



HAL
open science

Modélisation du comportement mécanique du béton par approche multi-physique (couplage chimie-mécanique) : application à la réaction alcali-silice

Raphaëlle Naar

► To cite this version:

Raphaëlle Naar. Modélisation du comportement mécanique du béton par approche multi-physique (couplage chimie-mécanique) : application à la réaction alcali-silice. Mécanique [physics.med-ph]. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2009. Français. NNT: . tel-00481739

HAL Id: tel-00481739

<https://pastel.hal.science/tel-00481739>

Submitted on 7 May 2010

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 Doctorale 364 : Sciences Fondamentales et Appliquées

N° attribué par la bibliothèque

_____|_____|_____|_____|_____|_____|_____|_____|_____|_____|

T H E S E

pour obtenir le grade de
Docteur de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris
Spécialité «Mécanique Numérique»

présentée et soutenue publiquement par

Mlle. Raphaëlle NAAR

Soutenue le 14 Décembre 2009

<p>MODELISATION DU COMPORTEMENT MECANIQUE DU BETON PAR APPROCHE MULTI-PHYSIQUE (COUPLAGE CHIMIE-MECANIQUE) : APPLICATION A LA REACTION ALCALI-SILICE</p>

Directeurs de thèse : François BAY, Eric GARCIA-DIAZ

Jury :

M. Fabrice BERNARD	Rapporteur
M. François TOUTLEMONDE	Rapporteur
M. François DE LARRARD	Examineur
M. Yves DEMAY	Examineur
M. Xavier GUILLOT	Examineur
M. François BAY	Directeur de thèse
M. Eric GARCIA-DIAZ	Directeur de thèse
M. Pierre-Olivier BOUCHARD	Encadrant de thèse

Résumé

Modélisation du comportement mécanique du béton par approche multi-physique (couplage chimie-mécanique) : application à la réaction alcali-silice

Raphaëlle Naar

Thèse réalisée au CEMEF (Centre de Mise en Forme des Matériaux), laboratoire de l'Ecole des Mines de Paris, en collaboration avec le DGCE (Département de Génie Civil et Environnemental) de l'Ecole des Mines de Douai et le CMGD (Centre des Matériaux de Grande Diffusion) de l'Ecole des Mines d'Alès et soutenue par l'ATILH (Association Technique de l'Industrie des Liants Hydrauliques).

La réaction alcali-silice (RAS) est une pathologie des bétons engendrant des désordres et dégradations irréversibles au niveau d'ouvrages de divers types (ponts, barrages, trottoirs, etc.). C'est une réaction chimique entre les alcalins contenus dans la pâte de ciment et la silice contenue dans certains granulats utilisés lors de la confection du béton. Bien que des recommandations existent afin d'éviter le développement de cette pathologie, la modélisation numérique des effets de la réaction alcali-silice sur la tenue mécanique du béton reste un enjeu de première importance pour le génie civil.

L'objectif de cette thèse est de progresser dans la compréhension et la modélisation des phénomènes chimiques, mécaniques et de leurs interactions lors de la RAS.

Une modélisation a d'abord été élaborée afin de rendre compte de la chimie de la réaction alcali-silice. Ce modèle analytique est un modèle couplé à deux variables qui sont les champs de concentration en alcalins et en silice. Il permet de connaître à chaque instant de la réaction et en tout point d'une éprouvette la concentration des différentes espèces. La cinétique de la réaction est aussi prise en compte via un paramètre, la constante cinétique, qui pourra être identifiée numériquement.

Afin de coupler chimie et mécanique, ce modèle a été implémenté dans l'outil numérique FEMCAM (Finite Element Model for Concrete Analysis Method) qui simule le comportement mécanique tridimensionnel des matériaux quasi-fragiles tels que les bétons. C'est une approche mésoscopique qui a été adoptée où le béton est considéré comme un matériau biphasé composé de granulats agglomérés dans une pâte de mortier. Le modèle non local de Mazars avec formulation implicite est implémenté dans cet outil pour rendre compte du comportement élastique endommageable de la pâte de mortier tandis que les granulats sont considérés comme ayant un comportement purement élastique.

Le modèle chimique a ensuite été couplé au modèle mécanique afin de rendre compte des effets de la RAS sur le comportement du béton. Il a été considéré une approche dite de gonflement granulaire dans laquelle ce sont les granulats eux-mêmes qui gonflent dans la pâte de mortier et non le gel formé par la réaction. Le couplage inverse, c'est-à-dire l'influence de la dégradation mécanique du béton sur l'avancement de la réaction, a aussi été modélisé par une loi simple mais facilement évolutive. Le modèle complet a pu être validé grâce à différentes campagnes expérimentales et de nombreuses études de sensibilité ont donc été réalisées afin de mieux comprendre l'influence des différents paramètres mis en jeu dans la réaction.

Mots-clefs : Modélisation numérique, béton, réaction alcali-silice, diffusion chimique, couplages multi-physiques, mécanique de l'endommagement.

Abstract

Modelling of the mechanical behavior of concrete using a coupled multi-physics approach (chemical-mechanical coupling): Application to alkali-silica reaction

Raphaëlle Naar

CEMEF (Centre de Mise en Forme des Matériaux) of Ecole des Mines de Paris
DGCE (Département de Génie Civil et Environnemental) of Ecole des Mines de Douai
CMGD (Centre des Matériaux de Grande Diffusion) of Ecole des Mines d'Alès
ATILH (Association Technique de l'Industrie des Liants Hydrauliques)

Alkali-silica reaction is a pathology of concrete which induces irreversible damage for various types of structures (bridges, dams, pavements, etc.). It is a chemical reaction which occurs between the alkalis in cement paste and the silica present in some of the aggregates used for concrete preparation. Although some recommendations exist to prevent the development of this pathology, numerical modeling of the effects of alkali-silica reaction on mechanical properties of concrete remains an important issue for civil engineering applications.

This thesis thus aims at advancing in the understanding and modelling of chemical and mechanical processes, and their interactions during the ASR.

In a first stage, a model has been developed in order to cope with the chemical modeling of the alkali-silica reaction. This model is a coupled model dealing with two main variables – namely the concentrations in alkalis and silica. It provides at any time of the reaction and at every location of the sample the concentrations of the different species. The kinetics of the reaction is also taken into account through a parameter - the kinetics constant - which may be identified numerically.

In order to couple chemistry and mechanics, this model has been implemented in the numerical tool FEMCAM (Finite Element Model for Concrete Analysis Method) - which simulates the 3D mechanical behavior of quasi-brittle materials - such as concrete. A mesoscopic approach has been used here and concrete is considered as a two-phase material composed of aggregates embedded in a mortar paste. A non local Mazars model - with implicit formulation – has been implemented in this tool in order to describe the elastic damage behaviour of mortar paste, aggregates are considered as having a purely elastic behaviour.

The chemical model has then been coupled to the mechanical model in order to consider the effects of the ASR on the concrete's behaviour. A granular swelling has been considered in which the aggregates themselves swell within the mortar paste - and not the gel formed by the reaction. The inverse coupling - that is to say, the influence of concrete's mechanical degradation on the reaction's progress - has also been modelled by a simple but easily scalable law.

The complete model has been validated thanks to different experimental campaigns, numerous sensitivity studies have been carried out to understand better the influence of the various parameters involved in the reaction.

Keywords: Numerical modelling, concrete, alkali-silica reaction, chemical diffusion, multiphysics coupling, damage.

Table des matières

INTRODUCTION GENERALE.....	1
CHAPITRE II : ETAT DE L'ART	5
II.1. PHYSICO-CHIMIE DE LA REACTION ALCALI-SILICE	6
II.1.1. Les principaux modèles de mécanismes réactionnels	6
II.1.2. L'apport de l'expérimentation en laboratoire	11
II.1.3. Conclusion sur l'étude bibliographique de la physico-chimie de la RAS	17
II.2. LES MODELISATIONS DE LA REACTION ALCALI-SILICE	17
II.2.1. Les modèles mésosocopiques	18
II.2.2. Les modèles macroscopiques	33
II.2.3. Conclusion sur les modélisations de la réaction alcali-silice	36
CHAPITRE III : MODELISATION MULTIMATERIAUX DU BETON ET MODELE CHIMIQUE DE LA REACTION ALCALI-SILICE (RAS)	41
III.1. L'OUTIL NUMERIQUE FEMCAM	42
III.1.1. Présentation de l'outil numérique	42
III.1.2. Représentation du matériau béton dans FEMCAM	42
III.2. LA MODELISATION DE LA CHIMIE DE LA REACTION ALCALI-SILICE	45
III.2.1. Hypothèses posées et mécanismes réactionnels retenus	45
III.2.2. Modèle chimique de la réaction alcali-silice.....	46
III.2.3. Modélisation numérique de la réaction alcali-silice.....	48
III.3. ETUDE PARAMETRIQUE DU MODELE PHYSICO-CHIMIQUE.....	55
III.3.1. Référencement des différents paramètres d'entrée utilisés par le modèle et des paramètres visualisables en fin de calcul	55
III.3.2. Etudes de sensibilité	57
III.4. CONCLUSIONS	61
CHAPITRE IV : MODELISATION NUMERIQUE DU COMPORTEMENT MECANIQUE DU BETON	64
IV.1. ETAT DE L'ART DES CODES DE CALCUL MODELISANT LE COMPORTEMENT MECANIQUE DU BETON	65
IV.1.1. Le code CESAR-LCPC.....	65
IV.1.2. Le code SYMPHONIE (CSTB).....	66
IV.1.3. L'outil numérique AMIE de l'EPFL.....	67
IV.2. MODELE DE COMPORTEMENT MECANIQUE DU BETON ET RESOLUTION NUMERIQUE	69
IV.2.1. Le modèle élastique endommageable de Mazars pour le mortier.....	69
IV.2.2. Résolution numérique du problème	71
IV.2.3. Identification des paramètres du modèle de Mazars	73
IV.3. AVANTAGES ET LIMITES DE LA MODELISATION DU BETON DANS FEMCAM	79
IV.3.1. Les avantages du modèle	79
IV.3.2. Les limites du modèle	80
IV.4. CONCLUSIONS	81
CHAPITRE V : MODELISATION DES COUPLAGES ENTRE LA CHIMIE ET LA MECANIQUE POUR LA REACTION ALCALI-SILICE	84
V.1. LE COUPLAGE CHIMIE → MECANIQUE.....	85
V.1.1. Le modèle considéré.....	85

V.1.2. Le problème élastique-chimique pour les granulats réactifs	87
V.1.3. Expression du gonflement induit par la réaction alcali-silice	89
V.1.4. Remarques sur la modélisation des conséquences mécaniques de la RAS	90
V.2. LE COUPLAGE MECANIQUE → CHIMIE.....	90
V.2.1. Position du problème et état de l'art.....	90
V.2.2. Proposition d'un modèle	92
V.3. LE SCHEMA DE RESOLUTION COMPLET IMPLEMENTE DANS FEMCAM.....	92
CHAPITRE VI : VALIDATION NUMERIQUE DU MODELE ET IDENTIFICATION DE	
PARAMETRES	97
VI.1 PRESENTATION DES MESURES EXPERIMENTALES	98
VI.1.1. Les mesures liées à la chimie de la réaction	99
VI.1.2. Les données liées au comportement mécanique	103
VI. 2. IDENTIFICATION DES PARAMETRES DU MODELE.....	106
VI.2.1. Présentation du modèle numérique	106
VI.2.2. Identification de la constante cinétique K.....	108
VI.2.3. Identification du paramètre lié au gonflement granulaire G	109
VI.2.4. Identification de la concentration limite C_{limite}	110
VI.3. VALIDATION NUMERIQUE DU MODELE	112
VI.3.1. Evolution de la géométrie d'une éprouvette au cours de la réaction	113
VI.3.2. Comparaison des données d'avancement expérimental et numérique.....	115
VI.3.3. Evolution des caractéristiques mécaniques au cours de la réaction.....	117
CHAPITRE VII : RESULTATS ET INTERPRETATIONS	127
VII.1. RESULTATS EXPERIMENTAUX	128
VII.1.1. La campagne expérimentale	128
VII.1.2. Résultats sur les propriétés mécaniques du béton.....	129
VII.1.3. Résultats sur la chimie de la réaction alcali-silice	131
VII.1.4. Conclusions sur les résultats expérimentaux	134
VII.2. RESULTATS NUMERIQUES.....	135
VII.2.1. Simulation du béton de la campagne expérimentale réalisée au CGMD d'Alès	
.....	137
VII.2.2. Influence de l'endommagement dans la pâte de mortier	139
VII.2.3. Influence du pourcentage de grains réactifs dans l'éprouvette de béton	141
VII.2.4. Influence de la teneur en alcalins dans l'éprouvette de béton	142
VII.2.5. Influence des coefficients de diffusion dans la pâte de mortier et dans les	
granulats	145
VII.2.6. Influence du confinement de l'éprouvette de béton	147
VII.2.7. Simulation d'un béton haute performance soumis à la réaction alcali-silice ...	150
VII.2.8. Bilan.....	153
VII.3. PROTOCOLE D'UTILISATION DE L'OUTIL NUMERIQUE FEMCAM.....	153
VII.3.1. Première étape : les paramètres mécaniques	153
VII.3.2. Deuxième étape : les paramètres intrinsèques au béton formulé.....	155
VII.3.3. Troisième étape : les paramètres du modèle couplé chimie mécanique.....	156
VII.3.4. Résumé	157
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES	159

INTRODUCTION GENERALE

Contexte de l'étude

Le béton est un matériau de construction composite complexe fabriqué à partir de granulats (sable, gravillons) agglomérés par un liant. La phase liante est à base de ciment hydraté. Le béton étudié à une échelle mésoscopique comporte trois phases principales : les agrégats, la pâte de mortier et la zone interfaciale de transition (ITZ) (Fig. 1).

Les agrégats sont soit naturels soit artificiels et ils sont de taille et de forme variables. On parle de gros agrégats ou gravillons lorsque leur diamètre est supérieur à 4mm et d'agrégats fins ou de sable lorsque leur diamètre est compris entre 80 μ m et 4mm.

La pâte de mortier est composée de la phase liante, le ciment hydraté, et d'agrégats fins. Cette pâte joue le rôle de coagulant, c'est une phase continue qui enveloppe les gravillons.

La zone interfaciale de transition a été découverte par Farran en 1956 et représente la pâte de mortier localisée à la surface des gros agrégats. Cette zone a des propriétés mécaniques et de transferts très différents de celles de la pâte de mortier. En effet, cette zone présente une plus faible résistance et son épaisseur varie entre 20 et 50 μ m en fonction de la composition minérale, de la forme, de la rugosité et de la porosité de l'agrégat ainsi que du type de ciment ou du ratio eau/ciment.

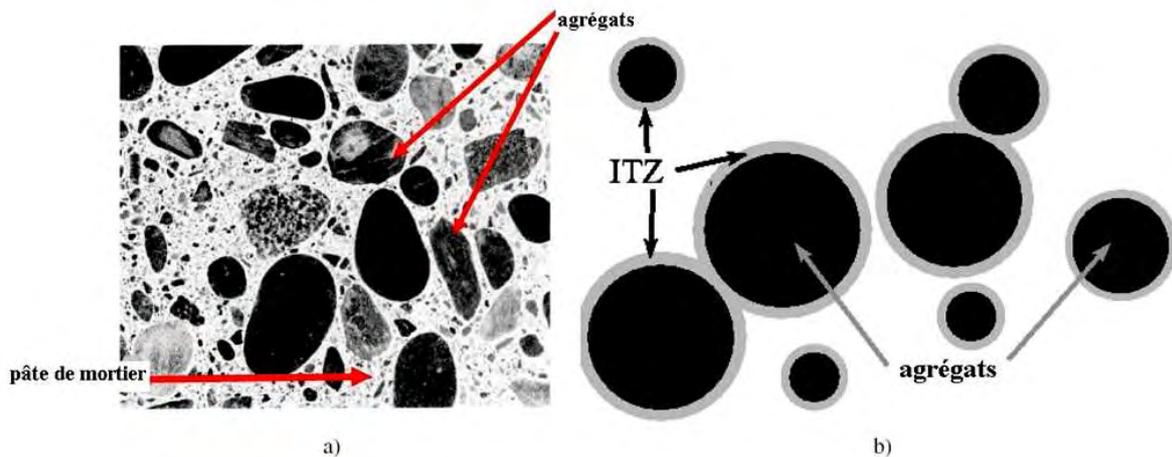


Figure 1 : a) La composition du béton, deux composants principaux sont visibles, la pâte de mortier et les agrégats ; b) Représentation de la zone interfaciale de transition (ITZ)

Le béton est en perpétuelle recherche d'un état d'équilibre vis-à-vis des conditions externes (température, hygrométrie, composition chimique, intempéries...) et est donc normalement évolutif. Si ces conditions sont trop sévères et/ou la composition du béton inadéquate, cette évolution prend des aspects anormaux qualifiés de pathologiques.

En 1935, R.j. Holden est le premier qui a observé aux Etats-Unis l'existence de réactions chimiques dans le béton, entre le ciment et certains granulats mais c'est l'américain Stanton qui précisa le premier, en 1940, la nature des réactions causant les dégradations observées sur des chaussées en Californie. Ces réactions se produisent entre les alcalins du ciment présents dans la solution interstitielle du béton et certains types de granulats, d'où le nom de réaction alcali-granulats (RAG). En France, il faut attendre la fin des années 70 pour confirmer la présence d'alcali-réaction au sein de quelques barrages et 1987 pour découvrir que plusieurs ponts sont atteints par cette pathologie. Il existe trois principaux types de réactions alcali-granulats : la réaction alcali-carbonate, la réaction alcali-silicate et enfin la réaction alcali-silice. Cette dernière étant de loin la plus répandue dans le monde, notre étude se limitera donc à la réaction alcali-silice. Cette réaction endogène entre la silice réactive

contenue dans certains granulats et la solution interstitielle du béton très alcaline engendre la création d'un gel silico-alcalin susceptible d'absorber des quantités d'eau importantes. Ce gel se forme et gonfle d'abord dans les gravillons puis pénètre éventuellement dans la porosité connectée du béton. Cette expansion s'étend généralement sur plusieurs dizaines d'années et peut engendrer des dégradations irréversibles sur les structures. En effet, ce gonflement provoque d'importantes pressions internes ce qui conduit à l'amorçage de fissures dans la pâte de ciment et réduit donc considérablement la résistance du matériau.

Objectifs de la thèse

Afin d'éviter que les nouveaux ouvrages soient susceptibles d'être atteints par la réaction alcali-silice, de nombreuses recherches sur les mécanismes réactionnels ainsi que sur les origines chimiques de la réaction ont été menées depuis la découverte des premiers ouvrages « malades ». Il est donc possible aujourd'hui d'éviter le développement de cette pathologie en respectant certaines recommandations. En ce qui concerne les structures déjà atteintes, peu d'outils permettent de prévoir l'évolution de leur comportement mécanique.

Un premier objectif de ce travail est de proposer un modèle physique permettant de mieux comprendre les différents phénomènes chimiques mis en jeu mais aussi les interactions entre la chimie et la mécanique. Ce travail permettra aussi de savoir quels paramètres ont une réelle influence sur le développement de la réaction et son impact sur le comportement du matériau béton. Ce point est très important car les expérimentations en laboratoire sont bien souvent difficiles à mettre en place, longues et fastidieuses à réaliser.

Un second objectif de ce travail est l'analyse de ce modèle à l'aide d'un outil de modélisation numérique. Pour ce qui est de cette étude, nous nous limiterons à l'implémentation d'un modèle couplé chimie mécanique dans un logiciel tridimensionnel aux éléments finis et nous nous placerons à une échelle mésoscopique. L'objectif à plus long terme étant bien sûr d'aboutir à une représentation multi échelles en intégrant les résultats de ce travail dans un logiciel de calcul des structures.

Plan du manuscrit

Ce manuscrit de thèse est divisé en huit chapitres.

Le deuxième chapitre sera consacré à une revue bibliographique dans laquelle nous nous intéresserons à la physico-chimie de la réaction alcali-silice mais aussi aux différentes modélisations existantes pour représenter cette pathologie et ses effets mécaniques sur le matériau béton.

Le troisième chapitre permettra de présenter une modélisation multimatériaux du béton implémentée dans l'outil numérique aux éléments finis FEMCAM (Finite Element Model for Concrete Analysis Method) mais aussi de proposer le modèle chimique de la réaction alcali-silice. Ce modèle physico-chimique sera largement détaillé ainsi que son implémentation numérique dans l'outil numérique utilisé.

Le quatrième chapitre présentera le modèle de comportement mécanique utilisé pour représenter le matériau béton.

Le cinquième chapitre, quant à lui, sera consacré à la modélisation des couplages multiphysiques entre la chimie et la mécanique.

La sixième partie de ce travail permettra de valider le modèle couplé chimie-mécanique mais aussi d'identifier un certain nombre de paramètres nécessaires à une bonne représentation numérique de cette pathologie très complexe.

Avant de conclure et de présenter différents axes qui pourraient être abordés lors de futures recherches, nous présenterons les résultats obtenus avec notre modélisation numérique de la réaction alcali-silice au travers de nombreuses études de sensibilité des différents paramètres qui entrent en jeu.

CHAPITRE II :

ETAT DE L'ART

II.1. PHYSICO-CHIMIE DE LA REACTION ALCALI-SILICE	6
II.1.1. Les principaux modèles de mécanismes réactionnels	6
II.1.1.a. Les processus dits topochemiques.....	6
II.1.1.a.i. Mécanisme de Dent-Glasser et Kataoka.....	6
II.1.1.a.ii. Mécanisme de Poole.....	7
II.1.1.a.iii. Mécanisme de Wang et Gillott.....	7
II.1.1.b. L'approche dite trans-solution.....	8
II.1.1.c. Les différentes théories sur le gonflement induit par la réaction.....	8
II.1.1.c.i. Gel expansif : approche topochemique	9
II.1.1.c.ii. Gel expansif : approche trans-solution	9
II.1.1.c.iii. Gonflement granulaire : modèle de Bulteel et Garcia-Diaz	9
II.1.2. L'apport de l'expérimentation en laboratoire	11
II.1.2.a. Les paramètres influençant la réaction alcali-silice	11
II.1.2.a.i. La teneur en alcalins	11
II.1.2.a.ii. L'origine de la silice réactive	11
II.1.2.a.iii. Le rôle de l'eau	11
II.1.2.a.iv. L'influence de la température	12
II.1.2.a.v. Le rôle de la porosité de la pâte de ciment	13
II.1.2.b. Les essais expérimentaux de suivie de la réaction alcali-silice	13
II.1.2.b.i. Evolution des caractéristiques géométriques.....	13
II.1.2.b.ii. Evolution des caractéristiques mécaniques	14
II.1.2.b.iii. Evolution des caractéristiques chimiques	15
II.1.2.c. Les effets de la réaction alcali-silice sur les propriétés mécaniques.....	16
II.1.3. Conclusion sur l'étude bibliographique de la physico-chimie de la RAS.....	17
II.2. LES MODELISATIONS DE LA REACTION ALCALI-SILICE	17
II.2.1. Les modèles mésoscopiques	18
II.2.1.a. Le modèle de Sellier	18
II.2.1.b. Le modèle de Uomoto et Furusawa.....	19
II.2.1.c. Le modèle de Bazant et Steffens.....	20
II.2.1.d. Le modèle de Xi	22
II.2.1.e. Le modèle de Poyet.....	24
II.2.2. Les modèles macroscopiques	33
II.2.2.a. Le modèle de Nielsen.....	33
II.2.2.b. Le modèle de Capra.....	33
II.2.2.c. Le modèle de Li	34
II.2.3. Conclusion sur les modélisations de la réaction alcali-silice	36

L'étude bibliographique suivante portera sur deux thèmes principaux. Tout d'abord nous nous intéresserons à la physico-chimie de la réaction alcali-silice afin d'en dégager les principaux mécanismes réactionnels qui deviendront nos hypothèses pour la création du modèle chimique. Les différentes techniques expérimentales pour caractériser tant d'un point de vue chimique que mécanique la réaction seront aussi étudiées afin de réaliser une campagne expérimentale de validation du modèle. La deuxième partie de ce chapitre sera consacrée à l'étude approfondie des différents modèles existant pour modéliser la réaction alcali-silice et ses effets mécaniques sur le béton. Ceci nous permettra de poser certaines hypothèses pour la modélisation.

II.1. Physico-chimie de la réaction alcali-silice

II.1.1. Les principaux modèles de mécanismes réactionnels

Dans la bibliographie, le mécanisme réactionnel unanimement accepté est l'attaque des ions hydroxydes conduisant à l'ionisation des groupements silanols neutralisés ensuite par les contre-ions et la rupture des ponts siloxanes. Par contre le rôle des ions calcium mais aussi la nature du processus chimique ne font pas l'objet d'un consensus. En effet, les modèles en découlant sont à la base des différentes théories de gonflement.

Deux processus chimiques sont principalement relatés dans la littérature, le premier s'appuyant sur un processus topo-chimique, le second étant plutôt basé sur un processus dit de « dissolution-précipitation ». Cependant, le déroulement des réactions présenté par ces différentes approches ont des points communs et la réaction peut être résumée en deux principales étapes : l'attaque des granulats réactifs et le développement des gels expansifs.

II.1.1.a. Les processus dits topo-chimiques

L'approche topo-chimique implique que l'endroit où a lieu la réaction alcali-silice est fixe. Elle se déroule à l'interface solide-liquide constituée par le granulat réactif et la solution interstitielle. Ce processus n'implique pas nécessairement le passage en solution d'entités provenant du granulat.

Les granulats réactifs sont donc attaqués par les ions hydroxydes, deux phases se dégagent alors :

- un processus physique de migration des ions réactifs (les alcalins Na^+ et K^+ associés aux hydroxydes OH^-) contenus dans la pâte de ciment vers les sites réactifs (silice réactive, c'est-à-dire à l'état amorphe, contenue dans certains agrégats) ;
- un processus chimique de réaction des différents ions avec la silice pour aboutir à la formation d'un gel.

II.1.1.a.i. Mécanisme de Dent-Glasser et Kataoka

Les réactions chimiques constituant cette deuxième phase ont été expliquées par Dent-Glasser et Kataoka [Dent-Glasser, 1981]. Le mécanisme suivant a été proposé :

- les ions hydroxydes ionisent les groupements silanols (Fig. 1.a) :

$$\text{Si-OH} + \text{OH}^- \rightarrow \text{Si-O}^- + \text{H}_2\text{O}$$
- les alcalins (Na^+ ou K^+) neutralisent les sites ionisés :

$$\text{Si-O}^- + \text{Na}^+ \rightarrow \text{Si-O-Na} + \text{H}_2\text{O}$$
- les ions hydroxydes coupent les ponts siloxanes (Fig. 1.b):

$$\text{Si-O-Si} + 2\text{OH}^- \rightarrow 2\text{Si-O}^- + \text{H}_2\text{O}$$

Ces réactions conduisent à la formation d'un gel silico-alcalin qui est responsable des expansions.

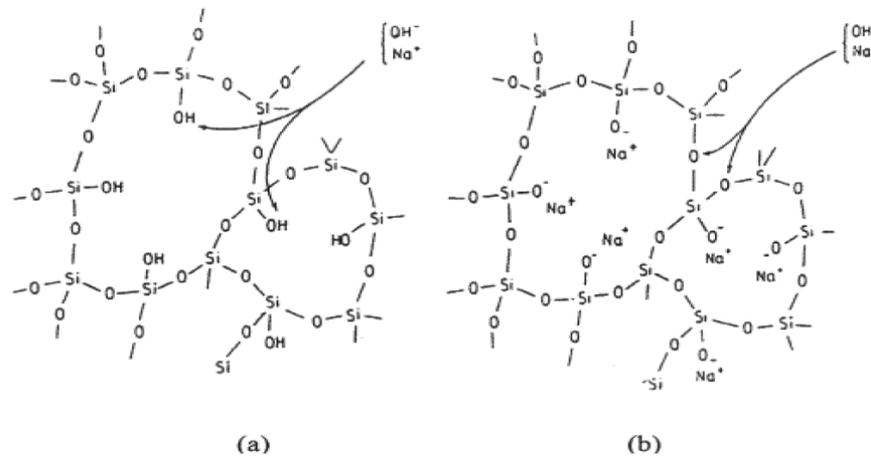


Figure 1 : Réaction alcali-silice d'après L.S. Dent-Glasser et N. Kataoka [Dent-Glasser, 1981]

Ces premières étapes sont admises par une très grande majorité des auteurs notamment Prince et Perami [Prince, 1993] qui ont démontré que l'attaque de la silice était réalisée par les ions hydroxydes. Toutefois, quelques auteurs comme Wilson et al. [Wilson, 1994] pensent que les alcalins sont à l'origine de la rupture des ponts siloxanes. Il est à noter que le modèle ne fait pas intervenir l'ion calcium.

II.1.1.a.ii. Mécanisme de Poole

Le mécanisme proposé par Poole [Poole, 1992] s'inspire du précédent mais cette fois-ci le rôle des ions calcium est pris en compte. Ce schéma réactif décompose les mécanismes en 5 étapes :

- ionisation et neutralisation des liaisons silanols ;
- rupture des ponts siloxanes ;
- dissolution de la portlandite ;
- diffusion des ions ;
- adsorption des ions calcium et retour en solution des alcalins.

Dans ce modèle, la chaux joue un double rôle très important. Tout d'abord un rôle régénérateur en substituant le sodium par le calcium dans les produits formés mais aussi un rôle de réservoir à ions hydroxydes pouvant remplacer ceux consommés par la réaction.

Ce modèle est un peu plus réaliste car il prend en compte la consommation de chaux, toutefois il est seulement descriptif.

II.1.1.a.iii. Mécanisme de Wang et Gillott

Wang et Gillott [Wang, 1991] décrivent cette fois le modèle de réaction en 4 étapes :

- étape 1 : un échange cationique a lieu en surface du granulat entre les protons des groupes silanols et les cations (K^+ , Na^+ et Ca^{2+}).
- étape 2 : les liaisons siloxanes sont rompues par attaque des ions hydroxydes. Dans le même temps, la chaux dissout libère des ions hydroxydes en quantité suffisante pour permettre la poursuite de la découpe.

- étape 3 : un échange cationique entre les protons des silanols et les alcalins formants des complexes alcali-silice susceptibles d'absorber l'eau. Deux raisons peuvent être invoquées pour expliquer une meilleure diffusion des ions alcalins par rapport aux ions calcium. Tout d'abord, la solubilité des hydroxydes alcalins est bien plus importante que celle de la chaux ce qui les rend plus disponibles. De plus, le rayon hydraulique est un facteur qui affecte la diffusion des cations vers les sites réactionnels et celui des Na^+ et des K^+ étant plus petit que celui des Ca^{2+} , cela leur permet de diffuser plus facilement dans le grain.
- étape 4 : un échange entre les Ca^{2+} et les alcalins. En effet, une fois que l'expansion a eu lieu, il y a plus d'espace et cela accroît la possibilité des ions calcium à diffuser vers les sites des complexes alcali-silice. Partiellement remplacés par les Ca^{2+} , les alcalins deviennent à nouveau disponibles pour une attaque des ponts siloxanes et la réaction se poursuit.

Ce modèle est sensiblement équivalent à celui de Poole en mettant en évidence le rôle de la portlandite.

II.1.1.b. L'approche dite trans-solution

Les partisans de ce type de description de la réaction alcali-silice affirment que le développement de la réaction peut se faire n'importe où dans le béton et pas seulement à la surface des granulats réactifs. Ceci implique obligatoirement un passage en solution des éléments nécessaires à la réaction. Ce type de modèle a tout d'abord été initié par Dron [Dron, 1990] et peut se décomposer selon les différentes étapes suivantes :

- une hydrolyse topo-chimique des ponts siloxanes par les OH^- ;
- une ionisation des silanols (adsorption des Na^+ , K^+ et Ca^{2+}) ;
- une dissolution du silicagel ionisé sous forme de silicates ;
- une dissolution de la portlandite ;
- une diffusion des ions silicates et calcium ;
- une précipitation des C-S-H ;
- et enfin une adsorption des Na^+ , K^+ et des silicates.

La première étape se produit donc obligatoirement en surface des granulats réactifs mais la réaction chimique qui va suivre et créer le gel peut avoir lieu partout dans la solution interstitielle, s'accordant ainsi avec le principe de Le Chatelier. L'auteur précise que ce schéma n'est que partiellement démontré car les expansions dues à la réaction sont attribuées à la pression de cristallisation des composés. Or, s'il est vrai que des structures cristallisées existent dans les ouvrages atteints par l'alcali-réaction, elles semblent être des phases ultimes d'évolution des gels.

II.1.1.c. Les différentes théories sur le gonflement induit par la réaction

La réaction alcali-silice provoque donc des gonflements locaux importants impliquant des déformations et aboutissant à la création d'un réseau de fissures réduisant nettement la résistance mécanique du béton atteint. Deux théories sont couramment avancées pour expliquer ces gonflements, la théorie du gel expansif et celle du granulat expansif. La théorie du gel expansif est utilisée à la fois par les partisans de l'approche topo-chimique et ceux de l'approche trans-solution.

II.1.1.c.i. Gel expansif : approche topochimique

Les produits de la réaction alcali-silice se forment donc à l'interface solide-liquide. Deux étapes interviennent alors dans le gonflement : l'hydratation et donc le gonflement de ce gel puis sa dispersion dans tout le matériau béton.

Pendant l'étape d'hydratation, l'eau contenue dans la solution interstitielle pénètre dans le gel grâce à une différence de potentiel chimique entre cette dernière et l'eau déjà contenue dans le gel. Deux types de pression sont alors présentés comme étant responsables des expansions : la pression d'imbibition proposée par Dent-Glasser et Kataoka et la pression osmotique soutenue par Ludwig et Sideris [Ludwig, 1975]. Ces deux notions sont très proches puisqu'elles ont en commun leur cause : une différence de potentiel chimique d'un même corps présent dans deux régions distinctes. La différence essentielle entre ces deux pressions réside dans le fait que dans le cas de la pression d'imbibition, il n'est pas nécessaire de faire intervenir une membrane semi-perméable séparant les régions de potentiels chimiques différents. Cette séparation est réalisée par le produit de la réaction lui-même car il est insoluble dans le liquide.

L'adsorption de l'eau par le gel provoque donc son expansion et engendre d'importants gonflements. Selon Jones [Jones, 1988], leur amplitude dépendrait d'une compétition entre la vitesse de formation et d'hydratation du gel et la capacité de ce dernier à se disperser dans le béton. Deux facteurs influent sur sa facilité de dispersion : sa viscosité mais aussi la perméabilité du béton. Dans tous les cas, si le gel s'hydrate lentement et qu'il se disperse rapidement alors les contraintes créées par l'expansion seront moindres.

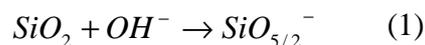
II.1.1.c.ii. Gel expansif : approche trans-solution

Cette théorie développée par Dron et Brivot [Dron, 1992 & 1993] avance comme origine du gonflement, la pression de cristallisation générée par la formation des produits de la réaction par dissolution-précipitation. En effet, le bilan d'énergie libre du système permettrait aux produits formés de mettre la pâte de ciment en traction de sorte qu'elle se fissurerait.

II.1.1.c.iii. Gonflement granulaire : modèle de Bulteel et Garcia-Diaz

Cette approche est donc assez différente des précédentes puisqu'elle avance un gonflement non pas du gel formé par la réaction mais du granulat en lui-même par une transformation structurale de la silice [Garcia-Diaz, 2005] [Bulteel, 2002]. Afin de bien comprendre ce modèle, il faut tout d'abord définir la notion de silice de type Q_4 et Q_3 utilisée par les auteurs. Cette nomenclature renseigne sur la structure de la silice et indique le nombre de liaisons siloxanes (-Si-O-Si-) existant pour un atome de silicium. Un tétraèdre Q_4 correspond à de la silice SiO_2 avec 4 ponts siloxanes et un tétraèdre Q_3 est constitué de 3 liaisons siloxanes et d'un atome d'oxygène non pontant.

Dans un premier temps, l'hydrolyse de la silice (tétraèdres Q_4) par les ions hydroxydes OH^- aboutit à la formation de sites silanols ionisés (tétraèdres Q_3) :



Les sites silanols $SiO_{5/2}^-$ formés sont des tétraèdres de silicium Q_3 dont l'oxygène non pontant est chargé négativement (Fig. 2). Cette transition $Q_4 \rightarrow Q_3$ est expansive, la variation volumique induite a été estimée à 9 cm³ par mole de tétraèdres Q_4 formés.

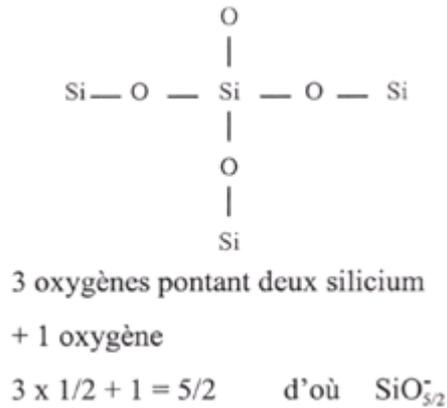
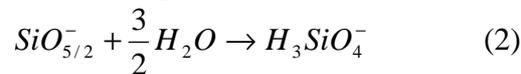


Figure 2 : Représentation des sites réactifs

La deuxième étape correspond à la dissolution de la silice dans la solution interstitielle par hydrolyse des sites silanols ionisés pour former un ion silicate :



Selon la nature physico-chimique du milieu (disponibilité de la Portlandite), cet ion silicate peut précipiter sous la forme de C-S-H plus ou moins dopés en alcalins voire sous la forme d'un silicate alcalin.

Selon les auteurs, si la vitesse de l'étape 1 l'emporte sur la vitesse de l'étape 2, l'accumulation de tétraèdres Q_3 dans le réseau siliceux va s'accompagner d'un gonflement chimique à la base du gonflement du granulat.

Ce mécanisme réactionnel met en avant deux étapes essentielles à partir desquelles deux taux d'avancement sont définis :

- La quantité des sites réactifs présents dans le granulat :

$$n = \frac{\text{nombre de moles de sites actifs}}{\text{nombre de moles de silice initiale}} \quad (\text{II. 1})$$

La quantité de sites actifs n résulte de la compétition entre la réaction de formation de ces sites actifs (étape 1) et la réaction de consommation de ceux-ci (étape 2).

- La quantité de silice dissoute :

$$\alpha = \frac{\text{nombre de moles de silice dissoute}}{\text{nombre de moles de silice initiale}} \quad (\text{II. 2})$$

A partir de n et α , il est possible de calculer n^* :

$$n^* = \frac{\text{nombre de moles de sites actifs}}{\text{nombre de moles de silice restante}} = \frac{n}{1 - \alpha} \quad (\text{II. 3})$$

Ces taux d'avancement quantifient la réaction alcali-silice et présentent l'avantage d'être spécifiques à cette réaction.

II.1.2. L'apport de l'expérimentation en laboratoire

La réaction alcali-silice étant une réaction très lente et pouvant se développer sur des dizaines d'années dans une structure, il paraît important de savoir reproduire cette réaction en accéléré dans un laboratoire. Dans cette partie, nous allons tout d'abord mettre en évidence les facteurs influents sur le développement de la réaction avant de discuter des différentes techniques expérimentales qui permettent de quantifier l'avancement de la réaction. Les effets de la réaction sur les différentes propriétés mécaniques du béton seront aussi exposés.

II.1.2.a. Les paramètres influençant la réaction alcali-silice

Pour qu'il y ait développement de l'alcali-réaction dans une structure en béton, trois éléments sont indispensables : des alcalins, de la silice réactive et de l'eau. Nous allons donc discuter de ces trois éléments, mais aussi du rôle d'autres paramètres tels que la température et la porosité du béton.

II.1.2.a.i. La teneur en alcalins

La principale source d'alcalins est bien sûr le ciment utilisé lors de la formulation des bétons. Du fait de la nature chimique des ciments, ils contiennent toujours des composés alcalins, Na_2O et K_2O , souvent sous forme de sulfates alcalins. Une fois le gâchage du béton réalisé et lorsque la réaction d'hydratation se déroule, ces alcalins passent dans la solution interstitielle. Toutefois le ciment n'est pas la seule source d'apports d'alcalins. En effet, il faut aussi surveiller l'apport potentiel en alcalins de certains granulats tels que les argiles, les feldspaths ou encore les micas. Les alcalins peuvent aussi être apportés par l'eau de gâchage, les adjuvants ou encore les additions minérales mais ils peuvent aussi provenir de l'environnement dans lequel est située l'ouvrage comme par exemple un contact avec les eaux salines ou les sels de déverglaçage.

Au vue du nombre important de sources de provenance des alcalins, il apparaît indispensable de prendre en compte tous ces facteurs lors de la formulation d'un béton. De nombreux travaux de recherche ont montré que la meilleure garantie pour empêcher le développement de la réaction était d'imposer que la teneur en alcalins actifs ne dépasse pas 3 kg par m^3 de béton.

II.1.2.a.ii. L'origine de la silice réactive

La silice qui peut être considérée comme réactive est apportée par les granulats. La réactivité de ces derniers est fonction de leur structure et de leur texture. La texture d'un granulat est liée à sa granularité, à sa microporosité et à sa microfissuration. Une texture fine augmentera ainsi la surface potentiellement réactionnelle. La structure d'un grain est quant à elle définie par l'état de cristallisation de la silice. Une structure mal organisée (opale amorphe, verre volcanique) ou une structure altérée (dégradations par des processus mécaniques ou chimiques) constitue autant de sites actifs potentiels pour initier la réaction.

II.1.2.a.iii. Le rôle de l'eau

Lors de la réaction alcali-silice, l'eau a deux rôles majeurs : une fonction de réactif car l'eau intervient sur l'amplitude des gonflements, et une fonction de milieu réactionnel pour la représentation trans-solution car elle permet le transport et la mise en contact des réactants [Larive, 1997]. Sur les ouvrages, on peut observer des gonflements différentiels en fonction

de la zone dans laquelle se situe le béton : sérieux gonflements en zone humide mais peu ou pas en zone sèche. Selon Hornain [Hornain, 1993], en deçà d'une humidité relative de 70 à 80%, la réaction n'a que très peu de chance de se produire. Une eau de gâchage en excès et donc non consommée par les réactions d'hydratation suffit à l'apparition de désordres [Larive, 1997], d'où l'importance du rapport E/C (eau sur ciment) dans la formulation des bétons. Dans ses travaux, Larive définit aussi une valeur seuil en terme de perte en eau du béton en deçà de laquelle la réaction est stoppée. Si le béton perd plus de 0,15% de masse (i.e. plus de 15g d'eau par kg de béton) alors la réaction chimique est arrêtée mais elle pourra reprendre lors d'un apport d'eau ultérieur.

II.1.2.a.iv. L'influence de la température

La température a une influence sur le déroulement de la réaction, à la fois sur la cinétique mais aussi sur l'amplitude des gonflements. Son rôle cinétique a été rapidement mis en évidence et utilisé pour accélérer la réaction en laboratoire. En effet, alors qu'à température ambiante l'alcali-réaction met plusieurs années à se déclarer et plusieurs dizaines d'années à arriver à son terme, pour des températures plus élevées les déformations apparaissent rapidement. Cette influence peut être modélisée par la loi d'Arrhenius [Larive, 1997]. Typiquement, les essais en laboratoire se font pour des températures comprises entre 38 et 80°C.

D'un point de vue théorique, une hausse de la température devrait aggraver les désordres en entraînant une baisse de la solubilité de la portlandite et une augmentation de celle de la silice. Mais il est aussi à noter qu'une hausse modérée de température permet d'améliorer les propriétés de résistance du matériau. Les deux phénomènes sont en compétition tout comme les différentes constatations en laboratoire des auteurs. Plusieurs auteurs observent des gonflements différents en fonction de la température de conservation des éprouvettes sans toutefois trouver un consensus sur les tendances alors que d'autres comme Shayan et al. [Shayan, 1996] ou Larive retrouvent des gonflements finaux comparables quelle que soit la température (Fig. 3).

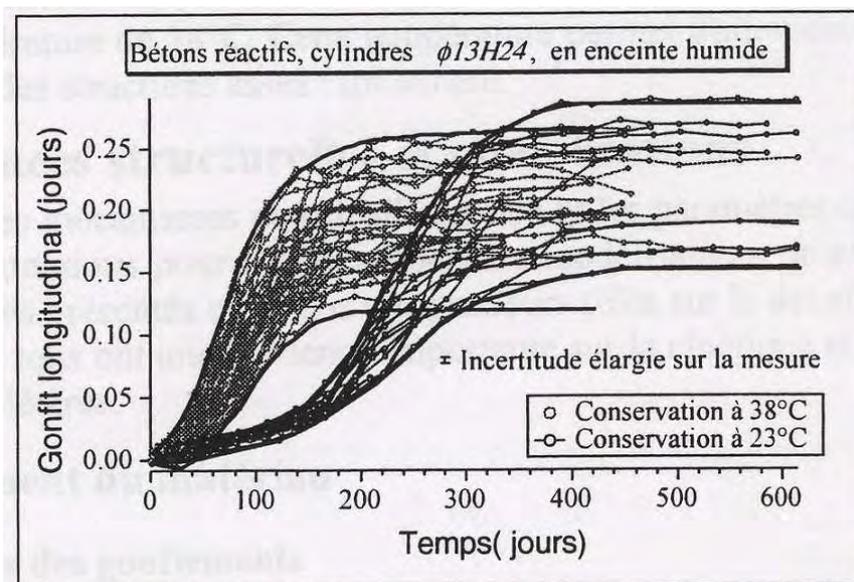


Figure 3 : Comparaison de gonflements obtenus à 23°C et 38°C pour des éprouvettes de même nature [Larive, 1998]

II.1.2.a.v. Le rôle de la porosité de la pâte de ciment

La porosité du béton joue aussi un rôle important dans le développement de la réaction alcali-silice. En effet, elle a deux fonctions principales qui sont d'une part la possibilité pour les alcalins de diffuser (ce terme regroupant à la fois la diffusion pure mais aussi le transport) et d'autre part la possibilité pour le gel créé de ne pas engendrer de désordres en gonflant dans la porosité. Là aussi deux phénomènes rentrent en compétition. Une faible porosité permet de limiter la diffusion et le transport des réactants ce qui retardera l'apparition de la réaction, mais en contrepartie cette porosité ne peut pas jouer son rôle de vase d'expansion ce qui entrainera des gonflements plus importants. Il est possible de faire les mêmes remarques en ce qui concerne la porosité des gravillons qui joue sur la diffusion des alcalins mais aussi qui sert de vase d'expansion lors de la création du gel dans le grain.

II.1.2.b. Les essais expérimentaux de suivie de la réaction alcali-silice

Comme vu précédemment, afin d'accélérer la réaction alcali-silice en laboratoire, la plupart des expérimentateurs mettent en cure les éprouvettes dans des bacs hermétiques et les conservent dans une autoclave dont la température et l'humidité sont contrôlées et ajustées. Un des facteurs nécessaires au développement de l'alcali-réaction étant la présence d'eau, l'humidité relative dans les bacs de conservation des éprouvettes doit être supérieure à 95%.

Les travaux expérimentaux réalisés au département de Génie Civil de l'Ecole des Mines de Douai ainsi que les différents résultats obtenus vont être présentés ici puisqu'ils seront la base des données permettant la validation du modèle élaboré ainsi que l'identification de certains paramètres. Ces recherches ont donné lieu à de nombreux travaux et publications notamment Bulteel [Bulteel, 2002] (Cf. modèle II.1.1.c.iii.), Riche [Riche, 2003], Garcia-Diaz [Garcia-Diaz, 2005], Dehaut [Dehaut, 2002] et Comby [Comby, 2006]. La première étape de ces études a été de déterminer une formulation de béton très réactive vis-à-vis de la réaction alcali-silice [Dehaut, 2002]. Voici la formulation de celle-ci :

- sable calcaire non réactif ;
- gravillons : 50% de gravillons siliceux réactifs, 50% de gravillons calcaires non réactifs ;
- 500 kg/m³ de ciment de type CEM I dont la teneur en alcalin équivalent est de 1% ;
- un rapport E/C de 0,4.

Une fois cette formulation trouvée, de nombreuses campagnes expérimentales ont été réalisées afin de suivre l'évolution des caractéristiques mécaniques, physiques et chimiques d'un béton soumis à la RAS en fonction de l'avancement de la réaction ; nous présenterons ici les principaux résultats qui nous serviront dans la suite du manuscrit.

II.1.2.b.i. Evolution des caractéristiques géométriques

Deux types de caractéristiques géométriques sont étudiés et suivis au cours de la réaction alcali-silice. A l'aide d'un palpeur digital, la taille de l'éprouvette parallélépipédique 7*7*28 cm est mesurée chaque semaine pour étudier la variation linéique de l'échantillon. La variation volumique de l'éprouvette est aussi mesurée expérimentalement par la méthode de la pesée hydrostatique. Les figures suivantes montrent l'évolution de la variation linéique et la corrélation entre la variation linéique et volumique (Fig. 4) :

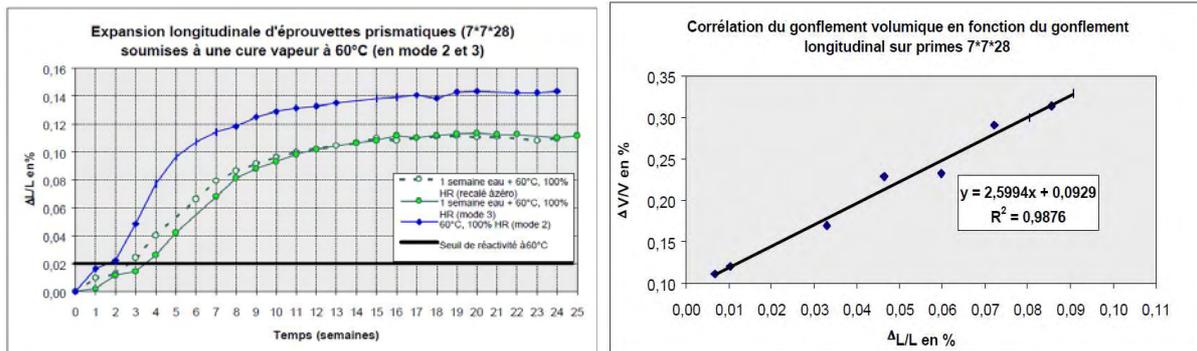


Figure 4 : Variation linéique et corrélation entre gonflement volumique et longitudinal sur prismes 7*7*28 cm [Dehautd, 2002]

Il est à remarquer le coefficient de 2,6 pour la pente de la droite reliant le gonflement volumique au gonflement longitudinal ce qui signifie que le gonflement de l'éprouvette n'est pas isotrope.

II.1.2.b.ii. Evolution des caractéristiques mécaniques

L'évolution du module d'Young est mesurée chaque semaine grâce à un essai de compression simple sur des éprouvettes cylindriques 14*7 cm carottées dans des éprouvettes cylindriques 32*16 cm. Les tests ont été effectués sur une presse hydraulique et instrumentés par un système de jauges extensométriques. La figure suivante présente les résultats (Fig. 5) :

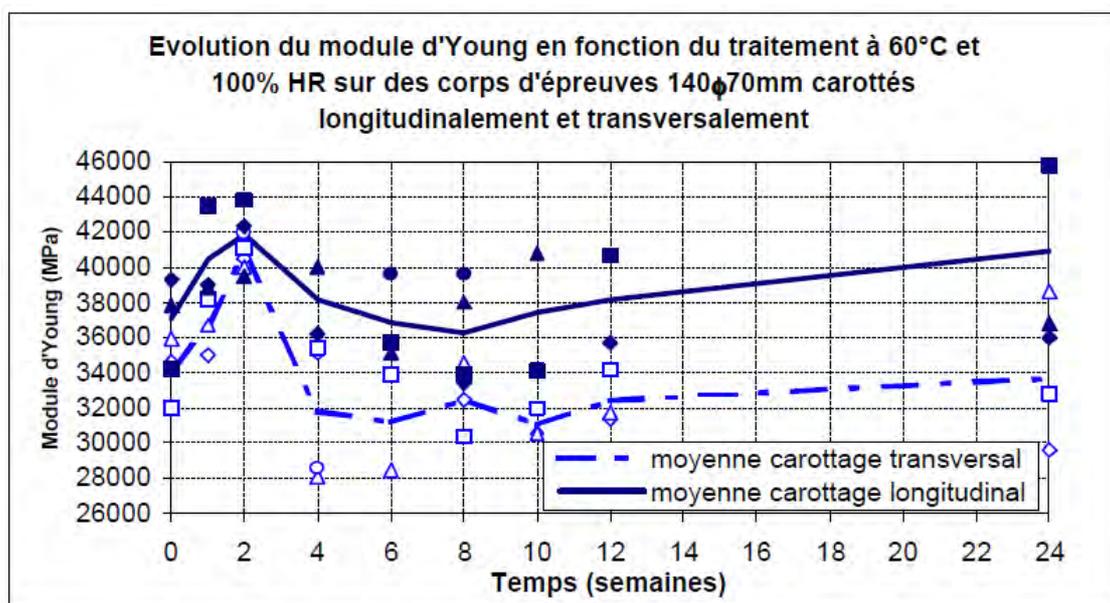


Figure 5 : Evolution du module d'Young sur cylindres conservés à 60°C et 100% HR [Dehautd, 2002]

Cette figure montre une diminution du module de l'ordre de 20% par rapport à la valeur maximale atteinte à deux semaines.

L'évolution de la contrainte à la rupture en compression, mais aussi en traction via un test de flexion trois points, est elle aussi mesurée au cours de la réaction. Les résultats sont les suivants (Fig. 6 et 7) :

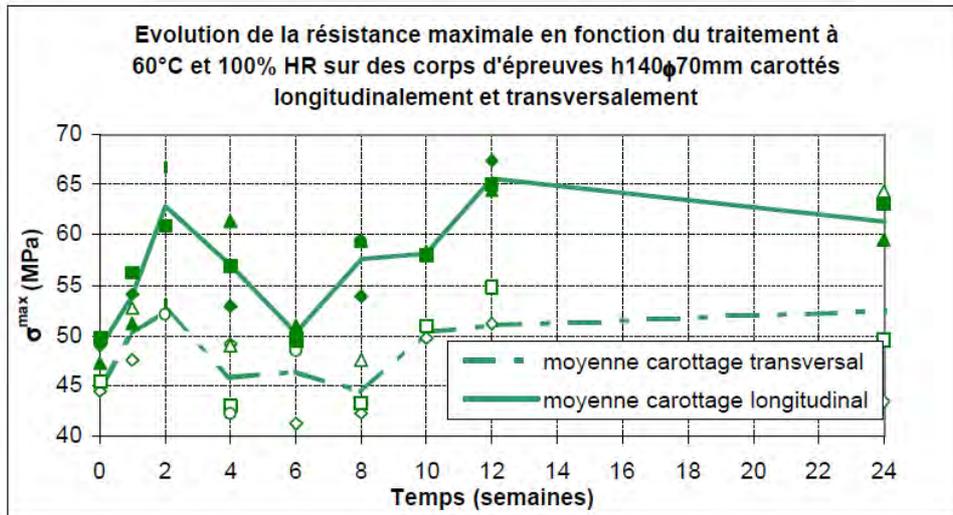


Figure 6 : Evolution de la résistance à la rupture en compression [Dehaut, 2002]

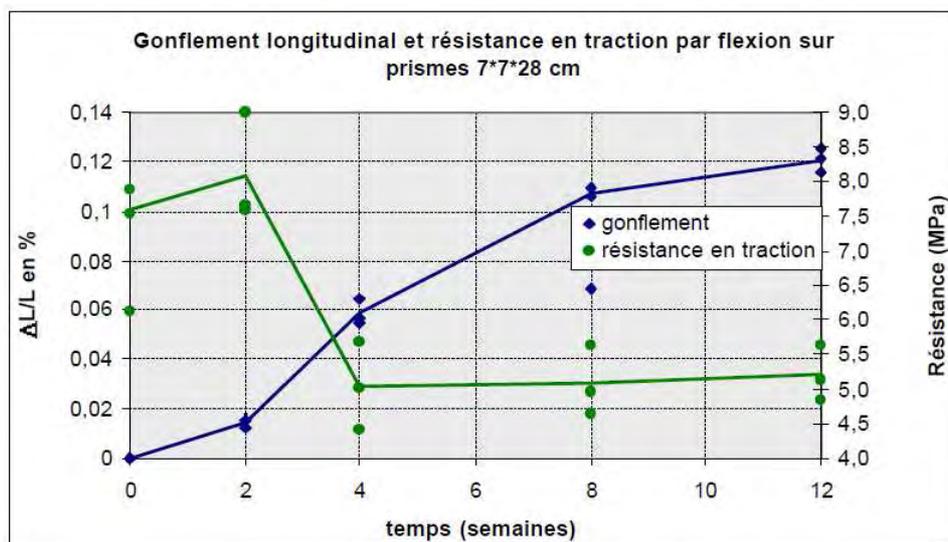


Figure 7 : Evolution de la résistance à la rupture en traction [Dehaut, 2002]

On observe pour la résistance à la rupture en compression qu'après une première phase d'augmentation (de l'ordre de 30%) pendant deux semaines, il y a une chute brutale d'environ 25%. Le double sens de carottage n'a pas permis de mettre en évidence un sens privilégié de fissuration pour la réaction.

Pour la résistance à la rupture en traction, il est observé une diminution de l'ordre de 40% entre 2 et 6 semaines puis une phase de stabilisation.

II.1.2.b.iii. Evolution des caractéristiques chimiques

Une méthode novatrice mise au point au Département de Génie Civil et Environnemental (DGCE) de l'Ecole des Mines de Douai permet d'obtenir la variation du squelette granulaire siliceux au cours du temps [Bultee, 2002]. Cette méthode sera détaillée plus tard dans le manuscrit. Nous présentons ici la variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps de réaction (Fig. 8) :

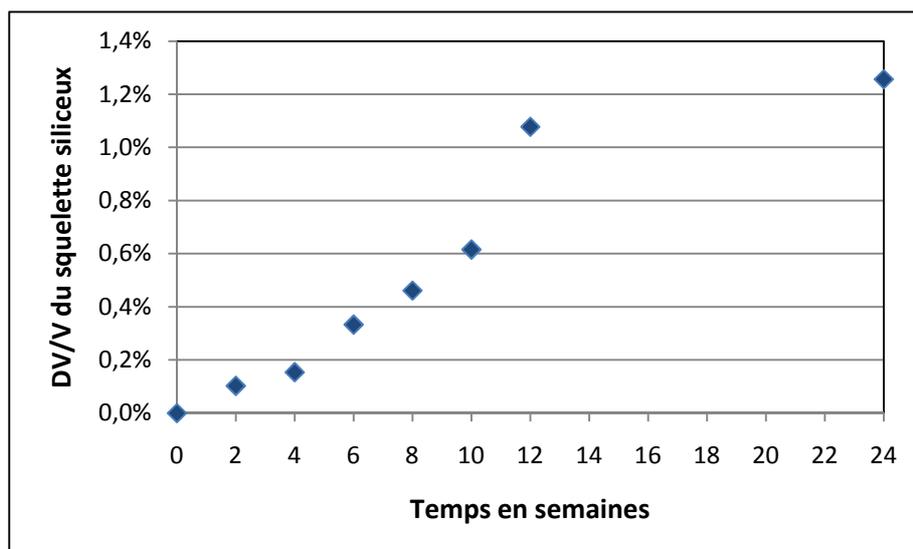


Figure 8 : Variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps de réaction

En considérant que l'avancement de la réaction est le rapport entre le nombre de moles de silice consommées et celui initial, il est obtenu le graphique suivant (Fig. 9) :

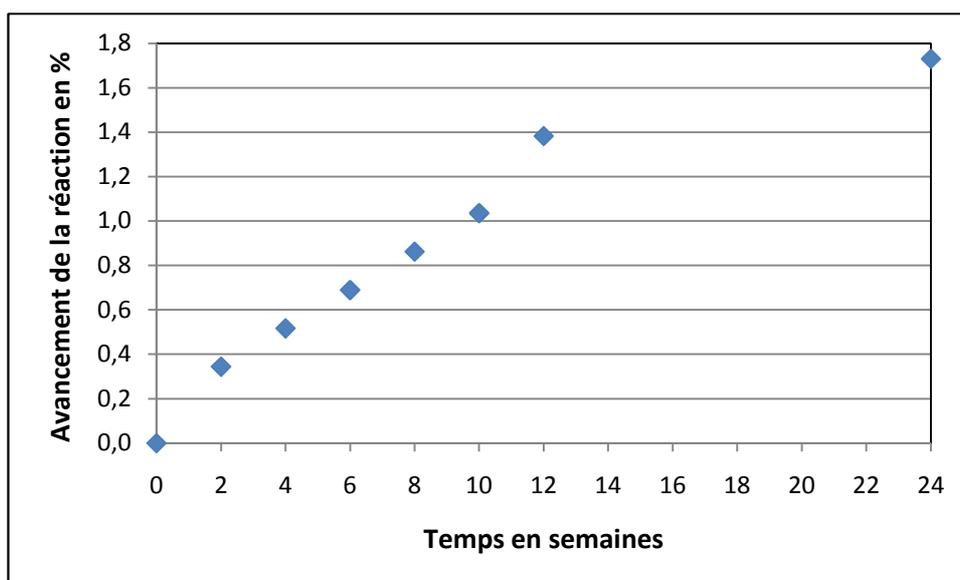


Figure 9 : Avancement de la réaction en fonction du temps en semaines

II.1.2.c. Les effets de la réaction alcali-silice sur les propriétés mécaniques

De nombreux auteurs se sont attachés à démontrer et mesurer les effets de la réaction alcali-silice sur les propriétés mécaniques du béton, tant sur des éprouvettes de laboratoire que sur des carottes extraites de structures. Là encore, les résultats sont divers et variés voire même contradictoires en partie à cause des différences de formulation, de matériaux utilisés et de la difficulté de mesurer des grandeurs mécaniques sur un béton endommagé. Il est donc difficile de généraliser et de décrire une évolution universelle des bétons atteints par la réaction. Toutefois, voici une petite analyse non exhaustive de ce que l'on peut trouver dans la littérature.

Pour ce qui est du module d'Young, la très grande majorité des auteurs s'accorde sur une chute rapide mais cette dernière est comprise entre 20 et 80% du module d'Young mesuré sur béton sain de même formulation ce qui représente une très grande dispersion. En effet, Dehaut [Dehaut, 2002] trouve une chute du module d'Young de l'ordre de 20% pour un essai de compression simple réalisé sur un béton réactif conservé à 60°C et 100% d'humidité relative. Cette chute correspond à celle trouvée par d'autres tels que Abe et al. [Abe, 1989], Fan et Hanson [Fan, 1998] ou encore Smaoui [Smaoui, 2003]. Inoue [Inoue, 1989] quant à lui observe une chute de 48% sur des éprouvettes cylindriques après 24 semaines de cure à 40°C et 100% d'humidité relative. Pleau et al. [Pleau, 1989] se rapprochent de cette tendance puisqu'ils constatent une chute de 60%. Des chutes plus importantes du module sont aussi mentionnées comme celle de 73% observée par Ohno [Ohno, 1989] sur des éprouvettes conservées sous les conditions climatiques du Japon ou encore celle de 80% mesurée par Swamy [Swamy, 1988]. Tous ces résultats extrêmement dispersés montrent la complexité de mesurer correctement et précisément le module d'Young d'un béton. Cela va donc ajouter une difficulté supplémentaire pour élaborer une modélisation numérique prédictive des effets mécaniques de la RAS.

En ce qui concerne l'évolution au cours de la réaction de la résistance à la compression et au fendage, les observations sont plus en contradiction. Certains n'observent pas de diminution de cette propriété même pour des expansions importantes [Larive, 1998, Monette, 2002, Gravel, 2000, Multon, 2003], d'autres mesurent une chute comprise entre 15 et 30% [Abe, 1989, Fan, 1998, Smaoui, 2003] et enfin certains trouvent même une augmentation de cette résistance.

II.1.3. Conclusion sur l'étude bibliographique de la physico-chimie de la RAS

La première partie de cet état de l'art a permis de faire le point sur les différentes connaissances concernant :

- les mécanismes réactionnels de l'alcali-réaction ;
- les différentes théories expliquant le gonflement et donc la dégradation du béton ;
- les paramètres influents sur la naissance, la cinétique et l'amplitude de la réaction ;
- les différents essais en laboratoire mis au point pour évaluer la réaction ;
- et enfin l'impact du gonflement sur la résistance du béton.

Au vue de cette première analyse, il semble évident que la réaction alcali-silice est une pathologie des bétons extrêmement complexe mettant en jeu un grand nombre de phénomènes chimiques et physiques, faisant intervenir de nombreuses espèces et surtout dont la caractérisation s'avère non triviale. Bien que certains points fassent l'objet d'un consensus au sein de la communauté scientifique s'intéressant à l'alcali-réaction, il a aussi été mis en évidence que d'autres phénomènes étaient toujours en discussion et divisaient les chercheurs.

Il a aussi été souligné que les essais expérimentaux en laboratoire étaient longs, fastidieux et grandement dépendant de la formulation de béton utilisée mais aussi des conditions de conservation des éprouvettes. C'est pourquoi de nombreux auteurs ont cherché à créer des modèles physiques destinés à permettre une modélisation numérique rendant compte des conséquences de la réaction.

II.2. Les modélisations de la réaction alcali-silice

Les principaux mécanismes de cette réaction ont été mis en évidence mais le nombre des phénomènes et des couplages mis en jeu rend les approches de la modélisation difficiles et diverses. On peut distinguer deux types d'approches de la réaction, une approche locale par

les phénomènes physico-chimiques mésoscopiques de la réaction alcali-silice, et une approche par les phénomènes structuraux au sens large.

Dans un premier temps, nous allons donc nous intéresser aux modèles dits mésoscopiques dans lesquels les mécanismes réactionnels sont décrits et qui prennent en compte les phénomènes de transport des différentes espèces chimiques et les cinétiques de réaction afin de reproduire la courbe de gonflement libre du matériau. Certains de ces modèles tentent ensuite d'évaluer les propriétés mécaniques du matériau.

Puis, nous étudierons les modèles macroscopiques dans lesquels les mécanismes réactionnels sont simplifiés, voire inexistants, et qui prennent en compte un gonflement global à l'échelle de la structure.

II.2.1. Les modèles mésoscopiques

II.2.1.a. Le modèle de Sellier

La modélisation de Sellier [Sellier, 1995] se décompose en deux parties :

- une modélisation des mécanismes de réaction ;
- une description des effets mécaniques induits par le gonflement du gel.

Ces deux parties utilisent des notions probabilistes.

Les hypothèses posées pour ce modèle sont :

- les granulats sont sphériques, homogènes et de même diamètre ;
- les ions Na^+ et K^+ ont le même effet c'est-à-dire qu'ils sont confondus dans ce modèle ;
- l'attaque des ions est supposée uniforme sur toute la surface des granulats.

Dans ce modèle, l'auteur ne s'intéresse qu'à un seul site réactif (un seul granulat réactif).

La diffusion des alcalins et des ions hydroxyles vers le granulat réactif est décrite par les lois de Fick (II. 4) :

$$\frac{\partial \bar{C}_X}{\partial t}(r,t) = -\text{div}[D_X \text{grad}(\bar{C}_X)] + S(X) \quad (\text{II. 4})$$

avec $\bar{C}_X(r,t)$ la concentration moyenne probable autour du granulat réactif en espèce X , D_X le coefficient de diffusion de l'espèce X et $S(X)$ un terme source qui représente une variation homogène de concentration en espèce X .

La silice se combine avec les alcalins pour former un gel qui peut s'imbiber et entraîner des gonflements. Ce gel se forme au voisinage du granulat réactif et peut ensuite migrer dans la porosité connectée de la pâte de ciment entourant le granulat. La pression générée favorise l'ouverture et la propagation des fissures en mode I. Les fissures ainsi créées constituent une nouvelle place pour le gel.

L'auteur a modélisé la distribution poreuse par une distribution statistique log-normale qu'il a calée d'après des valeurs expérimentales. Le volume de gel contenu dans la fissure est calculé en supposant un remplissage partiel de la fissure. L'expansion générée par la réaction alcali-silice ϵ_{RAS} est alors directement liée au volume des fissures créées (II. 5) :

$$\epsilon_{RAS} \approx \frac{V_f}{3V_e} \quad (\text{II. 5})$$

avec V_f le volume total des fissures créées et V_e le volume élémentaire de béton considéré.

Cette modélisation décrit l'ensemble des mécanismes réactionnels locaux par une cinétique locale de réaction dans le granulat réactif. Mais elle ne considère qu'une seule taille de granulats réactifs, elle ne peut donc a priori être utilisée pour la description du gonflement des mortiers ou de bétons pour lesquels les granulats réactifs sont présents suivant plusieurs classes granulaires.

II.2.1.b. Le modèle de Uomoto et Furusawa

Ce modèle proposé par Uomoto [Uomoto, 1992] puis par Furusawa [Furusawa, 1994] vise à prédire la cinétique et l'amplitude des gonflements engendrés par la réaction alcali-silice.

Les mécanismes réactionnels retenus par les auteurs de ce modèle sont :

- la diffusion des alcalins dans les granulats réactifs ;
- la réaction entre la silice réactive et les alcalins ;
- la formation des produits de la réaction autour des granulats.

Les hypothèses posées sont :

- les granulats sont sphériques et entièrement constitués de silice réactive ;
- les produits se forment dans une zone poreuse entourant le granulat ;
- la couche de gel entourant les granulats est fine devant le diamètre des granulats ;
- la couche de gel a une épaisseur uniforme ;
- la diffusion des espèces dans les granulats est l'étape limitante du processus.

Avec cette dernière hypothèse, la cinétique globale de la réaction est considérée comme la cinétique de diffusion.

La cinétique de la réaction alcali-silice est donc décrite par les auteurs de manière simplifiée comme suit (II. 6):

$$\frac{dx_i}{dt}(C,t) = k \frac{C}{x_i(C,t)} \quad (\text{II. 6})$$

avec x_i l'épaisseur de la couche des produits, k le coefficient de diffusion des ions hydroxyles dans le granulat et C la concentration en ions OH^- à l'interface granulat-matrice.

L'avancement de la réaction pour le granulat i , α_i , est définie comme étant le pourcentage volumique du granulat ayant été dissous (II. 7):

$$\alpha_i = 1 - \left(1 - \frac{x_i}{R_i}\right)^3 \quad (\text{II. 7})$$

avec R_i le rayon du granulat réactif i .

Le volume de produits formés autour du granulat i est (II. 8) :

$$P_i(t) = \alpha_i \beta_i \frac{M_a}{\rho_{\text{SiO}_2}} \quad (\text{II. 8})$$

avec M_a la masse totale de granulats réactifs dans le béton, ρ_{SiO_2} la masse molaire de la silice réactive ($= 60.08 \text{ g/m}^3$) et β_i la fraction volumique de granulats de rayon R_i .

Au fur et à mesure que la réaction dans le granulat réactif avance, la concentration en ions alcalins C diminue, ce qui est décrit par (II. 9) :

$$C(t) = \frac{1}{W_f} (C_{ini} - C_{surf} - P_t RS) \quad (\text{II. 9})$$

avec W_f la quantité d'eau libre dans le béton, C_{ini} la concentration initiale en alcalins par unité de volume et RS le rapport molaire alcalins/silice (paramètre de calage).

C_{surf} est la concentration en alcalins absorbée par tous les granulats réactifs par unité de volume de béton. Elle est calculée avec (II. 10) :

$$C_{surf} = 3C_{unit} V_a \sum_{i=1}^n \frac{\beta_i}{R_i} \quad (\text{II. 10})$$

avec V_a le volume total des granulats réactifs par unité volumique de béton, C_{unit} la concentration en ions alcalins consommés par les granulats réactifs par unité de surface extérieure (paramètre constant quelque soit la taille des granulats réactifs).

Le volume total de produits formés dans le béton est égal à la somme des volumes produits par chaque granulat réactif (II. 11) :

$$P_t = \frac{V_a \rho_a}{\rho_{SiO_2}} \sum_{i=1}^n \alpha_i \beta_i \quad (\text{II. 11})$$

avec ρ_a la masse volumique des granulats.

L'expansion générée par la réaction alcali-silice dans les différents granulats réactifs, $\varepsilon(t)$, est calculée comme suit (II. 12) :

$$\varepsilon(t) = B(P_t - P_{abs}) \quad (\text{II. 12})$$

avec B un paramètre de calage constant et P_{abs} le volume de produits nécessaire pour combler la porosité autour du granulat réactif.

Ce modèle prend en compte l'interaction entre les différents granulats réactifs sur la consommation en alcalins mais encore une fois il n'est appliqué que pour une seule classe granulaire. De plus, les hypothèses et les processus considérés sont assez simplifiés et cette modélisation comporte beaucoup de paramètres de calage ce qui réduit sa portée prédictive.

II.2.1.c. Le modèle de Bazant et Steffens

Cette modélisation [Bazant, 2000] est appliquée aux bétons contenant des granulats de verre broyé constitués de silice amorphe.

Les hypothèses retenues pour ce modèle sont :

- les granulats sont des particules sphériques entièrement réactives ;
- les auteurs se ramènent à l'étude d'un volume élémentaire représentatif (V.E.R.) sphérique dont les dimensions sont déterminées d'après la proportion de granulats dans le béton ;
- la dissolution de la silice réactive progresse de manière uniforme dans une direction radiale depuis la surface du granulat réactif ;
- les agrégats sont statistiquement distribués uniformément dans la matrice du béton ;
- deux molécules d'eau sont nécessaires pour dissoudre un atome de silice.

Les mécanismes réactionnels retenus sont :

- la diffusion des espèces réactives vers le granulat de verre ;
- la dissolution de la silice réactive et la réaction avec les ions ;
- la formation d'un gel sec autour du granulat ;
- l'imbibition du gel par l'eau et son expansion dans la matrice cimentaire ;
- l'apport d'eau vers le site de réaction par macro-diffusion.

Les auteurs considèrent aussi que la diffusion des espèces à travers la couche de gel est l'étape la plus lente de l'ensemble des processus de la réaction et que l'eau y joue un rôle fondamental. Ce mécanisme est donc modélisé de manière simplifiée par la diffusion de l'eau en régime permanent à travers la couche de gel formé (II. 13) :

$$\xi_w(x,t) = w_s \frac{1 - z(t)/x}{1 - 2z(t)/D} \quad (\text{II. 13})$$

avec ξ_w la concentration en eau dans la couche de produits formés, w_s la concentration en eau dans le béton autour du granulat réactif, $z(t)$ le rayon de la partie inaltérée du granulat et D le diamètre initial du granulat.

La concentration massique en gel formé dans le V.E.R. est alors (II. 14) :

$$\xi_g = \frac{8\rho_s}{\hat{s}^3} \left(\frac{D}{8} - z^3 \right) \frac{m_g}{m_s} \quad (\text{II. 14})$$

avec m_g la masse molaire du gel, m_s la masse molaire de la silice, ρ_s la densité massique de la silice réactive et \hat{s} le rayon du volume élémentaire représentatif.

Le gel formé est donc un produit solide en l'absence d'eau. Ce solide possède la capacité de s'imbiber d'eau pour former un gel fluide dont le volume augmente en fonction de la quantité d'eau qu'il absorbe. La pression générée par le gel limite la quantité d'eau qu'il absorbe. De la même façon, l'imbibition ne peut se produire que lorsque l'humidité relative dans les pores est supérieure à un certain seuil. Ces processus de gonflement du gel formé par la réaction alcali-silice sont décrits de manière simplifiée par (II. 15) :

$$\dot{w}_i = \frac{n(p)m(h)\xi_g - w_i}{\delta_c^2 / C_{w_i}} \quad (\text{II. 15})$$

avec w_i la masse d'eau imbibée par le gel, \dot{w}_i la vitesse d'imbibition de l'eau (décroît quand la pression dans le gel augmente), δ_c l'épaisseur de la zone poreuse entourant le granulat, C_{w_i} la diffusivité de l'eau dans le gel.

La fonction $m(h)$ représente l'influence de l'humidité relative dans les pores (Fig. 10). \dot{w}_i doit décroître avec la baisse relative d'humidité h dans les pores du béton près de la particule réactive. L'imbibition doit s'arrêter à une certaine humidité des pores tel que $h = 0.85$ ce qui représente un seuil de gonflement.

La fonction $n(p)$ représente l'influence de la pression sur l'imbibition du gel (Fig. 10). Cette fonction donne la masse spécifique d'eau qui est imbibée par le gel à une certaine pression quand l'équilibre thermodynamique est atteint.

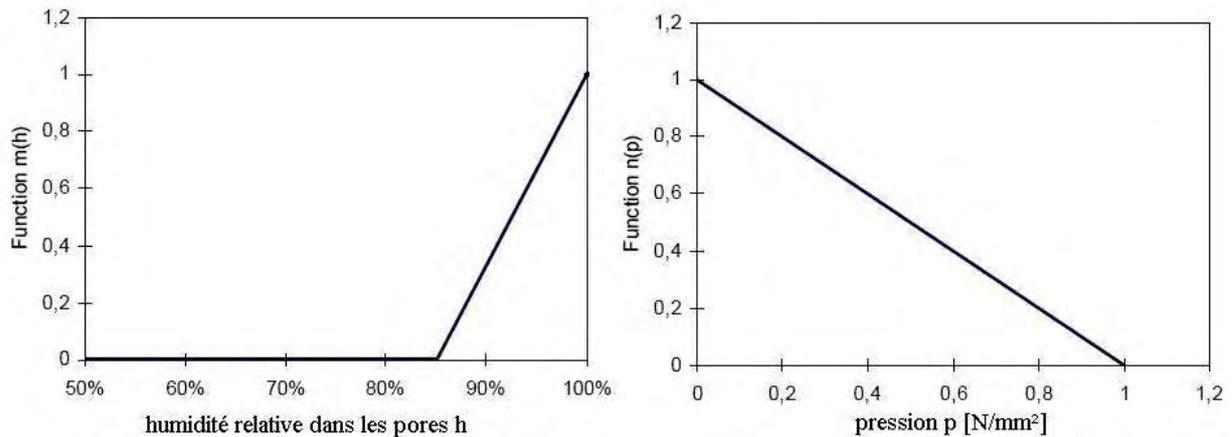


Figure 10 : Influence de l'humidité relative dans les pores et de la pression sur l'imbibition du gel basique [Bazant, 2000]

Le processus de la réaction alcali-silice dépendant fortement de la présence et de la quantité d'eau il est aussi nécessaire de modéliser la diffusion macroscopique de l'eau à travers le béton. Ce transport à travers le béton vers le granulat réactif est décrit grâce aux lois de Fick par (II. 16) :

$$\dot{h} = k(h) \operatorname{div}[-a(h) \operatorname{grad}(h)] - \dot{h}_s(t_e) - k(h)(\dot{w}_g + \dot{w}_i) \quad (\text{II. 16})$$

avec $k(h)$ l'inverse de la pente de la courbe de sorption du matériau étudié, $a(h)$ la perméabilité du béton, $h_s(t_e)$ une fonction du temps donnée, w_g la consommation d'eau correspondant à la formation du gel et w_i la consommation d'eau correspondant à l'imbibition du gel.

Ce modèle prend en compte le diamètre des granulats et permet de montrer son influence sur la cinétique de la réaction et du gonflement. En revanche, il ne considère qu'une seule taille de granulats réactifs et de nombreuses hypothèses simplificatrices sont posées bien qu'elles soient difficiles à vérifier (comme l'influence de la pression et de l'humidité relative sur l'imbibition).

II.2.1.d. Le modèle de Xi

Ce modèle [Xi, 1999] est basé sur une description hétérogène du béton : matrice cimentaire et granulats. Cette approche s'applique sur une sphère de pâte de ciment entourant un granulat sphérique placé en son centre.

Les hypothèses sont :

- les granulats sont sphériques, isotropes et homogènes ;
- la pâte cimentaire est homogène et isotrope.

Les mécanismes réactionnels retenus par l'auteur de ce modèle sont :

- la diffusion des alcalins dans les granulats réactifs ;
- la réaction entre la silice réactive et les alcalins ;
- la formation des produits de la réaction autour des granulats ;
- la perméation du gel dans la porosité connectée sous l'effet de la pression.

L'auteur décrit la diffusion des ions dans un granulat réactif de rayon R_i par la seconde loi de Fick (II. 17. a). Cette équation est résolue de manière analytique en supposant que la concentration est nulle au centre du granulat et qu'elle est constante et égale à C_0 à l'interface matrice/granulat (II. 17. b) :

$$\frac{\partial C_X(r,t)}{\partial t} = -div[-D_X grad C_X] \quad (\text{II. 17. a})$$

$$C_X(r,t) = C_0 + 2 \frac{R_i C_0}{\pi r} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n} \exp\left(-\frac{D_X n^2 \pi^2 t}{R_i^2}\right) \sin\left(n\pi \frac{r}{R_i}\right) \quad (\text{II. 17. b})$$

avec C_X la concentration en espèce X , C_0 une constante représentant la concentration en ions alcalins à l'interface matrice/granulat, D_X le coefficient de l'équation de diffusion et n le nombre de granulats réactifs.

L'auteur écrit le volume final de produits formés V_{gel} sous la forme suivante (II. 18) :

$$V_{gel} = \eta V_R \quad (\text{II. 18})$$

où V_R est le volume réagissant avec les ions hydroxydes et $\eta = \eta(t) > 1$ un coefficient de l'augmentation volumique du produit final par rapport à V_R .

La réaction alcali-silice se faisant dans le granulat, le gel de produits se forme puis se déplace dans le volume poreux entourant le granulat sous l'effet de la pression qu'il génère.

L'auteur suppose une relation linéaire entre la pression et la concentration en gel décrite par une loi de Darcy (II. 19) :

$$\frac{\partial C_{gel}}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\frac{K_{gel}}{\eta_{gel}} \nabla P \right] \quad (\text{II. 19})$$

avec η_{gel} un paramètre qui dénote la viscosité du produit, C_{gel} la concentration en gel dans la zone poreuse, P la pression du gel et K_{gel} un paramètre qui dénote la perméabilité de la zone poreuse vis-à-vis du produit fluide.

La solution analytique de cette équation est (II. 20) :

$$C_{gel}(r,t) = \frac{2\beta}{r(R_{if} - R_i)} \sum_{n=1}^{+\infty} \exp\left(-\frac{K_{gel} n^2 \pi^2 t}{\eta_{gel} (R_{if} - R_i)^2}\right) \sin\left(n\pi \frac{r - R_i}{R_{if} - R_i}\right) \Omega(n, p) \quad (\text{II. 20. a})$$

$$\Omega(n, p) = -n\pi \frac{K_{gel} R_i}{\eta_{gel} (R_i - R_{if})} \int_0^t P(\lambda) \exp\left[\frac{K_{gel} n^2 \pi^2 \lambda}{\eta_{gel} (R_i - R_{if})^2}\right] d\lambda \quad (\text{II. 20. b})$$

Le volume de gel contenu dans la zone poreuse entourant tous les granulats de rayon équivalent R_i est alors (II. 21) :

$$V_{pg}^i = V_a \phi_i \int_{R_i}^{R_{if}} 4\pi r^2 C_{gel}(r,t) dr \quad (\text{II. 21})$$

avec V_a la fraction volumique de granulats réactifs dans le béton et ϕ_i le pourcentage de granulats réactifs de taille i par rapport au nombre total de granulats réactifs.

La contribution des granulats d'une certaine taille à l'expansion asymptotique du matériau, ε_i , s'écrit par la différence entre le volume total V_{gel} de produits et la partie absorbée par la zone poreuse V_{pg} (II. 22) :

$$\varepsilon_i = \frac{V_{gel}^i - V_{pg}^i}{\phi_i V_a} \quad (\text{II. 22})$$

L'expansion totale du matériau $\varepsilon(t)$ est calculée à partir des expansions $\varepsilon_i(t)$ générées par les différentes classes granulaires par l'intermédiaire d'une analogie thermique. En effet, l'auteur assimile l'augmentation de volume des granulats à une dilatation thermique qu'il décrit grâce au modèle composite qui donne l'expansion du béton en fonction de l'expansion et des caractéristiques mécaniques des granulats et de la matrice cimentaire. Pour cela, il suppose que le matériau est élastique. L'expansion totale du béton s'écrit alors (II. 23) :

$$\varepsilon(t) = \frac{K_a V_a (3K_m + 4G_m)}{K_m (3K_a + 4G_m) - 4V_a G_m (K_m - K_a)} \sum_{i=1}^n \phi_i \varepsilon_i(t) \quad (\text{II. 23})$$

où K_a , K_m et G_m sont respectivement le module élastique du granulat, le module élastique de la matrice et le module de cisaillement de la matrice.

Ce modèle a été écrit de manière à prendre en compte la présence de plusieurs granulats réactifs dans le béton mais il n'y a pas d'interactions entre eux sur la consommation des ions car la concentration à l'interface granulat/matrice reste constante au cours du temps, ce qui devient de plus en plus faux au cours du temps.

II.2.1.e. Le modèle de Poyet

Ce modèle [Poyet, 2003] est une évolution de la version développée par Sellier. Il a pour but la prédiction de la cinétique et de l'amplitude du gonflement engendré par la réaction alcali-silice dans le béton.

Les ions présents dans la matrice cimentaire comme les alcalins, les hydroxydes et les ions calciums pénètrent dans les granulats réactifs par diffusion. Le réseau siliceux est alors attaqué par les ions hydroxydes. Les charges négatives engendrées sont équilibrées par les alcalins et les ions calciums pour former des produits silico-alcalins ou silico-calciques. Ces produits se forment en dehors du granulat, dans l'ITZ. Lorsque le volume des produits formés devient plus important que le volume poreux entourant les granulats, la matrice cimentaire est alors mise sous pression et le béton gonfle [Sellier, 1999]. La cause du gonflement retenue par S. Poyet est donc la précipitation des produits de la réaction. A ces différents mécanismes réactionnels locaux s'ajoutent les phénomènes de diffusion des ions dans la matrice vers les sites réactifs et la dissolution de la portlandite pour maintenir le niveau d'ions calciums en solution.

Dans cette modélisation, l'étape limitante en temps est la diffusion des ions tandis que tous les autres mécanismes sont considérés comme instantanés.

Les granulats sont considérés comme sphériques, homogènes et isotropes. Ils sont uniformément répartis dans le béton. La réaction est elle aussi considérée comme isotrope et on suppose qu'elle se produit de façon uniforme sur toute la surface des granulats réactifs (Fig. 11).

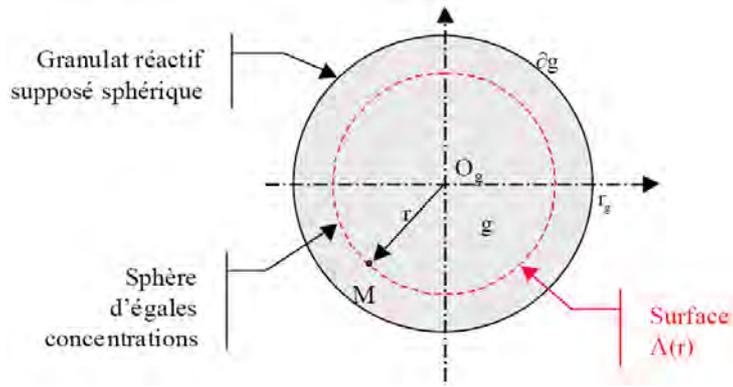


Figure 11 : Représentation d'un granulat réactif supposé sphérique

On a alors une symétrie sphérique à la fois à l'intérieur des granules mais aussi en dehors. Les zones d'égales concentrations sont donc des sphères de rayon r et de centre O_g . On passe alors d'une concentration locale réelle X à une concentration homogénéisée $\bar{X}_g(r)$ qui a pour expression (II. 24) :

$$\bar{X}_g(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \int_{A(r)} X(M) dA \quad (\text{II. 24})$$

L'équation de conservation de la masse dans le granulat s'écrit (II. 25) :

$$\int_{A(r)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho S_r X) dV = - \int_{A(r)} \text{div}[-D_g^X \text{grad}(X)] dV + \int_{A(r)} S(X) dV \quad (\text{II. 25. a})$$

ou encore:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}_g \bar{S}_r \bar{X}_g) = -\text{div}[-\bar{D}_g^X \text{grad}(\bar{X}_g)] + \bar{S}_g(X) \quad (\text{II. 25. b})$$

avec \bar{D}_g^X le coefficient de diffusion de l'espèce X dans le granulat et \bar{S}_g un terme source.

Définition d'un volume élémentaire représentatif

Le volume élémentaire représentatif (V.E.R.) est sphérique et contient différentes classes granulaires réactives. Le V.E.R. peut être représenté sous la forme suivante (Fig. 12) en focalisant sa représentation sur une classe granulaire donnée. Sur cette figure, un exemple est donné pour trois classes granulaires.

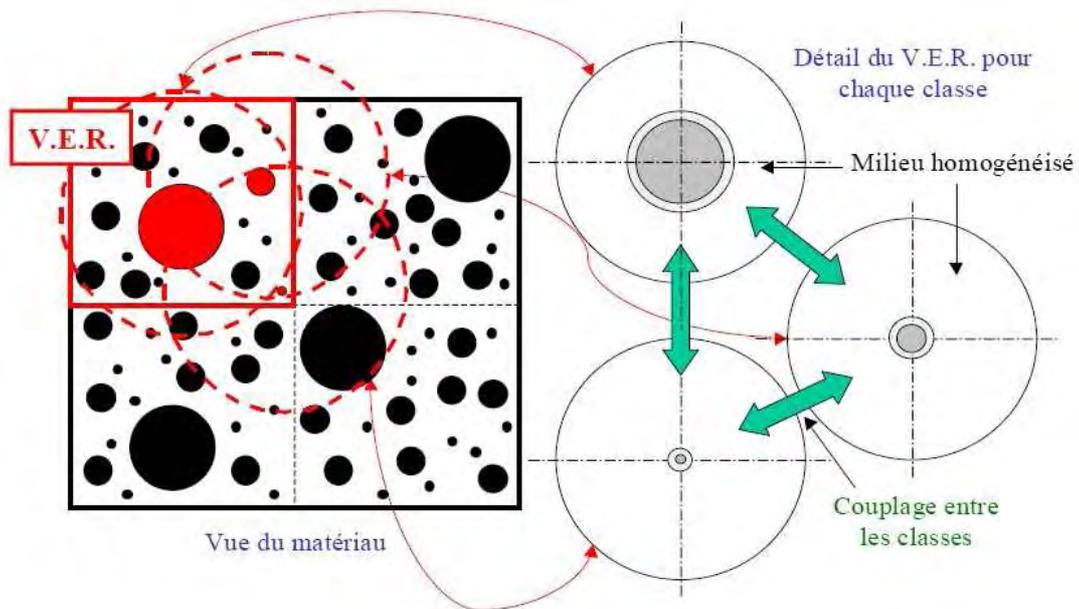


Figure 12 : Exemple de V.E.R. pour trois granulats, visualisation des trois focalisations

Le rayon du V.E.R. est défini comme tel (II. 26) :

$$R_{VER} = \max(R_{VER}^i) = \max\left(\frac{R_i}{\sqrt[3]{\phi_i \xi_g}}\right) \quad (\text{II. 26})$$

avec R_{VER}^i le rayon du volume élémentaire représentatif pour la classe granulaire i , ϕ_i la fraction volumique de la classe i , ξ_g la concentration volumique de granulats dans le béton et R_i le rayon moyen des granulats de classe i .

Si on se focalise sur une seule classe granulaire i alors le V.E.R. sphérique sera centré sur un granulat de la classe i et le milieu homogénéisé autour sera composé de la pâte de ciment durcie et de tous les autres granulats réactifs (ceux de la classe i et ceux des autres classes). Chacune des focalisations du V.E.R. est maillée par des éléments sphériques concentriques. Cela peut donc se ramener à une approche numérique radiale quasi 1D avec une discrétisation sur chaque rayon du volume élémentaire représentatif de la classe i (Fig. 13).



Figure 13 : Représentation de la discrétisation du modèle de Poyet

Pour chaque espèce ionique considérée, l'équation globale de diffusion (II. 25. b) est appliquée sur les volumes élémentaires représentatifs de chaque classe granulaire i . Cette équation est posée pour le domaine correspondant au granulat avec des conditions limites en $r=0$ et en $r=R_i$, c'est-à-dire au centre et au bord de l'agrégat, et pour le domaine correspondant à la pâte de mortier avec des conditions limites en $r=R_i$ et en $r=R_{VER}^i$, c'est-à-dire au bord de l'agrégat et au bord du volume élémentaire représentatif de la classe i .

Le nombre de granulats réactifs sphériques N_i^g pour chaque classe i dans le béton est donné par (II. 27) :

$$N_i^g = \frac{3\xi_g \phi_i}{4\pi R_i^3} \quad (\text{II. 27})$$

Le nombre de granulats réactifs de chaque classe granulaire dans le V.E.R. est alors (II. 28) :

$$n_i^g = \frac{N_i^g}{\min(N_i^g)} \quad (\text{II. 28})$$

Détermination du terme source dans les granulats réactifs

A l'intérieur d'un granulat réactif de la classe i , le terme source $\bar{S}_i(X)$ correspond à la diminution de concentration engendrée par la consommation des ions X par la réaction alcali-silice. Tous les ions qui pénètrent dans le granulat sont supposés réagir instantanément avec la silice réactive donc tant qu'il reste de la silice le terme de source est directement relié au flux dans le granulat et s'exprime ainsi (II. 29) :

$$\bar{S}_i(X) = -\text{div} \left[\bar{D}_i^g(X) \frac{\partial X_i}{\partial r}(r) \right] \quad (\text{II. 29})$$

avec $\bar{D}_i^g(X)$ le coefficient de diffusion des ions X dans le granulat i .

Détermination du terme source dans la matrice cimentaire

En dehors du granulat réactif, le terme source correspond à la baisse de concentration engendrée par la consommation des ions X par tous les autres granulats réactifs présents dans le volume élémentaire représentatif. En effet, les ions consommés par les autres granulats ne sont plus disponibles pour diffuser et réagir avec le granulat considéré i .

Le terme de source s'écrit (II. 30) :

$$\bar{S}_i(X) = -\frac{1}{V_{VER} - V_i^g} \left[\lambda_i^i(r) C_i^i(X) + \sum_{j \neq i} \lambda_i^j C_i^j(X) \right] \quad (\text{II. 30})$$

avec $\bar{C}_i(X)$ la consommation totale en ions X de tous les granulats réactifs autres que celui considéré et $\lambda_i^j(r)$ une fonction de pondération qui tient compte de la probabilité de présence d'un granulat de la classe j à la distance r du centre du granulat de la classe i .

Diffusion des alcalins dans les granulats réactifs

Le transport des alcalins dans les granulats réactifs est défini par (II. 31) :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{p}_i \bar{S}_i \bar{N} a_i) = -\text{div} \left[-\bar{D}_i^g(Na) \text{grad}(\bar{N} a_i) \right] + \bar{S}_i^{reac}(Na) \quad (\text{II. 31})$$

Dans le granulat, tant qu'il reste de la silice, le terme source correspond à la consommation des alcalins par la réaction (II. 32) :

$$\bar{S}_i^{reac}(Na) = -div \left[\bar{D}_i^g(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(r) \right] \quad (\text{II. 32})$$

avec pour conditions limites (II. 33) :

$$\frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(r=0) = 0 \quad (\text{II. 33. a})$$

$$\bar{D}_i^g(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(R_i^-) = \bar{D}_i^m(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(R_i^+) \quad (\text{II. 33. b})$$

avec $\bar{D}_i^m(Na)$ le coefficient de diffusion des alcalins dans la matrice autour du granulat i .

Diffusion des alcalins dans la pâte de mortier

L'équation de transport s'écrit alors (II. 34) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{p}_i \bar{S}_i \bar{N}a_i) = -div \left[-\bar{D}_i^m(Na) grad(\bar{N}a_i) \right] + \bar{S}_i^{coup}(Na) \quad (\text{II. 34})$$

$$\text{avec } \bar{S}_i^{coup}(Na) = -\frac{4\pi R_i^2 (n_i^g - 1)}{V_{VER} - V_i^g} \bar{D}_i^m(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(R_i) - \frac{4\pi}{V_{VER} - V_i^g} \sum_{j \neq i} n_j^g R_j^2 \frac{\partial \bar{N}a_j}{\partial r}(R_j)$$

Les conditions limites sont (II. 35) :

$$\frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(r = R_{VER}) = 0 \quad (\text{II. 35. a})$$

$$\bar{D}_i^g(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(R_i^-) = \bar{D}_i^m(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(R_i^+) \quad (\text{II. 35. b})$$

Il y a donc deux systèmes d'équations différentielles linéaires par rapport aux champs de concentration en alcalins à résoudre. Le premier pour la pâte de mortier et le second pour les granulats réactifs. Ces deux systèmes sont constitués de n_{cl} équations.

1^{er} système correspondant à la pâte de mortier (II. 36) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{p}_1 \bar{S} r_1 \bar{N} a_1) = -div[-\bar{D}_1^m (Na) grad(\bar{N} a_1)] + \bar{S}_1^{coup} (Na) \\ \frac{\partial}{\partial t}(\bar{p}_i \bar{S} r_i \bar{N} a_i) = -div[-\bar{D}_i^m (Na) grad(\bar{N} a_i)] + \bar{S}_i^{coup} (Na) \\ \frac{\partial}{\partial t}(\bar{p}_{n_{cl}} \bar{S} r_{n_{cl}} \bar{N} a_{n_{cl}}) = -div[-\bar{D}_{n_{cl}}^m (Na) grad(\bar{N} a_{n_{cl}})] + \bar{S}_{n_{cl}}^{coup} (Na) \end{array} \right. \quad (II. 36)$$

Ce système est composé de n_{cl} équations différentielles linéaires couplées entre elles par le terme source de couplage inter-granulaire.

2^{ème} système correspondant aux granulats réactifs (II. 37) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{p}_1 \bar{S} r_1 \bar{N} a_1) = -div[-\bar{D}_1^g (Na) grad(\bar{N} a_1)] + \bar{S}_1^{reac} (Na) \\ \frac{\partial}{\partial t}(\bar{p}_i \bar{S} r_i \bar{N} a_i) = -div[-\bar{D}_i^g (Na) grad(\bar{N} a_i)] + \bar{S}_i^{reac} (Na) \\ \frac{\partial}{\partial t}(\bar{p}_{n_{cl}} \bar{S} r_{n_{cl}} \bar{N} a_{n_{cl}}) = -div[-\bar{D}_{n_{cl}}^g (Na) grad(\bar{N} a_{n_{cl}})] + \bar{S}_{n_{cl}}^{reac} (Na) \end{array} \right. \quad (II. 37)$$

Ce système est composé de n_{cl} équations différentielles linéaires découplées. Ces deux systèmes sont couplés entre eux et doivent donc être résolus simultanément.

Diffusion des ions calciums en solution dans les granulats réactifs

C'est la même chose que pour les ions alcalins (II. 38) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{p}_i \bar{S} r_i \bar{C} a_i) = -div[-\bar{D}_i^g (Ca) grad(\bar{C} a_i)] + \bar{S}_i^{reac} (Ca) \quad (II. 38. a)$$

$$\text{avec} \quad \bar{S}_i^{reac} (Ca) = -div\left[\bar{D}_i^g (Ca) \frac{\partial \bar{C} a_i}{\partial r}(r)\right] \quad (II. 38. b)$$

et pour conditions limites (II. 39) :

$$\frac{\partial \bar{C} a_i}{\partial r}(r=0) = 0 \quad (II. 39. a)$$

$$\bar{D}_i^g (Ca) \frac{\partial \bar{C} a_i}{\partial r}(R_i^-) = \bar{D}_i^m (Ca) \frac{\partial \bar{C} a_i}{\partial r}(R_i^+) \quad (II. 39. b)$$

Diffusion des ions calciums en solution dans la pâte de mortier

Dans le mortier, il est supposé que la portlandite est en équilibre local instantané avec la solution interstitielle.

L'auteur montre alors qu'il est impossible de gérer le calcium en solution indépendamment des alcalins en solution tant qu'il reste de la portlandite. Pour simplifier le problème, il suppose que la portlandite est toujours en excès en tout point de la pâte de ciment. Cette hypothèse est tout à fait vérifiée à court terme mais devient de plus en plus fautive au cours du temps.

La relation entre les ions calciums et les alcalins est alors (II. 40) :

$$\frac{\partial \bar{C}a_i}{\partial t} = \alpha(\bar{N}a_i) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial t} \quad (\text{II. 40})$$

Petit résumé

Dans un granulat quelconque i , il faut résoudre (II. 41):

$$\begin{cases} \forall i \in \{1, \dots, n_{cl}\} \\ \forall r \in [R_i, R_{VER}] \end{cases} \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{p}_i \bar{S}r_i \bar{N}a_i) = -\text{div}[-D_i^g(Na) \text{grad}(\bar{N}a_i)] + \bar{S}_i^{reac}(Na) \\ \frac{\partial}{\partial t} (\bar{p}_i \bar{S}r_i \bar{C}a_i) = -\text{div}[-D_i^g(Ca) \text{grad}(\bar{C}a_i)] + \bar{S}_i^{reac}(Ca) \end{cases} \quad (\text{II. 41. a})$$

$$\text{avec} \quad \begin{cases} \bar{S}_i^{reac}(Na) = \text{div} \left[-\bar{D}_i^g(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(r) \right] \\ \bar{S}_i^{reac}(Ca) = \text{div} \left[-\bar{D}_i^g(Ca) \frac{\partial \bar{C}a_i}{\partial r}(r) \right] \end{cases} \quad (\text{II. 41. b})$$

Les conditions limites sont (II. 42) :

$$\frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(r=0) = \frac{\partial \bar{C}a_i}{\partial r}(r=0) = 0 \quad (\text{II. 42. a})$$

$$\bar{D}_i^g(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(R_i^-) = \bar{D}_i^m(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(R_i^+) \quad (\text{II. 42. b})$$

$$\bar{D}_i^g(Ca) \frac{\partial \bar{C}a_i}{\partial r}(R_i^-) = \bar{D}_i^m(Ca) \frac{\partial \bar{C}a_i}{\partial r}(R_i^+) \quad (\text{II. 42. c})$$

Dans la pâte de mortier, il faut résoudre (II. 43) :

$$\begin{cases} \forall i \in \{1, \dots, n_{cl}\} \\ \forall r \in [R_i, R_{VER}] \end{cases} \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{p}_i \bar{S}r_i \bar{N}a_i) = -\text{div}[-\bar{D}_i^m(Na) \text{grad}(\bar{N}a_i)] + \bar{S}_i^{coup}(Na) \\ \frac{\partial \bar{C}a_i}{\partial t} = \alpha(\bar{N}a_i) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial t} \end{cases} \quad (\text{II. 43. a})$$

avec

$$\bar{S}_i^{coup}(Na) = -\frac{4\pi R_i^2 (n_i^g - 1)}{V_{VER} - V_i^g} \bar{D}_i^m(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(R_i) - \frac{4\pi}{V_{VER} - V_i^g} \sum_{j \neq i} n_j^g R_j^2 \frac{\partial \bar{N}a_j}{\partial r}(R_j) \quad (\text{II. 43. b})$$

Les conditions limites sont (II. 44) :

$$\frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(r = R_{VER}) = 0 \quad (\text{II. 44. a})$$

$$\bar{D}_i^g(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(R_i^-) = \bar{D}_i^m(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(R_i^+) \quad (\text{II. 44. b})$$

Calcul du gonflement

Détermination des quantités de produits formés par la réaction

Les hypothèses posées pour calculer les quantités sont :

- la réaction est instantanée, c'est-à-dire que tous les ions qui pénètrent dans le granulat réactif sont consommés dès qu'ils rencontrent la silice réactive ;
- les ions alcalins et calciums réagissent séparément pour former des produits différents ;
- il faut deux moles d'alcalins pour couper les liaisons du réseau siliceux et libérer une mole de silice réactive pour former une mole de gel silico-alcalin ;
- il faut une mole d'ions calciums pour former une mole de gel silico-calcique.

Pour les granulats de chaque classe, l'évolution du nombre de moles de produits formés en fonction du temps est donnée par (II. 45) :

$$\forall i \in \{1, \dots, n_{cl}\} \begin{cases} N_i^{Na}(t) = \frac{1}{2} n_i^g \int_0^t \bar{\Phi}_i^{Na}(\tau) d\tau \\ N_i^{Ca}(t) = n_i^g \int_0^t \bar{\Phi}_i^{Ca}(\tau) d\tau \end{cases} \quad (\text{II. 45})$$

avec N_i le nombre de moles de produits formés par chaque classe de granulat, n_i^g le nombre de granulats réactifs de chaque classe granulaire, $\bar{\Phi}_i$ le flux d'espèce entrant dans les granulats de chaque classe présents dans le V.E.R. Ces flux sont connus par la résolution de (II. 46) :

$$\forall i \in \{1, \dots, n_{cl}\} \begin{cases} \bar{\Phi}_i^{Na}(t) = -4\pi R_i^2 \bar{D}_i^g(Na) \frac{\partial \bar{N}a_i}{\partial r}(r = R_i) \\ \bar{\Phi}_i^{Ca}(t) = -4\pi R_i^2 \bar{D}_i^g(Ca) \frac{\partial \bar{C}a_i}{\partial r}(r = R_i) \end{cases} \quad (\text{II. 46})$$

Le volume des produits formés pour chaque classe granulaire est calculé à partir du volume molaire. Ce volume molaire du gel a été déterminé expérimentalement par Lombardi et al. [Lombardi, 2000] et il est de $V_{mol}^{gel} = 21.5 \text{ cm}^3 / \text{mol}$. On a alors (II. 47) :

$$\forall i \in \{1, \dots, n_{cl}\} \begin{cases} V_i^{Na}(t) = N_i^{Na}(t) V_{mol}^{gel} \\ V_i^{Ca}(t) = N_i^{Ca}(t) V_{mol}^{gel} \end{cases} \quad (\text{II. 47})$$

Le volume total de produits formés par les granulats de la classe i est par conséquent (II. 48) :

$$V_i^g(t) = V_i^{Na}(t) + V_i^{Ca}(t) \quad (\text{II. 48})$$

Détermination du gonflement induit par la réaction

Selon les mécanismes réactionnels retenus par l'auteur, le gel se forme dans la zone poreuse entourant le granulat et lorsque le volume du gel devient supérieur au volume poreux disponible alors il y a une mise en pression de la matrice cimentaire définie par (II. 49) :

$$P_i^g(t) = K_i^g (1 - D) \langle V_i^g - V_i^p \rangle^+ \quad (\text{II. 49})$$

avec P_i^g la pression générée par le gel sur la matrice, K_i^g le coefficient de compressibilité des produits formés, D l'endommagement mécanique du matériau composant le V.E.R., V_i^g le volume de précipités formés par les granulats de la classe i et V_i^p le volume poreux accessible pour le gel au voisinage des granulats de la classe i .

La fonction $F(X) = \langle X \rangle^+$ donne la partie positive de X .

Ce modèle très complet permet de reproduire les tendances expérimentales observées de gonflement mais les sous estime. Cela pourrait être dû au fait que l'auteur considère une consommation totale des alcalins ou encore à la stœchiométrie des produits formés.

Les modèles mésoscopiques se ramènent tous à l'étude d'un V.E.R. au moyen d'hypothèses adéquates (granulats sphériques, homogénéité et isotropie des matériaux et de la réaction, répartition statistiquement homogène des granulats). Les mécanismes réactionnels décrits dans ces modélisations sont très similaires. Toutes permettent de prendre en compte l'influence du diamètre des granulats réactifs. En revanche, seulement trois modèles sont écrits de manière à tenir compte de la présence simultanée de granulats réactifs de tailles différentes dans le V.E.R. (celui de Uomoto et Furusawa, celui de Xi et celui de Poyet). Mais aucun ne le fait de manière satisfaisante. Xi considère que la concentration à l'interface granulat/pâte est constante au cours du temps. Cette hypothèse est valable dans le cas d'un matériau dilué mais elle devient d'autant plus fautive que la proportion d'agrégats réactifs augmente. Le modèle de Uomoto et Furusawa prend en compte la baisse de concentration engendrée par la consommation simultanée de plusieurs granulats réactifs. Malheureusement, cette baisse est obtenue grâce à un paramètre de calage C_{unit} . Poyet quant à lui prend en compte cette baisse de concentration par l'intermédiaire d'une fonction de pondération. Le modèle de Poyet apparaît comme le plus complet de tous, notamment car c'est le seul qui a été appliqué pour simuler le gonflement d'un matériau contenant différentes classes granulaires.

II.2.2. Les modèles macroscopiques

II.2.2.a. Le modèle de Nielsen

Ce modèle [Nielsen, 1993] propose de calculer les déformations et les contraintes induites par le gonflement d'un granulat réactif sphérique placé au centre d'un volume élémentaire représentatif. Le gonflement est dû à la pénétration d'ions et d'eau dans le granulat, cela génère des fissures dans le mortier et l'expansion du béton. Les fissures sont supposées être radiales. La cinétique de gonflement est la donnée d'entrée du modèle. L'expansion est directement liée à l'humidité relative dans les pores par l'intermédiaire d'une loi empirique basée sur les observations de Nilsson et al. [Nilsson, 1983] (Fig. 14). Cette dernière est déterminée par un calcul hydrique.

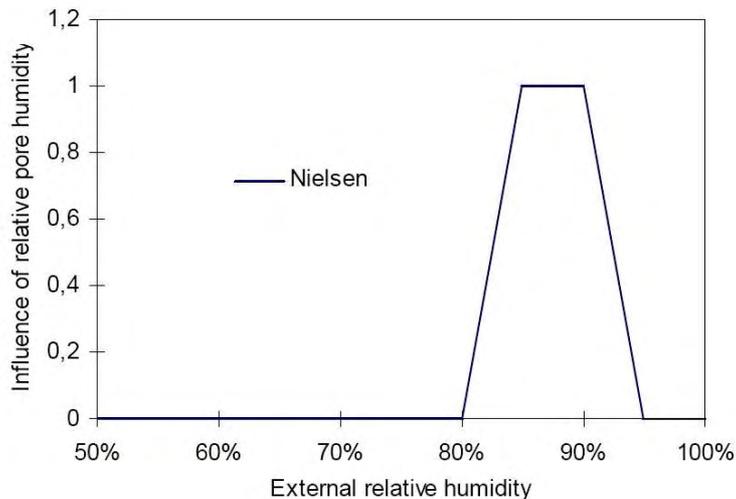


Figure 14 : Influence de l'humidité relative sur le gonflement [Nielsen, 1993]

Les contraintes et les déformations générées par le gonflement interne et l'extension de la zone fissurée sont calculées au moyen d'un modèle géométrique. L'influence du chargement extérieur est prise en compte.

Ce modèle ne prédit pas le gonflement interne généré par la réaction, mais la conséquence macroscopique de ce gonflement interne. Ce dernier est une entrée du modèle et pas un résultat. Le gonflement est directement lié à l'humidité relative dans les pores. Le calcul des contraintes et des déformations est donc lié à un calcul hydrique. Le modèle permet de mettre en évidence la grande importance des transferts hydriques sur le gonflement et les contraintes engendrées par la réaction mais il ne prend en compte qu'un seul granulat réactif.

II.2.2.b. Le modèle de Capra

Le modèle proposé par Capra et Bournazel [Capra, 1996]-[Capra, 1998] permet de calculer la déformation engendrée par la réaction alcali-silice, ε^r , en tout point d'une structure (II. 50) :

$$\varepsilon^r(M, t) = \varepsilon^{100\%}(t) f(hr) g(A, T) h(\sigma) \quad (\text{II. 50})$$

Le terme $\varepsilon^{100\%}$ représente l'évolution du gonflement libre pour le matériau saturé qui peut être déterminée expérimentalement. Les fonctions f , g et h prennent en compte respectivement

l'influence de l'humidité relative dans les pores, de la température et de la quantité d'alcalins consommés (ou avancement de la réaction) et de la contrainte de compression appliquée au point considéré (Fig. 15).

La fonction $f(hr)$ a été calée par l'auteur d'après les résultats tirés de la littérature [Poole, 1992] (II. 51) :

$$f(hr) = hr^8 \quad (\text{II. 51. a})$$

$$h(\sigma) = \begin{cases} 1 & \text{si } \sigma < \sigma_1 \\ K \log(\sigma / \sigma_0) & \text{si } \sigma > \sigma_1 \end{cases} \quad (\text{II. 51. b})$$

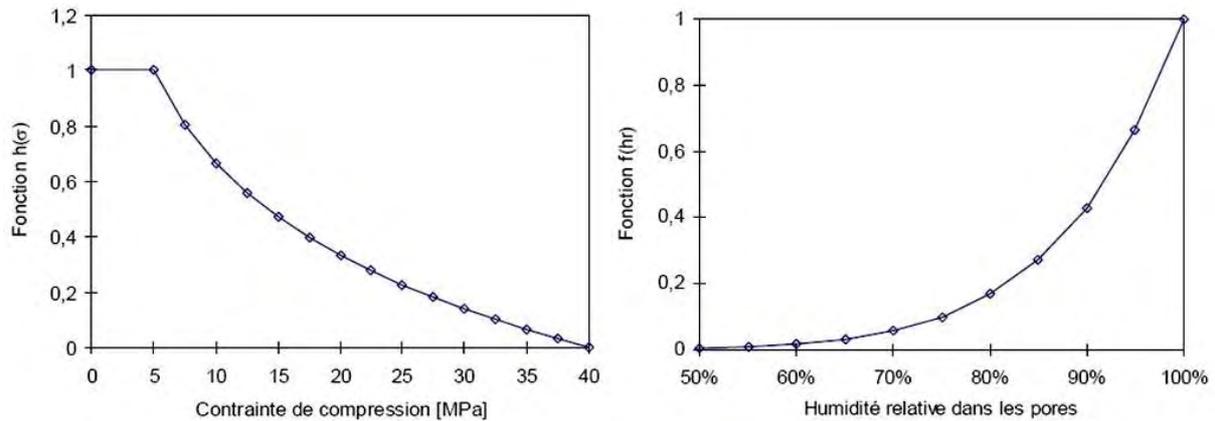


Figure 15 : Evolution des fonctions h à gauche (avec $\sigma_1=5$ MPa et $\sigma_0=40$ MPa) et f à droite

La cinétique de réaction est supposée être du premier ordre, la déformation générée par la réaction devient alors (II. 52) :

$$\varepsilon^r(M, t) = \varepsilon^{100\%}(t) h(\sigma) hr^8 \langle 1 - \exp(-k(T)t) - A_0 \rangle^+ \quad (\text{II. 52})$$

La fonction $k(T)$ prend en compte l'influence de la température par l'intermédiaire d'une loi d'activation d'Arrhenius. La détermination du champ de déformations engendré par la réaction alcali-silice nécessite la connaissance du champ d'humidité relative dans les pores et des caractéristiques de gonflement du béton. Le champ d'humidité est déterminé par un calcul hydrique préalable et les caractéristiques de gonflement peuvent être déterminées par un essai de gonflement libre. Si l'on compare les résultats expérimentaux aux résultats numériques en regardant l'influence de la contrainte appliquée sur l'expansion au cours du temps [Capra, 1997] alors on remarque que la prédiction numérique est très bonne pour des contraintes comprises entre 0 et 5 MPa mais que les résultats divergent beaucoup dès que la contrainte est supérieure. Ceci n'est pas étonnant étant donné que ce modèle comporte beaucoup d'approximations et de fonctions de calage qui ne représentent pas forcément une réalité physique.

II.2.2.c. Le modèle de Li

Le modèle proposé par Li [Li, 2002] vise à évaluer les conséquences de la réaction alcali-silice sur des ouvrages réels. La réaction est supposée produire un « gel sec » non gonflant selon un avancement ξ . Ce dernier possède la propriété de s'imbiber d'eau en

fonction du temps et de l'humidité relative dans les pores pour former un « gel mouillé ». Ces deux processus sont supposés suivre des cinétiques du premier ordre (II. 53) :

$$\xi(t) = 1 - \exp(-t/t_c) \quad \gamma(t) = 1 - \exp(-t/t_a) \quad (\text{II. 53. a et b})$$

Le terme t_c est le temps caractéristique de la réaction considéré comme constant à température et à humidité relative constantes. γ est une variable de vieillissement normalisée avec $\gamma=0$ pour un gel sec « jeune » qui vient d'être formé et garde donc tout son potentiel de combiner de l'eau, et $\gamma=1$ pour un gel « vieux » ayant perdu toute capacité à se combiner avec l'eau. Le terme t_a est un temps caractéristique de ce processus de vieillissement supposé constant. Le caractère vieillissant de la capacité du gel à fixer l'eau revient à écrire que le taux de prise de volume d'eau \dot{v}_w dépend à la fois de la cinétique de formation du gel sec, donc de $\dot{\xi}$, et de l'âge γ du gel. L'auteur choisit d'écrire (II. 54) :

$$\dot{v}_w = M(1 - \gamma)\dot{\xi} \quad (\text{II. 54})$$

où M est un coefficient de combinaison qui rapporte le taux de prise d'eau au taux de gel sec « jeune » en cours de formation.

En exprimant le temps t dans (II. 53. a) en fonction de l'avancement ξ de formation du gel sec à l'aide de (II. 53. b), il vient (II. 55) :

$$1 - \gamma = (1 - \xi)^{\frac{t_c}{t_a}} \quad (\text{II. 55})$$

Le taux de prise de volume d'eau s'écrit alors (II. 56) :

$$\dot{v}_m = M(1 - \xi)^{\frac{t_c}{t_a}} \dot{\xi} \quad (\text{II. 56})$$

Le gonflement libre ε_l^r induit par la réaction est alors pour une humidité relative donnée (II. 57) :

$$\varepsilon_l^r(t) = \frac{\beta M}{1 + \bar{w}} \exp\left[-\frac{t_f}{t_c}(1 + \bar{w})\right] \left[1 - \exp\left(-\frac{1 + \bar{w}}{t_c} \langle t - t_f \rangle^+\right)\right] \quad (\text{II. 57})$$

avec β un coefficient d'expansion chimico-élastique traduisant la réponse du matériau à l'expansion du gel mouillé, t_f le temps nécessaire pour que le gonflement apparaisse, $f(x) = \langle x \rangle^+$ est la fonction qui renvoie la partie positive de x et \bar{w} une constante qui dépend des temps caractéristiques telle que $\bar{w} = t_c / t_a$.

L'expansion provoquée par le gel mouillé implique trois phénomènes couplés : la formation d'un gel sec de temps caractéristique t_c , la combinaison de l'eau et du gel sec dont le caractère vieillissant est caractérisé par t_a et un phénomène de remplissage de durée t_f .

Un modèle de comportement thermo-chemo-élastoplastique implanté dans le code de calcul CESAR-LCPC permet de prendre en compte l'effet des variations de température et d'humidité relative et du gonflement interne sur le comportement du béton (II. 58) :

$$\sigma = \left(K - \frac{2}{3} G \right) (\varepsilon - \varepsilon^p) + 2G(\varepsilon - \varepsilon^p) - (K\alpha\Delta\theta)I - (K\beta v_w)I \quad (\text{II. 58})$$

- σ , ε , ε^p sont respectivement les tenseurs des contraintes, des déformations totales et des déformations plastiques ;
- I est le tenseur identité ;
- K et G sont les modules de compressibilité et de cisaillement du béton ;
- α est le coefficient de dilatation du béton.

Le calage des nombreux paramètres permet la reproduction du comportement hydro-chimique des bétons, même pour des historiques d'apport d'eau quelconques. Les simulations numériques permettent alors l'évaluation structurelle d'ouvrages dégradés [Li, 2000] - [Li, 2002].

Ce modèle permet de prendre en compte l'influence de l'environnement extérieur sur la réaction alcali-silice (température et apport d'eau). Le nombre conséquent de paramètres rend difficile le calage d'un tel modèle.

II.2.3. Conclusion sur les modélisations de la réaction alcali-silice

La première partie a été dédiée à la présentation de modèles mésoscopiques qui se basent sur des mécanismes réactionnels probables pour prédire l'évolution des espèces ioniques dans le matériau et l'avancement de la réaction. Ils font le lien entre les phénomènes physico-chimiques mésoscopiques de la réaction alcali-silice et leurs effets sur le comportement mécanique du matériau.

La seconde partie a été consacrée à la présentation des modèles macroscopiques qui se basent sur des phénomènes physiques observés expérimentalement pour décrire l'évolution du gonflement interne (ou des contraintes générées) induit par la réaction en fonction de données observables (chargement, température, humidité relative...) sans pour autant en connaître l'origine. Ils sont couplés avec des modèles de comportement et ont pour vocation l'évaluation des effets structuraux de la réaction sur des ouvrages réels.

Ce travail bibliographique a montré la richesse des travaux menés dans le cadre de la modélisation de la réaction alcali-silice. Pour la construction de notre modèle couplé chimie-mécanique de la réaction alcali-silice, nous nous appuyerons sur les différents modèles passés en revue (principalement celui de Poyet en ce qui concerne la partie diffusion des alcalins) mais les hypothèses et les conditions d'application tenteront d'être moins restrictives. En effet, nous implémenterons le modèle élaboré dans l'outil numérique FEMCAM, outil numérique tridimensionnel représentant le comportement hétérogène du béton.

Références bibliographiques

Abe, M., Kikuta, S., Masuda, Y., Tomozawa, F., **1989**, *Experimental study of mechanical behavior of reinforced concrete members affected by alkali-aggregate reaction*, The 8th ICAAR, Kyoto, Japan, pp. 691-696.

Bažant, Z.P., Steffens, S., **2000**, *Mathematical model for kinetics of alkali-silica reaction in concrete*, Cement and Concrete Research, Vol. 30, pp. 419-428.

Bulteel, D., Garcia-Diaz E., Vernet C., Zanni H., **2002**, *Alkali-silica reaction: a method to quantify the reaction degree*, Cement and Concrete Research, Vol. 32, pp. 1199-1206.

Capra, B., Bournazel, J.-P., **1996**, *Modelling of alkali aggregate reaction induced mechanical effects in concrete*, Proceedings of the International Conference on Concrete : from material to structure, Arles (France).

Capra, B., **1997**, *Modélisation des effets mécaniques induits par les réactions alcali-granulats*, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de Cachan.

Capra, B., Bournazel, J.-P., **1998**, *Modelling of induced mechanical effects of alkali-aggregate reactions*, Cement and Concrete Research, Vol. 28, pp.251-260.

Comby, I., **2006**, *Development and validation of a 3D computational tool to describe damage and fracture due to alkali silica reaction in concrete structures*, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

Dehaut, S., **2002**, *Etude de la dégradation d'un béton soumis à la réaction alkali-granulat*, Thèse de doctorat, Université des sciences et technologies de Lille.

Dent-Glasser, L.S., Kataoka, N., **1981**, *The chemistry of alkali-aggregate reaction*, Cement and Concrete Research, Vol. 11, pp. 1-9.

Dron, R., **1990**, *Thermodynamique de la réaction alcali-silice*, Bulletin de liaison des Ponts et Chaussées, Vol. 166, pp. 55-59.

Dron, R., Brivot, F., **1992**, *Thermodynamic and kinetic approach to the alkali-silica reaction. Part 1: concepts*, Cement and Concrete Research, Vol. 22, n°5, pp. 941-948.

Dron, R., Brivot, F., **1993**, *Thermodynamic and kinetic approach to the alkali-silica reaction. Part 2: experiments*, Cement and Concrete Research, Vol. 23, n°1, pp. 93-103.

Fan, S., Hanson, J., **1998**, *Length Expansion and Cracking of Plain and Reinforced Concrete Prisms due to Alkali-Silica Reaction*, ACI Materials Journal, Vol. 95, n°4, July-Aug., pp. 480-487.

Furusawa, Y., Ohga, H., Uomoto, T., **1994**, *An analytical study concerning prediction of concrete expansion due to alkali-silica reaction*, Proceedings of the 3rd International Conference on Durability of concrete, Nice (France).

- Garcia-Diaz, E.,** Riche, J., Bulteel, D., Vernet, C., **2005**, *Mechanism of damage for the alkali-silica reaction*, Cement and Concrete Research, Vol. 36, pp. 395-400.
- Gravel, C.,** Ballivy, G., Khayat, K., Quirion, M., Lachemi, M., **2000**, *Expansion of AAR concrete under triaxial stress: simulation with instrumented concrete block*, 11th international conference on Alkali-Aggregate Reaction, Québec, Canada, pp.949-958.
- Hornain, H.,** **1993**, *Mécanismes physico-chimiques d'alcalis-réactions*, Annales de l'ITBTP, Vol. 29, pp. 97-113.
- Inoue, S.,** Fuji, M., Kobayashi, K., Nakano, K., **1989**, *Structural behaviors of reinforced concrete beams affected by ASR*, The 8th ICAAR, Kyoto, Japan, pp. 727-732.
- Jones, T.N.,** **1988**, *A new interpretation of alkali-silica reaction and expansion mechanisms in concrete*, Chemistry and Industry, Vol. 18, January, pp.40-44.
- Larive, C.,** **1997**, *Apport combinés de l'expérimentation et de la modélisation à la compréhension de l'alcali-réaction et de ses effets mécaniques*, Thèse de doctorat, Ecole Nationale des ponts et Chaussées.
- Li, K.,** Ulm, F.-J., Coussy, O., Larive, C., Fan, L., **2000**, *Chemoelastic modelling of alkali-silica reaction in concrete*, Proceedings of the 11th International Conference on Alkali-Aggregate Reaction in Concrete, Québec City (Canada).
- Li, K.,** **2002**, *Modélisation chimico-mécanique du comportement des bétons affectés par la réaction d'alcali-silice et expertise numérique des ouvrages d'art dégradés*, Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- Li, K.,** Coussy, O., **2002**, *Evaluation des ouvrages dégradés par la réaction alkali-granulat*, Revue Française de Génie Civil, Vol. 6, n°5, pp. 835-852.
- Lombardi, J.,** Perruchot, A., Massard, P., **2000**, *Experimental evaluation of composition and volume variability of Ca-Si gels, first products of alkali silica reaction (ASR)*, Proceedings of the 11th International Conference on Alkali-Aggregate Reaction in Concrete, Québec City (Canada).
- Ludwig, U.,** Sideris, K., **1975**, *Mechanismus und Wirkungsweise des Alkali-Zuschlag-Reaktion*, Sprechsaal für Keramik, Glass, Baustoffe, Vol. 108, n°5-6, pp. 128-148.
- Monette, L.J.,** Gardner, N.J., Grattan-Bellew, P.E., **2002**, *Residual strength of reinforced concrete beams damaged by alkali-silica reaction - Examination of Damage Rating Index method*, ACI Materials Journal, Vol. 99 (1), pp.42-50.
- Multon, S.,** **2003**, *Evaluation expérimentale et théorique des effets mécaniques de l'alcali-réaction sur des structures modèles*, Thèse de doctorat, 2003.
- Nielsen, A.,** Gottfredsen, F., Thøgersen, F., **1993**, *Development of stresses in concrete structures with alkali-silica reactions*, Materials and Structures, Vol. 26, pp. 152-158.

Nilsson, L.O., 1983, *Moisture effects on the alkali-silica reaction*, Proceedings of the International Conference on Alkalies in Concrete, Copenhagen (Denemark).

Ohno, S., Yoshioka, Y., Shinozaki, Y., Morikawa, T., 1989, *The mechanical behavior of beams coated after alkali-silica reaction damage*, The 8th ICAAR, Kyoto, Japan, pp. 697-702.

Pleau, R., Berube, M.A., Pigeon, M., Fournier, B., Raphael, S., 1989, *Mechanical behavior of concrete affected by ASR*, The 8th ICAAR, Kyoto, Japan, pp. 721-726.

Poole, A.B., 1992, *Alkali-silica reactivity mechanisms of gel formation and expansion*, Proceedings of the 9th International Conference on Alkali-Aggregate Reaction in Concrete, London (England).

Poyet, S., 2003, *Etude de la dégradation des ouvrages en béton atteints par la réaction alcali-silice : approche expérimentale et modélisation numérique multi-échelles des dégradations dans un environnement hydro-chemo-mécanique variable*, Thèse de doctorat, Université de Marne-La-Vallée.

Prince, W., Perami, R., 1993, *Mise en évidence du rôle essentiel des ions OH⁻ dans les réactions alcalis-silice*, Cement and Concrete Research, Vol. 23(5), pp. 1121-1129.

Riche, J., 2003, *Quantification de la réaction alcali-silice dans des matières durcies : micromortiers et bétons*, Thèse de doctorat de l'École des Mines de Douai.

Sellier, A., 1995, *Modélisations probabilistes du comportement de matériaux et de structures en génie civil*, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de Cachan.

Sellier, A., Capra, B., Tognazzi, C., Poyet, S., 1999, *Couplage dégradation-diffusion, chapitre 8 de la communication : La dégradation des bétons-couplage fissuration-dégradation chimique*, sous la direction de J.-M. Torrenti, O. Didry, J.-P. Ollivier, F. Plas dans la série : communications en mécanique, Ed. Hermès.

Shayan, A., Diggins, R., Ivanusec, I., 1996, *Long-term effectiveness of fly ash in preventing deteriorious expansion due to Alkali-Aggregate reaction in concrete*, 10th International Conference on Alkali-Aggregate Reaction in concrete, Melbourne, Australia, pp. 538-545.

Smaoui, N., Bérubé, M-A., Fournier, B., Bissonnette, B., 2003, *Influence of Specimen Geometry, Orientation of casting Plane, and Mode of Concrete Consolidation on Expansion Due to ASR*, submitted to Cement, Concrete and Aggregates.

Swamy, R.N., Al-Asali, M.M., 1988, *Engineering Properties of concrete affected by alkali-silica reaction*, ACI Materials Journal, Vol. 85 (5), pp.367-374.

Uomoto, T., Furusawa, Y., Ohga, H., 1992, *A simple kinetics based model for predicting alkali-silica reaction*, Proceedings of the 9th International Conference on Alkali-Aggregate Reaction in Concrete, London (England).

Wang H., Gillott J.E., 1991, *Mechanism of alkali-silica reaction and the significance of calcium hydroxide*, Cement and Concrete Research, Vol. 21, pp. 647-654.

Wilson M., Cabrera J.G., Zou Y., **1994**, *The process and mechanism of alkali-silica reaction using fused silica as the reactive aggregate*, Advances in Cement Research, Vol. 6, n°23, pp. 117-125.

Xi, Y., Suwito, A., Wen, X., Meyer, C., Jin, W., **1999**, *Testing and modelling alkali-silica-reaction and the associated expansion of concrete*, Mechanics of quasi-brittle materials and structures, pp. 217-232, Ed. Hermès Science Publications.

CHAPITRE III :

**MODELISATION MULTIMATERIAUX DU BETON ET
MODELE CHIMIQUE DE LA REACTION ALCALI-SILICE
(RAS)**

III.1. L'OUTIL NUMERIQUE FEMCAM	42
III.1.1. Présentation de l'outil numérique	42
III.1.2. Représentation du matériau béton dans FEMCAM	42
III.1.2.a. Choix de l'échelle d'étude	42
III.1.2.b. Génération de la mésostructure hétérogène.....	43
III.1.2.c Discussions	44
III.2. LA MODELISATION DE LA CHIMIE DE LA REACTION ALCALI-SILICE	45
III.2.1. Hypothèses posées et mécanismes réactionnels retenus	45
III.2.2. Modèle chimique de la réaction alcali-silice.....	46
III.2.3. Modélisation numérique de la réaction alcali-silice.....	48
III.2.3.a. Formulation du problème à résoudre.....	48
III.2.3.b. Résolution par éléments finis	48
III.2.3.b.i. Formulation variationnelle	48
III.2.3.b.ii. Discrétisation éléments finis	49
III.2.3.b.iii. Discrétisation temporelle	50
III.2.3.c. Validation sur un cas test.....	51
III.2.3.c.i. Présentation du cas test.....	51
III.2.3.c.ii. Solution analytique.....	52
III.2.3.c.iii. Comparaison des solutions analytiques et numériques.....	53
III.3. ETUDE PARAMETRIQUE DU MODELE PHYSICO-CHIMIQUE.....	55
III.3.1. Référencement des différents paramètres d'entrée utilisés par le modèle et des paramètres visualisables en fin de calcul	55
III.3.1.a. Les données accessibles.....	55
III.3.1.b. Les données en discussion.....	56
III.3.1.c. Les données à identifier grâce au modèle numérique	56
III.3.1.d. Les données accessibles et visualisables en sortie	56
III.3.2. Etudes de sensibilité	57
III.3.2.a. Le cas test numérique	57
III.3.2.b. Sensibilité au pas de temps.....	57
III.3.2.c. Sensibilité à la constante cinétique.....	59
III.3.2.d. Le coefficient stœchiométrique	59
III.3.2.e. Sensibilité au maillage.....	60
III.4. CONCLUSIONS	61

Ce chapitre a pour objectif principal de présenter le modèle mathématique mis au point pour représenter la réaction alcali-silice dans le béton. Nous présenterons aussi l'implémentation de ce modèle dans un outil numérique éléments finis tridimensionnel FEMCAM dont nous ferons une rapide présentation. Une étude paramétrique du modèle de la RAS sera finalement réalisée.

III.1. L'outil numérique FEMCAM

III.1.1. Présentation de l'outil numérique

Les simulations de ce manuscrit que ce soit pour la représentation de la réaction alcali-silice ou pour l'étude du comportement mécanique du béton ont été réalisées avec une version améliorée de l'outil numérique éléments finis FEMCAM. L'outil numérique FEMCAM (Finite Element Method for Concrete Analysis Model) est dérivé du logiciel commercial Forge3® développé par le CEMEF. Forge3® est un outil de simulation des procédés basé sur la méthode des éléments finis. Il était initialement dédié à la simulation de la thermomécanique des grandes déformations de matériaux lors de divers procédés de mise en forme (forgeage, emboutissage, laminage, roulage, ...). Ses principales caractéristiques sont :

- une formulation mixte vitesse-pression ;
- l'utilisation d'éléments finis P1+/P1 : tétraèdres linéaires en 3D avec terme bulle ;
- la gestion des grandes déformations plastiques ;
- des lois de comportement variées : élastique, élasto-plastique, élasto-visco-plastique avec endommagement et couplage thermomécanique ;
- un maillage et remaillage complètement automatique qui permet de simuler des géométries très complexes et de grandes déformations tout en préservant la qualité du maillage ;
- une gestion multi matériaux et multi corps ;
- la prise en compte de différents contacts : tangentiel (collant, glissant ou avec frottement) et normal (unilatéral ou bilatéral) ;
- une modélisation de la rupture par la méthode « kill element » (élimination des éléments du maillage lorsqu'une caractéristique mécanique critique est atteinte).

FEMCAM est plus particulièrement dédié à la représentation du comportement mécanique des matériaux quasi-fragiles puisqu'il intègre la génération d'un matériau biphasique mais aussi une loi de comportement élastique endommageable de Mazars [Comby, 2006].

III.1.2. Représentation du matériau béton dans FEMCAM

III.1.2.a. Choix de l'échelle d'étude

Pour l'étude du béton, on peut différencier trois principales échelles (Fig. 1):

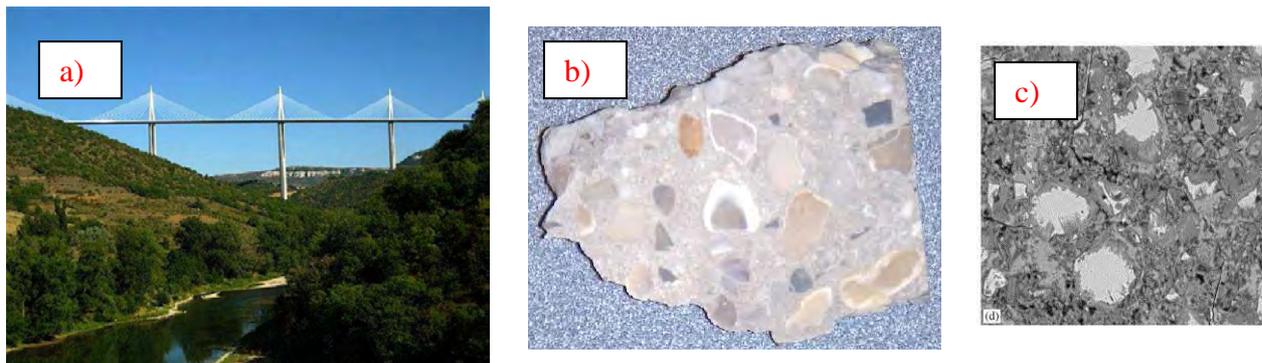


Figure 1 : Trois échelles d'étude pour le béton, a) Macroscopique, b) Mésoscopique, c) Microscopique

A l'échelle macroscopique, le béton est considéré comme un matériau homogène et cette échelle est principalement utilisée pour le calcul des structures. A l'échelle microscopique, on s'intéresse aux propriétés très locales du béton et donc plus particulièrement à la composition chimique du ciment utilisé et à son degré d'hydratation. Cette échelle est surtout utilisée pour relier les propriétés physiques, chimiques et mécaniques du béton au jeune âge à celle du béton durci. Pour notre étude, il a été choisi de se placer à l'échelle mésoscopique où le béton est considéré comme un matériau hétérogène composé de trois phases principales qui sont les agrégats, la pâte de mortier et la zone interfaciale de transition. Cette dernière sera négligée dans la suite du manuscrit pour des raisons que nous détaillerons plus tard.

III.1.2.b. Génération de la mésostructure hétérogène

Pour modéliser la structure granulaire du béton, deux principales hypothèses sont posées :

- la zone interfaciale de transition est négligée ;
- le contact entre les grains et la pâte de mortier est considéré comme bilatéral (pas de décohésion normale à l'interface) collant (pas de déplacement tangentiel à l'interface).

Le but de cette génération du squelette granulaire du béton est de pouvoir représenter n'importe quelle distribution granulaire réelle. Les granulats sont générés de manière aléatoire du plus gros au plus petit et en s'appuyant sur les éléments du maillage de l'éprouvette de béton. Trois aspects physiques principaux doivent être pris en compte dans cet algorithme :

- il doit y avoir un espace minimum, appelé épaisseur de pâte maximale (MPT), entre les plus gros grains générés, cet espace est défini par (III. 1) :
-

$$l = d_{\max} \left(\sqrt[3]{\frac{g^*}{g}} - 1 \right) \quad (\text{III. 1})$$

avec d_{\max} le diamètre maximal des agrégats considérés, g le volume d'agrégats à générer et g^* calculé ainsi [De Larrard, 1999] (III. 2) :

$$g^* = 1 - 0.47 \left(\frac{d_{\min}}{d_{\max}} \right)^{0.22} \quad (\text{III. 2})$$

d_{\min} étant le diamètre le plus petit des agrégats à générer ;

- il faut aussi tenir compte des effets de bords en laissant un espace suffisant, égal au rayon du granulat considéré, entre les bords de l'éprouvette de béton et les centres des granulats placés près des contours ;
- il est aussi essentiel de n'avoir aucun contact entre les grains et donc aucun nœud du maillage appartenant à deux agrégats différents.

L'algorithme de création de la structure mésoscopique du béton s'arrête lorsque le nombre de granulats à générer est atteint ou bien lorsque le volume numérique du squelette granulaire créé atteint celui désiré.

Lors de la génération du squelette granulaire, il est aussi possible de sélectionner quels granulats seront réactifs vis-à-vis de la réaction alcali-silice. Ce choix se fait aussi de façon aléatoire en fonction du pourcentage de granulats réactifs demandé dans l'éprouvette. Plus de détails sur l'algorithme de placement des granulats peuvent être trouvés dans [Comby, 2006].

La figure suivante (Fig. 2) représente le squelette granulaire d'une éprouvette parallélépipédique 7*7*28 cm composé de 935 agrégats avec des diamètres variant entre 7,15 mm et 22,5 mm et dont le pourcentage de granulats réactifs est de 50% :

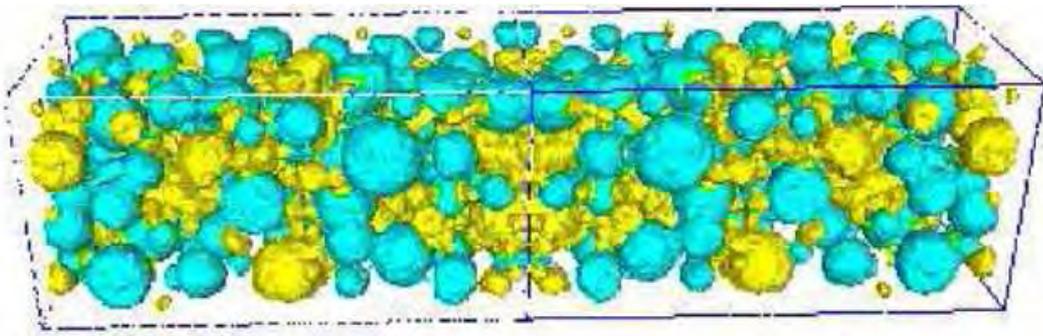


Figure 2 : Représentation d'une éprouvette hétérogène de béton avec en turquoise les granulats réactifs vis-à-vis de la RAS et en jaune les granulats non réactifs [Comby, 2006]

III.1.2.c Discussions

Le maillage joue un rôle important dans la génération du squelette granulaire. Tout d'abord, la taille de maille doit absolument dépasser le rayon du plus petit granulat à générer tout en sachant qu'un maillage fin autorise l'insertion d'un plus grand nombre de grains ainsi qu'une meilleure cohérence entre le volume de grains créé numériquement et celui désiré.

La question du nombre de granulats maximum que l'on peut représenter numériquement se pose aussi. Le problème principal est bien sur la capacité de calcul et de représentation du nombre d'éléments par la machine. Considérant un PC standard (Intel Xeon Processor, 2,13 GHz, 3 Go Ram) sur lequel on peut discrétiser une éprouvette classique 7*7*28 cm avec au maximum un million d'éléments tétraédriques (limitation par rapport à la mémoire de la machine), il n'est pas possible de représenter tous les grains, sable et agrégats, composant le squelette (cela représenterait plus de 65 millions de grains). Le modèle considère donc le béton comme un matériau biphasique :

- un squelette granulaire dont le diamètre minimum des agrégats est de 7,15 mm ;
- une pâte de mortier composée du ciment et de tous les autres granulats dont le diamètre est inférieur à 7,15 mm.

III.2. La modélisation de la chimie de la réaction alcali-silice

III.2.1. Hypothèses posées et mécanismes réactionnels retenus

Les mécanismes réactionnels de la réaction alcali-silice sont nombreux, complexes et interviennent à différentes échelles comme nous avons pu le constater dans le chapitre précédent. Il semble donc indispensable de poser certaines hypothèses et de sélectionner les mécanismes réactionnels les plus importants afin de créer notre modèle chimique.

Les hypothèses posées sont :

- le matériau est considéré comme saturé en eau ;
- les ions calcium ne sont pas pris en compte ;
- les ions sodium et potassium (Na^+ et K^+) sont confondus dans notre modèle et seront notés Na^+ dans la suite du manuscrit ;
- au temps initial, les alcalins sont présents uniquement dans la pâte de mortier ;
- tout au long de la réaction, la silice réactive est contenue uniquement dans les granulats considérés comme réactifs ;
- un granulat défini comme réactif est composé à 100% de silice réactive et un granulat non réactif ne contient pas de silice ;
- il n'y a pas d'échange de matière entre le matériau et le milieu extérieur.

Les mécanismes réactionnels retenus par ordre chronologique sont :

- les alcalins contenus dans la pâte de mortier diffusent vers les agrégats ;
- la réaction débute à la surface des granulats réactifs uniquement à partir d'une concentration seuil minimale en alcalins ;
- tous les ions pénétrant dans les agrégats réagissent plus ou moins rapidement selon la cinétique choisie ;
- les produits gonflants de la réaction alcali-silice se créent en premier lieu à la surface des agrégats réactifs ce qui entraîne une dilatation de la couche surfacique des grains atteints ;
- lorsque la silice en surface des grains est épuisée alors la réaction se produit plus en profondeur et entraîne de nouveau une dilatation.

Cette description du déroulement de la réaction peut être résumée par le schéma ci-dessous (Fig. 3) :

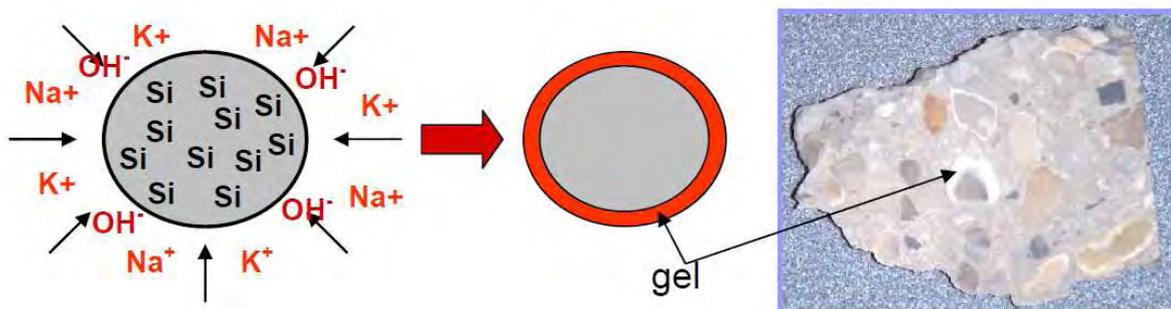


Figure 3 : Schéma représentatif des mécanismes réactionnels considérés dans le modèle chimique de la RAS

Une fois les hypothèses posées et les mécanismes réactionnels à modéliser choisis, le travail consistait à mettre en équation ces phénomènes chimiques en s'appuyant bien sûr sur la bibliographie réalisée dans le chapitre précédent.

III.2.2. Modèle chimique de la réaction alcali-silice

Un modèle à deux variables couplées a été élaboré pour représenter la réaction alcali-silice. Ces deux variables sont :

- le champ de concentration en alcalins noté $[Na^+]$;
- le champ de concentration en silice noté $[SiO_2]$.

Nous avons, dans un premier temps, écrit l'équation qui modélise la réaction des alcalins avec la silice (III. 3) :

$$\frac{\partial[Na^+]}{\partial t} = \lambda \frac{\partial[SiO_2]}{\partial t} \quad (\text{III. 3})$$

Cette équation est un bilan de conservation de la matière qui à chaque instant relie l'évolution de la concentration en alcalins à celle de la concentration en silice tout en tenant compte du coefficient stœchiométrique λ de la réaction qui pourra être ajusté.

Dans un second temps, il a fallu intégrer à la première équation (III. 3) le fait que les alcalins diffusent vers les sites réactifs, c'est-à-dire les granulats contenant de la silice, avant de réagir avec cette dernière. Nous avons donc rajouté un terme de diffusion de type loi de Fick mais dans lequel le coefficient de diffusion considéré est un coefficient de diffusion apparent. C'est-à-dire qu'il inclut à la fois la diffusion chimique pure mais aussi un terme de transport des alcalins via la solution interstitielle du béton. L'équation qui rend compte de la diffusion/réaction des alcalins dans le béton s'écrit alors (III. 4) :

$$\frac{\partial[Na^+]}{\partial t} - \text{div}(D_{\text{apparent}} \vec{\nabla}([Na^+])) = \lambda \frac{\partial[SiO_2]}{\partial t} \quad (\text{III. 4})$$

Pendant la réaction, les alcalins et la silice sont consommés pour créer les produits gonflants de la réaction. La diminution des alcalins est prise en compte par le second membre de l'équation précédente. Une deuxième équation exprime donc la disparition de la silice au cours du temps (III. 5) :

$$\frac{\partial[SiO_2]}{\partial t} = -K[SiO_2] \Gamma_{[Na^+]} \quad (\text{III. 5})$$

$\Gamma_{[Na^+]}$ est une indicatrice de présence des ions alcalins en concentration supérieure à la concentration seuil de déclenchement de la réaction définie. Cette dernière équation est une équation cinétique locale uniquement pour les granulats réactifs siliceux et qui n'est considérée que lorsque la concentration en alcalins dans l'agrégat est plus grande que la concentration limite (cf. indicatrice). K est une constante qui rend compte de la cinétique de la réaction alcali-silice.

Nous allons expliciter les équations à résoudre en fonction du milieu dans lequel on se trouve.

✓ *Dans la matrice ou les granulats non réactifs*

Il n'y a pas de présence de silice et ce ne sont pas des milieux réactifs, il n'y a donc qu'une seule équation à résoudre qui est (III. 6) :

$$\frac{\partial[Na^+]}{\partial t} = \text{div}(D_{\text{apparent}} \vec{\nabla}([Na^+])) \quad (\text{III. 6})$$

Ceci est une équation de diffusion pure sans second membre (terme source ou puits) où D_{apparent} est le coefficient apparent de diffusion des ions alcalins dans la matrice cimentaire ou dans les granulats non réactifs, il est donc variable localement.

✓ *Dans les granulats réactifs (siliceux)*

Dans les granulats réactifs, nous avons à la fois la diffusion des alcalins mais aussi la disparition de ces deux espèces lorsque la concentration en alcalins est supérieure à une concentration seuil. La première équation à résoudre est donc l'équation de diffusion réaction pour les alcalins, obtenue en injectant l'équation (III. 5) dans l'équation (III. 4), (III. 7) :

$$\frac{\partial[Na^+]}{\partial t} - \text{div}(D_{\text{apparent}} \vec{\nabla}([Na^+])) = -K\lambda[SiO_2] \quad (\text{III. 7})$$

La seconde équation prend en compte la disparition de la silice au cours du temps. C'est l'équation (III. 5) qui est une équation différentielle dont la solution exacte est (III. 8) :

$$[SiO_2]_{t+\Delta t} = [SiO_2]_t \exp(-K\Delta t) \quad (\text{III. 8})$$

Ce modèle quantifie donc à chaque instant de la réaction les variations des champs de concentration en alcalins et en silice dans l'éprouvette modélisée. Comme il n'y a pas d'échange de matière avec le milieu extérieur, les conditions aux limites sur les bords du domaine sont des conditions de flux nul. Si l'on considère un domaine Ω de surface $\partial\Omega$ et \vec{n} la normale sortante au domaine (Fig. 4) alors les conditions aux limites s'écrivent ainsi (III. 9) :

$$\begin{cases} D_{\text{apparent}} \frac{\partial[Na^+]}{\partial n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega \\ D_{\text{apparent}} \frac{\partial[SiO_2]}{\partial n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (\text{III. 9})$$

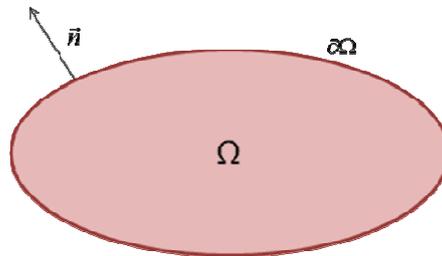


Figure 4 : Conditions aux limites

III.2.3. Modélisation numérique de la réaction alcali-silice

III.2.3.a. Formulation du problème à résoudre

Le problème numérique que nous allons résoudre peut s'écrire de la façon suivante (III. 10) :

$$\begin{cases} \frac{\partial C_X}{\partial t} = \text{div}(D_X \vec{\nabla} C_X) + S & \text{dans } \Omega \\ C_X(x, t = t_{\text{initial}}) = C_0 & \text{dans } \Omega \end{cases} \quad (\text{III. 10})$$

avec pour conditions aux limites (III. 11) :

$$D_X \frac{\partial C_X}{\partial n} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (\text{III. 11})$$

Ω étant le domaine fermé d'étude, C_X est la concentration en espèce X , D_X est le coefficient de diffusion apparent de l'espèce X et S un terme puits qui représente une variation homogène de concentration en espèce X . Dans notre cas, S correspond à la diminution de concentration engendrée par la consommation des ions alcalins par la réaction alcali-silice afin de former les produits expansifs.

III.2.3.b. Résolution par éléments finis

III.2.3.b.i. Formulation variationnelle

Afin d'obtenir la forme faible du problème, l'équation (III. 10) est multipliée par la fonction test C^* et intégrée sur l'ensemble du domaine Ω considéré. Le problème à résoudre est donc le suivant :

- ✓ On cherche le champ de concentration C_X tel que $\forall C^*$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C_X}{\partial t} C^* d\Omega = \int_{\Omega} \text{div}(D_X \vec{\nabla} C_X) C^* d\Omega + \int_{\Omega} S C^* d\Omega \quad (\text{III. 12})$$

Grâce aux conditions aux limites de flux nul et si l'on considère le coefficient de diffusion apparent comme constant, on obtient la formulation faible du problème fort en intégrant par parties :

- ✓ On cherche le champ de concentration C_X tel que $\forall C^*$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C_X}{\partial t} C^* d\Omega + \int_{\Omega} D_X \nabla C_X \nabla C^* d\Omega = \int_{\Omega} S C^* d\Omega \quad (\text{III. 13})$$

III.2.3.b.ii. Discrétisation éléments finis

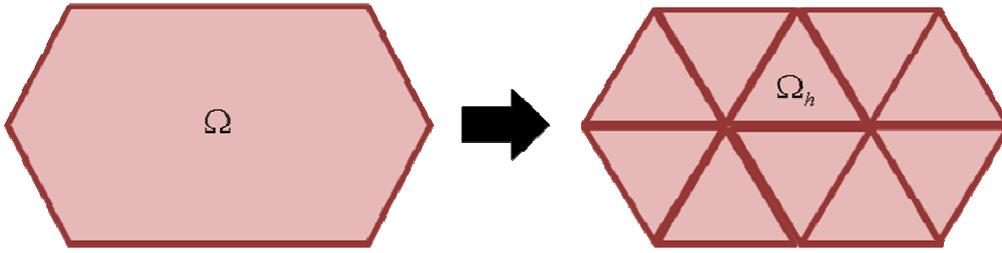


Figure 5 : Discrétisation par éléments finis du domaine Ω

Après discrétisation du domaine continu Ω en un domaine discrétisé Ω_h (Fig. 5), la formulation éléments finis permet d'exprimer le champ de concentration C_x à l'instant t en un point quelconque x du domaine Ω . Pour ce faire, le champ de concentration aux nœuds du maillage C_i est utilisé pour interpoler le champ de concentration C_h sur l'ensemble du domaine (III. 14) :

$$C_h(x,t) = \sum_{i=1}^{Nbnoe} N_i(x)C_i(t) \quad (\text{III. 14})$$

où $Nbnoe$ correspond au nombre total de nœuds du maillage, les N_i sont les fonctions de base valant 1 au nœud i et 0 partout ailleurs.

Une interpolation linéaire par éléments des fonctions de forme a été choisie (Fig. 6). Les fonctions N_i sont donc des polynômes de degré 1.

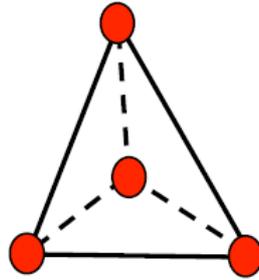


Figure 6 : Interpolation linéaire du champ de concentration

Le problème discrétisé se met sous la forme suivante (III. 15) :

$$\frac{\partial C_x}{\partial t} + [Diff] C_x = [Q] \quad (\text{III. 15})$$

où $C_x = \{C_i ; i = 1, Nbnoe\}$ représente le vecteur champ de concentration solution. La matrice de diffusion $[Diff]$ ainsi que le vecteur de chargement $[Q]$ sont définis de la façon suivante (III. 16) :

$$\begin{aligned}
Diff_{ij} &= \sum_{e=1}^{Nbelt} \left(\int_{\Omega_e} D_X \nabla N_i \cdot \nabla N_j d\Omega_e \right) \\
Q_i &= \sum_{e=1}^{Nbelt} \int_{\Omega_e} S N_i d\Omega_e
\end{aligned} \tag{III. 16}$$

III.2.3.b.iii. Discrétisation temporelle

Le schéma temporel mis en œuvre dans FEMCAM consiste en un schéma aux différences finies à deux pas de temps. Nous ne présenterons que succinctement celui-ci mais le lecteur intéressé pourra se reporter à Soyris [Soyris, 1990] pour plus de détails.

Le système est discrétisé à l'instant t^* de la façon suivante (III. 17) :

$$\begin{cases} t^* = \alpha_1 t^{n-1} + \alpha_2 t^n + \alpha_3 t^{n+1} \\ \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1 \end{cases} \tag{III. 17}$$

Le champ de concentration se calcule donc au temps t^* selon (III. 18) :

$$\begin{cases} C_X^* = \alpha_1 C_X^{n-1} + \alpha_2 C_X^n + \alpha_3 C_X^{n+1} \\ \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1 \end{cases} \tag{III. 18}$$

La dérivée correspondante s'écrit (III. 19) :

$$\frac{\partial C_X^*}{\partial t} = \frac{\beta_1 C_X^{n-1} + \beta_2 C_X^n}{\Delta t_1} + \frac{\gamma_1 C_X^n + \gamma_2 C_X^{n+1}}{\Delta t_2} \tag{III. 19}$$

Pour que cette dérivée soit réellement l'expression d'une dérivée, on montre qu'il est nécessaire de respecter les conditions suivantes (III. 20) [Soyris, 1990] :

$$\begin{cases} \gamma_1 = -\gamma_2 \\ \beta_1 = -\beta_2 = \gamma_2 - 1 \end{cases} \tag{III. 20}$$

De plus, il est également démontré que le schéma est de second ordre, stable et consistant à condition de respecter les relations suivantes (III. 21 et III. 22) :

- Condition de stabilité :

$$\begin{cases} \gamma_2 \geq \frac{1}{2} \\ \alpha_1 = \frac{1}{2}(1 - \gamma_2) \end{cases} \tag{III. 21}$$

- Condition de consistance :

$$\begin{cases} \alpha_2 = 1 - \alpha_1 + \left(\frac{1}{2} - \alpha_1\right) \frac{\Delta t_1}{\Delta t_2} - \frac{\gamma_2}{2} \left(1 + \frac{\Delta t_1}{\Delta t_2}\right) \\ \alpha_3 = \left(\alpha_1 - \frac{1}{2}\right) \frac{\Delta t_1}{\Delta t_2} + \frac{\gamma_2}{2} \left(1 + \frac{\Delta t_1}{\Delta t_2}\right) \end{cases} \quad (\text{III. 22})$$

Plusieurs schémas, résumés dans le tableau suivant (Tab. 1), sont obtenus suivant la valeur des différents coefficients.

	α_1	α_2	α_3	γ_2	β_1
Lees	1/3	1/3	1/3	1/2	-1/2
Dupont-Dupont	1/4	0	3/4	1	0
Dupont Implicite	0	0	1	3/2	1/2
Cranck-Nicholson	0	1/2	1/2	1	0

Tableau 1 : Valeur des coefficients pour différents types de schéma

Soyris ayant observé la supériorité du schéma Dupont implicite, il a été implémenté dans FEMCAM. Il conduit donc à résoudre l'équation suivante (III. 23) :

$$\left(\frac{\gamma_2}{\alpha_3 \Delta t_2} + Diff\right) C^* = Q + \left[\left(\frac{\alpha_1 \gamma_3}{\alpha_3 \Delta t_2} - \frac{\beta_1}{\Delta t_1}\right) C_X^{n-1} + \left(\frac{\alpha_2 \gamma_2}{\alpha_3 \Delta t_2} - \frac{\beta_1}{\Delta t_1} - \frac{\gamma_1}{\Delta t_2}\right) C_X^n \right] \quad (\text{III. 23})$$

où C^* est donné par l'équation (III. 18).

III.2.3.c. Validation sur un cas test

Afin de valider l'implémentation dans FEMCAM du modèle tridimensionnel de diffusion, il nous faut le vérifier sur un cas simple dont on connaît la solution analytique afin de pouvoir comparer les résultats numériques obtenus avec les résultats analytiques connus.

III.2.3.c.i. Présentation du cas test

Nous allons considérer un parallélépipède de longueur 500mm dans la direction x, de hauteur 10mm dans la direction z et de profondeur 10mm dans la direction y (Fig. 7).



Figure 7 : Géométrie utilisée pour le cas test

Le repère est positionné de telle façon que x varie de -250mm à +250mm, y de -5mm à +5mm et z de 0 à 10mm. Nous allons imposer une concentration aux nœuds différente selon la

position de ces nœuds. En effet, si le nœud a une coordonnée x inférieure à 0 alors on lui applique une concentration initiale de 100 mol/L et ce quelles que soient ses coordonnées y et z , sinon on applique une concentration initiale de 50 mol/L. Pour obtenir la meilleure interface possible entre les deux milieux ainsi définis, on maille plus finement le centre de la pièce avec des éléments ayant une taille de maille de 2 mm tandis que le reste est de 3,3 mm (Fig. 8).

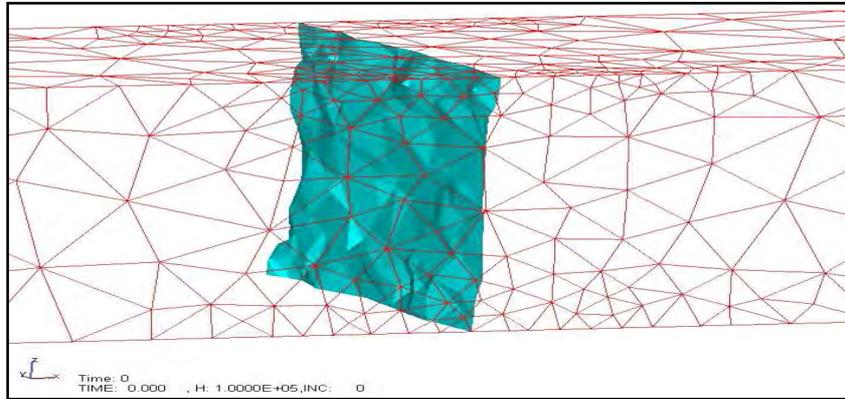


Figure 8 : Surface séparatrice des deux milieux du parallélépipède

Nous imposons un coefficient de diffusion unique dans toute l'éprouvette qui est de $10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}$. Avec ce cas, nous pouvons considérer que nous sommes dans le cas d'un problème unidimensionnel qui admet une solution elle aussi unidimensionnelle. On peut alors négliger les phénomènes locaux de diffusion dans les directions y et z qui ne sont que des effets purement numériques dû au caractère non structuré du maillage et considérer que la diffusion se fait quasi exclusivement dans la direction x .

III.2.3.c.ii. Solution analytique

On peut considérer qu'à l'instant $t = 0\text{s}$, on accole par leurs surfaces (plan d'abscisse nulle) deux milieux semi infinis de concentrations initiales respectives C_1 et C_2 . Ces deux milieux ont le même coefficient de diffusion D . Il s'établit dans les milieux un profil de concentration évoluant au cours du temps. Il s'agit donc de résoudre l'équation de diffusion de la matière dans l'éprouvette définie précédemment (III. 24) :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \Delta C = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

avec pour conditions initiales à $t = 0$:

$$C(x \leq 0) = C_0^1 = 100 \text{ mol / L}$$

$$C(x > 0) = C_0^2 = 50 \text{ mol / L} \tag{III. 24}$$

et pour conditions aux limites

$$D \frac{\partial C}{\partial n} = 0 \quad \text{à la surface du domaine}$$

La solution analytique de cette équation est (III. 25) :

Milieu $x \leq 0$:

$$C_1(x,t) = C_i + (C_0^1 - C_i) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (\text{III. 25})$$

Milieu $x > 0$:

$$C_2(x,t) = C_i + (C_0^2 - C_i) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

où erf est la fonction erreur définie par (III. 26) :

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du \quad (\text{III. 26})$$

Si le contact entre les deux solides est parfait, c'est-à-dire s'il a lieu sur la totalité des surfaces réelles des deux milieux (ce qui est bien le cas dans notre cas test étant donné que l'on travaille dans une seule et même éprouvette), on peut écrire l'égalité des flux de concentration à l'interface (III. 27) :

$$\left| \frac{\partial C_1}{\partial t} \right| = \left| \frac{\partial C_2}{\partial t} \right| \Rightarrow \frac{(C_1 - C_i)}{2\sqrt{Dt}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} = -\frac{(C_2 - C_i)}{2\sqrt{Dt}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \quad (\text{III. 27})$$

On en déduit alors la concentration à l'interface (III. 28) :

$$C_i = \frac{C_1 + C_2}{2} \quad (\text{III. 28})$$

Dans notre cas test, la concentration à l'interface est donc égale à 75 mol/L.

Dans ce qui va suivre, les résultats obtenus par simulation numérique avec un schéma à deux pas de temps Dupont implicite seront comparés à la solution analytique.

III.2.3.c.iii. Comparaison des solutions analytiques et numériques

En traçant le profil de concentration selon l'axe des abscisses au cours du temps, on obtient (Fig. 9):

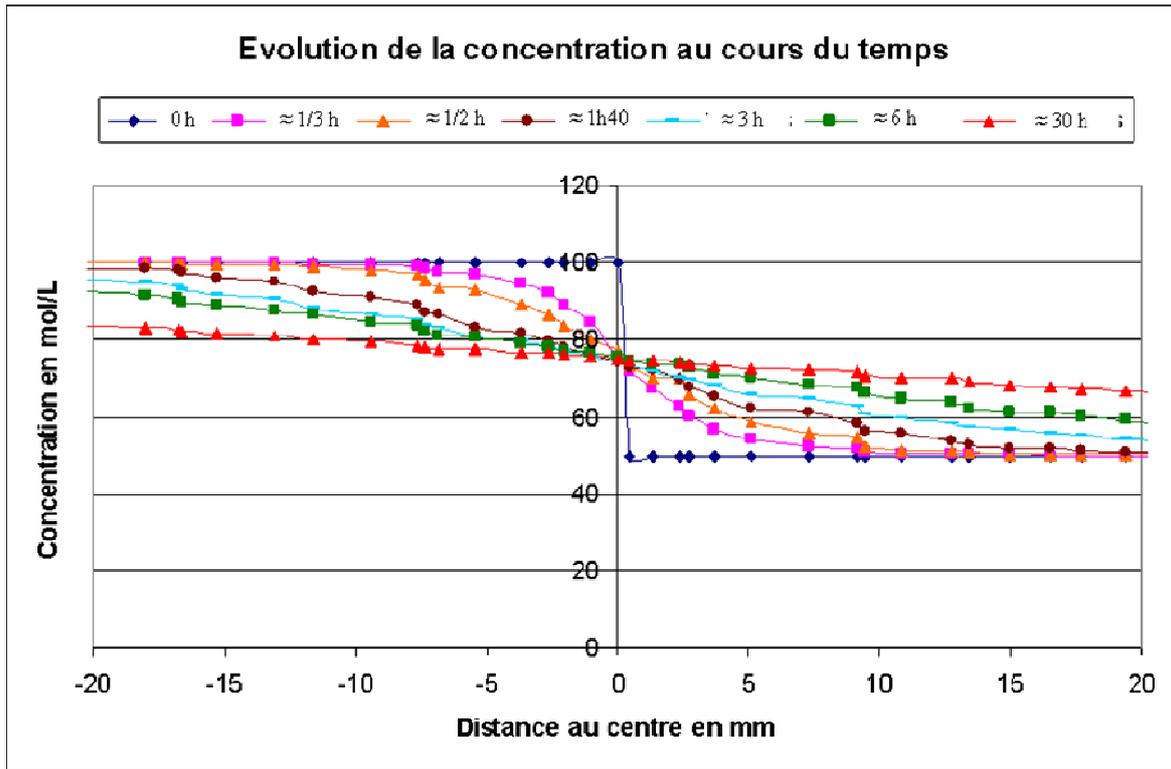


Figure 9 : Evolution de la concentration (mol/L) en fonction du temps pour $D = 10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}$

Il s'établit dans les deux milieux un profil de concentration évoluant au cours du temps mais tel que la concentration C_i à l'interface reste constante. En effet, dans le cas contraire, si C_i augmentait (respectivement diminuait), on arriverait à la situation paradoxale où la concentration du milieu le plus concentré (respectivement le moins concentré) augmenterait (respectivement diminuerait) au contact d'un milieu moins concentré (respectivement plus concentré). Ce profil correspond à l'évolution linéaire que l'on observe avec le post processeur de l'outil numérique (Fig. 10) :

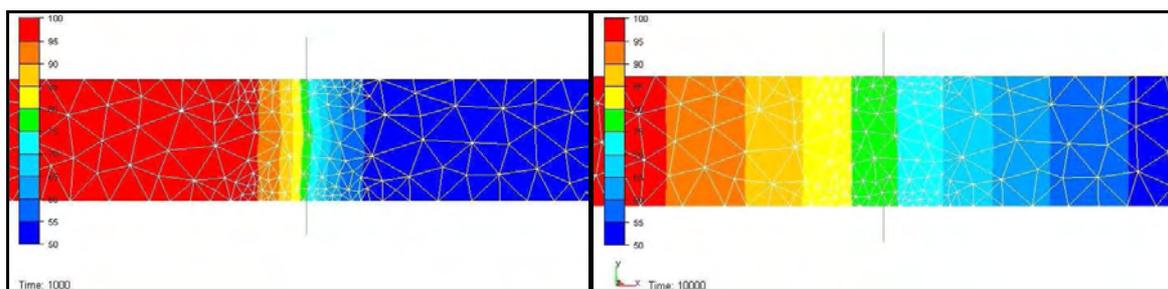


Figure 10 : Visualisation de l'évolution de la concentration (mol/L) dans l'éprouvette à deux instants différents pour $D=10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}$

Sur ces images, le trait gris représente la zone d'abscisse nulle. On remarque que dès le premier pas de temps ($t = 1000 \text{ s}$), la concentration à l'interface des deux milieux est bien de 75 mol/L . Puis la concentration évolue linéairement dans chacun des deux milieux. Nous allons maintenant comparer la solution analytique et les résultats numériques. Pour cela, nous choisissons de regarder l'évolution de la concentration en $x = 5 \text{ mm}$ et en $x = -5 \text{ mm}$ au cours du temps (Fig. 11).

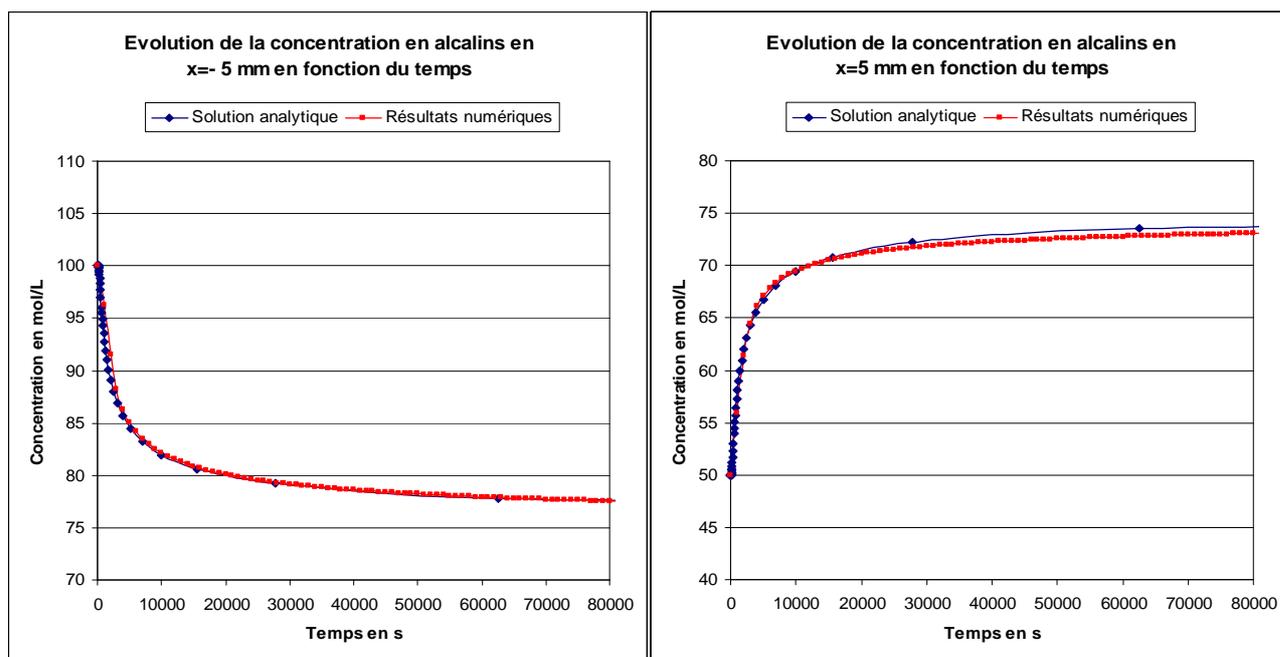


Figure 11 : Comparaison entre solution analytique et résultats numériques en deux points de l'éprouvette

Nous remarquons que sur chacun des deux graphiques, les courbes se superposent très bien. Il est à noter que l'état d'équilibre ne sera atteint qu'au bout d'un temps extrêmement long.

Ceci nous permet de valider l'implémentation de l'équation de diffusion dans l'outil numérique.

III.3. Etude paramétrique du modèle physico-chimique

Dans cette section, deux points importants vont être abordés. Tout d'abord, nous effectuerons un référencement des paramètres utilisés par le modèle chimique de la réaction alcali-silice et nous discuterons de leur accessibilité. Ensuite, plusieurs études de sensibilité seront présentées afin de s'assurer de la robustesse du modèle.

III.3.1. Référencement des différents paramètres d'entrée utilisés par le modèle et des paramètres visualisables en fin de calcul

Une fois la mise en donnée géométrique d'un cas (dimension, géométrie, maillage) effectuée grâce au pré processeur de l'outil numérique, il faut aussi fournir au modèle un certain nombre de données. Les paramètres du modèle vont être divisés en trois catégories distinctes : ceux pour lesquels il est facile d'obtenir des données que ce soit par la littérature ou bien par l'expérience, ceux difficilement accessibles par l'expérience et dont les données présentes dans la littérature sont controversées et enfin ceux qu'il va falloir identifier grâce au modèle numérique.

III.3.1.a. Les données accessibles

Les données accessibles sont en premier lieu les concentrations initiales en alcalins et en silice. Celle en alcalins pourra être déterminée grâce à la composition du ciment utilisé et à sa quantité. Nous prendrons comme référence le pourcentage de la teneur en alcalins équivalents du ciment qui se calcule ainsi (III. 29) :

$$Na_2O_{eq} = Na_2O + 0,658K_2O \quad (III. 29)$$

où Na_2O et K_2O sont respectivement les teneurs en oxyde de sodium et en oxyde de potassium. La concentration en silice sera calculée en fonction de la quantité de granulats réactifs utilisée, de la masse molaire de la silice et de sa masse volumique. Il est à noter que dans le modèle, les concentrations seront exprimées en mol/mm³.

Une autre donnée facilement déterminable est la granulométrie utilisée c'est-à-dire la composition du squelette granulaire pour des agrégats de diamètre supérieure à 7,5 mm, mais aussi le pourcentage de granulats réactifs dans ce squelette.

III.3.1.b. Les données en discussion

Il y a tout d'abord le coefficient stœchiométrique λ de la réaction alcali-silice qui est le plus souvent dans la littérature égal à 1, c'est-à-dire que l'on considère qu'une mole d'alcalins réagit avec une mole de silice afin de former une mole de gel, mais certaines descriptions des mécanismes réactionnels de la RAS définissent plutôt ce coefficient comme égal à 2.

Les coefficients de diffusion apparents des alcalins dans les différents domaines sont aussi des paramètres à déterminer. Il faut définir le coefficient de diffusion apparent des alcalins dans la pâte de mortier, dans les granulats non réactifs et dans les granulats réactifs. Ces coefficients sont difficiles à estimer correctement par l'expérience car ils doivent rendre compte à la fois des phénomènes de diffusion pure mais aussi des phénomènes de transport. Toutefois, il est possible de trouver dans la littérature de bons ordres de grandeur de ce coefficient dans une pâte de mortier. Il est à noter que dans le modèle, les coefficients de diffusion seront exprimés en mm²/s.

III.3.1.c. Les données à identifier grâce au modèle numérique

En premier lieu, il y a la constante cinétique qui rend compte de la cinétique de la réaction alcali-silice. Ce paramètre, que l'on peut qualifier de nouveau étant donné qu'il n'est présent dans aucun autre modèle actuellement, pourra être identifié par le modèle numérique en balayant une large gamme de valeurs et en comparant les résultats numériques obtenus sur la consommation du nombre de moles de silice au cours de la réaction avec les résultats expérimentaux dont nous disposons.

Il y a aussi la concentration limite en alcalins. Ce seuil à partir duquel la réaction débute dans les granulats est souvent admis par les auteurs mais aucune donnée fiable n'existe à ce sujet. Ce paramètre pourra donc faire l'objet d'une étude de sensibilité pour mieux en comprendre son influence.

III.3.1.d. Les données accessibles et visualisables en sortie

Grâce à l'implémentation du modèle chimique de la réaction alcali-silice dans l'outil numérique FEMCAM, un certain nombre de résultats vont pouvoir être obtenus, soit sous forme de données brutes par le stockage dans des fichiers soit visualisables par le biais du post processeur de l'outil numérique. Ces données sont :

- ✓ les cartes de concentrations au cours du temps des différentes espèces dans la pièce modélisée ;
- ✓ les quantités consommées de chaque espèce ;
- ✓ les variations molaires de chaque espèce ;

- ✓ la visualisation des zones ayant réagi dans les granulats ;
- ✓ l'avancement de la réaction alcali-silice.

L'accès à de nombreuses données mécaniques sera aussi possible mais nous les présenterons en détail plus loin dans le manuscrit.

III.3.2. Etudes de sensibilité

III.3.2.a. Le cas test numérique

Tous les tests qui vont être présentés dans la suite de cette section ont été réalisés sur le même cas numérique. Il s'agit d'une éprouvette parallélépipédique de dimension 7*7*14 cm avec un plan de symétrie selon l'axe x (Fig. 12) :

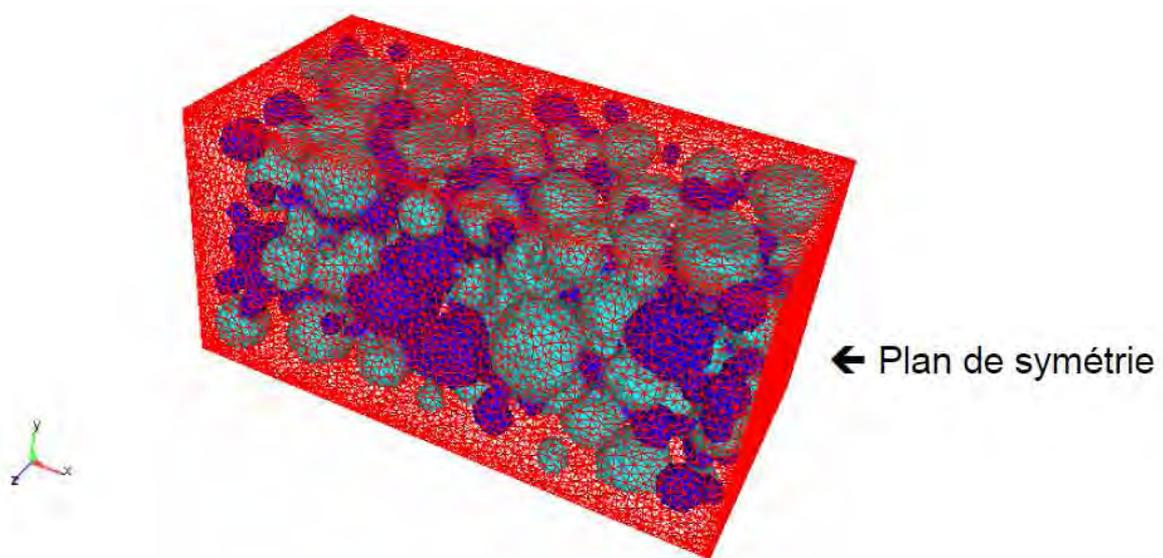


Figure 12 : Représentation de la géométrie de l'éprouvette ainsi que de son squelette granulaire

Le maillage de l'éprouvette représentée est composé de 288539 éléments tétraédriques et de 54711 nœuds. Le squelette granulaire est composé de 315 granulats avec la granulométrie suivante (Tab. 2) :

Diamètre des granulats en mm	22,5	18	14,2	11,25	9	7,15
Nombre de granulats composant la classe granulaire	4	32	52	45	64	118

Tableau 2 : Distribution granulaire

Le pourcentage de granulats réactifs étant de 50%, nous voyons sur la figure précédente en turquoise les granulats considérés comme réactifs et en bleu foncé ceux qui sont non réactifs.

III.3.2.b. Sensibilité au pas de temps

Un point très important à vérifier d'un point de vue numérique est la sensibilité du modèle vis-à-vis du pas de temps choisi. Pour cela nous avons étudié la sensibilité du modèle en fonction de trois pas de temps différents. Sachant que la réaction alcali-silice est une

réaction extrêmement lente et qui se déroule sur des temps très grands même dans le cas d'essais accélérés en laboratoire, les trois pas de temps choisis sont : 42 heures, ½ semaine et enfin 1 semaine. La figure suivante présente l'influence du pas de temps sur la consommation du nombre de moles d'alcalins en fonction du temps de réaction (Fig. 13) :

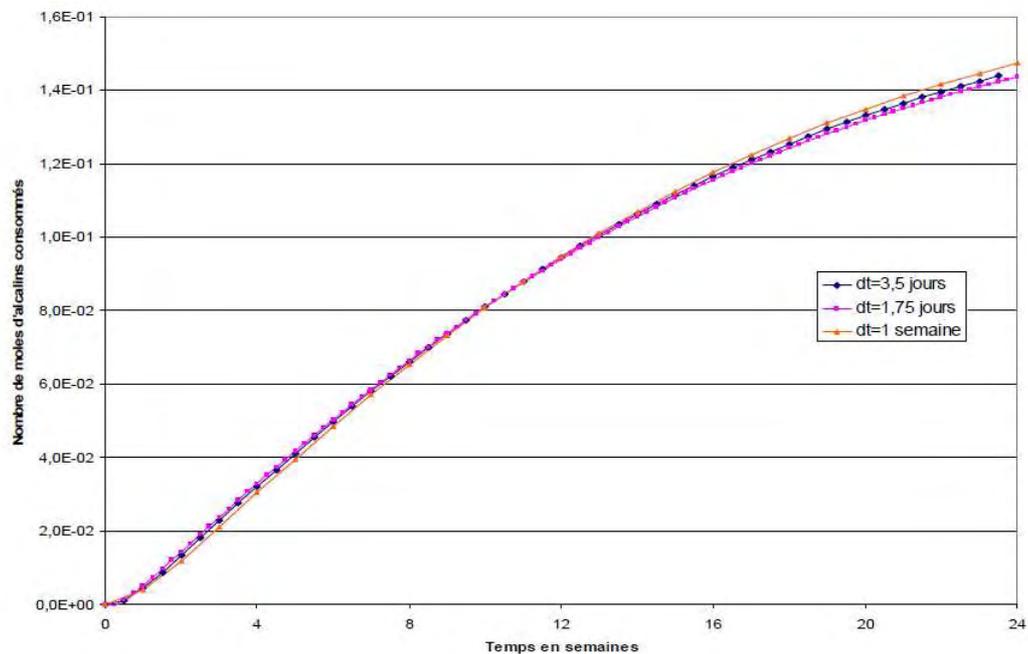


Figure 13 : Evolution du nombre de moles d'alcalins consommées en fonction du temps

Nous pouvons constater que le pas de temps n'a aucune influence sur la consommation des alcalins au cours du temps. Si l'on s'intéresse maintenant à la consommation du nombre de moles de silice au cours du temps (Fig. 14) :

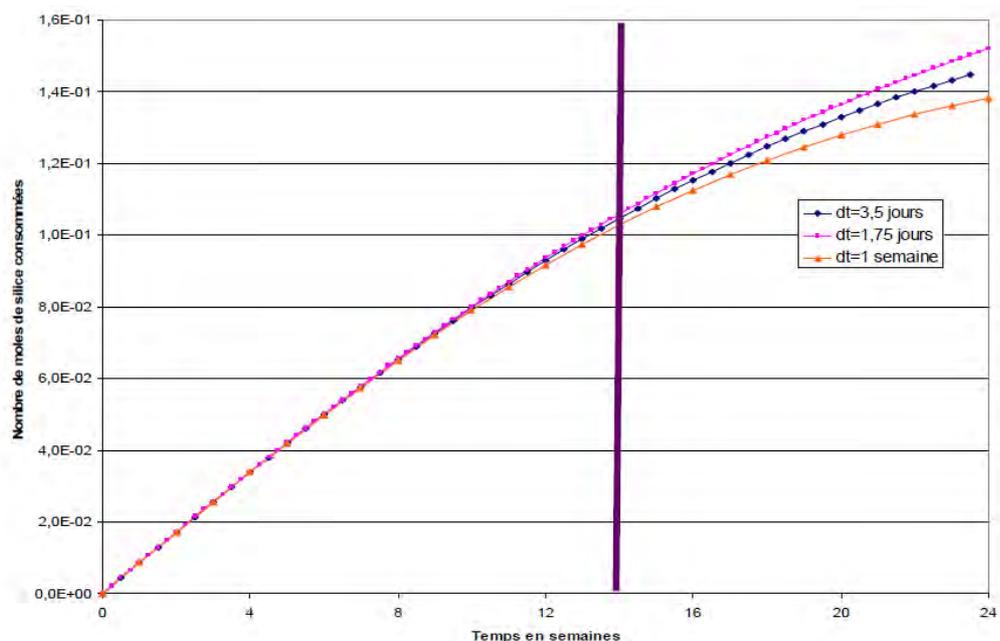


Figure 14 : Evolution du nombre de moles de silice consommées en fonction du temps

Nous pouvons remarquer que la dépendance est un petit peu plus marquée notamment en fin de réaction. Ceci est dû à l'intégration numérique de l'équation différentielle qui régit la disparition de la silice au cours du temps. Avant 14 semaines de mise en autoclave, il n'y a aucune dépendance par rapport au pas de temps choisi et c'est bien là le plus important étant donné qu'après il est observé expérimentalement que la réaction n'évolue plus de façon significative.

III.3.2.c. Sensibilité à la constante cinétique

La constante cinétique va en premier lieu influencer la consommation de la silice, plus ou moins rapide en fonction de la valeur choisie. Cela va donc aussi se répercuter sur la consommation d'alcalins au cours du temps et donc sur la vitesse de réaction. Afin de mieux comprendre l'impact de cette constante, nous avons testé une large gamme de valeurs comprises entre 10^{-2} et 10^{-10} s^{-1} puis nous avons regardé son influence sur le nombre de moles d'alcalins dans l'éprouvette (Fig. 15).

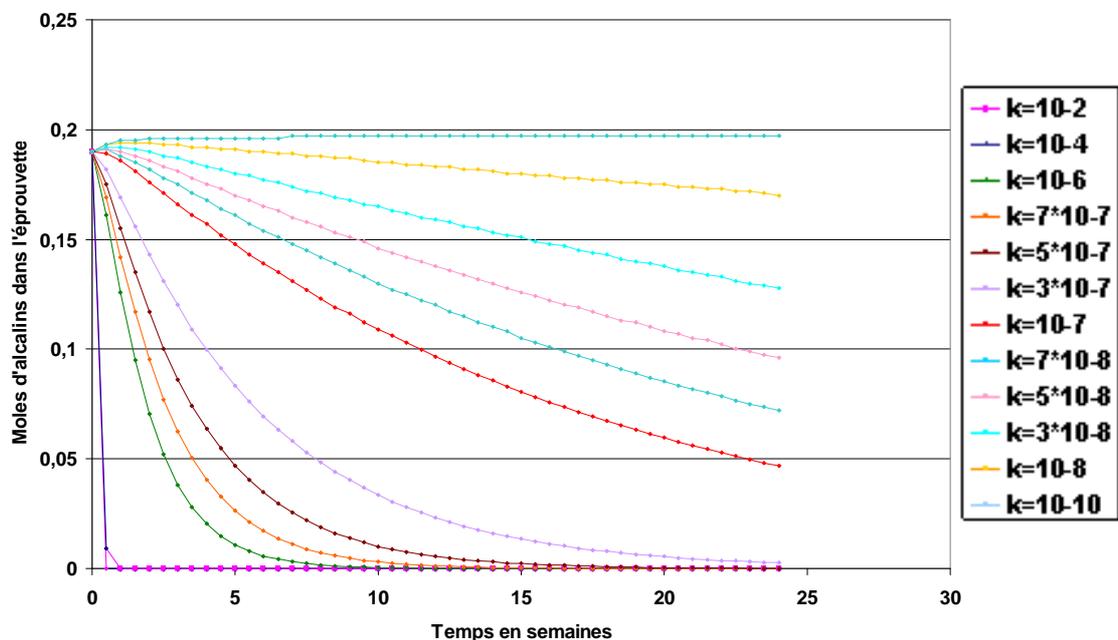


Figure 15 : Nombre de moles d'alcalins dans l'éprouvette en fonction du temps

Au cours de la réaction alcali-silice, les alcalins disparaissent puisqu'ils sont consommés. Plus la constante cinétique est élevée, plus les alcalins disparaissent rapidement. Nous retrouvons la même tendance pour la disparition de la silice au cours du temps.

III.3.2.d. Le coefficient stœchiométrique

Afin de vérifier que le modèle prend bien en compte la stœchiométrie imposée, nous avons testé deux valeurs de coefficient stœchiométrique habituellement trouvés dans la littérature à savoir 1 et 2. Ce test a été réalisé pour une constante cinétique prise arbitrairement égale à 5.10^{-9} s^{-1} . La figure suivante présente l'évolution du nombre de moles de silice consommées en fonction du nombre de moles d'alcalins consommées (Fig. 16) :

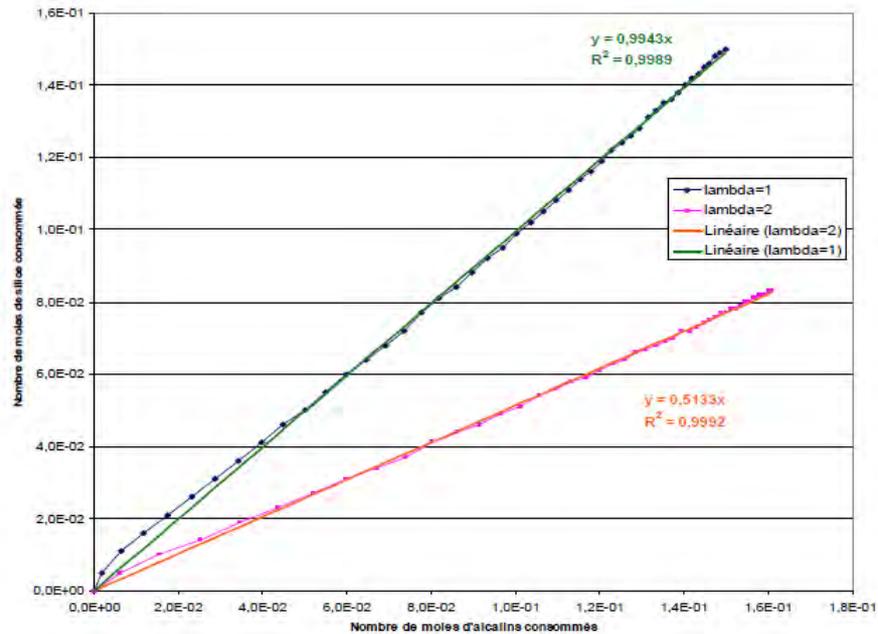


Figure 16 : Nombre de moles de silice consommées en fonction du nombre de moles d'alcalins consommés

Pour un coefficient stœchiométrique égal à 1, la pente de la droite est quasiment égale à 1. Pour un coefficient stœchiométrique égal à 2, la pente de la droite directrice est très proche de 0,5 ce qui traduit bien le fait que deux moles d'alcalins réagissent avec 1 mole de silice pour former les produits gonflants de la réaction. Cela signifie que le modèle respecte bien la stœchiométrie de la réaction.

III.3.2.e. Sensibilité au maillage

Comme il a été présenté dans la section III.1.2.c de ce chapitre, le maillage et plus particulièrement la taille de maille joue un rôle très important dans la génération de la structure mésoscopique du matériau béton. Ceci peut donc entraîner une petite variation sur la quantité de silice présente dans la pièce en début de réaction mais nous n'observons pas d'impact sur le déroulement de la réaction ensuite comme le montre la figure suivante qui présente l'avancement de la réaction (définie comme le rapport entre le nombre de moles de silice consommées et le nombre de moles initial) au cours du temps pour différentes tailles de maille, 2 mm, 3 mm et 4 mm (Fig. 17). Il est à noter que nous ne pouvons pas augmenter plus la taille de maille du maillage de l'éprouvette sinon le squelette granulaire ne peut plus être généré.

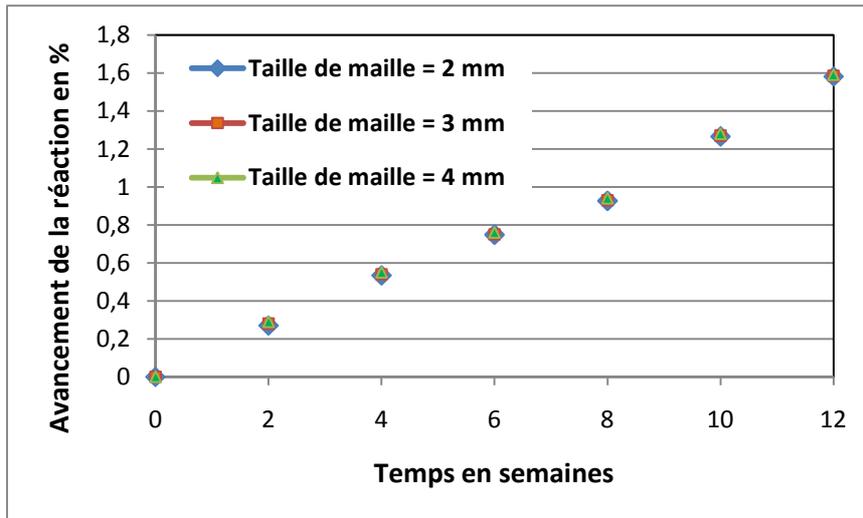


Figure 17 : Avancement de la réaction en fonction du temps pour différentes tailles de maille

Le modèle physico-chimique implémenté dans l'outil numérique FEMCAM ne présente pas de sensibilité particulière à la taille de maille.

III.4. Conclusions

Ce chapitre a permis de faire une présentation de l'outil numérique FEMCAM ainsi que la manière dont est modélisée la structure hétérogène du matériau béton. Mais le point le plus important est bien sûr la description du modèle analytique élaboré pour rendre compte de la chimie de la réaction alcali-silice. Ce modèle a été implémenté dans FEMCAM et sa résolution numérique présentée en détail. Ce chapitre a aussi été l'occasion de lister les paramètres nécessaires à la résolution du modèle et d'en présenter les principales caractéristiques (Tab. 3).

Types de données	Noms des données utilisateurs	Signification
Création de la structure mésoscopique du béton	Nb_granulats	Nombre de granulats à générer pour le squelette
	Nb_classe_granulaire	Nombre de classes granulaires présentes dans le squelette
	Diam	Diamètre des grains de chaque classe granulaire
	Nb_classe	Nombre de grains à générer pour chaque classe granulaire
Paramètres du modèle chimique de représentation de la réaction alcali-silice	$[Na^+]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en alcalins dans la pâte de mortier
	$[Na^+]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en alcalins dans les agrégats
	$[SiO_2]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en silice dans la pâte de mortier
	$[SiO_2]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en silice dans les agrégats
	C_{limite}	Concentration seuil en alcalins
	K	Constante cinétique
	λ	Coefficient stœchiométrique
	$D_{apparente}^{PM}$	Coefficient de diffusion apparente de la pâte de mortier
	$D_{apparente}^{Ag}$	Coefficient de diffusion apparente des agrégats
% RAS	Pourcentage de granulats réactifs dans le squelette	

Tableau 3 : Paramètres du modèle physico-chimique de représentation de la RAS

Le point important est que ce modèle est indépendant du pas de temps utilisé mais aussi du maillage de l'éprouvette. Nous avons aussi vu l'influence des paramètres principaux vis-à-vis de la réaction et surtout celle de la constante cinétique, principale innovation du modèle élaboré.

Références bibliographiques

Comby, I., 2006, *Development and validation of a 3D computational tool to describe damage and fracture due to alkali silica reaction in concrete structures*, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

De Larrard, F., 1999, *Concrete mixture-Proportionning – A scientific approach*, Modern Concrete Technology series, n°9, E & FN SPON, Londres.

Soyris, N., 1990, *Modélisation tridimensionnelle du couplage thermique en forgeage à chaud*, Thèse de doctorat, Ecole nationale Supérieure des Mines de Paris.

CHAPITRE IV :
MODELISATION NUMERIQUE DU COMPORTEMENT
MECANIQUE DU BETON

IV.1. ETAT DE L'ART DES CODES DE CALCUL MODELISANT LE COMPORTEMENT MECANIQUE DU BETON	65
IV.1.1. Le code CESAR-LCPC.....	65
IV.1.2. Le code SYMPHONIE (CSTB).....	66
IV.1.3. L'outil numérique AMIE de l'EPFL.....	67
IV.2. MODELE DE COMPORTEMENT MECANIQUE DU BETON ET RESOLUTION NUMERIQUE	69
IV.2.1. Le modèle élastique endommageable de Mazars pour le mortier.....	69
IV.2.2. Résolution numérique du problème	71
IV.2.2.a. Evaluation de l'endommagement.....	71
IV.2.2.b. Calcul de la contrainte et du module tangent	71
IV.2.3. Identification des paramètres du modèle de Mazars	73
IV.2.3.a. Méthode d'analyse inverse.....	73
IV.2.3.b. Paramètres à identifier et études de sensibilité	74
IV.2.3.b.i. Le seuil d'endommagement ε_{D0}	76
IV.2.3.b.ii. Les coefficients A	76
IV.2.3.b.iii. Les coefficients B	77
IV.2.3.c. Identification des paramètres pour la modélisation numérique du béton.....	77
IV.3. AVANTAGES ET LIMITES DE LA MODELISATION DU BETON DANS FEMCAM	79
IV.3.1. Les avantages du modèle	79
IV.3.1.a. L'outil numérique FEMCAM	79
IV.3.1.b. Indépendance au maillage	79
IV.3.1.c. Evolutions possibles	80
IV.3.2. Les limites du modèle	80
IV.3.2.a. Les hypothèses restrictives.....	80
IV.3.2.b. L'identification des paramètres.....	81
IV.3.2.c. La corrélation entre l'endommagement numérique et expérimental.....	81
IV.4. CONCLUSIONS	81

Le modèle chimique destiné à représenter la réaction alcali-silice a donc été élaboré et implémenté dans l'outil numérique aux éléments finis FEMCAM. Afin d'étudier l'impact des produits de la réaction sur la résistance mécanique du béton, il est nécessaire d'avoir un modèle numérique de représentation du comportement mécanique du matériau. Après une rapide présentation des différents codes de calcul existants pour rendre compte de ces phénomènes, le modèle mécanique implémenté dans FEMCAM sera présenté puis discuté afin d'en faire ressortir à la fois ses points forts et ses limites.

IV.1. Etat de l'art des codes de calcul modélisant le comportement mécanique du béton

Nous nous proposons ici de faire une étude bibliographique des différents codes de calcul modélisant le comportement mécanique du béton et intégrant un module de représentation de la réaction alcali-silice. La liste qui va suivre n'est bien sûr pas exhaustive mais elle permettra de mieux situer notre approche par rapport à ce qui existe.

IV.1.1. Le code CESAR-LCPC

CESAR-LCPC est un code de calcul par éléments finis principalement dédié aux problèmes de génie civil [Humbert, 2005]. Il a été développé par le LCPC (Laboratoire Central des Ponts et Chaussées). Ce code de calcul est composé par les logiciels de pré- et post-traitement CLEO2D et CLEO3D (respectivement pour les modélisations bi- ou tridimensionnelles) et par le solveur fondé sur la méthode des éléments finis CESAR. Le solveur CESAR est principalement organisé en modules, familles et bibliothèques, chaque composant logiciel effectuant une fonction bien déterminée (Fig. 1).

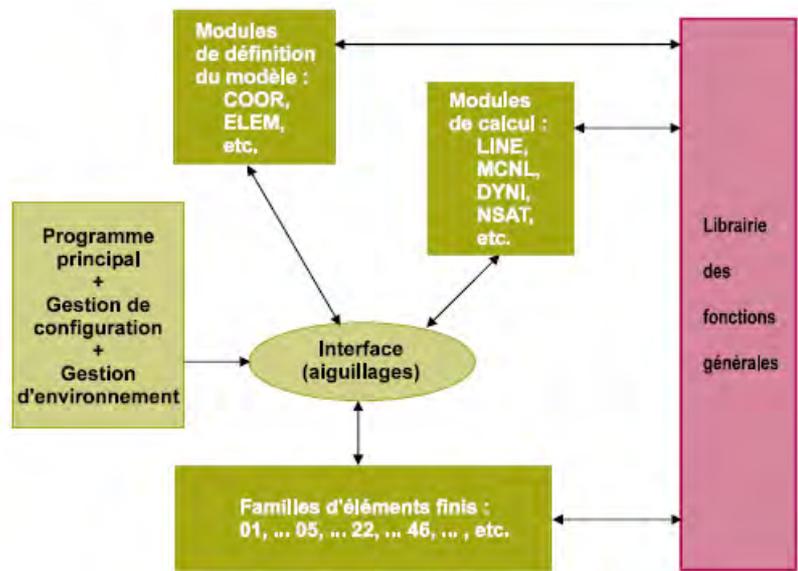


Figure 1 : Architecture générale du solveur CESAR [Humbert, 2005]

Les modules de définition servent à faire reconnaître la modélisation par le solveur (la modélisation se définit par sa discrétisation géométrique, les modèles de comportement et les paramètres retenus, la prise en compte des sollicitations et des conditions aux limites, etc.). Le module de calcul qui va plus particulièrement nous intéresser est le module ALKA développé par Li & Coussy [Li, 2002]. S'inspirant des travaux expérimentaux et théoriques de Larive et

al. [Larive, 2000] et Ulm et al. [Ulm, 2000], la méthode de recalcul des ouvrages atteints de RAS proposée par Li & Coussy part du principe que l'avancement de la réaction est mesuré par une variable $\xi \in [0;1]$, 0 correspondant au démarrage de la réaction, et 1 à sa fin par consommation totale de l'un au moins des réactifs. La transformation de ce degré d'avancement en expansion chimico-induite est donnée par (IV. 1) :

$$\varepsilon_{\chi}(t) = \beta \xi(t) \quad (\text{IV. 1})$$

L'évolution au cours du temps de ξ est gouvernée par deux paramètres : τ_l est le temps de latence de la réaction et τ_c est son temps caractéristique. Le modèle d'expansion libre de Larive [Larive, 1997] s'écrit (IV. 2) :

$$\varepsilon_{\chi}(t) = \beta \frac{1 - e^{-\frac{t}{\tau_c}}}{1 + e^{-\frac{\tau_l - t}{\tau_c}}} \quad (\text{IV. 2})$$

Les valeurs de gonflement asymptotique β et des temps τ_c et τ_l sont fortement corrélées à l'état thermohydrique du béton. On les mesure pour un état de référence correspondant à une température T_0 et une humidité relative h_0 sur des éprouvettes cylindriques en expansion libre. Leurs valeurs pour un état hydrique quelconque (T, h) sont alors déterminées par les lois présentées par Larive et al. [Larive, 2000] et Li et al. [Li, 2000].

Connaissant β , τ_c et τ_l pour l'état de référence (T_0, h_0) , la première étape du recalcul d'une structure soumise à la RAS consiste à déterminer les champs d'humidité relative $h(t, x)$ et de température $T(t, x)$ où $t \in [0; t_F]$ est le temps et x représente la position d'un point dans la structure. D'un point de vue pratique, ces champs sont calculés à l'aide du module de diffusion non-linéaire du logiciel CESAR-LCPC.

Ces champs sont alors utilisés comme données d'entrée pour le module ALKA qui calcule pour chaque x dans la structure et chaque instant t_i la valeur du degré d'avancement de la réaction $\xi(t, x)$ et celle du gonflement imposé ε_{χ} .

Pour le couplage chimico-mécanique, le module ALKA propose deux lois de comportement pour le béton affecté par la RAS : un modèle élastique et un modèle plastique basé sur le critère de William-Warnke [Li, 2002].

Ce code de calcul permet de modéliser de nombreux phénomènes liés au génie civil et il intègre un module particulier qui vise à modéliser un béton soumis à la réaction alcali-silice à l'échelle de la structure.

IV.1.2. Le code SYMPHONIE (CSTB)

Le code éléments finis Symphonie, mis au point au CSTB (Centre Scientifique et Technique du Bâtiment), possède une large bibliothèque d'éléments uni, bi et tridimensionnels pour la résolution des problèmes de mécanique statique et dynamique, de thermique stationnaire et transitoire et de problèmes couplés thermo-hygro-mécanique pour des milieux saturés ou non saturés [Obeid, 1998]. Il possède une large gamme de solveurs optimisés pour la résolution des grands systèmes symétriques et non symétriques. Le modèle qui nous intéresse plus particulièrement est le modèle Béton Numérique développé par

Mounajed [Mounajed, 2001, 2002]. Il consiste en la génération d'un volume élémentaire représentatif (VER) du béton présentant une distribution aléatoire des granulats et de pores de différentes tailles dans une pâte de ciment. Le matériau béton est généré numériquement comme un matériau multi-phasique comportant une succession de n phases de matériaux distribués spatialement d'une manière aléatoire. Les fractions volumiques des différentes phases et leurs tailles peuvent être choisies par l'utilisateur en s'appuyant sur la granulométrie réelle du béton étudié. La figure suivante (Fig. 2) montre des exemples de maillage du volume élémentaire représentatif en 2 et 3 dimensions.

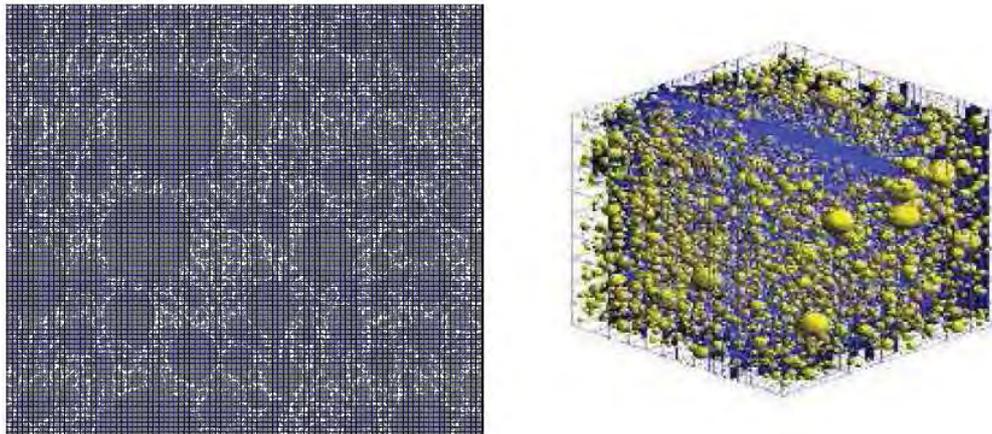


Figure 2 : Maillage en 2D (gauche) et en 3D (droite) d'un VER de béton par le modèle béton Numérique [Mounajed, 2001]

Ce code de calcul comporte aussi un modèle d'endommagement isotrope appelé MODEV. Ung et Mounajed [Mounajed, 2003] [Ung, 2005] ont proposé un modèle d'endommagement qui considère 2 modes d'endommagement mécanique : un endommagement par déformation déviatorique et un endommagement par extension sphérique. Lors d'une sollicitation de compression, seul l'endommagement déviatorique est activé et lors d'un chargement en traction, les deux modes d'endommagement agissent simultanément, l'endommagement sphérique influençant l'endommagement déviatorique. Pour la formulation du modèle, le mécanisme d'endommagement est supposé gouverné par trois énergies de déformation : l'énergie de déformation élastique totale, l'énergie de distorsion pour prendre en compte le phénomène de glissement entre les lèvres des micro-fissures et l'énergie de déformation volumique. Du point de vue microscopique, ce sont les micro-fissures et les micro-vides qui sont principalement responsables des mécanismes irréversibles d'endommagement et de déformation.

Ce code de calcul se place à une échelle microscopique, il permet de modéliser une microstructure hétérogène dans un volume élémentaire représentatif. De plus, il présente un module d'endommagement intéressant puisqu'il prend en compte les micro-fissures.

IV.1.3. L'outil numérique AMIE de l'EPFL

Le modèle développé à l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) permet de modéliser les dégradations micro-mécaniques engendrées par la réaction alcali-silice [Dunant, 2009] par le biais de l'outil numérique aux éléments finis AMIE. Cet outil intègre une librairie géométrique, un mailleur, une librairie d'éléments finis, des solveurs et un post processeur. Pour simuler la réaction alcali-silice, le protocole est le suivant :

- d'après une distribution granululaire, les agrégats sont générés et placés dans une éprouvette ;
- dans chaque agrégat, des zones réactives sont générées et placées ;
- l'outil numérique génère ensuite la représentation discrète du problème (Fig. 3) ;

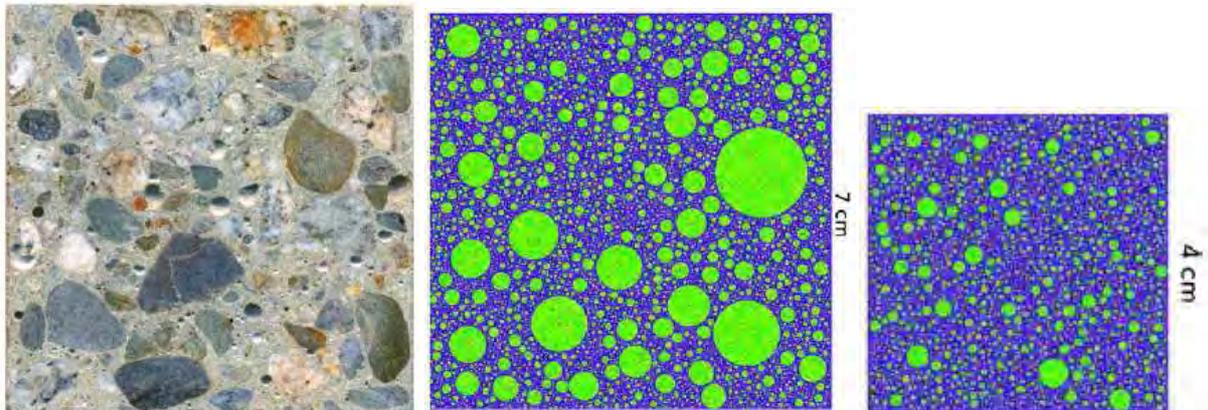


Figure 3 : Béton simulé (gauche), structure du béton (centre) et structure d'un mortier (droite) [Dunant, 2009]

- à chaque pas de temps, les conditions aux limites sont appliquées et les zones réactives contenant le gel silico-alcalin gonflent d'après des données expérimentales ;
- l'endommagement causé par cette expansion est calculé et les propriétés macroscopiques sont ajustées.

L'endommagement est causé par un réseau dense de fissures. A cause du nombre élevé de fissures, des précautions particulières doivent être prises pour que leur propagation corresponde à une énergie globale minimale. Cette approche conduit à simuler un réseau de fissures qui est qualitativement proche de celui observé expérimentalement (Fig. 4).

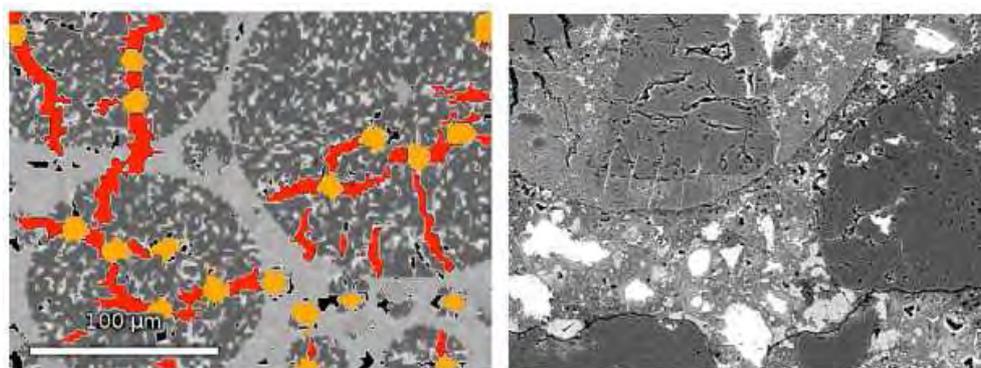


Figure 4 : Chemin de fissuration généré par la modèle de représentation de la réaction alcali-silice (gauche) et comparaison avec une image microscopique à la même échelle d'un agrégat (droite) [Dunant, 2009]

L'originalité de ce modèle réside dans le fait que les poches de gel sont explicitement considérées donc l'endommagement dans les agrégats et dans la pâte de mortier provient directement de la mésostructure numérique.

Ce modèle se place à une échelle microscopique et pour l'instant les calculs numériques n'ont été réalisés qu'en 2D sur des mortiers.

Cette revue non exhaustive des codes de calcul permettant de modéliser le comportement mécanique du béton et éventuellement la réaction alcali-silice nous a permis de montrer que ces modèles se placent soit à l'échelle de la structure soit à l'échelle microscopique. Lorsque les modélisations sont à l'échelle de la structure alors elles imposent un gonflement global, souvent déterminé expérimentalement, pour calculer la perte des propriétés mécaniques au cours de la réaction. Lorsque l'échelle est microscopique, là aussi le gonflement imposé est issu de données expérimentales mais l'objectif est plutôt de rendre compte des microfissurations induites par la réaction. Notre approche est intermédiaire puisqu'elle se situe à une échelle mésoscopique et que l'outil numérique FEMCAM est tridimensionnel. Le gonflement imposé dans notre modèle sera certes identifié grâce à l'expérience mais il dépendra directement de la quantité d'espèces ayant réagi, quantité calculée numériquement grâce au modèle de diffusion / réaction. De plus, nous couplerons ce gonflement à la mécanique afin de prédire les propriétés mécaniques d'une éprouvette soumise à la réaction alcali-silice.

IV.2. Modèle de comportement mécanique du béton et résolution numérique

Dans l'outil numérique FEMCAM, l'échelle mésoscopique a été privilégiée et le béton est donc considéré comme un matériau biphasique composé de granulats agglomérés dans une pâte de mortier. Les agrégats générés comme présenté dans le chapitre III.1.2.b. sont considérés comme ayant un comportement purement élastique, ils ne s'endommagent pas ni ne se fissurent.

Après avoir étudié différentes possibilités pour simuler le comportement mécanique de la pâte de mortier, il a été décidé de considérer un comportement élastique endommageable en s'appuyant sur le modèle de Mazars [Mazars, 1984].

IV.2.1. Le modèle élastique endommageable de Mazars pour le mortier

Ce modèle a pour but de modéliser la modification du comportement élastique du béton à l'aide d'une variable d'endommagement scalaire et isotrope, w , qui affecte la rigidité du matériau.

L'endommagement est piloté par la déformation équivalente $\tilde{\varepsilon}$ qui permet de représenter l'ensemble des déformations subies par le matériau. Comme les déformations en traction sont primordiales dans le phénomène de fissuration du béton, la déformation équivalente introduite est définie à partir des valeurs propres positives du tenseur des déformations soit (IV. 3) :

$$\tilde{\varepsilon} = \sqrt{\sum_{i=1}^3 \langle \varepsilon_i \rangle_+^2} \quad (\text{IV. 3})$$

Sachant que la partie positive $\langle \rangle_+$ est définie de telle sorte que si ε_i est la déformation principale dans une direction alors (IV. 4) :

$$\begin{cases} \langle \varepsilon_i \rangle_+ = \varepsilon_i & \text{si } \varepsilon_i \geq 0 \\ \langle \varepsilon_i \rangle_+ = 0 & \text{si } \varepsilon_i < 0 \end{cases} \quad (\text{IV. 4})$$

Cette déformation équivalente contrôle l'évolution de l'endommagement selon les conditions suivantes (IV. 5) :

$$f(\varepsilon, w) = \tilde{\varepsilon} - N \quad (\text{IV. 5})$$

N est la valeur maximale atteinte par $\tilde{\varepsilon}$ durant l'histoire du matériau. L'endommagement w apparait lorsque la déformation équivalente $\tilde{\varepsilon}$ atteint un seuil initialisé à ε_{D0} .

Il a été observé expérimentalement que la réponse mécanique du béton est différente selon qu'on le sollicite en traction ou en compression. La variable d'endommagement w définie par Mazars se décompose donc en deux parties (IV. 6) :

$$w = \alpha_T^\beta w_T + \alpha_C^\beta w_C \quad (\text{IV. 6})$$

Le paramètre β est identifié à partir de la réponse en cisaillement du matériau et on le considère habituellement comme une constante. w_T et w_C sont respectivement la composante en traction et en compression de la variable d'endommagement w . Ces deux composantes sont définies comme suit (IV. 7) :

$$w_{T,C} = 1 - \frac{\varepsilon_{D0}(1 - A_{T,C})}{\tilde{\varepsilon}} - \frac{A_{T,C}}{\exp[B_{T,C}(\tilde{\varepsilon} - \varepsilon_{D0})]} \quad (\text{IV. 7})$$

A_C , A_T , B_C et B_T étant quatre paramètres matériaux à identifier. Les poids α_C et α_T sont quant à eux définis par (IV. 8) :

$$\alpha_C = \sum_{i=1}^3 H_i \frac{\varepsilon_{Ci}(\varepsilon_{Ti} + \varepsilon_{Ci})}{\tilde{\varepsilon}^2} \quad (\text{IV. 8})$$

$$\alpha_T = \sum_{i=1}^3 H_i \frac{\varepsilon_{Ti}(\varepsilon_{Ti} + \varepsilon_{Ci})}{\tilde{\varepsilon}^2}$$

Et les déformations principales $(\varepsilon_i)_{i \in [1,3]}$ vérifient (IV. 9) :

$$\varepsilon_i = \varepsilon_{Ti} + \varepsilon_{Ci} \quad (\text{IV. 9})$$

$H_i = 1$ si $\varepsilon_i \geq 0$, sinon $H_i = 0$. Dans le cas d'une traction pure, $\alpha_C = 0$ et w tend vers w_T ; pour une compression pure, $\alpha_T = 0$ et w tend vers w_C ; enfin pour un chargement mixte, les valeurs de w_T et w_C dépendent de l'amplitude des contraintes et $\alpha_T + \alpha_C = 1$.

La variable d'endommagement w est un scalaire compris entre 0 et 1. Si w est nul alors le matériau est complètement sain et si $w = 1$ alors le matériau est complètement endommagé. Cette variable w fait le lien entre l'endommagement et le comportement mécanique du matériau via les caractéristiques effectives (IV. 10) :

$$\tilde{E} = E_0(1 - w)$$

$$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma_0}{1 - w} \quad (\text{IV. 10})$$

\tilde{E} et $\tilde{\sigma}$ sont respectivement le module d'Young effectif et la contrainte effective. E_0 et σ_0 sont respectivement le module d'Young initial et la contrainte initiale.

IV.2.2. Résolution numérique du problème

IV.2.2.a. Evaluation de l'endommagement

La procédure d'obtention de l'endommagement est simple, elle se décompose ainsi :

- calcul des déformations élastiques pour chaque élément ;
- calcul de la déformation équivalente ;
- si la déformation équivalente est supérieure à la déformation seuil à partir de laquelle l'endommagement apparaît, alors il y a calcul des poids α_C et α_T , calcul des composantes en compression et en traction de l'endommagement pour enfin obtenir la valeur de l'endommagement dans chaque élément du matériau.

IV.2.2.b. Calcul de la contrainte et du module tangent

Un schéma classique d'Euler à 1 pas est utilisé pour calculer la solution au temps $t + \Delta t$. La solution X_t au temps t étant connue, le schéma donne la solution $X_{t+\Delta t}$ au temps $t + \Delta t$ par l'équation suivante (IV. 11) :

$$X_{t+\Delta t} = X_t + \Delta t (X_{t+\Delta t} - X_t) \quad (\text{IV. 11})$$

Δt étant le pas de temps considéré.

Dans le cas d'un comportement élastique pur, le module d'Young reste constant au cours de la simulation et il n'y a pas de variation du module de cisaillement μ et du module de compressibilité χ entre t et $t + \Delta t$. Dans le cas d'un modèle élastique endommageable, le module d'Young dépend de la valeur de l'endommagement. Cela affecte donc les valeurs de μ et χ qui peuvent évoluer et changer entre le temps t et le temps $t + \Delta t$.

Le matériau béton modélisé est considéré comme ayant un comportement élastique endommageable. La déformation élastique ε est reliée au tenseur des contraintes σ par la loi de Hooke (IV. 12) :

$$\sigma = 2\mu\varepsilon + \lambda \text{Tr}(\varepsilon) \text{Id}$$

$$\text{avec} \begin{cases} \mu = \frac{E(w)}{2(1+\nu)} & \text{avec } \mu : \text{module de cisaillement} \\ \lambda = \frac{E(w)\nu}{(1-2\nu)(1+\nu)} & \text{avec } \lambda : \text{coefficient de Lamé} \end{cases} \quad (\text{IV. 12})$$

Id est le tenseur identité et ν le coefficient de Poisson. w est l'endommagement qui affecte le module d'Young pour modéliser la dégradation du matériau. En utilisant la loi de Hooke, on obtient les expressions de la partie sphérique p et de la partie déviatorique s du tenseur des contraintes (IV. 13) :

$$\begin{cases} s = \sigma - \frac{1}{3}Tr(\sigma)Id \\ Tr(\sigma) = (2\mu + 3\lambda)Tr(\varepsilon) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} s = 2\mu e \\ p = -\chi Tr(\varepsilon) \end{cases} \quad (IV. 13)$$

Avec :

$$\chi = \frac{E(w)}{3(1-2\nu)} \quad \text{le module de compressibilité,}$$

$$\text{et } e = \varepsilon - \frac{1}{3}Tr(\varepsilon)Id \quad \text{la partie déviatorique du tenseur des déformations.}$$

Avec ces équations, le tenseur des contraintes est calculé à chaque pas de temps mais aussi le module tangent L (IV. 14) :

$$L^{t+\Delta t} = \left. \frac{\partial s}{\partial \varepsilon} \right|^{t+\Delta t} = -2\tilde{\mu}^0 \frac{\partial w^{t+\Delta t}}{\partial \tilde{\varepsilon}^{t+\Delta t}} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}^{t+\Delta t}}{\partial \varepsilon^{t+\Delta t}} \frac{\partial \varepsilon^{t+\Delta t}}{\partial \dot{\varepsilon}^{t+\Delta t}} e^{t+\Delta t} + 2\Delta t \tilde{\mu}^{t+\Delta t} \frac{\partial \dot{\varepsilon}^{t+\Delta t}}{\partial \dot{\varepsilon}^{t+\Delta t}} \quad (IV. 14)$$

où $\tilde{\mu}^0$ représente le module de cisaillement initial.

La figure suivante (Fig. 5) présente un schéma de l'algorithme utilisé pour résoudre le problème mécanique.

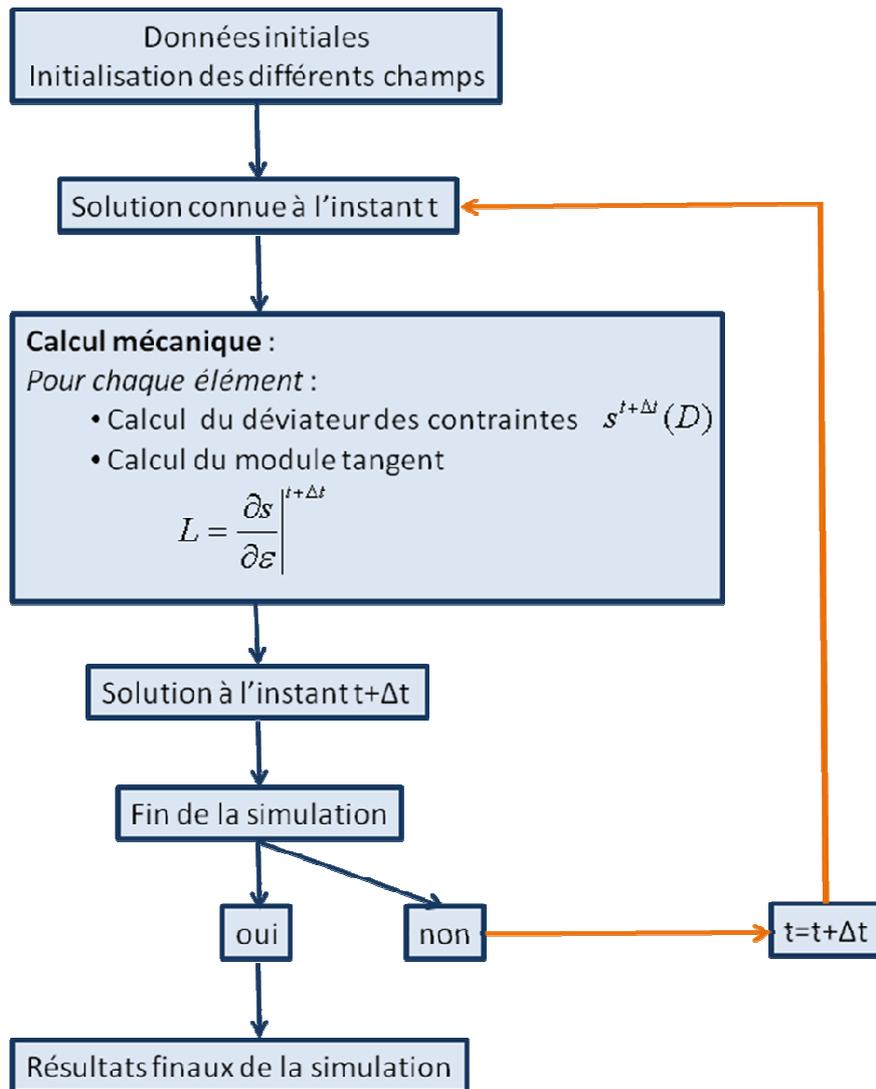


Figure 5 : Schéma de résolution implicite incrémentale par l’algorithme de Newton-Raphson du problème mécanique

A chaque pas de temps, le champ de déformations est actualisé puis le déviateur des contraintes s et le module tangent L sont calculés. Ce dernier est alors utilisé dans l’algorithme de Newton-Raphson.

IV.2.3. Identification des paramètres du modèle de Mazars

IV.2.3.a. Méthode d’analyse inverse

Les paramètres du modèle de Mazars ont été calibrés grâce au module d’analyse inverse « RheOBeton » développé au Cemef. Dans ce module, un algorithme évolutif est utilisé. Les algorithmes évolutifs sont des algorithmes de recherche basés sur le principe du processus d’évolution naturelle. Un algorithme de type stratégie d’évolution est composé de trois éléments essentiels :

- 1) une population constituée de plusieurs individus représentant des solutions potentielles du problème donné ;
- 2) un mécanisme d’évaluation de l’adaptation de chaque individu de la population à l’égard de son environnement extérieur ;

- 3) un mécanisme d'évolution composé d'opérateurs permettant d'éliminer certains individus et de produire de nouveaux individus à partir des individus sélectionnés.

D'un point de vue opérationnel, un algorithme évolutif débute avec une population initiale souvent générée aléatoirement et répète ensuite un cycle d'évolution composé de trois étapes séquentielles :

- 1) mesurer l'adaptation, la qualité de chaque individu de la population par le mécanisme d'évaluation ;
- 2) sélectionner une partie des individus ;
- 3) produire de nouveaux individus par des recombinaisons d'individus sélectionnés.

Ce processus se termine quand la condition d'arrêt est vérifiée, par exemple, quand un nombre maximum de cycles (générations) ou un nombre maximum d'évaluations est atteint. Selon l'analogie de l'évolution naturelle, la qualité des individus de la population devrait tendre à s'améliorer au fur et à mesure du processus. L'utilisation de ce type d'algorithme présente de nombreux avantages notamment le fait qu'un algorithme évolutif utilise des règles de transition probabilistiques pour guider leur recherche. Plus d'informations peuvent être recherchées dans [Peyrot, 2009].

Dans notre cas, les paramètres du modèle de Mazars ont donc été identifiés grâce à des données expérimentales [Comby, 2006] et au module d'analyse inverse « RheOBeton » que l'on peut schématiser ainsi (Fig. 6) :

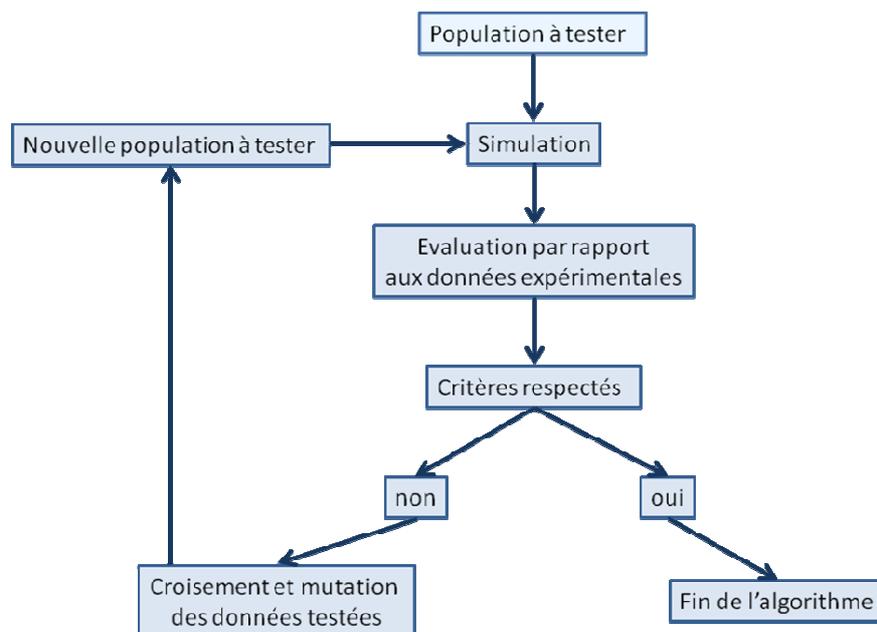


Figure 6 : Module d'analyse inverse

IV.2.3.b. Paramètres à identifier et études de sensibilité

Pour modéliser le comportement mécanique du béton, il faut identifier douze paramètres qui peuvent être divisés en deux groupes : les paramètres élastiques et les paramètres d'endommagement (Tab. 1) :

Paramètres à identifier	
E_{PM}	Module d'Young de la pâte de mortier du béton
ν_{PM}	Coefficient de Poisson de la pâte de mortier du béton
E_A	Module d'Young des agrégats
ν_A	Coefficient de Poisson des agrégats
A_C	Paramètre de Mazars relié à l'évolution de l'endommagement en compression
B_C	Paramètre de Mazars relié à l'évolution de l'endommagement en compression
A_T	Paramètre de Mazars relié à l'évolution de l'endommagement en traction
B_T	Paramètre de Mazars relié à l'évolution de l'endommagement en traction
ϵ_{D0}	Seuil d'endommagement
$\tilde{\epsilon}_C^{crit}$	Seuil de fissuration en compression
$\tilde{\epsilon}_T^{crit}$	Seuil de fissuration en traction

Tableau 1 : Paramètres à identifier pour caractériser complètement le béton

Au vu de ce tableau, trois types de tests ont été réalisés en laboratoire. Des essais de compressions simples et de flexions trois points afin d'identifier les paramètres et un essai « Brésilien » pour valider les résultats obtenus (Fig. 7).

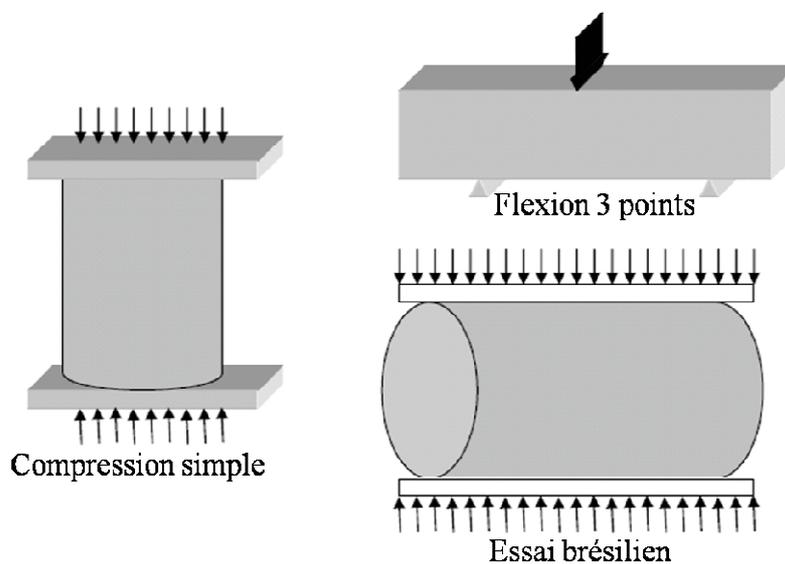


Figure 7 : Essais mécaniques d'identification et de validation

Avant d'identifier les paramètres via RheOBeton, nous présentons ici les conclusions présentés par Mazars [Mazars, 1984] sur l'effet de chacun de ses paramètres sur des courbes contraintes-déformations.

IV.2.3.b.i. Le seuil d'endommagement ε_{D0}

Ce seuil contrôle bien sûr l'initiation de l'endommagement, il agit donc sur la contrainte au pic mais également sur la forme de la courbe post-pic. En effet, la chute de contrainte est d'autant moins brutale que ε_{D0} est petit. En général, ε_{D0} est compris entre $[1.10^{-5}; 5.10^{-4}]$.

IV.2.3.b.ii. Les coefficients A

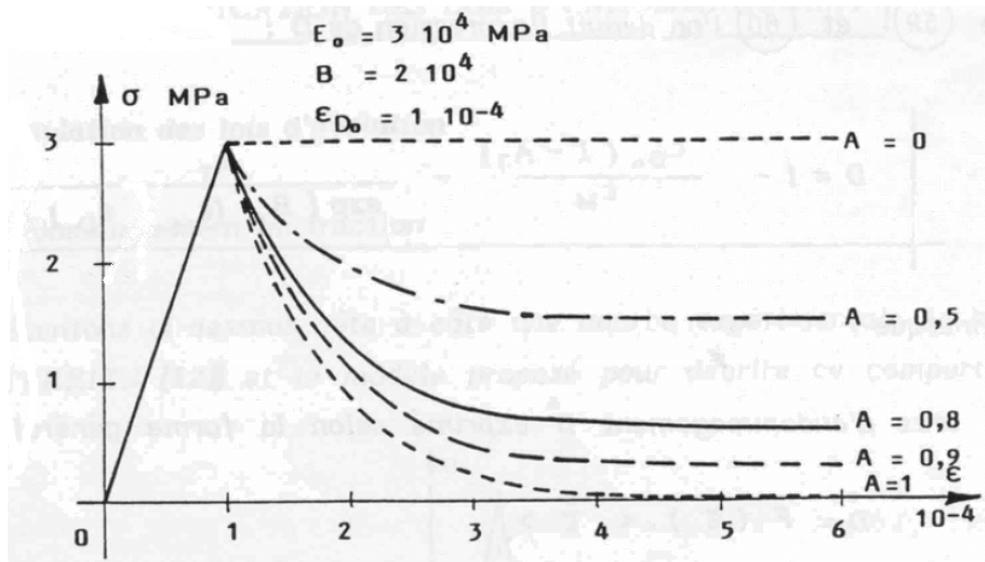


Figure 8 : Influence des paramètres A [Mazars, 1984]

A introduit une asymptote horizontale qui est l'axe des déformations pour $A = 1$ et l'horizontale passant par le pic pour $A = 0$ (Fig. 8). Plus le paramètre A est grand, plus le comportement du matériau est fragile. En général, A_C est compris entre $[1 ; 1,15]$ et A_T entre $[0,7 ; 1,5]$.

IV.2.3.b.iii. Les coefficients B

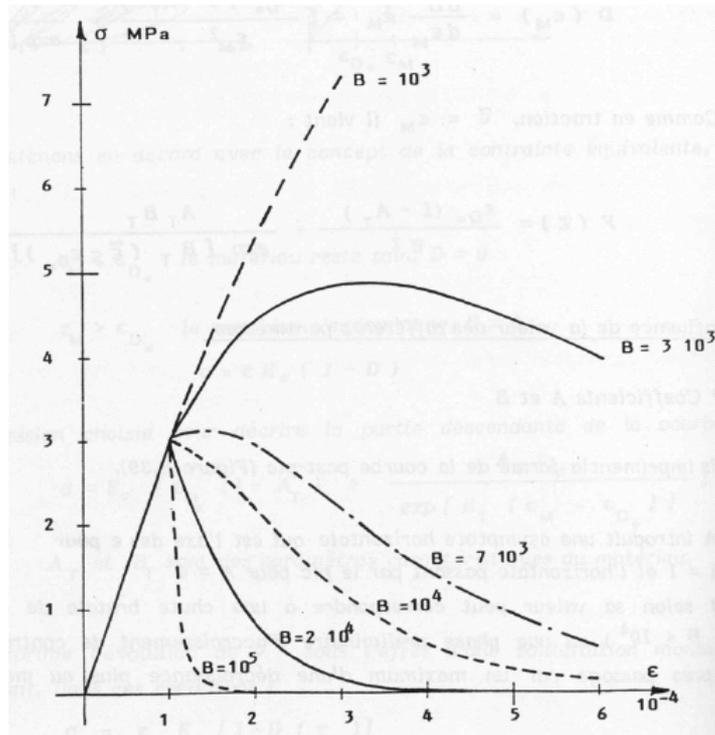


Figure 9 : Influence des paramètres B [Mazars, 1984]

Selon sa valeur, B peut engendrer une chute brutale de contrainte ($B > 10000$) ou une phase préliminaire d'accroissement de contrainte suivie, après passage par un maximum, d'une décroissance plus ou moins rapide (Fig. 9). Ce paramètre influence donc à la fois le pic de chargement mais aussi la pente de la courbe dans sa phase d'adoucissement. Généralement, B_C est compris entre [200 ; 2000] et B_T entre [10000 ; 100000].

IV.2.3.c. Identification des paramètres pour la modélisation numérique du béton

Les propriétés mécaniques d'un mortier sont différentes de celles d'une pâte de mortier d'un béton à cause de la présence des gravillons. En effet, lorsque le béton est fabriqué, un réseau de microfissures se crée à cause de la contraction de la pâte de mortier autour des gravillons. Il n'est pas possible d'identifier séparément le comportement élastique des granulats et le comportement élastique endommageable de la pâte de mortier. La technique consiste donc à considérer comme connus les paramètres élastiques des agrégats puis à identifier le comportement de la pâte de mortier avec des tests directement sur des bétons. Les essais sont les suivants :

- essais de compression simple sur des éprouvettes cylindriques de diamètre 16 cm et de hauteur 32 cm pour identifier les paramètres élastiques ;
- essais de flexion trois points sur des éprouvettes parallélépipédiques 7*7*28 cm en utilisant les paramètres élastiques précédemment trouvés pour identifier les paramètres d'endommagement en traction ;
- essais de compression uniaxiale pour identifier les paramètres d'endommagement en compression ;

- validation des paramètres identifiés sur un essai de type « Brésilien » (l'essai brésilien consiste en l'application d'un chargement de compression sur une éprouvette cylindrique dans la direction diamétrale (Fig. 7).

En ce qui concerne les données initiales élastiques pour les agrégats, nous utilisons des données de la littérature avec un module d'Young de 70 GPa et un coefficient de Poisson de 0,2.

Le tableau suivant (Tab. 2) représente les valeurs des paramètres identifiés :

Paramètres matériau	Dénomination	Valeur
E_{PM}	Module d'Young de la pâte de mortier du béton	18,69 GPa
ν_{PM}	Coefficient de Poisson de la pâte de mortier du béton	0,2
E_A	Module d'Young des agrégats	70 GPa
ν_A	Coefficient de Poisson des agrégats	0,2
A_C	Paramètre de Mazars relié à l'évolution de l'endommagement en compression	1,01
B_C	Paramètre de Mazars relié à l'évolution de l'endommagement en compression	657,08
A_T	Paramètre de Mazars relié à l'évolution de l'endommagement en traction	1,18
B_T	Paramètre de Mazars relié à l'évolution de l'endommagement en traction	50000
ϵ_{D0}	Seuil d'endommagement	$9,1 \cdot 10^{-5}$
$\tilde{\epsilon}_C^{crit}$	Seuil de fissuration en compression	$8,72 \cdot 10^{-4}$
$\tilde{\epsilon}_T^{crit}$	Seuil de fissuration en traction	$1,63 \cdot 10^{-4}$

Tableau 2 : Identification des paramètres du modèle de Mazars

Après une analyse de sensibilité sur l'influence des granulats, il a été montré que [Comby, 2006] :

- la distribution granulaire n'a pas d'influence sur la réponse globale du matériau ;
- le diamètre des agrégats n'a pas d'influence sur la réponse globale du matériau lorsqu'il est compris entre 7,15 mm et 22,5 mm ;
- la résistance à la compression augmente linéairement avec le volume des agrégats, le comportement mécanique de la pâte de mortier est donc dépendant du nombre de grains dans l'éprouvette.

IV.3. Avantages et limites de la modélisation du béton dans FEMCAM

IV.3.1. Les avantages du modèle

IV.3.1.a. L'outil numérique FEMCAM

FEMCAM est un outil de modélisation 3D permettant de représenter une large gamme de géométries différentes. De plus, la méthode « kill element » est d'ores et déjà intégrée dans FEMCAM et permet d'éliminer des éléments du maillage lorsque l'endommagement est maximal. Cette méthode reste cependant à utiliser avec précaution. En effet, chaque élimination d'éléments entraîne une perte de volume et un maillage très raffiné est par conséquent recommandé. Une technique représentant explicitement la propagation de fissures serait plus adaptée. Cependant, il n'est, à l'heure actuelle, pas envisageable de représenter plusieurs centaines de fissures en 3D dans un maillage.

L'échelle mésoscopique à laquelle on se place ainsi que la possibilité de générer un squelette granulaire sont particulièrement intéressantes pour représenter la réaction alcali-silice.

IV.3.1.b. Indépendance au maillage

La localisation numérique des déformations et de l'endommagement est un phénomène couramment observé dans la modélisation des matériaux quasi-fragiles comme le béton. Ce phénomène induit une dépendance de la solution à la taille de maille et conduit, dans le cas de maillages très fins, à des dissipations d'énergie nulles, ce qui est physiquement inacceptable. Plusieurs modèles permettent de rendre le problème indépendant de la taille de maille. Ces techniques introduisent une « longueur caractéristique ». Celle-ci permet de définir une zone de régularisation à l'intérieure de laquelle les éléments de matière sont en interaction les uns par rapport aux autres. La longueur caractéristique l_c (de trois à cinq fois le diamètre du plus gros granulat présent dans le béton [Bazant, 1983]) peut être introduite suivant différentes formulations. Parmi les nombreuses approches non locales, les plus couramment utilisées sont le modèle non local à formulation intégrale et le modèle non local avec une formulation par gradient implicite.

Les modèles non locaux à formulation intégrale considèrent la déformation équivalente comme une moyenne pondérée des déformations équivalentes dans un volume représentatif autour de ce point. On note $\bar{\epsilon}$ la moyenne des déformations équivalentes $\tilde{\epsilon}$ dans un volume représentatif autour d'un point x . C'est cette variable qui va alors contrôler l'évolution de l'endommagement au point x (IV. 15) :

$$\begin{aligned}\bar{\epsilon} &= \frac{1}{V_r(x)} \int_V \tilde{\epsilon}(s) \alpha(s, x) ds \\ V_r(x) &= \int_V \alpha(s, x) ds\end{aligned}\tag{IV. 15}$$

V est le volume de la structure considéré, $\tilde{\epsilon}$ est la déformation équivalente au point s . $\alpha(s, x)$ est une fonction poids standardisée homogène et isotrope qui dépend de la distance $|s - x|$ entre les points s et x . Plusieurs fonctions sont considérées dans la littérature pour exprimer α mais la plus populaire est la fonction Gaussienne (Fig. 10) (IV. 16) :

$$\alpha(s, x) = \exp\left(-\frac{4|s-x|^2}{l_c^2}\right) \quad (\text{IV. 16})$$

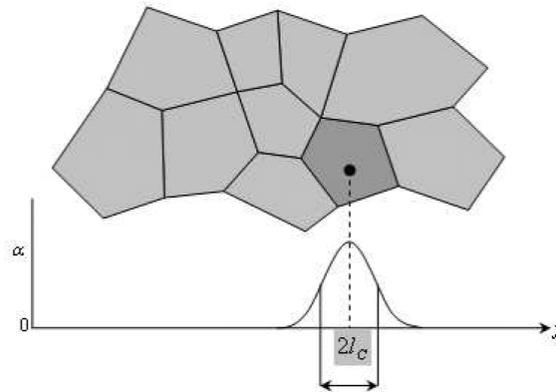


Figure 10 : Régularisation de la variable locale par une fonction poids Gaussienne

La valeur de $\bar{\epsilon}$, que l'on peut considérer comme étant la déformation non locale équivalente, est donc la variable qui contrôle l'évolution de l'endommagement selon le même principe qu'étudié dans la section IV.2.1 (IV. 17) :

$$f(\bar{\epsilon}, N) = \bar{\epsilon} - N \quad (\text{IV. 17})$$

Lorsqu'un tel modèle est associé à une méthode de propagation de fissures, il est indispensable de prendre des précautions particulières car la région (de longueur définie par la longueur caractéristique) pour un nœud proche d'une fissure peut inclure des nœuds situés de l'autre côté de la fissure ce qui n'est pas réaliste.

Une autre approche consiste à définir la variable non locale à l'aide d'une formulation par gradient implicite. Cette formulation implicite est une approximation du modèle non local à formulation intégrale mais elle semble mieux adaptée dans le cas de la modélisation du béton [Comby, 2006]. Le modèle numérique implémenté dans FEMCAM est donc totalement indépendant du maillage généré.

IV.3.1.c. Evolutions possibles

Le modèle de comportement mécanique du béton implémenté dans FEMCAM offre des perspectives intéressantes. En effet, l'objet de ce travail est de modéliser la réaction alcali-silice dans le béton et ses effets sur les propriétés mécaniques du matériau mais il semble tout à fait envisageable de représenter d'autres pathologies du béton tels que la réaction sulfatique interne ou encore les phénomènes de gel-dégel moyennant quelques développements. C'est l'approche mésoscopique qui permet d'envisager de telles évolutions.

IV.3.2. Les limites du modèle

IV.3.2.a. Les hypothèses restrictives

Une des premières critiques que l'on peut faire de ce modèle est le fait qu'il néglige un certain nombre de paramètres.

- ✓ tout d'abord, le béton est représenté comme un matériau biphasique et la zone interfaciale de transition est donc négligée au profit d'un contact bilatéral-collant entre les agrégats et la pâte de mortier ;
- ✓ le modèle est élastique endommageable ce qui signifie que l'on ne prend pas en compte de composante visqueuse dans la pâte de mortier ce qui permettrait une adaptation du matériau au cours de la déformation ;
- ✓ de plus, comme déjà cité dans le chapitre III.1.2.c, le nombre de granulats ainsi que la taille minimale pouvant être représenté est bien sûr limité par le nombre d'éléments pouvant être traité par les moyens de calcul ;
- ✓ le comportement des granulats est considéré comme purement élastique, ce qui ne représente pas la réalité étant donné que l'on observe quasi systématiquement une rupture des grains précédée d'un endommagement.

IV.3.2.b. L'identification des paramètres

Le travail d'identification des paramètres de Mazars mais aussi celui d'identification des paramètres élastiques des agrégats et de la pâte de mortier du béton représente un lourd travail à la fois expérimental et numérique, mais c'est une difficulté que l'on rencontre couramment dans les approches numériques.

IV.3.2.c. La corrélation entre l'endommagement numérique et expérimental

Nous verrons dans la suite du manuscrit que ce modèle de comportement mécanique est en parfaite corrélation avec ce qui est observé expérimentalement lors de l'endommagement créé par des chargements mécaniques classiques mais qu'il n'en est pas de même lorsqu'il s'agit de rendre compte de l'endommagement créé par la réaction alcali-silice. En effet, le type d'endommagement créé par la RAS, principalement dû au gonflement des produits de la réaction, est différent de celui créé par un essai mécanique classique. Nous verrons et détaillerons donc plus tard les difficultés rencontrées.

IV.4. Conclusions

Après un rapide passage en revue des principaux codes de calculs existants actuellement pour modéliser le comportement mécanique du béton, ce chapitre a principalement permis de présenter l'implémentation dans le code éléments finis tridimensionnel FEMCAM d'un modèle de comportement élastique endommageable de Mazars pour la pâte de mortier. L'influence et l'identification des différents paramètres matériau, c'est-à-dire ceux d'endommagement mais aussi les paramètres élastiques, ont été largement discutés.

La principale force de notre approche réside dans la représentation mésoscopique du béton, ce qui est particulièrement bien adapté à la modélisation de phénomènes se produisant au niveau des gravillons. La génération réaliste de la granulométrie permet de réaliser de nombreuses études de sensibilité vis-à-vis du développement et de l'impact de la réaction alcali-silice. De plus, le modèle d'endommagement de Mazars a été implémenté de manière non locale à partir d'une formulation à gradient implicite. Nous sommes donc capables de représenter la dégradation progressive des propriétés mécaniques du béton dû à la RAS, et ce indépendamment de la taille de maille.

Enfin, une étude critique des hypothèses simplificatrices adoptées dans FEMCAM a été proposée afin d'identifier les limites actuelles de notre modèle.

Références bibliographiques

- Bazant, Z.P.**, Oh, B.H., **1983**, *Crack band theory for fracture of concrete*, Mat. Struct., Vol. 16, pp. 155-177.
- Comby, I.**, **2006**, *Development and validation of a 3D computational tool to describe damage and fracture due to alkali silica reaction in concrete structures*, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- C.F. Dunant**, K.L. Scrivener, **2009**, *Micro-mechanical modelling of alkali-silica-reaction-induced degradation using the AMIE framework*, Cement and Concrete Research, doi:10.1016/j.cemconres.2009.07.024.
- Humbert, P.**, Dubouchet, A., Fezans, G., Remaud, D., **2005**, *CESAR-LCPC, un logiciel de calcul dédié au génie civil*, Bulletin des laboratoires de Ponts et Chaussées, 256-257, Juillet-Aout-Septembre, pp. 7-37.
- Larive, C.**, **1997**, *Apport combinés de l'expérimentation et de la modélisation à la compréhension de l'alcali-réaction et de ses effets mécaniques*, Thèse de doctorat, Ecole Nationale des ponts et Chaussées.
- Larive, C.**, Laplaud, A., Coussy, O., **2000**, *The role of water in alkali-silica reaction*, 11th ICAAR, Québec, pp. 61-69.
- Li, K.**, Ulm, F.-J., Coussy, O., Larive, C., Fan, L., **2000**, *Chemoelastic modeling of alkali-silica reaction in concrete*, 11th ICAAR, Québec, pp. 989-998.
- Li, K.**, Coussy, O., **2002**, *Concrete ASR degradation: from material modeling to structure assessment*, Concrete Science and Engineering, tome 4, pp. 35-46.
- Mazars, J.**, **1984**, *Application de la Mécanique de l'endommagement au comportement non linéaire et à la rupture du béton de structure*, Thèse de Doctorat d'état, Univ. Paris VI (France).
- Mounajed, G.**, **2001**, *Conception et développement du modèle aléatoire béton numérique dans le code de calcul aux e.f. SYMPHONIE*, Rapport de recherche cstb, CSTB.
- Mounajed, G.**, **2002**, *Exploitation du nouveau modèle béton numérique dans SYMPHONIE : Concept, homogénéisation du comportement thermomécanique des BHP et simulation de l'endommagement thermique*, Cahiers du CSTB 3421, CSTB.
- Mounajed, G.**, Ung Quoc, H., and Boussa, H., **2003** *Elaboration d'un nouveau modèle d'endommagement dans le code de calcul SYMPHONIE*, Revue Française de Génie Civil, 7(5/2003) :679-689.
- Obeid, W.**, **1998**, *Modélisation du couplage thermo-hygro-mécanique en milieux poreux non saturés. Application au cas du mortier de ciment*, Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.

Peyrot, I., Bouchard, P.-O., Ghisleni, R., Michler, J., **2009**, *Determination of plastic properties of metals by instrumented optimization using o stochastic optimization*, Journal of Material Research, 24(3), pp. 936-943.

Ulm, F.-J., Coussy, O., Li, K., Larive, C., **2000**, *Thermo-chemo-mechanics of ASR expansion in concrete structures*, J. Eng. Mech., tome 126, n°3, pp. 233-242.

Ung Quoc, H. and Mounajed, G., **2005**, *A new f.e. tangent damage model MODEV for concrete structures*, 11th International Conference on Fracture ICFXI.

CHAPITRE V :
**MODELISATION DES COUPLAGES ENTRE LA CHIMIE ET
LA MECANIQUE POUR LA REACTION ALCALI-SILICE**

V.1. LE COUPLAGE CHIMIE → MECANIQUE.....	85
V.1.1. Le modèle considéré.....	85
V.1.2. Le problème élastique-chimique pour les granulats réactifs	87
V.1.3. Expression du gonflement induit par la réaction alcali-silice	89
V.1.4. Remarques sur la modélisation des conséquences mécaniques de la RAS.....	90
V.2. LE COUPLAGE MECANIQUE → CHIMIE.....	90
V.2.1. Position du problème et état de l'art.....	90
V.2.2. Proposition d'un modèle	92
V.3. LE SCHEMA DE RESOLUTION COMPLET IMPLEMENTE DANS FEMCAM.....	92

Le but de ce chapitre est de présenter le modèle couplé chimie-mécanique pour modéliser la réaction alcali-silice. En effet, nous avons précédemment présenté le modèle chimique de la réaction et le modèle de comportement mécanique du béton ; il faut désormais coupler ces deux représentations afin de modéliser l'impact de la réaction alcali-silice sur les propriétés mécaniques du béton. La dégradation du matériau peut, elle aussi, influencer le déroulement de la réaction dans le béton, nous discuterons donc également de ce point. Le diagramme général auquel nous voulons aboutir est le suivant (Fig. 1) :

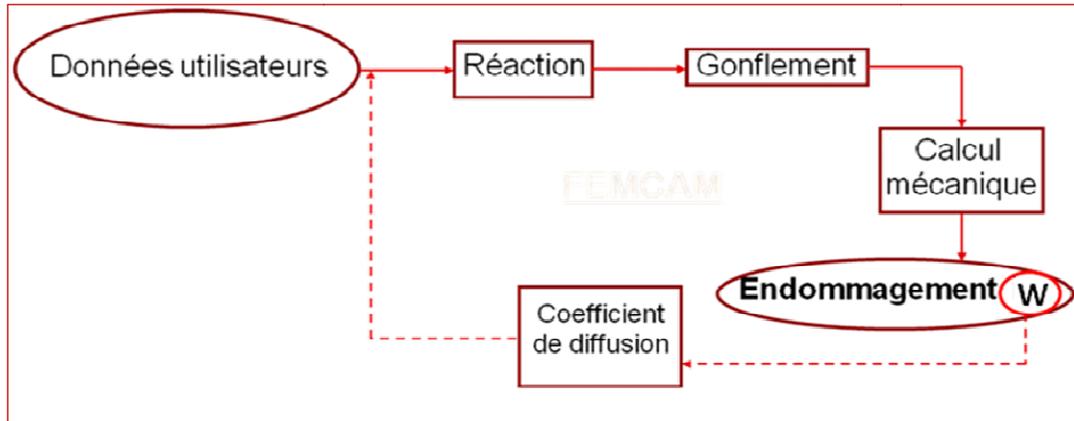


Figure 1 : Diagramme du modèle couplé chimie-mécanique

A chaque pas de temps, la diffusion des alcalins vers les sites réactifs aboutira à la réaction avec la silice ce qui va provoquer un gonflement des gravillons réactifs et donc endommager la matrice cimentaire. Cette endommagement aura éventuellement une influence sur le coefficient de diffusion des alcalins dans la pâte de mortier.

V.1. Le couplage chimie → mécanique

Le but de cette section est de présenter la manière dont les conséquences mécaniques de la réaction alcali-silice vont être prises en compte par le modèle.

V.1.1. Le modèle considéré

Pour cela nous nous appuyerons sur les travaux réalisés au département de Génie Civil et Environnemental de l'École des Mines de Douai et plus particulièrement par Bulteel [Bulteel, 2002] et Garcia-Diaz [Garcia-Diaz, 2005]. Le modèle considéré postule que la réaction alcali-silice induit un gonflement des granulats réactifs (Cf. Chapitre II.1.1.c.iii). La réaction alcali-silice est divisée en deux étapes :

- La première correspond à la formation de $SiO_{5/2}^-$, avec l'hydrolyse de la silice réactive par les ions OH^- pour former un gel alcalin-siliceux. v_1 représente la vitesse de cette étape ;
- la deuxième correspond à la dissolution de la silice par l'absorption d'eau. v_2 représente la vitesse de cette étape.

Une méthode expérimentale performante a été développée pour mesurer le gonflement des agrégats réactifs au cours du temps. Il est possible de mesurer le degré de réaction d'échantillons réactifs à différents temps de réaction grâce à des attaques à l'acide successives. L'échantillon est broyé afin d'obtenir une fine poudre de béton prête pour les processus chimiques qui suivent. Ceux-ci sont exécutés pour éliminer tous les apports du

ciment et se réalisent à l'aide de solution d'acide chlorhydrique et d'EDTA-triéthanolamine. Ce protocole d'extraction des granulats permet alors de déterminer les variables d'avancement chimique de la réaction alcali-silice. En effet, l'échantillon obtenu après extraction est composé à plus de 99% de tétraèdres Q₃ (silice dégradée) et de tétraèdres Q₄ (silice saine), il pourra alors être soumis à différentes analyses, telles que des analyses thermogravimétriques, BET ou encore pycnomètre à Hélium.

Ce modèle décrit la réaction chimique depuis l'échelle microscopique jusqu'à l'échelle mésoscopique en donnant une relation entre le gonflement de la pâte de mortier et le gonflement du squelette granulaire. Cette méthodologie expérimentale a été mise au point pour mieux comprendre l'amorçage et le processus de gonflement et conduit à quelques conclusions illustrées par la figure suivante (Fig. 2) :

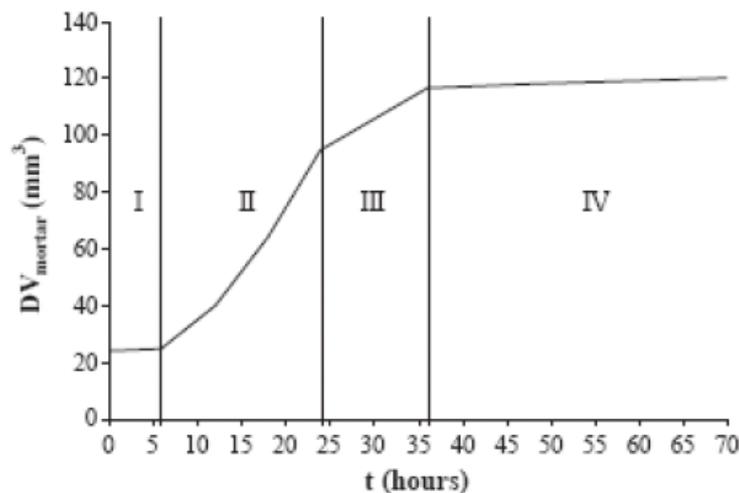


Figure 2 : Evolution du gonflement de la pâte de mortier en fonction du temps [Garcia-Diaz, 2003]

- Partie I : les deux étapes de la réaction alcali-silice ont la même vitesse ce qui signifie que $v_1 = v_2$. Les tétraèdres Q₃ sont produits et consommés en même temps et l'échantillon ne gonfle pas pendant cette période.
- Partie II et III : la vitesse de réaction de la première étape est plus rapide que celle de la seconde, ce qui signifie que la formation de tétraèdres Q₃ est supérieure à leur consommation. La première étape est donc expansive, les tétraèdres Q₃ sont à l'origine du processus de gonflement des agrégats réactifs. Ceci conduit à l'endommagement et à la fissuration de l'éprouvette. Ces fissures sont probablement à l'origine de l'augmentation de volume de l'échantillon de mortier. Ceci est montré par la figure 3 qui représente la variation volumique de l'éprouvette $\frac{DV}{V}$ (mesurée directement à différents temps de réaction grâce à une pesée hydrostatique) en fonction de la variation volumique du squelette granulaire $\frac{DV_g}{V_g}$ (mesurée indirectement par la méthode expérimentale basée sur les attaques à l'acide) :

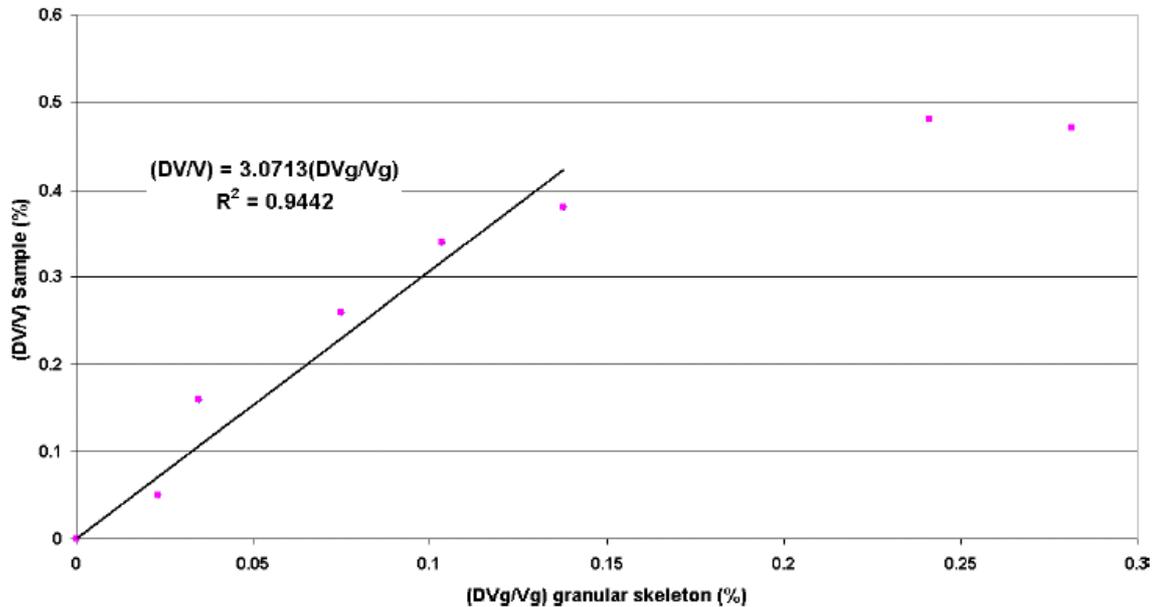


Figure 3 : Variation volumique d'une éprouvette en fonction de la variation volumique du squelette granulaire pour une formulation spécifique de béton [Riche, 2003]

La partie III correspond à une compétition entre les deux étapes de la réaction alcali-silice, ce qui conduit au fait que l'échantillon gonfle mais pas aussi rapidement que durant la partie II.

- Partie IV : Le gonflement est asymptotique bien que les deux étapes de la réaction continuent. Cela correspond à la période où les produits de la réaction combles les fissures créées, on parle alors de cicatrisation.

Cette approche confirme que la première étape de la réaction (transformation des tétraèdres Q_4 en Q_3) est responsable du gonflement.

Ce modèle complexe, basé sur des données expérimentales, fait le lien entre les aspects chimiques et leurs effets mécaniques à une échelle mésoscopique. Le modèle numérique s'attachera donc à représenter au mieux ces processus. Le but sera de relier la consommation des ions hydroxydes selon un processus de diffusion – réaction au nombre de moles de tétraèdres Q_3 formés puis de relier ce nombre de tétraèdres formés au gonflement granulaire qui est à la base de l'expansion du béton.

V.1.2. Le problème élastique-chimique pour les granulats réactifs

Nous considérons les granulats comme ayant un comportement mécanique purement élastique (cf. chapitre IV). Le code de calcul que nous utilisons est basé sur une formulation vitesse-pression. Il faut alors modifier les équations constitutives pour prendre en compte la pression générée par le gonflement des agrégats. Ces modifications n'affectent que les éléments du maillage qui appartiennent à des granulats réactifs et qui ont réagi, c'est-à-dire où de la silice a été consommée (cf. modèle chimique décrit dans le chapitre III).

Si nous considérons un domaine 3D nommé Ω , les équations d'équilibre classiques pour un objet solide soumis à un chargement mécanique peuvent être exprimées localement par (V. 1) :

$$\text{div}(\sigma) + \rho f = \rho \gamma \quad (\text{V. 1})$$

où σ est le champ de contraintes dans le solide, f les forces volumiques par unité de masse, ρ la masse volumique et γ l'accélération. Le problème à résoudre est exprimé dans

FEMCAM en utilisant une formulation en vitesse-pression. Le tenseur des contraintes est alors généralement exprimé comme la somme de sa partie déviatorique s et de sa partie sphérique p (V. 2) :

$$\sigma = s - p Id \quad (\text{V. 2})$$

Id est le tenseur identité et $p = -\frac{1}{3}Tr(\sigma)$ représente la pression hydrostatique. s est évalué en utilisant une résolution locale de la loi de comportement. Les équations d'équilibre classiques pour un solide soumis à un chargement mécanique s'expriment alors ainsi (V. 3) :

$$\begin{cases} \text{trouver } (\vec{v}, p) \text{ tels que :} \\ \text{div}(s) - \text{grad}(p) + \rho f = \rho \gamma \end{cases} \quad (\text{V. 3})$$

où \vec{v} est le champ de vitesse.

Pour le cas des granulats réactifs, nous considérons qu'ils ont un comportement élastique et nous négligeons les termes d'inertie. Cela nous conduit donc à réécrire les équations d'équilibre ainsi (V. 4) :

$$\begin{cases} \text{trouver } (\vec{v}, p) \text{ tels que :} \\ \text{div}(s) - \text{grad}(p) = 0 \end{cases} \quad (\text{V. 4})$$

Les granulats ne s'endommageant pas, nous pouvons considérer que nous sommes dans le cas d'un matériau incompressible et isotrope. La masse volumique ρ est donc constante et l'incompressibilité se traduit alors sur le champ de vitesse par (V. 5) :

$$\text{div}(\vec{v}) = 0 \quad (\text{V. 5})$$

En utilisant la loi de Hooke qui relie le tenseur des déformations élastiques \mathcal{E} au tenseur des contraintes ($\sigma = 2\mu\mathcal{E} + \lambda Tr(\mathcal{E})Id$), nous obtenons alors l'expression de la partie déviatorique p et de la partie sphérique s (V. 6) :

$$\begin{cases} s = 2\mu e \\ \dot{p} = -\chi Tr(\dot{\mathcal{E}}) \end{cases} \quad (\text{V. 6})$$

μ est le module de cisaillement, e la partie déviatorique du tenseur des déformations et χ est le module d'incompressibilité des agrégats réactifs. Pour prendre en compte le gonflement chimique, nous introduisons un terme chimique dans le tenseur global des déformations (V. 7) :

$$\dot{\mathcal{E}}_{ij} = \dot{\mathcal{E}}_{ij}^{el} + \dot{\mathcal{E}}_{ij}^{RAS} \quad (\text{V. 7})$$

où $\dot{\mathcal{E}}_{ij}^{el}$ correspond à la vitesse de déformation élastique et $\dot{\mathcal{E}}_{ij}^{RAS}$ correspond à la vitesse de déformation introduit par le gonflement chimique des agrégats réactifs.

Si l'élément fini considéré appartient à un granulat réactif et que celui-ci a réagi pendant l'intervalle de temps (disparition de silice), alors $\dot{\varepsilon}_{ij}^{RAS} \neq 0$, sinon ce terme est nul. Nous allons maintenant présenter la prise en compte de la pression induite par la réaction chimique.

V.1.3. Expression du gonflement induit par la réaction alcali-silice

Une hypothèse importante est considérée pour l'expression de ce gonflement induit. En effet, nous considérons que le gonflement libre du béton est proportionnel à l'avancement de la réaction $\delta V_{REACTION}$. Si $\delta V_{REACTION}$ est nul alors il n'y a pas de création de gel. Dans notre modèle, $\delta V_{REACTION}$ correspond à la variation volumique d'un élément tétraédrique appartenant à un granulat réactif. Le calcul de l'avancement de la réaction se fait ainsi (V. 8) :

$$\delta V_{REACTION} = \Delta[SiO_2] * V_{elt} * G \quad (V. 8)$$

$\Delta[SiO_2]$ représente la variation de concentration en silice sur l'élément, V_{elt} le volume de l'élément tétraédrique considéré et enfin G est un paramètre à identifier qui permet de relier le gonflement granulaire associé à la réaction d'une mole de silice. G sera identifié dans le chapitre suivant grâce aux données expérimentales dont nous disposons sur la variation volumique globale du squelette siliceux en fonction du temps de réaction.

La loi de comportement pour un matériau isotrope élastique-chimique s'écrit ainsi (V. 9) :

$$\sigma_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij} + \lambda\varepsilon_{kk}\delta_{ij} - 3\varepsilon^\infty\chi\delta V_{REACTION}\delta_{ij} \quad (V. 9)$$

où $\chi > 0$ et ε^∞ est la déformation asymptotique pour un gonflement libre. Dans le cas d'une expansion libre (i.e. $\sigma = 0$), il y a une relation linéaire entre l'avancement de la réaction ξ et les déformations dans le matériau. En inversant l'équation précédente, nous obtenons l'expression de la déformation associée à la réaction chimique (V. 10) :

$$\varepsilon_{ii} = \frac{\sigma_{ii}}{2\mu + 3\lambda} + \frac{3\varepsilon^\infty\delta V_{REACTION}}{2\mu + 3\lambda} * \frac{2\mu + 3\lambda}{3} \quad (V. 10)$$

que l'on peut réécrire ainsi (V. 11) :

$$\varepsilon_{ii} = \frac{\sigma_{ii}}{2\mu + 3\lambda} + \varepsilon^\infty\delta V_{REACTION} \quad (V. 11)$$

Si l'on remplace l'expression de ε_{ii} dans l'équation (V. 9), nous obtenons (V. 12) :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{2\mu} - \frac{3\lambda}{2\mu} \left(\frac{1}{2\mu + 3\lambda} \sigma_{kk}\delta_{ij} + \delta V_{REACTION}\varepsilon^\infty \right) + \frac{3\chi}{2\mu} \varepsilon^\infty \delta V_{REACTION} \delta_{ij} \quad (V. 12)$$

que l'on peut réécrire ainsi (V. 13) :

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^{el} - \frac{3}{2\mu} \delta V_{REACTION} \varepsilon^\infty + \frac{3\chi}{2\mu} \delta V_{REACTION} \varepsilon^\infty \delta_{ij} \quad (V. 13)$$

Nous pouvons alors exprimer la déformation associée à la réaction alcali-silice ainsi (V. 14) :

$$\varepsilon_{ij}^{RAS} = -\frac{3}{2\mu} \delta V_{REACTION} \varepsilon^{\infty} + \frac{3\chi}{2\mu} \delta V_{REACTION} \varepsilon^{\infty} \delta_{ij} \quad (\text{V. 14})$$

Après avoir réduit l'expression, on aboutit à (V. 15) :

$$\varepsilon_{ij}^{RAS} = \delta V_{REACTION} \varepsilon^{\infty} \delta_{ij} \quad (\text{V. 15})$$

V.1.4. Remarques sur la modélisation des conséquences mécaniques de la RAS

Dans le modèle couplé chimie-mécanique pour représenter la réaction alcali-silice, nous avons trois comportements mécaniques bien distincts en fonction de l'endroit où on se situe dans le matériau. Si l'élément fini sur lequel est résolu le problème par FEMCAM appartient à la matrice cimentaire alors le problème à considérer est celui présenté dans le chapitre IV c'est-à-dire un comportement élastique endommageable. En revanche, si l'élément fini appartient à un granulat non réactif alors le problème se restreint à résoudre une loi de comportement élastique pure. Pour finir, en ce qui concerne les agrégats réactifs, deux cas de figure se présentent. Si l'élément qui appartient à ce grain réactif a réagi alors on lui applique une loi de comportement élasto-chimique, sinon il conserve son comportement élastique pur.

Un autre point important à souligner est le caractère brutal du gonflement. En effet, pour chaque élément et à chaque pas de temps le gonflement d'un élément appartenant à un granulat réactif est calculé en fonction du nombre de moles de silice ayant réagi. En fait, on applique une variation volumique à cet élément. Cela signifie qu'il n'y a aucune action de la pâte de mortier sur le gonflement granulaire, comme par exemple un retard de transmission des contraintes si la pâte de mortier avait une composante visqueuse dans son comportement. La déformation est donc imposée brutalement.

Pour conclure avec ces remarques, nous verrons dans le prochain chapitre comment nous avons pu identifier la constante numérique G qui nous permet de calculer l'avancement de la réaction $\delta V_{REACTION}$.

V.2. Le couplage mécanique → chimie

V.2.1. Position du problème et état de l'art

Le couplage mécano-chimique consiste à prendre en compte l'effet de la dégradation du matériau considéré sur les paramètres de la réaction alcali-silice. Un certain consensus apparait dans la littérature. En effet, beaucoup postulent l'existence d'une corrélation entre les déformations et les valeurs des coefficients de diffusion effective. Les déformations engendrées augmentent la porosité du matériau, il y a donc des créations de surface et de vide qui représentent un facteur déterminant dans l'augmentation du coefficient de diffusion effective. En revanche peu de relations concrètes sont présentées.

Sellier & al. [Sellier, 1999] supposent que le flux total traversant un volume de béton est la somme du flux sur les phases non fissurées et du flux dans les fissures supposées traversantes. Comme les fissures ne sont pas toutes traversantes, leur ouverture équivalente est calculée en fonction des déformations totales et est ensuite corrigée par un coefficient de calage dit coefficient d'efficacité de la fissuration (noté C). L'expression suivante est alors proposée (V. 16) :

$$D_{eff} i = D_{eau} C \left(\langle \varepsilon_j \rangle^+ + \langle \varepsilon_k \rangle^+ \right) + D_0 \quad (V. 16)$$

Dans cette expression, $D_{eff} i$ est la valeur du coefficient de diffusion effectif dans la direction principale i , D_{eau} est le coefficient de diffusion de l'espèce diffusante dans l'eau pure. D_0 est le coefficient de diffusion effectif dans le matériau sain non chargé. Les résultats trouvés sont présentés dans la figure suivante et ont été réalisés sur la diffusion du tritium (Fig. 4) :

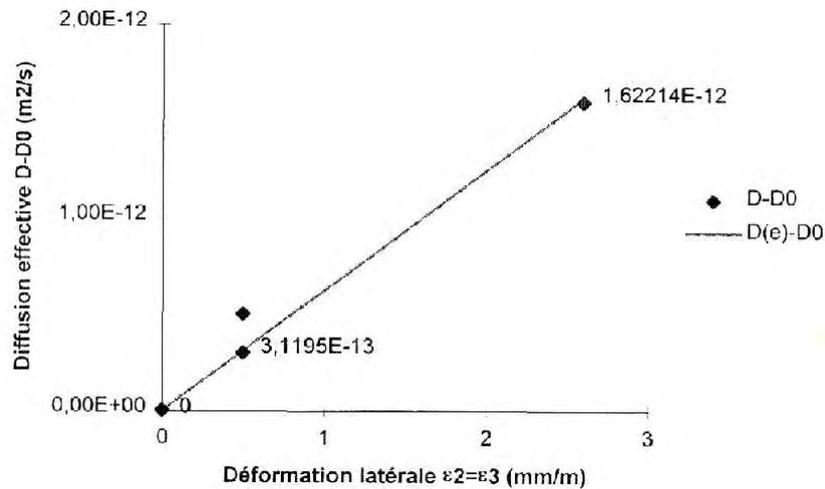


Figure 4 : Corrélation expérimentale entre diffusion effective et déformation latérale sur les éprouvettes endommagées par compression pure [Sellier, 1999]

En prenant pour le coefficient de diffusion dans l'eau $D_{eau} = 2,2 \cdot 10^{-9} m^2 / s$, pour le coefficient de diffusion effectif initial $D_0 = 1,7 \cdot 10^{-12} m^2 / s$ et en exprimant la déformation latérale en m/m on a : $C = 0.142$.

Sellier en conclut que, pratiquement cela signifie que seulement une fraction de 14% de fissures créées contribue à l'augmentation du coefficient de diffusion effectif.

Dans ce modèle, les auteurs prennent donc en compte les fissures créées dans la pièce et en calculent l'influence sur les mécanismes de diffusion. Dans le cas de notre modèle, les fissures ne sont pas représentées, seul l'endommagement est calculé.

D'autres auteurs relient la dégradation du matériau à une augmentation de la porosité et cela conduit donc aussi à faciliter la diffusion des ions. La plupart de ces modèles se situe à une échelle microscopique. Dans le cadre de notre modèle, nous n'avons pas de variables représentant directement la porosité, celle-ci est incluse dans le coefficient de diffusion apparent des alcalins.

Pour la réalisation du couplage inverse de notre modèle, nous nous trouvons donc confronté à plusieurs problèmes. Tout d'abord, il n'y a quasiment pas dans la littérature de modèles concluants qui relient l'endommagement au coefficient de diffusion apparente des alcalins ou d'une autre espèce. Les moyens expérimentaux mis à disposition ne permettent pas facilement d'accéder à une mesure du coefficient de diffusion apparente des alcalins en fonction de l'avancement de la réaction alcali-silice. De plus, dans notre modèle mécanique, les agrégats ne s'endommagent pas ou ne se fissurent pas. Or, il apparaît clairement que la fissuration dans les grains permet d'ouvrir des sortes « d'autoroutes » pour le transport des

alcalins dans le béton et donc d'augmenter grandement les valeurs des coefficients de diffusion apparente.

Au vu de ces différents paramètres, nous avons décidé d'implémenter dans FEMCAM une loi simple mais facilement évolutive de couplage entre l'endommagement créé dans la matrice cimentaire et les coefficients de diffusion de la matrice et des grains.

V.2.2. Proposition d'un modèle

Une première loi va permettre de modifier au cours du calcul le coefficient de diffusion apparente des alcalins dans la pâte de mortier. Cette loi s'écrit ainsi (V. 17) :

$$D_{apparente}^{PM}(t + dt) = D_{apparente}^{PM}(initial) * (1 + \beta * w(t)) \quad (V. 17)$$

$w(t)$ est la variable d'endommagement à l'instant t et β un paramètre identifiable par l'utilisateur. Cette loi linéaire permet donc de faire varier le coefficient de diffusion apparente des alcalins entre sa valeur initiale et $(1 + \beta) * \text{valeur initiale du coefficient}$.

En ce qui concerne le coefficient de diffusion apparente dans les agrégats réactifs, cela s'avère un peu plus compliqué étant donné qu'il n'y a pas d'endommagement. Il faut donc déterminer en premier lieu un instant, ou encore la valeur de l'avancement de la réaction $\delta V_{REACTION}$, à partir desquels on considère que les granulats réactifs se dégradent et donc que leurs coefficients de diffusion augmentent. La loi linéaire choisie s'écrit alors (V. 18) :

$$\begin{aligned} & \text{A partir de } \delta V_{REACTION} = F \\ & D_{apparente}^{ag\ réac}(t) = D_{apparente}^{ag\ réac}(initial) * \alpha \end{aligned} \quad (V. 18)$$

F est la valeur de déclenchement de la modification du coefficient de diffusion apparente dans les agrégats réactifs et α un paramètre identifiable par l'utilisateur.

Pour les granulats non réactifs, nous considérons que leur coefficient de diffusion n'évolue pas au cours de la réaction.

Nous verrons dans le chapitre suivant l'influence de la modification des coefficients de diffusion apparente dans les agrégats réactifs et dans la matrice cimentaire sur le déroulement de la réaction alcali-silice.

V.3. Le schéma de résolution complet implémenté dans FEMCAM

Une fois la mise en donnée géométrique d'un cas (dimension, géométrie, maillage) effectuée grâce au pré processeur de l'outil numérique, l'utilisateur devra fournir un certain nombre de données tant mécaniques que chimiques que nous allons toutes référencer ici (Tab. 1) :

Types de données	Noms des données utilisateurs	Signification
Création de la structure mésoscopique du béton	Nb_granulats	Nombre de granulats à générer pour le squelette
	Nb_classe_granulaire	Nombre de classes granulaires présentes dans le squelette
	Diam	Diamètre des grains de chaque classe granulaire
	Nb_classe	Nombre de grains à générer pour chaque classe granulaire
Caractéristiques mécaniques du béton	E_{ini}^{PM}	Module d'Young initial de la pâte de mortier
	$E_{ini}^{ag R}$	Module d'Young initial des agrégats réactifs (siliceux)
	$E_{ini}^{ag NR}$	Module d'Young initial des agrégats non réactifs
	$\nu_A = \nu_{PM}$	Coefficients de Poisson du matériau béton
Paramètres du modèle d'endommagement de Mazars	A_C	lié à l'évolution de l'endommagement en compression
	B_C	lié à l'évolution de l'endommagement en compression
	A_T	lié à l'évolution de l'endommagement en traction
	B_T	lié à l'évolution de l'endommagement en traction
	ϵ_{D0}	Seuil d'endommagement
	$\tilde{\epsilon}_C^{crit}$	Seuil de fissuration en compression
	$\tilde{\epsilon}_T^{crit}$	Seuil de fissuration en traction
Paramètres du modèle chimique de représentation de la réaction alcali-silice	$[Na^+]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en alcalins dans la pâte de mortier
	$[Na^+]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en alcalins dans les agrégats
	$[SiO_2]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en silice dans la pâte de mortier
	$[SiO_2]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en silice dans les agrégats
	C_{limite}	Concentration seuil en alcalins
	K	Constante cinétique
	λ	Coefficient stoechiométrique

	$D_{apparente}^{PM}$	Coefficient de diffusion apparente de la pâte de mortier
	$D_{apparente}^{Ag}$	Coefficient de diffusion apparente des agrégats
	% RAS	Pourcentage de granulats réactifs dans le squelette
Couplage chimie → mécanique	G	Constante exprimant le gonflement granulaire
Couplage mécanique → chimie	F	Seuil d'avancement de la réaction
	β	Relié à la modification de la diffusion dans la pâte de mortier
	α	Relié à la modification de la diffusion dans les granulats réactifs

Tableau 1 : Référencement des différents paramètres du modèle numérique de la réaction alcali-silice

Ce tableau contient 29 paramètres dont 11 à déterminer par des essais mécaniques couplés à une analyse inverse, 8 à identifier numériquement et 4 à déterminer expérimentalement (essais pour déterminer les différentes concentrations).

Une fois ce jeu de données utilisateurs fourni à l'outil numérique, le schéma de résolution du modèle numérique couplé chimie-mécanique implémenté dans FEMCAM et résolu pour chaque pas de temps peut se représenter ainsi (Fig. 5) :

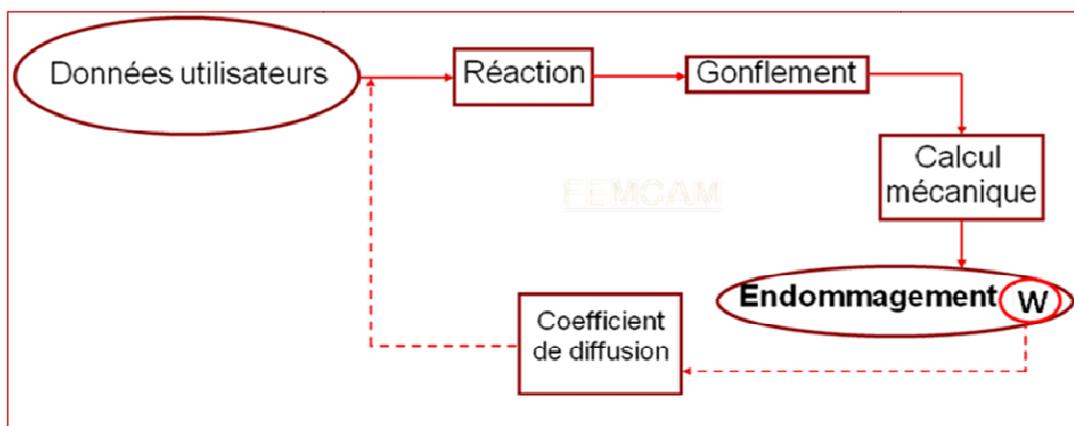


Figure 5 : Représentation de l'implémentation dans FEMCAM du modèle couplé chimie-mécanique

A chaque incrément de temps, l'algorithme de résolution va se dérouler ainsi :

- Résolution de l'équation de diffusion/réaction pour les ions alcalins (bilan de conservation).
- Résolution de l'équation différentielle pour la gestion de l'épuisement de la silice (équation de cinétique locale pour les éléments appartenant aux granulats réactifs et ayant réagi).
- Couplage chimie → mécanique via le gonflement des granulats réactifs.

- Calcul mécanique qui va permettre de calculer les déformations, les contraintes et bien sûr l'endommagement dans le matériau (impact du gonflement des agrégats réactifs sur les propriétés mécaniques de la matrice cimentaire).
- Couplage mécanique → chimie qui va modifier les coefficients de diffusion apparente pour le prochain incrément de calcul.

Le modèle couplé chimie-mécanique étant maintenant implémenté dans l'outil numérique aux éléments finis 3D FEMCAM, nous allons pouvoir passer à l'étape de validation de ce modèle. Nous avons pour cela accès à un grand nombre de résultats numériques grâce au post processeur de l'outil numérique mais aussi au stockage de nombreuses informations que l'on va pouvoir comparer aux résultats expérimentaux dont nous disposons. Cette phase de validation devra être précédée d'un travail d'identification d'un certain nombre de paramètres du modèle que nous avons déjà mentionné.

Références bibliographiques

Bulteel, D., Garcia-Diaz E., Vernet C., Zanni H., **2002**, *Alkali-silica reaction: a method to quantify the reaction degree*, Cement and Concrete Research, Vol. 32, pp. 1199-1206.

Garcia-Diaz, E., Riche, J., Bulteel, D., **2003**, *A new method to improve the diagnose of the alkali-silica reaction in concrete*, 1st International Conference of Concrete Repair, Proc. Of Int. Conf. of Saint Malo, Vol. 1, pp. 391-398.

Garcia-Diaz, E., Riche, J., Bulteel, D., Vernet, C., **2005**, *Mechanism of damage for the alkali-silica reaction*, Cement and Concrete Research, Vol. 36, pp. 395-400.

Riche, J., 2003, *Quantification de la réaction alcali-silice dans des matières durcies : micromortiers et bétons*, Thèse de doctorat de l'Ecole des Mines de Douai.

Sellier, A., Capra, B., Tognazzi, C., Poyet, S., **1999**, *Couplage dégradation-diffusion, chapitre 8 de la communication : La dégradation des bétons-couplage fissuration-dégradation chimique*, sous la direction de J.-M. Torrenti, O. Didry, J.-P. Ollivier, F. Plas dans la série : communications en mécanique, Ed. Hermès.

CHAPITRE VI :
VALIDATION NUMERIQUE DU MODELE ET
IDENTIFICATION DE PARAMETRES

VI.1 PRESENTATION DES MESURES EXPERIMENTALES	98
VI.1.1. Les mesures liées à la chimie de la réaction	99
VI.1.2. Les données liées au comportement mécanique	103
VI. 2. IDENTIFICATION DES PARAMETRES DU MODELE.....	106
VI.2.1. Présentation du modèle numérique	106
VI.2.2. Identification de la constante cinétique K.....	108
VI.2.3. Identification du paramètre lié au gonflement granulaire G	109
VI.2.4. Identification de la concentration limite C_{limite}	110
VI.3. VALIDATION NUMERIQUE DU MODELE	112
VI.3.1. Evolution de la géométrie d'une éprouvette au cours de la réaction	113
VI.3.2. Comparaison des données d'avancement expérimental et numérique.....	115
VI.3.3. Evolution des caractéristiques mécaniques au cours de la réaction.....	117
VI.3.3.a. Essai de compression simple.....	117
VI.3.3.b. Essai de flexion trois points	119
VI.3.3.c. Discussions	120

Ce chapitre vise à confronter les résultats obtenus par le modèle aux mesures expérimentales. Il traitera en premier lieu de l'identification de certains paramètres du modèle couplé chimie-mécanique, présenté précédemment, et qui ne sont donc pas accessibles directement par l'expérience. Dans une seconde partie, nous validerons ce modèle en comparant les résultats numériques générés avec les résultats expérimentaux obtenus lors de campagnes expérimentales ultérieurement réalisées au département de génie civil et environnemental de l'Ecole des Mines de Douai. Il s'en suivra une large discussion notamment autour des résultats obtenus sur l'évolution des caractéristiques mécaniques d'une éprouvette au cours de la réaction alcali-silice.

VI.1 Présentation des mesures expérimentales

Deux types de données expérimentales vont servir pour identifier mais aussi valider le modèle couplé chimie-mécanique présenté dans les chapitres précédents. Il y a tout d'abord les données expérimentales liées à la chimie, c'est-à-dire le suivi de certaines variables comme l'avancement de la réaction ou encore les variations géométriques de l'éprouvette au cours de l'évolution de la réaction. Le second type de données sur lesquelles nous allons nous appuyer sont des données liées à la mécanique qui permettent de déterminer l'évolution de la résistance du matériau au cours de la réaction par le biais du module d'Young ou encore des résistances en traction et en compression.

Toutes ces données expérimentales ont été obtenues lors de travaux précédents réalisés au Département de Génie Civil et Environnemental de l'Ecole des Mines de Douai par S. Dehaut [Dehaut, 2002], J. Riche [Riche, 2003], D. Bulteel [Bulteel, 2002] et E. Garcia-Diaz [Garcia-Diaz, 2005]. Toutes ces études ont en commun la formulation du béton utilisée ainsi que le protocole d'accélération de la réaction alcali-silice. La formulation pour 1 m³ de béton est la suivante (Tab. 1) :

Ciment CEM I 42,5R	500 kg
Sable calcaire non réactif	552 kg
Granulats calcaires non réactifs	583 kg
Granulats silex réactifs	583 kg
Eau	200 L

Tableau 1 : Formulation du béton considérée

Le ciment utilisé est un CEM I 42,5 R dont la teneur en alcalin équivalent est de 0,99% (l'analyse chimique de ce ciment a été réalisée par fluorescence X). Le choix de ce ciment a été motivé par sa quantité élevée en alcalins, qui le situe directement dans des conditions favorables au développement de l'alcali-réaction.

Le sable utilisé est un sable calcaire du Boulonnais non lavé de ses fines dont le diamètre des grains le composant est compris entre 0 et 4 mm.

Les granulats non réactifs sont des gravillons du Boulonnais composés à 98% par du calcaire et dont le diamètre des grains est compris entre 6 et 20 mm. L'essai microbar, qui est un essai accéléré (3 jours) sur mortier permettant de caractériser la réactivité d'un granulat vis-à-vis de l'alcali-réaction a permis de montrer que ce type de granulats pouvait être considéré comme non réactif.

Les granulats réactifs sont des gravillons Savreux composés à plus de 99% de silice et dont le diamètre des grains est compris entre 5 et 20 mm. L'essai microbar a montré que ce type de granulats se classait dans la catégorie des granulats potentiellement réactifs à effet pessimum

c'est-à-dire que l'expansion passe par un maximum en fonction du rapport C/G (quantité de ciment sur quantité de granulats) (Fig. 1) :

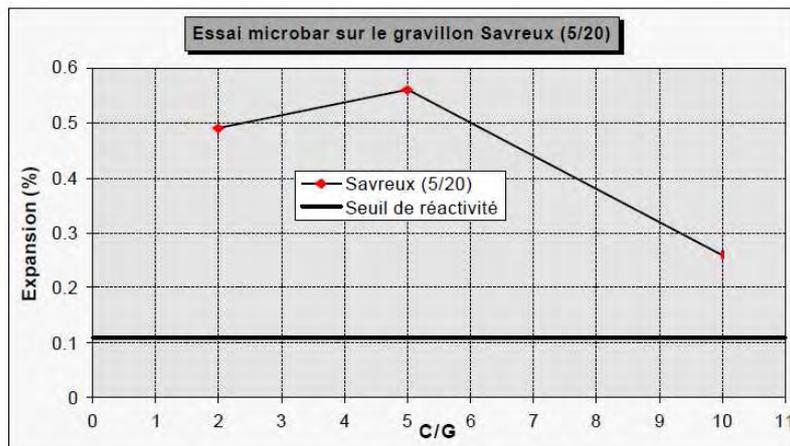


Figure 1 : Essai microbar (NF P 18-588) sur le gravillon Savreux (5/20) [Dehaut, 2002]

Le squelette granulaire est donc composé de la même quantité de granulats potentiellement réactifs et non réactifs. Le rapport E/C est de 0,4.

Des éprouvettes parallélépipédiques de dimension 7*7*28 cm et cylindriques de dimension 16*32 cm sont fabriquées avec cette composition de béton. Elles sont démoulées à 24h puis conservées 7 jours en durcissement sous eau avant d'être placées en autoclave à 60°C et 100% d'humidité relative afin d'accélérer la réaction (Fig. 2).

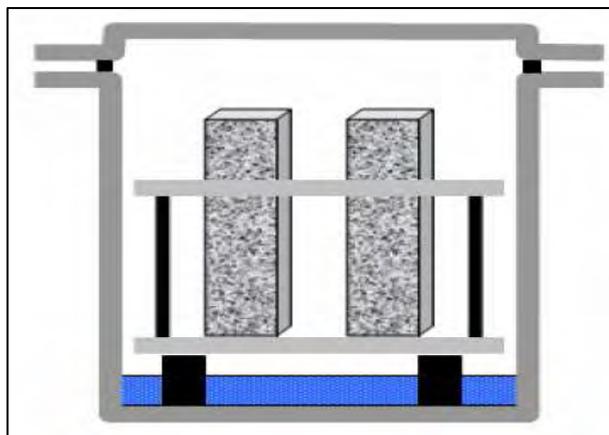


Figure 2 : Schéma représentant la mise en autoclave des éprouvettes testées

Chaque semaine, des mesures sont effectuées sur les éprouvettes. Celles-ci sont sorties 24h auparavant de l'autoclave et disposées dans une salle climatisée à 20°C et 50% d'humidité relative afin d'éviter toutes erreurs de mesures liées à la dilatation thermique.

VI.1.1. Les mesures liées à la chimie de la réaction

Les données liées à la chimie sont issues de la thèse de J. Riche [Riche, 2003]. Elles vont être suivies tout au long de la réaction, elles sont au nombre de trois et se mesurent sur les éprouvettes parallélépipédiques :

- mesure de l'expansion longitudinale par palpeur incrémental ;

- mesure du gonflement volumique de l'éprouvette par la méthode de la pesée hydrostatique ;
- mesure du gonflement volumique du squelette siliceux de l'éprouvette.

Le principe de la mesure à l'aide du palpeur incrémental (Fig. 3) consiste à comparer la longueur des prismes, équipés de plots noyés à leurs extrémités, à la longueur d'une barre étalon en Invar de 28 cm. La précision de cette mesure est de l'ordre de $0,5\mu\text{m}$.

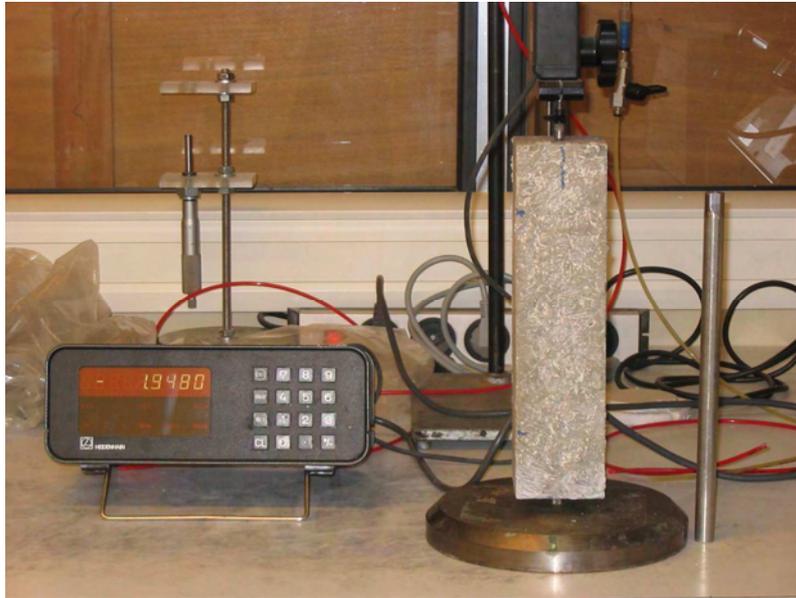


Figure 3 : Mesure par palpeur incrémental

La longueur de la même face de chaque éprouvette est alors mesurée chaque semaine afin d'obtenir la variation de l'allongement linéique au cours du temps.

La mesure de la variation volumique de l'éprouvette au cours du temps se fait grâce à la méthode de pesée hydrostatique basée sur le principe de la poussée d'Archimède. La pesée hydrostatique se fait dans un bac contenant de l'eau et à l'aide d'une balance, dont la précision est de 0,01 g, munie d'un crochet auquel est suspendu un panier grillagé servant à recevoir l'éprouvette (Fig. 4) :



Figure 4 : Balance de précision et bac à eau pour la pesée hydrostatique

Le calcul du volume d'une éprouvette V se fait par différence de pesée à l'air (M_a) et de pesée hydrostatique (M_h) (VI. 1) :

$$V = \frac{M_a - M_h}{\rho_{eau}} \quad (\text{VI. 1})$$

ρ_{eau} = masse volumique de l'eau

La figure suivante présente les deux mesures de gonflement réalisées en fonction du temps d'autoclave des éprouvettes (Fig. 5) :

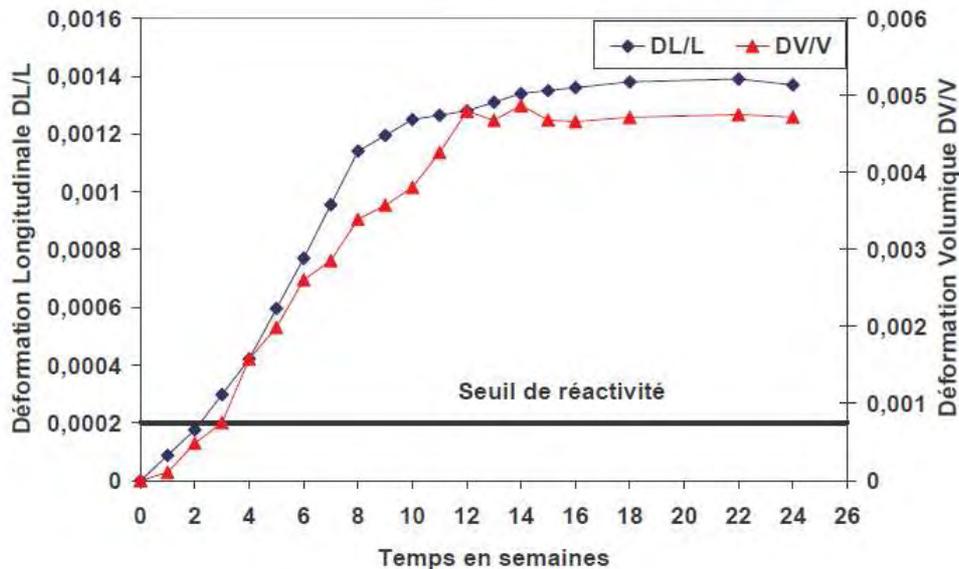


Figure 5 : Déformation longitudinale DL/L et volumique DV/V en fonction du temps [Riche, 2003]

L'asymptote de gonflement pour cet essai réalisé à 60°C est atteinte après 12 semaines de mise en autoclave et elle est 6 à 7 fois supérieure au seuil de réactivité ($DL/L = 0,02\%$). Le seuil de réactivité est rapidement dépassé entre la deuxième et troisième semaine.

Afin de mesurer la variation volumique du squelette siliceux d'une éprouvette, il a été mis au point au DGCE de Douai une méthode d'extraction des granulats. Ce protocole se divise en trois étapes. La première consiste à broyer finement une éprouvette de béton. Le mélange obtenu est alors une poudre de béton fine et homogène. La seconde étape consiste en l'extraction des granulats. Pour cela, il faut éliminer les éléments apportés par le ciment et contenus dans la fine poudre. Ce traitement chimique se fait en trois étapes détaillées par J. Riche [Riche, 2003]. A l'issue de ces trois étapes, il est obtenu un mélange de silice saine (tétraèdres Q_4) et dégradée (tétraèdres Q_3) d'une pureté supérieure à 99%. La troisième étape consiste à déterminer le volume absolu molaire et le volume poreux molaire de l'échantillon afin de déterminer le volume apparent du squelette siliceux (somme du volume poreux et du volume absolu). Il est alors possible de déterminer la variation volumique du squelette siliceux au cours de la réaction (Fig. 6) :

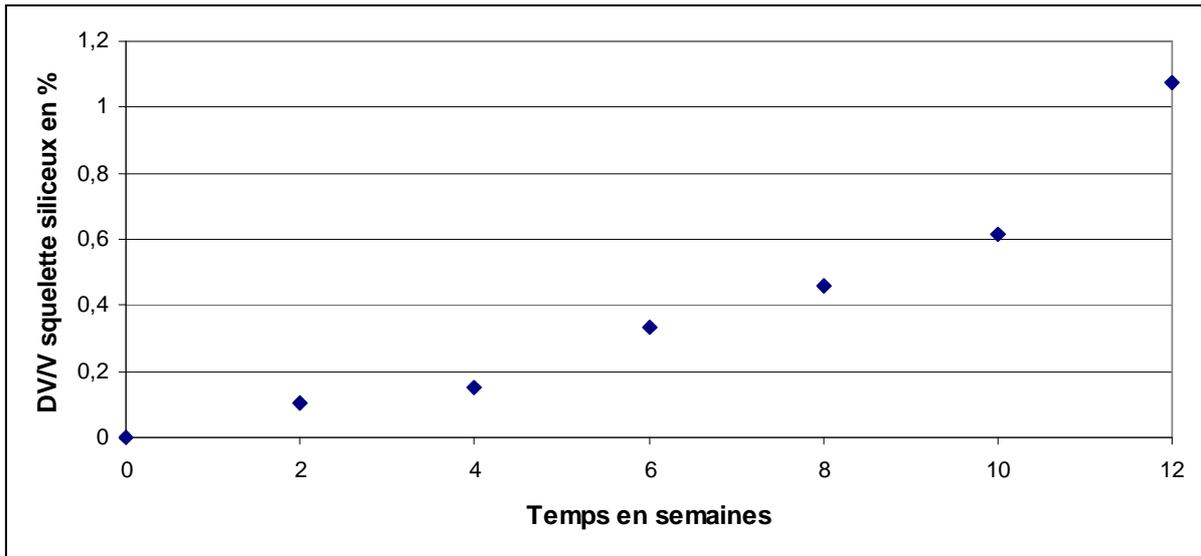


Figure 6 : Variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps de réaction

A la différence des deux autres techniques, cette mesure est destructive. Avec ce protocole, nous pouvons aussi accéder à l'avancement de la réaction définie comme suit (VI. 2) :

$$\begin{aligned}
 \text{avancement} &= \frac{\text{nombre de moles de } Q_3 \text{ formées}}{\text{nombre de moles de } Q_4 \text{ initial}} \\
 &= \frac{\text{nombre de moles de silice consommées}}{\text{nombre de moles de silice initial}}
 \end{aligned}
 \tag{VI. 2}$$

Le graphique suivant représente l'avancement de la réaction en fonction du temps (Fig. 7) :

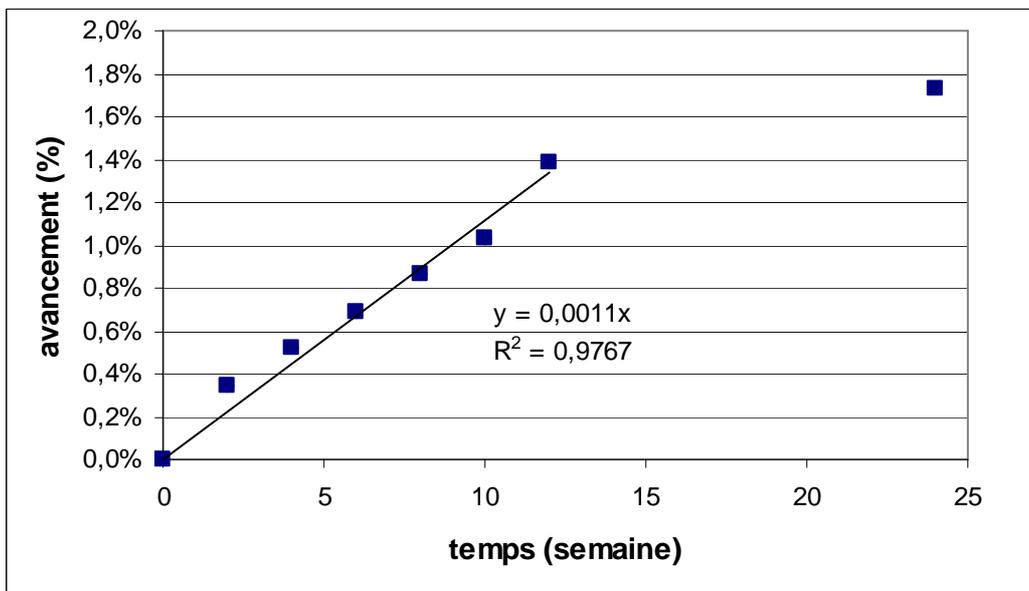


Figure 7 : Avancement de la réaction alcali-silice en fonction du temps

Les deux variables dimensionnelles et la variable chimique citées précédemment vont nous permettre de caler et de valider le modèle chimique de représentation de la réaction

alcali-silice élaboré dans les chapitres précédents. Nous allons aussi avoir besoin de certaines données d'ordre mécanique afin de valider le couplage chimie-mécanique du modèle.

VI.I.2. Les données liées au comportement mécanique

Nous disposons aussi de trois types de données liées au comportement mécanique [Dehaut, 2002] afin de les comparer aux résultats donnés par le modèle numérique :

- l'évolution du module d'Young ;
- l'évolution de la résistance à la rupture en compression ;
- l'évolution de la résistance à la rupture en traction.

La mesure de l'évolution du module d'Young et de l'évolution de résistance à la rupture en compression se fait par un essai de compression uniaxiale sur des éprouvettes cylindriques de dimension 14*7 cm elles-mêmes carottées dans des éprouvettes cylindriques de dimension 16*32 cm soumis à la réaction alcali-silice. Il y a deux sens de carottage afin d'observer un éventuel sens privilégié de fissuration. Pour obtenir des faces parallèles, les éprouvettes sont surfacées au soufre. Quatre jauges extensométriques sont ensuite disposées sur le cylindre comme montré sur la figure suivante (Fig. 8) :



Figure 8 : Jauges extensométriques disposées longitudinalement et transversalement sur une éprouvette cylindrique

Une presse hydraulique de 100 tonnes pilotée en déplacement avec une vitesse de 0,03 mm/s est utilisée pour comprimer les éprouvettes et une centrale d'acquisition permet d'enregistrer pendant l'essai la force de la presse ainsi que les déformations des jauges.

L'évolution de la résistance à la rupture en compression au cours du temps est donnée par la figure suivante (Fig. 9) :

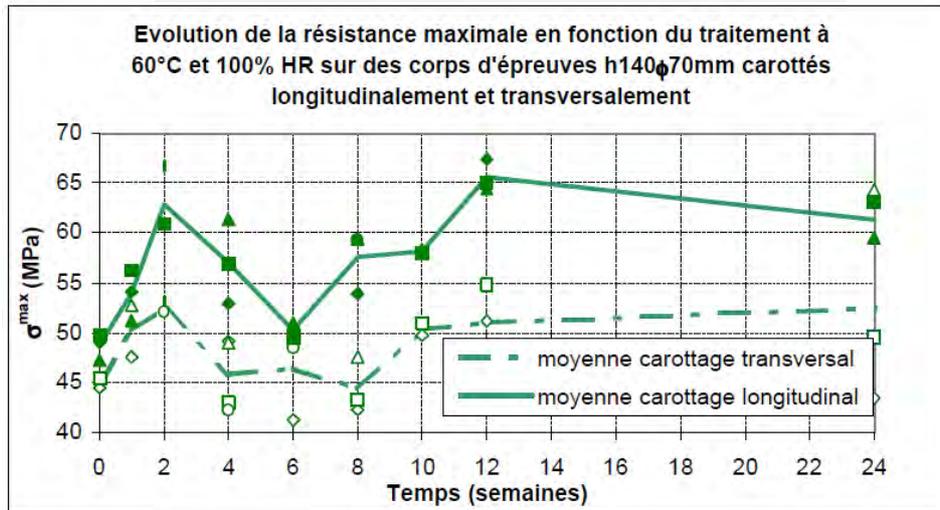


Figure 9 : Evolution de la résistance à la rupture en compression sur cylindres réactifs [Dehaut, 2002]

On peut distinguer quatre phases sur ce graphique :

- les deux premières semaines, il est observé une augmentation brutale de la résistance à la rupture. Ce phénomène s'explique par le fait que l'éprouvette ayant été mise en autoclave après seulement 7 jours de cure, elle continue de se rigidifier et les processus chimiques ne sont pas encore actifs.
- durant les 4 semaines suivantes, il y a une chute tout aussi importante de la résistance due à la dégradation induite par la réaction alcali-silice qui a déjà bien commencé ;
- de 6 à 12 semaines, il y a une nouvelle phase d'augmentation qui peut s'expliquer par le fait que certains grains de ciment n'ont pas été complètement hydratés avant la mise en autoclave et qu'ils s'hydratent désormais à cause de l'environnement très humide. Il y a certainement un phénomène de remplissage des fissures donc de cicatrisation du béton qui peut expliquer cette augmentation.
- enfin, il apparaît une phase de stabilisation des résistances.

Dehaut conclue que le double sens de carottage n'a pas permis de mettre en évidence un sens privilégié de fissuration mais nous remarquons tout de même une résistance meilleure dans le sens longitudinal d'environ 20%.

L'évolution du module d'Young au cours du temps est donnée par la figure suivante (Fig. 10) :

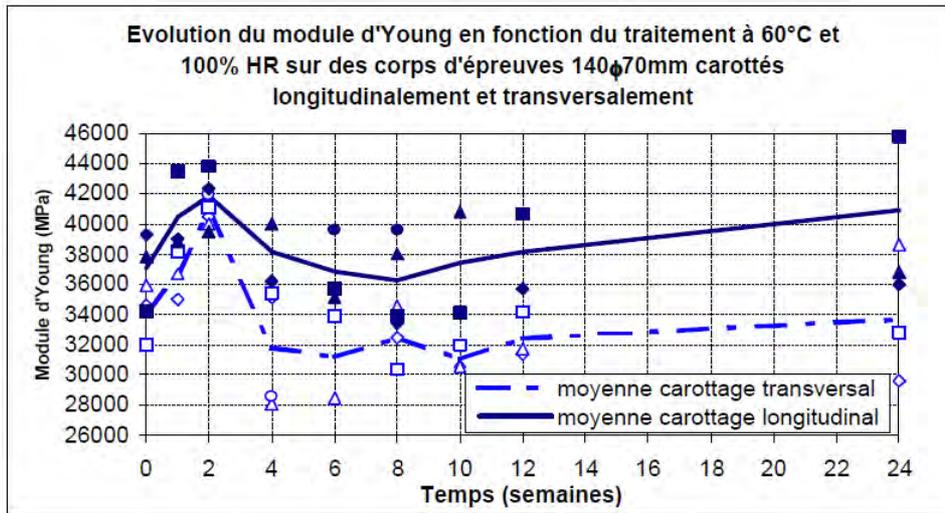


Figure 10 : Evolution du module d'Young sur cylindres réactifs [Dehaut, 2002]

Nous retrouvons pour le module d'Young une évolution relativement similaire à celle de la résistance à la rupture, avec une reprise de rigidité durant les deux premières semaines suivi d'une chute de module de l'ordre de 20% par rapport à la valeur maximale atteinte à deux semaines.

La mesure de l'évolution de la résistance à la rupture en traction se fait par un essai de flexion 3 points sur des éprouvettes parallélépipédiques 7*7*28 cm. L'échantillon est placé entre un appui fixe et une rotule et une charge est appliquée au centre de l'éprouvette jusqu'à sa rupture (Fig. 11). La presse fournit alors la charge appliquée au cours de l'essai dont il est possible de déduire la résistance à la rupture.

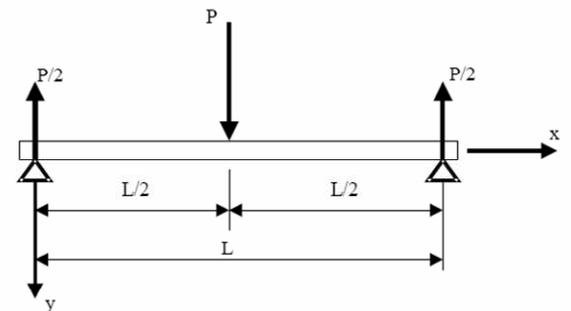


Figure 11 : Essai de flexion trois points

La figure suivante représente l'évolution du gonflement longitudinal et de la résistance à la rupture en flexion en fonction du temps (Fig. 12) :

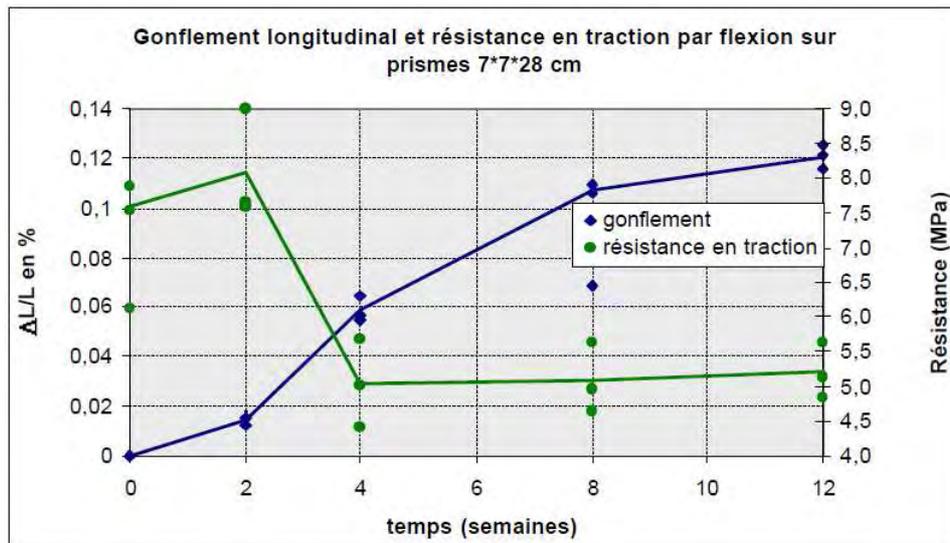


Figure 12 : Allongement linéique et résistance à la rupture en flexion sur prismes soumis à la RAS [Dehaut, 2002]

Comme sur les études précédentes, il est observé une augmentation de la résistance les deux premières semaines. Il y a ensuite une chute de l'ordre de 40% significative d'une forte dégradation du matériau puis une période de stabilisation.

Toutes ces données expérimentales, qu'elles soient dimensionnelles, chimiques ou encore mécaniques vont à la fois nous permettre d'identifier certains paramètres du modèle couplé chimie-mécanique de représentation de la réaction alcali-silice qui ne nous sont pas accessibles directement par l'expérience mais aussi de valider le modèle numérique, point essentiel de toute élaboration de modèle.

VI. 2. Identification des paramètres du modèle

Comme nous l'avons vu dans les chapitres précédents, l'élaboration du modèle chimique a nécessité la mise en place de paramètres identifiables uniquement par l'association d'une simulation numérique adaptée avec des données expérimentales sur la réaction alcali-silice. Ces paramètres sont au nombre de trois. Il s'agit de la constante cinétique, de la concentration seuil en alcalins et enfin du paramètre lié au gonflement granulaire G .

VI.2.1. Présentation du modèle numérique

Afin d'identifier les différents paramètres, nous avons décidé de modéliser une éprouvette de béton se rapprochant au plus de la réalité. La différence réside dans le nombre de gravillons composant le squelette granulaire mais aussi dans la taille du diamètre minimum des agrégats (cf. Chapitre III.1). Nous avons donc considéré une éprouvette parallélépipédique de dimension 7*7*28 cm maillée avec 186314 éléments tétraédriques et 36178 nœuds (Fig. 13).

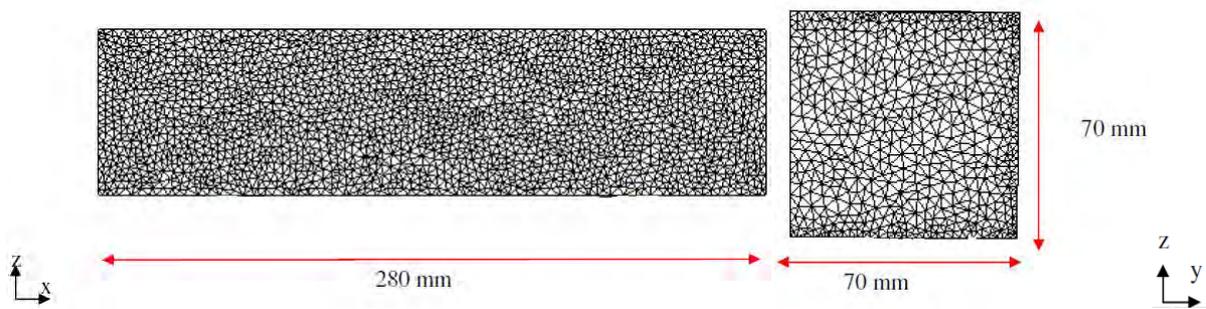


Figure 13 : Géométrie du cas test considéré

Nous avons généré un squelette granulaire représentatif de 631 granulats avec une densité volumique de 40% et dont la distribution granulaire est donnée par le tableau suivant (Tab. 2) :

Diamètre des granulats (mm)	22,5	18	14,25	11,25	9	7,15
Nombre de granulats générés pour chaque classe	8	62	106	91	128	236

Tableau 2 : Distribution granulaire du squelette de l'éprouvette

Parmi ces granulats, il est considéré que la moitié d'entre eux sont réactifs afin de respecter la formulation des campagnes expérimentales. L'éprouvette est alors représentée ainsi (Fig. 14), avec en bleu foncé les agrégats non réactifs et en bleu turquoise ceux qui sont réactifs vis-à-vis de la réaction alcali-silice.

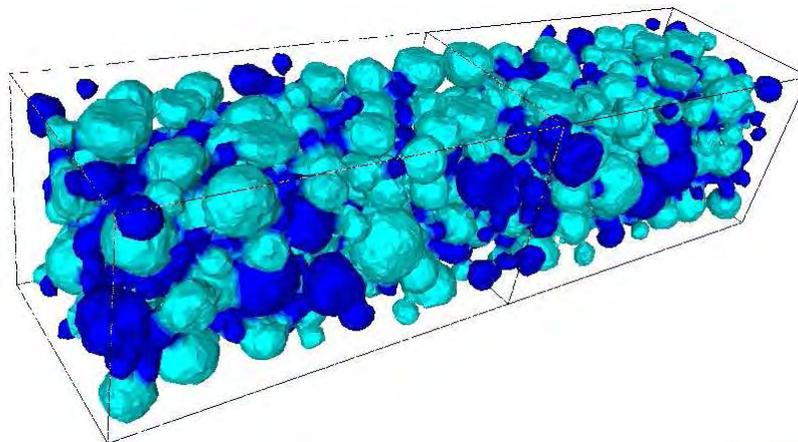


Figure 14 : Epreuve parallélépipédique hétérogène de béton composée à 50% de granulats réactifs (turquoise) et 50% de granulats non réactifs (bleu foncé)

Les caractéristiques mécaniques et les paramètres d'endommagement du modèle de Mazars considérés sont ceux présentés au chapitre IV. Ils ont été identifiés par [Comby, 2006] sur un béton de même formulation que celui sur lequel ont été réalisées les campagnes expérimentales de suivi de la réaction (cf. Chapitre VI.1).

Les concentrations initiales en alcalins et en silice ont été calculées simplement en connaissant la composition du ciment, la masse molaire et la masse volumique de la silice ainsi que le volume de chacune de ces phases. Nous obtenons alors ces concentrations initiales (Tab. 3) :

	Dans les granulats réactifs	Dans la pâte de mortier	Dans les granulats non réactifs
Concentration initiale en alcalins en mol/mm ³	0	4,7 .10 ⁻⁷	0
Concentration initiale en silice en mol/mm ³	4,33 .10 ⁻⁵	0	0

Tableau 3 : Concentrations initiales dans l'éprouvette

Le coefficient stœchiométrique est considéré égal à 1, c'est-à-dire qu'une mole de Q₄ réagit avec une mole d'ions hydroxyles pour former une mole de Q₃.

En ce qui concerne les coefficients de diffusion apparente des alcalins dans les différents milieux, nous nous sommes là aussi appuyés sur la littérature. Nous avons utilisé le même coefficient de diffusion pour la pâte de mortier que celui que S. Poyet [Poyet, 2003] a déterminé lors de son travail de thèse. Pour le coefficient de diffusion apparente des alcalins dans les granulats, nous ne disposons pas de données fiables. Nous avons donc postulé que ce coefficient devait être moins élevé que celui de la pâte de mortier car les granulats, qu'ils soient calcaires ou siliceux, présentent une porosité bien plus faible. Les coefficients de diffusion apparente qui regroupent à la fois les phénomènes de diffusion pure mais aussi ceux de transport sont donnés par le tableau suivant (Tab. 4) :

	Dans les granulats réactifs	Dans la pâte de mortier	Dans les granulats non réactifs
Coefficient de diffusion apparente en mm ² /s	5 .10 ⁻⁸	5 .10 ⁻⁶	5 .10 ⁻⁸

Tableau 4 : Coefficients de diffusion apparente dans l'éprouvette

Pour l'identification de ces paramètres, nous ne considérons que le couplage chimie → mécanique et non le couplage inverse.

VI.2.2. Identification de la constante cinétique *K*

Cette constante rend compte de la cinétique de la réaction alcali-silice c'est-à-dire de la vitesse de réaction entre la silice et les alcalins qui diffusent dans les granulats réactifs. Pour l'identifier, nous avons testé une large gamme de valeurs comprises entre 10⁻² et 10⁻¹⁰ s⁻¹. Il est à noter que pour cette identification, la concentration seuil en alcalins est considérée comme nulle ainsi que le paramètre de gonflement *G*. Nous avons ensuite comparé, pour chaque valeur de *K* testée, le nombre de moles de silice consommées au cours du temps avec les données expérimentales dont nous disposons. Une première campagne numérique de sensibilité à la constante cinétique nous a permis de déterminer que cette constante avait une valeur comprise entre 10⁻⁹ et 10⁻¹⁰ s⁻¹. Nous avons donc réalisé une seconde série de simulations afin d'affiner cette valeur et nous avons obtenu le graphique suivant (Fig. 15) :

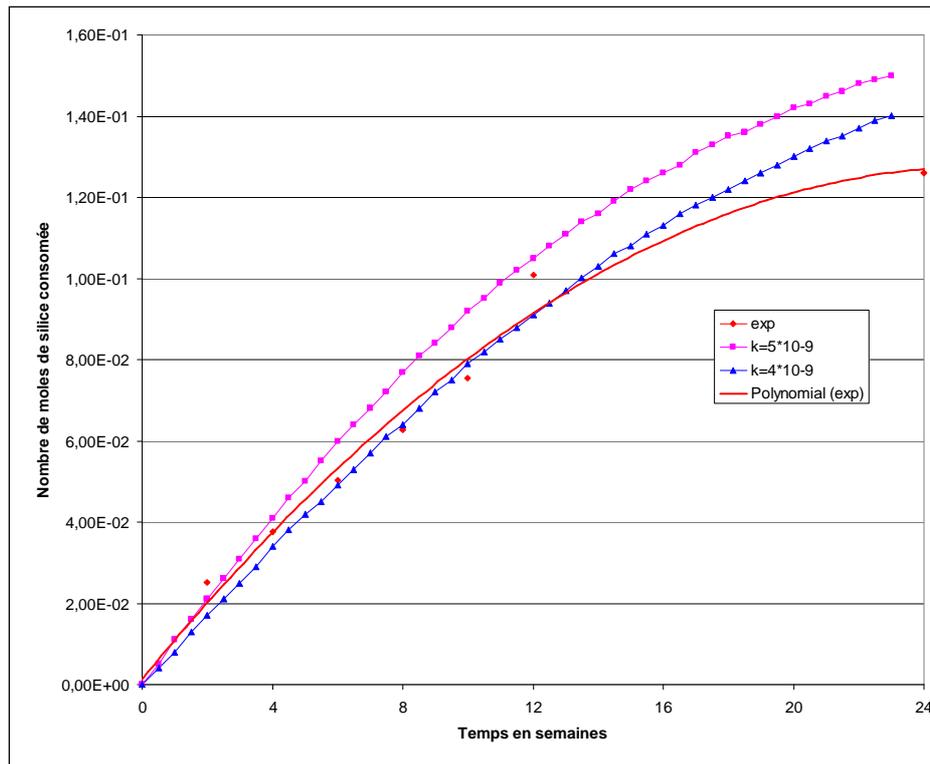


Figure 15 : Evolution du nombre de moles de silice consommées en fonction du temps de réaction en semaines pour une éprouvette soumise à la réaction alcali-silice

La valeur de la constante cinétique a donc été identifiée à $K = 4 \cdot 10^{-9} \text{ s}^{-1}$ et nous l'utiliserons dans toutes les simulations de la suite de ce manuscrit.

VI.2.3. Identification du paramètre lié au gonflement granulaire G

G est donc le paramètre qui permet de relier le gonflement granulaire associé à la réaction d'une mole de silice. Afin de l'identifier, nous avons testé une large gamme de valeurs comprises entre 1% et 15% puis nous avons comparé le gonflement volumique du squelette siliceux au cours du temps obtenu numériquement avec celui obtenu expérimentalement (Fig. 6). Pour calculer numériquement le gonflement volumique du squelette siliceux, nous calculons à chaque pas de temps le volume des éléments contenant de la silice puis nous calculons la variation volumique entre deux pas de temps avant de retrancher le volume initial de silice dans la pièce. Sur le graphique suivant, seules deux valeurs testées sont représentées, 3% et 3,5% (Fig. 16) :

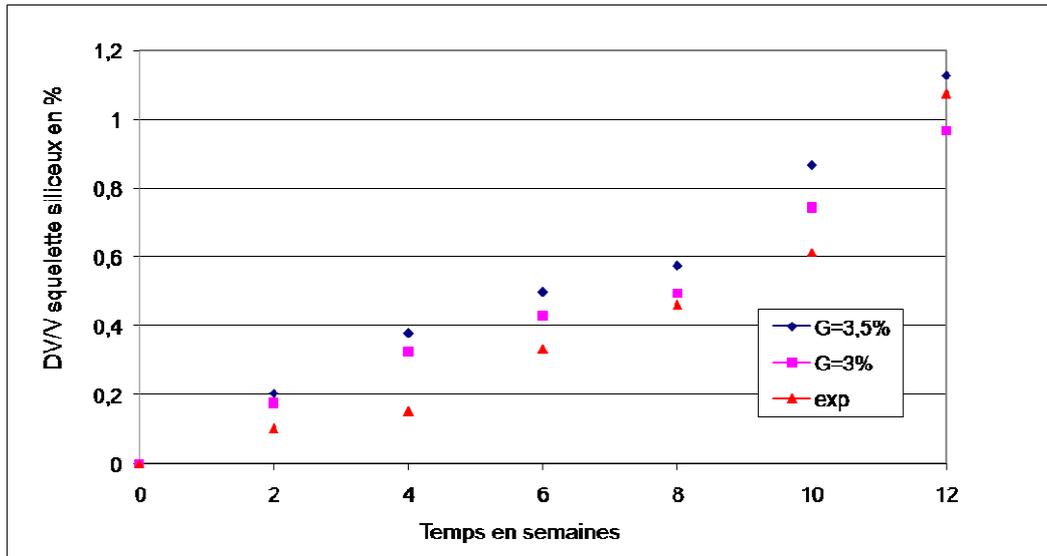


Figure 16 : Gonflement volumique du squelette siliceux au cours du temps

La valeur du paramètre de gonflement G a donc été identifiée à $G = 3\%$ et nous l'utiliserons pour toutes les simulations présentes dans la suite de ce manuscrit. Il est à noter qu'une valeur inférieure de G permettrait de mieux fitter la courbe expérimentale en début de réaction mais que le gonflement en fin de réaction serait beaucoup plus sous estimé. Nous avons donc fait un compromis et choisi de privilégier une meilleure représentation du gonflement final par la valeur de $G = 3\%$.

VI.2.4. Identification de la concentration limite C_{limite}

Le paramètre de concentration limite en alcalins à partir de laquelle la réaction débute dans le granulat réactif a été intégré au modèle car dans les expériences menées au DGCE de l'Ecole des Mines de Douai (thèse en cours d'Idriss Moundoungou), certaines observations laissaient penser qu'il fallait en effet atteindre un certain nombre de moles d'alcalins dans le grain pour que la réaction avec la silice débute. Nous avons donc testé l'influence de ce paramètre sur la réaction chimique pour des valeurs comprises entre 0,1% et 5% de la concentration initiale en alcalins. Le graphique suivant montre son impact sur le nombre de moles de silice consommées au cours de la réaction (Fig. 17) :

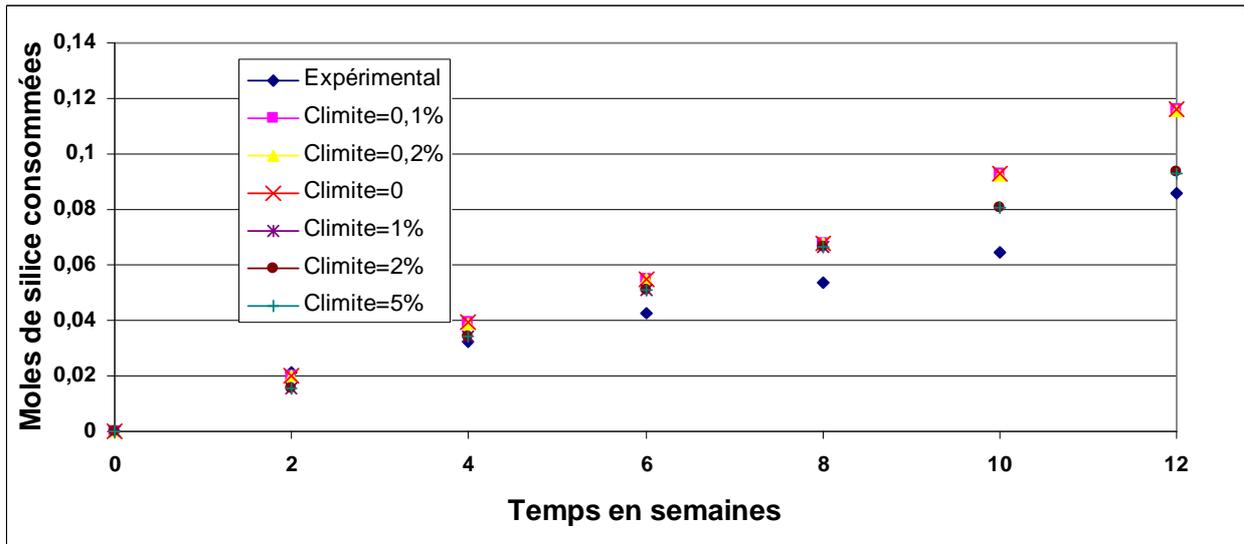


Figure 17 : Evolution du nombre de moles de silice consommées au cours du temps suivant différentes valeurs de concentration limite en alcalins

Ce graphe ne permet pas de mettre en évidence une influence marquée de la concentration seuil, nous avons donc aussi regardé son influence sur le gonflement volumique du squelette siliceux de l'éprouvette (Fig. 18) :

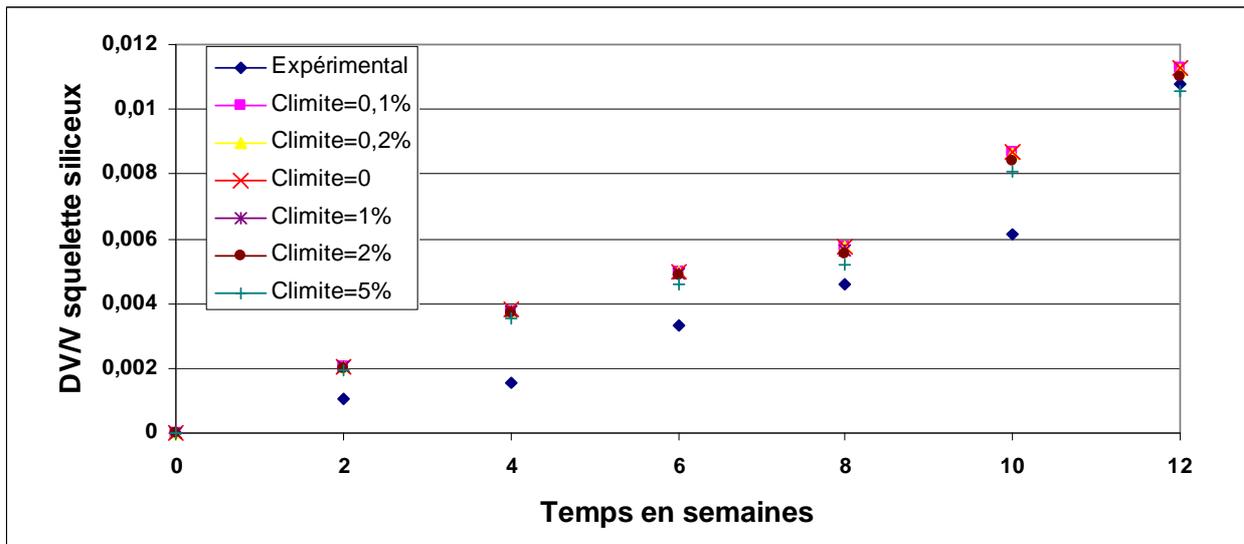


Figure 18 : Evolution du gonflement volumique du squelette siliceux de l'éprouvette au cours du temps suivant différentes valeurs de concentration limite en alcalins

Pour ce qui est de l'impact de la concentration seuil sur le gonflement volumique du squelette siliceux, nous ne constatons pas d'influence notable. Au vu de ces résultats, nous décidons de mettre le paramètre de concentration limite en alcalins égal à 0 pour le reste de nos simulations et donc dans la suite de ce manuscrit.

VI.3. Validation numérique du modèle

Pour valider notre modèle couplé chimie-mécanique, nous allons nous intéresser à trois types de données et faire la comparaison entre résultats expérimentaux et numériques. Nous nous intéresserons d'abord à l'évolution de la géométrie de l'éprouvette au cours de la réaction c'est-à-dire à son allongement linéique mais aussi à son gonflement volumique. Nous comparerons ensuite l'avancement expérimental et numérique de la réaction et nous finirons en regardant l'évolution des caractéristiques mécaniques. Pour toutes ces comparaisons, nous utiliserons deux cas test, le cas de l'éprouvette parallélépipédique présentée dans la partie précédente mais aussi celui d'une éprouvette cylindrique de diamètre 16 cm et de hauteur 32 cm (Fig. 19).

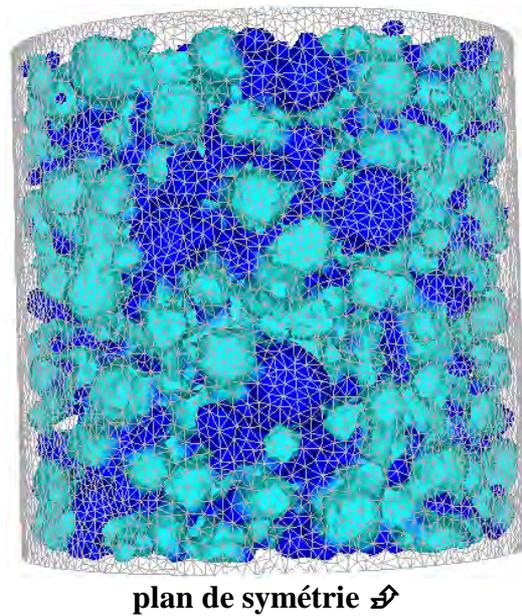


Figure 19 : Eprouvette cylindrique 16*16 cm avec un plan de symétrie et un squelette granulaire composé de 1489 granulats à 50% réactifs vis-à-vis de la RAS

Les paramètres du modèle de Mazars sont toujours ceux présentés dans le chapitre IV. Les paramètres du modèle chimique sont ceux présentés et identifiés dans la partie précédente et résumés dans le tableau suivant (Tab.5).

	Dans les gravillons réactifs	Dans la pâte de mortier	Dans les gravillons non réactifs
Concentration initiale en alcalins en mol/mm ³	0	$4,7 \cdot 10^{-7}$	0
Concentration initiale en silice en mol/mm ³	$4,33 \cdot 10^{-5}$	0	0
Coefficient stœchiométrique λ	1		
Coefficient de diffusion apparente en mm ² /s	$5 \cdot 10^{-8}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-8}$
Constante cinétique K en s ⁻¹	$4 \cdot 10^{-9}$		
Paramètre de gonflement granulaire G	3%		
Concentration limite en mol/mm ³	0		

Tableau 5 : Paramètres du modèle numérique

VI.3.1. Evolution de la géométrie d'une éprouvette au cours de la réaction

Pour valider l'évolution de la géométrie d'une éprouvette au cours de la réaction alcali-silice, nous considérons l'éprouvette parallélépipédique et nous simulons un essai de gonflement libre comme c'est le cas lors de la mise en autoclave expérimentale. Nous nous intéressons alors à deux observables : la variation volumique globale de l'éprouvette en fonction du temps de réaction (Fig. 20) ainsi que l'allongement linéique suivant la direction x (Fig. 21).

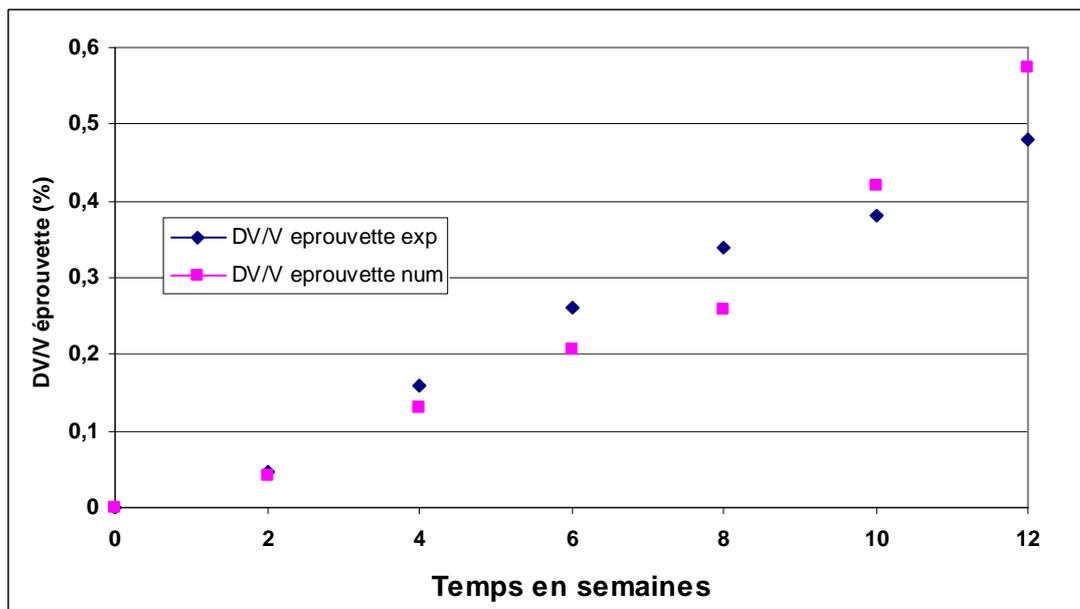


Figure 20 : Variation volumique de l'éprouvette parallélépipédique au cours de la RAS

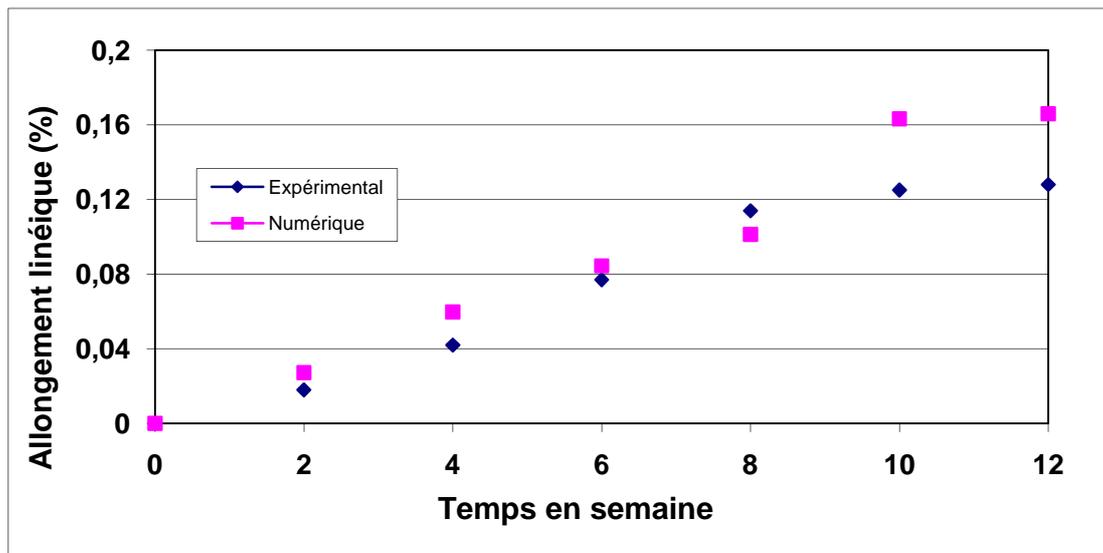


Figure 21 : Allongement linéique de l'éprouvette parallélépipédique au cours de la RAS

Dans les deux cas, le modèle numérique reproduit correctement l'évolution de la géométrie de l'éprouvette au cours de la réaction alcali-silice. On peut toutefois constater une légère surestimation par le modèle numérique des valeurs de gonflement en fin de réaction. Ce phénomène peut être lié à la façon très brutale dont nous imposons le gonflement granulaire (cf. Chapitre V) mais aussi à la non prise en compte de différents phénomènes tels que la création de fissures dans le matériau et le caractère visqueux de la pâte de mortier.

Pour confirmer la validation de notre modèle concernant l'évolution de la géométrie d'une éprouvette au cours de la réaction alcali-silice, nous pouvons aussi regarder l'évolution de la variation volumique de l'éprouvette en fonction de son allongement linéique comme cela a été présenté au chapitre II.1.2.b.i. (Fig. 22).

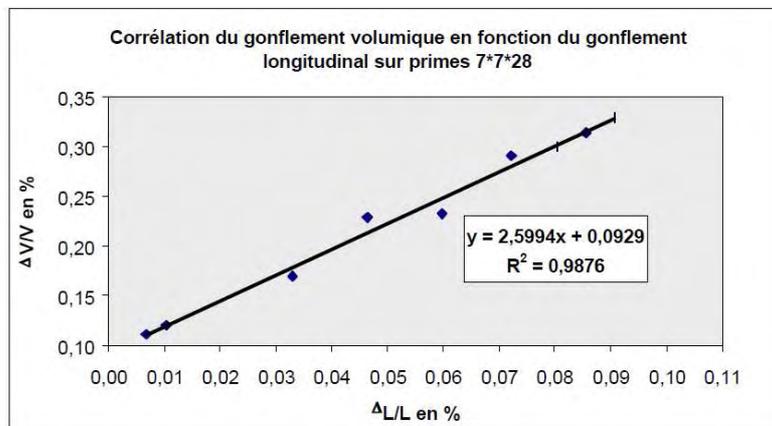
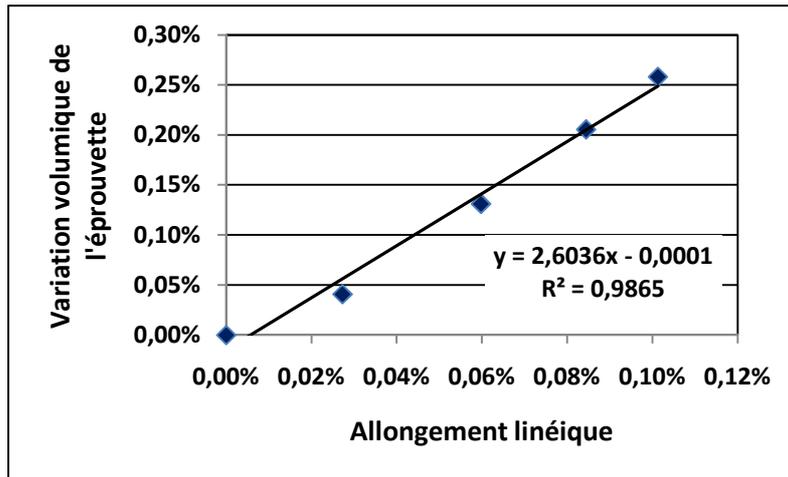


Figure 22 : Comparaison entre résultat numérique (haut) et expérimental (bas) pour la variation volumique d'une éprouvette en fonction de son allongement linéique

Nous obtenons, dans les deux cas, une pente de la droite directrice sensiblement identique et égale à 2,6.

Le modèle numérique couplé chimie-mécanique de représentation de la réaction alcali-silice reproduit correctement l'évolution de la géométrie d'une éprouvette au cours de la réaction.

VI.3.2. Comparaison des données d'avancement expérimental et numérique

Afin de vérifier la modélisation de la chimie de la réaction alcali-silice, nous avons comparé l'avancement chimique numérique avec celui trouvé expérimentalement. Le premier graphe (Fig. 23) représente l'avancement en fonction du temps de réaction pour l'éprouvette de type prisme tandis que le deuxième (Fig. 24) représente celui d'une éprouvette cylindrique.

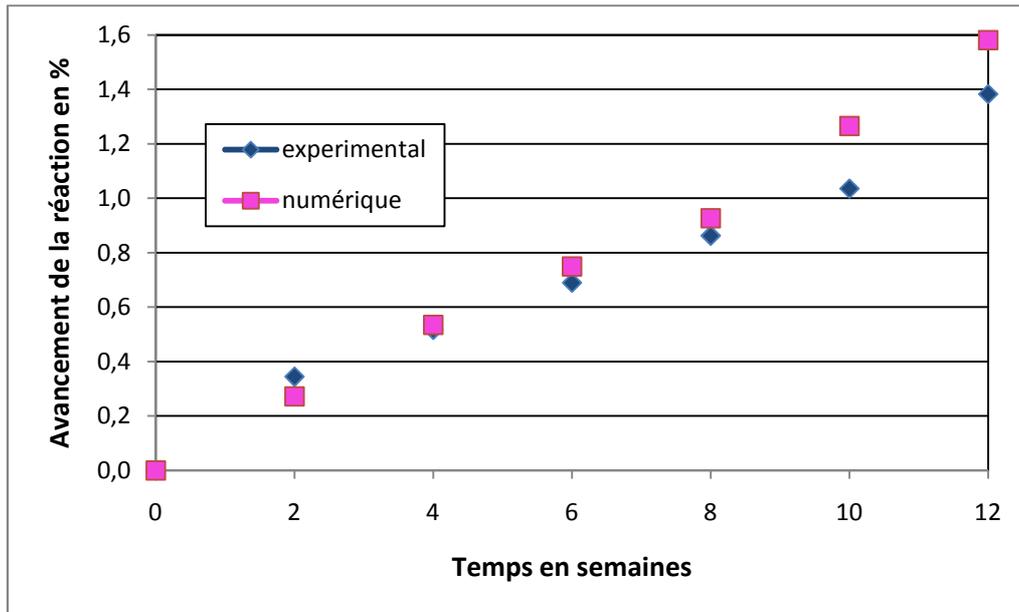


Figure 23 : Avancement de la réaction en fonction du temps pour une éprouvette parallélépipédique

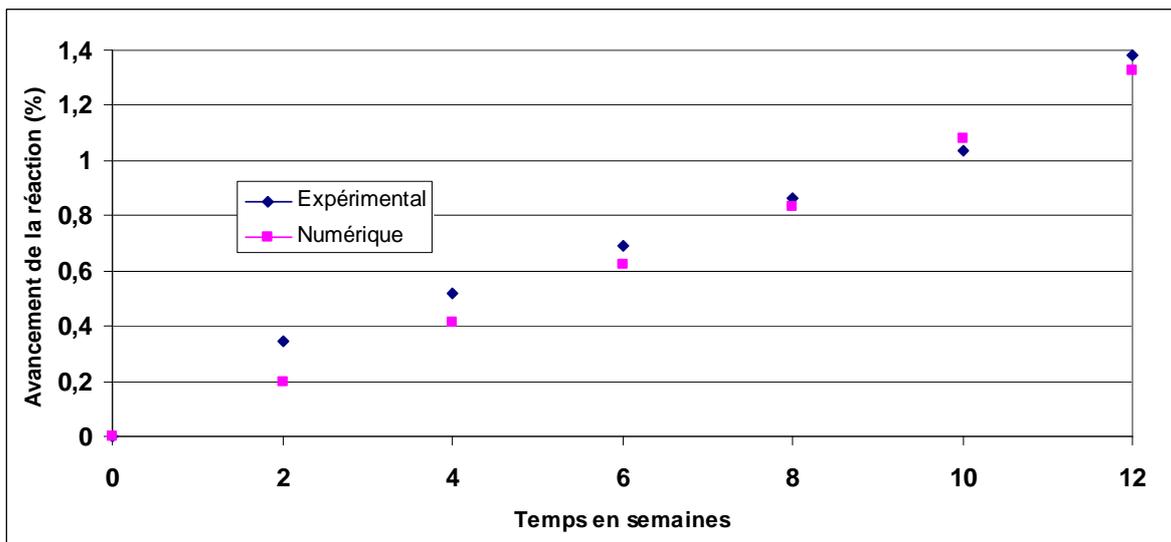


Figure 24 : Avancement de la réaction en fonction du temps pour une éprouvette cylindrique

Dans les deux cas, le modèle numérique reproduit très bien les résultats expérimentaux. Une autre observable souvent examinée est l'évolution du gonflement du squelette siliceux en fonction de l'avancement de la réaction (Fig. 25) :

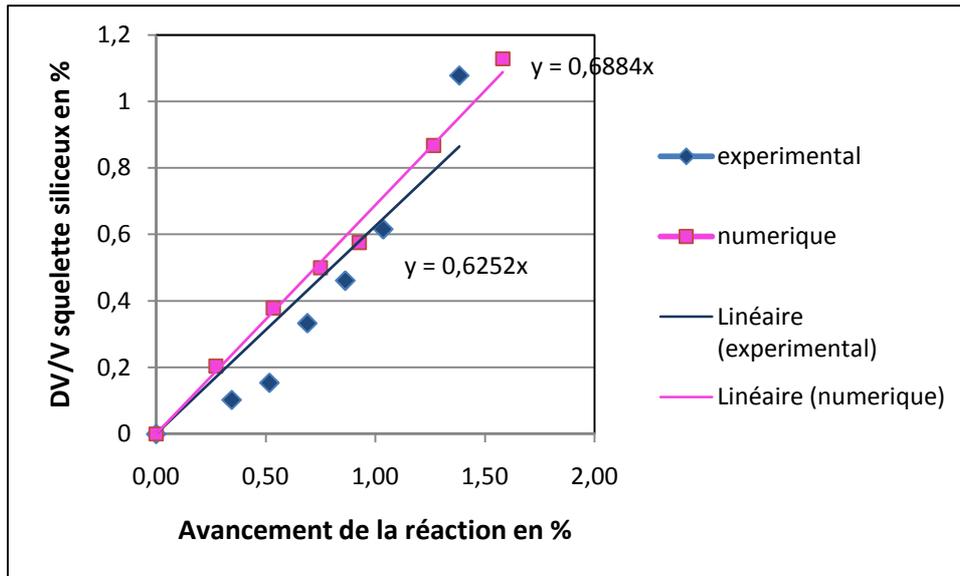


Figure 25 : Gonflement volumique du squelette siliceux en fonction de l'avancement de la réaction alcali-silice pour une éprouvette parallélépipédique

Là encore, nous retrouvons des comportements très proches entre le numérique et l'expérimental.

Le modèle numérique de représentation de la réaction alcali-silice dans le béton donne des résultats tout à fait en accord avec les résultats expérimentaux en ce qui concerne les données liées à la géométrie des éprouvettes mais aussi aux données purement chimiques de la réaction. Ces différents tests nous permettent donc de valider le modèle numérique pour ce qui est de la partie de représentation de la réaction et du gonflement engendré par celle-ci. Nous allons maintenant tenter de valider le couplage chimie-mécanique du modèle c'est-à-dire l'influence de la réaction alcali-silice sur les propriétés mécaniques d'éprouvettes en béton.

VI.3.3. Evolution des caractéristiques mécaniques au cours de la réaction

Pour suivre l'évolution des caractéristiques mécaniques d'une éprouvette soumise à la réaction alcali-silice numériquement, nous avons effectué un essai de gonflement libre comme précédemment mais nous avons stoppé la simulation à des temps définis qui sont 2, 4, 6 et 8 semaines. Nous avons ensuite effectué un essai mécanique, soit de compression unilatérale soit de flexion 3 points, pour obtenir les valeurs de module d'Young et de résistance à rupture.

VI.3.3.a. Essai de compression simple

Pour cet essai de compression unilatérale (Fig. 26), nous reprenons l'éprouvette cylindrique présentée dans la partie précédente (Fig. 19). Le contact entre l'outil et l'éprouvette est de type frottant fort, c'est-à-dire qu'il est représenté par une loi de Coulomb limitée par un critère de Tresca dont les paramètres sont : $\bar{m} = 0,4$ et $\mu_F = 0,2$. La vitesse de l'outil est de 0,01 mm/s.

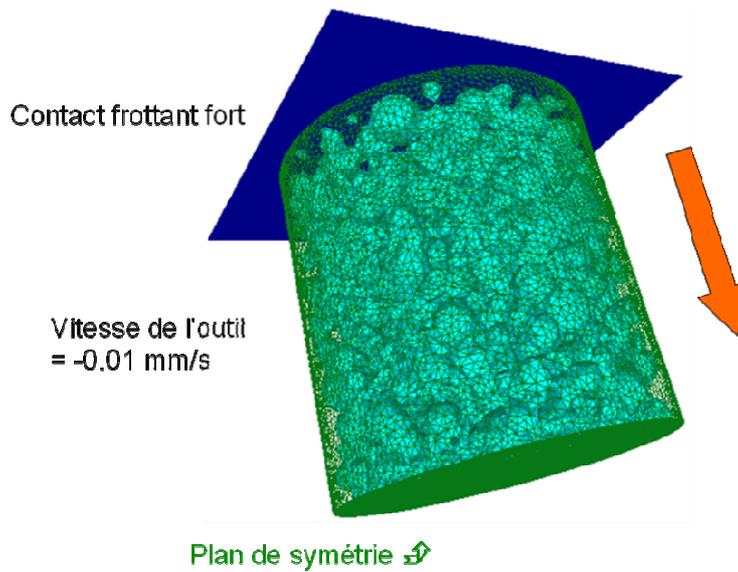


Figure 26 : Eprouvette hétérogène de béton et essai de compression unilatérale

Initialement, c'est-à-dire sur un matériau sain non encore soumis à la réaction alcali-silice, nous trouvons un module d'Young de 30830 MPa et une résistance à la rupture en compression de 55,6 MPa. Ces deux résultats sont tout à fait en accord avec les résultats expérimentaux de S. Dehaut [Dehaut, 2002] ce qui signifie que le modèle mécanique d'endommagement du béton de l'outil numérique FEMCAM est performant pour représenter le comportement d'un béton sain soumis à un essai mécanique classique. Le graphique suivant représente les courbes contrainte-déformation obtenues pour les tests effectués à différents temps de réaction ainsi que la valeur du module d'Young E calculé pour chaque courbe (Fig. 27) :

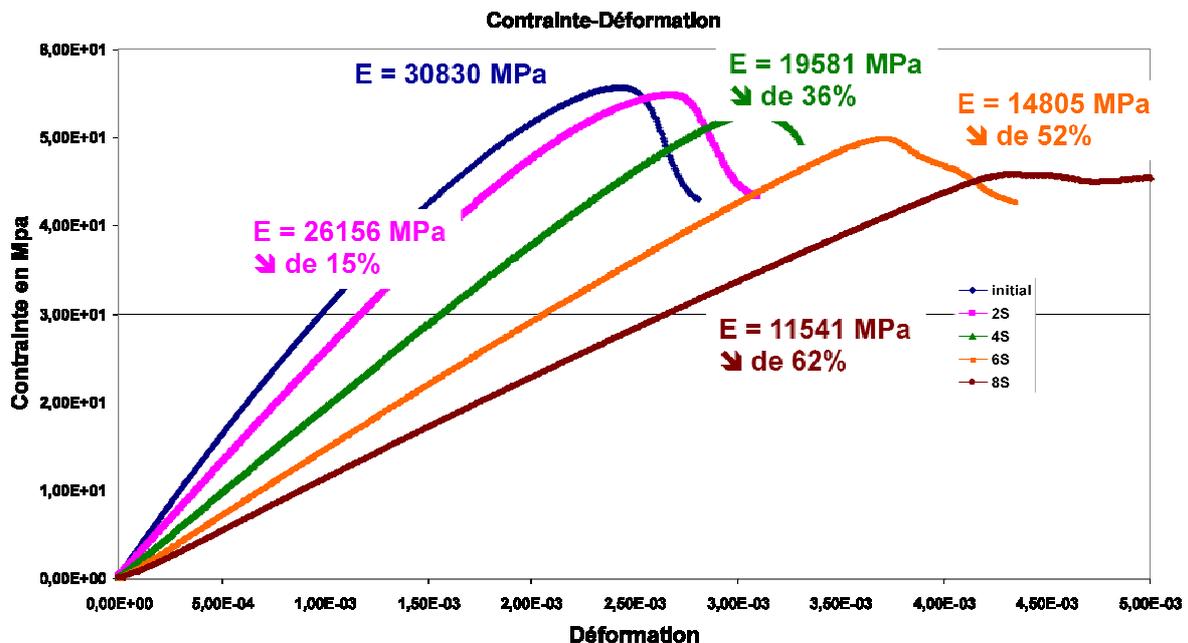


Figure 27 : Courbes contrainte-déformation pour des essais de compression unilatérale réalisés à différents temps de réaction

Nous obtenons donc une chute du module d'Young de l'ordre de 60% après 8 semaines de réaction alcali-silice (Fig. 28). Cette chute semble très importante et n'est pas en adéquation avec les résultats expérimentaux présentés en début de ce chapitre. Nous savons, grâce à l'état de l'art réalisé en début de ce manuscrit, que les chutes de module d'Young sont très diverses et variées et qu'elles s'étalonnent de 20% à 80% selon les auteurs. Ces différences s'expliquent bien sûr par des formulations de béton et des moyens d'accélération de la réaction différents mais aussi par le fait que la mesure d'un module d'Young sur un béton endommagé n'est pas triviale.

En ce qui concerne l'évolution de la contrainte à rupture en compression (Fig. 28), nous trouvons une chute de l'ordre de 20% au bout de 8 semaines ce qui est celle déterminée expérimentalement.

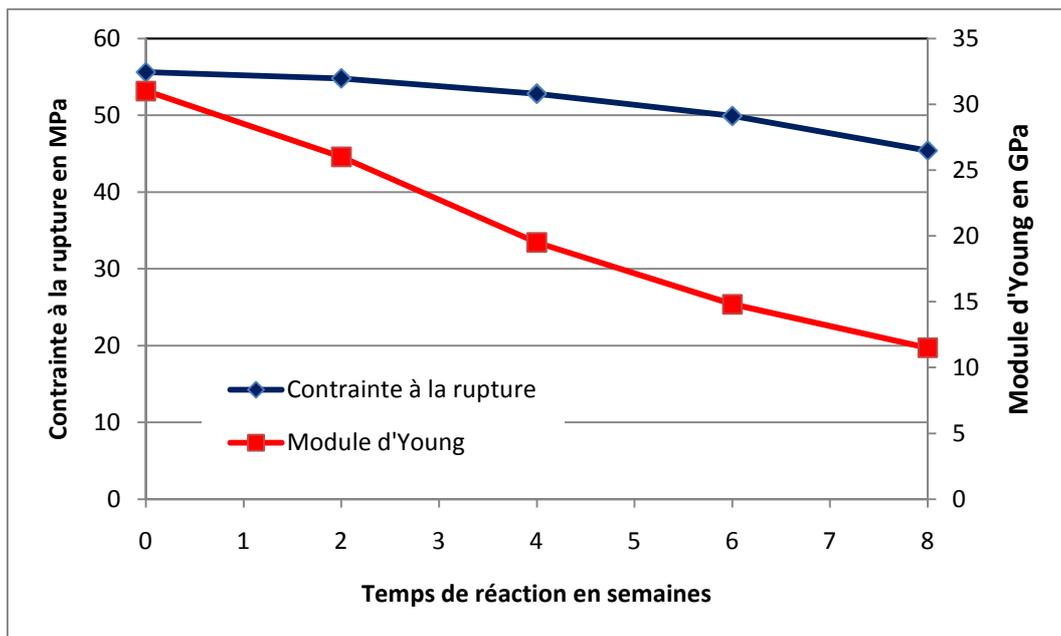


Figure 28 : Evolution de la contrainte à la rupture en compression et du module d'Young au cours de la réaction alcali-silice

Il est à noter que le modèle numérique n'est pas en mesure de reproduire la phase d'augmentation du module d'Young lors des deux premières semaines puisqu'elle conduit à des modifications des propriétés mécaniques du béton qui n'ont pas été intégrées au modèle.

Au vu de ces résultats, nous ne pouvons pas valider le couplage chimie-mécanique du modèle mais nous allons voir ce qu'il en est pour un test de flexion 3 points sur un prisme avant de tenter d'expliquer la cause du problème rencontré.

VI.3.3.b. Essai de flexion trois points

Pour cet essai de flexion 3 points, nous avons considéré l'éprouvette parallélépipédique présentée précédemment (Fig. 29). Le contact entre l'outil supérieur et l'éprouvette est de type collant. Le contact entre l'outil inférieur et le prisme est frottant fort, c'est-à-dire qu'il est représenté par une loi de Coulomb limitée par un critère de Tresca dont les paramètres sont : $\bar{m} = 0,4$ et $\mu_F = 0,2$. Le déplacement de l'outil supérieur est égal à $2,5 \cdot 10^{-3}$ mm par incrément.

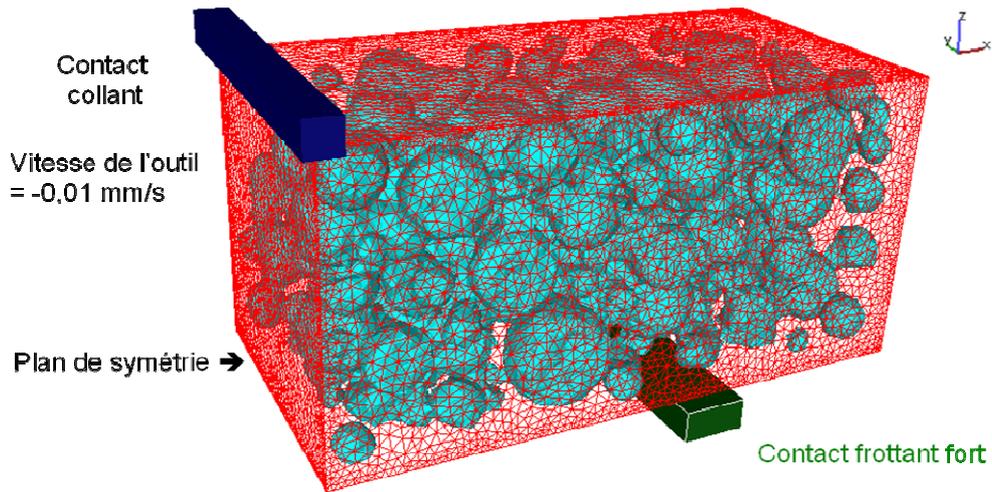


Figure 29 : Essai de flexion 3 points sur une éprouvette hétérogène de béton

Initialement, nous trouvons une valeur de la contrainte à rupture en flexion de 6,5 MPa, ce qui est très proche de celle mesurée expérimentalement (7,5 MPa).

Au vu des résultats obtenus en ce qui concerne l'évolution des propriétés mécaniques d'une éprouvette en béton soumis à la réaction alcali-silice, il semble nécessaire de comprendre pourquoi le modèle numérique ne reproduit pas correctement les mesures expérimentales. Nous allons donc analyser plus finement nos résultats et tenter de proposer une solution pour remédier à ce problème.

VI.3.3.c. Discussions

Pour commencer, nous nous sommes intéressés à l'évolution de l'endommagement dans la pièce lors d'un essai de gonflement libre dû à la réaction alcali-silice. La figure suivante présente cette évolution pour 3 temps différents de réaction, 2, 4 et 6 semaines et montre aussi une coupe transversale dans le cylindre à 2 semaines de réaction (Fig. 30) :

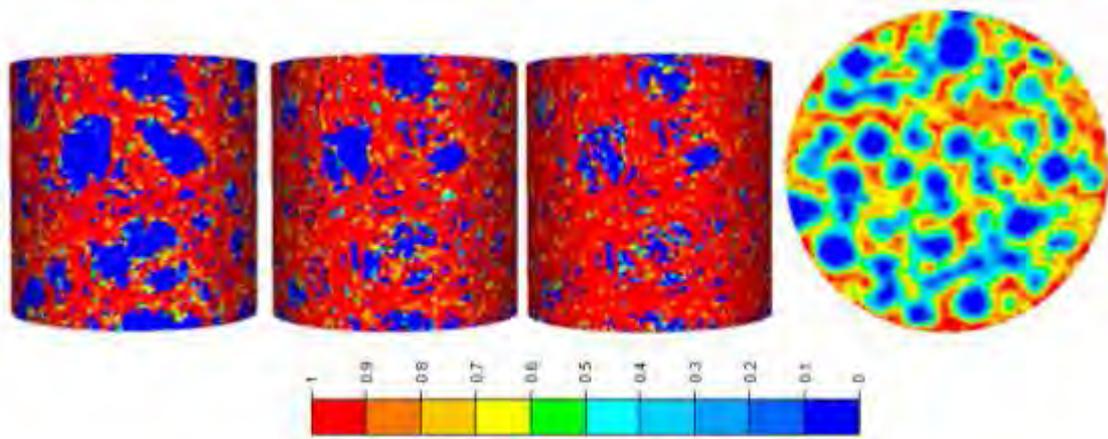


Figure 30 : Evolution de l'endommagement dans une éprouvette cylindrique soumise à la RAS à 2, 4 et 6 semaines – coupe transversale à 2 semaines

La variable d'endommagement varie entre 0 et 1. Lorsqu'elle est nulle, cela signifie que le matériau est sain et lorsqu'elle est égale à 1, cela signifie que le matériau est complètement endommagé et ne présente plus de résistance. Les granulats, qu'ils soient réactifs ou non, ne s'endommagent pas car ils ont un comportement purement élastique, la variable d'endommagement reste donc égale à 0 (bleu) tout au long du calcul. Il ressort clairement que l'endommagement apparaît très rapidement dans la pièce puisqu'après seulement deux semaines de réaction la majorité de la pâte de mortier est totalement endommagée (rouge). Puis l'endommagement continue de croître au fil du temps. La résistance de la pièce vient donc du seul squelette granulaire ce qui explique les résultats précédents et donc la chute bien trop importante du module d'Young au cours de la réaction. La source du problème est donc l'endommagement, son apparition bien trop rapide mais aussi sa valeur bien trop importante. Nous avons donc essayé d'analyser un peu plus finement le modèle de comportement mécanique du béton présent dans l'outil numérique FEMCAM et de tester des modifications possibles.

Nous avons d'abord tenté de modifier les paramètres du modèle de Mazars et particulièrement ceux reliés au seuil d'endommagement et de fissuration en compression et traction. S'il est vrai qu'en jouant sur ces paramètres, il est possible de ralentir l'apparition de l'endommagement et d'en diminuer sa valeur afin d'obtenir des résultats concordants avec l'expérience, les nouveaux paramètres identifiés ne sont alors plus valables lorsqu'il s'agit de modéliser un matériau sain. Il nous faudrait alors plusieurs jeux de paramètres pour représenter le comportement mécanique du béton tout au long de la réaction alcali-silice, ce qui n'est pas physiquement acceptable.

Nous avons ensuite pensé à introduire un effet de refermeture des fissures en compression via le paramètre de la triaxialité des contraintes comme c'est le cas dans des modèles d'endommagement dans les métaux type Lemaitre [Lemaitre, 1996]. La triaxialité des contraintes, définie comme suit (VI. 3), est calculée et en fonction de sa valeur on modifie l'influence de l'endommagement sur le calcul du module d'Young.

$$\text{triaxialité} = T = \frac{\text{contrainte hydrostatique}}{\text{contrainte équivalente}} \quad (\text{VI. 3})$$

En effet, si cette variable de triaxialité des contraintes est de signe positif alors elle caractérise un état de traction de la pièce. Si elle est nulle, alors elle caractérise un état de cisaillement pur. Et enfin, si elle est négative alors c'est un état de compression qu'elle définit. Pour

prendre en compte l'effet de fermeture des fissures en compression, un paramètre h est alors introduit. Il dépend du matériau et satisfait la condition suivante (VI. 4) :

$$0 \leq h \leq 1 \quad (\text{VI. 4})$$

Le calcul du module d'Young qui s'effectuait auparavant ainsi (cf. chapitre IV) (VI. 5) :

$$E = E_0(1 - w) \quad (\text{VI. 5})$$

s'effectue désormais comme cela (VI. 6) :

$$\begin{aligned} \text{Si } T \geq 0 \text{ alors } E &= E_0(1 - w) \\ \text{Si } T < 0 \text{ alors } E &= E_0(1 - hw) \end{aligned} \quad (\text{VI. 6})$$

La valeur généralement préconisée pour ce paramètre h dans les métaux est $h = 0,2$ [Lemaitre, 1996]. Il est intéressant de noter que si $h = 1$, le matériau initial est retrouvé. Dans le cas $h = 0$, alors l'effet de fermeture des fissures est total et le matériau ne s'endommage plus en compression. Nous avons donc testé plusieurs valeurs de ce paramètre h sans réel succès, ce qui nous a conduit à analyser de plus près cette variable de triaxialité des contraintes afin de mieux comprendre l'état du matériau lorsqu'il est soumis à la réaction alcali-silice. Nous avons tout d'abord regardé l'état de triaxialité des contraintes du matériau au cours de la réaction (Fig. 31) :

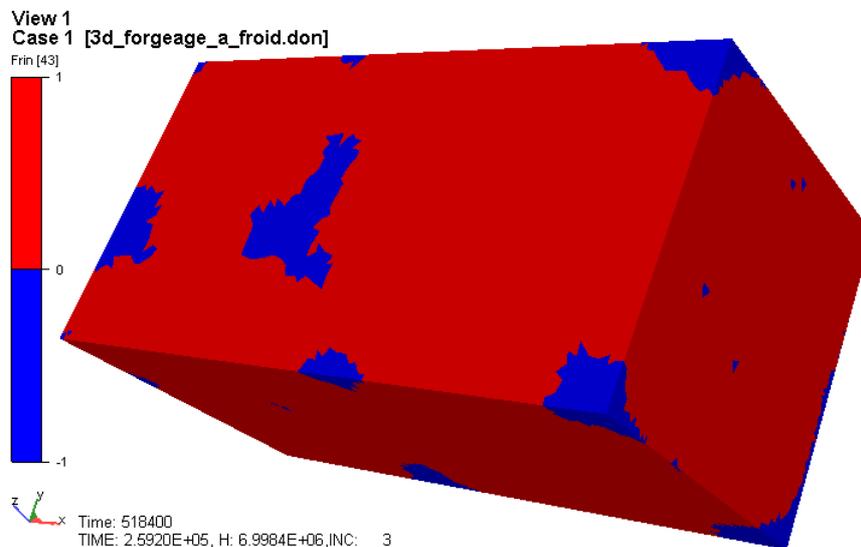


Figure 31 : Valeur de la variable de triaxialité des contraintes sur une éprouvette après 6 jours de réaction alcali-silice

Sur cette image, prise après 6 jours de réaction alcali-silice, il apparaît clairement que la majorité de la pièce travaille en traction (rouge) à sa surface. Ceci explique donc pourquoi le modèle de refermeture des fissures semblait inefficace pour résoudre notre problème. En effet, la pièce étant tout au long du calcul dans un état de traction, le paramètre h ne pouvait pas être pris en compte dans le calcul du module d'Young à chaque nouvel incrément de temps.

Nous nous sommes aussi intéressés à la répartition et à la valeur de la triaxialité des contraintes dans l'éprouvette de béton. L'image suivante présente la valeur de la variable de triaxialité des contraintes sur une coupe transversale de l'éprouvette parallélépipédique après 6 jours de RAS (Fig. 32) :

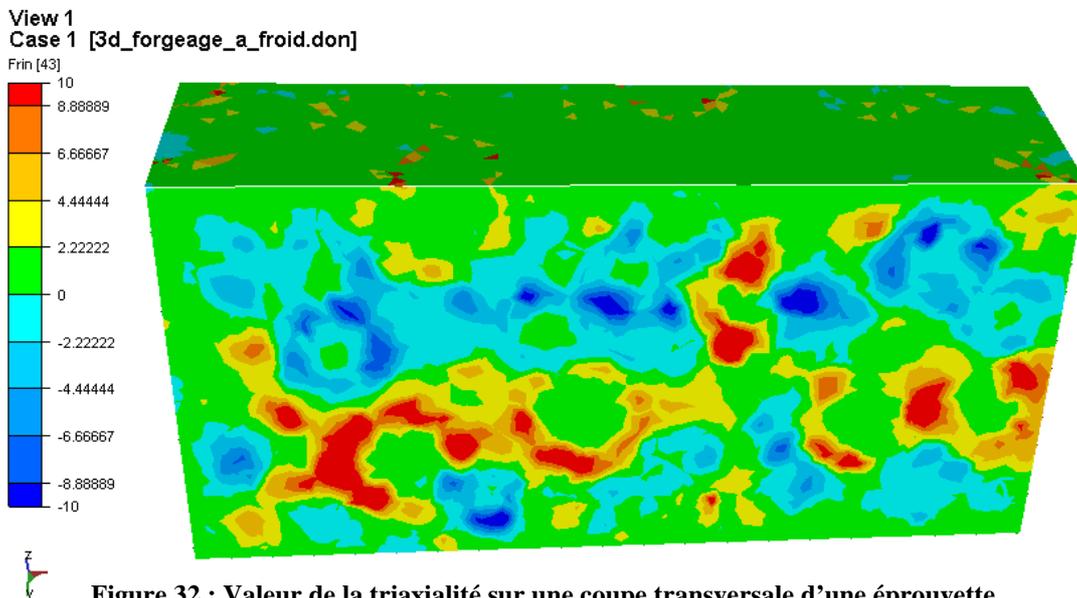


Figure 32 : Valeur de la triaxialité sur une coupe transversale d'une éprouvette parallélépipédique après 6 jours de RAS

Comme montré précédemment, la pièce travaille principalement en traction puisque la variable de triaxialité des contraintes est majoritairement positive. Ce qui est encore plus remarquable, ce sont les valeurs de cette variable. En effet, ces valeurs semblent extrêmement élevées. Lors de la simulation d'un essai mécanique classique type compression unilatérale ou encore flexion 3 points, la triaxialité des contraintes varie entre -2 et 3. Or, dans notre cas, nous atteignons des valeurs comprises entre -10 et 10. Lorsque la pièce se trouve en traction, état le plus critique pour un béton, la contrainte hydrostatique est parfois dix fois supérieure à la contrainte équivalente, ce qui signifie que les effets de dépression sont bien plus importants que ceux liés au cisaillement.

Un autre point intéressant, est la répartition des états de traction et de compression dans l'éprouvette. Il apparaît que les zones de très forte traction (rouge) sont principalement situées autour des agrégats non réactifs tandis que les zones de forte compression (bleu) sont situées autour des granulats réactifs. De plus, comme le précise la figure suivante (Fig. 33), les grains non réactifs ne sont sollicités qu'en traction mais la valeur de triaxialité des contraintes est plus faible au centre du granulat qu'en périphérie. Sur cette figure, nous avons effectué deux plans de coupe dans l'éprouvette pour se situer au centre d'un gravillon. L'hétérogénéité des valeurs s'explique par deux phénomènes, premièrement le post processeur de l'outil numérique qui effectue un lissage automatique des valeurs et deuxièmement les autres gravillons du squelette granulaire qui entourent le granulat considéré et qui eux ne sont pas coupés en leur centre.

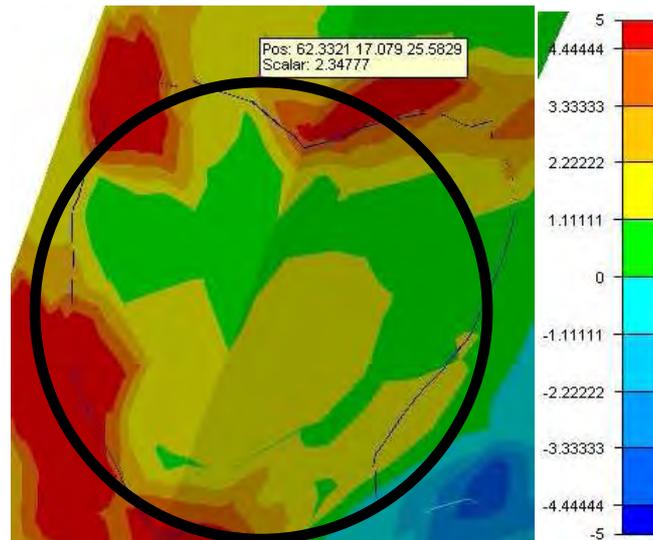


Figure 33 : Représentation de la triaxialité des contraintes dans et autour d'un granulat non réactif (entouré) dans une éprouvette de béton soumis à la RAS

En ce qui concerne les granulats réactifs, nous observons une zone de traction assez faible au centre du grain et une forte zone de compression autour (Fig. 34) :

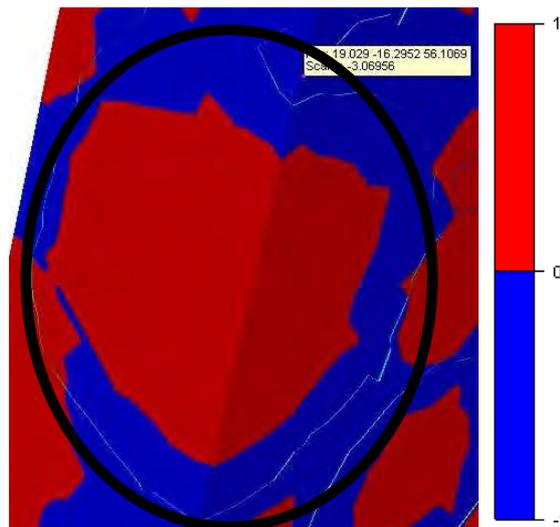


Figure 34 : Représentation de la triaxialité des contraintes dans et autour d'un granulat réactif (entouré) dans une éprouvette de béton soumis à la RAS

Nous avons donc identifié et analysé la cause de notre problème de mauvaise représentation des effets de la réaction alcali-silice sur le comportement mécanique du béton. En effet, cela provient à la fois de la nature de l'endommagement produit par la RAS mais aussi du modèle d'endommagement implémenté dans FEMCAM. La réaction alcali-silice produit des gonflements importants qui devraient s'accompagner d'un endommagement important de la structure en béton. Or, diverses expériences [Larive, 1997, Multon, 2003, Gravel, 2000] montrent que la diminution des propriétés mécaniques reste faible par rapport aux déformations atteintes. Le modèle d'endommagement présent dans l'outil numérique FEMCAM (modèle de Mazars) est très performant pour représenter l'endommagement créé dans la matrice cimentaire par des chargements mécaniques de types déviatoriques comme c'est le cas lors d'essais mécaniques classiques. En revanche, ce modèle n'a pas été élaboré

pour représenter un endommagement créé par des chargements mécaniques de types sphériques, typiques de ceux induit par la réaction alcali-silice (gonflement / dilatation). En effet, il ne présente pas de termes liés directement à un effet de triaxialité des contraintes, le modèle est basé sur la déformation équivalente. Il est donc impossible de trouver un jeu de paramètres qui permette de caler à la fois des chargements de types sphériques et déviatoriques et donc de représenter correctement le comportement d'un matériau sain et d'un matériau soumis à la RAS.

De plus, il est important de rappeler que le modèle numérique néglige certains phénomènes qui pourraient sans doute améliorer le couplage chimie-mécanique :

- la zone interfaciale de transition n'est pas représentée ; or elle permettrait d'absorber un peu les contraintes générées par le gonflement du grain qui, comme nous l'avons signifié précédemment, est très brutal ;
- la viscosité de la pâte de mortier n'est pas prise en compte ; or cela pourrait retarder la transmission des contraintes et donc en limiter leur concentration ;
- le modèle utilisé est un modèle d'endommagement et non de fissuration ; or un modèle de fissuration associé à un modèle de refermeture des lèvres de fissures permettrait certainement une reprise de rigidité en compression.

Afin de mieux modéliser les effets mécaniques de la réaction alcali-silice, il faudrait envisager un modèle d'endommagement avec une dépendance explicite à la pression, comme cela est le cas dans certains modèles de mécanique des sols.

Conclusion

Ce chapitre a permis de faire le point sur les données expérimentales dont nous disposons afin d'identifier certains paramètres du modèle couplé chimie-mécanique de représentation de la réaction alcali-silice et de la valider. Les différentes méthodologies d'identification des paramètres chimiques et mécaniques y ont été présentées. Ce modèle conduit à une bonne représentation de la chimie de la RAS et de ses conséquences sur la géométrie d'une éprouvette en terme de gonflement libre. En effet, nous obtenons des gonflements, linéiques et volumiques, tout à fait en accord avec l'expérience mais aussi une bonne adéquation en ce qui concerne l'avancement de la réaction et la présence des différentes espèces ioniques dans la pièce au cours du temps. Bien que notre modèle soit très bien adapté pour représenter le comportement mécanique d'un béton sain, les effets mécaniques de la réaction, eux, sont plutôt mal pris en compte surtout en ce qui concerne l'évolution du module d'Young au cours du temps. Ces constatations nous ont tout de même permis de mieux analyser et comprendre les différents mécanismes mis en jeu lors de l'endommagement de la matrice cimentaire par la RAS afin d'orienter les futurs développements vers un modèle plus adapté.

Références bibliographiques

- Bulteel, D.,** Garcia-Diaz E., Vernet C., Zanni H., **2002**, *Alkali-silica reaction: a method to quantify the reaction degree*, Cement and Concrete Research, Vol. 32, pp. 1199-1206.
- Dehaut, S., 2002**, *Etude de la dégradation d'un béton soumis à la réaction alkali-granulat*, Thèse de doctorat, Université des sciences et technologies de Lille.
- Garcia-Diaz, E.,** Riche, J., Bulteel, D., Vernet, C., **2005**, *Mechanism of damage for the alkali-silica reaction*, Cement and Concrete Research, Vol. 36, pp. 395-400.
- Gravel, C.,** Ballivy, G., Khayat, K., Quirion, M., Lachemi, M., **2000**, *Expansion of AAR concrete under triaxial stress: simulation with instrumented concrete block*, 11th international conference on Alkali-Aggregate Reaction, Québec, Canada, pp.949-958.
- Larive, C., 1997**, *Apport combinés de l'expérimentation et de la modélisation à la compréhension de l'alcali-réaction et de ses effets mécaniques*, Thèse de doctorat, Ecole Nationale des ponts et Chaussées.
- Lemaitre, J.,** Chaboche, J.L., **1996**, *Mécanique des matériaux solides*. 2e édition. s.l. : Dunod.
- Multon, S., 2003**, *Evaluation expérimentale et théorique des effets mécaniques de l'alcali-réaction sur des structures modèles*, Thèse de doctorat, 2003.
- Poyet, S., 2003**, *Etude de la dégradation des ouvrages en béton atteints par la réaction alcali-silice : approche expérimentale et modélisation numérique multi-échelles des dégradations dans un environnement hydro-chemo-mécanique variable*, Thèse de doctorat, Université de Marne-La-Vallée.
- Riche, J., 2003**, *Quantification de la réaction alcali-silice dans des matières durcies : micromortiers et bétons*, Thèse de doctorat de l'Ecole des Mines de Douai.

CHAPITRE VII :

RESULTATS ET INTERPRETATIONS

VII.1. RESULTATS EXPERIMENTAUX	128
VII.1.1. La campagne expérimentale	128
VII.1.2. Résultats sur les propriétés mécaniques du béton.....	129
VII.1.2.a. Les propriétés mécaniques initiales	129
VII.1.2.b. L'évolution des propriétés mécaniques au cours de la réaction alcali-silice	130
VII.1.3. Résultats sur la chimie de la réaction alcali-silice	131
VII.1.3.a. Le gonflement linéique	131
VII.1.3.b. L'avancement de la réaction	132
VII.1.3.c. Comparaison avec les campagnes expérimentales précédentes.....	133
VII.1.4. Conclusions sur les résultats expérimentaux	134
VII.2. RESULTATS NUMERIQUES.....	135
VII.2.1. Simulation du béton de la campagne expérimentale réalisée au CMGD d'Alès	137
VII.2.2. Influence de l'endommagement dans la pâte de mortier	139
VII.2.3. Influence du pourcentage de grains réactifs dans l'éprouvette de béton	141
VII.2.4. Influence de la teneur en alcalins dans l'éprouvette de béton	142
VII.2.5. Influence des coefficients de diffusion dans la pâte de mortier et dans les granulats	145
VII.2.6. Influence du confinement de l'éprouvette de béton	147
VII.2.7. Simulation d'un béton haute performance soumis à la réaction alcali-silice ...	150
VII.2.8. Bilan.....	153
VII.3. PROTOCOLE D'UTILISATION DE L'OUTIL NUMERIQUE FEMCAM.....	153
VII.3.1. Première étape : les paramètres mécaniques	153
VII.3.2. Deuxième étape : les paramètres intrinsèques au béton formulé.....	155
VII.3.3. Troisième étape : les paramètres du modèle couplé chimie mécanique	156
VII.3.4. Résumé	157

L'objectif de ce dernier chapitre est de présenter et d'analyser les résultats numériques obtenus grâce à l'utilisation du modèle numérique de représentation de la réaction alcali-silice mais aussi de discuter des résultats expérimentaux obtenus pendant cette étude. Ce chapitre s'articulera donc autour de trois parties principales. La première traitera de la campagne expérimentale réalisée au Centre des Matériaux de Grande Diffusion (CMGD) à l'Ecole des Mines d'Alès. Après description des matériaux utilisés et du protocole expérimental mis en place, nous discuterons des résultats chimiques et mécaniques obtenus avant de les comparer avec ceux des campagnes précédentes. La deuxième partie sera principalement consacrée aux résultats numériques. Nous présenterons et analyserons les résultats obtenus pour différentes études de sensibilité sur les paramètres du modèle mais aussi sur des bétons particuliers comme des bétons haute performance. Enfin, nous délivrerons un protocole d'utilisation de l'outil numérique FEMCAM dans lequel nous ferons le point sur les différentes expériences à réaliser afin d'obtenir les paramètres nécessaires au bon fonctionnement de l'outil.

VII.1. Résultats expérimentaux

VII.1.1. La campagne expérimentale

La formulation du béton utilisée pour réaliser l'ensemble de la campagne expérimentale est la suivante (Tab. 1) :

Composition du béton pour 1 m ³	Masse des composants (matériaux séchés)
Ciment CEM I 52,5N	410 kg
Sable calcaire non réactif	585 kg
Gravillons silex réactifs	1170 kg
Eau totale	188 litres
Soude (10 M)	14 litres

Tableau 1 : Formulation du béton considéré

Le ciment utilisé est un CEM I 52,5 N dont la teneur en alcalins équivalent est de 0,89% (analyse réalisée par fluorescence X). Pour assurer une quantité suffisante d'alcalins dans le mélange de béton, condition nécessaire au développement de la réaction alcali-silice, la formulation est dopée en soude afin d'avoir une teneur de 8 kg d'alcalins par m³ de béton.

Le sable utilisé est un sable calcaire du Boulonnais non lavé de ses fines dont le diamètre des grains le composant est compris entre 0 et 4 mm. Ce sable est non réactif.

Le squelette granulaire de ce béton est composé à 100% de granulats siliceux réactifs. Ce sont des gravillons de Conchil Le Temple dont le diamètre est compris entre 4 et 14 mm et dont la composition chimique est donnée par le tableau suivant (Tab. 2) :

Composant	SiO₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	Na₂O	K₂O	MgO
% massique	96,33	0,38	0,57	1,54	< 0,01	0,06	0,04
Composants	S SO ₃ total	Mn ₂ O ₃	TiO ₂	P ₂ O ₅	Cl	SrO	Perte au feu
% massique	0,11	0,06	0,02	0,04	< 0,01	< 0,01	0,99

Tableau 2 : Composition chimique des granulats réactifs

Ces gravillons sont donc composés à plus de 96% de silice et ne contiennent que très peu d'alcalins. Les essais microbar réalisés par le centre technique du groupe Italcementi (CTG) et

le laboratoire de recherche et développement de la cimenterie d'Obourg (Materials and Applications Center, Holcim), ont montré que ces gravillons pouvaient être classés dans la catégorie des granulats potentiellement réactifs à effet pessimum.

Trois éprouvettes cylindriques de dimension 11*22 cm ainsi que 12 éprouvettes parallélépipédiques de dimension 7*7*28 cm ont été confectionnées en une seule gâchée. Elles ont été démoulées à 24h puis conservées 7 jours en durcissement dans une solution alcaline afin d'éviter tout risque de lixiviation des alcalins. A 7 jours, les trois éprouvettes cylindriques ont subi un essai de compression afin de déterminer le module d'Young du béton. Trois éprouvettes parallélépipédiques ont également été testées à l'aide d'un essai de flexion 4 points après en avoir mesuré leur module dynamique par la méthode des fréquences de résonance. Cette méthode consiste à créer une impulsion dans l'éprouvette en la frappant avec un petit marteau métallique. Cette action provoque une réponse du matériau à sa fréquence de résonance et l'appareil de mesure relié au marteau (Fig. 1) peut assimiler cette fréquence à une valeur du module d'Young dynamique.

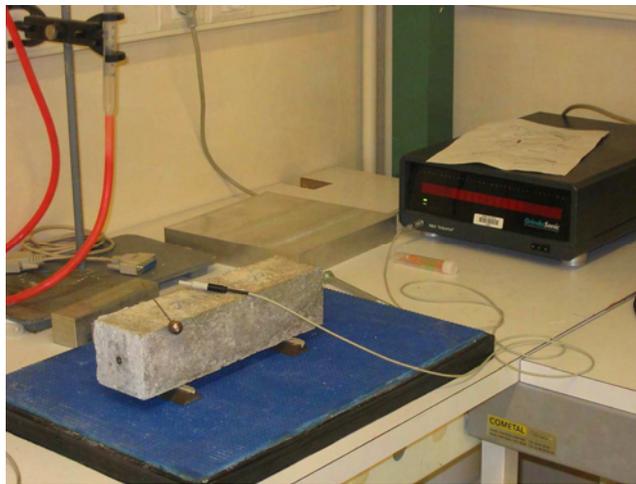


Figure 1 : Appareil de mesure du module d'Young dynamique par la méthode des fréquences de résonance

Les éprouvettes parallélépipédiques restantes sont elles mises en autoclaves à 60°C et 100% d'humidité relative. Chaque semaine, il sera mesuré l'allongement linéique des éprouvettes et, en fonction de ce gonflement, nous testerons leurs propriétés mécaniques (essai de flexion 4 points sur trois éprouvettes et mesure des fréquences de résonance). La variation volumique du squelette siliceux sera aussi déterminée grâce à la méthode d'extraction des granulats par l'attaque à l'acide. Ces méthodes d'expérimentation ont été présentées dans le chapitre précédent.

VII.1.2. Résultats sur les propriétés mécaniques du béton

VII.1.2.a. Les propriétés mécaniques initiales

Les trois essais de compression uniaxiale ont donné des résultats très peu dispersés. La résistance moyenne à la rupture en compression mesurée est de 34,7 MPa. Il s'en déduit un module d'Young moyen de 32 GPa.

Les trois essais de calcul du module d'Young dynamique par la méthode des fréquences de résonance donnent là aussi des résultats tout à fait reproductibles bien que le matériau béton soit très hétérogène. Il s'en déduit un module d'Young dynamique moyen de 42,4 GPa.

Les trois essais de flexion 4 points ont mesuré une résistance moyenne à la rupture en flexion de 4,44 MPa. Ces essais sont réalisés avec 4 cycles de charge-décharge d'une vitesse de 0,2 MPa/s. Le module d'Young moyen calculé est de 42 GPa.

Les résultats mécaniques sont résumés dans le tableau suivant (Tab. 3) :

Type d'essai	Module d'Young	Contrainte à la rupture
Compression uniaxiale	32 GPa	34,7 MPa
Flexion 4 points	42 GPa	4,44 MPa
Fréquences de résonance	42,4 GPa	∅

Tableau 3 : Résultats des essais mécaniques sur un matériau sain

Les essais de flexion 4 points et ceux réalisés avec la méthode des fréquences de résonance donnent des résultats similaires. Toutefois, ces deux méthodes donnent des valeurs de module d'Young supérieures de 10 GPa par rapport à celles données par l'essai de compression uniaxiale. Etant donné que pour la compression uniaxiale le module d'Young a été calculé à partir de la contrainte à la rupture par une méthode Eurocode et non directement par le biais d'une courbe contrainte-déformation, nous privilégions les deux autres méthodes et considérons que le module d'Young du béton sain est d'environ 42 GPa.

VII.1.2.b. L'évolution des propriétés mécaniques au cours de la réaction alcali-silice

Pour mesurer l'évolution des propriétés mécaniques du béton au cours de la réaction alcali-silice, seules les méthodes de flexion 4 points et de fréquence de résonance sont utilisées. L'évolution du module d'Young moyen au cours de la réaction est donnée par le graphique suivant (Fig. 2) :

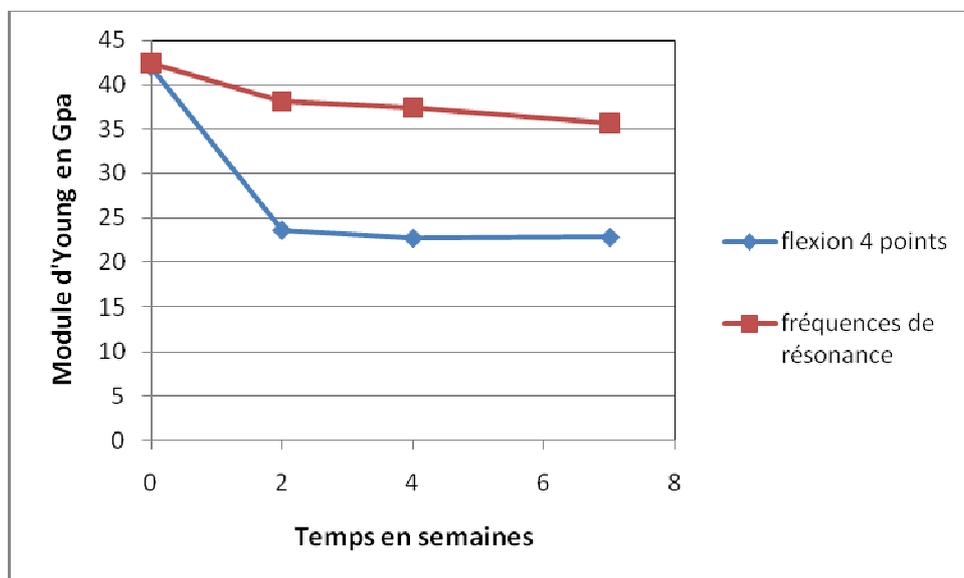


Figure 2 : Evolution du module d'Young en fonction du temps de réaction

On observe donc une chute du module d'Young en fin de réaction de l'ordre de 16% pour la méthode des fréquences de résonance et cette chute est régulière.

En revanche, on observe une chute de 46% pour les mesures en flexion 4 points. Cette chute a lieu essentiellement pendant les deux premières semaines.

Pour les mesures en flexion 4 points, nous observons une dispersion assez importante des résultats sur les trois éprouvettes testées toutes les deux semaines.

Pour les mesures en fréquence de résonance, nous avons une dispersion encore plus grande des résultats et ils ne sont que très peu reproductibles. Ceci s'explique certainement par le fait que cette méthode n'est pas adaptée aux matériaux endommagés.

Comme il avait été discuté dans le chapitre bibliographique, cette étude de l'évolution des propriétés mécaniques montre encore une fois qu'il n'est pas trivial de mesurer correctement et de façon reproductible le module d'Young d'un béton endommagé par la réaction alcali-silice. Les dispersions observées sont dues à la fois aux mesures en elles-mêmes mais aussi à la réaction alcali-silice qui ne se développe pas exactement de la même façon dans chacune des trois éprouvettes testées chaque semaine.

VII.1.3. Résultats sur la chimie de la réaction alcali-silice

Nous allons maintenant nous intéresser à deux types de mesures qui permettent de qualifier la réaction alcali-silice d'un point de vue chimique : le gonflement linéique et l'avancement de la réaction déduit de la mesure du gonflement du squelette siliceux. Nous comparerons ensuite ces résultats à ceux de campagnes expérimentales précédentes présentés dans le chapitre précédent.

VII.1.3.a. Le gonflement linéique

Nous avons suivi l'allongement linéique des éprouvettes parallélépipédiques au cours de la réaction alcali-silice (Fig. 3) :

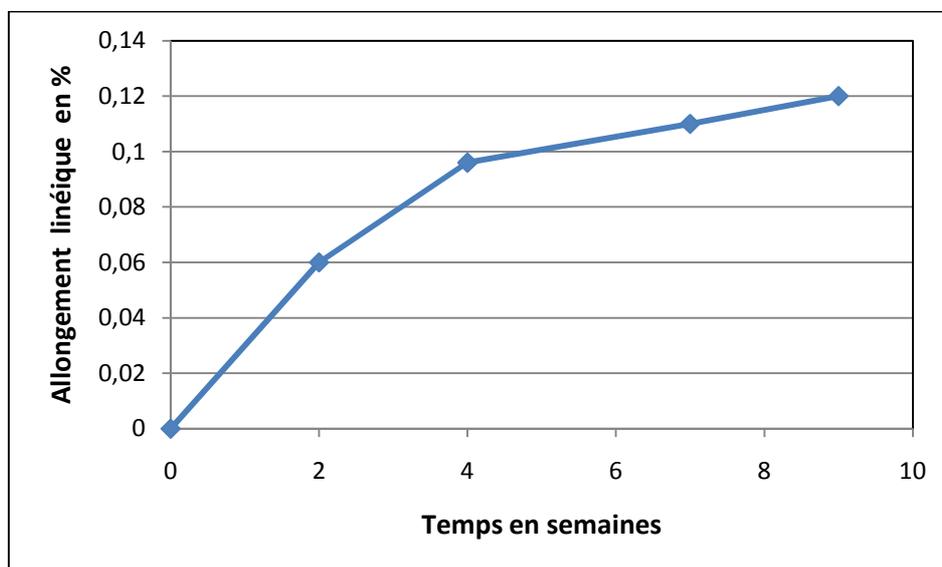


Figure 3 : Evolution de l'allongement linéique en fonction du temps

On remarque un gonflement moyen relativement brutal dès les deux premières semaines de réaction, puis ce gonflement diminue peu à peu pour arriver sur le plateau asymptotique avec une valeur maximale aux environs de 0,12%. Cet essai étant non destructif, les mesures sont réalisées à chaque fois sur 6 éprouvettes et les résultats obtenus ne présentent qu'une très faible dispersion.

VII.1.3.b. L'avancement de la réaction

Grâce à la technique d'extraction des granulats siliceux présentée dans le chapitre précédent et détaillée dans [Bulsteel, 2002] et [Riche, 2003], il nous est possible de tracer l'avancement de la réaction alcali-silice en fonction du temps de réaction (Fig. 4) qui, pour rappel, est défini par le rapport entre le nombre de moles de silice à l'instant t et le nombre de moles initial.

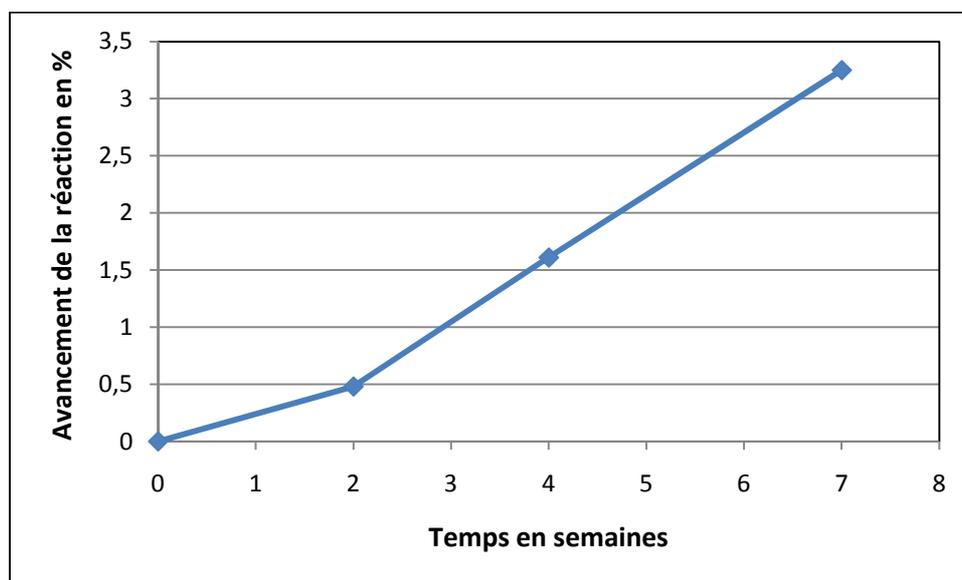


Figure 4 : Avancement de la réaction en fonction du temps

On observe une différence de pente entre les deux premières semaines et les semaines suivantes. Une pente plus faible au début, ce qui va dans le sens inverse de ce que l'on a pu observer précédemment pour l'allongement linéique. Cela peut s'observer sur le graphique suivant (Fig. 5) qui représente l'allongement linéique en fonction de l'avancement de la réaction :

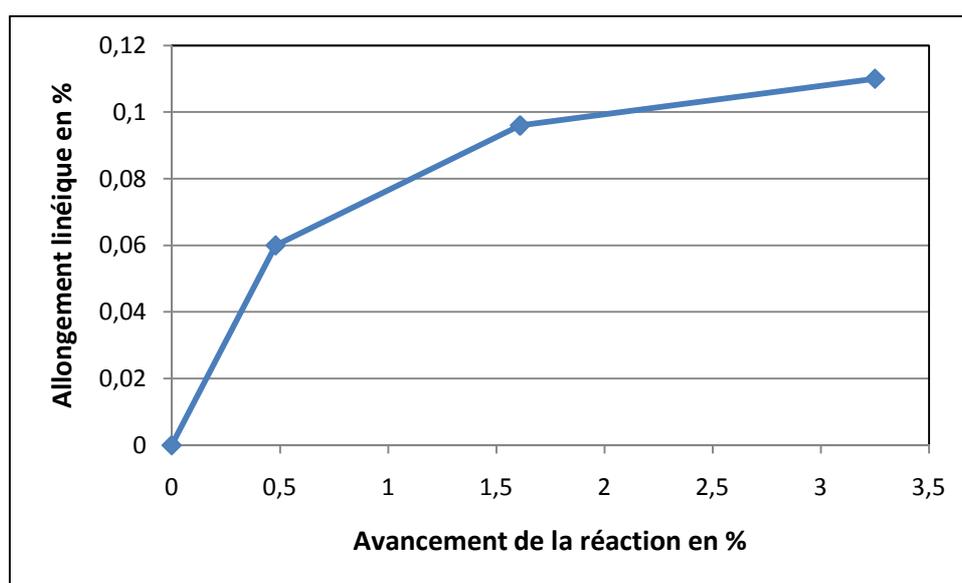


Figure 5 : Allongement linéique en fonction de l'avancement de la réaction

On observe tout d'abord que plus de la moitié de l'allongement linéique est obtenu alors que l'avancement de la réaction n'est seulement qu'à 15% de sa valeur maximale. Cela signifie que la majeure partie de la dégradation de l'éprouvette se fait dans les premières semaines et qu'ensuite la silice continue de réagir avec les alcalins, mais que les conséquences pour le matériau sont moindres.

VII.1.3.c. Comparaison avec les campagnes expérimentales précédentes

Deux points principaux diffèrent entre la campagne expérimentale menée au CMGD d'Alès et les campagnes précédentes menées au DGCE de Douai : les granulats utilisés et la quantité initiale d'alcalins dans le béton confectionné. Dans les campagnes de Douai les granulats utilisés sont des silex provenant du Savreux et composés à 99% de silice. De plus le squelette granulaire du béton n'est composé qu'à 50% de ces granulats réactifs. Dans la campagne d'Alès ce sont toujours des silex, mais ils proviennent de Conchil Le Temple et sont composés à 96% de silice. Le squelette granulaire du béton est composé à 100% de ces gravillons. Dans les deux cas, les granulats sont qualifiés de potentiellement réactifs vis-à-vis de la réaction alcali-silice. L'étude de la composition chimique des gravillons a permis de montrer que le granulats de Conchil Le Temple était beaucoup moins dégradé à l'état brut que celui du Savreux. De plus, dans les campagnes de Douai, la quantité d'alcalins équivalents était de 5 kg par m³ de béton tandis que pour la campagne d'Alès, le béton est dopé en soude pour atteindre une valeur en alcalins équivalents de 8 kg par m³ de béton. Le graphique suivant (Fig. 6) montre l'évolution de la variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps de réaction :

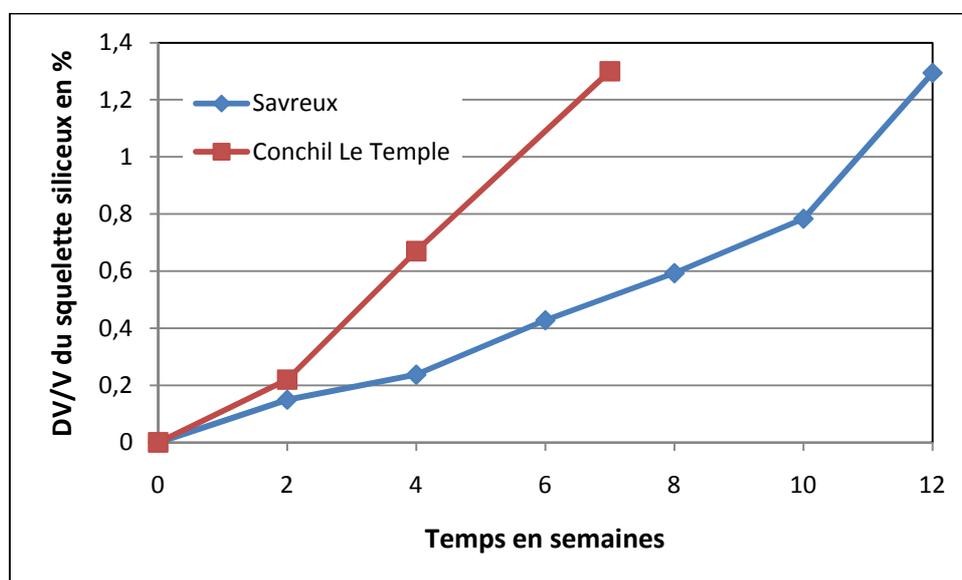


Figure 6 : Variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps

Nous avons deux comportements bien distincts avec un gonflement du squelette siliceux bien plus rapide pour la formulation de béton contenant 100% de gravillons de Conchil Le Temple et 8 kg d'alcalins. Toutefois, il est important de remarquer que la valeur en fin de réaction de ce gonflement volumique est la même dans les deux cas, aux alentours de 1,3%. Ceci conduit à un comportement relativement similaire entre les deux formulations si l'on regarde la variation de l'allongement linéique en fonction de la variation volumique du squelette siliceux (Fig. 7) :

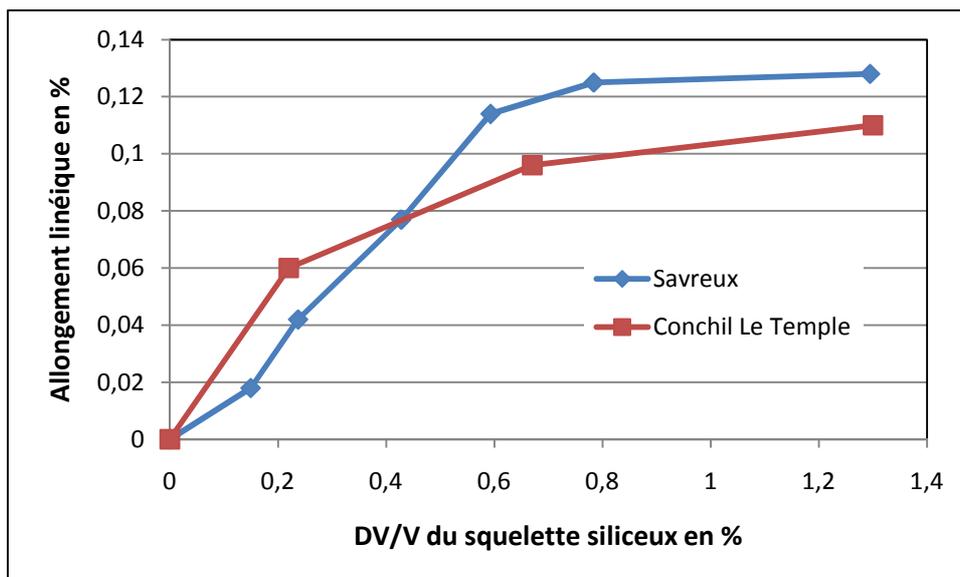


Figure 7 : Evolution de l'allongement linéique en fonction de la variation volumique du squelette siliceux

En effet, dans les deux cas, le plateau asymptotique est obtenu pour une variation volumique proche de 0,6% et les valeurs finales d'allongement linéique sont très proches.

Les deux bétons comparés sont donc très différents tant du point de vue de leur formulation que de la composition physico-chimique des produits les composants et cela se traduit sur la cinétique de la réaction alcali-silice. Pourtant, les conséquences de cette réaction sur la géométrie des éprouvettes testées semblent très proches.

VII.1.4. Conclusions sur les résultats expérimentaux

La campagne expérimentale menée au CMGD d'Alès a permis de mettre en avant certains résultats importants. En ce qui concerne l'évolution des caractéristiques mécaniques d'une éprouvette de béton soumise à la réaction alcali-silice, les résultats ne sont pas très concluants. Cela est dû en particulier au fait que nos méthodes de mesure présentent une faible reproductibilité et une grande dispersion des résultats. La méthode de flexion 4 points n'est pas facile à instrumenter précisément, ce qui explique les dispersions de résultats. La méthode des fréquences de résonance, quant à elle, semble inefficace lorsque le matériau est trop dégradé et donc bien plus hétérogène qu'initialement. En effet, l'endroit où l'on tape sur l'éprouvette avec le marteau pour créer la fréquence dans l'éprouvette est primordial et selon l'endroit, si l'éprouvette est trop endommagée, on trouve des résultats très différents, ce qui explique la faible reproductibilité de la méthode. Toutefois, il semble que le matériau soit fortement dégradé après seulement deux semaines de réaction.

En ce qui concerne les résultats d'ordre chimique, nous avons réussi à mesurer 3 observables très importantes dans la modélisation de la réaction alcali-silice. Nous avons déterminé l'allongement linéique de l'éprouvette au cours de la réaction mais aussi l'avancement de la réaction et la variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps de réaction. Au vu des résultats obtenus pour l'allongement linéique et le gonflement du squelette siliceux, il semble que la majeure partie de la réaction ait lieu pendant les deux premières semaines de mise en autoclave.

Cette campagne nous permet d'avancer une hypothèse sur le facteur limitant de la réaction. En effet, nous savons que cela ne peut pas être la quantité de silice ou celle d'alcalins étant donné que ces deux composants sont présents en très grand nombre. Nous

observons une chute du module d'Young très forte pendant les deux premières semaines, associée à un fort allongement linéique et à une grande variation volumique du squelette siliceux. Ensuite, toutes les valeurs de ces observables stagnent ou croissent beaucoup moins fortement. Cela nous amène à penser que le limitant de la réaction serait la mécanique. En effet, il semble que la réaction alcali-silice continue doucement mais que son effet sur la géométrie et les propriétés mécaniques du matériau soit limité. Cela laisse penser que le matériau se dégrade rapidement, notamment la liaison pâte de mortier-gravillons et que la transmission des contraintes liées au gonflement dans le grain du gel silico-alcalin soit réduite.

Le dernier point important de cette étude expérimentale est la comparaison avec les campagnes précédentes. Bien que les formulations de béton ainsi que la composition chimique des éléments le composant soient très différents, il apparaît que les deux matériaux ont un comportement relativement similaire vis-à-vis de la réaction alcali-silice. Ceci est un point très encourageant pour le caractère prédictif de notre modèle numérique.

VII.2. Résultats numériques

Dans cette section, nous allons passer en revue un certain nombre de simulations réalisées avec notre modèle numérique couplé chimie-mécanique afin de mieux comprendre l'influence de différents paramètres sur la réaction alcali-silice. Pour chaque simulation, il sera réalisé un essai de gonflement libre sur une éprouvette parallélépipédique de dimension 7*7*14 cm avec un plan de symétrie (Fig. 8).

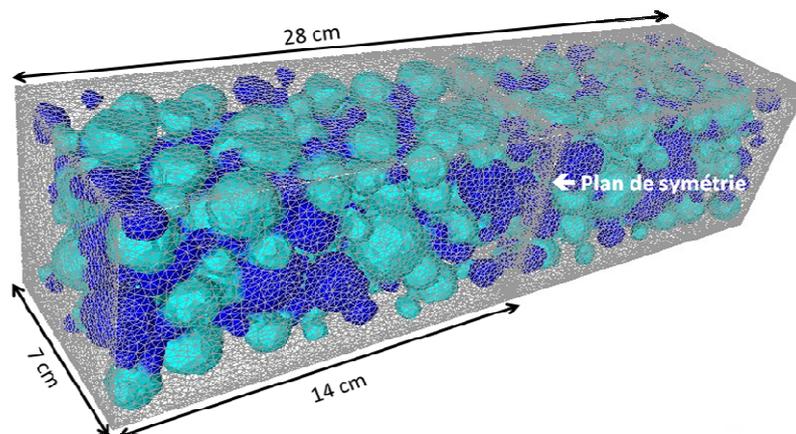


Figure 8 : Présentation du cas test numérique

Le maillage de l'éprouvette parallélépipédique est composé de 288539 éléments et 54711 nœuds. Le squelette granulaire sera composé de 315 granulats.

Une campagne expérimentale réalisée au TU de Delft (Pays-Bas) a permis de déterminer le module d'Young initial des granulats siliceux utilisés, ceux de Conchil Le Temple. Le protocole expérimental se décompose en trois étapes principales. Il faut d'abord usiner des micros éprouvettes dans un bloc de silex de quelques dizaines de cm comme le montre le schéma suivant où les mesures sont exprimées en mm (Fig. 9).

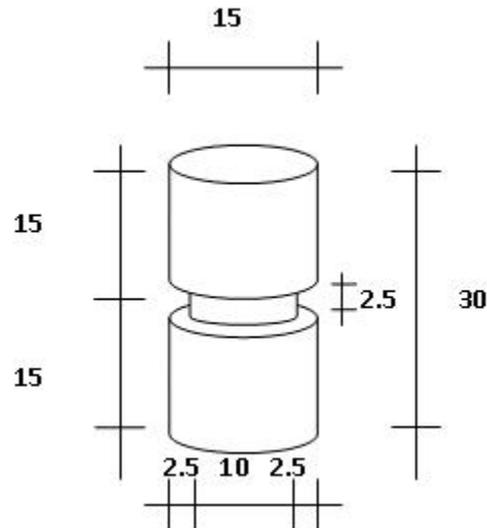


Figure 9 : Géométrie des micros éprouvettes usinées dans un gravillon de silex

Les éprouvettes ainsi usinées sont alors testées en tension, et la courbe force-déformation peut être obtenue grâce à l'instrumentation d'une machine de micro-tension (Fig. 10).

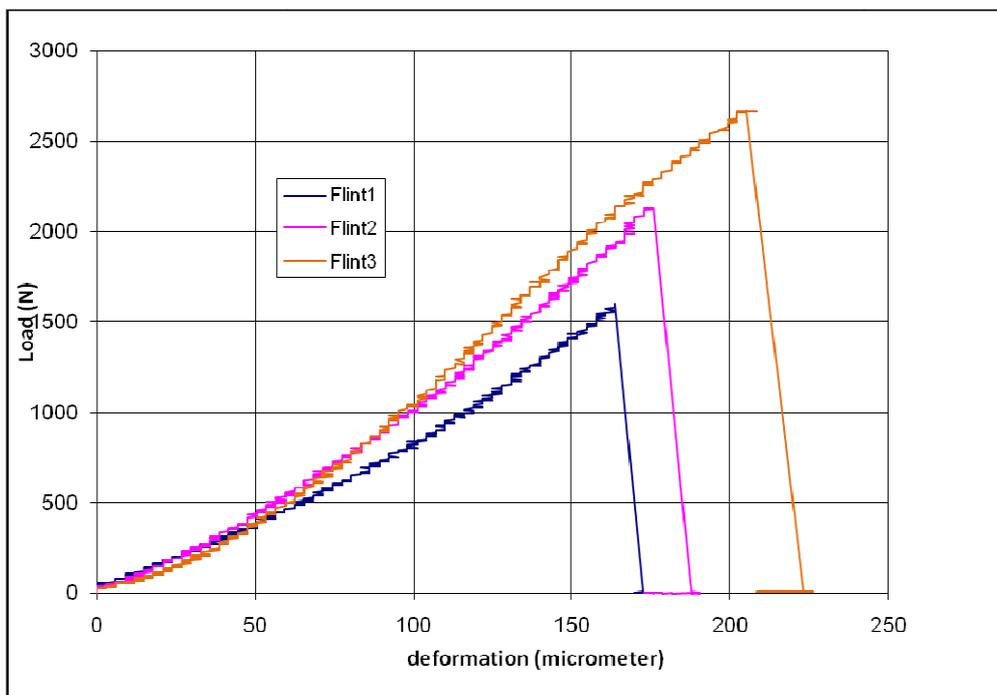


Figure 10 : Courbes force-déformation pour trois spécimens de silex testés

Grâce aux courbes précédentes, ainsi qu'avec la mesure précise du diamètre de la zone utile des éprouvettes, nous pouvons calculer un module d'Young moyen sur ces trois tests qui est de 140 GPa.

En ce qui concerne les granulats non réactifs composés principalement de calcaire, nous considérons que la valeur de leur module d'Young est de 70 GPa comme nous pouvons le trouver régulièrement dans la littérature.

Les paramètres du modèle de Mazars utilisés sont ceux identifiés dans le chapitre IV.

Le tableau suivant (Tab. 4) résume les paramètres du modèle couplé chimie-mécanique qui resteront inchangés au cours des simulations à suivre.

Nom de la variable	Signification	Valeur
$E_{ini}^{ag R}$	Module d'Young initial des agrégats réactifs (siliceux)	140 GPa
$E_{ini}^{ag NR}$	Module d'Young initial des agrégats non réactifs	70 GPa
$\nu_A = \nu_{PM}$	Coefficient de Poisson du matériau béton	0,2
A_C	lié à l'endommagement en compression	1,01
B_C	lié à l'endommagement en compression	657,085
A_T	lié à l'endommagement en traction	1,18
B_T	lié à l'endommagement en traction	50000
ϵ_{D0}	Seuil d'endommagement	$9,1 \cdot 10^{-5}$
$\tilde{\epsilon}_C^{crit}$	Seuil de fissuration en compression	0,000872
$\tilde{\epsilon}_T^{crit}$	Seuil de fissuration en traction	0,000163
C_{limite}	Concentration seuil en alcalins	0 mol/mm^3
K	Constante cinétique	$4 \cdot 10^{-9} \text{ s}^{-1}$
λ	Coefficient stœchiométrique	1
G	Constante exprimant le gonflement granulaire	3%

Tableau 4 : Paramètres du modèle numérique constants pour les simulations à venir

Au vu des résultats numériques peu concluants concernant les propriétés mécaniques et présentés dans le chapitre précédent, nous avons décidé de ne pas utiliser le couplage mécanique → chimie pour les différentes études de sensibilité suivantes.

Une dernière remarque importante : toutes les simulations à venir seront comparées aux résultats obtenus lors des campagnes expérimentales issues des thèses précédentes réalisées au DGCE de Douai.

VII.2.1. Simulation du béton de la campagne expérimentale réalisée au CMGD d'Alès

Pour simuler la campagne expérimentale réalisée à Alès, nous avons considéré un squelette granulaire composé à 100% de granulats siliceux réactifs et une concentration initiale en alcalins correspondant à 8 kg d'alcalins par m^3 de béton.

Les paramètres utilisés pour cette simulation sont les suivants (Tab. 5) :

Nom de la variable	Signification	Valeur
E_{ini}^{PM}	Module d'Young initial de la pâte de mortier	18,69 GPa
$[Na^+]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en alcalins dans la pâte de mortier	$7,52 \cdot 10^{-7}$ mol/mm ³
$[Na^+]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en alcalins dans les agrégats	0
$[SiO_2]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en silice dans la pâte de mortier	0
$[SiO_2]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en silice dans les agrégats	$4,33 \cdot 10^{-5}$ mol/mm ³
$D_{apparente}^{PM}$	Coefficient de diffusion apparente de la pâte de mortier	$5 \cdot 10^{-6}$ mm ² /s
$D_{apparente}^{Ag}$	Coefficient de diffusion apparente des agrégats	$5 \cdot 10^{-8}$ mm ² /s
% RAS	Pourcentage de granulats réactifs dans le squelette	100%

Tableau 5 : Paramètres du modèle numérique

En premier lieu, nous allons nous intéresser à la variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps de réaction et la comparer avec celle obtenue lors de la campagne expérimentale d'Alès (Fig. 11).

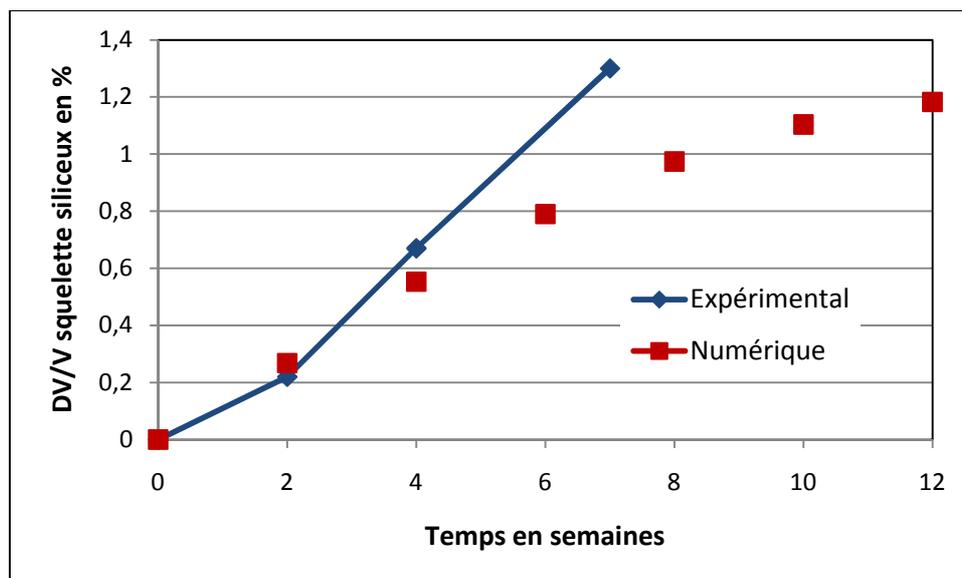


Figure 11 : Variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps

Lors des 4 premières semaines, le modèle reproduit correctement le gonflement volumique, ensuite il le sous-estime légèrement. Nous pouvons faire la même remarque si nous regardons l'avancement de la réaction alcali-silice en fonction du temps (Fig. 12).

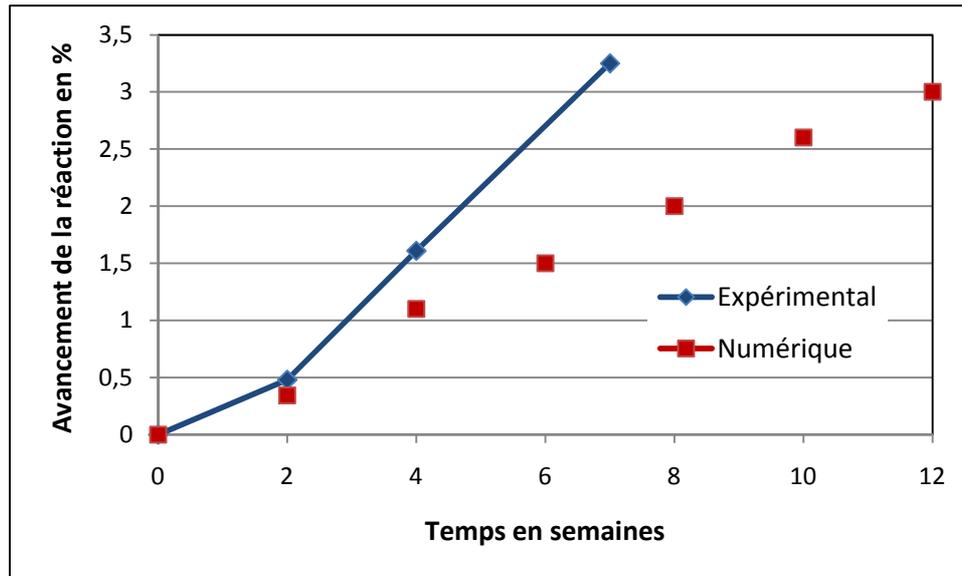


Figure 12 : Avancement de la réaction en fonction du temps de réaction

Le modèle numérique ne reproduit pas précisément ce qui est observé expérimentalement notamment en ce qui concerne la cinétique de la réaction. Or dans notre modèle, deux paramètres ont été identifiés grâce à des données expérimentales antérieures réalisées sur un béton de formulation différente de celle d'Alès. Pour mieux représenter numériquement le comportement du béton d'Alès vis-à-vis de la réaction alcali-silice, il faudrait de nouveau identifier la constante cinétique K ainsi que le paramètre de gonflement granulaire G .

VII.2.2. Influence de l'endommagement dans la pâte de mortier

Nous avons voulu connaître l'influence de l'endommagement de la matrice sur la réaction alcali-silice, nous avons donc simulé un cas dans lequel la pâte de mortier avait un comportement purement élastique et non plus élastique endommageable. Les paramètres utilisés pour cette simulation sont les suivants (Tab. 6) :

Nom de la variable	Signification	Valeur
Modèle élastique endommageable de Mazars		désactivé
E_{ini}^{PM}	Module d'Young initial de la pâte de mortier	18,69 GPa
$[Na^+]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en alcalins dans la pâte de mortier	$4,7 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mm}^3$
$[Na^+]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en alcalins dans les agrégats	0
$[SiO_2]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en silice dans la pâte de mortier	0
$[SiO_2]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en silice dans les agrégats	$4,33 \cdot 10^{-5} \text{ mol/mm}^3$
$D_{apparente}^{PM}$	Coefficient de diffusion apparente de la pâte de mortier	$5 \cdot 10^{-6} \text{ mm}^2/\text{s}$
$D_{apparente}^{Ag}$	Coefficient de diffusion apparente des agrégats	$5 \cdot 10^{-8} \text{ mm}^2/\text{s}$
% RAS	Pourcentage de granulats réactifs dans le squelette	100%

Tableau 6 : Paramètres du modèle numérique

Nous avons étudié l'influence de l'endommagement dans la pâte de mortier sur deux gonflements significatifs de la réaction alcali-silice, la variation volumique du squelette siliceux (Fig. 13) et la variation volumique de l'éprouvette (Fig. 14).

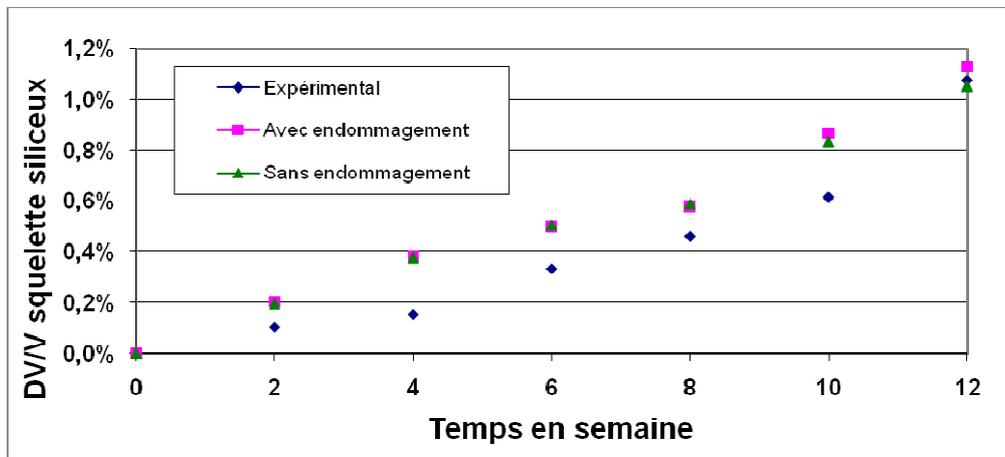


Figure 13 : Variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps de réaction

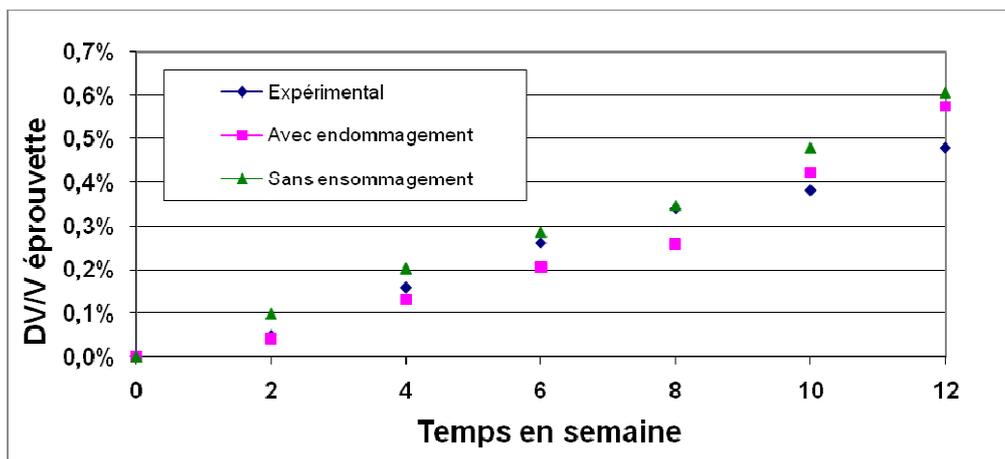


Figure 14 : Variation volumique de l'éprouvette parallélépipédique de béton en fonction du temps de réaction

Nous remarquons qu'il n'y a pas ou très peu d'influence de l'endommagement de la matrice sur la réaction alcali-silice. Nous avons aussi pu voir qu'il n'y avait pas non plus d'influence sur la diffusion ou l'avancement de la réaction. Ces résultats ne sont pas étonnants étant donné la façon dont nous appliquons le gonflement des gravillons siliceux qui ont réagi. En effet, pour faire dilater les éléments d'un grain siliceux ayant réagi nous imposons brutalement une déformation. La pâte de mortier se « conforme » donc à cette déformation mais par contre, la contrainte dans celle-ci sera plus ou moins importante suivant qu'elle est endommagée ou non, mais la déformation restera identique. L'endommagement impacte le module d'Young des éléments de la pâte de mortier en le diminuant. S'il n'y a pas d'endommagement, chaque élément de la pâte de mortier conserve au cours du calcul le même module d'Young, celui imposé initialement. La pâte de mortier, quelque soit son comportement (endommageable ou non) n'a donc pas d'effet mécanique sur ce gonflement, en l'état actuel de notre modèle.

VII.2.3. Influence du pourcentage de grains réactifs dans l'éprouvette de béton

Pour regarder l'influence du pourcentage de grains réactifs dans le squelette granulaire de l'éprouvette considérée, nous utilisons les paramètres suivants (Tab. 7) :

Nom de la variable	Signification	Valeur
E_{ini}^{PM}	Module d'Young initial de la pâte de mortier	18,69 GPa
$[Na^+]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en alcalins dans la pâte de mortier	$4,7 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mm}^3$
$[Na^+]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en alcalins dans les agrégats	0
$[SiO_2]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en silice dans la pâte de mortier	0
$[SiO_2]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en silice dans les agrégats	$4,33 \cdot 10^{-5} \text{ mol/mm}^3$
$D_{apparente}^{PM}$	Coefficient de diffusion apparente de la pâte de mortier	$5 \cdot 10^{-6} \text{ mm}^2/\text{s}$
$D_{apparente}^{Ag}$	Coefficient de diffusion apparente des agrégats	$5 \cdot 10^{-8} \text{ mm}^2/\text{s}$
% RAS	Pourcentage de granulats réactifs dans le squelette	10%, 30%, 50%, 70% et 90%

Tableau 7 : Paramètres du modèle numérique

Nous regardons alors l'influence du nombre de gravillons réactifs sur le gonflement volumique du squelette siliceux (Fig. 15) et de l'éprouvette globale (Fig. 16).

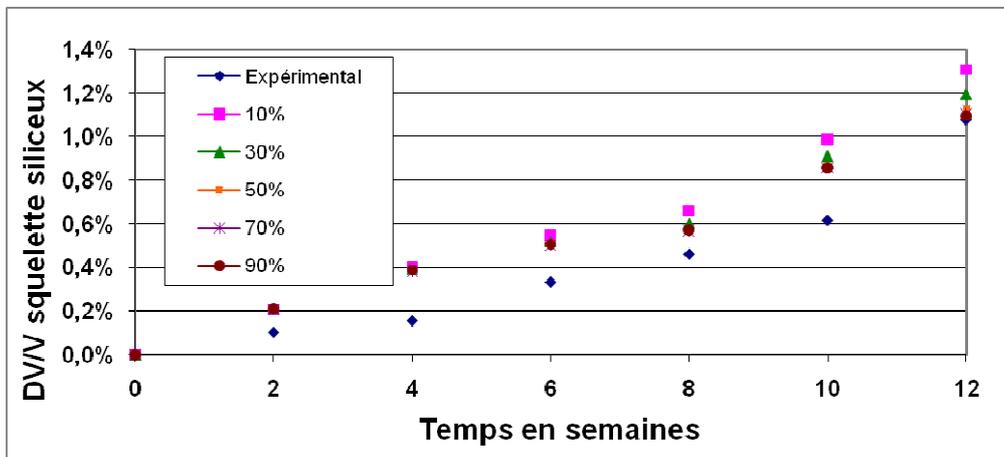


Figure 15 : Variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps de réaction

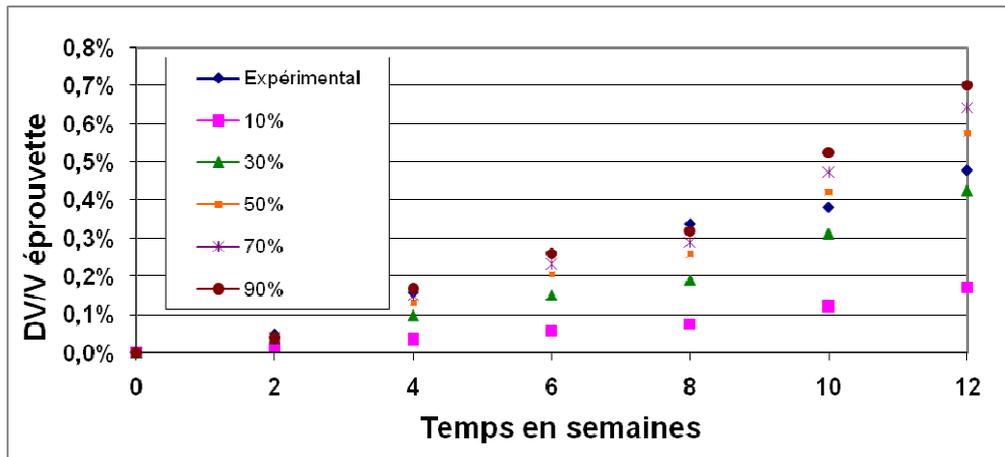


Figure 16 : Variation volumique de l'éprouvette de béton en fonction de la réaction

Cette différence de pourcentage de granulats réactifs n'a pas d'impact sur le gonflement volumique du squelette siliceux ce qui est tout à fait logique étant donné que nous observons un gonflement relatif et que plus le pourcentage de gravillons réactifs est faible, plus le volume initial de silice dans l'éprouvette est petit. En revanche, le nombre de gravillons siliceux a bien sûr un impact sur le gonflement global de l'éprouvette. Plus ce nombre est élevé, plus l'éprouvette augmente de volume.

Il est important de remarquer que lorsque le pourcentage est très faible, 10%, le gonflement de l'éprouvette est très fortement diminué. Ceci peut s'expliquer par le fait que 90% des grains dans l'éprouvette sont non réactifs et ont donc un module d'Young très élevé (par rapport à celui de la pâte de mortier) ce qui contraint encore plus l'impact du gonflement des grains réactifs.

VII.2.4. Influence de la teneur en alcalins dans l'éprouvette de béton

Pour cette étude, nous allons nous intéresser au nombre de moles d'alcalins présentes dans l'éprouvette, ce qui va modifier la concentration en alcalins dans la pâte de mortier. Nous allons tester 3 cas et les comparer à notre cas de référence qui a une teneur en alcalins de 5 kg par m³ de béton (Tab. 8).

Nom de la variable	Signification	Valeur
E_{ini}^{PM}	Module d'Young initial de la pâte de mortier	18,69 GPa
$[Na^+]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en alcalins dans la pâte de mortier	$2,82 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mm}^3 \rightarrow 3 \text{ kg/m}^3$ $4,7 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mm}^3 \rightarrow 5 \text{ kg/m}^3$ $7,05 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mm}^3 \rightarrow 7,5 \text{ kg/m}^3$ $9,4 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mm}^3 \rightarrow 10 \text{ kg/m}^3$
$[Na^+]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en alcalins dans les agrégats	0
$[SiO_2]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en silice dans la pâte de mortier	0
$[SiO_2]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en silice dans les agrégats	$4,33 \cdot 10^{-5} \text{ mol/mm}^3$
$D_{apparente}^{PM}$	Coefficient de diffusion apparente de la pâte de mortier	$5 \cdot 10^{-6} \text{ mm}^2/\text{s}$
$D_{apparente}^{Ag}$	Coefficient de diffusion apparente des agrégats	$5 \cdot 10^{-8} \text{ mm}^2/\text{s}$
% RAS	Pourcentage de granulats réactifs dans le squelette	50%

Tableau 8 : Paramètres du modèle numérique

A nouveau, nous allons regarder l'impact de ces différentes concentrations en alcalins dans la pièce sur le gonflement du squelette siliceux (Fig. 17) et sur la variation volumique de l'éprouvette parallélépipédique (Fig. 18).

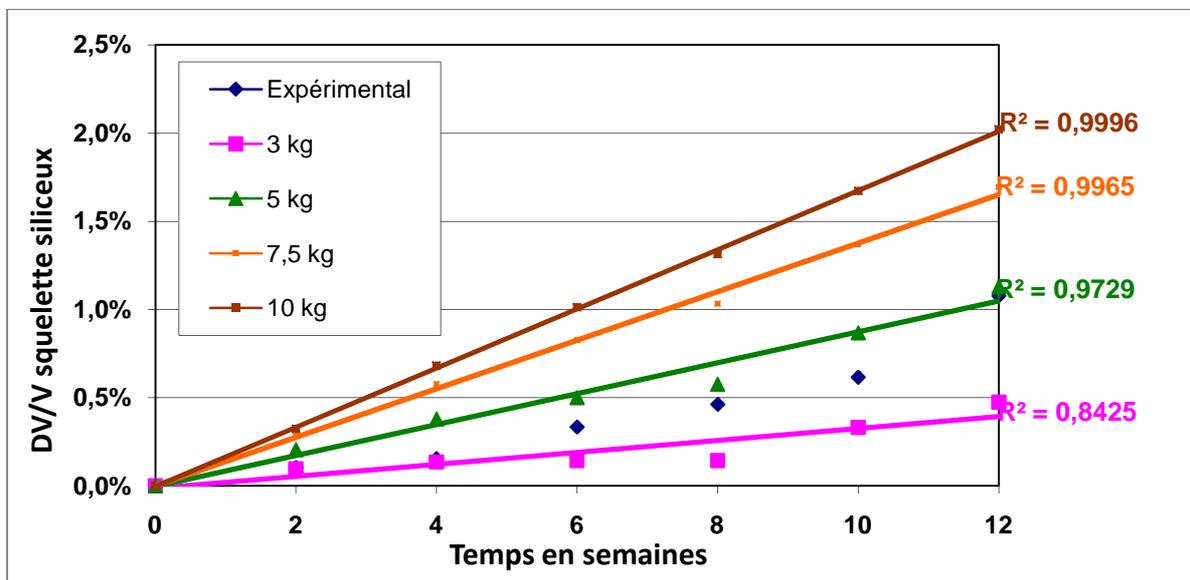


Figure 17 : Variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps de réaction

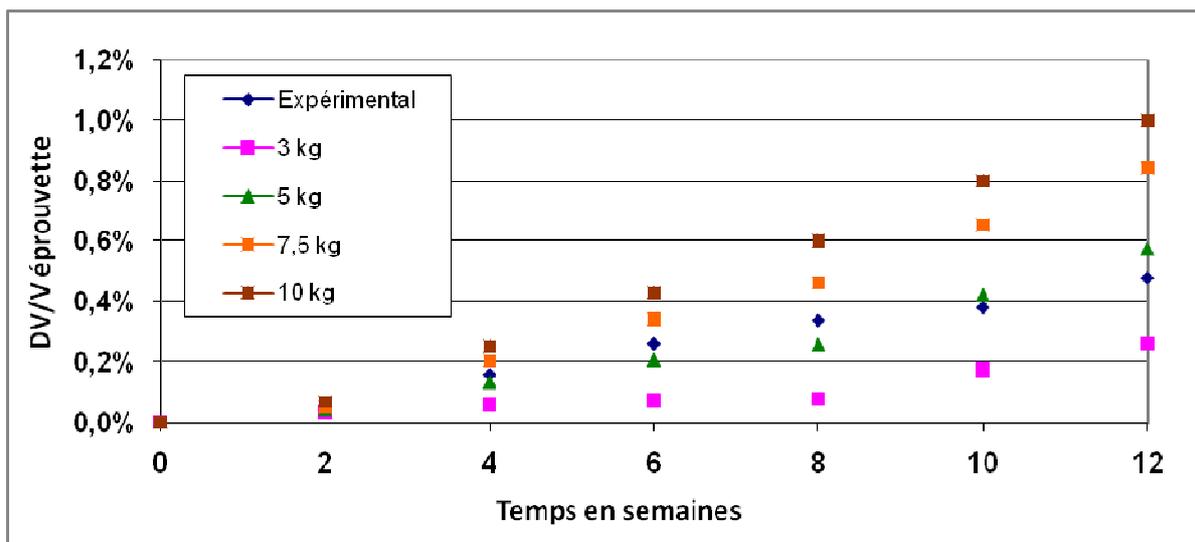


Figure 18 : Variation volumique de l'éprouvette en fonction du temps de réaction

Nous observons un phénomène particulier en ce qui concerne la variation volumique du squelette siliceux. En effet, plus le nombre de moles d'alcalins présentes dans la pièce est grand, plus la variation du squelette siliceux présente un comportement linéaire lors des 12 premières semaines de réaction. Lorsque le nombre d'alcalins est grand, le plateau asymptotique va être atteint bien après 12 semaines car la réaction entre les alcalins et la silice continue. Cela contredit ce qui a été observé expérimentalement lors de la campagne réalisée à Alès, car lors de cette campagne le nombre de moles d'alcalins était bien supérieur à celui des campagnes expérimentales précédentes et pourtant le plateau asymptotique était atteint quasiment au même moment. Nous avons donc avancé l'hypothèse que la mécanique et principalement l'endommagement de l'interface pâte de mortier / grain était le limitant de la réaction. Or dans notre modèle, au vu des résultats concernant l'influence de l'endommagement dans la pâte de mortier ainsi que la non prise en compte de la zone interfaciale de transition, le comportement mécanique de la pâte de mortier ne peut pas limiter la réaction alcali-silice. Il semble donc logique que le modèle ne puisse pas reproduire ce phénomène observé expérimentalement.

Une autre conclusion peut être formulée si l'on compare ces résultats à ceux de la section VII.2.1 modélisant numériquement la campagne expérimentale d'Alès. En effet, si l'on place dans l'éprouvette 100% de granulats réactifs et une quantité élevée d'alcalins (8 kg) alors on obtient une variation volumique du squelette siliceux en fin de réaction bien inférieure à celle obtenue dans le cas 50% de granulats réactifs et 7,5 kg d'alcalins (Fig. 19).

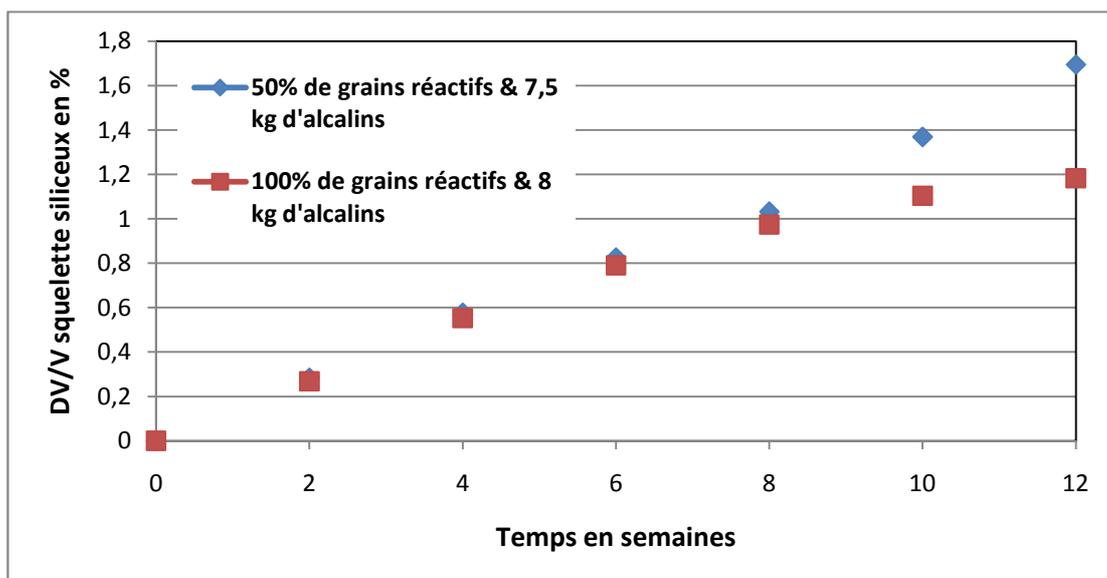


Figure 19 : Variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps

On observe une différence de comportement entre les deux cas lors des 4 dernières semaines de réaction. On peut donc émettre l'hypothèse que ce sont les granulats réactifs, qui ont une forte rigidité ($E_{ini}^{ag R} = 140$ GPa), qui « bloquent » le gonflement du squelette en fin de réaction.

Le gonflement volumique de l'éprouvette est lui aussi fortement dépendant de la concentration en alcalins dans l'éprouvette.

VII.2.5. Influence des coefficients de diffusion dans la pâte de mortier et dans les granulats

Le couplage de la mécanique sur la chimie ne pouvant pas être étudié directement, nous nous sommes tout de même intéressés à l'influence des coefficients de diffusion apparente des alcalins dans la pâte de mortier et dans les gravillons sur la réaction alcali-silice (Tab. 9). Cette étude pourra être le point de départ futur de la mise au point d'une loi modélisant l'impact de la mécanique sur la chimie lors de la réaction.

Nom de la variable	Signification	Valeur
E_{ini}^{PM}	Module d'Young initial de la pâte de mortier	18,69 GPa
$[Na^+]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en alcalins dans la pâte de mortier	$4,7 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mm}^3$
$[Na^+]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en alcalins dans les agrégats	0
$[SiO_2]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en silice dans la pâte de mortier	0
$[SiO_2]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en silice dans les agrégats	$4,33 \cdot 10^{-5} \text{ mol/mm}^3$
$D_{apparente}^{PM}$	Coefficient de diffusion apparente de la pâte de mortier	$5 \cdot 10^{-6} \text{ mm}^2/\text{s}$ $8 \cdot 10^{-6} \text{ mm}^2/\text{s}$ $2 \cdot 10^{-5} \text{ mm}^2/\text{s}$
$D_{apparente}^{Ag}$	Coefficient de diffusion apparente des agrégats	$5 \cdot 10^{-8} \text{ mm}^2/\text{s}$ $1 \cdot 10^{-7} \text{ mm}^2/\text{s}$ $5 \cdot 10^{-7} \text{ mm}^2/\text{s}$
% RAS	Pourcentage de granulats réactifs dans le squelette	50%

Tableau 9 : Paramètres du modèle numérique

Nous avons testé 4 cas différents, 2 dans lesquels le coefficient de diffusion apparente dans la pâte de mortier est augmenté et 2 dans lesquels c'est le coefficient de diffusion apparente dans les gravillons qui est en augmenté. En rose sur les deux graphiques (Fig. 20 et 21) qui suivent le cas test utilisé dans le chapitre précédent.

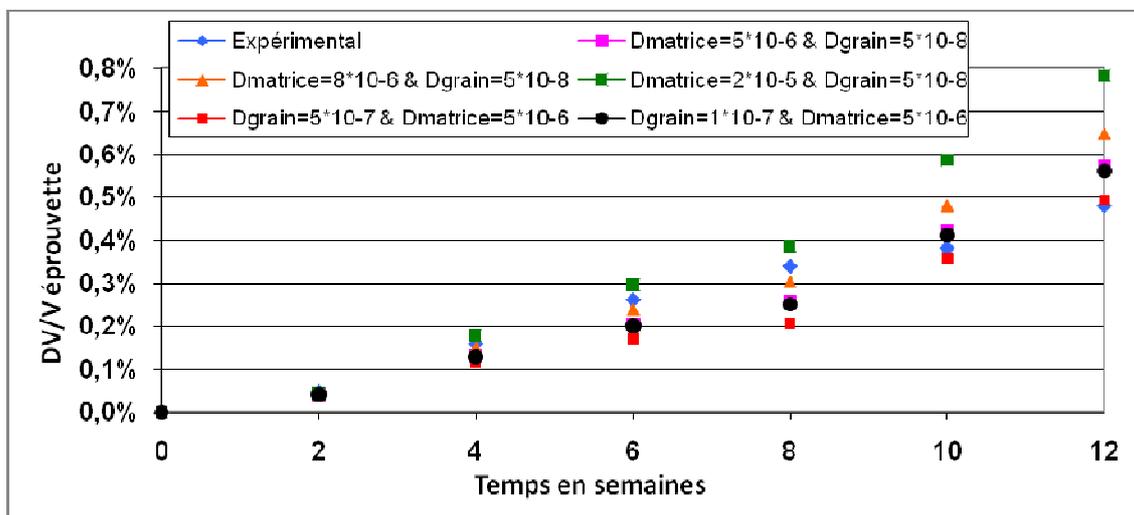


Figure 20 : Variation volumique de l'éprouvette en fonction du temps de réaction

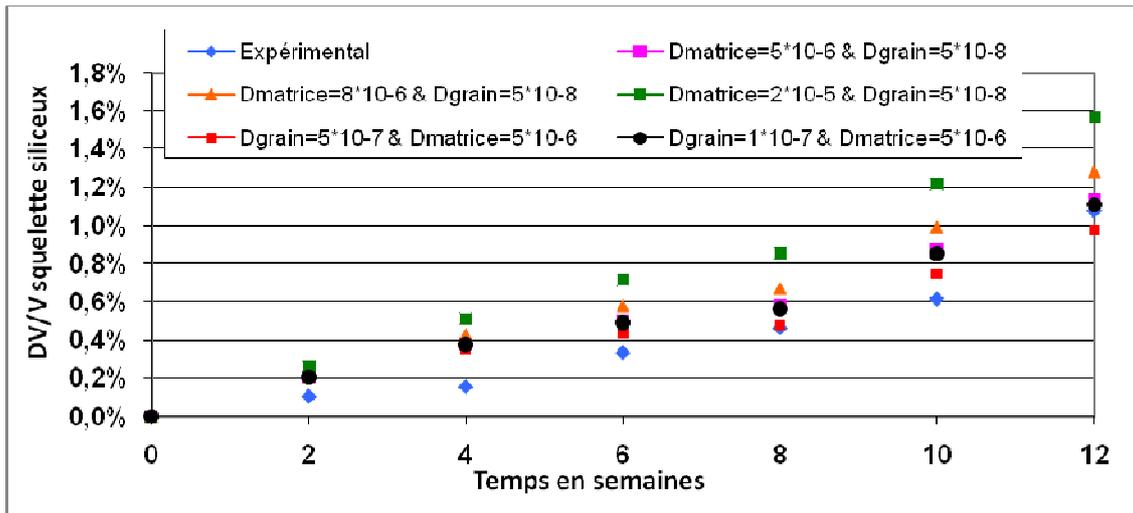


Figure 21 : Variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps de réaction

Dans les deux cas, il apparaît clairement que l'influence du coefficient de diffusion apparente des alcalins dans la pâte de mortier est bien plus forte que celle du coefficient de diffusion apparente dans les gravillons. En effet, on peut voir sur la variation volumique du squelette siliceux que quelque soit le coefficient de diffusion apparente dans les grains, points rouges et noirs, ils sont quasiment confondus avec ceux du cas test (points rose), tandis que les points correspondant à un coefficient plus grand dans la pâte de mortier, points verts et orange, se détachent plus nettement.

Cette étude montre que pour réaliser un couplage mécanique → chimie, il sera plus important de se focaliser sur une loi valable dans la pâte de mortier. Une loi pour les granulats réactifs ne sera pas indispensable.

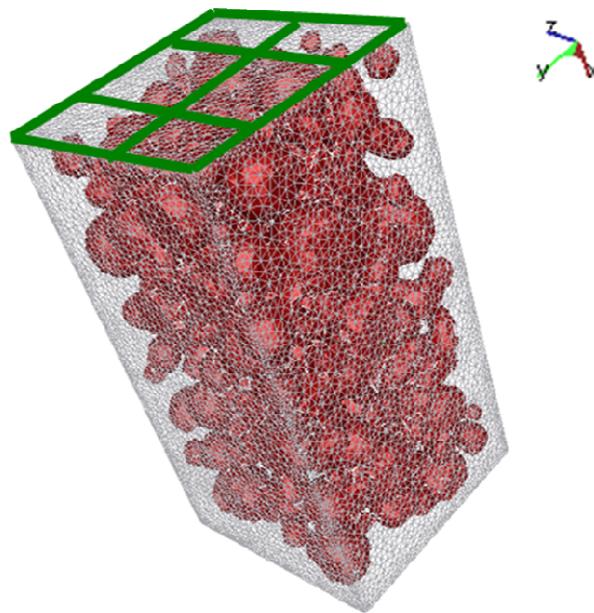
VII.2.6. Influence du confinement de l'éprouvette de béton

Une expérience souvent réalisée en laboratoire [Multon, 2003, Larive, 1997, Grimal, 2007] est le confinement d'une éprouvette soumise à la réaction alcali-silice. Nous avons donc voulu savoir si le modèle numérique reproduisait correctement ce qui était observé expérimentalement. Pour cela nous utilisons les paramètres classiques pour le modèle (Tab. 10).

Nom de la variable	Signification	Valeur
E_{ini}^{PM}	Module d'Young initial de la pâte de mortier	18,69 GPa
$[Na^+]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en alcalins dans la pâte de mortier	$4,7 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mm}^3$
$[Na^+]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en alcalins dans les agrégats	0
$[SiO_2]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en silice dans la pâte de mortier	0
$[SiO_2]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en silice dans les agrégats	$4,33 \cdot 10^{-5} \text{ mol/mm}^3$
$D_{apparente}^{PM}$	Coefficient de diffusion apparente de la pâte de mortier	$5 \cdot 10^{-6} \text{ mm}^2/\text{s}$
$D_{apparente}^{Ag}$	Coefficient de diffusion apparente des agrégats	$5 \cdot 10^{-8} \text{ mm}^2/\text{s}$
% RAS	Pourcentage de granulats réactifs dans le squelette	50%

Tableau 10 : Paramètres du modèle numérique

Nous soumettons l'éprouvette parallélépipédique à un essai de gonflement libre mais nous lui appliquons en même temps une contrainte constante au cours du calcul selon la plus grande dimension de la pièce c'est-à-dire selon l'axe x (Fig. 22).



Plan de symétrie

Figure 22 : Géométrie du cas numérique pour l'influence du confinement d'une éprouvette sur la réaction alcali-silice

Nous testons trois valeurs de contraintes qui sont 5 MPa, 10 MPa et 20 MPa puis nous regardons les résultats obtenus concernant l'allongement linéique suivant une des direction

non contrainte, ici y (Fig. 23), mais aussi la variation volumique globale de l'éprouvette (Fig. 24).

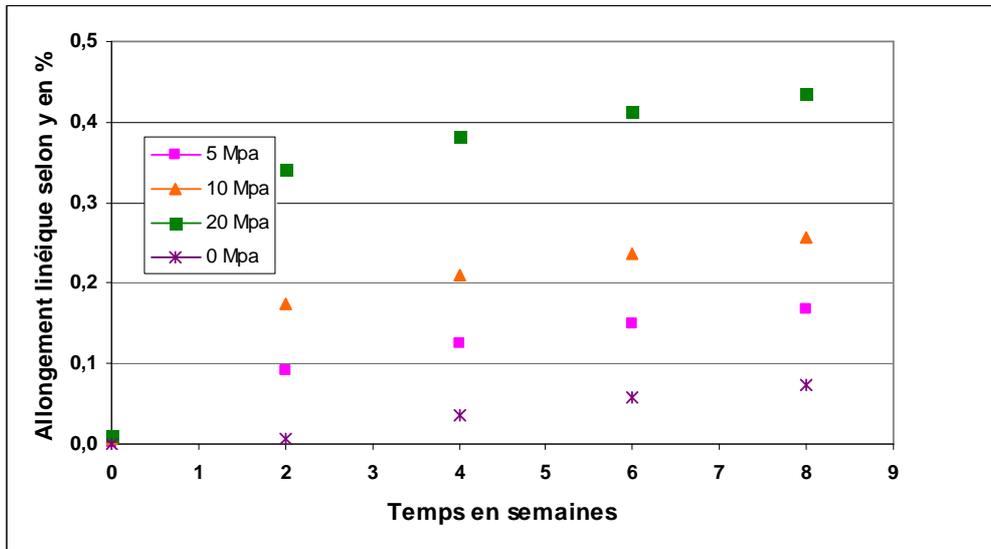


Figure 23 : Allongement linéique suivant y en fonction du temps de réaction

Comme nous pouvions nous y attendre, l'allongement linéique suivant y est d'autant plus important que la contrainte appliquée suivant x est grande. Nous retrouverions ce même résultat si nous regardions l'allongement linéique suivant z, la deuxième direction non contrainte.

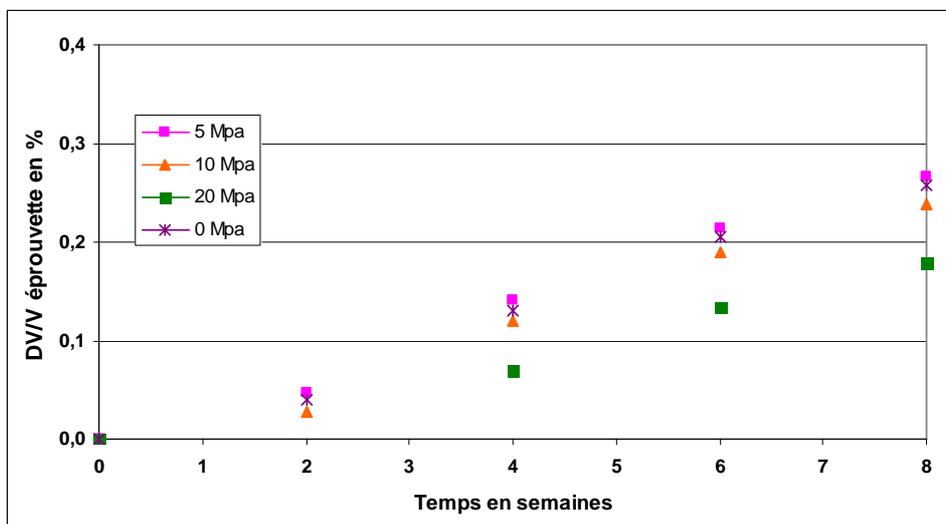


Figure 24 : Variation volumique de l'éprouvette en fonction du temps de réaction

Contrairement à l'allongement linéique, le volume de l'éprouvette ne varie pas ou très peu lorsque la contrainte appliquée est vraiment forte. Ceci est tout à fait en accord avec les résultats expérimentaux [Larive 1997, Multon, 2003] qui montrent que lorsque les expansions sont bloquées dans une direction par un confinement, ici la direction x, alors elles se reportent quasi totalement dans les autres directions, ici y et z, et les gonflements volumiques restent inchangés.

VII.2.7. Simulation d'un béton haute performance soumis à la réaction alcali-silice

L'objectif de cette simulation est de soumettre un béton dit haute performance à la réaction alcali-silice. La première étape était donc de déterminer les caractéristiques de la pâte de mortier permettant d'atteindre des propriétés mécaniques typiques d'un béton haute performance, c'est-à-dire un module d'Young de l'ordre de 60 GPa et une contrainte à la rupture en compression de l'ordre de 120 MPa. La démarche est donc de tester numériquement en compression des éprouvettes cylindriques avec différents module d'Young pour la pâte de mortier. Afin de nous donner une fourchette de valeurs à tester, nous avons utilisé le modèle « trispère » [De Larrard, 1999] qui permet d'évaluer le module d'Young de la pâte de mortier E^{PM} en fonction du module d'Young des agrégats E^A et du module d'Young homogénéisé du béton E (VII. 1) :

$$\begin{cases} E = \frac{(2-g^*)E^{PM} + g^*E^A}{g^*E^{PM} + (2-g^*)E^A} E^A \\ g^* = 1,0475 \sqrt[5]{\frac{d_{\min}}{d_{\max}}} \end{cases} \quad (\text{VII. 1})$$

où g^* représente la concentration granulaire. Si nous considérons $E = 60 \text{ GPa}$, ce que nous souhaitons obtenir, $E^A = 105 \text{ GPa}$, le module d'Young moyen des gravillons de la pâte de mortier (50% de non réactifs avec un module d'Young de 70 GPa et 50% de réactifs avec un module d'Young de 140 GPa) et $g^* = 0,61$ en accord avec la distribution granulaire (le diamètre minimum dans la pâte de mortier est 4 mm) alors le modèle « trispère » nous donne un module d'Young pour la pâte de mortier égal à $E^{PM} = 45 \text{ GPa}$.

Nous avons donc testé trois valeurs pour le module d'Young de la pâte de mortier, $E^{PM} = 40 \text{ GPa}$ ou 45 GPa ou 50 GPa , et effectué un essai de compression uniaxiale tel qu'il est décrit dans le chapitre VI. Il apparaît alors que l'on obtient les résultats recherchés, c'est-à-dire $E = 60 \text{ GPa}$ et une contrainte à la rupture de 120 MPa pour $E^{PM} = 50 \text{ GPa}$.

Nous savons aussi que dans un béton haute performance, la porosité et la teneur en eau sont inférieures à un béton classique. Ces deux paramètres influent fortement sur le coefficient de diffusion apparente des alcalins dans la pâte de mortier. Il a donc été décidé de diminuer ce coefficient en le divisant arbitrairement par 10. Nous avons donc aussi diminué le coefficient de diffusion apparente dans les gravillons afin de conserver un rapport de 100 avec celui de la matrice.

Les paramètres utilisés pour cette simulation sont alors (Tab. 11) :

Nom de la variable	Signification	Valeur
E_{ini}^{PM}	Module d'Young initial de la pâte de mortier	50 GPa
$[Na^+]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en alcalins dans la pâte de mortier	$4,7 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mm}^3$
$[Na^+]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en alcalins dans les agrégats	0
$[SiO_2]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en silice dans la pâte de mortier	0
$[SiO_2]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en silice dans les agrégats	$4,33 \cdot 10^{-5} \text{ mol/mm}^3$
$D_{apparente}^{PM}$	Coefficient de diffusion apparente de la pâte de mortier	$5 \cdot 10^{-7} \text{ mm}^2/\text{s}$
$D_{apparente}^{Ag}$	Coefficient de diffusion apparente des agrégats	$5 \cdot 10^{-9} \text{ mm}^2/\text{s}$
% RAS	Pourcentage de granulats réactifs dans le squelette	50%

Tableau 11 : Paramètres du modèle numérique

Nous allons cette fois-ci analyser trois observables qui sont la variation volumique de l'éprouvette (Fig. 25), celle du squelette siliceux (Fig. 26) et enfin le nombre de moles de silice consommées (Fig. 27).

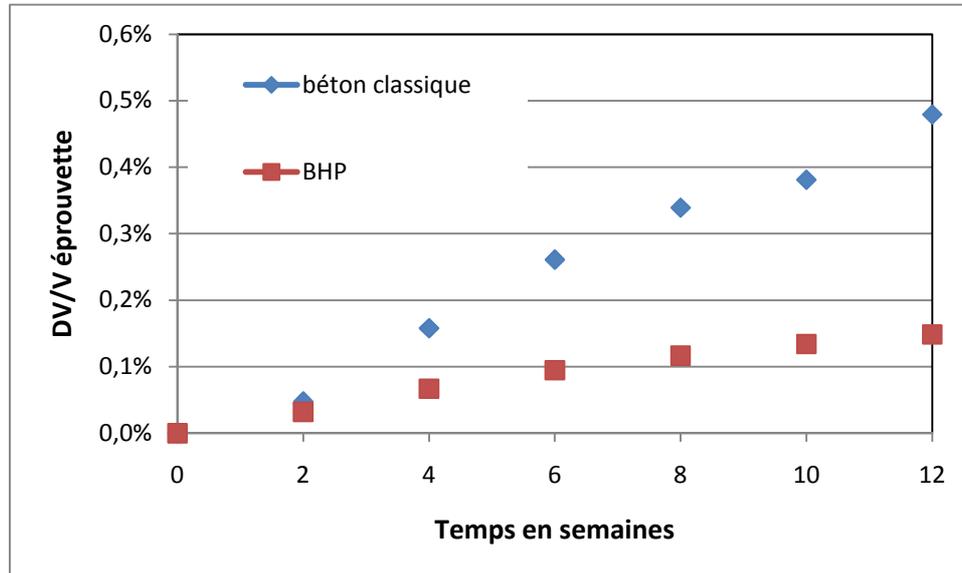


Figure 25 : Variation volumique de l'éprouvette en fonction du temps de réaction

On remarque que le gonflement de l'éprouvette est très fortement diminué dans le cas d'un béton haute performance dès la quatrième semaine.

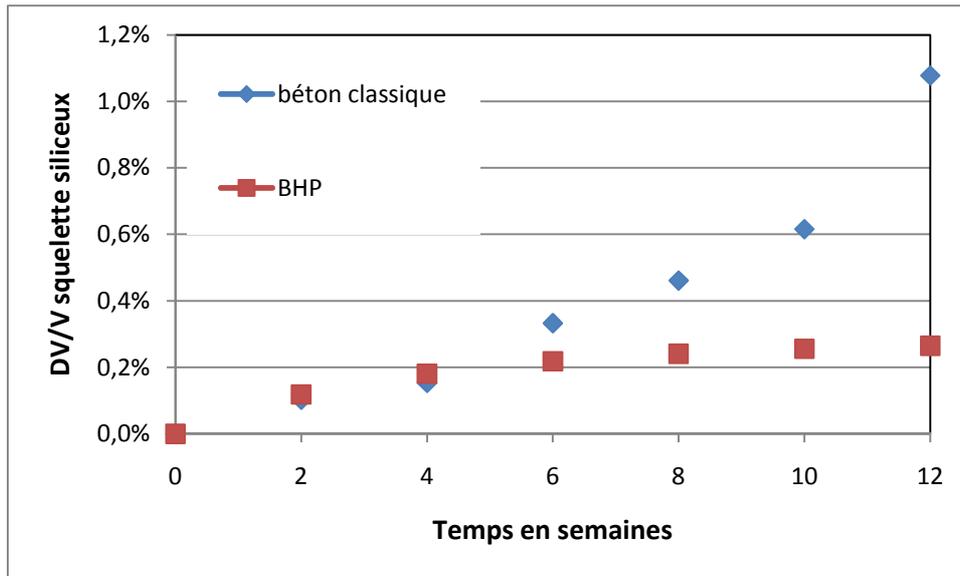


Figure 26 : Variation volumique du squelette siliceux en fonction du temps de réaction

Le gonflement du squelette siliceux est lui aussi très fortement diminué dès la sixième semaine.

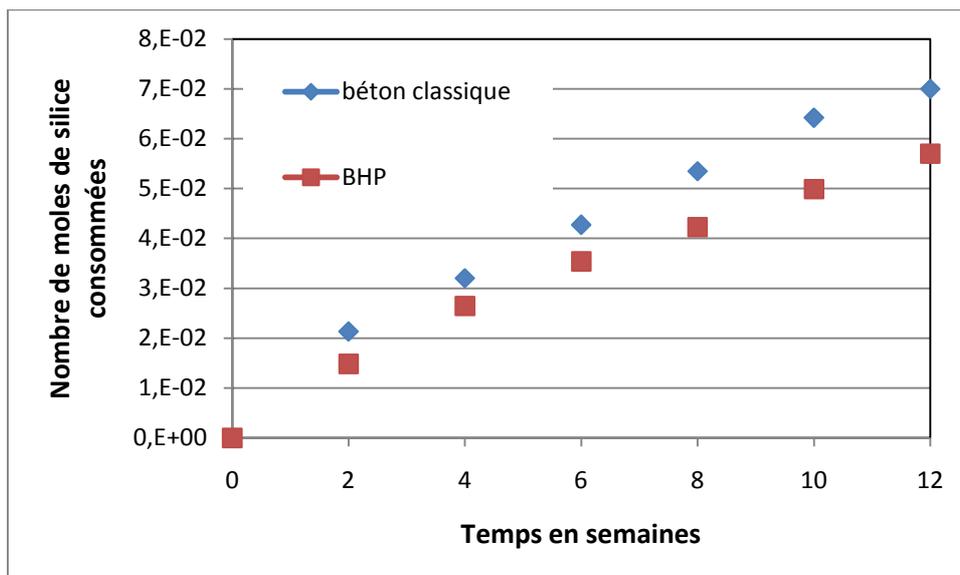


Figure 27 : Evolution du nombre de moles de silice consommées en fonction du temps de réaction

En revanche, le nombre de moles de silice consommées ne varie que très peu au cours de la réaction entre un béton dit classique et un béton haute performance.

Ces observations nous permettent de conclure que la valeur du module d'Young de la pâte de mortier a une réelle influence sur le déroulement de la réaction alcali-silice. En effet, bien que les coefficients de diffusion apparente soient diminués, ils ne peuvent pas expliquer à eux seuls cette si grande différence dans les gonflements observés (cf. chapitre VII.2.5) ; surtout que le nombre de moles de silice consommées est quasiment le même. Cela signifie donc que du fait que la pâte de mortier soit bien plus rigide que dans le cas d'un béton classique, elle permet de réduire l'impact de la déformation des granulats réactifs sur l'éprouvette.

VII.2.8. Bilan

Toutes les études de sensibilité réalisées ont permis de mieux comprendre l'impact des différents paramètres du modèle numérique sur la réaction alcali-silice. Beaucoup de ces études n'ont pas pu être comparées avec des résultats expérimentaux à cause de la lourdeur et de la difficulté à mettre en place des campagnes expérimentales concernant la réaction.

Les principales conclusions de ce travail sont :

- il semble important d'identifier les deux principaux paramètres du modèle numérique, la constante cinétique K et le paramètre de gonflement granulaire G , pour chaque formulation de béton ;
- le comportement mécanique de la pâte de mortier, endommageable ou non, n'a pas d'influence sur le déroulement de la réaction alcali-silice ;
- la teneur en alcalins ainsi que le pourcentage de granulats réactifs a une influence non négligeable sur les gonflements liés à la réaction ;
- la rigidité et donc le module d'Young de la pâte de mortier mais aussi des granulats composant le squelette du béton ont une forte influence sur le comportement d'une éprouvette soumise à la réaction alcali-silice, plus ils sont rigides et plus ils permettent de réduire les gonflements ;
- le coefficient de diffusion apparente des alcalins dans la pâte de mortier a une réelle influence sur la réaction tandis que celui dans les agrégats ne joue pas de façon significative ;
- le modèle numérique permet de reproduire correctement les résultats obtenus dans le cas d'une éprouvette soumise à la réaction alcali-silice lorsque celle-ci est confinée.

Les perspectives de ce travail sont de deux types. D'un point de vue numérique, il semble indispensable d'adopter un modèle d'endommagement compatible avec les mécanismes de la réaction alcali-silice mais aussi d'introduire une composante visqueuse dans le comportement mécanique de la pâte de mortier. D'un point de vue expérimental, il semble important de tester différentes formulations de béton et d'en faire un suivi plus approfondi mais aussi plus performant notamment en ce qui concerne le suivi des propriétés mécaniques du béton au cours de la réaction.

VII.3. Protocole d'utilisation de l'outil numérique FEMCAM

Cette dernière partie vise à expliquer les protocoles numériques et expérimentaux à mettre en place pour une utilisation correcte de notre modèle numérique couplé chimie-mécanique.

VII.3.1. Première étape : les paramètres mécaniques

Il s'agit d'identifier les caractéristiques mécaniques du béton à modéliser ainsi que les paramètres du modèle de Mazars au nombre de 11 et listés dans le tableau suivant (Tab. 12) :

Caractéristiques mécaniques du béton	E_{ini}^{PM}	Module d'Young initial de la pâte de mortier
	$E_{ini}^{ag R}$	Module d'Young initial des agrégats réactifs (siliceux)
	$E_{ini}^{ag NR}$	Module d'Young initial des agrégats non réactifs
	$\nu_A = \nu_{PM}$	Coefficient de Poisson du matériau béton
Paramètres du modèle d'endommagement de Mazars	A_C	lié à l'évolution de l'endommagement en compression
	B_C	lié à l'évolution de l'endommagement en compression
	A_T	lié à l'évolution de l'endommagement en traction
	B_T	lié à l'évolution de l'endommagement en traction
	ϵ_{D0}	Seuil d'endommagement
	$\tilde{\epsilon}_C^{crit}$	Seuil de fissuration en compression
	$\tilde{\epsilon}_T^{crit}$	Seuil de fissuration en traction

Tableau 12 : Paramètres mécaniques à identifier

- ✓ Le coefficient de Poisson peut être déterminé expérimentalement en mesurant l'expansion radiale d'une éprouvette standard cylindrique soumise à un essai de compression uniaxiale grâce à une jauge de type rosette. Mais le plus souvent le coefficient de Poisson d'un béton classique est considéré comme ayant une valeur aux alentours de 0,2. Pour ce paramètre, auquel le modèle ne présente pas de sensibilité particulière, il n'est pas absolument nécessaire de faire des essais expérimentaux pour le déterminer.
- ✓ Pour les modules d'Young des différents gravillons utilisés, il existe des méthodes expérimentales pour les déterminer comme présenté précédemment mais ce sont des protocoles assez lourds à mettre en place et qui demandent un équipement spécial. Toutefois, il existe dans la littérature des données concernant les propriétés mécaniques des différentes roches présentes dans la nature. Il suffit donc de connaître la composition physico-chimique des gravillons utilisés (souvent fournie lors de l'approvisionnement ou alors une fluorescence X peut être effectuée) pour pouvoir déterminer assez précisément la valeur du module d'Young des grains utilisés.

Sur 11 paramètres à déterminer, 3 ne nécessitent pas obligatoirement d'expériences particulières.

Pour les 8 paramètres restants, il faut associer une campagne expérimentale à une campagne numérique réalisée avec un logiciel d'analyse inverse.

Il faudra alors prévoir la confection de 6 éprouvettes cylindriques 16*32 cm ou 11*22 cm au choix, ainsi que de 3 éprouvettes parallélépipédiques de dimension 7*7*28 cm.

- ✓ Trois éprouvettes cylindriques, équipées de 4 jauges extensométriques reliées à un dispositif d'acquisition, serviront à réaliser un essai de compression simple. Ces essais, au nombre de 3 pour la reproductibilité, permettront de déterminer le module d'Young de la pâte de mortier ainsi que les paramètres en compression du modèle de Mazars.

- ✓ Les 3 éprouvettes parallélépipédiques, équipées d'une jauge extensométrique reliée à un dispositif d'acquisition, permettront d'identifier les paramètres en traction du modèle de Mazars.
 - ✓ Enfin, les 3 éprouvettes cylindriques restantes seront soumises à un essai de type « brésilien » afin de valider les paramètres trouvés par le logiciel d'analyse inverse.
- Pour déterminer les paramètres mécaniques de notre modèle, il sera donc nécessaire de confectionner au minimum 9 éprouvettes de béton et de disposer d'un logiciel d'analyse inverse.

VII.3.2. Deuxième étape : les paramètres intrinsèques au béton formulé

Il s'agit de déterminer les paramètres du modèle numérique relatifs à la composition du béton qui sont au nombre de 9 (Tab. 13).

Structure mésoscopique du béton	Nb_granulats	Nombre de granulats à générer pour le squelette
	Nb_classe_granulaire	Nombre de classes granulaires présentes dans le squelette
	Diam	Diamètre des grains de chaque classe granulaire
	Nb_classe	Nombre de grains à générer pour chaque classe granulaire
	% RAS	Pourcentage de granulats réactifs dans le squelette
Composition physico-chimique du béton	$[Na^+]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en alcalins dans la pâte de mortier
	$[Na^+]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en alcalins dans les agrégats
	$[SiO_2]_{ini}^{PM}$	Concentration initiale en silice dans la pâte de mortier
	$[SiO_2]_{ini}^{Ag}$	Concentration initiale en silice dans les agrégats

Tableau 13 : Paramètres intrinsèques du béton à déterminer

- ✓ Les 4 premiers paramètres du tableau précédent sont déterminés à partir de la granulométrie du béton à modéliser. Classiquement, en laboratoire, il est effectué une granulométrie des gravillons utilisés pour connaître la proportion de chaque taille de grains dans le béton. Avec la quantité de grains utilisés, il est aussi possible de connaître la concentration granulaire. Avec ces paramètres facilement accessibles, il s'agira de composer un squelette granulaire numérique respectant à la fois la composition réelle mais permettant aussi d'être généré par l'outil numérique, en tenant compte des limites de mémoire de la machine utilisée (cf. chapitre III).
- ✓ Le pourcentage de granulats potentiellement réactifs est directement connu par l'utilisateur.
- ✓ En ce qui concerne les concentrations en silice et en alcalins dans le béton, il va falloir les calculer. La concentration en alcalins dans la pâte de mortier est déterminée par le volume de pâte de mortier dans une éprouvette, le pourcentage d'alcalins équivalents du ciment

utilisé ainsi que du volume molaire des alcalins (K^+ et Na^+) largement connu. La seule mesure à réaliser est donc de déterminer le pourcentage d'alcalins équivalents. Deux possibilités pour cela, se fier à la notice caractéristique donnée par le fournisseur de ciment ou, ce qui est plus recommandé, effectuer une fluorescence X. Il faudra effectuer les mêmes calculs pour connaître la concentration en silice dans les gravillons réactifs.

VII.3.3. Troisième étape : les paramètres du modèle couplé chimie mécanique

Les paramètres du modèle chimique à déterminer sont au nombre de 6 et sont présentés dans le tableau suivant (Tab. 14).

Paramètres du modèle chimique de représentation de la réaction alcali-silice	C_{limite}	Concentration seuil en alcalins
	K	Constante cinétique
	λ	Coefficient stœchiométrique
	$D_{apparente}^{PM}$	Coefficient de diffusion apparente de la pâte de mortier
	$D_{apparente}^{Ag}$	Coefficient de diffusion apparente des agrégats
	G	Constante exprimant le gonflement granulaire

Tableau 14 : Paramètres du modèle couplé chimie mécanique à déterminer

- ✓ Comme montré dans le chapitre précédent, la concentration limite en alcalins n'a pas ou peu d'influence sur le modèle, il est donc logique de la prendre nulle.
- ✓ Le coefficient stœchiométrique peut être mis égal à 1 puisque c'est la valeur la plus largement rencontrée dans la littérature.
- ✓ Pour identifier la constante cinétique K , ainsi que le paramètre de gonflement G , il est nécessaire de reproduire en laboratoire une réaction alcali-silice accélérée. Il faut donc disposer :
 - de bacs autoclaves ;
 - d'une étuve pouvant être réglée en température et en humidité afin de reproduire les conditions de 60°C et 100% d'humidité relative.

La réaction alcali-silice devra être suivie sur au minimum 12 semaines avec des mesures toutes les deux semaines. A chaque échéance, il faudra mesurer :

- l'allongement linéique à l'aide d'un palpeur sur 3 éprouvettes parallélépipédiques équipées de plots (essai non destructifs) ;
- la variation volumique globale d'une éprouvette par la méthode de la pesée hydrostatique (essai non destructif) ;
- et enfin la variation volumique du squelette siliceux. Bien qu'elle ne nécessite qu'une seule éprouvette, cette dernière expérience est de loin la plus lourde à réaliser puisqu'elle nécessite du temps, un broyeur à béton, un laboratoire de chimie dans lequel pourront être réalisées les attaques à l'acide successives, un pycnomètre à hélium pour mesurer la variation du volume molaire absolu et d'une analyse BET pour mesurer la variation du volume poreux absolu.

Le suivi complet de la réaction alcali-silice en laboratoire nécessite donc au minimum 15 éprouvettes parallélépipédiques, 3 qui seront équipées de plots pour le suivi toutes les deux semaines de l'allongement linéique, 6 qui serviront à mesurer la variation volumique de

l'éprouvette (1 par échéance) et 6 pour les attaques à l'acide. Pour plus de reproductibilité, il est préférable de mesurer à chaque échéance la variation volumique globale d'une éprouvette sur deux échantillons, ce qui nous amène à la fabrication de 21 éprouvettes parallélépipédiques. Avec ces données, il sera possible de déterminer les paramètres K et G en essayant de superposer les courbes obtenues numériquement avec celles obtenues expérimentalement.

- ✓ En ce qui concerne les coefficients de diffusion apparente dans le matériau, nous avons vu que principalement celui dans la pâte de mortier avait une petite influence sur le modèle numérique. Ces coefficients regroupant à la fois le transport des alcalins mais aussi la diffusion pure, il est difficile de les déterminer expérimentalement puisqu'ils vont dépendre à la fois de la porosité du béton mais aussi de sa teneur en eau. Il est donc conseillé de prendre une valeur moyenne de ce qui est rencontré dans la littérature pour le coefficient de diffusion apparente des alcalins dans la pâte de mortier puis de diviser ce coefficient par 100 pour celui dans les gravillons.

VII.3.4. Résumé

Pour une bonne utilisation du modèle numérique couplé chimie-mécanique présenté dans ce manuscrit, il est nécessaire d'identifier un certain nombre de paramètres. Pour cela il faut en premier lieu déterminer une formulation de béton qui sera réactive vis-à-vis de la réaction alcali-silice, c'est-à-dire utiliser un ciment dont le pourcentage en alcalins équivalents est élevé (> 1%) et des gravillons qualifiés de potentiellement réactifs.

Pour ce qui est du nombre d'éprouvettes minimum à confectionner, il faudra prévoir :

- 6 éprouvettes cylindriques (de dimension 16*32 cm ou bien 11*22 cm) ;
- 24 éprouvettes parallélépipédiques de dimension 7*7*28 cm dont 3 équipées de plots.

Cela représente environ 46 L de béton si les éprouvettes cylindriques de dimension 11*22 cm sont préférées ou alors 72 L si ce sont celles de dimension 16*32 cm.

En ce qui concerne les essais expérimentaux ainsi que les moyens dont il faudra disposer, ils sont listés dans le tableau suivant (Tab. 15) avec leur niveau d'importance pour le modèle numérique.

Moyens expérimentaux	Importance
1 logiciel d'analyse inverse	Indispensable
3 essais de compression uniaxiale instrumentés	Indispensable
3 essais de flexion 3 points instrumentés	Indispensable
3 essais « brésiliens » instrumentés	Facultatif
1 granulométrie des gravillons utilisés	Nécessaire
1 fluorescence X des gravillons	Facultatif
1 fluorescence X du ciment	Facultatif
1 étuve + bacs autoclaves	Indispensable
1 palpeur digital	Indispensable
1 broyeur + laboratoire de chimie	Indispensable
1 pycnomètre à hélium	Indispensable
1 analyse BET	Indispensable

Tableau 15 : Résumé des moyens expérimentaux à mettre en œuvre pour l'utilisation du modèle numérique de représentation de la réaction alcali-silice

Références bibliographiques

Buldeel, D., Garcia-Diaz E., Vernet C., Zanni H., **2002**, *Alkali-silica reaction: a method to quantify the reaction degree*, Cement and Concrete Research, Vol. 32, pp. 1199-1206.

De Larrard, F., 1999, *Concrete mixture-Proportionning – A scientific approach*, Modern Concrete Technology series, n°9, E & FN SPON, Londres.

Grimal, E., 2007, *Caractérisation des effets du gonflement provoqué par la réaction alcali-silice sur le comportement mécanique d'une structure en béton. Analyse numérique.*, Thèse de doctorat de l'Université de Toulouse.

Larive, C., 1997, *Apport combinés de l'expérimentation et de la modélisation à la compréhension de l'alcali-réaction et de ses effets mécaniques*, Thèse de doctorat, Ecole Nationale des ponts et Chaussées.

Multon, S., 2003, *Evaluation expérimentale et théorique des effets mécaniques de l'alcali-réaction sur des structures modèles*, Thèse de doctorat, 2003.

Riche, J., 2003, *Quantification de la réaction alcali-silice dans des matières durcies : micromortiers et bétons*, Thèse de doctorat de l'Ecole des Mines de Douai.

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Conclusions

La réaction alcali-silice provoque des dégradations irréversibles dans les ouvrages en béton. Cette réaction, d'origine chimique mais ayant un impact sur la tenue mécanique, a été largement étudiée dans la littérature depuis une trentaine d'années. Les mécanismes réactionnels retenus pour modéliser cette réaction ont été décrits d'après le modèle développé à l'Ecole des Mines de Douai. Le gonflement global du béton est directement la conséquence du gonflement du squelette granulaire à cause de la création d'un gel dans les agrégats siliceux. Ce gonflement granulaire conduit à la modification des propriétés mécaniques du béton et de son comportement en créant de l'endommagement mais aussi des fissures. Il existe des recommandations pour limiter les risques de fabriquer un béton susceptible de développer la réaction alcali-silice mais il n'y a pas de méthodes satisfaisantes pour prédire ou réparer les structures déjà atteintes par la réaction. L'objectif global de ce travail a donc été d'évaluer grâce à une approche couplée chimie-mécanique le gonflement d'un béton atteint par la RAS ainsi que les conséquences mécaniques de ce gonflement afin d'améliorer la durabilité des ouvrages de Génie Civil.

Le but de ce travail de thèse était de modéliser numériquement les mécanismes réactionnels de la réaction alcali-silice et ses conséquences mécaniques sur une éprouvette de béton en s'appuyant sur l'outil numérique FEMCAM. Nous avons donc enrichi l'outil numérique afin de décrire d'un point de vue chimique la réaction alcali-silice mais aussi les aspects mécaniques du processus de gonflement.

En premier lieu, une étude bibliographique approfondie a été réalisée afin de recenser les différentes théories sur le déroulement de la réaction alcali-silice mais aussi les nombreux modèles qui tentent de représenter, à différentes échelles, la réaction. Parmi les différents mécanismes réactionnels envisagés, nous avons retenu ceux proposés par le Département de Génie Civil et Environnemental de l'Ecole des Mines de Douai. La principale originalité de cette approche réside dans le fait qu'elle avance un gonflement du granulat en lui-même par une transformation structurale de la silice réactive qui le compose. Les différents modèles numériques passés en revue nous ont permis de poser les bases et les hypothèses pour l'élaboration de notre modèle physico-chimique de représentation de la réaction alcali-silice. Nous avons choisi une approche à l'échelle mésoscopique dans laquelle les mécanismes réactionnels sont décrits et qui prennent en compte les phénomènes de transport des différentes espèces chimiques et les cinétiques de réaction afin de reproduire la courbe de gonflement libre du matériau.

La troisième section a été l'occasion de présenter l'outil numérique de modélisation par éléments finis tridimensionnels FEMCAM ainsi que la génération de la structure mésoscopique d'un béton. Cet outil, dérivé du logiciel commercial Forge3®, permet de représenter le comportement mécanique du béton. Le béton est considéré comme un matériau biphasique composé d'agrégats agglomérés dans une pâte de mortier. Le comportement des agrégats est considéré comme purement élastique tandis que la pâte de mortier a un comportement élastique endommageable de Mazars. Ce chapitre a aussi présenté l'élaboration du modèle physico-chimique de la réaction alcali-silice puis son implémentation dans l'outil numérique FEMCAM. Nous avons proposé un modèle couplé à deux variables qui sont les champs de concentration en silice et en alcalins. Dans la pâte de mortier ou les granulats non réactifs, seule une équation de diffusion des alcalins représente la réaction. Dans les granulats siliceux réactifs, deux équations permettent de rendre compte de la chimie de la réaction. Une équation de diffusion – réaction pour les alcalins et une équation qui rend compte de la

disparition de la silice au cours du temps. Cette dernière équation contient un paramètre important et novateur, la constante cinétique. Ce paramètre permet de prendre en compte une réaction plus ou moins rapide de la silice avec les alcalins. Une étude paramétrique du modèle physico-chimique a été proposée afin de recenser les différents paramètres d'entrée et de sortie du modèle, d'étudier par une première approche l'influence de ces paramètres mais aussi de montrer la robustesse du modèle numérique.

Après une étude non exhaustive des principaux codes de calculs permettant de modéliser le comportement mécanique du béton, le quatrième chapitre nous a permis de présenter de façon détaillée le modèle de comportement mécanique implémenté dans FEMCAM. Le modèle choisi est celui d'un comportement élastique endommageable de Mazars. Nous avons aussi présenté la méthode pour identifier les paramètres du modèle qui consiste à procéder à une analyse inverse via un logiciel adapté à partir de données expérimentales. Enfin, nous avons discuté des limites et des avantages de cet outil numérique.

La cinquième partie de ce manuscrit a été consacrée aux couplages multiphysiques. En effet, après avoir présenté le modèle physico-chimique de représentation de la RAS et le modèle de comportement mécanique du béton, il était important de coupler ces deux approches afin de représenter les conséquences mécaniques de la réaction. Pour le couplage chimie \rightarrow mécanique, nous avons donc considéré l'approche du DGCE de Douai qui postule le gonflement des agrégats siliceux. Nous avons donc modifié le comportement mécanique des agrégats réactifs afin de prendre en compte un gonflement. Ce gonflement est étroitement lié au nombre de moles de silice ayant réagi via un paramètre numérique G . Ce paramètre devra être identifié à partir de données expérimentales concernant l'avancement de la réaction. Pour le couplage inverse, c'est-à-dire mécanique \rightarrow chimique, nous avons implémenté une loi simple mais facilement évolutive afin de prendre en compte l'augmentation du coefficient de diffusion des alcalins dans le matériau lorsque celui s'endommage.

Une fois le modèle couplé chimie – mécanique élaboré puis implémenté dans FEMCAM, nous avons présenté, dans le sixième chapitre, l'identification des trois paramètres principaux du modèle qui sont la constante cinétique, le paramètre lié au gonflement granulaire et la concentration limite en alcalins. Ces paramètres ont pu être déterminés grâce aux données expérimentales obtenues lors de travaux de thèse précédents. Nous avons ensuite validé le modèle numérique suivant deux axes principaux, les données liées à la chimie de la réaction et les données liées à la mécanique. Nous avons montré que l'outil numérique représentait correctement la chimie de la réaction, c'est-à-dire qu'il rend bien compte de l'évolution de la géométrie d'une éprouvette soumise à la réaction alcali-silice mais aussi de l'avancement de cette réaction ainsi que du gonflement granulaire généré par la RAS. En revanche, le modèle numérique ne reproduit pas fidèlement l'évolution des propriétés mécaniques au cours du temps. En effet, le modèle semble plus sévère que la réalité, il prédit des chutes de résistance 2 à 3 fois plus élevées que ce qui est observé expérimentalement. Nous avons mis en évidence le niveau très élevé de la triaxialité des contraintes dû au mécanisme de gonflement des agrégats et conclu que le modèle d'endommagement de Mazars n'était pas adapté pour représenter les dégradations créées par la réaction alcali-silice.

Le dernier chapitre a été l'occasion de présenter la campagne expérimentale réalisée pendant ce travail de thèse au CMGD d'Alès. La formulation testée est différente de celle étudiée lors des travaux antérieurs, principalement en terme de type de granulats réactifs utilisés mais aussi en quantité d'alcalins présents. Bien que nous constatons une cinétique de

réaction différente, il a été montré que l'allongement linéique en fin de réaction était du même ordre de grandeur. Cette section présente différentes études de sensibilité des paramètres du modèle. Il en ressort principalement que la rigidité initiale du mortier d'enrobage du squelette réactif joue un rôle non négligeable : plus ce mortier est rigide plus l'expansion pour un taux de réaction donnée est faible. Par contre, le comportement endommageable ou non de ce mortier a peu d'influence sur le gonflement libre. La teneur initiale en alcalins dans l'éprouvette ainsi que le pourcentage de granulats réactifs jouent un rôle non négligeable. Enfin, le coefficient de diffusion des alcalins dans la pâte de mortier a une réelle influence sur la cinétique de réaction.

Perspectives

Ce travail de thèse a permis de montrer l'intérêt de l'outil numérique 3D FEMCAM pour aborder la réaction alcali-silice à l'échelle mésoscopique. Les résultats obtenus, tant d'un point de vue numérique qu'expérimental, sont encourageants et les perspectives sont nombreuses pour décrire les problèmes de durabilité des bétons. En effet, grâce aux larges possibilités d'évolution de l'outil numérique, il semble possible d'adapter le modèle à d'autres pathologies des bétons. Cette étude a aussi permis de souligner une nouvelle fois la grande complexité des matériaux cimentaires, tant d'un point de vue chimique que mécanique. Les principales améliorations à apporter au modèle numérique seraient la réduction du nombre de paramètres à identifier mais aussi et surtout l'utilisation d'un modèle d'endommagement adapté pour la représentation des dégradations mécaniques engendrées par la réaction alcali-silice.

Concernant le comportement mécanique du béton, nous avons déjà souligné le fait de prendre en compte une composante visqueuse dans la loi de comportement du béton. Cette prise en compte de la viscosité apparaît d'autant plus justifiée que la réaction alcali-silice est une réaction très lente se déroulant sur de longues périodes. Les effets de fluage mais aussi de relaxation des contraintes sont donc non négligeables.

Une autre perspective d'amélioration du modèle serait la prise en compte de la zone interfaciale de transition. Il faudrait donc repenser le contact bilatéral collant que nous imposons entre les agrégats et la pâte de mortier pour insérer une zone maillée avec des éléments très aplatis auxquels on pourrait donner des propriétés mécaniques initiales différentes. Les approches de type CZM (Cohesive Zone Models) seraient certainement intéressantes pour représenter le comportement élastique endommageable de l'interface entre les agrégats et la pâte de mortier.

Enfin, notre modèle numérique pourrait être enrichi en considérant un comportement élastique endommageable pour les granulats.

D'un point de vue expérimental, là aussi les perspectives sont nombreuses. En effet, il semble important de mettre en place des campagnes expérimentales en faisant varier les formulations de béton testées afin de pouvoir confirmer les observations numériques. Il sera important aussi d'améliorer le suivi expérimental de la réaction et notamment tout ce qui concerne les essais mécaniques y compris la mesure de module sur un matériau endommagé. Enfin, la mise au point d'un protocole expérimental permettant de déterminer le coefficient de diffusion des alcalins dans la pâte de mortier mais aussi dans les granulats serait un atout.