\partial t} + \mathbf{C}_{gt} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \mathbf{C}_{gu} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \mathbf{K}_{gg} \bar{\mathbf{p}}^g + \mathbf{K}_{gc} \bar{\mathbf{p}}^c + \mathbf{K}_{gt} \bar{\theta} &= \mathbf{f}_g \\
\mathbf{C}_{cc} \frac{\partial \bar{\mathbf{p}}^c}{\partial t} + \mathbf{C}_{ct} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \mathbf{C}_{cu} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \mathbf{K}_{cg} \bar{\mathbf{p}}^g + \mathbf{K}_{cc} \bar{\mathbf{p}}^c + \mathbf{K}_{ct} \bar{\theta} &= \mathbf{f}_c \\
\mathbf{C}_{tc} \frac{\partial \bar{\mathbf{p}}^c}{\partial t} + \mathbf{C}_{tt} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \mathbf{C}_{tu} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \mathbf{K}_{tg} \bar{\mathbf{p}}^g + \mathbf{K}_{tc} \bar{\mathbf{p}}^c + \mathbf{K}_{tt} \bar{\theta} &= \mathbf{f}_t \\
\mathbf{K}_{ug} \bar{\mathbf{p}}^g + \mathbf{K}_{uc} \bar{\mathbf{p}}^c + \mathbf{K}_{ut} \bar{\theta} + \mathbf{K}_{uu} \bar{\mathbf{u}} &= \mathbf{f}_u
\end{aligned} \tag{6.97}$$

avec les matrices $\mathbf{K}_{ij}$, $\mathbf{C}_{ij}$, $\mathbf{f}_i$ ($i,j=g,c,t,u$) définies, par exemple dans [Schrefler98] ou [Pesavento00].

Le système 6.97 peut être enfin écrit sous forme matricielle condensée :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{gg} & \mathbf{K}_{gc} & \mathbf{K}_{gt} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{cg} & \mathbf{K}_{cc} & \mathbf{K}_{ct} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{tg} & \mathbf{K}_{tc} & \mathbf{K}_{tt} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{ug} & \mathbf{K}_{uc} & \mathbf{K}_{ut} & \mathbf{K}_{uu} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{p}^g \\ \mathbf{p}^c \\ \bar{\theta} \\ \mathbf{u} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{gg} & \mathbf{C}_{gc} & \mathbf{C}_{gt} & \mathbf{C}_{gu} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C}_{cc} & \mathbf{C}_{ct} & \mathbf{C}_{cu} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C}_{tc} & \mathbf{C}_{tt} & \mathbf{C}_{tu} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} \begin{Bmatrix} \mathbf{p}^g \\ \mathbf{p}^c \\ \bar{\theta} \\ \mathbf{u} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_g \\ \mathbf{f}_c \\ \mathbf{f}_\theta \\ \mathbf{f}_u \end{Bmatrix} \tag{6.98}$$

6.9.2 Discrétisation du modèle dans le temps

La méthode des différences finies a été utilisée pour la discrétisation dans le temps. On peut tout d'abord écrire le système d'équations sous forme concise :

$$\mathbf{C} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} + \mathbf{K} \mathbf{X} = \mathbf{F} \tag{6.99}$$

avec $\mathbf{C}$, $\mathbf{K}$, $\mathbf{X}$ et $\mathbf{F}$ de matrices définies de la manière suivante :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{gg} & \mathbf{K}_{gc} & \mathbf{K}_{gt} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{cg} & \mathbf{K}_{cc} & \mathbf{K}_{ct} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{tg} & \mathbf{K}_{tc} & \mathbf{K}_{tt} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{ug} & \mathbf{K}_{uc} & \mathbf{K}_{ut} & \mathbf{K}_{uu} \end{bmatrix} ; \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{gg} & \mathbf{C}_{gc} & \mathbf{C}_{gt} & \mathbf{C}_{gu} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C}_{cc} & \mathbf{C}_{ct} & \mathbf{C}_{cu} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C}_{tc} & \mathbf{C}_{tt} & \mathbf{C}_{tu} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \tag{6.100}$$

$$\mathbf{F} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_g \\ \mathbf{f}_c \\ \mathbf{f}_\theta \\ \mathbf{f}_u \end{Bmatrix} ; \quad \mathbf{X} = \begin{Bmatrix} \mathbf{p}^g \\ \mathbf{p}^c \\ \bar{\theta} \\ \mathbf{u} \end{Bmatrix} \tag{6.101}$$

les matrices $\mathbf{C}$ et $\mathbf{K}$ ne sont pas symétriques et dépendent de $\mathbf{X}$. La discrétisation dans le temps est donc faite à l'aide de la méthode suivante :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \right)_{n+\Theta} &= \frac{\mathbf{X}_{n+1} - \mathbf{X}_n}{\Delta t} \\ 0 < \Theta &\leq 1 \\ \mathbf{X}_{n+\Theta} &= (1 - \Theta) \mathbf{X}_n + \Theta \mathbf{X}_{n+1} \end{aligned} \quad (6.102)$$

avec Δt le pas de temps, $\mathbf{X}_n$ et $\mathbf{X}_{n+1}$ les vecteurs des variables d'état au temps t_n et t_{n+1} . On peut bien entendu obtenir différents schémas d'intégration, selon la valeur de Θ :

$\Theta = 1$ – schéma implicite (ou Euler backward) ;

$\Theta = 0.5$ – Crank-Nicholson ;

$\Theta = 0$ – schéma explicite (ou Euler forward) ;

au temps $t_{n+\Theta}$ on peut écrire :

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{X}_{n+1}) &= [\mathbf{C} + \Theta \Delta t \mathbf{K}]_{n+\Theta} \mathbf{X}_{n+1} + \\ &- [\mathbf{C} - (1 - \Theta) \Delta t \mathbf{K}]_{n+\Theta} \mathbf{X}_n - \Delta t \mathbf{F}_{n+\Theta} = 0 \end{aligned} \quad (6.103)$$

avec

$$\Psi(\mathbf{X}_{n+1}) = [\Psi^g(\mathbf{X}_{n+1}), \Psi^c(\mathbf{X}_{n+1}), \Psi^\theta(\mathbf{X}_{n+1}), \Psi^u(\mathbf{X}_{n+1})]^\Theta \quad (6.104)$$

6.9.3 Linéarisation du système

Le système d'équations que l'on a présenté plus haut, est non-linéaire : classiquement on applique la méthode itérative de Newton-Raphson pour la linéarisation :

$$\Psi^\kappa(\mathbf{X}_{n+1}^i) = - \frac{\partial \Psi^\kappa}{\partial \mathbf{X}} \bigg|_{\mathbf{X}_{n+1}^i} \Delta \mathbf{X}_{n+1}^i, \quad \kappa = g, c, t, u \quad (6.105)$$

avec le Jacobien défini de la manière suivante :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{X}} \bigg|_{\mathbf{X}_{n+1}^i} = \left[\begin{array}{cc} \frac{\partial \Psi^g}{\partial \bar{\mathbf{p}}^g} \frac{\partial \Psi^g}{\partial \bar{\mathbf{p}}^c} & \frac{\partial \Psi^g}{\partial \bar{\theta}} \frac{\partial \Psi^g}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \\ \frac{\partial \Psi^c}{\partial \bar{\mathbf{p}}^g} \frac{\partial \Psi^c}{\partial \bar{\mathbf{p}}^c} & \frac{\partial \Psi^c}{\partial \bar{\theta}} \frac{\partial \Psi^c}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \\ \frac{\partial \Psi^t}{\partial \bar{\mathbf{p}}^g} \frac{\partial \Psi^t}{\partial \bar{\mathbf{p}}^c} & \frac{\partial \Psi^t}{\partial \bar{\theta}} \frac{\partial \Psi^t}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \\ \frac{\partial \Psi^u}{\partial \bar{\mathbf{p}}^g} \frac{\partial \Psi^u}{\partial \bar{\mathbf{p}}^c} & \frac{\partial \Psi^u}{\partial \bar{\theta}} \frac{\partial \Psi^u}{\partial \bar{\mathbf{u}}} \end{array} \right] \bigg|_{\mathbf{X}=\mathbf{X}_{n+1}^i} \quad (6.106)$$

et le vecteur $\Delta \mathbf{X}_{n+1}^i$:

$$\Delta \mathbf{X}_{n+1}^i = \left[(\Delta \bar{\mathbf{p}}^g)_{n+1}^i, (\Delta \bar{\mathbf{p}}^c)_{n+1}^i, \Delta \bar{\theta}_{n+1}^i, \Delta \bar{\mathbf{u}}_{n+1}^i \right]^\Theta \quad (6.107)$$

avec la variable i qui tient compte de l'itération.

Après chaque pas de temps, le vecteur $\mathbf{X}_{n+1}$ est mis à jour :

$$\mathbf{X}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{X}_{n+1}^i + \Delta \mathbf{X}_{n+1}^i \quad (6.108)$$

Dans la méthode de Newton-Raphson, les éléments de la matrice Jacobienne sont mis à jour après chaque itération : cette opération est, d'un point de vue numérique, très coûteuse. Souvent, la matrice Jacobienne est donc calculée à la première itération de chaque pas de temps ou, en alternative, après un certain nombre d'itérations.

6.10 Conclusions

Le chapitre qu'on vient de présenter nous a permis d'introduire le modèle THCM selon la formulation proposée par [Schrefler98]. On a donc pu mettre en évidence l'ensemble des phénomènes qui ont lieu dans le béton lorsqu'il y a une élévation de température. En particulier, on a souligné l'importance de l'endommagement ainsi que l'influence de la mécanique sur les phénomènes de transport.

Une formulation de type thermodynamique a été utilisée pour introduire d'abord la formulation de l'endommagement mécanique selon la formulation classique de [Mazars89]. Ensuite, la même approche nous a permis d'introduire les lois et les variables d'état dont la formulation est utilisée pour décrire les aspects liés à la mécanique d'un milieu poreux.

Le modèle a ensuite été complété à travers l'introduction de l'ensemble des lois de type phénoménologique dont la formulation est nécessaire pour la description du comportement du milieu.

Enfin, une comparaison entre le modèle THC et le modèle THCM a mis en évidence les différences entre les deux modèles, et les aspects similaires, et, en particulier, la base commune sur laquelle les deux formulations reposent.

La description mathématique de notre milieu poreux à ce point est donc complète. Il nous reste à présenter le travail qui a été mené grâce aux deux modèles que l'on a présenté. Le prochain chapitre nous permettra donc d'introduire l'ensemble des travaux expérimentaux qui ont été menés dans le cadre de la thèse, ainsi qu'une comparaison entre les résultats de laboratoire et les résultats numériques obtenus à l'aide des deux modèles. En particulier, cette comparaison montrera une bonne correspondance entre les résultats et permettra de souligner la validité des approches numériques qui ont été développées.

Chapitre 7

Résultats expérimentaux et numériques

7.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de présenter les travaux expérimentaux qui ont été réalisés dans le cadre de cette thèse ainsi que les résultats des simulations numériques issues des deux modèles THC et THCM.

Dans la première partie du chapitre on présentera donc un essai, réalisé en collaboration avec le CEA, sur une maquette à échelle réelle pour la simulation du comportement à haute température d'un béton. On présentera les caractéristiques du matériau ainsi que les instruments qui ont été utilisés pour l'acquisition des données expérimentales.

Ensuite, dans la deuxième partie du chapitre, le modèle THC (présenté au chapitre 5) et le modèle THCM (présenté au chapitre 6) seront utilisés pour la simulation de l'essai. On montrera que ces deux modèles sont bien adaptés pour la description du comportement en température du béton et que, en particulier, le modèle THCM permet une prédiction quantitative, et pas seulement qualitative, des champs de température et pression au sein du béton. La comparaison des deux modèles mettra en évidence que la prise en compte de l'endommagement total est nécessaire pour une description du comportement du milieu poreux ainsi que pour une description plus soignée de la physique des phénomènes qui se produisent lorsqu'on augmente la température.

Enfin, l'analyse des résultats expérimentaux ainsi que des résultats issus du modèle THCM, nous permettra de proposer une loi pour décrire l'évolution de la perméabilité intrinsèque en fonction de l'endommagement.

7.2 Description de l'essai

Dans le but de réaliser des essais pour mieux comprendre le comportement à haute température du béton, une maquette à échelle réelle a été réalisée en collaboration avec le CEA. Un cylindre creux, de 1.50m de hauteur, 25cm de diamètre interne, 55cm de diamètre externe, a été chauffé par l'intérieur à la vitesse de $0.1\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$ jusqu'à la température finale de 250°C . Les températures, ainsi que les pressions du gaz à l'intérieur du béton ont été

mesurées et enregistrées pendant l'essai. Après la phase de montée, la température a été gardée constante pendant 30 jours.

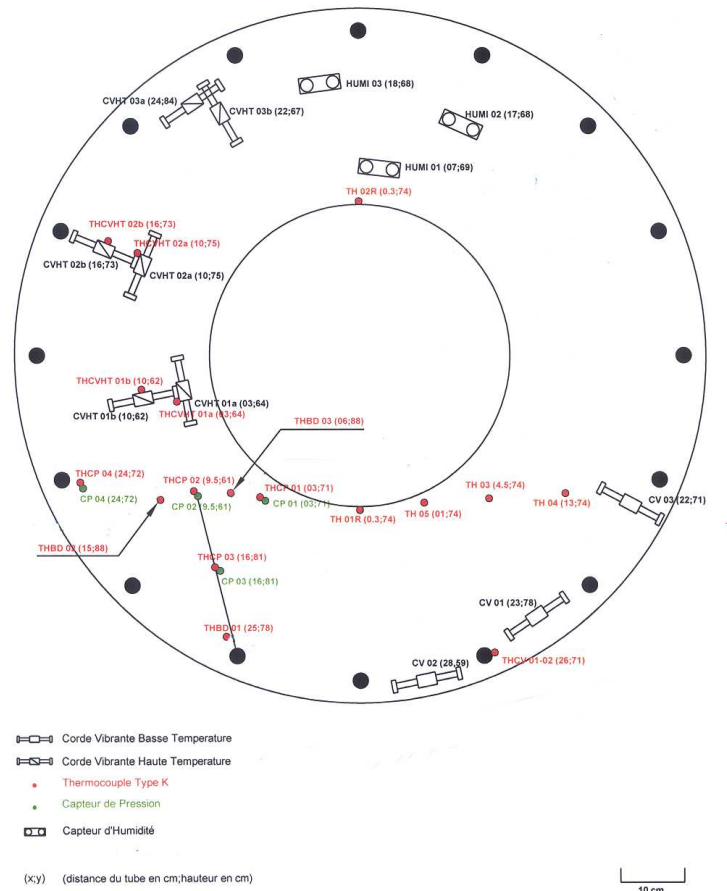


FIG. 7.1 – Schéma de la maquette

7.2.1 Choix de la géométrie

Le but de l'expérience était la reproduction du comportement en température d'une structure en béton en vraie échelle i.e. le chauffage d'une paroi en béton d'environ 30cm d'épaisseur. La réalisation d'une simple paroi s'avère plutôt compliquée, soit pour l'implantation des capteurs (spécialement si, pour vérification, on veut introduire plusieurs capteurs à la même distance), soit pour la réalisation du système de chauffage. Le choix d'une maquette cylindrique présente donc un certain nombre d'avantages. En premier lieu, celle-ci permet l'implantation d'un nombre considérable de capteurs ainsi que de plusieurs capteurs à la même distance radiale pour la vérification des résultats. En plus, la réalisation du moule et le coulage du béton sont des tâches relativement simples, qui ont été résolues à l'aide d'une tôle en acier. La tôle même n'a pas été enlevée pendant l'expérience pour limiter la fissuration à l'extérieur du cylindre. Enfin, le choix d'une géométrie parfaitement symétrique rend la modélisation numérique considérablement plus simple i.e. on peut représenter le cylindre tout simplement au moyen de son rayon.

Constituant (kgm^{-3})	M100
Ciment CEM I 52.5	415
Sable de Seine (0-4mm)	439
Sable du Boulonnais (0-5mm)	432
Gravillon du Boulonnais (5-12.5mm)	488
Gravillon du Boulonnais (12.5-20mm)	561
Fumée de silice	41.6
Superplastifiant résine GT	13.75
Eau	139

TAB. 7.1 – Composition du béton étudié

7.2.2 Confection du béton

7.2.2.1 Composition

Le béton à haute performance qui a été utilisé est un béton de type M100, déjà connu dans le cadre du programme de recherche [BHP2000]. De nombreuses données expérimentales sont disponibles pour ce matériau à température ambiante ; par contre, l'évolution avec la température de certaines caractéristiques (e.g. conductibilité thermique, densité, ...) sont encore en cours d'étude. On a donc complété les données manquantes à l'aide des données d'un béton similaire, le C90 (voir [Hiteco]).

Le béton M100 contient des granulats concassés du Boulonnais de résistance à la compression comprise entre 140 et 180MPa et deux granulométries de sable, un sable du Boulonnais et un sable de Seine qui est un sable roulé silico-calcaire. De la fumée de silice est aussi ajoutée. Le ciment est un ciment de type CEM I 52.5. Le rapport eau-ciment est de 0.33 (voir tab.7.1). Le béton a été confectionné sur le site de l'ENPC.

7.2.2.2 Cure appliquée au béton

Les dimensions importantes du cylindre n'ont pas permis un curage du béton "dans les règles de l'art" (i.e. 24 heures à humidité contrôlée, période dans l'eau etc). Cette limitation est typique des structures en vraie échelle ; le but du CEA étant de reproduire une structure réelle, des compromis sont à accepter par rapport aux éprouvettes de petite taille. De toute manière, le béton a été isolé et l'humidité a été, autant que possible, gardée constante.

7.2.2.3 Caractéristiques mécaniques

On résume dans le tableau 7.2 les caractéristiques mécaniques à 28 jours du béton M100.

7.2.3 Dispositif de mesure

Le système de mesure des variables mesurables dans le béton est constitué par des capteurs et une centrale d'acquisition avec d'enregistrement des données. Un schéma est présenté en fig.7.1.

Paramètre	Symbole	Unit	Value
Densité apparent	ρ	$[kgm^{-3}]$	2620
Module de Young	E	$[GPa]$	86
Coefficient de Poisson	ν	$[-]$	0.18
Résistance la compression	f_c	$[MPa]$	103
Résistance à la traction	f_t	$[MPa]$	6.0
Porosité	ϕ	$[-]$	10

TAB. 7.2 – Propriétés mécaniques pour le béton M100 à température ambiante

7.2.3.1 Les capteurs

Nous avons utilisé 36 capteurs :

- 20 capteurs de température
- 9 cordes vibrantes
- 3 capteurs d'humidité
- 4 capteurs de pression

Les capteurs de température Il s'agit de thermocouples de type K, la plupart connectés à la centrale de mesure par l'intermédiaire de rallonges adaptées. Le principe physique de ces capteurs de température est la mesure de la différence de tension électrique qui apparaît au contact de deux métaux différents. Cette tension est une fonction de la température et des types de métaux qui forment le thermocouple. La précision est de l'ordre de $2.5^{\circ}C$.

Les cordes vibrantes Une corde vibrante permet, à travers la fréquence de résonance de la corde tendue (fonction de la distance entre les deux extrémités de la corde), de mesurer la déformation du béton pendant le chauffage. Des cordes vibrantes de marque TELEMAT, réalisées spécialement pour cette expérience afin de résister aux hautes températures, ont été utilisées. Les principaux problèmes rencontrés étaient liés à la nature de la résine qui constitue la gaine du fil des bobines et à la faiblesse du signal électrique obtenu sur la bobine d'écoute. En effet, le diamètre du fil gainé spécial était très supérieur au diamètre du fil ordinaire. Il ne permettait, à encombrement égal, qu'un nombre très réduit de spires. La dilatation de la corde, suite à la déformation mécanique, provoque une augmentation de la fréquence de vibration ; l'effet thermique, par contre, entraîne une diminution de la fréquence. Ceci dit, l'effet thermique a été supérieur à la prévision : lors de l'expérience, les fréquences des cordes sont descendues souvent au dessous de 450Hz, la fréquence la plus basse que nous avions prévue pendant l'expérience et, donc, la plus basse mesurable par le système d'acquisition.

Pour cette raison, les résultats issus des cordes vibrantes n'ont pas pu être retenus pour les analyses.

Les capteurs d'humidité La quantité d'eau dans un matériau est exprimée par la teneur en eau massique qui est le rapport de la masse d'eau contenue dans le matériau à la masse du matériau sec. Le principe physique pour la réalisation des capteurs utilisés est basé sur le fait que les valeurs de la constante diélectrique (ou permittivité) des différents constituants d'un matériau poreux (solide, eau liquide, gaz) sont très différentes. L'eau en particulier a

une constante très élevée par rapport à celles des autres constituants. Il n'y a pas de relation simple qui lie la permittivité du matériau à celle de ses constituants, mais la présence d'eau influe de façon prépondérante sur la valeur de la capacité diélectrique. En particulier, en mesurant la capacité diélectrique équivalente du milieu hétérogène à une fréquence donnée, on peut déterminer, grâce à un étalonnage, la teneur en eau du matériau.

En particulier, si la fréquence est élevée (entre 30MHz et 1GHz), on peut mesurer de manière quantitative la teneur en eau. Pendant l'expérience, le manque de moyens techniques n'a pas permis une mesure à haute fréquence : on a donc pu obtenir des résultats qualitatifs (voir fig.7.2). On n'a pas pu, donc, utiliser ces données pour l'analyse numérique de l'essai.

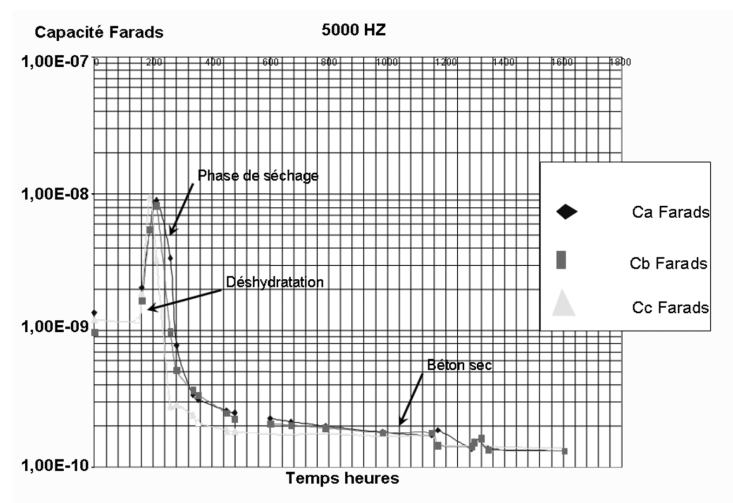


FIG. 7.2 – Résultats qualitatifs issus des capteurs de teneur en eau

Les capteurs de pression Les capteurs de pression (modèle XCQ de la marque Kulite) ont été fournis par le CEA. Ces capteurs sont compensés en température sur une plage allant de $25^{\circ}C$ à $250^{\circ}C$. Quatre capteurs ont été utilisés, à une distance de 3, 9, 16, 25 cm de la face chauffée. Le capteur à 9cm n'a pas fonctionné, très probablement à cause d'un problème pendant l'implantation du capteur même. La pression mesurée par ce capteur a été la pression de vapeur saturante i.e. très probablement la formation d'une poche d'air autour de la tête du capteur, a donné un effet "cocotte minute" qui a empêché la mesure de la pression générée à l'intérieur du béton. Nous avons également eu un problème au début d'expérience avec le capteur à 16 cm : un mauvais contact dans un cylindre de 1mm de diamètre, inséré sur le câble de liaison entre le capteur et la centrale de mesure. Ce cylindre, fabriqué par Kulite, contient un réseau de résistances qui servent à faire la compensation en température. En conséquence, on a obtenu pour ce capteur des valeurs non compensées en température. Dans un deuxième temps, en appliquant aux valeurs brutes un coefficient correctif calé sur la valeur initiale, ces données ont été corrigées et donc retenues pour les analyses suivantes.

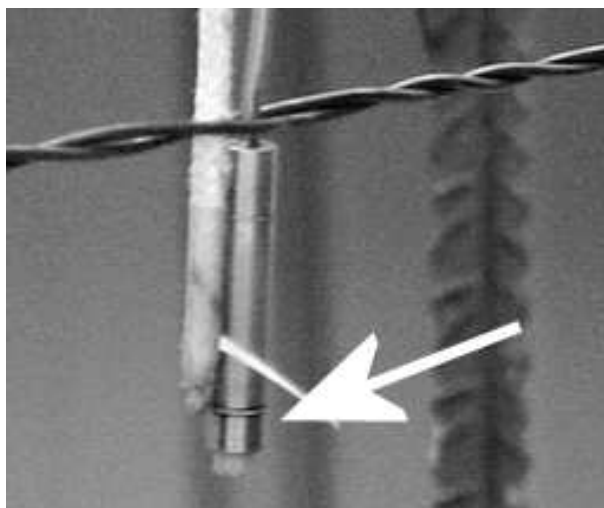


FIG. 7.3 – Capteur de pression

7.2.3.2 La centrale de mesure

La centrale de mesure se compose d'un ordinateur, d'un logiciel LabView, d'un logiciel WinVNC qui permet de surveiller à distance l'essai, de deux cartes d'acquisition National Instruments, d'un conditionneur (fabriqué au sein du LAMI) pour les cordes vibrantes et les capteurs et d'un dispositif "chien de garde" lié à un système d'alarme pour signaler un danger ou un dysfonctionnement du système. En particulier, à travers le logiciel LabView il est possible de commander la montée en température grâce à une comparaison avec les données transmises par les thermocouples placés sur la peau, à l'intérieur du cylindre. Le même logiciel a été utilisé aussi pour l'acquisition des données expérimentales et permet l'affichage des mesures ainsi que leur stockage. Ceci constitue une vérification en temps réel des résultats et permet d'intervenir rapidement en cas de problèmes.

7.2.4 Description de l'essai

Le béton a été coulé dans un coffrage en carton pour le cylindre interne et en tôle d'acier pour le cylindre externe. En particulier, la tôle en acier n'a pas été enlevée pendant le chauffage du béton pour limiter les fissurations sur la peau externe du béton et empêcher la fuite trop rapide du mélange gazeux. Avant de lancer le test, le béton a mûri pendant environ trois mois. La plupart des auteurs affirment que deux mois de maturation sont nécessaires pour l'étude du comportement à haute température.

Le cylindre a été donc chauffé sur la face intérieure à l'aide d'une résistance de puissance de 1400W, qui a permis d'atteindre la température finale de 250°C (sur la peau interne du cylindre) à une vitesse de montée de $0.1^{\circ}\text{C}/\text{min}$. La choix de la température finale a été fait en fonction des capteurs de pression qui ont été conçus pour résister jusqu'à cette température. En ce qui concerne la vitesse de chauffage, on a choisi une montée très lente (par rapport, par exemple, à la courbe ISO-feu) pour éviter les phénomènes d'écaillage explosif et laisser le temps au béton de se déshydrater complètement (on a donc pu négliger la cinétique de la déshydratation).

La température maximale a été atteinte en environ 38h et a été maintenue pendant un mois. Cette durée a permis d'observer les phénomènes qui se sont produits au sein du béton, en particulier grâce aux capteurs de température et de pression.

7.3 Résultats expérimentaux

Le but de ce paragraphe est de présenter les résultats de l'analyse expérimentale qui a été réalisée au sein du LAMI. Cette expérience a donc permis la mesure et l'acquisition des champs de température et pression du gaz dans un béton soumis à un chauffage.

Au-dessous du point d'ébullition de l'eau, les gradients de pression qui se produisent au sein du béton sont assez faibles i.e. les phénomènes de transport de masse sont pratiquement négligeables. Le mélange (formé du gaz et de l'eau liquide libre) a tendance à se déplacer vers les zones froides du béton ; par conséquent on obtient une augmentation de la saturation en liquide et de la teneur en eau vers les couches les plus externes du cylindre.

La température, suite au chauffage sur la paroi interne, augmente doucement à l'intérieur du béton (voir fig.7.4). Quand la température dépasse le $378.15K$, i.e. $105^{\circ}C$, les phénomènes

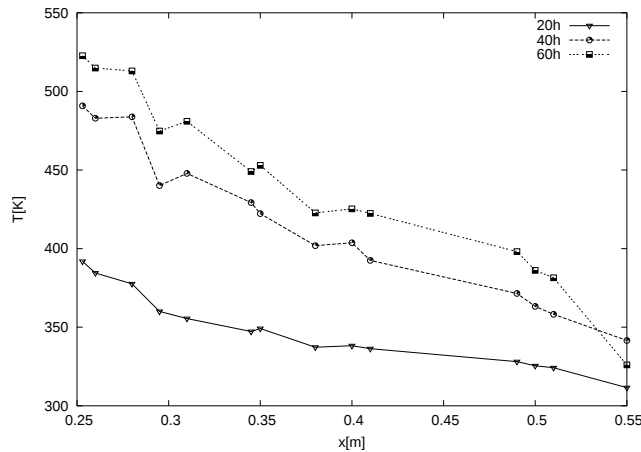


FIG. 7.4 – Température vs rayon

deviennent importants. On rappelle que cette température est purement conventionnelle ; on a cependant vérifié de manière expérimentale que, effectivement, à partir de cette température, les phénomènes de transport d'eau liquide/gaz deviennent plus importants suite à la déshydratation (voir fig.7.5).

Celle-ci relâche de l'eau liquide (qui est sujette à l'ébullition) et entraîne une évolution très rapide des caractéristiques géométriques du réseau poreux. Le mélange gaz/eau liquide libre continue à se déplacer vers les zones les plus froides du cylindre creux ; le béton étant un matériau très peu poreux, empêche la fuite du mélange gaz/eau libre, la pression derrière le front de désaturation augmente de manière significative (voir fig.7.6).

La pression maximale atteint graduellement la valeur d'environ $0.22MPa$ au temps $t = 38h$ qui correspond au pic de température. Cependant, le front de désaturation se déplace vers les couches externes, plus froides, du cylindre si bien que le front de chaleur se déplace vers l'intérieur du béton. En même temps, la teneur en eau et le niveau de saturation en liquide augmentent dans la zone derrière le front.

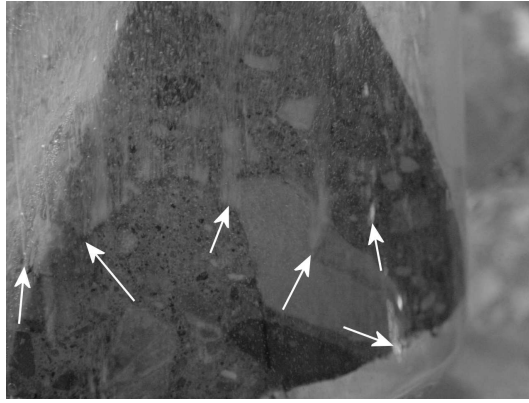


FIG. 7.5 – Mise en évidence de la perte de masse aux alentours de 105°C : on remarque la fuite d'air/vapeur d'eau à travers une fissure et des macro-pores

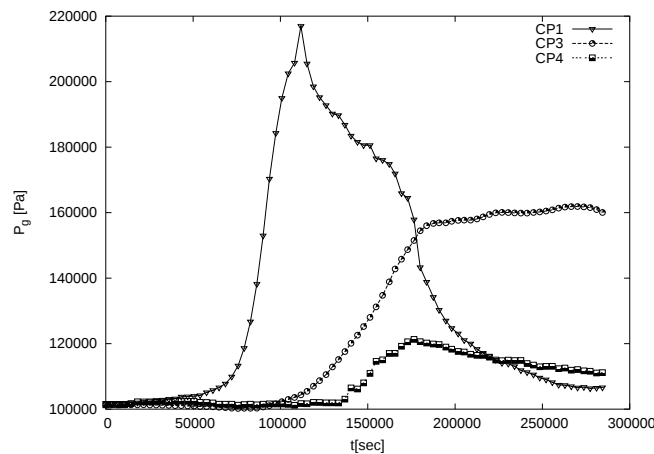


FIG. 7.6 – Pression du gaz vs temps

Les phénomènes que l'on a décrits sont naturellement couplés avec l'évolution de la microstructure du milieu poreux. On a déjà remarqué que seul le modèle THCM prend en compte les effets liés à la mécanique, et, en particulier, les effets liés à l'endommagement i.e. les microfissures qui se forment suite au gradient de température entre l'intérieur et l'extérieur du cylindre. On donnera plus loin une description de ces phénomènes. En particulier, les modifications entraînées par l'élévation de température influencent les phénomènes de transport à travers une augmentation de la porosité et de la perméabilité intrinsèque. Les modifications les plus évidentes sont bien entendu localisées au voisinage des couches les plus proches de la source du chauffage, la température y étant plus élevée.

Après avoir atteint la valeur maximale de 250°C , le champ de température devient stationnaire sur l'épaisseur après environ $50h$, alors que les autres variables continuent leur évolution. Suite à l'arrêt du phénomène de déshydratation, la production d'eau libre dans le béton s'achève, le pic de pression continue son déplacement vers les couches externes du cylindre tout en diminuant sa valeur maximale. De la même manière, la saturation en liquide décroît suite au transport du mélange gaz/eau liquide vers les zones froides.

En synthèse, l'expérience a permis la mesure directe de la température et de la pression du gaz. Cependant, d'autres variables (notamment la porosité, la saturation en liquide,

l'endommagement) sont intéressantes pour la description du comportement du béton. Leur mesure étant difficile voire impossible, la description de ces grandeurs sera effectuée à travers une comparaison des résultats issus des modèles THC et THCM.

7.4 Modélisation numérique

7.4.1 Modèle THC

7.4.1.1 Discrétisation du cylindre

Le cylindre a été discrétisé à l'aide de la méthode des volumes finis. La symétrie axiale du cylindre a permis de représenter la maquette à travers son rayon i.e. on considère les flux comme unidirectionnels. On a donc réduit le problème 3D à un problème 1D, beaucoup plus simple à résoudre. La méthode de discrétisation est inspirée de [Mainguy99] : le rayon a été schématisé à travers une grille de noeuds autour desquels les volumes finis ont été construits (voir fig.7.7). Le cylindre a donc été discrétisé à travers 11 volumes. Ce nombre de volumes peut apparaître un peu faible par rapport à la dimension du cylindre. Cependant on a remarqué qu'un nombre supérieur de volumes augmente de manière significative le temps de calcul sans donner de bénéfices en termes de qualité des résultats.

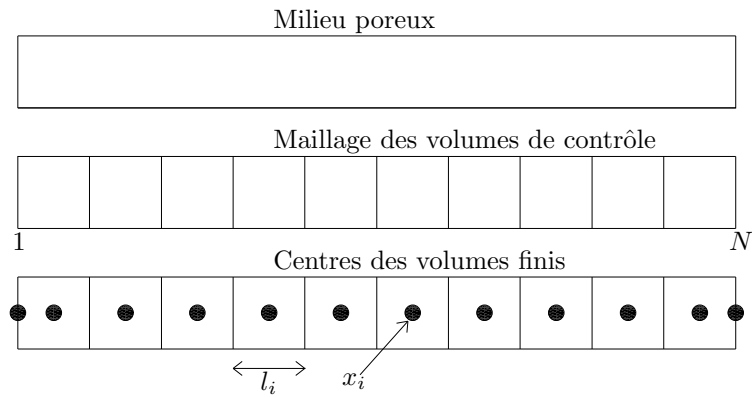


FIG. 7.7 – Discrétisation 1D du domaine Ω

7.4.1.2 Conditions initiales et aux limites

Le système algébrico-différentiel que l'on a écrit requiert des conditions initiales et aux limites pour pouvoir être résolu.

Conditions initiales Les conditions initiales pour tous les volumes de contrôle sont imposées sur les variables principales. En particulier, on a imposé la température initiale $\theta = 293.15K$, la masse déshydratée $m_{des} = 0$, la pression du gaz égale à la pression atmosphérique et l'humidité relative $HR = 50\%$ (voir tab.7.5).

Les valeurs initiales des autres variables, comme on l'a déjà remarqué au chapitre 5, sont calculées à partir de ces variables par substitution dans les autres équations algébriques.

Variable	Valeurs
θ	$\theta = 293.15[K]$
m_{des}	$m_{des}^0 = 0[kgm^{-3}]$
$p^{gw} + p^{ga}$	$p_0^{gw} + p_0^{ga} = 101325[Pa]$
p^{gw}	$p_0^{gw} = 1300[Pa]$

TAB. 7.3 – Conditions initiales THC

Conditions aux limites La définition des valeurs à l'état 0 des variables principales doit être complétée par la définition des conditions aux limites pour les variables θ , p^{gw} et p^{ga} .

Indiquons alors avec l'indice 1 le volume le plus proche de la source de chauffage et avec l'indice N le dernier volume, le plus loin de la source. Les conditions aux limites sont résumées dans le tableau 7.4

Face	Variables	Valeurs et coefficients	Type de condition
1	p_g	$p_g = 101325[Pa]$	I
	p_{gw}	$HR \times p_{sat}(\theta)$	I
	θ	$\Delta\theta = 0.1K/min$	I
N	p_g	$p_g = 101325[Pa]$	I
	p_{gw}	$HR \times p_{sat}(\theta)$	I
	θ	$\alpha_c = 8[WKm^{-2}]$	III

TAB. 7.4 – Conditions aux limites THC

En ce qui concerne la température, nous avons imposé sur le volume 1 la courbe de montée expérimentale de $0.1K/min$ (condition à la Dirichlet, type I) et, sur le volume N , un flux d'échange convectif avec l'extérieur (coefficient d'échange $\alpha_c = 8[WKm^{-2}]$) (condition à la Cauchy, type III).

En ce qui concerne la pression du gaz, sur le volume 1, directement en contact avec l'atmosphère, la pression doit rester égale à la pression initiale. Sur le volume N , on fait l'hypothèse que la tôle en acier empêche tous les échanges de matière avec l'extérieur i.e. il faudrait imposer un flux massique nul. Cependant, au lieu d'imposer le flux d'échange égal à 0, nous avons utilisé une condition de type Dirichlet (valeur imposée) sur la pression du gaz. Cette approximation s'avère de toute manière acceptable car la pression du gaz à l'extérieur (voir e.g. les résultats expérimentaux sur le capteur de pression 4) ne diffère pas de manière significative de la pression atmosphérique.

7.4.1.3 Caractérisation du matériau

Un modèle numérique nécessite un certain nombre de grandeurs pour pouvoir décrire les caractéristiques du milieu et définir le comportement du béton. Comme on l'a déjà remarqué, ces valeurs, à l'exception de la perméabilité à chaud, peuvent en général être trouvées dans la littérature ou être obtenues grâce à des mesures expérimentales (voir chapitres précédents).

La perméabilité joue un rôle importante dans un milieu poreux vis-à-vis de phénomènes de transport. Sa définition, ainsi que la description de son évolution, sont donc importantes

pour une reproduction correcte du comportement du béton en température. Cependant, sa mesure à chaud est difficilement accessible : il faut donc obtenir cette évolution à travers un certain nombre de considérations.

Au chapitre 5, on a vu que, en général, l'évolution de la perméabilité est liée à l'évolution de la microstructure et, donc, à la déshydratation. Cependant, par simplicité, cette dépendance est normalement exprimée en fonction de la température. Comme dans notre cas la vitesse de chauffage est assez lente, la cinétique de déshydratation est négligeable et température et déshydratation sont synonymes. On a aussi vu que, d'après [Herbst89], la pression du gaz joue un rôle en ouvrant les fissures et augmente donc la perméabilité. L'endommagement aussi joue un rôle très important pour la définition de l'évolution de la perméabilité. Comme il n'est pas présente dans ce modèle, on ne peut pas prendre en compte ses conséquences sur l'évolution de la perméabilité : cet effet sera donc pris en compte dans le modèle THCM (voir sec.7.4.2)

D'après [Gawin03] nous avons donc retenu la relation suivante pour décrire l'évolution de la perméabilité :

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_0 \cdot 10^{A_\theta(\theta - \theta_0)} \left(\frac{p^g}{p_0} \right)^{A_p} \quad \text{formulation THCM}$$

Avec A_θ et A_p des paramètres à déterminer et $\mathbf{K}_0$ la perméabilité initiale. Nous avons donc décidé de régler dans les calculs les paramètres A_θ et A_p de manière à obtenir des résultats satisfaisants vis-à-vis des variables qu'on a pu mesurer pendant l'expérience, i.e. la température et la pression. En ce qui concerne la perméabilité initiale, celle-ci est une caractéristique typique du béton que l'on peut mesurer à l'aide d'un perméamètre. On présentera donc dans la suite (voir sec.7.4.3) la démarche qu'on a suivie et qui nous a permis de mesurer la perméabilité intrinsèque du béton à l'état initial.

7.4.2 Modèle THCM

L'utilisation de la méthode des éléments finis permet une plus grande flexibilité pour la réalisation du maillage. On a donc pu réduire l'étude du cylindre à un problème 2D grâce à la double symétrie du cylindre. Vis-à-vis de l'endommagement, un maillage 2D garde l'avantage, par rapport au maillage 1D, de vérifier qu'il n'y a pas localisation de l'endommagement et donc pas d'éventuelle formation de macrofissures.

Le maillage bidimensionnel permet aussi d'imposer des conditions aux limites plus proches des conditions de laboratoire en particulier en ce qui concerne la partie mécanique du problème. On a donc discrétisé le cylindre à travers 150 éléments à 8 noeuds de type Serendipity pour un total de 501 noeuds (voir fig.7.8). La maquette a été simulée pendant les premières 70 heures avec un pas de temps de 4s. Comme dans le cas du modèle THC, un maillage plus fin du cylindre (par exemple de la zone la plus proche de la source chauffante) n'a pas donné de différences significatives vis-à-vis des résultats tout en augmentant de manière considérable le temps de calcul.

7.4.2.1 Conditions initiales et aux limites

Conditions initiales Les conditions hygro-thermiques initiales que l'on a imposées dans le cas THCM restent les mêmes que pour le cas précédent. L'ensemble des conditions est

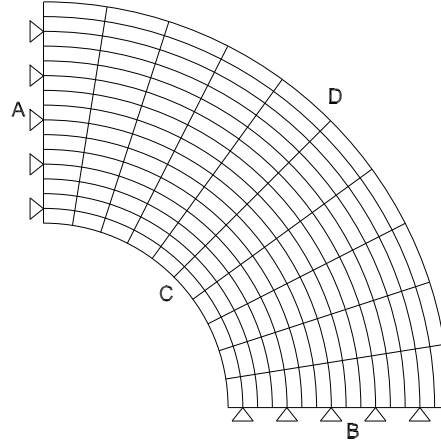


FIG. 7.8 – Maillage 2D

résumé dans le tab.7.2.

Variable	Valeurs
θ	$\theta = 293.15[K]$
u_x	$u_x^0 = 0[m]$
u_y	$u_y^0 = 0[m]$
$p^{gw} + p^{ga}$	$p_0^{gw} + p_0^{ga} = 101325[Pa]$
p^{gw}	$p_0^{gw} = 1300[Pa]$

TAB. 7.5 – Conditions initiales THCM

Conditions aux limites En ce qui concerne les conditions aux limites, on nomme A, B, C, D les faces du maillage (voir fig.7.8). On résume les conditions dans le tab.7.6.

Les conditions sur les faces A, B, C restent les mêmes que pour le cas THC. La face D, celle avec la tôle en acier, mérite une attention supplémentaire soit d'un point de vue hygro-thermique (elle empêche les échanges de matière avec l'extérieur), soit d'un point de vue mécanique. L'implémentation du modèle THCM permet d'imposer des flux pour la description de conditions aux limites : on a donc pu imposer, dans ce cas, un flux de matière nul pour empêcher les échanges hydrauliques avec l'extérieur ($q_{gw} = q_w = 0$).

On souligne aussi que le coefficient d'échange thermique α_c est légèrement différent par rapport à celui du cas THC pour compenser la différence des lois de conductivité thermique utilisées dans les deux modèles. Les différences restent pratiquement négligeables.

En ce qui concerne les conditions mécaniques sur la face D, la réponse thermo-élastique de la tôle en acier a été introduite à l'aide d'un chargement équivalent.

La tôle est essentiellement sujette à deux chargements : la dilatation thermique, suite à l'augmentation de température, et la tension radiale transmise par le cylindre. On a donc imposé une charge équivalente variable à travers une formule itérative :

$$F = \left(\frac{2\pi E s}{L_0 r} \right) U_r - \frac{\alpha_s E s \Delta \theta}{r} \quad (7.1)$$

Face	Variables	Valeurs et coefficients	Type de condition
A	u_x	0	I
	p_g	$p_g = 101325[Pa]$	I
	p_c	$q_{gw} = q_w = 0$	II
	θ	$q_\theta = 0$	II
B	u_y	0	I
	p_g	$p_g = 101325[Pa]$	I
	p_c	$q_{gw} = q_w = 0$	II
	θ	$q_\theta = 0$	II
C	p_g	$p_g = 101325[Pa]$	I
	p_c	$p_{gw} = 1300[Pa], \beta_c = 0.07[ms^{-1}]$	III
	θ	$\Delta\theta = 0.1K/min$	I
D	u_x	Charge eq. imposée	I
	u_y	Charge eq. imposée	I
	p_g	$p_g = 101325[Pa]$	I
	p_c	$q_{gw} = q_w = 0$	II
	θ	$\alpha_c = 6.9[WKm^{-2}]$	III

TAB. 7.6 – Conditions aux limites THCM

avec L_0 la circonférence initiale du cylindre, r le rayon, U_r le déplacement radial, s l'épaisseur de la tôle en acier et α_s le coefficient de dilatation thermique linéaire de l'acier. De toute manière, le chargement mécanique imposé par la tôle en acier a été très faible.

7.4.2.2 Caractérisation du matériau

Les caractéristiques du matériau, nécessaires pour décrire le comportement mécanique du béton, ont été présentées au chapitre 6. On a déjà remarqué que l'endommagement joue un rôle très important pour la définition de l'évolution de la perméabilité : ses conséquences sur l'évolution de la perméabilité seront donc prises en compte dans cette modélisation.

Dans le cas du modèle THCM, l'évolution de la perméabilité intrinsèque peut être reliée aussi à l'évolution de l'endommagement. Ce paramètre prend en compte la dégradation et la fissuration du béton pendant le chauffage : il joue donc un rôle majeur sur les phénomènes de transport.

D'après [Gawin03] nous avons retenu la relation suivante pour décrire l'évolution de la perméabilité, en fonction de la température, de la pression du gaz et de l'endommagement total :

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_0 \cdot f(\theta) \left(\frac{p^g}{p_0} \right)^{A_p} 10^{A_D D} \quad \text{formulation THCM}$$

avec $f(\theta) = 10^{A_\theta^2(\theta-\theta_0)^2 + A_\theta^1(\theta-\theta_0)}$.

Comme dans le cas précédent, nous avons donc décidé de régler les paramètres A_θ^1 , A_θ^2 , A_p et A_D de manière à obtenir des résultats satisfaisants vis-à-vis des températures et des

pressions.

En ce qui concerne la perméabilité initiale, on présentera au paragraphe 7.4.3) la démarche qu'on a suivie et qui nous a permis de mesurer sa valeur à l'état initial. Les paramètres utilisés dans les deux lois de perméabilité ainsi qu'une description des résultats obtenus seront donnés plus loin.

7.4.3 Mesure de la perméabilité au gaz

La perméabilité au gaz a été mesurée à l'aide d'un perméamètre à charge constante de type Cembureau [Kollek89]. En fig.7.9 on donne un schéma du principe du perméamètre.

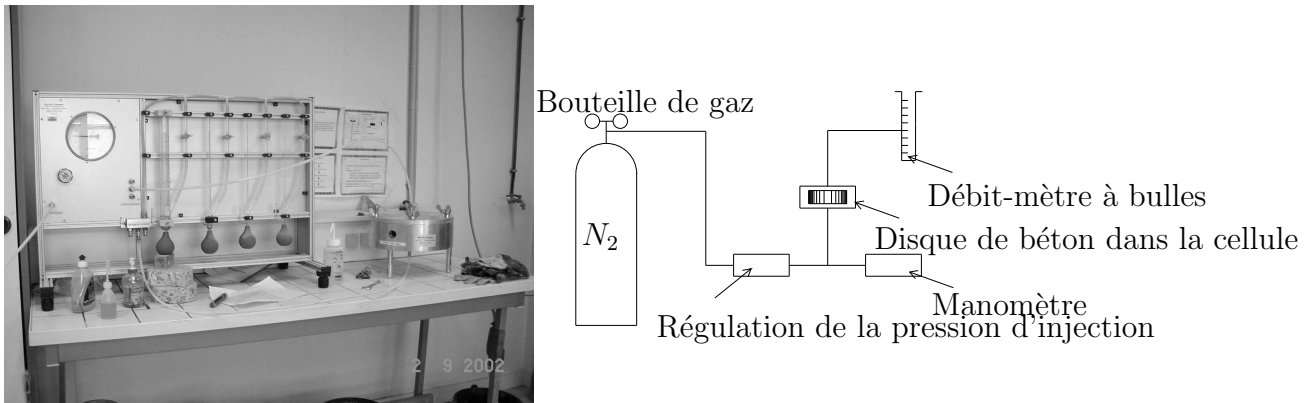


FIG. 7.9 – Dispositif expérimental de mesure de perméabilité au gaz : perméamètre à charge constante

La pression relative $p_{inj} - p_{atm}$ (avec p_{inj} la pression d'injection et p_{atm} la pression atmosphérique de sortie) appliquée à l'échantillon est mesurée à travers un manomètre analogique. Les mesures de perméabilité ont lieu en salle climatisée à $20 \pm 1^\circ C$ et $HR = 50 \pm 5\%$, avec de l'azote pour gaz percolant. L'échantillon est disposé dans une cellule appropriée; les deux faces planes reposent sur une plaque striée permettant une répartition homogène de la pression. La face circulaire est entourée d'un manchon en gomme étanche, plaqué par la pression d'une chambre à air à la pression d'environ 0.7MPa. Cette précaution assure l'étanchéité latérale des cellules. L'efficacité du système a été testée à l'aide d'un disque de même dimension en PVC massif.

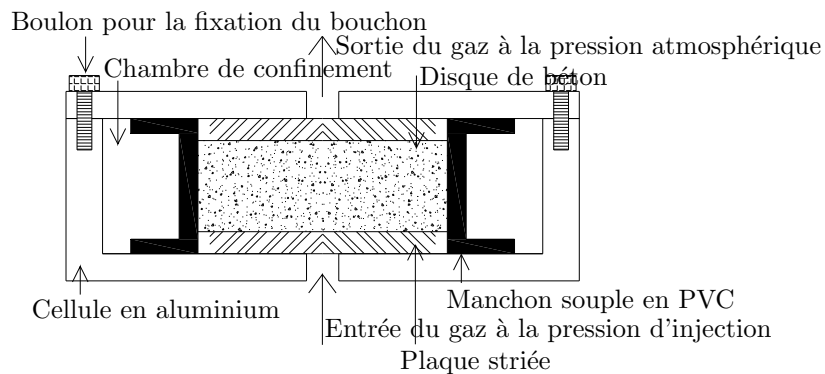


FIG. 7.10 – Schéma de la cellule du perméamètre

7.4.3.1 Protocole de mesure

Les essais de perméabilité au gaz effectués comprennent plusieurs mesures de perméabilité apparente à différentes pressions d'injection (voir sec.3). Lorsque cela est possible, quatre pressions d'injections sont appliquées dans cette étude expérimentale, de manière à pouvoir vérifier le fait que les mesures se trouvent alignées (voir chapitre 3). Les débits sont mesurés à pression atmosphérique à l'aide d'un débit-mètre à bulle; le perméamètre dispose pour cela de plusieurs tubes de différents calibres, de telle façon qu'une bulle de savon parcourt la longueur d'un tube pendant une durée comprise entre 20 et 60 secondes conformément aux recommandations [Kollek89].

Comme on a remarqué au chapitre 3, il est nécessaire d'attendre un temps suffisamment long entre deux mesures afin que l'écoulement puisse s'établir en régime permanent à travers l'échantillon. Généralement un temps de 30 minutes suffit pour que l'écoulement soit stable. Si les débits mesurés diffèrent de manière significative (de l'ordre de 5%), un temps supplémentaire est attendu avant de procéder aux mesures de débit pour la même pression d'injection.

7.4.3.2 Préconditionnement

On a déjà remarqué au chapitre 3 l'importance du preconditionnement des éprouvettes avant la mesure de la perméabilité. Pour la mesure de la perméabilité au gaz il est donc nécessaire de faire subir aux échantillons un séchage préalable. D'ailleurs le séchage peut faire varier la perméabilité au gaz des bétons de plusieurs ordres de grandeur : il est donc très important de savoir quel séchage il convient d'appliquer pour évacuer uniquement l'eau libre des échantillons. La difficulté réside dans le fait qu'il faut établir quel est le séchage qui modifie ou dégrade au minimum la structure poreuse du matériau.

Les échantillons ont été donc soumis à un séchage modéré dans un four ventilé à la température de 50°C pendant un mois avant que la première mesure ne soit effectuée. On peut considérer que ce type de chauffage n'engendre quasiment aucun endommagement dans le béton, permettant en même temps un drainage suffisant pour initier la percolation du gaz à travers les échantillons. Un chauffage à une température plus élevée endommage la microstructure du béton; le problème est que, à des températures faibles, la durée de stabilisation et d'homogénéisation du degré de saturation est très longue, notamment dans le cas d'un BHP. Après la mesure de perméabilité, le séchage des échantillons a continué pendant deux mois supplémentaires. Enfin, la perméabilité a été vérifiée à nouveau sur des échantillons choisis au hasard pour vérifier les mesures précédentes. Aucune différence de perméabilité n'a été remarquée lors de la deuxième session de mesures.

En ce qui concerne le résultat des mesures, la perméabilité intrinsèque a été évaluée à $2 \times 10^{-17} \text{m}^2$.

On dispose alors de toutes les données pour pouvoir simuler l'expérience du laboratoire. Dans la suite on donnera les résultats numériques obtenus à l'aide des modèles THC et THCM. En particulier, on portera attention à l'évolution des variables qui ont été mesurées pendant l'essai, la température et la pression du gaz. Dans le cadre du modèle THCM, les résultats numériques concernant l'évolution de l'endommagement seront aussi présentés. Les résultats numériques sont donnés aux pas de temps $t = 10h, 20h, 30h, 40h, 50h, 60h$. Au delà de ce pas de temps, les résultats expérimentaux ne sont pas significatifs.

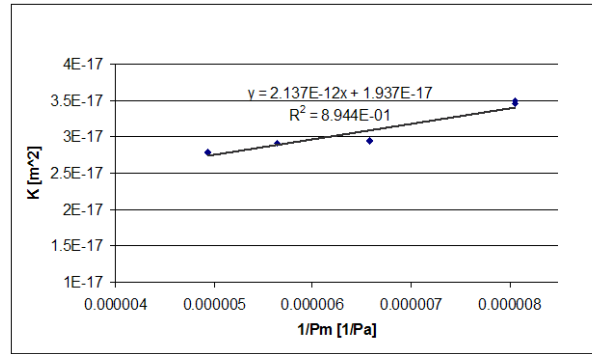


FIG. 7.11 – Résultat d'un essai de perméabilité au gaz sur un échantillon vierge

7.5 Comparaison entre les résultats expérimentaux et numériques

On rappelle que les résultats numériques présentés ci-dessous ont été obtenus après un réglage des paramètres qui définissent l'évolution de la perméabilité intrinsèque.

Les profils de température montrent une bonne correspondance avec les résultats expérimentaux aussi bien pour le modèle THC que pour le modèle THCM. On peut observer de petites différences tout au début du chauffage; ceci est dû au chauffage non-uniforme dans les couches externes du cylindre i.e. les cycles jour-nuit ont eu une certaine influence sur l'échauffement du cylindre. Ces petites perturbations disparaissent devant les températures plus élevées atteintes ensuite par le béton i.e. les perturbations ne sont plus présentes à l'équilibre (fig.7.12, fig.7.13, fig.7.14). Au début de l'expérience, on peut remarquer aussi des différences entre les deux modèles THC et THCM; ceci est lié à un choix différent des coefficients d'échange avec l'atmosphère externe pour prendre en compte les différentes conductibilités thermiques qui ont été utilisées dans les deux modèles. Les différences se compensent lorsque la température augmente et, à la fin du chauffage, les deux modèles donnent des températures pratiquement identiques.

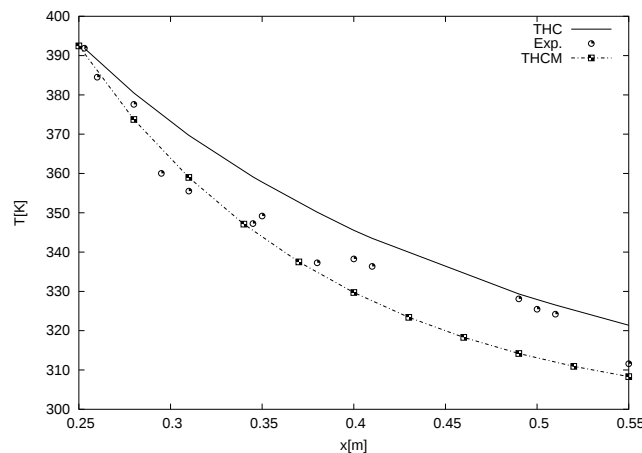
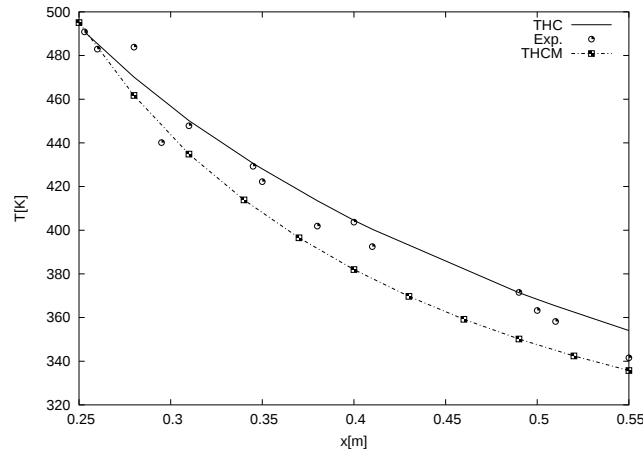
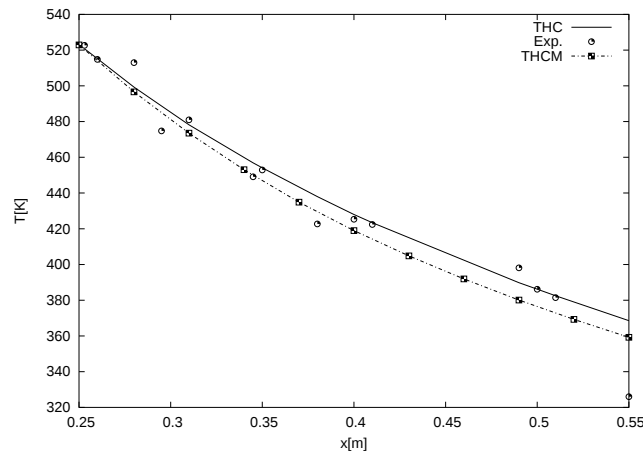


FIG. 7.12 – Température vs rayon à t=20h

FIG. 7.13 – Température vs rayon à $t=40h$ FIG. 7.14 – Température vs rayon à $t=60h$

En ce qui concerne les pressions du gaz, le capteur à 9cm de la surface chauffée étant défaillant, la comparaison a été menée sur les trois capteurs restants. La corrélation est bonne, même si les pressions calculées ne sont pas parfaitement égales aux valeurs expérimentales (fig.7.15, fig.7.16, fig.7.17).

En ce qui concerne le modèle THC, la correspondance seulement qualitative entre les résultats numériques et expérimentaux peut être expliquée de différentes manières. Les phénomènes qui ont lieu dans le béton sont très compliqués : leur mesure et leur reproduction requièrent un modèle complexe et complet. Il ne faut pas oublier que le modèle THC est relativement simple (on néglige la mécanique) et que des lois simplifiées ont été utilisées pour décrire le comportement du matériau.

Pour le modèle THCM, la comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux pour la pression du gaz souligne la capacité de prédiction du code de calcul Hitecosp.

La comparaison sur le premier capteur de pression est seulement qualitative ; si l'on considère que la pression du gaz mesurée pendant la première phase de montée suit la pression de vapeur saturante, on peut bien imaginer que sur ce capteur on a partiellement retrouvé le même effet que celui que l'on a retrouvé sur le capteur à 9cm i.e. la formation d'une petite poche d'air autour de la tête du capteur lors de la mise en place. En ce qui

concerne les capteurs à 16cm et à 25cm, la corrélation est bonne bien que, à partir d'un certain moment, les valeurs expérimentales montrent un changement brutal de comportement. La descente très rapide de la pression mesurée est probablement due à la formation d'une microfissure au voisinage du capteur qui a laissé échapper le mélange air-eau vapeur.

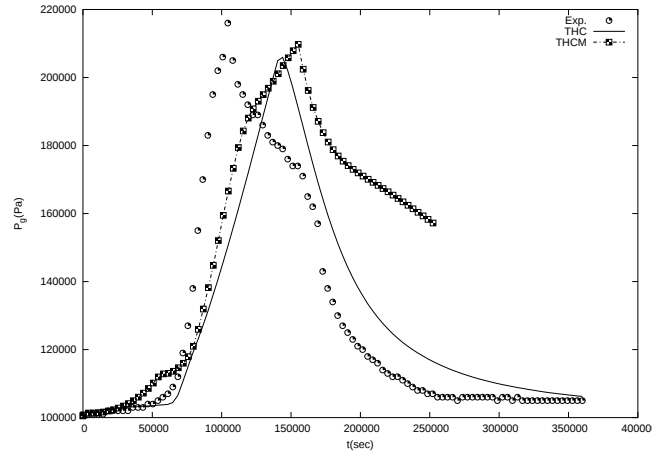


FIG. 7.15 – Pression numérique et expérimentale sur le capteur 1 (3cm)

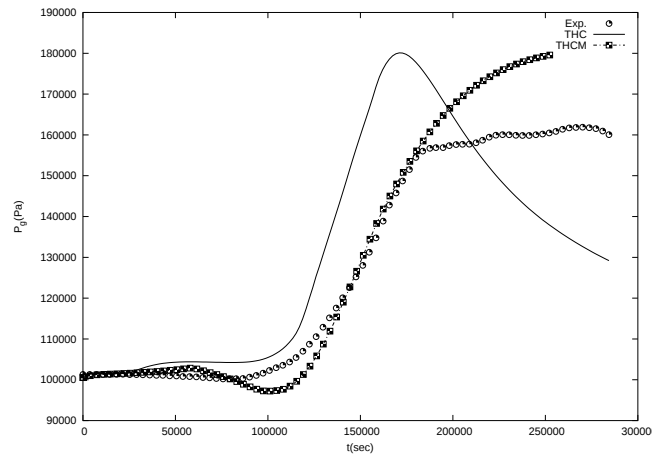


FIG. 7.16 – Pression numérique et expérimentale sur le capteur 3 (16cm)

On complète dans la suite la comparaison entre les deux modèles en introduisant les résultats des autres variables qui décrivent l'état microstructural du solide et des phases fluides.

Il est intéressant de remarquer que les valeurs de la porosité, bien que égales à l'instant initial, évoluent de manière différente dans les deux modèles. Comme on a déjà remarqué au chapitre 6, la porosité est fonction de la déshydratation pour le modèle THC et de la température pour le modèle THCM. Par conséquent, dans le modèle THCM la porosité évolue à partir de la température de référence (i.e. 20°C) tandis que, dans le modèle THC aucune évolution de la porosité n'est observable au dessous de 105°C , température à laquelle la déshydratation peut commencer. Les résultats finaux ne diffèrent pas de manière significative tandis que des différences sont observables à basse température (la courbe à 20 heures)

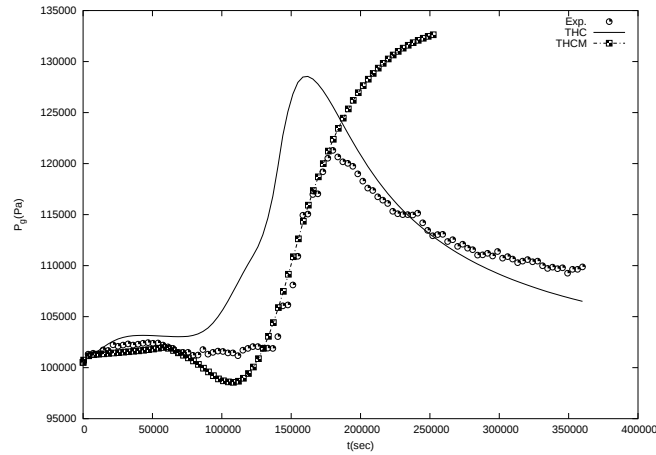


FIG. 7.17 – Pression numérique et expérimentale sur le capteur 4 (25cm)

et dans les zones les plus froides du béton même à la fin des simulations numériques. On a toutefois déjà remarqué que, suite à la (lente) cinétique de chauffage, l'utilisation d'une ou l'autre des deux formulations est presque indifférente. D'un point de vue de la description des processus physiques observables dans le béton, il serait envisageable d'exprimer l'évolution de la porosité en fonction de la déshydratation.

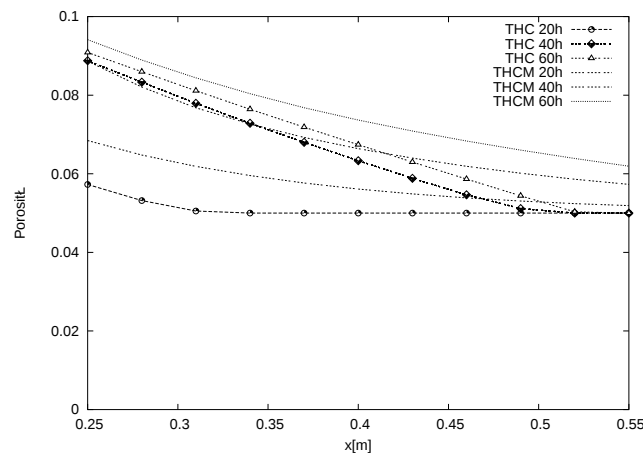


FIG. 7.18 – Évolution de la porosité avec la température

En ce qui concerne la saturation en liquide, une première observation montre des différences assez importantes entre les deux modèles (voir fig.7.20). Cependant, comme dans le cas précédent, les courbes sont comparables au moins de manière qualitative (les différences des valeurs absolues ne sont pas si importantes). En fait, on observe dans les deux modèles le même type de comportement : on a donc un front de saturation qui se déplace vers les zones froides et qui laisse une zone désaturée là où la température est plus élevée. Ce phénomène, assez typique pour un milieu poreux soumis à un chauffage, est de toute manière bien plus net dans le modèle THCM.

Ceci laisse supposer qu'il n'y a pas que l'évolution de la porosité qui ne soit pas la même dans les deux modèles, mais aussi sa distribution. En effet, dans le modèle THC l'évolution de la distribution de taille des pores a été négligée car, dans un premier temps, cet effet avait

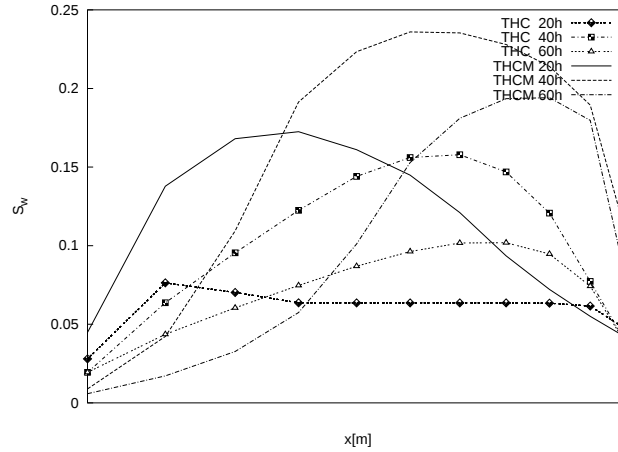


FIG. 7.19 – Saturation en liquide pour les deux modèles

été considéré d'importance secondaire. Dans le modèle THCM (voir le paragraphe 4.4.4), l'évolution de la courbe $p_c - S_w$ a été prise en compte selon la formulation proposée par [Pesavento00]. Les résultats des deux approches sont en fig.7.20 : il est donc évident que, par rapport à la situation pour la température de référence, la distribution de tailles des pores évolue de manière significative avec la température. Cette évolution a été mise en évidence par plusieurs travaux de nature expérimentale (e.g. [Alarcon03]).

La prise en compte de cette évolution est donc nécessaire pour une description plus correcte du comportement en température du béton.

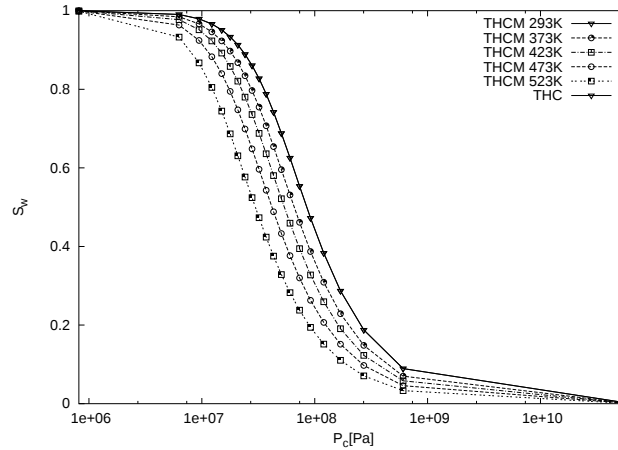
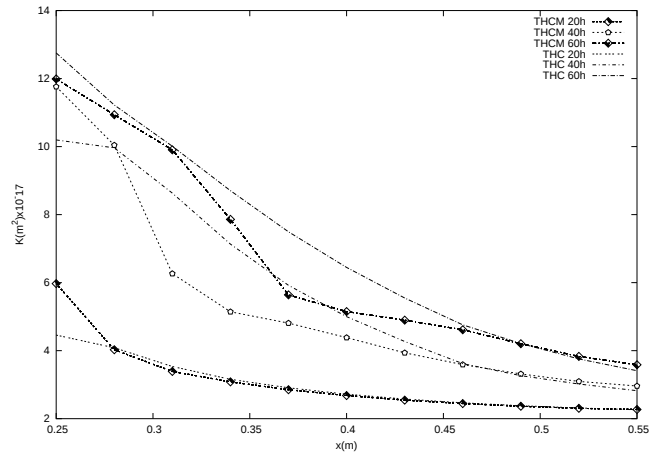


FIG. 7.20 – Distribution de la porosité : modèle THC et THCM

En ce qui concerne les perméabilités, on n'observe pas de différences remarquables entre les deux modélisations. Ceci est forcément lié au calage des paramètres qui règlent l'évolution de la perméabilité intrinsèque en fonction de la température, de la pression et, pour le modèle THCM, de l'endommagement. En particulier, dans le modèle THC, les paramètres A_θ et A_p doivent être forcément plus élevés que dans le modèle THCM pour pouvoir donner un effet équivalent à celui de l'endommagement.

En particulier, dans le modèle THCM, l'importance de l'endommagement dans la formulation que l'on a choisie est évidente si l'on compare les allures des courbes de l'endom-

FIG. 7.21 – Évolution de la perméabilité intrinsèque avec la température ($\times 10^{-17}$)

agement total et de la perméabilité (voir fig.6 et 7). Cette correspondance mathématique

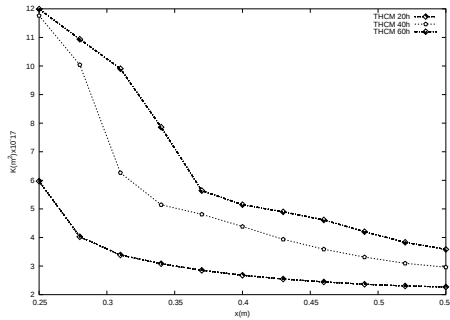


FIG. 7.22 – Perméabilité vs. rayon

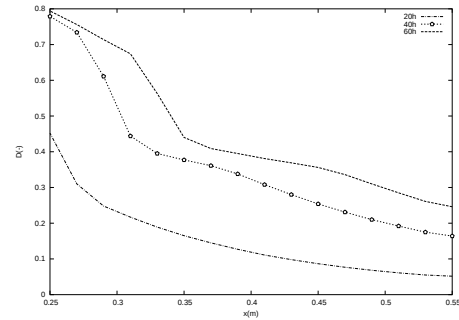
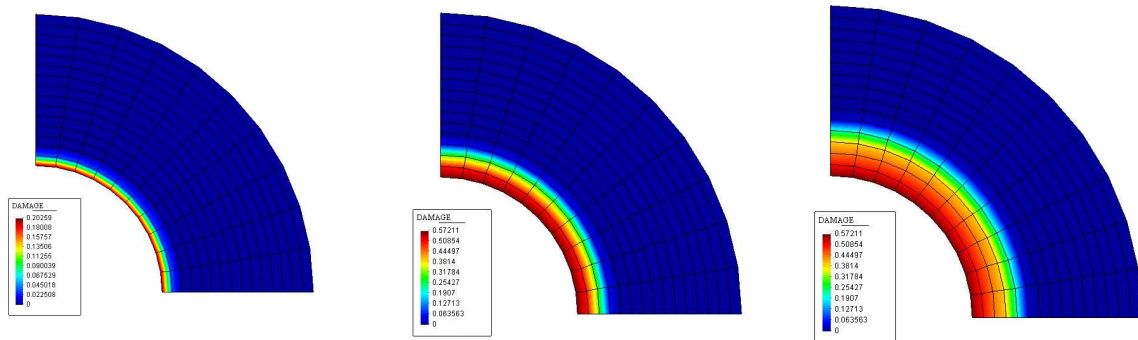


FIG. 7.23 – Endommagement total vs. rayon

(liée évidemment à la loi utilisée), représente bien la réalité physique. Il est clair que la microfissuration du béton est très importante vis-à-vis des phénomènes de transport : une relation d'évolution de la perméabilité doit nécessairement prendre en compte cet effet.

En ce qui concerne l'endommagement mécanique, celui-ci peut être observé seulement sur la face interne du cylindre creux (voir fig.7.24). L'effet de la tôle n'a pas montré une influence significative vis-à-vis de l'endommagement mécanique.

FIG. 7.24 – Endommagement mécanique à $t=20h, 40h, 60h$

Cependant, l'observation du cylindre après l'expérience, a mis en évidence la présence de

fissures soit sur la face interne du cylindre, soit sur le bord externe du cylindre, même si leur nombre et leur importance sont beaucoup plus faibles (on parlerait plutôt de microfissures dans ce cas).

Il est donc évident que la prise en compte du seul endommagement mécanique n'est pas suffisante pour décrire correctement la dégradation du béton.

Si on considère l'endommagement total, fonction aussi de la température, on peut observer une dégradation du béton même sur la peau externe (voir fig.7.25) i.e. la prise en compte de la dégradation thermo-chimique permet d'obtenir des résultats plus proches de ceux de l'expérience. Ceci souligne une fois de plus les bonnes capacités de prédictions du modèle THCM et son aptitude à décrire le comportement à chaud du béton.

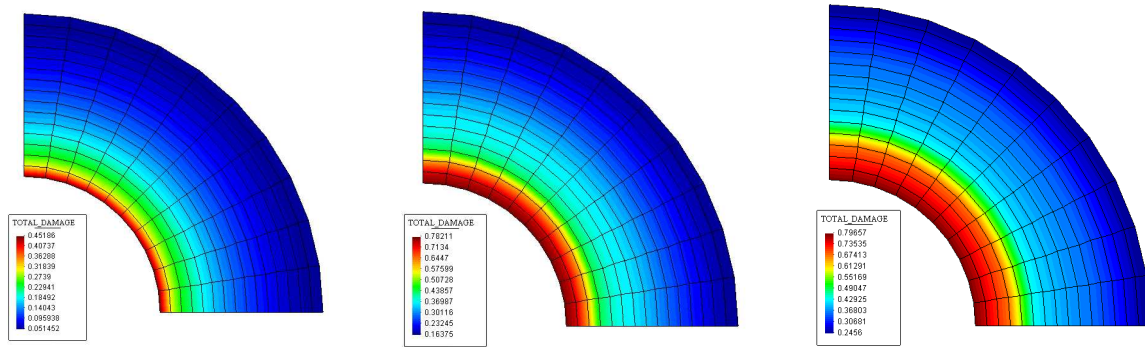


FIG. 7.25 – Endommagement total à t=20h, 40h, 60h

7.6 Retour sur l'évolution de la perméabilité

On a plusieurs fois remarqué l'influence de la perméabilité vis-à-vis des phénomènes de transport dans un milieu poreux. On a aussi souligné que la microstructure du milieu poreux évolue avec la température, et que, suite à la déshydratation, le réseau poreux du milieu change. L'augmentation de la température entraîne aussi des gradients de contraintes et une dégradation du matériau. Ces phénomènes ont comme conséquence la formation des microfissures dans la pâte de ciment.

Si on rappelle les considérations que l'on a faites plus haut, on peut alors bien imaginer (même de manière intuitive) que la déshydratation ainsi que l'endommagement (i.e. le paramètre qui par convention prend en compte la fissuration et la dégradation du béton) influencent de manière significative le transport d'énergie et de matière dans le milieu. D'après [Herbst89], il faut en outre prendre en considération l'influence de la pression du gaz, ayant comme effet d'élargir les fissures.

La recherche d'une relation entre l'endommagement, la déshydratation, la pression du gaz et l'évolution de la perméabilité, devient donc naturelle.

Les lois d'évolution de la perméabilité utilisés dans les modèles THC et THCM prennent donc en compte les effets qu'on a vu plus haut :

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_0 \cdot 10^{A_\theta(\theta-\theta_0)} \left(\frac{p^g}{p_0} \right)^{A_p} \quad \text{formulation THC}$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_0 \cdot f(\theta) \left(\frac{p^g}{p_0} \right)^{A_p} 10^{A_{DD}} \quad \text{formulation THCM}$$

Var.	THC	THCM
A_θ	0.0025	-
A_θ^1	-	0.000521
A_θ^2	-	-0.00000262
A_p	0.368	0.0368
A_D	-	1

TAB. 7.7 – Valeurs des paramètres A_θ , A_θ^1 , A_θ^2 , A_p , A_D

avec $f(\theta) = 10^{A_\theta^2(\theta-\theta_0)^2 + A_\theta^1(\theta-\theta_0)}$.

Cependant, des remarques sont à faire concernant les lois que l'on a utilisées. Tout d'abord, dans les deux modèles l'évolution de la microstructure, par simplicité, n'a pas été corrélée à la déshydratation mais, de manière plus approximative, à la température : cette simplification est acceptable dans le cas d'un chauffage lent i.e. la cinétique de la déshydratation est négligeable et la masse d'eau relâchée est fonction de la seule température.

En ce qui concerne l'endommagement, on a déjà remarqué que sa prise en compte dans l'évolution de la perméabilité est faite à l'aide d'une fonction exponentielle issue des essais menés par [Bary96] et [Picandet01]. Dans ces travaux, l'endommagement a été provoqué dans le béton en appliquant un chargement mécanique sur des échantillons. On peut donc se demander si cette relation perméabilité-endommagement s'avère adaptée pour la description de l'évolution des phénomènes de transport dans une structure à échelle réelle soumise à un chauffage.

Toutefois les moyens techniques actuels ne permettent pas une mesure facile de la perméabilité à chaud. En plus, la loi d'évolution de la perméabilité est issue des plusieurs travaux indépendants, faits sur des bétons différents, dans des conditions parfois éloignées du cas qui nous concerne (e.g.[Bary96]). La loi finale est donc le fruit des différents résultats. Mise sous une forme multiplicative, elle peut être aussi interprétée en termes probabilistes.

Nous avons donc décidé de vérifier la validité des lois de perméabilité de manière indirecte, au travers d'une comparaison avec les grandeurs mesurées pendant l'expérience i.e. la température et la pression du gaz. En ce qui concerne les autres paramètres du modèle (porosité, module de Young, ...), ils sont issus des mesures expérimentales sur le béton qu'on utilise, ou, à la limite sur un béton similaire : il nous semble, donc, qu'ils ne soient pas à mettre en question.

Les deux formulations présentées plus haut ont donc été retenues, mais en prenant la liberté de faire varier, pour le modèle THCM, les paramètres A_D , A_θ^2 , A_θ^1 et A_p , de manière à obtenir des résultats satisfaisants vis-à-vis des résultats mesurables pendant l'expérience i.e. les températures et les pressions du gaz. Ces résultats, présentés dans la section précédente, ont donc été obtenus à l'aide des paramètres qui sont dans le tableau 7.7.

On retiendra dans la suite la relation du modèle THCM, qui est la seule à prendre en considération l'endommagement total.

Si on analyse les valeurs des paramètres, il est assez évident que l'influence directe de la température (A_θ^1 , A_θ^2) et de la pression du gaz (A_p) sont négligeables par rapport à l'influence de l'endommagement total i.e. :

$$\mathbf{K} \approx \mathbf{K}_0 \times 10^D \quad (7.2)$$

On rappelle que l'endommagement total est fonction de l'endommagement mécanique et d'un endommagement que l'on a appelé thermo-chimique où l'on retrouve, indirectement, une dépendance en fonction de la température.

Ceci dit, le résultat que l'on trouve en 7.2 est d'une simplicité assez surprenante soit à cause des considérations que l'on a faites plus haut, soit vis-à-vis de la littérature (notamment les travaux de Gawin et al.) qui ne considèrent pas comme négligeable l'influence de la pression du gaz et de la température sur l'évolution de la perméabilité.

On se pose donc la question de la validité de la relation 7.2.

La réponse doit forcément passer par une comparaison entre les résultats de la perméabilité présentés plus haut et la perméabilité mesurée de manière expérimentale dans le béton chauffé. Cette mesure doit être forcément effectuée à froid : on fait donc l'hypothèse que la perméabilité à froid et à chaud ne diffèrent pas de manière significative. Cette hypothèse est valable si l'endommagement n'évolue pas pendant la phase de refroidissement. A ce propos, [Colina04] montre que pendant la phase de refroidissement le béton n'est pas soumis à un endommagement supplémentaire si l'on peut négliger le fluage thermique transitoire.

7.6.1 Mesure de la perméabilité dans le béton chauffé

La mesure de la perméabilité du béton du cylindre chauffé peut être effectuée au travers de l'extraction de disques, en appliquant la procédure décrite au paragraphe 7.4.3.

En premier lieu, on a obtenu des carottes de béton extraites du cylindre en béton à l'aide d'une couronne diamantée de diamètre de 150mm. Ensuite, les carottes ont été découpées à l'aide d'une lame circulaire diamantée de manière à en extraire des disques de 50mm d'épaisseur. Ceci a permis d'obtenir 4 disques pour chaque éprouvette, à distance croissante de la face chauffée (voir fig.7.26). Les disques ont été ensuite rectifiés et la surface latérale a été rendu étanche à l'aide d'un ruban adhésif afin d'assurer un flux unidirectionnel du gaz traversant les disques lors de la mesure de perméabilité.

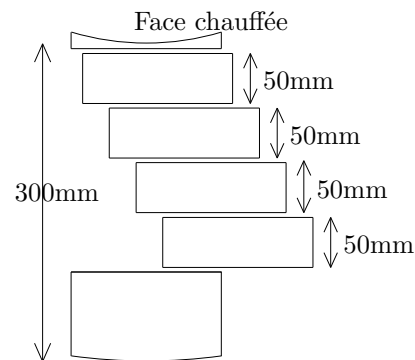


FIG. 7.26 – Extraction des disques

Après la procédure de préconditionnement décrite plus haut, la perméabilité a été mesurée sur 5 carottes, pour un total de 20 disques, 4 pour chaque distance radiale. En principe, chaque disque aurait du donner le même résultat : ceci n'a pas été tout à fait le cas. Le tableau 7.8 indique la plage de mesures pour chaque distance radiale.

Distance du centre	Plage de $\mathbf{K} \times 10^{-17} [m^2]$
29.5cm	7 – 20
34.5cm	4.6 – 9.5
39.5cm	2.3 – 6.1
44.5cm	2.4 – 5.6

TAB. 7.8 – Perméabilité intrinsèque dans le béton

On peut voir dans le tableau que la fourchette de valeurs est plutôt ample, spécialement dans la zone la plus proche du chauffage. Ceci laisse supposer que le comportement du béton n'a pas été véritablement axisymétrique comme sa géométrie peut le laisser supposer, mais peut être aussi expliquée en rappelant que la microstructure du béton est aléatoire.

7.6.2 Comparaison des résultats

Les résultats issus des analyses expérimentales sont comparés aux résultats numériques, à 60h, dans la figure 7.27.

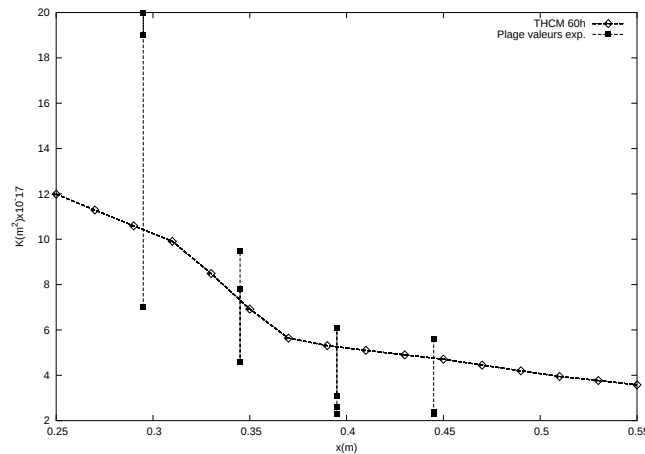


FIG. 7.27 – Comparaison entre l'évolution de perméabilité intrinsèque numérique et expérimentale ($\times 10^{-17}$)

L'observation des résultats en figure 7.27 confirme donc que le choix des paramètres pour la loi d'évolution endommagement-perméabilité n'a pas seulement permis une reproduction correcte des températures et pressions, mais donne aussi une bonne prédiction des mesures de perméabilité à froid.

On peut donc proposer une loi d'évolution de la perméabilité intrinsèque, considérablement plus simple de la loi utilisée pendant les simulations numériques :

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_0 \times 10^D \quad (7.3)$$

7.6.3 Considérations sur la loi d'évolution

La relation 7.3 peut être finalement considérée comme une loi d'évolution de la perméabilité intrinsèque, portant sur l'endommagement total.

On remarque d'abord, comme on l'a déjà fait plus haut, que l'endommagement total prend aussi en considération un effet lié à la température, i.e. l'endommagement thermo-chimique. Ce type d'endommagement prend en charge la dégradation de la matrice cimentaire suite à une élévation de température. Autrement dit, la température entraîne une "érosion" de matière (la déshydratation) qui dégrade le matériau. Il serait donc envisageable de relier le paramètre endommagement thermo-chimique V (voir chapitre 6) à la déshydratation plutôt qu'à la température. Cette considération est particulièrement importante lorsqu'on prend en compte une cinétique rapide de chauffage.

Le résultat qu'on a présenté, bien que surprenant, rend simplement compte du fait que la formation des microfissures dans le béton est le phénomène prépondérant vis-à-vis des phénomènes de transport : la prise en compte de l'endommagement est alors nécessaire pour la description du comportement du béton en température. Il faut toutefois rappeler que, bien que privé de la mécanique, la modélisation THC avait donné une bonne représentation des pressions et température ainsi qu'une reproduction de l'évolution de la perméabilité intrinsèque proche à celle du modèle THCM. Dans ce modèle, évidemment, le comportement endommageable du béton est pris en compte de manière implicite. Si on observe la courbe 7.28, on peut s'apercevoir de l'importance relative de la partie endommagement thermo-chimique par rapport à l'endommagement total : cet effet, étant lié à l'élévation de température, a été donc pris en compte aussi dans le modèle simplifié THC. Même dans ce modèle (comme dans la formulation THCM) l'effet d'ouverture des fissures provoqué par la pression du gaz reste négligeable par rapport à l'effet provoqué par la température.

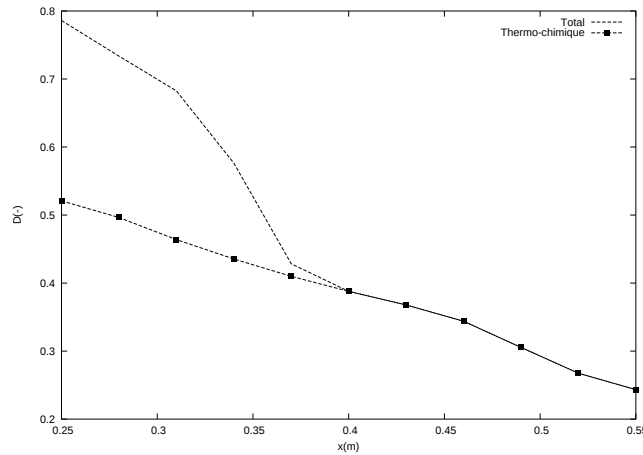


FIG. 7.28 – Endommagement total et thermo-chimique

On souligne enfin que la loi que l'on vient de proposer n'a été mise en évidence expérimentalement que pour un type de béton : elle n'a pas pour l'instant de portée générale. Il est nécessaire de mener un travail de validation sur d'autres types de bétons soumis à un chauffage. La montée en température peut aussi bien avoir une certaine influence sur l'évolution dans le temps de la perméabilité intrinsèque, spécialement dans le cas d'une montée rapide. Quant à la température finale de l'essai, il semble peu probable qu'une température plus élevée puisse avoir une influence sur le résultat présenté.

Une généralisation de la relation 7.3 peut être donc proposée sous la forme suivante :

$$K = K_0 \times 10^{\alpha D} \quad (7.4)$$

avec α un coefficient prenant en compte différents types de béton et/ou de montée en température.

7.7 Conclusions

Dans ce dernier chapitre nous avons introduit l'ensemble des analyses expérimentales et numériques qui ont été réalisées dans le cadre de cette thèse et qui nous ont permis d'aboutir à la proposition d'une loi très simple perméabilité-endommagement.

Dans la première partie du chapitre, nous avons présenté l'expérience qui a été réalisée au sein du LAMI pour la mesure des températures et des pressions du gaz dans une maquette en béton à échelle réelle soumise à une élévation de température.

Ensuite, le test en laboratoire a été reproduit à l'aide des modèles THC et THCM que l'on a présenté aux chapitres précédents.

En particulier, dans le modèle THCM, nous avons obtenu une bonne correspondance entre les résultats expérimentaux et numériques à travers un calage des paramètres de la loi qui règle l'évolution de la perméabilité intrinsèque. Ce réglage a mis en évidence l'importance prépondérante de l'endommagement (et donc de la microfissuration) vis-à-vis des phénomènes de transport dans le béton et nous a permis d'aboutir à une relation très simple pour la description de l'évolution de la perméabilité.

La mesure de la perméabilité à chaud étant actuellement difficile, nous avons validé l'approche à travers des mesures de perméabilité à froid : ceci nous a permis de mettre en évidence la correspondance entre les valeurs numériques issues de la loi et les mesures qu'on a effectuées.

La loi que l'on propose, souligne l'importance de l'endommagement total et rend compte de la nécessité du couplage avec la mécanique pour une description soignée du comportement du béton.

Cependant, l'approche numérique-expérimentale n'a été menée que pour un type de béton et ne peut pas, forcément, être considérée de validité générale : un travail de validation sur différents types de béton et différentes montées en température sera donc nécessaire pour confirmer l'étonnante simplicité de la relation endommagement-perméabilité que l'on a proposée.

Conclusion et perspectives

L'objectif de ce travail était d'apporter une contribution à l'étude du comportement des bétons à haute température, et, en particulier, d'établir quels sont les paramètres qui jouent un rôle majeur sur l'évolution de la perméabilité intrinsèque et, donc, sur les phénomènes de transport que, en général, on peut observer dans un milieu poreux.

Dans la première partie du mémoire nous avons donné une description générale du matériau béton ainsi qu'une description qualitative de l'évolution du milieu et des phénomènes qui se produisent lorsqu'on augmente la température.

Ensuite, on a introduit un modèle mathématique général pour la description d'un milieu poreux. Ce modèle prend en compte les trois phases présentes dans le béton (la matrice cimentaire, l'eau liquide et le gaz formé d'un mélange eau vapeur-air sec) ainsi que les phénomènes qui les caractérisent : la migration du mélange gaz/liquide, l'évaporation et la condensation, la chaleur latente, la conductivité thermique, la porosité,

Cette première partie, nous a permis d'identifier quels sont les besoins d'un modèle mathématique décrivant le comportement d'un milieu poreux : dans les chapitres suivants nous avons donc abordé une description détaillée de chaque phase formant le milieu poreux.

En particulier, dans le chapitre 3 nous avons décrit les phénomènes de transport qui caractérisent les phases fluides. On a donc pu introduire le concept de perméabilité intrinsèque comme grandeur associée au seul réseau poreux de la matrice cimentaire, indépendamment du fluide percolant. La description de la microstructure de la phase solide a fait objet du chapitre suivant : celui-ci a mis en évidence le concept de porosité et l'importance de sa distribution vis-à-vis des phénomènes de transport. On a aussi souligné que, suite à l'augmentation de la température, la matrice cimentaire est sujette à une "érosion" : la déshydratation, autrement dit, la destruction des liens chimiques qui forment la pâte de ciment. Par conséquent, la microstructure du béton évolue avec la déshydratation.

L'ensemble de ces phénomènes a été pris en compte dans les modèles THC et THCM décrits au chapitres 5 et 6. En particulier, le modèle THC nous a permis une première modélisation des phénomènes de transport ainsi que de la cinétique de déshydratation, tout en négligeant les phénomènes liés à la mécanique du milieu. Ces derniers ont été introduit dans le modèle THCM. Ce type de modélisation nous a permis de prendre en compte l'endommagement total comme une combinaison de l'endommagement mécanique (selon la formulation classique de Mazars) et de l'endommagement thermo-chimique. L'importance de l'endommagement vis-à-vis des phénomènes de transport a été mise en évidence dans le dernier chapitre.

Le chapitre 7 a donc été consacré à la présentation des résultats des analyses expérimentales et numériques. Les deux modèles ont permis une bonne reproduction des résultats issus de l'expérience. Les modélisations ont été réalisées à travers un réglage des paramètres

qui décrivent l'évolution de la perméabilité intrinsèque. Les résultats de la perméabilité "numérique" ont été ensuite comparés aux résultats issus des mesures de perméabilité sur des échantillons extraits du cylindre chauffé. Cette analyse numérique-expérimentale a mise en évidence le rôle majeur joué par l'endommagement total et nous a permis d'aboutir à la proposition d'une loi perméabilité-endommagement.

Cependant, il reste des aspects de l'étude à développer ultérieurement.

La mise au point et la réalisation d'un programme expérimental s'avère nécessaire pour valider la loi que nous avons proposée. Il est nécessaire en fait d'étendre l'étude qu'on a réalisée à d'autres types de béton pour vérifier que la loi d'évolution de la perméabilité ne dépend que de l'endommagement total. De la même manière, il serait envisageable de réaliser des essais avec une montée en température rapide, pour vérifier si la cinétique de déshydratation est importante vis-à-vis de la loi.

Enfin, on peut se demander si la formulation utilisée pour prendre en compte l'endommagement est effectivement la meilleure possible pour décrire le comportement du milieu poreux. Par exemple, le développement d'une théorie basée sur les éléments finis "enrichis", qui permettent la description des discontinuités et des imperfections dans un matériau, pourrait donner des résultats intéressants pour la caractérisation d'un milieu non-homogène comme le béton.

ANNEXES

ANNEXE A

A1. Théorèmes de moyenne

L'application de principes de moyenne requies la définition d'un certain nombre d'expressions. On donne dans la suite le principaux sous forme de théorème. On présente aussi un certain nombre d'identités qui seront utilisées dans la suite. Le théorème I a été présenté au chapitre 2.

- *Théorème II* : l'intégrale δV^π de la dérivée par rapport au temps d'une fonction est liée à la dérivée de l'intégrale :

$$\begin{aligned} \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V^\pi} \frac{\partial \zeta}{\partial t} dv \right] dV &= \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \frac{\partial \zeta}{\partial t} \gamma^\pi dv \right] dV = \\ &= \int_V \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \zeta \gamma^\pi dv \right] dV - \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \zeta \mathbf{w} \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \right] dV \end{aligned} \quad (\text{A1})$$

Une démonstration des théorèmes II et III est donné dans [Gray76-2].

- *Théorème III* : l'intégrale δV^π de la dérivée par rapport à l'espace d'une fonction est liée à la dérivée de l'intégrale :

$$\begin{aligned} \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V^\pi} \text{div}(\zeta) dv \right] dV &= \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \text{div}(\zeta) \gamma^\pi dv \right] dV = \\ &= \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \text{div}(\zeta \gamma^\pi) dv \right] dV + \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \zeta \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \right] dV \end{aligned} \quad (\text{A2})$$

- *Théorème IV* : si $\mathbf{n}$ est le vecteur unitaire normal sortant de δA et la fonction ζ est continue en direction normale à δA , on peut écrire :

$$\begin{aligned} \int_V \left[\text{div} \left(\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \zeta dv \right) \right] dV &= \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \text{div} \zeta dv \right] dV = \\ &= \int_A \left[\frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \zeta \cdot \mathbf{n} da \right] dA \end{aligned} \quad (\text{A3})$$

Si on remplace ζ avec $\zeta\gamma^\pi$ dans l'équation A3 et on fait la substitution dans A2 :

$$\begin{aligned} \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \text{div}(\zeta) \gamma^\pi dv \right] dV &= \int_A \left[\frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \zeta \gamma^\pi \cdot \mathbf{n} da \right] dA + \\ &\quad \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \zeta \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \right] dV \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

$\zeta\gamma^\pi$ est continue dans la direction normale à δA , de que en traversant δA , on reste dans la même phase où ζ and γ^π sont continues.

On donne aussi la définition de la *déviaton* de la fonction microscopique $\zeta(\mathbf{r}, t)$ de la quantité moyenne sur la masse $\bar{\zeta}^\pi(\mathbf{x}, t)$ du constituant π :

$$\tilde{\zeta}^\pi(\mathbf{x}, \xi, t) = \zeta(\mathbf{r}, t) - \bar{\zeta}^\pi(\mathbf{x}, t) \quad (\text{A5})$$

où

$$\zeta = \tilde{\zeta}^\pi + \bar{\zeta}^\pi \quad (\text{A6})$$

Dès que $\bar{\zeta}^\pi(\mathbf{x}, t)$ est constant dans l'intégrale sur δV ou δA , on peut écrire des identités (dont la démonstration est presque immédiate) qui seront utiles par la suite :

– Identité I :

$$\tilde{\zeta}^\pi = \frac{1}{\langle \rho \rangle_\pi \delta V} \int_{\delta V} \rho (\zeta - \bar{\zeta}^\pi) \gamma^\pi dv = \bar{\zeta}^\pi - \bar{\zeta}^\pi = 0 \quad (\text{A7})$$

– Identité II :

$$\overline{\tilde{\zeta}^\pi \bar{\omega}^\pi}^\pi = \overline{\bar{\zeta}^\pi \tilde{\omega}^\pi}^\pi = 0 \quad (\text{A8})$$

– Identité III :

$$\overline{\tilde{\zeta}^\pi \bar{\omega}^\pi}^\pi = \overline{(\tilde{\zeta}^\pi + \bar{\zeta}^\pi) (\tilde{\omega}^\pi + \bar{\omega}^\pi)}^\pi = \bar{\zeta}^\pi \bar{\omega}^\pi + \overline{\tilde{\zeta}^\pi \tilde{\omega}^\pi}^\pi \quad (\text{A9})$$

– Identité IV :

$$\begin{aligned} \int_A \overline{\rho \tilde{\zeta}^\pi}^\pi dA &= \int_A \left[\frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} (\rho \tilde{\zeta}^\pi) \cdot \mathbf{n} \gamma^\pi da \right] dA = \\ \int_V \left[\text{div} \left(\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \rho \tilde{\zeta}^\pi \gamma^\pi dv \right) \right] dV &= \int_V \text{div} \left(\langle \rho \rangle_\pi \bar{\zeta}^\pi \right) dV = 0 \end{aligned} \quad (\text{A10})$$

– Identité V :

$$\begin{aligned} \int_A \overline{(\rho \tilde{\zeta}^\pi \bar{\omega}^\pi)}^\pi dA &= \int_A \left[\frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} (\rho \tilde{\zeta}^\pi \bar{\omega}^\pi) \cdot \mathbf{n} \gamma^\pi da \right] dA = \\ \int_V \left[\text{div} \left(\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \rho \tilde{\zeta}^\pi \bar{\omega}^\pi \gamma^\pi dv \right) \right] dV &= \int_V \text{div} \left(\langle \rho \rangle_\pi \tilde{\zeta}^\pi \bar{\omega}^\pi \right) dV = 0 \end{aligned} \quad (\text{A11})$$

ANNEXE B

B1. Moyenne de l'équation générale microscopique de bilan

Dans ce paragraphe on obtiendra la forme générale de l'équation de bilan pour la quantité physique générique ψ dans la phase π . Si on introduit dans l'eq.2.14 la fonction de distribution γ_π et on intègre sur δV et sur V , on obtient :

$$\begin{aligned} \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \frac{\partial(\rho\psi)}{\partial t} \gamma_\pi dv \right] dV &+ \int_V \frac{1}{\delta V} \left[\int_{\delta V} \text{div}(\rho\psi \dot{\mathbf{r}}) \gamma_\pi dv \right] dV \\ &- \int_V \frac{1}{\delta V} \left[\int_{\delta V} \text{div} \mathbf{i} \gamma_\pi dv \right] dV - \int_V \frac{1}{\delta V} \left[\int_{\delta V} \rho b \gamma_\pi dv \right] dV \\ &= \int_V \frac{1}{\delta V} \left[\int_{\delta V} \rho G \gamma_\pi dv \right] dV \end{aligned} \quad (\text{B1})$$

avec $\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}$ la vitesse du matériau présente au point spatial $\mathbf{r}$.

Par rapport à d'autres méthodes de moyenne (ex.[Bear91]), la méthode proposée par [Gray79-1] donne l'ensemble des équations macroscopiques à partir d'une seule équation microscopique, écrite pour la générique variable conservative ψ . Ensuite, la loi que on obtiendra, sera spécialisée pour chaque quantité. Il faut aussi remarquer que l'ensemble des équations de bilan est indépendant du type de matériau de que les équations constitutives seront introduit seulement dans un deuxième temps.

En utilisant le théorème II au première terme de gauche dans l'eq.B1 et en rappelant la définition de masse moyenne $\bar{\psi}^\pi$:

$$\begin{aligned} \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \int_{\delta V} \frac{\partial(\rho\psi)}{\partial t} \gamma_\pi dv \right] dV &= \int_V \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi) dV - \\ &\int_V \left[\frac{1}{\delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \rho \psi \mathbf{w} \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \right] dV \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

On utilise l'A4 au deuxième terme de gauche de l'eq.B1. Pour la définition dans l'eq.A6 :

$$\psi \dot{\mathbf{r}} = \left(\bar{\psi}^\pi + \tilde{\psi}^\pi \right) \left(\bar{\mathbf{r}}^\pi + \tilde{\mathbf{r}}^\pi \right) = \bar{\psi}^\pi \bar{\mathbf{r}}^\pi + \bar{\psi}^\pi \tilde{\mathbf{r}}^\pi + \tilde{\psi}^\pi \bar{\mathbf{r}}^\pi + \tilde{\psi}^\pi \tilde{\mathbf{r}}^\pi \quad (\text{B3})$$

et devient :

$$\begin{aligned} \int_V \frac{1}{\delta V} \left[\int_{\delta V} \text{div} (\rho \psi \dot{\mathbf{r}}) \gamma_\pi dv \right] dV &= \int_A \left[\frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \rho \bar{\psi}^\pi \bar{\mathbf{r}}^\pi \cdot \mathbf{n} \gamma^\pi da \right] dA + \\ &\int_A \left[\frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \rho \bar{\psi}^\pi \tilde{\mathbf{r}}^\pi \cdot \mathbf{n} \gamma^\pi da \right] dA + \int_A \left[\frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \rho \tilde{\psi}^\pi \bar{\mathbf{r}}^\pi \cdot \mathbf{n} \gamma^\pi da \right] dA + \\ &\int_A \left[\frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \rho \tilde{\psi}^\pi \tilde{\mathbf{r}}^\pi \cdot \mathbf{n} \gamma^\pi da \right] dA + \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \rho \psi \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \right] dV \end{aligned} \quad (\text{B4})$$

Pour les identités (A11) on peut simplifier les deuxième et troisième termes de droite de l'eq.B4. En réécrivant en appliquant le théorème IV au première terme de droite et en observant que $\bar{\psi}^\pi$ and $\bar{\mathbf{r}}^\pi$ sont constantes dans le volume, l'eq.B4 devient :

$$\begin{aligned} \int_V \frac{1}{\delta V} \left[\int_{\delta V} \text{div} (\rho \psi \dot{\mathbf{r}}) \gamma_\pi dv \right] dV &= \int_V \text{div} \left(\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi \bar{\mathbf{r}}^\pi \right) dV + \\ &\int_A \left[\frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \rho \tilde{\psi}^\pi \tilde{\mathbf{r}}^\pi \cdot \mathbf{n} \gamma^\pi da \right] dA + \int_V \left[\frac{1}{\delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \rho \psi \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \right] dV \end{aligned} \quad (\text{B5})$$

On substitue les eq.B2 et B4 dans l'eq.B1, on applique l'eq.A4 au terme de flux, on rappelle la définition de masse moyenne donnée en 2.11 et on obtient donc la forme :

$$\begin{aligned} &\int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi) + \text{div} \left(\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi \bar{\mathbf{r}}^\pi \right) \right] dV - \\ &\int_V \left[\frac{1}{\delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \rho \psi (\mathbf{w} - \dot{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \right] dV - \\ &\int_V \left[\frac{1}{\delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \mathbf{i} \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \right] dV - \int_A \left[\frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \left[\mathbf{i} - \rho \tilde{\psi}^\pi \tilde{\mathbf{r}}^\pi \right] \cdot \mathbf{n} \gamma^\pi da \right] dA - \\ &\int_V \langle \rho \rangle_\pi \bar{b}^\pi dV = \int_V \langle \rho \rangle_\pi \bar{G}^\pi dV \end{aligned} \quad (\text{B6})$$

Le terme

$$\int_{\delta A^{\pi\alpha}} \rho\psi (\mathbf{w} - \dot{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da$$

prend en compte l'échange total de la propriété ψ , entre la phase π et la phase α suite au changement de phase. Le changement de phase est sous la forme la plus générale possible et prend en compte aussi le changement d'état (vaporisation-condensation). La fonction densité pour l'échange de ψ suite au changement de phase est appelée $e^\pi(\rho\psi)$:

$$e^\pi(\rho\psi) = \frac{1}{\langle \rho \rangle_\pi \delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \rho\psi (\mathbf{w} - \dot{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \quad (\text{B7})$$

De la même manière, la fonction densité pour l'échange de ψ entre la phase π et la phase α à travers une interaction mécanique est défini comme :

$$I^\pi = \frac{1}{\langle \rho \rangle_\pi \delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \mathbf{i} \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \quad (\text{B8})$$

On définit ensuite :

$$\int_{\delta A} [\mathbf{i} - \rho\tilde{\psi}^\pi \tilde{\mathbf{r}}^\pi] \cdot \mathbf{n}\gamma^\pi da$$

le flux non-convectif total de la propriété $\bar{\psi}^\pi$. On suppose l'existence d'une densité de flux moyenne $\tilde{i}^\pi$, définie comme (la démonstration de l'existence est négligée) :

$$\tilde{i}^\pi = \frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} [\mathbf{i} - \rho\tilde{\psi}^\pi \tilde{\mathbf{r}}^\pi] \cdot \mathbf{n}\gamma^\pi da \quad (\text{B9})$$

La substitution des eq.B7, B8 et B9 dans l'eq.B6 donne une équation générale de bilan pour chaque phase :

$$\begin{aligned} & \int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi) + \text{div} (\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi \tilde{\mathbf{r}}^\pi) \right] dV - \\ & \int_V [\langle \rho \rangle_\pi e^\pi(\rho\psi)] dV - \int_V [\langle \rho \rangle_\pi I^\pi] dV - \\ & \int_V [\langle \rho \rangle_\pi \bar{b}^\pi] dV - \int_A \tilde{i}^\pi dA = \int_V [\langle \rho \rangle_\pi \bar{G}^\pi] dV \end{aligned} \quad (\text{B10})$$

On introduit ensuite un nouveau théorème pour pouvoir réécrire l'eq.B10 :

Théorème V : le flux moyen $\tilde{i}^\pi$, à travers une surface donnée est une fonction linéaire du vecteur unitaire $\mathbf{n}$ de la surface :

$$\tilde{i}^\pi = \mathbf{n} \cdot \mathbf{i}^\pi \quad (\text{B11})$$

Si on substitue $\tilde{i}^\pi$ dans l'eq.B10, on obtient la forme finale de l'équation générale du bilan moyen :

$$\begin{aligned} \int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi) + \text{div} (\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi \bar{\mathbf{v}}^\pi) \right] dV - \int_A [\mathbf{i}^\pi \cdot \mathbf{n}] dA - \\ \int_V [\langle \rho \rangle_\pi (e^\pi(\rho\psi) + I^\pi + \bar{b}^\pi)] dV = \int_V [\langle \rho \rangle_\pi \bar{G}^\pi] dV \end{aligned} \quad (\text{B12})$$

avec l'introduction de la vitesse moyenne sur la masse $\bar{\mathbf{v}}^\pi$ de la phase π on obtient :

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{r}}^\pi(\mathbf{x}, t) = \bar{\mathbf{x}}^\pi(\mathbf{x}, t) = \\ \bar{\mathbf{v}}^\pi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\langle \rho \rangle_\pi(\mathbf{x}, t) \delta V} \int_{\delta V} \rho(\mathbf{r}, t) \dot{\mathbf{r}}(\mathbf{r}, t) \gamma^\pi(\mathbf{r}, t) dv \end{aligned} \quad (\text{B13})$$

Il nous faut définir la condition générale à l'interface i.e. la moyenne de l'eq.2.15. Avec cette équation on peut obtenir des informations supplémentaires sur le termes d'échange $e^\pi(\rho\psi)$ et I^π qui sont dans l'eq.B12.

L'intégration de l'eq.2.15 sur $\delta A^{\pi\alpha}$ et sur V , donne :

$$\begin{aligned} \int_V \frac{1}{\delta V} \left[\int_{\delta A^{\pi\alpha}} [\rho\psi(\mathbf{w} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha}] da \right] dV + \\ \int_V \frac{1}{\delta V} \left[\int_{\delta A^{\alpha\pi}} [\rho\psi(\mathbf{w} - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}^{\alpha\pi}] da \right] dV + \\ \int_V \frac{1}{\delta V} \left[\int_{\delta A^{\pi\alpha}} (\mathbf{i} \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha}) da \right] dV + \int_V \frac{1}{\delta V} \left[\int_{\delta A^{\alpha\pi}} (\mathbf{i} \cdot \mathbf{n}^{\alpha\pi}) da \right] dV = 0 \end{aligned} \quad (\text{B14})$$

Si on fait la somme de toutes les phases π et α , on rappelle l'eq.B7 et B8, on a :

$$\int_V \sum_\pi [\langle \rho \rangle_\pi (e^\pi(\rho\psi) + I^\pi)] dV = 0 \quad (\text{B15})$$

On peut donc écrire :

Théorème VI : Une propriété macroscopique $\bar{\psi}^\pi$ relative à une phase π d'un corps hétérogène qui occupe une volume V , qui ne contient pas de discontinuités et qui a une frontière A , est conservé à travers la relation de bilan suivante :

$$\begin{aligned} \int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi) \right] dV - \int_A [\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi \bar{\mathbf{v}}^\pi \cdot \mathbf{n}] dA - \int_A [\mathbf{i}^\pi \cdot \mathbf{n}] dA - \\ \int_V [\langle \rho \rangle_\pi \bar{b}^\pi] dV - \int_V [\langle \rho \rangle_\pi (e^\pi(\rho\psi) + I^\pi)] dV = \int_V [\langle \rho \rangle_\pi \bar{G}^\pi] dV \end{aligned} \quad (\text{B16})$$

sujet à :

$$\int_V \sum_{\pi} \langle \rho \rangle_{\pi} [(e^{\pi}(\rho\psi) + I^{\pi})] dV = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in V \quad (\text{B17})$$

avec $\mathbf{i}^{\pi}$ et $\bar{b}^{\pi}$ les vecteurs flux de surface et apport externe de $\bar{\psi}^{\pi}$, $e^{\pi}(\rho\psi)$ et I^{π} les échange de $\bar{\psi}^{\pi}$ avec les autres phases et les interactions mécaniques et $\bar{G}^{\pi}$ la production de $\bar{\psi}^{\pi}$.

Autrement dit, l'eq.B17, obtenue à partir des conditions microscopiques à l'interface, affirme la conservation de la propriété thermodynamique ψ pour tout le corps et donc à l'échelle macroscopique. Si on étend à tout le système et on fait la somme de l'eq.B16 sur toutes les phases :

$$\begin{aligned} & \int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho_m \psi_m) \right] dV - \int_A [\rho_m \psi_m \mathbf{v}_m \cdot \mathbf{n}] dA - \int_A [\mathbf{i}_m \cdot \mathbf{n}] dA - \\ & \int_V [\rho_m b_m] dV - \int_V \sum_{\pi} [\langle \rho \rangle_{\pi} (e^{\pi}(\rho\psi) + I^{\pi})] dV = \int_V [\rho_m G_m] dV \end{aligned} \quad (\text{B18})$$

avec :

$$\rho_m = \sum_{\pi} \langle \rho \rangle_{\pi}$$

et ψ_m , $\mathbf{v}_m$, b_m et G_m donnés par :

$$K_m = \frac{1}{\rho_m} \sum_{\pi} \langle \rho \rangle_{\pi} \bar{K}^{\pi}$$

et $\mathbf{i}_m$ donné par :

$$\mathbf{i}_m = \sum_{\pi} [\mathbf{i}^{\pi} - \langle \rho \rangle_{\pi} (\bar{\psi}^{\pi} - \psi_m) (\mathbf{v}^{\pi} - \mathbf{v}_m)]$$

La dernier intégrale à gauche dans l'eq.B18 est nulle ; l'équation de conservation macroscopique a alors la même forme de l'équation de bilan générale d'une phase simple continue.

La forme différentielle de l'équation de bilan peut être enfin écrite sous la forme suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho \rangle_{\pi} \bar{\psi}^{\pi}) + \text{div} (\langle \rho \rangle_{\pi} \bar{\psi}^{\pi} \bar{\mathbf{v}}^{\pi}) - \text{div} \mathbf{i}^{\pi} - \langle \rho \rangle_{\pi} e^{\pi}(\rho\psi) - \langle \rho \rangle_{\pi} I^{\pi} - \langle \rho \rangle_{\pi} \bar{b}^{\pi} = \langle \rho \rangle_{\pi} \bar{G}^{\pi} \quad \forall \mathbf{x} \in V \quad (\text{B19})$$

soumis à la condition :

$$\sum_{\pi} \langle \rho \rangle_{\pi} [(e^{\pi}(\rho\psi) + I^{\pi})] dV = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in V \quad (\text{B20})$$

On a remarqué que les eq.B19 et B20 sont valides seulement dans le cas d'absence de discontinuité dans le corps. Dans ce cas, si le corps est séparé par une surface de discontinuité Σ à l'échelle macroscopique, qui se déplace à la vitesse $\mathbf{w}$, une condition additionnelle doit être satisfaite :

$$[\langle \rho \rangle_\pi \bar{\psi}^\pi (\bar{\mathbf{v}}^\pi - \bar{\mathbf{w}}) - \mathbf{i}^\pi] \cdot \mathbf{N} = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma \quad (\text{B21})$$

avec $\mathbf{N}$ le vecteur normale à Σ dans $\mathbf{x}$.

ANNEXE C

C1. Équations de bilan au niveau macroscopique

On présente dans la suite les équations de bilan macroscopiques du moment linéaire, du moment angulaire, de l'énergie et de l'entropie. Les détails du calcul pour le passage micro-macro sont présentés. Les équations de bilan sont donc obtenues en substituant à la variable générique ψ contenu dans l'équation de bilan macroscopique générale (eq.2.19).

Équation du bilan du moment linéaire

Les variables microscopiques à introduire dans l'équation générale 2.14 sont les suivantes :

$$\psi = \dot{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{i} = \mathbf{t}_m, \quad \mathbf{b} = \mathbf{g}, \quad \mathbf{G} = \mathbf{0} \quad (\text{C1})$$

avec $\mathbf{t}_m$ le tenseur microscopique de contrainte et $\mathbf{g}$ le moment externe lié aux effets gravitationnels.

L'équation microscopique du moment linéaire devient donc :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \dot{\mathbf{r}}) + \text{div} (\rho \dot{\mathbf{r}} \otimes \dot{\mathbf{r}}) - \text{div} \mathbf{t}_m - \rho \mathbf{g} = \mathbf{0} \quad (\text{C2})$$

étant :

$$\text{div} (\rho \dot{\mathbf{r}} \otimes \dot{\mathbf{r}}) = \dot{\mathbf{r}} \otimes \dot{\mathbf{r}} \text{ grad } \rho + \rho \text{ grad } \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \rho \dot{\mathbf{r}} \text{ div } \dot{\mathbf{r}} \quad (\text{C3})$$

et :

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{r}}}{\partial t} + \text{grad } \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} = \ddot{\mathbf{r}} \quad (\text{C4})$$

l'eq.C2 peut être réécrite à l'aide de l'équation de bilan de masse 2.42 :

$$\text{div} \mathbf{t}_m + \rho (\mathbf{g} - \ddot{\mathbf{r}}) = \mathbf{0} \quad (\text{C5})$$

Cette équation représente la forme usuelle de l'équation de bilan microscopique pour un matériau monophasique.

En ce qui concerne l'équation de bilan macroscopique on a : $\bar{\psi}^\pi = \bar{\mathbf{v}}^\pi$ et :

$$\tilde{\mathbf{i}}^\pi = \tilde{\mathbf{t}}^\pi = \frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \left[(\mathbf{t}_m - \rho \tilde{\mathbf{r}}^\pi \otimes \tilde{\mathbf{r}}^\pi) \cdot \mathbf{n} \gamma^\pi \right] da \quad (\text{C6})$$

Selon l'équation B11 il existe une équation générale tel que :

$$\tilde{\mathbf{t}}^\pi = \mathbf{n} \cdot \mathbf{t}^\pi \quad (\text{C7})$$

Dans la théorie de mélange, le tenseur $\mathbf{t}^\pi$ est appelé tenseur de contrainte partiel. Le vecteur de contrainte $\tilde{\mathbf{t}}^\pi$ est composé par la somme du tenseur de contrainte microscopique de la phase π et un terme d'apport de contrainte moyenne produit par les flux de masse, $\rho \tilde{\mathbf{r}}^\pi$, qui a lieu à l'échelle microscopique relativement à la vitesse macroscopique de la phase π .

Le terme de moment externe, lié aux effets gravitationels, devient :

$$\bar{\mathbf{g}}^\pi = \frac{1}{\rho_\pi \delta V} \int_{\delta V} \rho \mathbf{g} \gamma^\pi dv \quad (\text{C8})$$

Le terme d'échange devient :

$$\mathbf{e}^\pi(\rho \dot{\mathbf{r}}) = \mathbf{e}^\pi(\rho) \bar{\mathbf{v}}^\pi + \mathbf{e}^\pi(\rho \tilde{\mathbf{r}}^\pi) \quad (\text{C9})$$

avec

$$\rho_\pi \mathbf{e}^\pi(\rho) = \frac{1}{\delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \rho [\bar{\mathbf{v}}^\pi \otimes (\mathbf{w} - \dot{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \quad (\text{C10})$$

le moment d'échange suite à l'apport externe, et :

$$\rho_\pi \mathbf{e}^\pi(\rho \tilde{\mathbf{r}}^\pi) = \frac{1}{\delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \rho [\tilde{\mathbf{r}}^\pi \otimes (\mathbf{w} - \dot{\mathbf{r}})] \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \quad (\text{C11})$$

l'apport au moment intrinsèque, lié à la déviation $\tilde{\mathbf{r}}^\pi$, de la vitesse du constituant π de la vitesse moyenne sur la masse, $\bar{\mathbf{v}}^\pi$, suite à un changement de densité.

L'échange de moment suite à une interaction mécanique avec les autres phases devient :

$$\mathbf{I}^\pi = \hat{\mathbf{t}}^\pi = \frac{1}{\rho_\pi \delta V} \sum_{\alpha \neq \pi}^k \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \mathbf{t}_m \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \quad (\text{C12})$$

La somme de l'eq.C12 et de l'eq.C9 donne :

$$\rho_\pi \mathbf{I}^\pi + \rho_\pi \mathbf{e}^\pi(\rho \dot{\mathbf{r}}) \quad (\text{C13})$$

qui est un apport basé sur le volume δV . Cette somme peut être interprété comme la densité de volume d'une interaction D entre la phase π et les autres constituants.

Enfin on impose :

$$\overline{\mathbf{G}}^\pi = 0 \quad (\text{C14})$$

L'équation moyen de bilan du moment linéaire peut être écrite :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_\pi \overline{\mathbf{v}}^\pi) + \text{div} (\rho_\pi \overline{\mathbf{v}}^\pi \otimes \overline{\mathbf{v}}^\pi) - \text{div} \mathbf{t}^\pi - \rho_\pi [\overline{\mathbf{g}}^\pi + \mathbf{e}^\pi (\rho \dot{\mathbf{r}}) + \hat{\mathbf{t}}^\pi] = 0 \quad (\text{C15})$$

Si on rappelle que les quantités moyennes dans le volume dv sont nulles et on utilise la relation suivante :

$$\text{div} (\rho_\pi \overline{\mathbf{v}}^\pi \otimes \overline{\mathbf{v}}^\pi) = \overline{\mathbf{v}}^\pi \otimes \overline{\mathbf{v}}^\pi \text{grad} \rho_\pi + \rho_\pi \text{grad} \overline{\mathbf{v}}^\pi \cdot \overline{\mathbf{v}}^\pi + \rho \overline{\mathbf{v}}^\pi \text{div} \overline{\mathbf{v}}^\pi \quad (\text{C16})$$

et la définition de l'accélération de la phase π :

$$\overline{\mathbf{a}}^\pi = \dot{\overline{\mathbf{v}}}^\pi = \frac{\partial \overline{\mathbf{v}}^\pi}{\partial t} + \text{grad} \overline{\mathbf{v}}^\pi \cdot \overline{\mathbf{v}}^\pi \quad (\text{C17})$$

et l'équation de bilan de masse macroscopique 2.44, on obtient :

$$\text{div} \mathbf{t}^\pi + \rho_\pi (\overline{\mathbf{g}}^\pi - \overline{\mathbf{a}}^\pi) + \rho_\pi [\mathbf{e}^\pi (\rho \dot{\mathbf{r}}) + \hat{\mathbf{t}}^\pi] = 0 \quad (\text{C18})$$

La quantité

$$\rho_\pi \overline{\mathbf{a}}^\pi \quad (\text{C19})$$

est la densité volumique de la force d'inertie.

Dans la suite, selon [Schrefler98], on assume que $\mathbf{t}^{\pi\alpha} = \mathbf{0}$. On peut démontrer que cette hypothèse simplificatrice équivaut à dire que les densités d'interactions entre les phases sont opposées et égales.

Dans la suite, on fera aussi l'hypothèse que la relation $\rho_\pi \mathbf{e}^\pi (\rho \dot{\mathbf{r}}) \neq \mathbf{0}$ est valable seulement pour les phases fluides.

On peut alors simplifier l'équation de bilan du moment linéaire pour la phase solide et écrire :

$$\text{div} \mathbf{t}^s + \rho_s (\overline{\mathbf{g}}^s - \overline{\mathbf{a}}^s) + \rho_s \hat{\mathbf{t}}^s = \mathbf{0} \quad (\text{C20})$$

L'équation de bilan moyen du moment linéaire est enfin soumise à la condition suivante :

$$\sum_\pi \rho^\pi [\mathbf{e}^\pi (\rho \dot{\mathbf{r}}) + \hat{\mathbf{t}}^\pi] = \mathbf{0} \quad (\text{C21})$$

Équation de bilan du moment angulaire

Si on prend en considération le moment angulaire, on utilise les variables microscopiques suivantes

$$\psi = \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{i} = \mathbf{r} \times \mathbf{t}_m, \quad \mathbf{b} = \mathbf{r} \times \mathbf{g}, \quad \mathbf{G} = \mathbf{0} \quad (\text{C22})$$

On obtient donc l'équation de moment angulaire microscopique :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}})] + \text{div} [\rho (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}) \otimes \dot{\mathbf{r}}] - \text{div} (\mathbf{r} \times \mathbf{t}_m) - \mathbf{r} \times \rho \mathbf{g} = \mathbf{0} \quad (\text{C23})$$

En appliquant la définition de la dérivée matérielle 2.29 et de l'accélération 2.29 :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}})] = \frac{\partial \rho}{\partial t} (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}) + \rho \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \times \dot{\mathbf{r}} \right) + \rho \left(\mathbf{r} \times \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}}{\partial t} \right) \quad (\text{C24})$$

$$\text{div} [\rho (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}) \otimes \dot{\mathbf{r}}] = (\text{grad } \rho \cdot \dot{\mathbf{r}}) (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}) + (\rho \text{div } \dot{\mathbf{r}}) (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}) + \rho \dot{\mathbf{r}} \cdot \text{grad } \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}} + \rho \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}} \cdot \text{grad } \mathbf{r} \quad (\text{C25})$$

et

$$\text{div} (\mathbf{r} \times \mathbf{t}_m) = \text{grad } \mathbf{r} \times \mathbf{t}_m + \mathbf{r} \times \text{div } \mathbf{t}_m \quad (\text{C26})$$

on obtient :

$$\left[\frac{D\rho}{Dt} + \rho \text{div } \dot{\mathbf{r}} \right] (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}) - \mathbf{r} \times [\text{div } \mathbf{t}_m + \rho (\mathbf{b} - \ddot{\mathbf{r}})] - \text{grad } \mathbf{r} \times \mathbf{t}_m = \mathbf{0} \quad (\text{C27})$$

Après l'application de l'équation bilan de masse 2.42 et du moment linéaire C5, et de la relation :

$$\text{grad } \mathbf{r} = \mathbf{I} \quad (\text{C28})$$

avec $\mathbf{I}$ le tenseur identité, on peut écrire l'eq.C27 :

$$\mathbf{I} \times \mathbf{t}_m = \mathbf{0} \quad (\text{C29})$$

qui implique la symétrie du tenseur de contraintes :

$$\mathbf{t}_m = (\mathbf{t}_m)^T \quad (\text{C30})$$

De la même manière on peut démontrer aussi la symétrie du tenseur de contrainte partielle, même à l'échelle macroscopique :

$$\mathbf{t}^\pi = (\mathbf{t}^\pi)^T \quad (\text{C31})$$

Équation de bilan de l'énergie

En ce qui concerne l'équation de bilan de l'énergie, les quantités microscopiques à introduire dans l'équation générale 2.14 sont les suivantes :

$$\psi = E + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}}, \mathbf{i} = \mathbf{t}_m \dot{\mathbf{r}} - \mathbf{q}, b = \mathbf{g} \cdot \dot{\mathbf{r}} + h, G = 0 \quad (\text{C32})$$

avec $E(\mathbf{r}, t)$ l'énergie intrinsèque spécifique, $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$ le vecteur flux de chaleur et $h(\mathbf{r}, t)$ l'apport externe volumique de chaleur.

L'équation microscopique se met sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho E + \rho \frac{1}{2} \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} \right) + \text{div} \left[\rho \left(E + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} \right) \dot{\mathbf{r}} \right] - \text{div} (\mathbf{t}_m \dot{\mathbf{r}} - \mathbf{q}) - \rho (\mathbf{g} \cdot \dot{\mathbf{r}} + h) = 0 \quad (\text{C33})$$

Si on considère la symétrie du tenseur de contrainte (eq.C30), $\mathbf{t}_m = \mathbf{t}_m^T$, la définition du tenseur gradient de vitesse, $\mathbf{L} = \text{grad } \dot{\mathbf{r}}$, et la relation suivante :

$$\mathbf{t}_m : \hat{\mathbf{w}} = 0 \quad (\text{C34})$$

on peut écrire :

$$\frac{D}{Dt} (\rho E) + \rho E \text{div } \dot{\mathbf{r}} + \frac{D}{Dt} \left(\rho \frac{1}{2} \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} \right) + \frac{1}{2} \rho \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} \text{div } \dot{\mathbf{r}} = \rho \ddot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \mathbf{t}_m : \mathbf{d} - \text{div } \mathbf{q} + \rho h \quad (\text{C35})$$

Enfin, en utilisant l'équation de bilan de masse 2.42 et l'équation de bilan du moment linéaire C5, on peut obtenir la forme finale de l'équation de bilan de l'énergie microscopique :

$$\rho \frac{DE}{Dt} = \mathbf{t}_m : \mathbf{d} - \text{div } \mathbf{q} + \rho h \quad (\text{C36})$$

Les quantités moyennes nécessaires pour l'équation de bilan macroscopique 2.19 de l'énergie sont les suivantes :

$$\overline{\psi}^\pi = \overline{E}^\pi + \frac{1}{2} \overline{\mathbf{v}}^\pi \cdot \overline{\mathbf{v}}^\pi \quad (\text{C37})$$

avec $\overline{E}^\pi$ représentant l'énergie spécifique moyenne et l'énergie cinétique moyenne lié à la déviation, $\tilde{\mathbf{r}}^\pi$ la vitesse moyenne dans δV .

En ce qui concerne le terme de flux on obtient :

$$\tilde{i}^\pi = \frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \left[\mathbf{t}_m \dot{\mathbf{r}} - \mathbf{q} - \rho \left(E + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \overline{E}^\pi - \frac{1}{2} \overline{\mathbf{v}}^\pi \cdot \overline{\mathbf{v}}^\pi \right) \tilde{\mathbf{r}}^\pi \right] \cdot \mathbf{n} \gamma^\pi da \quad (\text{C38})$$

En rappelant la définition suivante :

$$\tilde{\mathbf{v}}^\pi = \tilde{\mathbf{r}}^\pi = \dot{\mathbf{r}}^\pi - \overline{\mathbf{r}}^\pi = \dot{\mathbf{r}}^\pi - \overline{\mathbf{v}}^\pi \quad (\text{C39})$$

en appliquant la relation C6 et la définition de déviation A5 on peut écrire la forme suivante pour $\tilde{i}^\pi$:

$$\tilde{i}^\pi = \tilde{\mathbf{t}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi + \frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \left[\mathbf{t}_m \tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{q} - \rho \left(E + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{r}}^\pi \cdot \tilde{\mathbf{r}}^\pi \right) \tilde{\mathbf{r}}^\pi \right] \cdot \mathbf{n} \gamma^\pi da \quad (\text{C40})$$

L'expression intégrale représente le flux de chaleur interne moyen $\tilde{\mathbf{q}}^\pi$.

On peut donc définir le flux de chaleur macroscopique :

$$\tilde{q}^\pi = \tilde{\mathbf{q}}^\pi \cdot \mathbf{n} \quad (\text{C41})$$

et donc réécrire l'eq.C40 dans une forme contractée :

$$\tilde{i}^\pi = \tilde{\mathbf{t}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi - \tilde{q}^\pi \quad (\text{C42})$$

Le signe négatif prends en compte les directions opposés de $\mathbf{q}^\pi$ et $\mathbf{n}$.

Le terme qui rend compte de l'apport externe d'énergie devient :

$$\bar{b}^\pi = h^\pi + \mathbf{g}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi \quad (\text{C43})$$

avec h^π somme des apports externes volumiques moyens, h , et du travail moyen de forces de volume externes suite à la différence de vitesse $\tilde{\mathbf{r}}^\pi$.

A l'aide de l'eq.B7 et B8 les termes d'échange deviennent :

$$e^\pi(\rho\psi) = e^\pi \left(\rho E + \frac{1}{2} \rho \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} \right) = \frac{1}{\rho_\pi \delta V} \sum_{\alpha \neq \pi} \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \rho \left(E + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} \right) (\mathbf{w} - \dot{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \quad (\text{C44})$$

L'eq.C44 peut être réécrite (avec la définition de la déviation A5) :

$$e^\pi(\rho\psi) = \mathbf{e}^\pi \left(\rho \tilde{\mathbf{r}}^\pi \right) \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi + \frac{1}{2} e^\pi(\rho) \bar{\mathbf{v}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi + e^\pi \left(\rho \hat{E} \right) \quad (\text{C45})$$

avec :

$$e^\pi \left(\rho \hat{E} \right) = e^\pi = \frac{1}{\rho_\pi \delta V} \sum_{\alpha \neq \pi} \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \rho \left(E + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{r}}^\pi \cdot \tilde{\mathbf{r}}^\pi \right) (\mathbf{w} - \dot{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \quad (\text{C46})$$

le terme d'échange d'énergie interne suite au changement de phase et échange de masse.

Ensuite on a l'eq.B8 :

$$I^\pi = \frac{1}{\rho_\pi \delta V} \sum_{\alpha \neq \pi} \int_{\delta A^{\pi\alpha}} (\mathbf{t}_m \dot{\mathbf{r}} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \quad (\text{C47})$$

qui, à l'aide de l'eq.A5 et C12 peut être réécrite :

$$I^\pi = \hat{\mathbf{t}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi + \frac{1}{\rho_\pi \delta V} \sum_{\alpha \neq \pi} \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \left(\mathbf{t}_m \tilde{\mathbf{r}}^\pi - \mathbf{q} \right) \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da = \hat{\mathbf{t}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi + Q^\pi \quad (\text{C48})$$

Q^π prend en compte les échanges d'énergie suite à l'interaction mécanique.

Enfin :

$$\bar{G}^\pi = 0 \quad (\text{C49})$$

L'équation macroscopique de bilan d'énergie devient donc :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_\pi \left(\bar{E}^\pi + \frac{1}{2} \bar{\mathbf{v}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi \right) \right] + \text{div} \left[\rho_\pi \left(\bar{E}^\pi + \frac{1}{2} \bar{\mathbf{v}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi \right) \bar{\mathbf{v}}^\pi \right] \\ - \text{div} (\mathbf{t}^\pi \bar{\mathbf{v}}^\pi - \tilde{\mathbf{q}}^\pi) - \rho_\pi (h^\pi + \mathbf{g}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi) - \rho_\pi \mathbf{e}^\pi \left(\rho \tilde{\mathbf{r}}^\pi \right) \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi \\ - \frac{1}{2} \rho_\pi e^\pi (\rho) \bar{\mathbf{v}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi - \rho_\pi e^\pi (\rho \hat{E}) - \rho_\pi \hat{\mathbf{t}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi - \rho_\pi Q^\pi = 0 \end{aligned} \quad (\text{C50})$$

Si on utilise l'équation de bilan de masse 2.44 pour la phase πg , la définition de dérivée matérielle et l'équation de bilan du moment linéaire C18, on peut obtenir :

$$\rho_\pi \frac{D^\pi \bar{E}^\pi}{Dt} = \mathbf{t}^\pi : \mathbf{d}^\pi + \rho_\pi h^\pi - \text{div} \tilde{\mathbf{q}}^\pi + \rho_\pi R^\pi \quad (\text{C51})$$

avec :

$$\rho_\pi R^\pi = \rho_\pi \left[e^\pi (\rho \hat{E}) - e^\pi (\rho) \bar{E}^\pi + Q^\pi \right] \quad (\text{C52})$$

l'échange d'énergie entre la phase π et les autres phases suite à une interaction mécanique et au changement de phase.

L'eq.B20 devient sous la forme :

$$\sum_{\pi} \rho_\pi \left[e^\pi (\rho \hat{E}) + \mathbf{e}^\pi (\rho \tilde{\mathbf{r}}) \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi + \frac{1}{2} e^\pi (\rho) \bar{\mathbf{v}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi + \hat{\mathbf{t}}^\pi \cdot \bar{\mathbf{v}}^\pi + Q^\pi \right] = 0 \quad (\text{C53})$$

(In)équation de bilan de l'entropie

Les variables à introduire dans l'équation de bilan microscopique 2.14 sont les suivantes :

$$\psi = \lambda, \mathbf{i} = \Phi, b = s, G = \varphi \quad (\text{C54})$$

avec λ l'entropie spécifique, Φ le vecteur flux d'entropie, s une source intrinsèque d'entropie et φ la production d'entropie. L'équation de bilan devient alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \lambda) + \text{div} (\rho \lambda \mathbf{r}) - \text{div} \Phi - \rho s = \rho \varphi \quad (\text{C55})$$

On peut transformer l'équation de la manière usuelle, en introduisant aussi l'équation de bilan de masse :

$$\rho \frac{D\lambda}{Dt} - \rho s - \text{div } \Phi = \varphi \quad (\text{C56})$$

En rappelant les relations entre Φ et le flux de chaleur $\mathbf{q}$ et s et la source d'énergie h , on peut écrire :

$$\rho \frac{D\lambda}{Dt} - \frac{1}{\theta} \rho h + \text{div } \frac{1}{\theta} \mathbf{q} = \rho \varphi \quad (\text{C57})$$

Selon la deuxième loi de la thermodynamique, on peut écrire la relation suivante :

$$\rho \varphi \geq 0 \quad (\text{C58})$$

On obtient donc l'inégalité de l'entropie valable pour un milieu monophasique à l'aide de l'eq.2.40 :

$$\rho \frac{D\lambda}{Dt} - \frac{1}{\theta} \rho h + \text{div } \frac{1}{\theta} \mathbf{q} \geq 0 \quad (\text{C59})$$

On définit alors les variables macroscopiques de la manière suivante :

– l'entropie spécifique moyenne de la phase π :

$$\bar{\psi}^\pi = \bar{\lambda}^\pi = \frac{1}{\rho_\pi \delta V} \int_{\delta V} \rho \lambda \gamma^\pi dv \quad (\text{C60})$$

– la densité d'apport d'entropie moyenne :

$$\tilde{i}^\pi = \tilde{\Phi}^\pi = \frac{1}{\delta A} \int_{\delta A} \left(\Phi - \rho \tilde{\lambda}^\pi \tilde{\mathbf{r}}^\pi \right) \cdot \mathbf{n} \gamma^\pi da \quad (\text{C61})$$

pour lequel le vecteur apport d'entropie peut être défini comme :

$$\tilde{\Phi}^\pi = \Phi^\pi \cdot \mathbf{n} \quad (\text{C62})$$

– l'apport d'entropie suite à l'échange de masse :

$$e^\pi(\rho\psi) = e^\pi(\rho\lambda) = \frac{1}{\rho_\pi \delta V} \sum_{\alpha \neq \pi} \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \rho \lambda (\mathbf{w} - \dot{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \quad (\text{C63})$$

– l'apport d'entropie suite aux interactions mécaniques :

$$I^\pi = \frac{1}{\rho_\pi \delta V} \sum_{\alpha \neq \pi} \int_{\delta A^{\pi\alpha}} \Phi \cdot \mathbf{n}^{\pi\alpha} da \quad (\text{C64})$$

– l'apport externe d'entropie moyenne :

$$\bar{b}^\pi = \bar{s}^\pi \quad (\text{C65})$$

– l'augmentation moyenne totale de l'entropie :

$$\bar{G}^\pi = \bar{\varphi}^\pi \quad (\text{C66})$$

Si on indique la somme de l'eq.C63 et l'eq.C64 comme $1 / \rho_\pi \hat{\lambda}^\pi$ et on transforme l'équation comme d'habitude, on obtient :

$$\rho_\pi \frac{D^\pi \bar{\lambda}^\pi}{Dt} + \rho_\pi e^\pi(\rho) \bar{\lambda}^\pi - \text{div} \Phi^\pi - \rho_\pi \bar{s}^\pi - \hat{\lambda}^\pi = \rho_\pi \bar{\varphi}^\pi \quad (\text{C67})$$

Pour la condition à la frontière on obtient :

$$\sum_\pi \hat{\lambda}^\pi = 0 \quad (\text{C68})$$

A l'échelle microscopique on avait défini :

$$\sum_\pi \rho_\pi \bar{\varphi}^\pi \geq 0 \quad (\text{C69})$$

Si on suppose que la température absolue θ et l'accélération externe $\mathbf{g}$ sont constantes microscopiques, on peut écrire la forme finale de l'inéquation de l'entropie en introduisant l'eq.2.40 :

$$\sum_\pi \left[\rho_\pi \frac{D^\pi \bar{\lambda}^\pi}{Dt} + \rho_\pi e^\pi(\rho) \bar{\lambda}^\pi + \text{div} \left(\frac{1}{\theta^\pi} \mathbf{q}^\pi \right) - \frac{1}{\theta^\pi} \rho_\pi h^\pi \right] \geq 0 \quad (\text{C70})$$

ANNEXE D

D1. Enthalpie libre d'une substance pure

On rappelle tout d'abord des définitions qui nous permettront de définir l'enthalpie libre pour un gaz parfait et pour un liquide incompressible en tant que substance pure. On remarque que dans la suite on fera référence à une formulation de type molaire.

Dans la suite nous considérons les quatre fonctions d'état suivantes pour les fluides : l'énergie interne molaire u , l'énergie libre molaire W , l'enthalpie molaire h et l'enthalpie libre molaire g . Pour caractériser l'état, nous ferons référence à une couple de variables, la première est choisie entre le volume molaire V et la pression p , la seconde est choisie entre la température absolue θ et l'entropie s . L'utilisation du premier principe de la thermodynamique et de l'équation de bilan d'entropie permet de choisir un jeu de variables d'état "naturellement" associées à chaque fonction d'état au sens où cette expression permet d'établir des relations simples entre les dérivées partielles des fonctions d'état et les variables elles-mêmes.

Le premier principe de la thermodynamique nous permet d'écrire une relation entre les variations d'énergie interne du , d'énergie cinétique dK , de travail δL et de la chaleur δQ :

$$du + dK = \delta L + \delta Q \quad (\text{D1})$$

Si on considère le passage assez lent entre deux états d'équilibre, on peut négliger le terme de l'énergie cinétique K . On peut écrire le travail de la manière suivante :

$$\delta L = -pdV \quad (\text{D2})$$

avec V le volume molaire et p la pression. Si on rappelle l'équation de bilan de l'entropie s , on peut écrire :

$$ds = \frac{\delta Q}{\theta} + P_s \quad (\text{D3})$$

avec P_s la production interne d'entropie (que l'on négligera par la suite) et θ la température absolue.

L'eq.D1 peut être donc réécrite de la manière suivante :

$$du = -pdV + \theta ds \quad (\text{D4})$$

Si l'on suppose l'énergie interne une fonction d'état de V et s , on obtient donc les théorèmes suivants :

$$\frac{\partial u}{\partial V} = -p \quad (\text{D5})$$

$$\frac{\partial u}{\partial s} = \theta \quad (\text{D6})$$

Parmi les différentes représentations que l'on peut donner de l'énergie interne, on considère donc la représentation en fonction de V et de s comme la représentation "naturelle" de $u(V, s)$.

Définition On définit la fonction enthalpie h de la manière suivante :

$$h = u + pV \quad (\text{D7})$$

i.e.

$$dh = du + d(pV) = \theta ds + Vdp \quad (\text{D8})$$

La représentation naturelle de h est donc $h(p, s)$ et permet d'écrire :

$$\frac{\partial h}{\partial s} = \theta \quad (\text{D9})$$

$$\frac{\partial h}{\partial p} = V \quad (\text{D10})$$

Définition On définit la fonction énergie libre W de la manière suivante :

$$W = u - \theta s \quad (\text{D11})$$

i.e.

$$dW = du - d(\theta s) = -pdV - sd\theta \quad (\text{D12})$$

La représentation naturelle de W est donc $W(V, \theta)$ et permet d'écrire :

$$\frac{\partial W}{\partial V} = -p \quad (\text{D13})$$

$$\frac{\partial W}{\partial \theta} = -s \quad (\text{D14})$$

Définition On définit la fonction enthalpie libre g de la manière suivante :

$$g = h - \theta s \quad (\text{D15})$$

i.e.

$$dg = dh - d(\theta s) = V dp - s d\theta \quad (\text{D16})$$

La représentation naturelle de g est donc $g(p, \theta)$ et permet d'écrire :

$$\frac{\partial g}{\partial p} = V \quad (\text{D17})$$

$$\frac{\partial g}{\partial \theta} = -s \quad (\text{D18})$$

Gaz parfait

On peut retenir la définition suivante d'un gaz parfait : un gaz est parfait, si on peut exprimer l'énergie interne de la manière suivante :

$$u = c_v \theta \quad (\text{D19})$$

i.e. l'énergie interne est fonction de la seule température, avec c_v une constante nommée chaleur spécifique à volume constant.

A la relation D19, on peut associer la loi d'état d'un gaz parfait :

$$pV = R\theta \quad (\text{D20})$$

avec R la constante des gaz parfaits.

On peut donc écrire la relation suivante pour l'enthalpie h :

$$dh = du + d(pV) = du + R d\theta \quad (\text{D21})$$

et donc :

$$dh = c_v d\theta + R d\theta \quad (\text{D22})$$

Si l'on introduit une constante c_p nommée chaleur spécifique à pression constante de la manière suivante :

$$c_p = c_v + R \quad (\text{D23})$$

on peut écrire l'expression de l'enthalpie :

$$dh = c_p d\theta \quad (\text{D24})$$

i.e. l'enthalpie est fonction de la seule température.

De la relation D4 on tire la relation suivante :

$$ds = \frac{du}{\theta} - \frac{pdV}{\theta} \quad (\text{D25})$$

et donc :

$$\begin{aligned} ds &= \frac{c_v d\theta}{\theta} + \frac{R dV}{V} \\ ds &= \frac{c_p d\theta}{\theta} - \frac{R dp}{p} \end{aligned} \quad (\text{D26})$$

Ceci permet d'exprimer, à une constante près, l'entropie s en fonction de θ et V ou de θ et p .

Par exemple, à partir de l'une des relations D26, on peut donner l'entropie d'un gaz parfait. En particulier, en intégrant la deuxième des eq.D26, entre un état 1 et un état générique on obtient :

$$s(\theta, p) = c_p \ln \frac{\theta}{\theta_1} - R \ln \frac{p}{p_1} + s_1(\theta_1, p_1) \quad (\text{D27})$$

On peut alors calculer l'enthalpie libre, selon sa définition de base :

$$g = h - s\theta \quad (\text{D28})$$

Cette expression nous permet donc d'exprimer l'enthalpie libre en fonction de variables naturelles θ et p à une fonction affine de θ) près :

$$g = c_p(\theta - \theta_1) - c_p \theta \ln \frac{\theta}{\theta_1} + R \theta \ln \frac{p}{p_1} - s_1(\theta_1, p_1)\theta + h_1(\theta_1, p_1) \quad (\text{D29})$$

Remarque La relation D29 peut être aussi obtenue par intégration de la relation suivante :

$$dg = V dp - s d\theta = \frac{R\theta dp}{p} - s d\theta \quad (\text{D30})$$

En particulier, la dérivé partielle de g par rapport à θ est :

$$\frac{\partial g}{\partial \theta} = -s = -c_p \ln \frac{\theta}{\theta_1} + R \ln \frac{p}{p_1} - s_1(\theta_1, p_1) \quad (\text{D31})$$

et donc :

$$g(\theta, p) = -c_p \theta \ln \theta + c_p \theta + c_p \theta_1 \ln \theta_1 - c_p \theta_1 + c_p(\theta - \theta_1) \ln \theta_1 + R(\theta - \theta_1) \ln \frac{p}{p_1} - s_1(\theta_1, p_1)(\theta - \theta_1) + g(\theta_1, p) \quad (\text{D32})$$

$g(\theta_1, p)$ est une fonction de p à déterminer (paramètre par θ_1). Nous la notons $f(p)$.

On peut donc calculer $f(p)$ en observant que :

$$\frac{\partial g}{\partial p} = \frac{R\theta}{p} \quad (\text{D33})$$

On a donc l'expression pour g :

$$g(\theta, p) = -c_p \theta \ln \theta + c_p \theta + c_p \theta_1 \ln \theta_1 - c_p \theta_1 + c_p(\theta - \theta_1) \ln \theta_1 + R(\theta - \theta_1) \ln \frac{p}{p_1} + R \theta_1 \ln \frac{p}{p_1} - s_1(\theta_1, p_1)(\theta - \theta_1) + g_1(\theta_1, p_1) \quad (\text{D34})$$

qui dans sa forme finale est égale à la relation D29.

Liquide incompressible

Un liquide incompressible est un liquide pour lequel la variation de volume suite à une variation de pression est négligeable. Ainsi le volume molaire n'est fonction que de la température θ , et en particulier on suppose que :

$$V(\theta) = V(\theta_1) + k(\theta - \theta_1) \quad (\text{D35})$$

avec k une constante qui rend compte de l'expansion volumique. Dans la suite on choisit le couple de variables θ, p ; on peut tout d'abord écrire l'expression que nous donne le travail, selon la définition donnée plus haut :

$$\delta L = -pdV = -pkd\theta \quad (\text{D36})$$

On peut ensuite écrire la chaleur sous la forme suivante :

$$\delta Q = c(\theta, p)d\theta + l(\theta, p)dp \quad (\text{D37})$$

avec c la chaleur spécifique supposée fonction de θ et p et l une fonction à déterminer de θ et p .

On écrit l'expression de l'énergie interne, comme somme entre la chaleur et le travail :

$$du = \delta Q + \delta L = (c(\theta, p) - pk)d\theta + l(\theta, p)dp \quad (\text{D38})$$

et donc :

$$\frac{\partial u}{\partial \theta} = c(\theta, p) - pk \quad \frac{\partial u}{\partial p} = l(\theta, p) \quad (\text{D39})$$

La définition D37 nous permet de déterminer l'entropie :

$$ds = \frac{\delta Q}{\theta} = \frac{c(\theta, p)d\theta}{\theta} + \frac{l(\theta, p)dp}{\theta} \quad (\text{D40})$$

et donc :

$$\frac{\partial s}{\partial \theta} = \frac{c(\theta, p)}{\theta} \quad \frac{\partial s}{\partial p} = \frac{l(\theta, p)}{\theta} \quad (\text{D41})$$

A partir de la relation D38 on peut écrire :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \theta \partial p} = \frac{\partial c(\theta, p)}{\partial p} - k = \frac{\partial l(\theta, p)}{\partial \theta} \quad (\text{D42})$$

et de la relation D40 :

$$\theta \frac{\partial^2 s}{\partial \theta \partial p} = \frac{\partial c(\theta, p)}{\partial p} = \frac{\partial l(\theta, p)}{\partial \theta} - \frac{l(\theta, p)}{\theta} \quad (\text{D43})$$

et donc on peut écrire :

$$l(\theta, p) = -k\theta \quad (\text{D44})$$

On en déduit donc que $\frac{\partial c(\theta, p)}{\partial p} = 0$, donc la chaleur spécifique c ne dépend que de θ i.e. $c = c(\theta)$.

La relation D40 devient donc :

$$ds = \frac{c(\theta)d\theta}{\theta} - kdp \quad (\text{D45})$$

et donc :

$$\frac{\partial s}{\partial \theta} = \frac{c(\theta)}{\theta} \quad \frac{\partial s}{\partial p} = -k \quad (\text{D46})$$

Ces relations s'intègrent facilement si l'on connaît la primitive de $\frac{c(\theta)}{\theta}$. Pour l'eau, l'utilisation des mesures montre que l'on peut négliger la dépendance de c de θ ; on peut alors intégrer les relations D46 et écrire l'entropie s :

$$s(\theta, p) = c \ln \frac{\theta}{\theta_1} - k(p - p_1) + s_1(\theta_1, p_1) \quad (\text{D47})$$

On peut donc calculer l'expression pour l'enthalpie à partir de sa définition de base :

$$dh = du + d(pV(\theta)) = du + pdV(\theta) + V(\theta)dp \quad (\text{D48})$$

et donc, en rappelant les définitions que l'on a données plus haut :

$$dh = c d\theta + (V(\theta) - k\theta)dp \quad (\text{D49})$$

En particulier on peut écrire :

$$\frac{\partial h}{\partial \theta} = c \quad \frac{\partial h}{\partial p} = V(\theta) - k\theta \quad (\text{D50})$$

On peut donc écrire l'expression pour l'enthalpie :

$$h(\theta, p) = c(\theta - \theta_1) + V(\theta)(p - p_1) - k\theta(p - p_1) + h_1(\theta_1, p_1) \quad (\text{D51})$$

A partir de la définition de base, on a donc l'enthalpie libre :

$$\begin{aligned} g(\theta, p) = h - s\theta &= c(\theta - \theta_1) + V(\theta)(p - p_1) - k\theta(p - p_1) \\ &\quad - c\theta \ln \frac{\theta}{\theta_1} + k\theta(p - p_1) - s_1(\theta_1, p_1)\theta + h_1(\theta_1, p_1) \end{aligned} \quad (\text{D52})$$

et donc :

$$g(\theta, p) = c(\theta - \theta_1) + V(\theta)(p - p_1) - c\theta \ln \frac{\theta}{\theta_1} - s_1(\theta_1, p_1)\theta + h_1(\theta_1, p_1) \quad (\text{D53})$$

Remarque De la même manière que pour le gaz parfait, on peut calculer l'enthalpie libre en intégrant directement l'expression suivante :

$$dg = V(\theta)dp - sd\theta \quad (\text{D54})$$

$$\frac{\partial g}{\partial \theta} = -s = -c \ln \frac{\theta}{\theta_1} + k(p - p_1) - s_1(\theta_1, p_1) \quad (\text{D55})$$

Et donc :

$$\begin{aligned} g(\theta, p) &= -c\theta \ln \theta + c\theta + c\theta_1 \ln \theta_1 - c\theta_1 + c(\theta - \theta_1) \ln \theta_1 \\ &\quad + k(p - p_1)(\theta - \theta_1) - s_1(\theta_1, p_1)(\theta - \theta_1) + g(\theta_1, p) \end{aligned} \quad (\text{D56})$$

$g(\theta_1, p)$ est une fonction de p à déterminer (paramètre par θ_1). Nous la notons $f_{\theta_1}(p)$.

A partir de la relation D30, on peut écrire :

$$\frac{\partial g}{\partial p} = V(\theta_1) + k(\theta - \theta_1) \quad (\text{D57})$$

et comme (eq.D56) :

$$\frac{\partial g}{\partial p} = k(\theta - \theta_1) + f'_{\theta_1}(p) \quad (\text{D58})$$

On obtient donc :

$$f'_{\theta_1}(p) = V(\theta) - k(\theta - \theta_1) \quad (\text{D59})$$

et enfin :

$$f_{\theta_1}(p) = V(\theta)(p - p_1) - k(\theta - \theta_1)(p - p_1) \quad (\text{D60})$$

On peut donc finalement écrire l'expression pour l'énergie libre :

$$\begin{aligned} g(\theta, p) = & -c\theta \ln \theta + c\theta + c\theta_1 \ln \theta_1 - c\theta_1 + c(\theta - \theta_1) \ln \theta_1 \\ & + V(\theta)(p - p_1) - s_1(\theta_1, p_1)(\theta - \theta_1) + g_1(\theta_1, p_1) \end{aligned} \quad (\text{D61})$$

qui dans sa forme finale est égale à la relation D53.

Changement de phase

Pour simplifier, l'état de référence (θ_1, p_1) est choisi identique dans le gaz et le liquide. Dans la suite, les grandeurs liées au gaz seront notées g (gw si vapeur pure) et celles liées au liquide w . Si l'on suppose un changement de phase (vaporisation) sans dissipation, on peut égaliser les variations d'enthalpies libres du gaz parfait et du liquide incompressible. Il nous faut donc relier les enthalpies $g_1^g(\theta_1, p_1)$ et $g_1^w(\theta_1, p_1)$ à travers une expérience simple. Considérons un récipient rempli pour partie de liquide et pour le reste de sa vapeur pure. Supposons ce système à l'équilibre à la température θ_1 . Si la surface de séparation liquide-vapeur pure est plane, la pression est la même dans le gaz et dans le liquide. Cette pression dépend de la température et est nommée pression de vapeur saturante p_{sat} . Considérons les eq.D34 et D61 ; on peut imposer l'égalité des enthalpies du liquide et de la vapeur à la température θ_1 et à la pression p_{sat} :

$$g^w(\theta_1, p_{sat}(\theta_1)) = V(\theta_1)(p_{sat} - p_1) + g_1^w(\theta_1, p_1) = R\theta_1 \ln \frac{p_{sat}(\theta_1)}{p_1} + g_1^{gw}(\theta_1, p_1) = g^{gw}(\theta_1, p_{sat}(\theta_1)) \quad (\text{D62})$$

Ainsi nous pouvons exprimer $g_1^w(\theta_1, p_1)$ en fonction de $g_1^{gw}(\theta_1, p_1)$. La relation D61 peut donc s'écrire :

$$\begin{aligned} g^w(\theta, p^w) = & -c\theta \ln \theta + c\theta + c\theta_1 \ln \theta_1 - c\theta_1 + c(\theta - \theta_1) \ln \theta_1 \\ & + V(\theta)(p^w - p_1) - s_1^w(\theta_1, p_1)(\theta - \theta_1) + R\theta_1 \ln \frac{p_{sat}(\theta_1)}{p_1} + V(\theta_1)(p_1 - p_{sat}) + g_1^{gw}(\theta_1, p_1) \end{aligned} \quad (\text{D63})$$

Si l'on écrit maintenant qu'il n'y a pas de dissipation dans un changement de phase liquide-vapeur à la température θ_1 (i.e. $g^w(\theta_1, p^w) = g^{gw}(\theta_1, p^{gw})$) pour une interface liquide vapeur non plane, on obtient une relation entre p^w et p^{gw} :

$$V(\theta_1)(p^w - p_{sat}) = R\theta \ln \frac{p^{gw}}{p_{sat}} \quad (D64)$$

Enfin, en réécrivant la relation en termes massiques, on obtient à nouveau l'équation de Clapeyron généralisée tel que l'on a écrite au chapitre 3 :

$$p^w = p_{sat}(\theta_1) + \frac{\rho_w R \theta_1}{M_w} \text{Log} \left(\frac{p^{gw}}{p_{sat}(\theta_1)} \right) \quad (D65)$$

ANNEXE E

E1. Notation

On rappelle tout d'abord la notation, typique de la théorie des éléments finis, que l'on utilisera dans la suite.

– gradient :

$$\nabla = \left\{ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right\}^T \quad (E1)$$

avec ∇^T équivalent à la divergence

– forme vectorielle du tenseur de contrainte :

$$\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \tau_{xy}, \tau_{yz}, \tau_{zx}\}^T \quad (E2)$$

– forme vectorielle du tenseur de déformation :

$$\boldsymbol{\epsilon} = \{\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z, \gamma_{xy}, \gamma_{yz}, \gamma_{zx}\}^T \quad (E3)$$

– opérateur différentiel $\mathbf{L}$

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix}^T \quad (E4)$$

cet opérateur établi la relation entre le vecteur de déformation et le vecteur de déplacement $\mathbf{u} = \{u_x, u_y, u_z\}^T$ à travers la relation :

$$\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{L}\mathbf{u} \quad (E5)$$

– forme vectorielle du tenseur identité $\mathbf{I}$

$$\mathbf{m}^T = \{1, 1, 1, 0, 0, 0\}^T \quad (E6)$$

on peut vérifier que :

$$\text{div } \mathbf{v}^s = \nabla^T \mathbf{v}^s = \mathbf{m}^T \mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \quad (E7)$$

- relation constitutive de la phase solide

$$\boldsymbol{\sigma}' = \mathbf{D}\boldsymbol{\epsilon} \quad (\text{E8})$$

avec $\mathbf{D}$ le tenseur d'élasticité et $\boldsymbol{\sigma}'$ le tenseur de contraintes effectives défini comme :

$$\boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{I}\alpha (S_w p^w + S_g p^g) \quad (\text{E9})$$

Dans cette équation on a introduit le coefficient de Biot α pour prendre en compte aussi la déformation des grains du solide.

- forme matricielle du vecteur unitaire normale $\mathbf{n}$

$$\{n_x, n_y, n_z\}^T \quad (\text{E10})$$

on définit la matrice $\mathbf{l}$:

$$\mathbf{l} = \begin{bmatrix} n_x & 0 & 0 & n_y & 0 & n_z \\ 0 & n_y & 0 & n_x & n_y & 0 \\ 0 & 0 & n_z & 0 & n_y & n_x \end{bmatrix}^T \quad (\text{E11})$$

A l'aide des expressions qu'on vient de définir, on peut donc transformer les équations du modèle de la manière suivante :

conservation de masse de l'air :

$$\begin{aligned} & -n\rho^{ga} \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) - \rho^{ga} \beta_s (1-n) (1-S_w) \frac{\partial \theta}{\partial t} + \\ & + (1-S_w) \rho^{ga} \mathbf{m}^T \mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (1-S_w) n \left(\frac{\partial \rho^{ga}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{ga}}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{ga}}{\partial p^g} \frac{\partial p^g}{\partial t} \right) + \\ & + \nabla^T \left[\rho^{ga} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}) \right] + \nabla^T \left[\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \nabla \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \right] = \\ & = \left(\dot{m}_{dehydr} + (1-n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right) \frac{\rho^{ga}}{\rho^s} (1-S_w) \end{aligned} \quad (\text{E12})$$

conservation de masse de l'eau liquide et vapeur :

$$\begin{aligned} & n(\rho^w - \rho^{gw}) \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) + [\rho^w S_w + \rho^{gw} (1-S_w)] \mathbf{m}^T \mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \\ & + (1-S_w) n \left(\frac{\partial \rho^{gw}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{gw}}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) - \nabla^T \left[\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \nabla \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \right] \\ & + \nabla^T \left\{ \rho^{gw} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} [-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}] \right\} - \beta_{swg}^* \frac{\partial \theta}{\partial t} \\ & + \nabla^T \left\{ \rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} [-\nabla p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}] \right\} = \\ & + \frac{\rho^w S_w + \rho^{gw} (1-S_w)}{\rho^s} \left[(1-n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{D^s \Gamma_{dehydr}}{Dt} + \dot{m}_{dehydr} \right] - \dot{m}_{dehydr} \end{aligned} \quad (\text{E13})$$

conservation de l'enthalpie :

$$\begin{aligned}
& (\rho C_p)_{eff} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho^w C_p^w \left\{ \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} [-\nabla p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}] \right\} \cdot \nabla \theta \\
& + \rho^g C_p^g \left\{ \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} [-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}] \right\} \cdot \nabla \theta - \nabla^T (\chi_{eff} \nabla \theta) \\
& = -\dot{m}_{vap} \Delta H_{vap} + \dot{m}_{dehydr} \Delta H_{dehydr}
\end{aligned} \tag{E14}$$

avec :

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{vap} = & -\rho^w S_w \mathbf{m}^T \mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \beta_{sw}^* \rho^w \frac{\partial \theta}{\partial t} - \rho^w n \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) \\
& - \nabla^T \left[\rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}) \right] + \\
& - \left(\dot{m}_{dehydr} + (1-n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right) \frac{\rho^w S_w}{\rho^s} + \dot{m}_{dehydr}
\end{aligned} \tag{E15}$$

équation d'équilibre du moment linéaire :

$$\begin{aligned}
& \mathbf{L}^T \{ \mathbf{D} [\mathbf{L} \mathbf{u} - \mathbf{m}^T (\beta_s/3) (\theta - \theta_o)] - \mathbf{m}^T (p^g - S_w p^c) \} \\
& + [(1-n) \rho^s + n S_w \rho^w + n (1-S_w) \rho^g] \mathbf{g} = 0
\end{aligned} \tag{E16}$$

conditions initiales à $t=0$:

$$\begin{aligned}
p^g(t=0) &= p_o^g, \\
p^c(t=0) &= p_o^c, \\
\theta(t=0) &= \theta_o, \\
\mathbf{u}(t=0) &= \mathbf{u}_o,
\end{aligned} \quad \mathbf{x} \in (\Omega \cup \Gamma) \tag{E17}$$

condition aux limites de type I sur Γ_κ avec $t > 0$:

$$\begin{aligned}
p^g(t) &= \hat{p}^g(t), & \mathbf{x} &\in \Gamma_g \\
p^c(t) &= \hat{p}^c(t), & \mathbf{x} &\in \Gamma_c \\
\theta(t) &= \hat{\theta}(t), & \mathbf{x} &\in \Gamma_\theta \\
\mathbf{u}(t) &= \hat{\mathbf{u}}(t), & \mathbf{x} &\in \Gamma_u
\end{aligned} \tag{E18}$$

condition aux limites de type II sur Γ_κ^q avec $t > 0$:

$$\left[\rho^a \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}) + \rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \nabla \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \right] \cdot \mathbf{n} = q^{ga} \quad \mathbf{x} \in \Gamma_g^q \tag{E19}$$

$$\begin{aligned}
& \left[\begin{aligned} & l\rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}) + \\ & + \rho^{gw} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}) - \rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \nabla \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \end{aligned} \right] \cdot \mathbf{n} \\
& = q^w + q^{gw} + \beta_c (\rho^{gw} - \rho_\infty^{gw}) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_c^q
\end{aligned} \tag{E20}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}) \Delta H_{vap} - \chi_{eff} \nabla \theta \right) \cdot \mathbf{n} \\
& = q^\theta + \alpha_c (\theta - \theta_\infty) + e\sigma_o (\theta^4 - \theta_\infty^4) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_\theta^q
\end{aligned} \tag{E21}$$

$$\mathbf{l}^T \sigma = \mathbf{t} \quad \mathbf{x} \in \Gamma_u^q \tag{E22}$$

E2. Formulation variationnelle du modèle

On peut donc utiliser une méthode variationnelle pour résoudre le système d'équations que l'on vient de réécrire. Cette méthode sera la méthode des résidus pondérés. Ceci permet l'écriture des équations sous forme faible.

Si $t > 0$ les fonctions tests p^g, p^c, θ et $\mathbf{u}$ de classe C^1 doivent satisfaire les conditions aux limites que l'on vient d'écrire.

On introduit donc des fonctions poids w_g, w_c, w_t, w_u , de classe C^1 . Dans la formulation générale il s'agit de fonctions génériques, dont le choix sera limité de façon telle que :

$$w_\kappa = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_\kappa \quad \text{et} \quad \bar{w}_\kappa = -w_\kappa, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_\kappa^q \tag{E23}$$

avec $\kappa = g, c, \theta, u$.

On peut donc introduire les équations du modèle sous forme variationnelle :

conservation de la masse de l'air

$$\begin{aligned}
& \int_\Omega w_g^T \left[n \rho^{ga} \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) - \rho^{ga} \beta_s (1-n) (1-S_w) \frac{\partial \theta}{\partial t} \right] d\Omega + \\
& \quad + \int_\Omega w_g^T \left[(1-S_w) \rho^{ga} \mathbf{m}^T \mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right] d\Omega + \\
& \quad + \int_\Omega w_g^T \left[(1-S_w) n \left(\frac{\partial \rho^{ga}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{ga}}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{ga}}{\partial p^g} \frac{\partial p^g}{\partial t} \right) \right] d\Omega + \\
& \quad + \int_\Omega w_g^T \left\{ \nabla^T \left[\rho^{ga} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}) \right] \right\} d\Omega + \\
& \quad + \int_\Omega w_g^T \left\{ \nabla^T \left[\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \nabla \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \right] \right\} d\Omega + \\
& \quad - \int_\Omega w_g^T \left[\left(\dot{m}_{dehydr} + (1-n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right) \frac{\rho^{ga}}{\rho^s} (1-S_w) \right] d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{E24}$$

conservation de masse de l'eau liquide et vapeur :

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} w_c^T \left[-\beta_{sw}^* \frac{\partial \theta}{\partial t} + (1 - S_w) n \left(\frac{\partial \rho^{gw}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{gw}}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) \right] d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} w_c^T \left[n (\rho^w - \rho^{gw}) \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) \right] d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} w_c^T \left\{ [\rho^{gw} (1 - S_w) + \rho^w S_w] \mathbf{m}^T \mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right\} d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} w_c^T \left\{ \nabla^T \left[-\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \nabla \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \right] \right\} d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} w_c^T \left\{ \nabla^T \left[\rho^{gw} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}) \right] \right\} d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} w_c^T \left\{ \nabla^T \left[\rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}) \right] \right\} d\Omega + \\
& - \int_{\Omega} w_c^T \left[\left(\dot{m}_{dehydr} + (1 - n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right) \frac{\rho^{gw} (1 - S_w) + \rho^w S_w}{\rho^s} - \dot{m}_{dehydr} \right] d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{E25}$$

conservation de l'enthalpie :

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} w_t^T (\rho C_p)_{eff} \frac{\partial \theta}{\partial t} d\Omega - \int_{\Omega} w_t^T [\nabla^T (\chi_{eff} \nabla \theta)] d\Omega \\
& + \int_{\Omega} w_t^T \left\{ \left[\rho^w C_p^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}) \right] \cdot \nabla \theta \right\} d\Omega \\
& + \int_{\Omega} w_t^T \left\{ \left[\rho^g C_p^g \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}) \right] \cdot \nabla \theta \right\} d\Omega \\
& + \int_{\Omega} w_t^T \left\{ -\rho^w S_w \mathbf{m}^T \mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \Delta H_{vap} \right\} d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} w_t^T \left\{ \nabla^T \left[\rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}) \right] \Delta H_{vap} \right\} d\Omega \\
& + \int_{\Omega} w_t^T \left\{ \beta_{sw}^* \rho^w \frac{\partial \theta}{\partial t} - \rho^w n \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) \Delta H_{vap} \right\} d\Omega \\
& - \int_{\Omega} w_t^T \left\{ \left[\left(\dot{m}_{hydr} + (1 - n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right) \frac{\rho^w S_w}{\rho^s} - \dot{m}_{dehydr} \right] \Delta H_{vap} \right\} d\Omega \\
& - \int_{\Omega} w_t^T (\dot{m}_{dehydr} \Delta H_{dehydr}) d\Omega = 0
\end{aligned} \tag{E26}$$

équation d'équilibre du moment linéaire :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} w_u^T \{ \mathbf{L}^T \{ \mathbf{D} [\mathbf{L}\mathbf{u} - \mathbf{m}^T (\beta_s/3) (\theta - \theta_o)] - \mathbf{m}^T (p^g - S_w p^c) \} \} d\Omega \\ + \int_{\Omega} w_u^T [(1-n) \rho^s + n S_w \rho^w + n (1 - S_w) \rho^g] \mathbf{g} d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (\text{E27})$$

conditions aux limites de type II sur Γ_{κ}^q avec $t > 0$:

$$\int_{\Gamma_g^q} w_g^T \left\{ \left[\begin{array}{c} \rho^{ga} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}) \\ + \rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \nabla \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \end{array} \right] \cdot \mathbf{n} - q^{ga} \right\} d\Gamma = 0 \quad (\text{E28})$$

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_c^q} w_c^T \left\{ \left[\begin{array}{c} \rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}) \\ + \rho^{gw} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}) \\ - \rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \nabla \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \end{array} \right] \cdot \mathbf{n} + \right. \\ \left. - [q^w + q^{gw} + \beta_c (\rho^{gw} - \rho_{\infty}^{gw})] \right\} d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (\text{E29})$$

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_t^q} w_t^T \left\{ \left(\rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}) \Delta H_{vap} \right) \cdot \mathbf{n} + \right. \\ \left. - q^T + \alpha_c (\theta - \theta_{\infty}) + e \sigma_o (\theta^4 - \theta_{\infty}^4) \right\} d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (\text{E30})$$

$$\int_{\Gamma_u^q} w_u^T (\mathbf{l}^T \sigma - \mathbf{t}) d\Gamma = 0 \quad (\text{E31})$$

Aux termes qui contiennent l'opérateur divergence on peut appliquer le théorème de Green sous la forme :

$$\int_{\Omega} \Phi \nabla^T \Psi d\Omega = - \int_{\Omega} (\nabla \Phi)^T \cdot \Psi d\Omega + \int_{\Gamma} \Phi \Psi \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (\text{E32})$$

avec Φ une fonction scalaire et $\Psi = \{\Psi_x, \Psi_y, \Psi_z\}^{\theta}$ un vecteur.

L'application de la relation E32 introduit des termes supplémentaires liés aux flux Γ_{κ}^q sur la frontière. L'application des conditions aux limites de type II permet une élimination partielle.

Dans l'équation de conservation du moment linéaire, l'opérateur différentiel $\mathbf{L}$ donne le tenseur de contrainte σ ; on peut donc appliquer le théorème de Green de la manière suivante :

$$\int_{\Omega} \Phi \mathbf{L}^T \sigma \, d\Omega = - \int_{\Omega} (\nabla \Phi)^T \sigma \, d\Omega + \int_{\Gamma} \Phi \mathbf{I}^T \sigma \, d\Gamma \quad (\text{E33})$$

Dans la formulation variationnelle, la présence de dérivées de deuxième ordre des variables d'état, nécessite la continuité d'un ordre supérieur des fonctions de forme. L'application du théorème de Green permet de considérer les fonctions de base p^g, p^c, θ et $\mathbf{u}$, et les fonctions poids w_g, w_c, w_t, w_u de classe C^0 .

L'application des relations E32 et E33 et des conditions aux limites, permet de réécrire les équations du système :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} w_g^T \left[n \rho^{ga} \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) - \rho^{ga} \beta_s (1-n) (1-S_w) \frac{\partial \theta}{\partial t} \right] d\Omega + \\ & - \int_{\Omega} w_g^T \left[\left(\dot{m}_{hydr} + (1-n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right) \frac{\rho^{ga}}{\rho^s} (1-S_w) \right] d\Omega + \\ & + \int_{\Omega} w_g^T \left[(1-S_w) \rho^{ga} \mathbf{m}^T \mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right] d\Omega + \\ & + \int_{\Omega} w_g^T \left[(1-S_w) n \left(\frac{\partial \rho^{ga}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{ga}}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{ga}}{\partial p^g} \frac{\partial p^g}{\partial t} \right) \right] d\Omega + \\ & - \int_{\Omega} (\nabla w_g)^T \cdot \left\{ \left[\rho^{ga} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}) \right] \right\} d\Omega + \\ & - \int_{\Omega} (\nabla w_g)^T \cdot \left\{ \left[\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \nabla \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \right] \right\} d\Omega + \\ & + \int_{\Gamma_g^q} w_g^T q^{ga} \, d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (\text{E34})$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} w_c^T \left[-\beta_{sw}^* \frac{\partial \theta}{\partial t} + (1 - S_w) n \left(\frac{\partial \rho^{gw}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{gw}}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) \right] d\Omega + \\
& \quad + \int_{\Omega} w_c^T \left[n (\rho^w - \rho^{gw}) \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) \right] d\Omega + \\
& - \int_{\Omega} w_c^T \left[\left(\dot{m}_{dehydr} + (1 - n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right) \frac{\rho^{gw} (1 - S_w) + \rho^w S_w}{\rho^s} - \dot{m}_{dehydr} \right] d\Omega + \\
& \quad + \int_{\Omega} w_c^T \left\{ [\rho^{gw} (1 - S_w) + \rho^w S_w] \mathbf{m}^T \mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right\} d\Omega + \\
& \quad - \int_{\Omega} (\nabla w_c)^T \cdot \left[-\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \nabla \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) \right] d\Omega + \\
& \quad - \int_{\Omega} (\nabla w_c)^T \cdot \left[\rho^{gw} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}) \right] d\Omega \\
& \quad - \int_{\Omega} (\nabla w_c)^T \cdot \left[\rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}) \right] d\Omega \\
& \quad + \int_{\Gamma_c^g} w_c^T [q^w + q^{gw} + \beta_c (\rho^{gw} - \rho_{\infty}^{gw})] d\Gamma = 0
\end{aligned} \tag{E35}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} w_t^T (\rho C_p)_{eff} \frac{\partial \theta}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} (\nabla w_t)^T \cdot \chi_{eff} \nabla T d\Omega \\
& + \int_{\Omega} w_t^T \left\{ \left[\rho^w C_p^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}) \right] \cdot \nabla T \right\} d\Omega + \\
& \quad + \int_{\Omega} w_t^T \left\{ \left[+\rho^g C_p^g \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla p^g + \rho^g \mathbf{g}) \right] \cdot \nabla T \right\} d\Omega + \\
& \quad + \int_{\Omega} w_t^T \Delta H_{vap} \left\{ -\rho^w S_w \mathbf{m}^T \mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right\} d\Omega + \\
& \quad + \int_{\Omega} (\nabla w_t)^T \cdot \Delta H_{vap} \left[\rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla p^g + \nabla p^c + \rho^w \mathbf{g}) \right] d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} w_t^T \Delta H_{vap} \left\{ \beta_{sw}^* \rho^w \frac{\partial \theta}{\partial t} - \rho^w n \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} \right) \right\} d\Omega +
\end{aligned} \tag{E36}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Omega} w_t^T \Delta H_{vap} \left\{ \left[\left(\dot{m}_{hydr} + (1-n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right) \frac{\rho^w S_w}{\rho^s} - \dot{m}_{dehydr} \right] \right\} d\Omega + \\
& \quad + \int_{\Omega} w_t^T (-\Delta H_{dehydr} \dot{m}_{dehydr}) d\Omega + \\
& \quad + \int_{\Gamma_t^q} w_t^T [q^T + \alpha_c (\theta - \theta_{\infty}) + e \sigma_o (\theta^4 - \theta_{\infty}^4)] d\Gamma = 0 \\
& - \int_{\Omega} (\mathbf{L} w)^T \{ \mathbf{D} [\mathbf{L} \mathbf{u} - \mathbf{m}^T (\beta_s/3) (\theta - \theta_o)] - \mathbf{m}^T (p^g - S_w p^c) \} d\Omega + \\
& \quad + \int_{\Omega} w^T [(1-n) \rho^s + n S_w \rho^w + n (1 - S_w) \rho^g] \mathbf{g} d\Omega + \int_{\Gamma_u^q} w^T \mathbf{t} d\Gamma = 0
\end{aligned} \tag{E37}$$

E3. Discrétisation du modèle en espace

La discrétisation du modèle en espace des équations sous forme faible, est opérée à l'aide de la méthode des éléments finis. Les variables principales sont donc exprimées à l'aide des fonctions de forme sur les noeuds :

$$\begin{aligned}
\mathbf{p}^g &= \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^g \\
\mathbf{p}^c &= \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^c \\
\theta &= \mathbf{N}_t \bar{\theta} \\
\mathbf{u} &= \mathbf{N}_u \bar{\mathbf{u}}
\end{aligned} \tag{E38}$$

Les relations E38 sont donc introduites dans les équations du système, en remplaçant les fonctions poids w_g, w_c, w_t , et w_u avec les fonctions de forme $\mathbf{N}_p, \mathbf{N}_p, \mathbf{N}_t$ et $\mathbf{N}_u$ (méthode de Galerkin).

Si l'on prend en compte l'écriture suivante :

$$\begin{aligned}
\nabla \left(\frac{p^{gw}}{p^g} \right) &= \frac{\nabla p^{gw}}{p^g} - \frac{p^{gw}}{(p^g)^2} \nabla p^g = \\
&= \frac{1}{p^g} \frac{\partial p^{gw}}{\partial p^c} \nabla p^c + \frac{1}{p^g} \frac{\partial p^{gw}}{\partial \theta} \nabla \theta - \frac{p^{gw}}{(p^g)^2} \nabla p^g
\end{aligned} \tag{E39}$$

on peut obtenir l'expression finale :

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \mathbf{N}_{\mathbf{p}}^T \left[n \rho^{ga} \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \mathbf{N}_t \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \mathbf{N}_p \frac{\partial \bar{\mathbf{p}}^c}{\partial t} \right) \right] d\Omega + \\
& - \int_{\Omega} \mathbf{N}_{\mathbf{p}}^T \left[\left(\dot{m}_{dehydr} - (1-n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right) \frac{\rho^{ga}}{\rho^s} (1 - S_w) \right] d\Omega + \\
& \quad + \int_{\Omega} \mathbf{N}_{\mathbf{p}}^T \left[(1 - S_w) \rho^{ga} \mathbf{m}^T \mathbf{L} \mathbf{N}_u \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} \right] d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} \mathbf{N}_{\mathbf{p}}^T \left[(1 - S_w) n \left(\frac{\partial \rho^{ga}}{\partial \theta} \mathbf{N}_t \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{ga}}{\partial p^c} \mathbf{N}_p \frac{\partial \bar{\mathbf{p}}^c}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{ga}}{\partial p^g} \mathbf{N}_p \frac{\partial \bar{\mathbf{p}}^g}{\partial t} \right) \right] d\Omega + \quad (E40) \\
& - \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N}_{\mathbf{p}})^T \left\{ \left[\rho^{ga} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^g + \rho^g \mathbf{g}) \right] \right\} d\Omega + \\
& - \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N}_{\mathbf{p}})^T \left\{ \left[\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \left(\frac{1}{p^g} \frac{\partial p^{gw}}{\partial p^c} \nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^c + \frac{1}{p^g} \frac{\partial p^{gw}}{\partial \theta} \nabla \mathbf{N}_t \bar{\theta} \right) \right] \right\} d\Omega + \\
& - \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N}_{\mathbf{p}})^T \left\{ \left[\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \left(-\frac{p^{gw}}{(p^g)^2} \nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^g \right) \right] \right\} d\Omega + \int_{\Gamma_g^q} \mathbf{N}_{\mathbf{p}}^T q^{ga} d\Gamma = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Omega} \mathbf{N}_{\mathbf{p}}^T \left[\left(\dot{m}_{dehydr} + (1-n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right) \frac{\rho^{gw} (1 - S_w) + \rho^w S_w}{\rho^s} - \dot{m}_{dehydr} \right] d\Omega + \\
& \quad + \int_{\Omega} \mathbf{N}_{\mathbf{p}}^T \left[-\beta_{swg}^* \mathbf{N}_t \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + (1 - S_w) n \left(\frac{\partial \rho^{gw}}{\partial \theta} \mathbf{N}_t \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{gw}}{\partial p^c} \mathbf{N}_p \frac{\partial \bar{\mathbf{p}}^c}{\partial t} \right) \right] d\Omega + \\
& \quad + \int_{\Omega} \mathbf{N}_{\mathbf{p}}^T \left[n (\rho^w - \rho^{gw}) \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \mathbf{N}_t \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \mathbf{N}_p \frac{\partial \bar{\mathbf{p}}^c}{\partial t} \right) \right] d\Omega + \\
& \quad + \int_{\Omega} \mathbf{N}_{\mathbf{p}}^T \left\{ [\rho^{gw} (1 - S_w) + \rho^w S_w] \mathbf{m}^T \mathbf{L} \mathbf{N}_u \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} \right\} d\Omega + \\
& - \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N}_{\mathbf{p}})^T \left[-\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \left(\frac{1}{p^g} \frac{\partial p^{gw}}{\partial p^c} \nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^c \right) \right] d\Omega + \\
& - \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N}_{\mathbf{p}})^T \left[-\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \left(\frac{1}{p^g} \frac{\partial p^{gw}}{\partial \theta} \nabla \mathbf{N}_t \bar{\mathbf{T}} \right) \right] d\Omega + \\
& - \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N}_{\mathbf{p}})^T \left[-\rho^g \frac{M_a M_w}{M_g^2} \mathbf{D}_g^{gw} \left(-\frac{p^{gw}}{(p^g)^2} \nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^g \right) \right] d\Omega + \quad (E41)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N}_p)^T \left[\rho^{gw} \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^g + \rho^g \mathbf{g}) \right] d\Omega + \\
& - \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N}_p)^T \left[\rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^g + \nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^c + \rho^w \mathbf{g}) \right] d\Omega + \\
& + \int_{\Gamma_c^q} \mathbf{N}_p^T [q^w + q^{gw} + \beta_c (\rho^{gw} - \rho_{\infty}^{gw})] d\Gamma = 0 \\
& \int_{\Omega} \mathbf{N}_t^T \Delta H_{vap} \left\{ \beta_{sw}^* \rho^w \mathbf{N}_t \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} - \rho^w n \left(\frac{\partial S_w}{\partial \theta} \mathbf{N}_t \frac{\partial \bar{\mathbf{T}}}{\partial t} + \frac{\partial S_w}{\partial p^c} \mathbf{N}_p \frac{\partial \bar{\mathbf{p}}^c}{\partial t} \right) \right\} d\Omega + \\
& - \int_{\Omega} \mathbf{N}_t^T \Delta H_{vap} \left[\left(\dot{m}_{dehydr} + (1-n) \frac{\partial \rho^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \frac{\partial \Gamma_{dehydr}}{\partial t} \right) \frac{\rho^w S_w}{\rho^s} - \dot{m}_{dehydr} \right] d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} \mathbf{N}_t^T (\rho C_p)_{eff} \mathbf{N}_t \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N}_t)^T \chi_{eff} \nabla \mathbf{N}_t \bar{\mathbf{T}} d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} \mathbf{N}_t^T \left\{ \left[\rho^w C_p^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^g + \nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^c + \rho^w \mathbf{g}) \right] \cdot \nabla \mathbf{N}_t \bar{\mathbf{T}} \right\} d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} \mathbf{N}_t^T \left\{ \left[\rho^g C_p^g \frac{\mathbf{k} k^{rg}}{\mu^g} (-\nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^g + \rho^g \mathbf{g}) \right] \cdot \nabla \mathbf{N}_t \bar{\mathbf{T}} \right\} d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} \mathbf{N}_t^T \Delta H_{vap} \left\{ -\rho^w S_w \mathbf{m}^T \mathbf{L} \mathbf{N}_u \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} \right\} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{N}_t^T (-\Delta H_{dehydr} \dot{m}_{dehydr}) d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{N}_t)^T \Delta H_{vap} \left[\rho^w \frac{\mathbf{k} k^{rw}}{\mu^w} (-\nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^g + \nabla \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^c + \rho^w \mathbf{g}) \right] d\Omega + \\
& + \int_{\Gamma_t^q} \mathbf{N}_t^T [q^T + \alpha_c (\theta - \theta_{\infty}) + e \sigma_o (\theta^4 - \theta_{\infty}^4)] d\Gamma = 0
\end{aligned} \tag{E42}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Omega} (\mathbf{L} \mathbf{N}_u)^T \left\{ \mathbf{D} [\mathbf{L} \mathbf{N}_u \bar{\mathbf{u}} - \mathbf{m}^T (\beta_s/3) (\mathbf{N}_t \bar{\theta} - \theta_o)] \right\} d\Omega + \\
& + \int_{\Omega} (\mathbf{L} \mathbf{N}_u)^T [\mathbf{m}^T (\mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^g - S_w \mathbf{N}_p \bar{\mathbf{p}}^c)] d\Omega \\
& + \int_{\Omega} \mathbf{N}_u^T [(1-n) \rho^s + n S_w \rho^w + n (1-S_w) \rho^g] \mathbf{g} d\Omega + \\
& + \int_{\Gamma_u^q} \mathbf{N}_u^T \mathbf{t} d\Gamma = 0
\end{aligned} \tag{E43}$$

Si l'on considère une dernière substitution :

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \rho^{gw}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{gw}}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} = \\
= & \frac{M_w}{R\theta} \left(\frac{\partial p^{gw}}{\partial \theta} - \frac{p^{gw}}{\theta} \right) \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{M_w}{R\theta} \frac{\partial p^{gw}}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t}
\end{aligned} \tag{E44}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\partial \rho^{ga}}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{ga}}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{ga}}{\partial p^g} \frac{\partial p^g}{\partial t} \right) = \\
= & \left[-\frac{M_w}{R\theta} \left(\frac{\partial p^{gw}}{\partial \theta} - \frac{p^{gw}}{\theta} \right) - \frac{M_a}{\theta^2 R} \right] \frac{\partial \theta}{\partial t} \\
& - \frac{M_w}{R\theta} \frac{\partial p^{gw}}{\partial p^c} \frac{\partial p^c}{\partial t} + \frac{M_a}{R\theta} \frac{\partial p^g}{\partial t}
\end{aligned} \tag{E45}$$

et on rappelle la notation classique :

$$\mathbf{B} = \mathbf{L}\mathbf{N}_\kappa, \quad \kappa = p, \theta, u \tag{E46}$$

Bibliographie

- [ASHRAE] *ASHRAE Handbook : Fundamentals*. ASHRAE, 2001.
- [Abbas00] A. Abbas, M. Carcasses, and J.P. Ollivier. The importance of gas permeability in addition to the compressive strenght of concrete. *Magazine of concrete research*, 52(1) :1–6, 2000.
- [Abbas99] A. Abbas, M. Carcasses, and J.P. Ollivier. Gas permeability of concrete in relation to its degree of saturation. *Materials and structures*, 32 :3–8, Jan-Feb 1999.
- [Alarcon03] L. Alarcon-Ruiz. *Analyse de l'évolution des propriétés microstructurales des bétons lors d'une élévation de la température*. PhD thesis, ENPC, 2003.
- [Aldea99] C.M. Aldea, S.P. Shah, and A. Karr. The permeability of cracked concrete. *Materials and Structures*, 32 :370–376, 1999.
- [Aldea99-1] C.M. Aldea, S.P. Shah, and A. Karr. Permeability of cracked concrete. *Materials and structures*, (32) :370–376, 1999.
- [Aldea99-2] C.M. Aldea, S.P. Shah, and A. Karr. Effect of cracking on water and chloride permeability of concrete. *J.Mat.Civil Eng.*, (3) :181–187, 1999.
- [Alnajim04] A. Alnajim. *Modélisation et simulation du comportement du béton sous hautes températures par une approche thermo-hygro-mécanique couplée. Application à des situation accidentelles*. PhD thesis, UMLV, 2004.
- [Auriault90] J.L. Auriault, T. Strzelecki, J. Bauer, and S. He. Porous deformable media saturated by a very compressible fluid : quasi-statics. *Eur.J.Mech.*, (4) :373–392, 1990.
- [BHP2000] IREX, editor. *Projet national BHP2000*. 2000.
- [Baggio93] P. Baggio, C. Bonacina, and M. Strada. Trasporto di calore e di massa nel calcestruzzo cellulare. *La Termotecnica*, (12) :53–60, 1993.
- [Baggio97] P. Baggio, C. Bonacina, and B.A. Schrefler. Some considerations on modeling heat and mass transfer in porous media. *Transport in Porous Media*, 28 :233–251, 1997.
- [Bamforth87] P.B. Bamforth. The relationship between permeability coefficient for concrete obtained using liquid and gases. *Mag.Concr.Research*, (39) :3–11, 1987.
- [Baroghel94] V. Baroghel-Bouny. *Caractérisation microstructurale et hydrique des pâtes de ciment et des bétons ordinaires et á très hautes performances*. PhD thesis, ENPC, Paris, 1994.
- [Bary96] B. Bary. *Etude de couplage hydraulique-mécanique dans le beton endommagé*. PhD thesis, Paris 6, Cachan, 1996.

- [Bazant72] Z.P. Bazant and L.J. Najjar. Non linear water diffusion in non saturated concrete. *Matériaux et Construction*, (5) :3–20, 1972.
- [Bazant78] Z.P. Bazant and W. Thonguthai. Pore pressure and drying of concrete at high temperature. *J.Eng.Mech.Div., ASCE*, (104) :1059–1079, 1978.
- [Bazant79] Z.P. Bazant and W. Thonguthai. Pore pressure in heated concrete walls : theoretical prediction. *Mag. of Concrete Research*, (31) :67–76, 1979.
- [Bazant82] Z.P. Bazant and F.H. Whittmann. *Creep and shrinkage in concrete structures*. J.Wiley&Sons, 1982.
- [Bazant87] Z.P. Bazant and G. Pijaudier-Cabot. Nonlocal damage theory. *Journal of Engineering Mechanics, ASCE*, 113 :1512–1533, 1987.
- [Bear79] J. Bear. *Dynamics in fluids in porous media*. Dover, New York, 1979.
- [Bear91] J. Bear and J.M. Buchlin. *Modelling and application of transport phenomena in porous media*. Kluwer, Academic Publisher, 1991.
- [Bhal99] N.S. Bhal and J.P. Jain. Compressive strenght of concrete subjected to elevated temperatures. *The Indian Concrete Journal*, pages 503–507, August 1999.
- [Biot57] M.A. Biot and P.G. Willis. The elastic coefficients of the theory of consolidation. *J.Appl.Mech.*, 24 :594–601, 1957.
- [Brooks66] R.N. Grooks and A.T. Corey. Properties of porous media affecting fluid flow. *J.Irrig.Drain Div.Am.Soc.Civ.Eng.*, 92 :61–68, 1966.
- [Carcasses02] M. Carcasses, A. Abbas, J.P. Ollivier, and J. Verdier. An optimized preconditionig procedure for gas permeability measurement. *Metrials and structures*, 35 :22–27, Jan-feb 2002.
- [Carman56] P.C. Carman. *Flow of gases through porous media*. 1956.
- [Chaboche77] J.L. Chaboche. Sur l’utilisation des variables d’état interne pour la description du comportement viscoplastique et de la rupture par endommagement. Symp. Franco-Polonnais de Rhéologie et Mécanique, 1977.
- [Chakrabarti99] S.C. Chakrabarti and A.J. Jain. Strenght properties of concrete at elevated temperatures- a review. *The Indian Concrete Journal*, pages 495–501, August 1999.
- [Chen92] W.F. Chen and Y. Tsui. Limitations to the large strain theory. *Int.J.Num.Meth.Engng.*, 33 :101–114, 1992.
- [Cism03] CISM. Course on effect of heat on concrete. *CISM-Udine(Italy)*, 2003, 2003.
- [Colemann63] B.D. Colemann and W. Noll. The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity. *Arch.Rational Mech.Anal*, (13) :168–178, 1963.
- [Colina04] H. Colina and J. Sercombe. Transient thermal creep of concrete in service conditions at temperatures up to 300°C. *Mag.Conc.Res.*, in press, 2004.
- [Colleparidi92] M. Colleparidi. *Scienza e tecnologia del calcestruzzo*. Hoepli, 1992.
- [Corey57] A.T. Corey. Measurements of water and air permeability in unsaturated soil. *Soil Sci.Soc.Am.Proc.*, 21 :7–10, 1957.
- [Coussy03] O. Coussy, P. Dangla, T. Lassabatere, and V. Baroghel-Bouny. The equivalent pore pressure and the swelling and shrinkage of cement-based materials. *Materials and Structures*, in press, 2003.
- [Coussy04] O. Coussy. *Poromechanics*. Wiley, 2004.

- [Coussy90] O. Coussy. *Mécanique des milieux poreux*. Editions Technip, 1990.
- [Couture96] F. Couture, W. Jomaa, and Puiggali J.R. Relative permeability relations : a key factor for a drying model. *Transp.Porous Media*, (23) :303–335, 1996.
- [Daian88] J.-F. Daian. Condensation and isothermal water transfer in cement mortar part 1 -pore size distribution, equilibrium, water condensation, and imbibition. *Transport in porous media*, 3 :563–589, 1988.
- [DalPont03] S. Dal Pont and A. Ehrlacher. Analyse numérique et expérimentale de la déshydratation chimique, des transferts de masse et chaleur dans un cylindre creux sujet à hautes températures. CFM2003, 2003.
- [DalPont04] S. Dal Pont and A. Ehrlacher. Numerical and experimental analysis of chemical dehydration, heat and mass transfer in a concrete hollow cylinder submitted to high temperatures. *Int.J.Heat and Mass transfer*, 1(47) :135–147, 2004.
- [DalPont04a] S. Dal Pont, B.A. Schrefler, and A. Ehrlacher. Experimental and finite element analysis of a hollow cylinder submitted to high temperatures. *soumis à Materials and Structures*.
- [DalPont04b] S. Dal Pont, B.A. Schrefler, and A. Ehrlacher. Thermo-hydro-chemical-mechanical analysis of concrete at high temperatures. ICTAM04, Warsaw, 2004.
- [DalPont04c] S. Dal Pont, B.A. Schrefler, and A. Ehrlacher. Intrinsic permeability evolution in high temperature concrete : an experimental and numerical analysis. *Transport in Porous Media*, in press, 2004.
- [Dangla02] P. Dangla. *Introduction à la mécanique des milieux poreux*. Ecole doctorale MODES, ENPC, 2002.
- [Diederichs92] U.M. Diederichs, V. Jumppanen, and V. Penttala. Behaviour of high strength concrete at high temperatures. *Helsinki University of technology, Report 92*, pages 15–26, 1992.
- [Dranchuk65] P.M. Dranchuk and S. Sadiq. The interpretation of permeability measurements. *Journal of Canadian Petroleum*, pages 130–133, 1965.
- [Dranchuk67] P.M. Dranchuk and L.J. Kolada. Interpretation of steady linear visco-inertial gas flow data. *Journal of Canadian Petroleum*, pages 36–40, 1967.
- [Duval92] R. Duval and H. Hornain. "La durabilité du béton vis-à-vis des eaux agressives", *La durabilité des bétons*. Presse de l'ENPC, 1992.
- [Edvarsen99] C. Edvarsen. Water permeability and autogenous healing of cracks in concrete. *ACI Mat.J.*, (4) :448–454, 1999.
- [Eurocode2] Eurocodes, editor. *Eurocode2 : design of concrete structures*. Comité Européenne de Normalisation - Bruxelles, 2004.
- [Eurocode4] Eurocodes, editor. *Eurocode 4, Design of Composite Steel and Concrete Structures*. Eurocodes, 1994.
- [Feldman68] R.F. Feldman and P.J. Sereda. A model of hydrated portland cement paste as deduced from sorption length-change and mechanical properties. *Mat. and Struct. RILEM*, 1(6) :509–520, 1968.
- [Felicetti96] R. Felicetti, P.G. Gambarova, G.P. Rosati, and G. Giannuzzi. Residual mechanical properties of high-strength concretes subjected to high-temperatures cycles. pages 579–588. 4th Int.Symp. on Utilization of high-strength concrete, 1996.

- [Ferraille00] A. Ferraille. *Le rôle de l'eau dans le comportement á haute température des bétons*. PhD thesis, ENPC, Paris, 2000.
- [Folliot82] A. Folliot and M. Buil. *La structuration progressive de la pâte de ciment*. Presse de l'ENPC, Paris, 1982.
- [Forsyth91] P.A. Forsyth and R.B. Simson. A two phase, two component model for natural convection in a porous medium. *Int.J.Numer.Meth.Fluids*, (12) :665–682, 1991.
- [Fuller07] W.B. Fuller and S.E. Thompson. The laws of proportioning concrete. *ASCE*, (59) :67–143, 1907.
- [Garboczi90] E.J. Garboczi. Permeability, diffusivity, and microstructural parameters : a critical review. *Cement and concrete research*, 20 :591–601, 1990.
- [Gawin01] D. Gawin, M. Lefik, and B.A. Schrefler. An approach to sorption hysteresis within a coupled hygro-thermal-mechanical FE analysis. *Int.J.Numer.Meth.Engng*, 50 :299–323, 2001.
- [Gawin02] D. Gawin, B.A. Schrefler, and F. Pesavento. Modelling of hygro-thermal behavior and damage of concrete at temperature above the critical point of water. *Int.J.Numer.Anal.Meth.Geomech*, (26) :537–562, 2002.
- [Gawin03] D. Gawin, F. Pesavento, and B.A. Schrefler. Modelling of hygro-thermal behaviour of concrete at high temperature with thermo-chemical and mechanical material degradation. *Comput.Methods Appl.Mech.Engrg*, (192) :1731–1771, 2003.
- [Gawin96] D. Gawin, C.E. Majorana, , F. Pesavento, and B.A Schrefler. A fully coupled multiphase model of hygro-thermo-mechanical behaviour of concrete at high temperature. *Comp.Mech*, 1996.
- [Gawin99] D. Gawin, C.E. Majorana, and B.A. Schrefler. Numerical analysis of hygro-thermal behaviour and damage of concrete at high temperature. *Mech.Cohes.-Fric.Mater.*, 4 :37–74, 1999.
- [Gear71] C.W. Gear. The simultaneous numerical solution of differential-algebraic solutions. *IEEE Trans.Circuit Theory*, CT-18 :89–95, 1971.
- [Genuchten80] M.Th. Van Genuchten. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Sci.Soc.Am.J.*, 44 :892–898, 1980.
- [Germain83] P. Germain, Q.S. NGuyen, and P. Suquet. Continuum thermodynamics. *ASME J.Appl.Mech.*, 50 :1010–1020, 1983.
- [Gilbert87] F. Gilbert. *Descriptions thermo-mécaniques de milieux à plusieurs constituants et application aux milieux saturés*. PhD thesis, Université Paris VI, 1987.
- [Gragg82] S.J Gragg and K.S.W. Sing. *Adsorption, surface area and porosity*. 1982.
- [Gray76] W.G. Gray and K O'Neill. On the general equations for flow in porous media and their reduction to darcy's law. *Wat.Res.Research*, 4 :148–154, 1976.
- [Gray76-2] W.G. Gray and P.C.Y. Lee. On the theorems for local volume averaging of multiphase systems. *Int.J.Multiphase Flow*, 3 :333–340, 1976.
- [Gray79-1] W.G. Gray and S.M. Hassanizadeh. General conservation equations for multiphase systems : 1. averaging technique. *Adv.Water.Res*, 2 :131–144, 1979.
- [Gray79-2] W.G. Gray and S.M. Hassanizadeh. General conservation equations for multiphase systems : 2. mass, momenta, energy and entropy transfer. *Adv.Water.Res*, 2 :191–203, 1979.

- [Gray80] W.G. Gray and S.M. Hassanizadeh. General conservation equations for multiphase systems : 3. constitutive theory for porous media. *Adv. Water. Res.*, 3 :25–40, 1980.
- [Gray91] W.G. Gray and S.M. Hassanizadeh. Unsaturated flow theory including interfacial phenomena. *Water Resources Research*, 27 :1855–1863, 1991.
- [Harmathy70] T.Z. Harmathy. Thermal properties of concrete at elevated temperatures. *Journal of mechanics, JMLSA*, 5(1) :47–74, 1970.
- [Haywood90] R.W. Haywood. *Thermodynamic tables in SI units*. Cambridge University Press, 1990.
- [Hearn99] N. Hearn. Effect of shrinkage and load-induced cracking on water permeability of concrete. *ACI Mat. J.*, (2) :563–567, 1999.
- [Herbst89] U. Schneider and H.J. Herbst. Permeabilität und Porosität von Beton bei hohen Temperaturen. *Deutscher Ausschuss fuer Stahlbeton*, pages 23–52, 1989.
- [Hiteco] *Brite Euram III BRPR-CT95-0065 Hiteco, Understanding and industrial application of high performance concrete in high temperature environment-Final Report*. 1999.
- [Hyland83] R.W. Hyland and A. Wexler. Formulations for the thermodynamic properties of the saturated phases of H_2O from 173.15K to 473.15K. *ASHRAE Trans*, 89(2A) :500–519, 1983.
- [Incropera90] F.P. Incropera and D.P. De Witt. *Fundamentals of heat and mass transfer*. Wiley New York, 1990.
- [Kachanov58] L.M. Kachanov. Time of the rupture process under creep conditions. *Izv Akad S.S.R. Otd Tech Nauk*, 8 :26–31, 1958.
- [Kalifa00] P. Kalifa, F. Meneteeu, and D. Quenard. Spalling and pore pressure in HPC at high temperatures. *Cement and concrete research*, (30) :1915–1927, 2000.
- [Kalifa01] P. Kalifa, G. Chené, and C. Gallé. High-temperature behaviour of HPC with polypropylene fibres : From spalling to microstructure. *Cement and concrete research*, (31) :1487–1499, 2001.
- [Khoury85] G. Khoury, P. Sullivan, and B. Grainger. Transient thermal strain of concrete : literature review, conditions within specimen and individual constituent behaviour. *Mag. Conc. Research*, 37 :131–144, 1985.
- [Khoury92] G. Khoury. Compressive strength of concrete at high temperature : a reassessment. *Mag. Conc. Res.*, 44 :291, 1992.
- [Klinkenberg41] L.J. Klinkenberg. The permeability of porous media to liquid and gases. *American Petroleum Institute, Drilling and production practice*, pages 200–213, 1941.
- [Kollek89] J.J. Kollek. The determination of the permeability of concrete to oxygen by the cemberau method -a recommendation. *Materials and Structures*, 22 :225–230, 1989.
- [Lavedeze86] P. Lavedeze. Damage mechanics for composite materials. pages 667–683. JNC5, 9 1986.
- [Lee93] S.L. Lee. *Krylov methods for the numerical solution of initial-value problems in differential-algebraic equations*. PhD thesis, University of Illinois, USA, 1993.

- [Lemaitre78] J. Lemaitre and J.L. Chaboche. Aspect phénoménologique de la rupture par endommagement. *J.de Mec.Appl.*, 2 :317–365, 1978.
- [Lemaitre82] J. Lemaitre and J. Mazars. Application de la théorie de l’endommagement au comportement non-linéaire et à la rupture du béton de structure. *Annales de l’ITBTP*, 401, 1982.
- [Lemaitre85] J. Lemaitre. A continuum damage mechanics model for ductile fracture. *ASME J.Engng.Mat. and Technology*, 107 :83–89, 1985.
- [Mainguy98] M. Mainguy, O. Coussy, and V. Baroghel-Bouny. The role of air pressure in the drying of weakly permeable materials. *J.Eng.Mech.*, 127(2) :582–592, 1998.
- [Mainguy99] M. Mainguy, O. Coussy, and R. Eymard. *Modélisation des transferts hydriques isothermes en milieu poreux. Application au séchage des matériaux à base de ciment*. LCPC, 1999.
- [Mason65] E.A. Mason and L. Monchick. Survey of the equation of state and transport properties of moist gases. *Humidity and moisture Measurement and Control Science*, (3) :257–272, 1965.
- [Mazars84] J. Mazars. *Application de la mécanique de l’endommagement au comportement non-linéaire et à la rupture du béton de structure*. PhD thesis, L.M.T., 1984.
- [Mazars89] J. Mazars and G. Pijaudier-Cabot. Continuum damage theory -application to concrete-. *J.Eng.Mech. ASCE*, 115(2) :345–365, 1989.
- [Millington59] R.J. Millington. Gas diffusion in porous media. *Science*, (130) :100–102, 1959.
- [Molenkamp86] F. Molenkamp. Limits to the jaumann stress rate. *Int.J.Anal.Meth.Geomech*, 10 :151–176, 1986.
- [Moranville83] M. Moranville. *L’eau et ses différentes états dans le béton*. 1983.
- [Moranville92] M. Moranville. *Microstructure des bétons hautes performances, les bétons à hautes performances. Caractérisation, durabilité, application, malier*. Presse ENPC, 1992.
- [Muskat36] M. Muskat and M.W. Meres. The flow of heterogeneous fluids through porous media. *Physics*, (7) :346–363, 1936.
- [Neindre93] B. Le Neindre. Tensions superficielles des composés inorganiques et des mélanges. *Techniques de l’ingénieur*, (1993), 1993. article K476.
- [Noumowe94] A. Noumowe, P. Clastres, G. Debicki, and M. Bolvin. Effect of high temperature on high performance concrete (70 – 600°c)- strength and porosity. pages 151–172. CANMET/ACI Int.Conf.on durability of concrete, 1994.
- [Parker87] J.C. Parker, R.J. Lenhard, and T. Kuppusamy. A parametric model for constitutive properties governing multiphase flow in porous media. *Water Res.Res.*, 23 :618–624, 1997.
- [Pasquero02] D. Pasquero, L. Alarcon-Ruiz, and A.Ehrlacher. Modélisation de l’évolution de la porosité avec la déshydratation des pâtes de ciment. *Matériaux 2002*, October 2002.
- [Pasquero04] D. Pasquero. *Contribution à l’étude de la déshydratation dans les pâtes de ciment soumise à haute température*. PhD thesis, ENPC, 2004.
- [Perraton92] D. Perraton. *La perméabilité aux gaz des netons hydrauliques*. PhD thesis, Université Laval, 1992.

- [Perre90] P. Perre and A. Degiovanni. Simulation par volumes finis des transferts couplés en milieux poreux anisotropes : séchage du bois à basse et à haute température. *Int.J.Heat Mass Transfer*, (33) :2463–2478, 11 1990.
- [Pesavento00] F. Pesavento. *Non linear modelling of concrete as multiphase material in high temperature conditions*. PhD thesis, Università degli Studi di Padova, 2000.
- [Petzold83] L. Petzold. *A description of DASSL : a differential/algebraic system solver*. eds. RS Stepleman et al., Amsterdam, 1983.
- [Pezzani92] P. Pezzani. Propriétés thermodynamiques de l’eau. *Techniques de l’ingénieur*, K3, 1992.
- [Phan00] L.T. Phan, J.R. Lawson, and F. Davis. Mechanical properties of high performance concrete after exposure to elevated temperatures. Technical report, NIST, 2000.
- [Picandet01] V. Picandet. *Influence d’un endommagement mécanique sur la perméabilité et la diffusivité hydrique des bétons*. PhD thesis, LGC,Nantes, 2001.
- [Pimienta03] P. Pimienta and I. Hager. Comportement au feu de BHP additionnées de fibres organiques. Technical report, BHP2000, 2003.
- [Price97] P.E. Price, S. Wang, and I.H. Romdhane. Extracting effective diffusion parameters from drying experiments. *AIChE*, 8 :1925–1934, 1997.
- [Rabotnov68] Y.N. Rabotnov. Creep rupture. Proc. XII Int.Cong.Appl.Mech, 1968.
- [Raina78] S.J. Raina, V.N. Vishwanathan, and S.N. Ghosh. Instrumental techniques for investigating of damaged concrete. *Indian concrete journal*, pages 147–149, May-June 1978.
- [Ranc01] G. Ranc, J. Sercombe, S. Rodrigues, and C. Gatabin. Structural and local behaviour of reinforced highstrenght mock-up subjected to high temperatures. Conf.Int.FRAMCOS, 28 Mai-1er and Juin 2001.
- [Ranc03] G. Ranc, J. Sercombe, and S. Rodrigues. Comportement à haute température du béton de structure-impact de la fissuration sur le transferts hydriques. *Revue française de génie civil*, 7(4) :397–423, 2003.
- [Raznjevic70] K. Raznjevic. *Tables et Diagrammes Thermodynamiques*, 197.
- [Regourd82] M. Regourd. *L’hydratation du ciment Portland*. Presse de l’ENPC, Paris, 1982.
- [Reid87] R.C. Reid, J.M. Praunsnitz, and E.P. Bruce. *The properties of gases and liquids*. McGraw Hill, New York, 1987.
- [Rilem99] Rilem Technical Committées. Rilem TC116-PCD : Permeability of concrete as a criterion of its durability -recommendations-. *Materials and Structures*, 32 :174–179, 1999.
- [Savage97] B.M. Savage and D.J. Jansen. Soil physics principles validated for use in predicting unsaturated moisture movement in portland cement concrete. *ACI materials journal*, 94 :63–70, 1997.
- [Scherer00-1] G.W. Scherer. Thermal expansion kinetics : method to measure permeability of cementitious materials : I, theory. *J.Am.Ceram.Soc*, 11 :2753–2761, 2000.
- [Scherer00-2] G.W. Scherer, H. Ai, and F. Young. Thermal expansion kinetics : method to measure permeability of cementitious materials : Ii, application to hardened cement pastes. *J.Am.Ceram.Soc*, 2 :385–391, 2000.

- [Schrefler02] B.A. Schrefler, P. Brunello, D. Gawin, C. Majorana, and F. Pesavento. Concrete at high temperature with application to tunnel fire. *Computational Mechanics*, (29) :43–51, 2002.
- [Schrefler02b] B.A. Schrefler. Mechanics and thermodynamics of saturated/unsaturated porous materials and quantitative solutions. *Appl.Mech.Rev.*, 4 :351–388, 2002.
- [Schrefler98] R.W. Lewis and B.A. Schrefler. *The Finite Element Method in the static and dynamic deformation and consolidation of porous media*. J.Wiley&Sons, 1998.
- [Selih96] J. Selih, A.C.M. Sousa, and T.W. Bremner. Moisture transport in initially fully saturated concrete during drying. *Transport in porous media*, (24) :81–106, 1996.
- [Tamagny01] A. Feraille, P. Tamagny, A. Ehrlacher, and J. Sercombe. Thermo-hydro-chemical modelling of a porous medium submitted to high temperature : an application to an axisymmetrical structure. *Math.Comp.Mod.*, 37 :641–650, 2003.
- [Tamagny96] P. Tamagny. *Modélisation des milieux à microstructure : approches par la méthode des puissances virtuelles*. PhD thesis, ENPC, 1996.
- [Taylor84] H. Taylor. *The chemistry of cements*. Academic Press, London, 1984.
- [Taylor88] O.C. Taylor, R.L. and Zienkiewicz. *The finite element method*, volume 1 and 2. 1988.
- [Terzaghi25] K. Terzaghi. Principles of soil mechanics, a summary of experimental results on clay and sand. *Eng.News Rec.*, pages 3–98, 1925.
- [Thomas95] H.R. Thomas and M.R. Sansom. Fully coupled analysis of heat, moisture and air transfer in unsaturated soil. *J.Engng.Mech.*, (121) :392–405, 1995.
- [Tognazzi98] C. Tognazzi. *Couplage fissuration-dégradation chimique dans les matériaux cimentaires : caractérisation et modélisation*. PhD thesis, INSA, Toulouse, 1998.
- [Ulm99-1] F.J. Ulm, O. Coussy, and Z. Bazant. The "chunnel" fire. 1 : chemoplastic softening in rapidly heated concrete. *J.Eng.Mech.*, pages 272–282, 3 1999.
- [Ulm99-2] F.J. Ulm, O. Coussy, and Z. Bazant. The "chunnel" fire. 2 : analysis of concrete damage. *J.Eng.Mech.*, pages 283–289, 3 1999.
- [William03] K. William, I. Rhee, and Y. Xi. Thermal degradation of heterogeneous concrete materials. *ASCE Mat.J.*, 2003.
- [Xiao04] J. Xiao and G. Konig. Study on concrete at high temperature in china- an overview. *Fire safety journal*, 39 :89–103, 2004.
- [Zienkiewicz85] O.C. Zienkiewicz and T. Shiomi. Dynamic behaviour of saturated porous media : the general biot formulation and its numerical solution. *Int.J.Num.Anal.Meth.Geomech.*, 8 :71–96, 1985.
- [Zienkiewicz90] O.C. Zienkiewicz, Y.M. Xie, B.A. Schrefler, B.A. Ledesma, and N. Bicanic. Static and dynamic behaviour of soils : a rational approach for quantitative solutions. ii. semi-saturated problems. *Proc.R.Soc.London*, 429 :155–167, 1990.