

### Etude des couplages Thermo-Hydro-Chemo-Mécaniques pour la prévision du comportement des grands ouvrages en béton armé et béton précontraint

Laurie Lacarriere

### ► To cite this version:

Laurie Lacarriere. Etude des couplages Thermo-Hydro-Chemo-Mécaniques pour la prévision du comportement des grands ouvrages en béton armé et béton précontraint. Génie civil. Université de Toulouse, 2018. tel-02873220

### HAL Id: tel-02873220 https://hal.science/tel-02873220

Submitted on 18 Jun2020

**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.



# **MÉMOIRE**

En vue de l'obtention de l'

### HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

De l'Université de Toulouse

Délivrée par : l'Université Toulouse 3 - Paul Sabatier

Présenté le 29/11/2018 par :

### LAURIE LACARRIERE

### Etude des couplages Thermo-Hydro-Chemo-Mécaniques pour la prévision du comportement des grands ouvrages en béton armé et béton précontraint

### JURY

JOSÉE DUCHESNE NICOLAS BURLION ALAIN MILLARD ALAIN SELLIER XAVIER BOURBON LIONEL LINGER

CHRISTIAN LABORDERIE PROFESSEUR - ISA BTP (UPPA) PROFESSEUR - UNIVERSITÉ LAVAL **PROFESSEUR - POLYTECH LILLE** CHERCHEUR (HDR) - CEA SACLAY JEAN-MICHEL TORRENTI DIRECTEUR SCIENTIFIQUE - IFSTTAR **PROFESSEUR - UNIVERSITÉ TOULOUSE 3** INGÉNIEUR (DR) - ANDRA **INGÉNIEUR - VINCI (VCGP)** 

Président RAPPORTRICE RAPPORTEUR RAPPORTEUR **EXAMINATEUR** GARANT HDR MEMBRE INVITÉ **MEMBRE INVITÉ** 

École doctorale et spécialité : MEGEP, Génie civil Unité de Recherche : Laboratoire Matériaux et Durabilité de Constructions



# Table des matières

Ta	ble d	les mat	tières	i				
1	Intr	oducti	on	1				
2	Moo	délisati	ion numérique de l'évolution chimique des matériaux cimentaires	5				
	2.1	Intro	luction	7				
	2.2	Hydra	atation court-terme des matériaux cimentaires	8				
		2.2.1	Loi d'affinité phénoménologique	10				
		2.2.2	Variables internes du modèle d'hydratation et stoechiométrie des hydrates formés	12				
		2.2.3	Exemples d'application et validation pour les ciments portland et les liants binaires à teneur en silice modérée	15				
	2.3	Evolu	tion à long terme des liants fortement substitués en conditions endogènes	19				
		2.3.1	Limites du modèle d'hydratation court-terme	19				
		2.3.2	Observations expérimentales	19				
		2.3.3	Modélisation de l'hydratation long terme des liants à forte teneur en silice (type low-pH ou low-beat)	21				
	24	Déshi	vdratation des matériaux cimentaires	21				
	2.1	2 4 1	Modèle de cinétique de désbydratation	25				
		2.4.2	Loi de déshydratation élémentaire par hydrate	27				
		2.4.3	Application à différents ciments pour différents taux de chauffage	30				
	2.5	Bilan	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	32				
3	Moo	délisati	ion numérique des transferts de masse et chaleur dans les matériaux ci-					
	mei	ntaires		33				
	3.1	Introc		35				
		3.1.1		35				
		3.1.2	Principe de modélisation thermo-hydrique couplée	36				
	3.2	Modé	lisation unifiée des transferts d'eau pour les bétons durcis à température	20				
	2.2	moderees						
	3.3	Innue do rót	ence de variations de la microstructure et de la temperature sur les courbes	12				
		2 2 1	Modéligation de l'affet de la migrostructure sur les isothermes de sorntion	43				
		5.5.1	et désorntion	43				
		3.3.2	Modélisation macroscopique de l'effet de la température sur les courbes	C1				
		0.0.2	de rétention d'eau	45				
	3.4	Bilan		47				

4	Prise en compte des évolutions physico-chimiques sur le comportement mécanique					
des bétons						
	4.1	Introduction				
		4.1.1 Cadre général de travail				
		4.1.2 Principe général de couplage				
		4.1.3 Rappel du modèle LMDC pour les bétons durcis sains				
	4.2	Comportement mécanique du béton sous sollicitations thermo-hydriques 57				
		4.2.1 Effet de la température				
		4.2.2 Effet du degré de saturation				
		4.2.3 Application				
	4.3	Comportement mécanique du béton en cours d'hydratation 61				
		4.3.1 Écriture incrémentale des lois de comportement				
		4.3.2 Comportement élastique du béton au jeune âge				
		4.3.3 Fissuration du béton en cours d'hydratation				
		4.3.4 Comportement mécanique du béton armé au jeune âge				
		4.3.5 Comportement hydro-mécanique du béton au jeune âge				
		4.3.6 Comportement différé du béton au jeune âge				
	4.4	Comportement mécanique du béton soumis à une décalcification				
	4.5	Cumul des évolutions mécaniques en contexte thermo-hydro-chimique couplé . 86				
		4.5.1 Cumul d'endommagement diffus et évolution des propriétés mécaniques 86				
		4.5.2 Application à la prédiction de la durée de vie d'un ouvrage de stockage de				
		déchets radioactifs				
	4.6	Bilan				
5	Ann	$\mathbf{x}_{i}$				
5	App	ication a la difeticultur du compositement i montre su uctures massives 55				
	E 1					
	5.1	Introduction				
	5.1 5.2	Introduction       95         Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton       96         5.2.1       Mise en éridence et principe				
	5.1 5.2	Introduction       95         Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton       96         5.2.1       Mise en évidence et principe       96         5.2.2       Simulation du server de maint CEOC       90				
	5.1 5.2	Introduction       95         Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton       96         5.2.1       Mise en évidence et principe       96         5.2.2       Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS       99	1			
	<ul><li>5.1</li><li>5.2</li><li>5.3</li></ul>	Introduction       95         Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton       96         5.2.1       Mise en évidence et principe       96         5.2.2       Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS       99         Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments10       101	1			
	<ul><li>5.1</li><li>5.2</li><li>5.3</li></ul>	Introduction       95         Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton       96         5.2.1       Mise en évidence et principe       96         5.2.2       Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS       99         Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments10       101         5.3.1       Principe de modélisation       101	1			
	<ul><li>5.1</li><li>5.2</li><li>5.3</li></ul>	Introduction       95         Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton       96         5.2.1       Mise en évidence et principe       96         5.2.2       Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS       99         Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments10       101         5.3.1       Principe de modélisation       101         5.3.2       Loi de comportement des câbles de précontrainte       102	1			
	<ul><li>5.1</li><li>5.2</li><li>5.3</li></ul>	Introduction       95         Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton       96         5.2.1       Mise en évidence et principe       96         5.2.2       Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS       99         Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments10       101         5.3.1       Principe de modélisation       101         5.3.2       Loi de comportement des câbles de précontrainte       102         5.3.3       Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE       105	1			
	<ul><li>5.1</li><li>5.2</li><li>5.3</li><li>5.4</li></ul>	Introduction       95         Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton       96         5.2.1       Mise en évidence et principe       96         5.2.2       Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS       99         Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments10       101         5.3.1       Principe de modélisation       101         5.3.2       Loi de comportement des câbles de précontrainte       102         5.3.3       Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE       105         Phasage de réalisation       107	1			
	<ul><li>5.1</li><li>5.2</li><li>5.3</li><li>5.4</li></ul>	Introduction95Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton965.2.1Mise en évidence et principe965.2.2Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS99Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments101015.3.1Principe de modélisation1015.3.2Loi de comportement des câbles de précontrainte1025.3.3Simulation du comportement de la maquette précontrainte1055.4.1Principe de modélisation1075.4.2Cimulation du comportement de la maquette107	1			
	<ul><li>5.1</li><li>5.2</li><li>5.3</li><li>5.4</li></ul>	Introduction95Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton965.2.1 Mise en évidence et principe965.2.2 Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS99Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments105.3.1 Principe de modélisation1015.3.2 Loi de comportement des câbles de précontrainte1025.3.3 Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE1075.4.1 Principe de modélisation1075.4.2 Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge110	1			
6	<ul><li>5.1</li><li>5.2</li><li>5.3</li><li>5.4</li><li>Bila</li></ul>	Introduction95Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton965.2.1Mise en évidence et principe965.2.2Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS99Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments105.3.1Principe de modélisation1015.3.2Loi de comportement des câbles de précontrainte1025.3.3Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE105Phasage de réalisation1075.4.1Principe de modélisation1075.4.2Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge110101115115	1			
6	<ul> <li>5.1</li> <li>5.2</li> <li>5.3</li> <li>5.4</li> <li>Bila</li> <li>6.1</li> </ul>	Introduction95Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton965.2.1 Mise en évidence et principe965.2.2 Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS99Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments105.3.1 Principe de modélisation1015.3.2 Loi de comportement des câbles de précontrainte1025.3.3 Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE105Phasage de réalisation1075.4.1 Principe de modélisation1075.4.2 Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge110 <b>et Perspectives de recherche</b> 115Bilan global117	1			
6	<ul> <li>5.1</li> <li>5.2</li> <li>5.3</li> <li>5.4</li> <li>Bila</li> <li>6.1</li> <li>6.2</li> </ul>	Introduction95Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton965.2.1 Mise en évidence et principe965.2.2 Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS99Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments105.3.1 Principe de modélisation1015.3.2 Loi de comportement des câbles de précontrainte1025.3.3 Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE105Phasage de réalisation1075.4.1 Principe de modélisation1075.4.2 Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge110ransfert de connaissances117	1			
6	<ul> <li>5.1</li> <li>5.2</li> <li>5.3</li> <li>5.4</li> <li>Bila</li> <li>6.1</li> <li>6.2</li> <li>6.3</li> </ul>	Introduction95Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton965.2.1 Mise en évidence et principe965.2.2 Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS99Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments105.3.1 Principe de modélisation1015.3.2 Loi de comportement des câbles de précontrainte1025.3.3 Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE105Phasage de réalisation1075.4.1 Principe de modélisation1075.4.2 Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge110Transfert de connaissances117Prerspectives scientifiques à moyen terme121	1			
6	<ul> <li>5.1</li> <li>5.2</li> <li>5.3</li> <li>5.4</li> <li>Bila</li> <li>6.1</li> <li>6.2</li> <li>6.3</li> </ul>	Introduction95Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton965.2.1 Mise en évidence et principe965.2.2 Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS99Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments105.3.1 Principe de modélisation1015.3.2 Loi de comportement des câbles de précontrainte1025.3.3 Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE105Phasage de réalisation1075.4.1 Principe de modélisation1075.4.2 Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge110ret Perspectives de recherche115Bilan global117Transfert de connaissances119Perspectives scientifiques à moyen terme1216.3.1 Évolutions chimiques de bétons à fort taux de substitution et conséquences	1			
6	<ul> <li>5.1</li> <li>5.2</li> <li>5.3</li> <li>5.4</li> <li><b>Bila</b></li> <li>6.1</li> <li>6.2</li> <li>6.3</li> </ul>	Introduction95Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton965.2.1Mise en évidence et principe965.2.2Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS99Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments105.3.1Principe de modélisation1015.3.2Loi de comportement des câbles de précontrainte1025.3.3Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE1055.4.1Principe de modélisation1075.4.2Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge1105.4.2Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge1105.4.2Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge1105.4.2Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge1107.4.2Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge1109.4.2Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge1109.4.3Intransfert de connaissances1129.4.4Évolutions chimiques de bétons à fort taux de substitution et conséquences mécaniques121	1			
6	<ul> <li>5.1</li> <li>5.2</li> <li>5.3</li> <li>5.4</li> <li><b>Bila</b></li> <li>6.1</li> <li>6.2</li> <li>6.3</li> </ul>	Introduction       95         Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton       96         5.2.1       Mise en évidence et principe       96         5.2.2       Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS       99         Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments10       5.3.1       Principe de modélisation       101         5.3.2       Loi de comportement des câbles de précontrainte       102       102         5.3.3       Simulation du comportement de la maquette précontrainte       102         5.3.3       Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE       105         Phasage de réalisation       107       107         5.4.1       Principe de modélisation       107         5.4.2       Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge       110         6.4.2       Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge       110         6.3.1       Évolutions chimiques de bétons à fort taux de substitution et conséquences mécaniques       121         6.3.2       Comportement hygro-mécanique des bétons au jeune âge       121	1			
6	<ul> <li>5.1</li> <li>5.2</li> <li>5.3</li> <li>5.4</li> <li><b>Bila</b></li> <li>6.1</li> <li>6.2</li> <li>6.3</li> <li>6.4</li> </ul>	Introduction       95         Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton       96         5.2.1       Mise en évidence et principe       96         5.2.2       Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS       99         Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments10       101         5.3.1       Principe de modélisation       101         5.3.2       Loi de comportement des câbles de précontrainte       102         5.3.3       Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE       105         Phasage de réalisation       107         5.4.1       Principe de modélisation       107         5.4.2       Simulation du comportement de la maquette vercors au jeune âge       110         6.4.2       Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge       110         7.4.2       Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge       110         9.4.2       Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge       110         9.4.2       Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge       110         9.4.3       Mage       117       117         Transfert de connaissances       119       119         Perspectives scientifiques à moyen terme       12	1			
6	<ul> <li>5.1</li> <li>5.2</li> <li>5.3</li> <li>5.4</li> <li><b>Bila</b></li> <li>6.1</li> <li>6.2</li> <li>6.3</li> <li>6.4</li> </ul>	Introduction       95         Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton       96         5.2.1       Mise en évidence et principe       96         5.2.2       Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS       99         Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments10       93         5.3.1       Principe de modélisation       101         5.3.2       Loi de comportement des câbles de précontrainte       102         5.3.3       Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE       105         5.3.3       Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE       107         5.4.1       Principe de modélisation       107         5.4.2       Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge       110         5.4.2       Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge       110         5.4.2       Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge       110         6.4.2       Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge       110         6.4.2       Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge       110         6.4.1       Principe de modélisation       117       117         Transfert de connaissances       119       119	1			

### Bibliographie

## **Chapitre 1**

### Introduction

Lors de la conception et de la construction de structures en béton, un aspect important du cahier des charges est la durée de vie souhaitée de l'ouvrage. La durabilité de la structure dans le temps étant fortement conditionnée par les éventuelles attaques chimiques qu'elle peut subir (notamment par une perte de performances vis à vis des transferts ou des propriétés mécaniques) le calcul ou recalcul de structures en béton ne peut désormais se faire en ignorant les couplages entre les évolutions hydro-thermiques, chimiques et mécaniques du béton dans l'ouvrage. Dans ce contexte, les recherches que j'ai menées depuis mon recrutement en 2008 au sein du LMDC ont ainsi traité de la modélisation numérique des couplages THCM (Thermo Hydro Chemo Mécanique) pour la prévision du comportement des grands ouvrages en béton armé. Il s'est agi principalement d'étudier les évolutions physico-chimiques des bétons dans des contextes THCM variés ainsi que leur impact en termes de comportement mécanique. Les applications principales ont été la prédiction du risque de fissuration précoce des ouvrages massifs (barrages, enceinte de confinements, ...), le comportement à moyen et long terme des ouvrages soumis à dégradation ou évolution chimiques (tunnels de stockage des déchets radioactifs), et plus récemment le comportement des enceintes de confinement lors d'un accident nucléaire (comportement sous température élevées).

D'un point de vue organisationnel, ces recherches ont toutes été menées dans le cadre de projets de recherche obtenus au LMDC avec des partenariats industriels (VINCI, Andra) mais aussi institutionnels (2 ANR et 1 PN). La figure 1.1 reporte, sur les dernières lignes, les différents contrats dans lesquels j'ai été impliquée depuis la fin de ma thèse en 2007 (sont également indiqués le montant des contrats hors salaires et ma participation en %, précisée pour les contrats non portés seule).



FIGURE 1.1 - Bilan des encadrements et cadre de mes recherches

Ces contrats ont permis de financer 6 des 7 thèses que j'ai co-encadrées sur la période, 2 post-doctorats et 11 des 12 stages recherche M2 encadrés. Ces encadrements, et leur évolution depuis 2007 sont également reportés sur la figure 1.1.

D'un point de vue scientifique, de par les différents partenariats développés sur ces thématiques ces dernières années, ainsi que de par mon attrait personnel pour des recherches permettant justement d'aller du matériau à la structure, les développements des différents modèles de prédiction de l'évolution physico-chimique et mécanique des matériaux cimentaires se sont faits à une échelle suffisamment macroscopique pour qu'ils restent applicables à la prédiction de la durée de vie par exemple des grands ouvrages pour l'énergie (barrages, enceintes de confinement, structures d'entreposage des déchets radioactifs, ...).

L'approche d'étude se veut malgré tout multi-échelle, comme l'illustre la figure 1.2, puisqu'un soin particulier est porté à l'observation à l'échelle des hydrates afin de bien appréhender les phénomènes mis en jeu et de les transcrire ensuite en terme de lois d'évolutions à l'échelle du matériau qui pourront être utilisées dans les lois de comportement macroscopiques utilisées à l'échelle de la structure.



FIGURE 1.2 - Principe multi-échelle d'étude des phénomènes modélisés du matériau vers la structure

Concernant l'échelle de temps, en étudiant les évolutions chimiques des matériaux cimentaires depuis leur coulage jusqu'à long-terme, on se retrouve confronté à des phénomènes très rapides (comme les réactions d'hydratation dans les premiers jours après le coulage) et exothermiques ainsi qu'à des phénomènes beaucoup plus lents (comme l'évolution des propriétés mécaniques au delà du premier mois, ou les phénomènes de dégradation chimique). La figure 1.3 présente l'évolution du dégagement de chaleur, de la température et de la résistance en compression au cœur d'une structure réalisée en béton à base de liant ternaire (plus sensibles aux lentes évolutions chimiques à long-terme). Elle illustre cette occurrence décalée des phénomènes puisque l'on constate bien qu'avant deux mois la cinétique d'augmentation des résistances est bien corrélée à un dégagement de chaleur de cinétique similaire, alors qu'après un peu moins de 2 mois le dégagement de chaleur est négligeable (témoin de réactions bien moins vives) bien que la résistance continue à augmenter (avec malgré tout une cinétique plus lente que les premier mois).

Les enjeux sont donc différents suivant l'échelle d'observation de la structure. Au jeune âge, le risque de désordres est lié aux conséquences de l'exothermie des réactions d'hydratation (température atteinte élevée, risque de fissuration par gradient thermique ou au refroidissement,...). Les phénomènes d'équilibres chimiques internes fins (plus lents car pilotés par la nécessité de micro-diffusion des espèces dans une pâte hydratée) sont donc du second ordre à cette échelle de temps par rapport à la bonne prise en compte de l'exothermie des réactions (qui s'appréhendent plus facilement de façon globale à partir des anhydres réagissant que par des équilibres sur chaque phase solide).



FIGURE 1.3 – Evolution du dégagement de chaleur et des résistances d'un matériau cimentaire au cours du temps

A plus long terme le risque de désordre est lié aux modifications de la microstructure de la pâte sous l'effet d'agressions extérieures (dissolution ou modification de la structure des hydrates entraînant une augmentation de porosité et une perte de cohésion). Les variations de températures ne sont alors qu'exogènes et donc liées à des cinétiques extérieures (conditions aux limites) et non à des mécanismes réactionnels. On adopte donc volontairement une approche de modélisation chainée afin de découpler ces phénomènes régis par des moteurs et des cinétiques différents. La figure 1.4 illustre ce découplage en présentant le choix qui est fait sur la détermination des performances du matériau au cours du temps.



FIGURE 1.4 - Evolution schématique des performances d'un matériau cimentaire au cours du temps

Le couplage est ensuite fait au niveau mécanique, puisque le comportement mécanique est modélisé tout au long de la vie du béton par un seul modèle. L'effet des évolutions chimiques chainées, notamment leur impact sur la microstructure, est prise en compte tout au long de la durée de vie de l'ouvrage par un couplage de ce modèle mécanique avec les différents modèles chimiques, assurant ainsi un cumul des déformations, contraintes et endommagement depuis le coulage (couplage faible puisqu'à ce jour l'effet éventuel du comportement mécanique sur les évolutions chimiques du matériau est négligé).

Le travail réalisé ces 10 dernières annnées pour mettre au point ces modèles de comportement THCM des bétons dans les ouvrages sous différentes sollicitations physico-chimiques sera exposé dans ce mémoire en suivant ce principe de modélisation à couplage faible avec modélisation chimique chainée dans le temps.



FIGURE 1.5 – Schema de principe des couplages THCM pour la prédiction de la durée de vie des ouvrages - Plan du mémoire

La figure 1.5 reprend le principe général de couplage avec au cœur des développements les modèles de prédiction des évolutions chimiques des bétons du jeune âge à long terme et leurs conséquences sur l'évolution des comportements hygro-thermique et mécanique. CLa partie de ce mémoire présentant le bilan des activités scientifiques sera donc organisée en 4 chapitres :

- Chapitre 2 : Modélisation de l'évolution chimique des matériaux cimentaires : Ce chapitre présentera les modèles d'évolution chimique des bétons avec tout d'abord le modèle d'hydratation jeune âge adapté aux liants composés, puis le modèle d'évolution à long termes des liants à forte teneur en silice et enfin un modèle de déshydratation des matériaux cimentaires soumis à des températures élevées. Comme expliqué précédemment (et reporté fig. 1.5), la modélisation est chainée puisque chaque modèle s'appuie sur ses propres variables internes mais est initialisé à partir des résultats du précédent.
- Chapitre 3 : Modélisation numérique des transferts de masse et chaleur dans les matériaux cimentaires : Ce chapitre présentera la modélisation des transports de chaleur et d'eau en milieu saturé et insaturé avec une modélisation continue depuis le jeune âge (prise en compte de la consommation d'eau par l'hydratation) jusqu'à long terme sous sollicitations thermo-hydrique sévères (effet de températures élevées).
- Chapitre 4 : Prise en compte des évolutions physico-chimiques sur le comportement mécanique des bétons : Ce chapitre présentera les modélisations mises en œuvre pour faire dépendre le modèle de comportement mécanique non linéaire développé au LMDC des évolutions physico-chimiques mises en évidence aux chapitres 2 et 3. Il s'agira en particulier d'étudier le comportement mécanique du béton au jeune âge mais aussi l'effet de températures et humidité variables ou encore le comportement résiduel de bétons dégradés chimiquement.
- Chapitre 5 : Application à la prédiction du comportement THCM de structures massives : Enfin, ce dernier chapitre présentera les applications des modèles précédemment présentés au cas de structures massives réelles. Ce passage à une utilisation à l'échelle de structures réelles a nécessité quelques développements scientifiques spécifiques qui seront présentés ici.

Le dernier chapitre (Ch. 6) sera consacré à un bilan général et aux perspectives que l'on peut tirer pour les années à venir.

# **Chapitre 2**

# Modélisation numérique de l'évolution chimique des matériaux cimentaires

### Sommaire

2.1	Introduction				
2.2	2 Hydratation court-terme des matériaux cimentaires				
	2.2.1	Loi d'affinité phénoménologique	10		
	2.2.2	Variables internes du modèle d'hydratation et stoechiométrie des hy- drates formés	12		
	2.2.3	Exemples d'application et validation pour les ciments portland et les liants binaires à teneur en silice modérée	15		
2.3	Evolu gènes	tion à long terme des liants fortement substitués en conditions endo-	19		
	2.3.1	Limites du modèle d'hydratation court-terme	19		
	2.3.2	Observations expérimentales	19		
	2.3.3	Modélisation de l'hydratation long terme des liants à forte teneur en si- lice (type low-pH ou low-heat)	21		
2.4	Déshy	ydratation des matériaux cimentaires	24		
	2.4.1	Modèle de cinétique de déshydratation	25		
	2.4.2	Loi de déshydratation élémentaire par hydrate	27		
	2.4.3	Application à différents ciments pour différents taux de chauffage	30		
2.5	Bilan		32		

### 2.1 Introduction

Dans ce chapitre vont être présentés les différents modèles développés pour prédire une partie des évolutions chimiques subies par les matériaux cimentaires dans les structures depuis le coulage jusqu'à long terme. Partant d'une part de l'expérience acquise en DEA sur la modélisation de la décalcification de la pâte hydratée, et d'autre part de celle acquise en thèse avec le développement d'un modèle d'hydratation des matériaux cimentaires (ciments portland et ciments avec substitution par fumées de silice ou cendres volantes), les travaux menés depuis 2008 ont progressivement évolué vers la caractérisation et le développement de modèles permettant de prédire plusieurs formes d'évolutions chimiques des matériaux (hydratation à court terme d'autres liants cimentaires, hydratation à long terme de liants à forte teneur en silice, décalcification des ciments hydratées et déshydratation des bétons sous hautes températures). C'est en effet grâce à l'expertise concernant le développement de la microstructure et ses conséquences acquises en thèse puis au cours des premiers encadrements de thèses que ces études ont pu être élargies à la prise en compte de dégradation. Ces travaux ont débuté en 2008 dans la continuité de ma thèse de doctorat et on pu être réalisés grâce au soutien financier de deux partenariats industriels principaux :

- VINCI Construction Grands Projets (VCGP) *Laurent Boutillon et Lionel Linger* : suite aux résultats obtenus dans ma thèse (CIFRE VCGP 2004-2007), ils ont sollicité le LMDC pour financer une nouvelle thèse CIFRE afin d'étendre les modèles développés dans ma thèse au cas des bétons à base de laitiers et des structures armées (voir chapitre 4). C'est dans ce cadre que j'ai pu démarrer mon expérience de co-endradrement avec la thèse de Batian Kolani (co-encadrement Alain Sellier et Gilles Escadeillas).
- l'Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs (ANDRA) Xavier Bourbon et Guillaume Camps
  - Implication dans un contrat passé en 2006 avec le LMDC concernant la prédiction du comportement jeune âge et sous lixiviation des ouvrages de stockage radioactifs avec le co-encadrement (avec Alain Sellier) du post-doctorat de M. El Gonouni.
  - Obtention (avec Alain Sellier) en 2010 (suite à la présentation des résultats de la thèse de Batian Kolani sur la prédiction de l'hydratation des ciments aux laitiers) d'un contrat pour le développement d'un modèle de prédiction de l'évolution chimique long-terme de liants très fortement substitués. Ce contrat a permis (associé à une autre source de financement non répertoriée ici) le financement de la thèse de Youssef El Bitouri (co-encadrement Alain Sellier).
  - Obtention en 2016 (suite aux résultats obtenus par Y. El Bitouri) d'un contrat pour la prédiction du comportement chemo-mécanique des bétons bas pH (liants ternaires à forte teneur en silice) soumis à une lixiviation. Ce contrat a permis le financement de la thèse de Thomas Bes (encadrement à 100% avec dérogation HDR).
  - Obtention en 2017 d'un contrat incitatif d'accompagnement de stagiaire M2 (à partir de 2013 les stagiaires M2 devant être indemnisés, chaque encadrement a été associé à un contrat auquel je participais) pour amorcer une nouvelle collaboration avec l'ANDRA (avec l'implication d'un autre service de l'ANDRA - *Nicolas Girlardi*) sur le suivi du comportement de murs coulés en bas pH dans la galerie de laboratoire souterrain de l'ANDRA. Ceci devrait par ailleurs déboucher sur un nouveau contrat en 2018-19 pour un financement de thèse.

Les études sur la déshydratation, pour laquelle le laboratoire n'avait pas d'expertise, ont été amorcées en 2012 par l'obtention d'un financement de bourse CSC (co-encadrement Alain Sellier) pour laquelle le laboratoire a financé l'environnement sur fonds propres. La figure 2.1 résume les différents indicateurs associés à cette thématique en terme d'encadrement doctoral (avec % associés), de participation à des contrats industriels (avec les montants et le % d'implication), de relations avec l'international et de publications internationales (AI : revues de rang A, COI : chapitre d'ouvrage, CI : conférences avec actes).



FIGURE 2.1 - Bilan comptable des activités liées aux évolution chimiques des matériaux cimentaires

### 2.2 Hydratation court-terme des matériaux cimentaires

Lorsque l'on souhaite modéliser la cinétique de réaction d'hydratation des matériaux cimentaires en vue de prédire le comportement au jeune âge des structures (ou même d'éprouvettes de laboratoire) on ne peut s'affranchir du fait que ces cinétiques vont être activées par les conditions environnementales et en particulier la température. On ne peut donc, comme on peut le trouver dans la littérature attachée aux phénomènes de réactions chimiques à petite échelle [Avrami, 1939; Gutteridge and Dalziel, 1990; Knudsen, 1984], adopter une loi de cinétique exprimée en fonction du temps. Afin de prendre en compte cette thermoactivation non négligeable des réactions d'hydratation [Arrhenius, 1915], on peut considérer deux approches :

- Une approche dans laquelle la cinétique est exprimée en fonction d'un temps équivalent (caractérisant la maturité du matériau) [Hansen and Pedersen, 1977; Rastrup, 1954];
- Une approche dans laquelle la cinétique est exprimée en fonction d'un degré d'hydratation (ou de réaction) à travers une loi d'affinité chimique thermo-activée [Ulm and Coussy, 1998].

Le travail mené sur ces thématiques d'hydratation des liants cimentaires ces dernières années a toujours été entrepris dans l'objectif de pouvoir prévoir, in fine, le comportement mécanique des structures (soit au jeune âge soit sous l'effet d'une dégradation à plus long terme). Il nous est donc apparu plus intéressant d'adopter dès le début une approche basée sur le degré d'hydratation qui permet de réaliser le couplage avec le comportement thermique, hydrique et mécanique de façon plus aisée (de part la connaissance de la microstructure associée à un état d'hydratation donné). Comme expliqué en introduction générale de ce mémoire, nos choix de modélisation sont volontairement placés à une échelle plus globale permettant de s'affranchir de la gestion des concentrations et équilibres thermodynamiques de chaque espèce en présence.

Cependant les différents enjeux liés à ces recherches ont tous trait à l'utilisation de nouveaux liants pour lesquels on note une part décroissante de ciment portland laissant place aux additions minérales (dans un objectif de réduction des coûts, des impacts environnementaux mais aussi d'augmentation de la durabilité). Les outils développés dans ce cadre se sont donc attachés à permettre de modéliser de façon fiable et prédictive le comportement de ces nouveaux matériaux cimentaires en prenant donc en compte les intéractions physico-chimiques entre phases. Il nous est apparu important, dans le but d'être le plus pertinent possible pour des calculs sur des liants composés, de pouvoir se détacher de ce qui est fait classiquement à cette échelle là. Il est donc proposé de gérer le développement des réactions de façon couplée, par des variables propres l'hydratation du ciment et celle des additions minérales, et non par une seule variable d'hydratation globale comme on peut le voir dans les applications sur structures massives [Azenha and Faria, 2008; Benboudjema and Torrenti, 2008; Cervera et al., 2002].

Outre le fait de gérer les interactions entre clinker et additions minérales et ainsi pouvoir s'adapter sans recalage à une composition de liant avec des taux de substitutions différents, ce choix d'utiliser des variables séparées a été guidé par le fait que les additions minérales (et en particulier les fumées de silice et les cendres volantes) ont des énergies d'activation (paramètre pilotant l'activation thermique des réactions) très différentes. Ainsi, comme on peut le voir sur la figure 2.2, où sont tracées les évolutions du degré d'hydratation de 3 phases d'un laitier ternaire à 20°C et 40°C, les réactions de la fumées de silice (FS) et du laitier (L) sont plus fortement accélérées par une augmentation de température que celle du ciment (C). On ne peut ainsi appréhender l'impact de la température sur les réactions des liants composés (et les interactions entre phases) qu'en considérant une loi thermoactivée de cinétique propre à chaque anhydre.





On a donc adopté une formulation de la loi de cinétique de réaction de chaque anhydre (C, FS, L ou CV) basée sur une affinité chimique thermo-activée (Eq. 2.1).

$$\dot{\alpha}_{i} = \widetilde{A}_{ref\,i}\left(\alpha, W\right) \cdot \exp\left(-\frac{\mathrm{Ea}_{i}}{\mathrm{R}}\left(\frac{1}{\mathrm{T}} - \frac{1}{\mathrm{T}_{ref}}\right)\right) \tag{2.1}$$

Où:

- *α<sub>i</sub>* est le degré d'hydratation de l'anhydre i;
- T est la température du béton;
- W est la teneur en eau du béton;
- $T_{ref}$  est la température de référence pour la détermination des paramètres cinétiques;
- Ea<sub>i</sub> est l'énergie d'activation associée à la réaction de l'anhydre *i*;

Dans cette équation, qui permet de définir la cinétique de réaction dans un contexte exogène et non isotherme, on voit que l'influence de l'état thermo-hydrique du béton est pris en compte via la température (T) et la teneur en eau du béton (W). Comme nous le verrons plus précisément dans le chapitre 3, ces 2 grandeurs doivent donc être déterminées simultanément à chaque pas de temps à partir de la résolution des équations de conservation 2.2 et 2.3.

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(-D_{W} \overrightarrow{\operatorname{grad}} W\right) + \sum_{i} \dot{\alpha}_{i} \cdot Q^{W}{}_{hyd\,i}$$
(2.2)

$$\rho_b c_b \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(-k \operatorname{grad} \mathbf{T}\right) + \sum_i \dot{\alpha}_i \cdot \mathbf{Q}^{\mathrm{T}}_{hyd\,i}$$
(2.3)

Où :

- D<sub>W</sub> est le coefficient de diffusivité (regroupant les transports par permétaion et diffusion);
- Q<sup>W</sup><sub>hydi</sub> est le puits d'eau associé à la réaction de l'anhydre *i*;
- ρ<sub>b</sub> est la masse volumique du béton;
- *c*<sup>*b*</sup> est la capacité thermique massique du béton;
- $Q^{T}_{hydi}$  est la source de chaleur associée à la réaction de l'anhydre *i*.

### 2.2.1 Loi d'affinité phénoménologique

Dès les premières études que nous avons menées sur ce sujet (lors de ma thèse puis lors de la thèse de Batian Kolani), nous avons fait le choix d'une loi phénoménologique exprimée comme le produit de fonctions traduisant indépendamment les phénomènes mis en jeu lors des réaction du ciment et des additions minérales. La loi mise en œuvre pendant ma thèse [Buffo-Lacarrière, 2007; Buffo-Lacarrière et al., 2007] a été enrichie par la suite lors de la thèse de Batian Kolani afin de s'adapter au cas des ciments aux laitiers [Kolani et al., 2012] et de prendre en compte l'effet d'un superplastifiant. La loi est présentée ci-dessous (2.4) et volon-tairement un peu plus détaillée car représentative du principe de modélisation qui a guidé ensuite l'établissement des autres modèles d'évolutions chimiques à long terme ou sous l'effet d'une dégradation.

$$\widetilde{A}_{refi} = K_i \cdot g_i(\alpha_c, W_P) \cdot \Pi_i(\alpha_i, W_P, \Phi_P) \cdot s_i(CH, CaO)$$
(2.4)

Où:

- K<sub>i</sub> est un paramètre de cinétique global;
- $g_i$ ,  $\Pi_i$  et  $s_i$  sont des fonctions indépendantes présentées dans les paragraphes suivants;
- α<sub>c</sub> est le degré d'hydratation du ciment;
- W<sub>P</sub> est est la concentration volumique en eau (dans la pâte);
- $\Phi_{\rm P}$  est est la porosité de la pâte;
- CH et CaO sont respectivement les concentrations volumiques de portlandite et de la chaux présente dans la pâte.

Lors des réactions d'hydratation des anhydres d'un liant cimentaire, on distingue une phase de dissolution suivie de la précipitation des hydrates. Dans le cas du clinker, ce cycle dissolutionprécipitation est accéléré par la sursaturation de la solution interstitielle en calcium. Notre modélisation considère que l'activation des cinétiques de réaction augmente linéairement avec le degré d'hydratation du clinker (Eq. 2.5). En d'autres termes, on suppose que la compétition entre les vitesses de dissolution des anhydres et de précipitation des hydrates est en faveur de la sursaturation. Comme ces phénomènes se passent au voisinage du grain de clinker anhydre (faible diffusion des ions à ce stade compte tenu de la cinétique rapide de précipitation par rapport à la diffusion), on considère que l'activation de la cinétique va être conditionnée par un volume de solution interstitiel limité au voisinage du grain (traduit par une concentration seuil W<sub>P seuil</sub> dans l'équation).

$$g_i = \frac{\alpha_c \cdot C_{P \ 0c}}{\min(W_P, \ W_P \ seuil)}$$
(2.5)

Où:

- $C_{P \ 0 c}i$  est la concentration volumique initiale (dans la pâte) de clinker;
- W<sub>P *seuil*</sub> est la concentration volumique en eau seuil (dans la pâte) en dessus de laquelle l'eau n'a plus d'effet supplémentaire de dilution et donc de réduction de cinétique.

La fonction  $\Pi_i$  dans l'équation 2.4 modélise le ralentissement des cinétiques de réaction dû à la difficulté de contact entre l'eau et la surface des grains anhydres. Cette notion d'accessibilité de l'eau aux anhydres dépend de nombreux paramètres physiques comme l'épaisseur des couches d'hydrates entourant les grains anhydres, la porosité du matériau, la quantité d'eau à l'intérieur de ce réseau poreux ou encore la taille et le nombre de grains anhydres. Nous avons choisi de proposer une seule loi  $\Pi_i$  fonction d'une variable qui regroupe de façon globale et macroscopique l'influence de tous ces paramètres. Ainsi la variable  $\overline{r}_{mi}$  dans l'équation 2.6 est définie comme la pseudo « distance moyenne » que l'eau doit franchir pour atteindre le grain anhydre réduisant son accessibilité. Elle est fonction de la quantité d'hydrates formés en surface du grain anhydre, de la porosité et de la quantité d'eau. L'accessibilité de l'eau aux anhydres est alors calculée comme une fonction exponentielle de cette pseudo distance (Eq. 2.6).

$$\Pi_{i} = \exp\left(-\frac{1}{n_{i}} \cdot \left(\frac{\overline{r}_{m \, i}}{r_{k \, i}}\right)^{n_{i}}\right) \tag{2.6}$$

Où:

- $\overline{r}_{mi}$  est une fonction de la teneur en eau, de la porosité et des phases solides (Eq.2.7);
- *n<sub>i</sub>* et *r<sub>k i</sub>* sont des paramètres de calage déterminés à partir d'un essai de calorimétrie.

Au fur et à mesure des réactions d'hydratation, les couches d'hydrates formées recouvrent la surface des grains anhydres séparant progressivement ceux-ci de l'eau. En conséquence, la variable augmente au cours de l'hydratation suite au développement des produits d'hydratation. La formation d'hydrates, plus volumineux que les particules anhydres consommées pour leur formation, conduit également à un comblement de la porosité. Les cinétiques de réactions sont donc diminuées, et les réactions peuvent même être stoppées s'il n'y a plus assez d'espace disponible pour le développement d'une nouvelle couche d'hydrates [Hansen, 1986; Powers and Brownyard, 1946]. La pseudo distance moyenne est donc augmentée par le comblement de la porosité. Enfin, celle-ci est réduite par une augmentation de la teneur en eau dans le matériau. Au regard de ces considérations physiques, nous avons choisi de modéliser la variable de distance moyenne normalisée entre l'eau et les anhydres par l'équation 2.7). Cette équation traduit le fait que la cinétique va être ralentie par la diminution d'anhydres, d'eau ou de porosité disponible (au dénominateur) et par une augmentation de la quantité d'hydrates (au numérateur).

$$\overline{r}_{mi} = \frac{C_{P \ hyd_i}}{C_{P \ anh_i} \cdot W_P \cdot \Phi_P}$$
(2.7)

Où:

- C<sub>P anh<sub>i</sub></sub> est la teneur volumique en anhydre i dans la pâte;
- $C_{P hyd_i}$  est la teneur volumique totale en hydrates dans la pâte.

Dans le cas de liants composés, l'avancement des réactions secondaires (réactions pouzzolaniques des cendres volantes et des fumées de silice ou réactions des laitiers par exemple) n'est pas seulement piloté par les phénomènes présentés et modélisés précédemment. En effet, contrairement à la réaction d'hydratation du clinker, les réactions pouzzolaniques consomment non seulement de l'eau mais aussi le calcium provenant de la portlandite produite par la réaction primaire pour les additions purement pouzzolaniques mais aussi de la chaux présente dans l'anhydre pour les laitiers. La quantité de portlandite présente dans la pâte va donc également conditionner l'avancement de ces réactions (Eq. 2.8) ( $s_i$  dans l'équation 2.4)

$$s_{i} = \begin{cases} 1 & \text{pour le clinker} \\ \frac{C_{P CH}}{V_{m CH}} & \text{pour les additions purement pouzzolaniques} \\ \frac{C_{P CH}}{V_{m CH}} + \frac{C_{P CaO}}{V_{m CaO}} & \text{pour les laitiers} \end{cases}$$
(2.8)

Où:

- C<sub>P CH</sub> est la teneur volumique en portlandite dans la pâte;
- C<sub>P CaO</sub> est la teneur volumique totale en chaux (issue du laitier) dans la pâte.

### 2.2.2 Variables internes du modèle d'hydratation et stoechiométrie des hydrates formés

Comme on peut le voir dans les équations 2.1 et 2.4, la cinétique d'hydratation dépend des variables d'état de notre problème  $\alpha_i$ ,  $W_p$  et T dont les deux dernières sont gérées par des équations de conservation résolues de façon couplées au problème d'hydratation (voir chapitre 3). En effet la teneur en eau, par exemple, est une donnée commune à tous les anhydres et est déterminée de façon globale à partir de l'équation de conservation de la masse d'eau de façon à prendre en compte l'interaction « hydrique » entre les phases anhydres. Cette équation de conservation (voir chapitre 3) fait intervenir la consommation d'eau par chaque anhydre  $Q^W_{thi}$ . Celle-ci est obtenue à partir de la demande en eau molaire de chaque réaction (Eq.2.9) :

$$Q^{W}_{hyd\,i} = V_{mH_2O} \left( \sum_{j} H_{Hyd_j} \cdot \frac{\partial Hyd_j}{\partial \alpha_i} \right)$$
(2.9)

Où:

- $V_{mH_2O}$  est le volume molaire de l'eau;
- $H_{H\gamma d_i}$  est le nombre de moles d'eau dans l'hydrate j;
- $\frac{\partial H_y d_j}{\partial \alpha}$  est la quantité molaire de l'hydrate j produit par masse d'anhydre i (calculé à partir de considérations stoechiométriques).

L'équation de conservation en eau (par l'intermédiaire de son coefficient de diffusivité hydrique et de son terme source) dépend aussi de variables internes au problème à savoir la porosité de la pâte  $\Phi_p$  et la teneur en portlandite C<sub>P CH</sub>. En effet ces grandeurs sont affectées par toutes les réactions (comme cela était le cas pour la teneur en eau). La porosité de la pâte en cours d'hydratation peut être évaluée à chaque instant à partir de la formule suivante :

$$\Phi_{\rm P} = 1 - \sum_{i} \left( C_{\rm P \ anh_i} + C_{\rm P \ hyd_i} \right) \tag{2.10}$$

La teneur en anhydre à un instant donné peut être évaluée en fonction du degré d'hydratation de l'anhydre considéré :

$$C_{P anh_i} = (1 - \alpha_i) \cdot \alpha_i \cdot C_{P 0 anh_i}$$
(2.11)

Où:

•  $C_{P \ 0 \ anh_i}$  est la teneur volumique initiale en anhydre i dans la pâte.

La teneur totale en hydrates est déterminée à partir des quantités molaires des j hydrates produits par l'hydratation de l'anhydre i issues de considérations stœchiométriques à partir de l'équation 2.12).

$$C_{P hyd_{i}} = \left(\sum_{j} V_{m hyd_{j}} \cdot \frac{\partial Hyd_{j}}{\partial \alpha_{i}}\right) \cdot \alpha_{i} \cdot C_{P 0 anh_{i}} \cdot \rho_{anh_{i}}$$
(2.12)

Où:

- *j* varie de 1 au nombre d'hydrates produits par l'anhydre (4 pour C, 1 pour FS, 5 pour L);
- V<sub>*m hyd*<sub>*i*</sub> est le volume molaire de l'hydrate j;</sub>
- $\rho_{anh_i}$  est la masse volumique de l'anhydre i.

La portlandite est obtenue à partir de la consommation ou production de CH de chaque réaction (Eq. 2.13) :

$$C_{P CH} = V_{m CH} \sum_{i} \left( \frac{\partial CH}{\partial \alpha_{i}} \cdot \alpha_{i} \cdot C_{P 0 anh_{i}} \cdot \rho_{anh_{i}} \right)$$
(2.13)

Où:

- $V_{m CH}$  est le volume molaire de la portlandite;
- $\frac{\partial CH}{\partial \alpha_i}$  est le nombre de moles de CH produites ou consommées par la réaction de l'anhydre i (voir considérations stoechiométriques).

On constate que dans l'approche utilisée (permettant de gérer les intéractions entre les phases, la consommation d'eau par l'hydratation et le comblement de la porosite) on a besoin de connaître la stoechiométrie des hydrates formés lors de la réaction d'hydratation du clinker et lors des réactions des additions minérales. Comme nous souhaitons pouvoir accéder à l'énergie libérée par les réactions pour une application sur le comportement jeune âge des structures, le choix est fait de considérer une stoechiométrie de chaque hydrate non évolutive et basée sur la composition finale de la pâte. On considère ensuite que la quantité de chaque hydrate considéré évolue proportionnellement au degré d'hydratation du ciment  $(\frac{\partial Hyd_j}{\partial \alpha_i} = cste)$ .

Pour le ciment portland et les additions pouzolaniques (FS et CV), la stoechiométrie des hydrates est donc calculée à hydratation stabilisée [Buffo-Lacarrière et al., 2007; Kolani et al., 2012] à partir d'hypothèses simplificatrices sur la formation des aluminates[Adenot, 1992]. Cette hypothèse reste cohérente pour nos applications (puisqu'elle ne nécessite pas de gérer les concentrations des ions en solution et permet donc une convergence très rapide des calculs d'hydratation) bien qu'elle ne permette pas de considérer la précipitation et la dissolution de phases temporaires (comme par exemple le gyspe en début d'hydratation) [Taylor, 1990].

Pour le laitier par contre, il a été montré [Chen, 2007; Richardson and Groves, 1992] que son comportement est différent des additions pouzzolaniques du fait qu'il contient déjà une part de calcium. Le calcium qu'il utilise pour ses réactions proviendra donc de deux sources : la portlandite produite par le clinker (part pouzzolanique) et le calcium anhydre apporté par le laitier lui-même (part hydraulique). La stœchiométrie des hydrates formés lors de ces réactions nous conduit aux quantités d'hydrates produits par l'hydratation du laitier données ci-dessous.

C(A)SH	$\frac{\partial C(A)SH_{L}}{\partial \alpha_{L}} = S$		
Ettringite	$\frac{\partial C_{6}(A,F)\bar{S}_{3}H_{32}}{\partial \alpha_{L}} = \frac{\bar{S}}{3}$		
Hydrotalcite	$\frac{\partial M_5 A H_{13}}{\partial \alpha_L} = \frac{M}{5}$		
Aluminate tétracalcique	$\frac{\partial C_4 A H_{13}}{\partial \alpha_L} = A - \frac{A}{S_L} \cdot S - \frac{M}{5} - \frac{\bar{S}}{3}$		
Calcium consommé	$\frac{\partial_{(C_{L}+CH)}}{\partial_{\alpha_{L}}} = -\left[\left(\frac{C}{S_{L}}(t) - 4 \cdot \frac{A}{S_{L}}\right)S + \frac{2\bar{S}}{3} - \frac{4M}{5} + 4A\right]$		

TABLEAU 2.1 – Quantités d'hydrates formés et calcium consommé lors de la réaction du laitier en présence de clinker

Où :

- $\frac{C}{S_L}(t)$  est le rapport C/S des C-S-H produits par le laitiers (qui évolue comme nous le verrons en fonction de la quantité de calcium disponible à l'instant t);
- $\frac{A}{S_L}$  est le rapport A/S correspondant à la quantité d'aluminium fixé dans les C-S-H produits par le laitier.

On retrouve dans ces calculs stoechiométriques que le calcium nécessaire à la formation des hydrates du laitier en présence de clinker provient bien du calcium présent dans le laitier ( $C_L$ ) et de la portlandite présente dans la pâte (CH). Il apparaît donc nécessaire, pour cette phase, de gérer une stoechiométrie des C-S-H variable dans le temps en fonction de la disponibilité du calcium dans les 2 sources. Afin de conserver une facilité d'implantation numérique, la gestion de cette stoechiométrie variable a été proposée en considérant une consommation du calcium nécessaire proportionnellement aux quantités disponibles dans chaque source. Pour ce faire, on introduit deux coefficients de distribution représentant la proportion de portlandite disponible ( $k_c$ ) et la proportion de calcium disponible dans le laitier anhydre lui-même ( $k_L$ ) [Kolani et al., 2012].

$$\frac{\partial(\mathrm{CH})}{\alpha_{\mathrm{L}}} = -k_{\mathrm{C}}(t) \left[ \left( \frac{\mathrm{C}}{\mathrm{S}_{\mathrm{L}}}(t) - 4 \cdot \frac{\mathrm{A}}{\mathrm{S}_{\mathrm{L}}} \right) \mathrm{S} + \frac{2\bar{\mathrm{S}}}{3} - \frac{4\mathrm{M}}{5} + 4\mathrm{A} \right]$$
(2.14)

$$\frac{\partial(C_{\rm L})}{\alpha_{\rm L}} = -k_{\rm L}(t) \left[ \left( \frac{C}{S_{\rm L}}(t) - 4 \cdot \frac{A}{S_{\rm L}} \right) S + \frac{2\bar{S}}{3} - \frac{4M}{5} + 4A \right]$$
(2.15)

Statistiquement, ces coefficients de distribution représentent la probabilité que le calcium ayant servi à la fabrication des hydrates du laitier provienne d'une source ou de l'autre. Ces coefficients de distribution sont définis à chaque instant par les équations suivantes :

$$k_{\rm C}(t) = \frac{{\rm CH}(t)}{{\rm CH}(t) + {\rm C}_{\rm L}(t)}$$
 et  $k_{\rm L}(t) = \frac{{\rm C}_{\rm L}(t)}{{\rm CH}(t) + {\rm C}_{\rm L}(t)}$  (2.16)

Partant de ces postulats, la stœchiométrie des CSAH produits par le laitier en présence de clinker sera particulière du fait de :

- l'enrichissement des CSAH en calcium par consommation de la portlandite du clinker;
- l'incorporation d'alumine dans un rapport A/S.

En effet les résultats expérimentaux de [Richardson and Groves, 1992] indiquent que le rapport molaire C/S des C-(A)S-H formés par le laitier en présence du clinker est supérieur à celui des C-(A)S-H formés par le laitier pur. Cela s'explique par une consommation supplémentaire de calcium provenant de la portlandite disponible dans la solution interstitielle. La quantité de Portlandite disponible étant variable au cours de l'hydratation, de même que la concentration en calcium de la solution interstitielle, il paraît évident que la stœchiométrie des C-(A)S-H formés est tributaire de la quantité totale de calcium présente dans la solution poreuse à chaque cycle de formation des hydrates.Par conséquent, durant le processus d'hydratation du laitier en présence du clinker, la stœchiométrie des C-(A)S-H précipités à chaque instant dépendra de la quantité de calcium présent dans la solution interstitielle à chaque instant. Afin d'être compatible avec l'hypothèse faite précédemment sur la consommation respective du calcium du laitier et de la portlandite, on propose que le rapport C/S des C-(A)S-H formés par le laitier en présence de clinker soit calculé par interpolation linéaire entre le rapport molaire des C-(A)S-H formés par le laitier pur (indicé Lp) et celui des C-S-H formés par le clinker pur et cela proportionnellement aux coefficients de distribution comme suit (le rapport A/S est quant à lui considéré constant et égal à celui du laitier pur [Richardson and Groves, 1992]) :

$$\frac{C}{S_{L}}(t) = k_{L}(t)\frac{C}{S_{Lp}} + k_{C}(t)\frac{C}{S_{C}}$$
(2.17)

Le rapport C/S des C-(A)S-H qui seraient formés par un laitier pur activé par des alcalins (et non par la présence de clinker et de portlandite) est déterminé à partir de considérations stœchiométriques en fonction des oxydes du laitier anhydre.

# 2.2.3 Exemples d'application et validation pour les ciments portland et les liants binaires à teneur en silice modérée

Dans cette partie nous proposons d'étudier quelques comparaisons du modèle avec des tests réalisés en laboratoire afin de valider certains aspects originaux du modèle d'hydratation proposé. Les trois principales originalités du modèle sont ici étudiées : le couplage entre la teneur en eau et l'hydratation (effet de l'hydratation sur la teneur en eau et vice et versa), le choix d'une stœchiométrie évolutive des C-S-A-H du laitier (en présence de clinker) et la gestion de la portlandite en tant que variable interne (qui pilote une part important des interactions entre les anhydres).

### Effet de l'eau sur l'hydratation

L'effet de l'eau sur les cinétiques d'hydratation du ciment prédit par le modèle d'hydratation multiphasique proposé est illustré à la figure 2.3.



FIGURE 2.3 - Effet du rapport E/C initial sur les cinétiques et amplitudes d'hydratation d'un CEMI

On peut voir un effet d'accélération de cinétique initiale avec la diminution du rapport E/C (comme montré expérimentalement par [Mounanga, 2003]) ainsi qu'une baisse du degré d'hydratation "maximal" pouvant être atteint à long terme.

La validité de cette prédiction du degré d'hydratation maximal pouvant être atteint par un ciment de type CEM I est testée sur des résultats d'hydratation de pâtes de différents rapports E/C. Cette étude nous permettra de valider en partie la bonne prise en compte de l'effet de l'eau sur l'hydratation du clinker. Les résultats obtenus par notre modèle (à très long terme) pour 13 rapports E/C variant entre 0,25 et 0,85 sont comparés avec les nombreuses valeurs expérimentales données par [Waller, 1999] (tirées de la littérature ou issues de ses propres essais pour des CEM I en conservation endogène et adiabatique). Cette comparaison est reportée sur la figure 2.4.



FIGURE 2.4 – Effet du rapport E/C initial sur la valeur du degré d'hydratation d'un CEMI à 2 ans, résultats du modèle en noir et points expérimentaux en bleu recueillis par [Waller, 1999]

La figure montre que, bien que calé sur un essai quasi adiabatique durant seulement 3 jours et réalisé avec un E/C de 0,5, le modèle multiphasique permet de reproduire, sans recalage, les valeurs maximales atteintes en conditions endogènes par le degré d'hydratation du CEM I pour d'autres E/C. Ainsi, grâce à la dépendance implicite de la cinétique d'hydratation à la teneur en eau introduite dans la fonction d'accessibilité  $\Pi_i$ , le modèle permet d'adapter de façon correcte le développement de l'hydratation à la quantité d'eau initialement introduite. De plus, bien que n'étant pas mise en évidence ici, on rappelle que cette prise en compte implicite permet également de gérer l'influence de variations de teneur en eau, telles que rencontrées au cours d'un séchage par exemple, sur les cinétiques de réactions.

# CHAPITRE 2. MODÉLISATION NUMÉRIQUE DE L'ÉVOLUTION CHIMIQUE DES MATÉRIAUX CIMENTAIRES

Enfin la pertinence de l'effet de l'hydratation sur la teneur résiduelle en eau libre (pouvant être calculée à partir de la loi de conservation de la masse d'eau en utilisant les consommations d'eau issues des calculs stoechiométriques présentés précédemment 2.9) a été évaluée à travers l'étude menée par [Kolani, 2012]. Des mesures de teneur en eau liée ont été menées sur des pâtes contenant différents taux de substitution de laitiers (0, 30, 50 et 70). Les paramètres de clinker et du laitier ont été déterminés comme montré au paragraphe 7.1 sur un essai Langavant sur CEM I seul et sur un essai avec 30% de CEM I et 70% de laitiers (voir détails dans [Kolani, 2012]). Les résultats sont présentés sur la figure 2.5 (pour des échantillons conservés à 40°C).



FIGURE 2.5 – Evolution de la teneur en eau pour plusieurs compositions de pâte [Kolani et al., 2012]

On voit que la modélisation permet de bien reproduire la consommation d'eau par l'hydratation (figure 2.5a) et donc la quantité d'eau libre restante (figure 2.5b) et ce, quel que soit le taux de substitution. Les derniers points de mesures s'écartent de la modélisation pour la teneur en eau libre mais [Kolani, 2012] a montré que cela provenait d'une légère perte d'eau par condensation capillaire sur les tubes dans lesquels les échantillons ont été conservés.

### Validation du modèle stoechiométrique pour les réactions du laitier et la gestion de la portlandite

L'hydratation du laitier en présence du clinker se traduit par la formation de C-S-H dont le rapport molaire C/S est plus élevé que celui des C-S-H obtenus lors de l'hydratation du laitier pur activé par des alcalins. Afin de tester la validité de notre gestion de la stœchiométrie des C-(A)S-H produits par le laitier en présence de portlandite, nous utilisons les résultats des investigations expérimentales de [Richardson and Groves, 1992] qui ont analysé la microstructure des C-S-H formés par l'hydratation des liants à base de laitier. Les essais ont été réalisés sur des échantillons âgés de 14 mois en utilisant la microscopie électronique à transmission (MET) avec une microanalyse combinée par microsonde électronique. Les échantillons étudiés contenaient différents taux de substitution de laitier variant de 0 à 100% avec un rapport eau/liant de 0.4. Les échantillons ont été scellés dans des tubes en plastique et conservés à 20°C. Les rapports C/S mesurés sont des rapports moyens de tous les C-S-H présents dans la pâte (C-(A)S-H issus du laitier et C-S-H issus du clinker). Dans les résultats obtenus par le modèle ce rapport C/S moyen est obtenu en fonction des proportions molaires de chaque type de C-S-H dans la pâte :

$$\frac{\bar{C}}{S}(t) = \frac{C}{S_{L}} \cdot C(A)SH_{L}(t) + \frac{C}{S_{C}} \cdot CSH_{C}(t)$$
(2.18)

Les valeurs du rapport molaire moyen obtenues à l'échéance de 14 mois sont comparées aux mesures expérimentales de[Richardson and Groves, 1992] sur la figure 2.6. Les résultats obtenus montrent une très bonne adéquation entre les prédictions du modèle et l'expérimentation ce qui valide de manière implicite les coefficients de distribution et le calcul stœchiométrique proposé pour décrire la chimie des liants à base de laitier.



FIGURE 2.6 – Prédiction du rapport molaire C/S des C-S-H formés par l'hydratation des ciments au laitier, valeurs expérimentales issues de [Richardson and Groves, 1992]

La Portlandite produite par l'hydratation du clinker étant consommée par les réactions d'hydratation du laitier, sa prédiction achèvera la validation du calcul stœchiométrique proposé pour la gestion des interactions entre les anhydres. La comparaison est faite avec les résultats obtenus par ATG-ATD [Kolani, 2012] sur des pâtes avec différents taux de substitution du clinker par le laitier (figure 2.7). Compte tenu de la dispersion expérimentale pouvant être induite par la méthode de mesure, les résultats obtenus par le biais de l'approche de modélisation proposée peuvent être considérés en accord avec les expérimentations et ceci quel que soit le taux de substitution de laitier dans le liant (figure 2.7).



FIGURE 2.7 – Evolution de la teneur en portlandite pour plusieurs compositions de pâte

# 2.3 Evolution à long terme des liants fortement substitués en conditions endogènes

### 2.3.1 Limites du modèle d'hydratation court-terme

Lorsque l'on souhaite prédire l'hydratation de liants à très fort taux en silice (liants bas pH par exemple pour lesquels le pH bas est obtenu en substituant le ciment par une forte proportion de fumée de silice), on s'aperçoit que même après plusieurs mois le modèle prévoit une très forte quantité de silice anhydre résiduelle (qui ne peut réagir car toute la portlandite créée par la faible quantité de ciment présente a été consommée). Ceci est mis en évidence sur la figure 2.8 qui prévoit l'hydratation d'un liant formulé pour des applications de stockages souterrain de déchets radioactifs (ANDRA) et contenant 20% de ciment, 33% de fumée de silice et 47% de laitier.



FIGURE 2.8 – Evolution des degrés d'hydratation dans un liant ternaire bas pH prédit par le modèle d'hydratation court-terme

On constate bien qu'il reste au delà de 2 mois environ 85% de la silice qui n'a pas réagi. Cependant les résultats expérimentaux montrent qu'à plus long terme, et avec une cinétique très lente, cette silice anhydre est capable de réagir en attirant le calcium présent dans les phases plus riches (tels que les C-S-H produits par l'hydratation du ciment ou du laitiers) [Bach, 2010; García Calvo et al., 2010]. Ceci est en effet confirmé d'un point de vue mécanique puisque, comme nous l'avons vu en introduction à travers la figure 1.3, les résistances mécaniques continuent à augmenter à long terme, sans dégagement de chaleur noté ce qui traduit un phénomène réactionnel de cinétique tout à fait différent de ceux pris en compte dans le modèle à court-terme.

Ceci nous a conduit à proposer, au delà de 28 jours (âge auquel au considère que les phénomènes exothermiques deviennent négligeables 1.3), un nouveau modèle d'évolution chimique qui permet de prendre en compte ces évolutions de stœchiométrie interne qui induisent une hydratation progressive de la silice anhydre restant à 28 jours. Le modèle d'hydratation court-terme est dès lors, comme dans le cas de prise en compte de dégradation, utilisé pour déterminer la composition de la pâte à 28 jours (point de départ choisi pour le modèle long-terme).

### 2.3.2 Observations expérimentales

Afin de caractériser cette capacité de réaction à long terme de la silice anhydre résiduelle, une campagne expérimentale a été menée dans le cadre de la thèse de Y. El Bitouri et a permis de confirmer les hypothèse de rééquilibrage interne du calcium. Les essais ont été réalisés sur un liant ternaire composé de 20% de ciment, 33% de fumée de silice et 47% de laitier (formulé par l'ANDRA afin de limiter le pH de sa solution interstitielle pour ne pas risquer d'interaction néfaste avec l'argile gonflante assurant l'étanchéité des systèmes de scellement des galeries de stockage des déchets radioactifs Moyenne Activité Vie Longue).

L'objectif a été de déterminer les rapports C/S des différentes phases solides de la pâte hydratée à plusieurs âges (C/S des anhydres et des hydrates) pour mettre en évidence une éventuelle évolution des stœchiométries des solides au cours du temps. Nous nous sommes plus particulièrement intéressés au tracé d'histogrammes de répartition des rapports C/S de C-S-H (comme cela avait été fait dans de précédentes études [Bach, 2010]) mais aussi à celui des phases anhydres et, dans la mesure du possible à celui de la silice anhydre résiduelle (ces anhydres étant habituellement non considérés dans ce genre d'analyse). Les essais ont été réalisés sur des sections polies par des analyses EDS (spectroscopie à rayons X à dispersion d'énergie) sous MEB (Philips XL PW6631/01 LaB6, tension d'accélération 15 kV, volume d'interaction EDS env. 1  $\mu m^3$ ). 5 zones de 450 $\mu m$  x 600 $\mu m$  ont été étudiées avec un grossissement de 300. Sur chaque zone 5000 points ont été analysés de façon à être statistiquement représentatif. Les histogrammes obtenus à 3 mois et 9 mois sont présentés sur la figure 2.9.



FIGURE 2.9 – Histogramme des rapports C/S pour une pâte de liant ternaire bas pH et lois de distributions associées

Sur la figure 2.9 les courbes de distributions ont été obtenues par déconvolution. Pour les résultats à 3 mois la première loi de distribution (pour les faibles C/S) est une loi log-normale alors que la loi de distribution du deuxième pic ainsi que celles à 9 mois sont des lois normales.

A 3 mois le premier groupe (courbe rouge - loi de distribution de moyenne C/S=0.44, poids 66%) peut être associé à un mélange de silice anhydre résiduelle et à des C-S-H issus de la réaction de la fumée de silice avant 3 mois avec la portlandite du ciment (C-S-H à C/S modéré de l'ordre de 1,1). En effet la finesse des particules de fumée de silice résiduelle en comparaison du volume d'interaction de l'EDS n'autorise pas une observation distincte d'un pic à C/S nul qui correspondrait à cette fumée de silice. Ceci explique aussi pourquoi une loi gaussienne ne permet pas de reproduire la distribution de ce premier groupe, une loi log-normale et donc asymétrique permettant de mieux reproduire cette distribution "englobant" une part de solide de rapport C/S nul. Ce premier pic de haute intensité (par rapport à la quantité de C-S-H issus à 28 jours de la réaction de la fumée de silice) est donc un indicateur d'une quantité importante de fumée de silice n'ayant pas réagi à 3 mois.

A 3 mois le deuxième groupe (courbe verte associée à la loi de distribution de moyenne C/S=1.1, poids 34%) peut être associé à un mélange des C-S-H issus de l'hydratation courtterme de la fumée de silice, du laitier (rapport C/S de l'ordre de 1.2 dans la cas de ce liant ternaire) et du ciment (C/S=1.65 mais en faible proportion donc peu d'influence sur la valeur moyenne du pic) ainsi qu'au laitier anhydre résiduel. En observant l'évolution de ces deux pics à 9 mois on constate que le premier pic (courbe rouge) a augmenté en intensité (poids du mode 1 87%) et voit sa moyenne décalée vers des C/S plus forts (moyenne à 0.6). Au contraire le deuxième pic (courbe verte) ne bouge pas en moyenne (C/S moyen 1.1) mais baisse assez fortement en intensité (poids du mode 2 13%). Ceci traduit une progressive calcification de la fumée de silice non hydratée à 28 jours (loi normale permet de reproduire la distribution donc traduit bien l'absence de solides de C/S nul) et par phénomène inverse un appauvrissement en calcium des phases initialement les plus riches en calcium.

# 2.3.3 Modélisation de l'hydratation long terme des liants à forte teneur en silice (type low-pH ou low-heat)

Pour développer le modèle de rééquilibrage du calcium à long terme, nous sommes partis de l'expertise acquise sur une précédente étude avec l'ANDRA concernant la décalcification des ciments. Un modèle de lixiviation du calcium pour ciments portland avait en effet été développé en 2004 pour l'ANDRA et mis en application sur structures lors du co-encadrement de Mohamed El Gonouni en 2008 [Sellier et al., 2011]. Je ne présenterai pas ce modèle de façon détaillée ici puisque je n'ai participé à son développement qu'en tant qu'étudiante (stage de DEA sous la direction d'Alain Sellier), et que j'ai choisi de concentrer ce mémoire seulement sur les développements menés ensuite pour les échanges de calcium internes.

Comme dans cette approche de décalcification externe, le modèle de rééquilibrage du calcium se base sur l'hypothèse que la seule évolution de la concentration en calcium dans la solution permet de décrire l'évolution chimique des matériaux cimentaires dans un contexte d'échange externe (décalcification) ou interne (rééquilibrage) de calcium entre les phases solides [Gawin et al., 2009; Mainguy et al., 2000].

Lors d'un échange interne, le moteur du rééquilibrage est en effet également un gradient de concentration en calcium entre la solution interstitielle ( $\overline{Ca}$ ) et les zones au voisinage des solides pour lesquelles la concentration ( $\overline{Ca}^{eq}_{i}$ ) tend à s'équilibrer avec la teneur en calcium dans le solide selon la courbe d'équilibre C/S=f(Ca) représentée sur la figure 2.10.



FIGURE 2.10 – Principe du modèle de rééquilibrage chimique [El Bitouri et al., 2016]

Ainsi il est observé une progressive décalcification des hydrates à fort rapport C/S comme les C-S-H issus de l'hydratation du ciment ou des laitiers (pour lesquels  $\overline{Ca}^{eq}_i > \overline{Ca}$  et à l'inverse une progressive réaction des silices anhydres par calcification (pour la silice anhydre  $\overline{Ca}^{eq}_i = 0 < \overline{Ca}$ ). Ceci se traduit mathématiquement par une source/puits de calcium S $_{\overline{Ca}_i}$  pour chaque phase solide i (définie à l'équation 2.19 qui va influencer la conservation globale du calcium en solution (équation 2.20).

$$S_{\overline{Ca_i}} = \frac{1}{\tau_i} \left( \overline{Ca}^{eq}_{i} - \overline{Ca} \right)$$
(2.19)

$$\frac{\partial (\mathbf{W} \cdot \overline{Ca})}{\partial t} = -\operatorname{div} \overline{\varPhi}_{\overline{Ca}} + \sum_{i} S_{\overline{Ca}_{i}}$$
(2.20)

Où:

- t est le temps;
- W est la teneur en eau;
- $\overline{Ca}$  est la concentration en calcium dans la solution;
- $\Phi_{\overline{Ca}}$  est le flux de calcium dans le cas d'un gradient macroscopique de concentration en calcium (milieu ouvert);
- $\overline{Ca}^{eq}_{i}$  est la concentration en calcium liquide en équilibre avec le solide i;
- $\tau_i$  est le temps caractéristique décrivant le retard de dissolution-précipitation induit par la micro-diffusion du calcium qui dépend de la température, de la teneur en eau dans la pâte et de l'éventuelle couche d'hydrates bloquant l'accessibilité à la phase solide i [El Bitouri et al., 2016].

A titre d'illustration, lorsque l'on applique le modèle au liant ternaire testé par EDS, on obtient l'évolution des rapports C/S présentée sur la figure 2.11. On constate bien une décalcification progressive des C-S-H formés à fort rapport C/S pendant l'hydratation court-terme au profit de la formation de nouveaux hydrates à partir de la silice anhydre résiduelle à 28 jours (new C-S-H sur la figure).



FIGURE 2.11 – Evolution des rapports C/S prédite pour le liant TL [El Bitouri et al., 2016]

Comme pour le modèle d'hydratation court-terme l'objectif de nos démarches de modélisation des évolutions chimiques des matériaux cimentaires est de pouvoir prévoir le comportement mécanique induit dans les structures. Il faut donc pour cela calculer à partir de ces variations de teneur en calcium une variable globale permettant de traduire le taux d'hydratation de la pâte afin d'en déduire l'évolution des propriétés mécaniques (qui sont exprimées dans notre approche en fonction du degré d'hydratation comme nous le verrons au chapitre 3). Partant du principe que dans notre approche de réactions à long terme par rééquilibrage du calcium on peut utiliser la teneur en calcium des phases solides comme indicateur de l'état moyen d'hydratation de la pâte, on propose donc de définir ce degré d'hydratation moyen comme indiqué à l'équation 2.21 :

$$\frac{\partial \bar{\alpha}}{\partial t} = \frac{1}{Ca^{total}} \cdot \sum_{j} \frac{\partial Ca_{Sj}}{\partial t}$$
(2.21)

$$\frac{\partial Ca_{Sj}}{\partial t} = \frac{C}{S_j} \cdot \frac{\partial S_j}{\partial t} + S_j \cdot \left(\frac{C}{S_j}\right)^+$$
(2.22)

Où:

- t est le temps;
- α
   est le degré d'hydratation moyen de la pâte;
- Ca<sub>S j</sub> est la concentration en calcium solide dans l'hydrate j (C-S-H);
- *Ca<sup>total</sup>* est la concentration en calcium solide total du liant;
- S  $_i$  est la concentration molaire des phases siliceuses hydratées (C-S-H) ou anhydres (FS);
- $\frac{C}{S_j}$  est le rapport C/S de la phase siliceuse j (C/S démarre à une valeur non nulle pour les phases hydratées présentes initialement à 28 jours comme les C-S-H du clinker et à une valeur nulle pour la silice anhydre restant à 28 jours et qui va se calcifier par la suite).

Cette formulation permet d'avoir un degré d'hydratation moyen continu entre le modèle d'hydratation court-terme présenté au paragraphe 2.2 (utilisé de 0 à 28j) et le modèle de rééquilibrage chimique long-terme présenté ici. En effet lors de l'hydratation court-terme (rapide et exothermique à stoechiométrie fixe) les rapports C/S des phases formées sont fixes et ce sont les quantités d'hydrates qui augmentent (1er terme non nul dans l'équation 2.22 et 2nd terme nul) alors qu'après 28j, les quantités d'hydrates sont fixes (S<sub>j</sub> = cste) mais leur stoechiométrie varie (augmentation du rapport C/S de la silice anhydre présente à 28 jours) (1<sup>er</sup> terme nul dans l'équation 2.22 et 2<sup>d</sup> terme non nul).

Cette continuité est illustrée sur la figure 2.12. La continuité en terme de pente sert quant à elle à l'identification du paramètre cinétique  $\tau_i$  de l'équation 2.19.



FIGURE 2.12 - Continuité du degré d'hydratation calculé à partir des 2 modèles CT et LT

Au final, lorsqu'on applique le modèle de rééquilibrage chimique long terme à partir de 28 jours à la suite du modèle d'hydratation exothermique court-terme il est possible de reproduire à la fois l'évolution rapide des résistances de liant bas pH dans le premier mois mais également l'évolution plus modérée observée par [Leung Pah Hang, 2015] au delà de 28 jours (figure 2.13).



FIGURE 2.13 – Evolution des propriétés mécaniques prédites avec le modèle court-terme seul (pointillé) ou avec le modèle de rééquilibrage du calcium (trait plein), données expérimentales issues de [Leung Pah Hang, 2015]

### 2.4 Déshydratation des matériaux cimentaires

Partant de l'expérience acquise à travers l'étude et la modélisation des phénomènes d'hydratation court et long terme, il est apparu intéressant d'étendre nos approches de modélisation au cas de sollicitations extrêmes comme l'exposition à de hautes températures. Dans ce cas le béton subit en effet une déshydratation qui conduit, à l'inverse de l'hydratation, à une modification de la microstructure induisant des pertes de propriétés mécaniques.

Dans la plupart des cas de modélisation en vue d'applications sur structures (comme celles que nous visons), la déshydratation (à température modérée) est approchée par une droite fonction de la température [Bary et al., 2008; Gawin and Pesavento, 2012; Ranc et al., 2003]. Or on s'aperçoit en observant une courbe d'essai ATG (pâte de ciment soumise à une température croissant de 20°C à 1000°C avec une vitesse de chauffage constante, figure 2.14) que la déshydratation est un phénomène non-linéaire et dépendant du taux de chauffage. Or les lois de déshydratation utilisées par exemple pour reproduire le comportement d'une enceinte de confinement durant un accident grave (température intérieure augmentant en quelques minutes de 200°C) sont identifiées sur des essais de laboratoire ATG la plupart du temps réalisés avec une vitesse de chauffage de 5 K/min. La vitesse de chauffage utilisée lors des essais sevrant à identifier les paramètres de déshydratation et la vitesse réelle que subit la structure (du moins en surface) sont donc très différentes et cela aura un impact sur la cinétique de dégagement de chaleur qu'il faut prendre en compte. Cette prise en compte de la vitesse de chauffage sur la déshydratation peut être appréhendée en introduisant un paramètre cinétique dans la loi de déshydratation, comme le propose par exemple [Zhang and Ye, 2012].

Pour une phase bien cristallisée comme la portlandite, toute l'eau liée est perdue dès que l'on dépasse la température correspondant à l'équilibre de la phase par dissolution de la phase (moyennant une certaine cinétique). On observe donc une déshydratation à l'équilibre complète même si la température est maintenue à la température de déstabilisation de la phase. Dans ce cas une approche en cinétique pure comme proposée par [Zhang and Ye, 2012] peut se justifier.

Cependant, dans le cas de structures amorphes comme les C-S-H (phase majoritaire dans la pâte de ciment), la perte d'eau n'est pas liée à une déstabilisation complète de la phase mais à une libération progressive de l'eau interfeuillet, les couches d'eau les plus accessibles étant libérées pour les plus faibles températures et les couches les plus adsorbées ou intégrées dans les chaînes pour les température plus élevées.



FIGURE 2.14 – Résultats d'essai ATG-DSC sur une pâte de ciment portland à 2 vitesses de chauffages différentes [Wang, 2016]

Dans notre cas la déshydratation s'initie pour des températures modérées, mais si on maintient la température (par exemple à 100°C) seules les couches d'eau "accessibles" avec cette énergie (donc à cette température) vont être libérées. La déshydratation finit donc par s'équilibrer autour d'une quantité d'eau perdue correspondant à ces couches. Or si l'on applique une approche purement cinétique (comme on peut le voir illustré sur la figure 2.15), la déshydratation va se poursuivre même si la température reste constante car la notion de degré de déshydratation à l'équilibre (pour une température donnée) n'est pas intégrée.



FIGURE 2.15 – Perte de masse théorique calculé avec une approche cinétique pure pour un C-S-H conservé à une température de 100°C maintenue constante

### 2.4.1 Modèle de cinétique de déshydratation

Nous avons donc choisi de baser notre modélisation (dans le cadre de la thèse de J. Wang) sur l'approche proposée par Feraille [Feraille Fresnet, 2000] qui allie cinétique et équilibre. Cependant, afin de pouvoir disposer d'un modèle facilement applicable à différents ciments sans recalage, nous proposons de définir la cinétique de perte d'eau par déshydratation à partir des cinétiques de déshydratation de chaque hydrate *j* de la pâte de ciment hydratée selon l'équation 2.23.

$$\dot{w}_{des} = -\sum_{j} Q^{W}_{desj} \cdot \dot{\xi}^{j} \cdot H(T - T^{j}_{onset})$$
(2.23)

Où:

- $\xi^j$  est le degré de déshydratation de l'hydrate j;
- T<sup>*j*</sup> onset est la température à partir de laquelle l'hydrate *j* commence à se déshydrater;
- $Q^{W}_{des j}$  est la quantité d'eau liée chimiquement à l'hydrate j au début de la déshydratation.

Cette quantité d'eau maximale pouvant être libérée par la déshydratation de l'hydrate j est extraite des résultats du modèle d'hydratation présenté au paragraphe 2.2. Cette quantité d'eau contenue dans l'hydrate j au début de la déshydratation ( $t_{0\,des}$ ) est calculée à partir des degrés d'hydratation des anhydres ayant consommé ou produit de l'hydrate j et de considérations stœchiométriques :

$$Q^{W}_{des\,j} = \int_{0}^{t_{0des}} M_{H_{2}O} \sum_{i} \left( H_{Hyd_{j}} \cdot \frac{\partial Hyd_{j}}{\partial \alpha_{i}} \cdot \frac{\partial \alpha_{i}}{\partial t} \right) \cdot dt$$
(2.24)

Où:

- $M_{H_2O}$  est la masse molaire de l'eau;
- $\alpha_i$  est le degré d'hydratation de l'anhydre i ayant produit ou consommé de l'hydrate j;
- $H_{Hyd_i}$  est le nombre de moles d'eau dans l'hydrate j;
- $\frac{\partial Hyd_j}{\partial \alpha}$  est la quantité molaire de l'hydrate j produit (>0) ou consommé (<0) par masse d'anhydre i (calculé à partir de considérations stœchiométriques).

La cinétique de déshydratation de chaque hydrate est déterminée de façon similaire à la cinétique de dissolution-précipitation du calcium proposé à l'équation 2.19 comme dépendant de l'écart à l'équilibre et d'un temps caractéristique thermo-activé (equation 2.25) :

$$\dot{\xi^{j}} = \frac{1}{\tau^{j}} \exp\left(-\frac{E_{a}^{j}}{R} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T^{j}_{onset}}\right]^{-}\right) \left(\xi_{eq}^{j}(T) - \xi^{j}\right)$$
(2.25)

Où:

- $\tau^{j}$  est le temps caractéristique associé à l'hydrate *j*;
- $E_a^j$  est l'énergie d'activation associée à l'hydrate j;
- $\xi_{ea}^{j}(T)$  le degré de déshydratation obtenu à l'équilibre pour une température donnée.

Ce degré de déshydratation à l'équilibre va dépendre de la structure cristalline de l'hydrate concerné. Pour un hydrate bien cristallisé comme la portlandite il vaudra 1 dès que la température dépassera  $T_{onset}$ , traduisant une déstructuration complète de l'hydrate. Au contraire, pour un hydrate amorphe comme les C-S-H, le degré de déshydratation à l'équilibre dépendra de la température, traduisant une perte progressive de l'eau interfeuillets.

Le degré à l'équilibre  $(\xi_{eq}^{j})$  ainsi que les constantes pilotant la cinétique  $(\tau^{j})$  et sa dépendance à la température  $(E_{a}^{j})$  sont déterminés aux paragraphes suivants à partir de constations expérimentales et considérés comme des paramètres intrinsèques à l'hydrate puisque dépendant seulement de sa nature. La prédiction de la déshydratation pour n'importe quel ciment dépendra donc ensuite seulement de la composition de la pâte hydratée (qui peut être évaluée avec le modèle d'hydratation).

### 2.4.2 Loi de déshydratation élémentaire par hydrate

### Déshydratation de la portlandite

De part sa structure cristalline, le degré de déshydratation à l'équilibre de la portlandite est égal à 1 dès que la température atteint une valeur supérieure à  $T_{onset}$ . Le départ progressif de l'eau au cours de l'augmentation de température est dans ce cas entièrement piloté par les paramètres de cinétique (Eq. 2.26).

$$\dot{\xi}^{\text{CH}} = \frac{1}{\tau^{\text{CH}}} \exp\left(-\frac{\mathbf{E}_{a}^{\text{CH}}}{\mathbf{R}} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T^{\text{CH}}_{onset}}\right]^{-}\right) \left(1 - \xi^{\text{CH}}\right)$$
(2.26)

Zelic [Jelica Zelic and Jozic, 2007] a mené des essais d'ATG sur des échantillons de CH pure à différentes vitesses de chauffage afin de mettre justement en évidence ces phénomènes cinétiques. Les essais réalisés permettent ainsi d'identifier les paramètres de notre loi cinétique (tableau 2.2 et figure 2.16).

TABLEAU 2.2 - Paramètres de la loi de déshydratation pour CH

Tonset	τ	Ea	ξ <sub>eq</sub>
300°C	17,4 h	158 kJ/mol	1



FIGURE 2.16 – Identification des paramètres cinétiques de déshydratation de la portlandite [Wang, 2016]

#### Déshydratation de l'hexahydrate

L'hexahydrate ( $C_3AH_6$ ) a également une structure cristalline qui lui confère une degré de déshydratation à l'équilibre égal à 1 dès que la température atteint une valeur supérieure à ( $T_{onset}$ ). Le départ progressif de l'eau au cours de l'augmentation de température est également dans ce cas entièrement piloté par les paramètres de cinétique (Eq. 2.27).

$$\dot{\xi}^{C_3AH_6} = \frac{1}{\tau^{C_3AH_6}} \exp\left(-\frac{E_a^{C_3AH_6}}{R} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T^{C_3AH_6}onset}\right]^{-}\right) \left(1 - \xi^{C_3AH_6}\right)$$
(2.27)

Rivas-Mercury [Rivas-Mercury et al., 2008] a mené des essais d'ATG sur des échantillons quasiment purs d'hexahydrate de synthèse à un taux de chauffage relativement bas (2K/min). On note dans ses résultats la présence résiduelle d'eau libre notée par une légère perte de masse en dessous de 100°C (loin du pic de déshydratation de l'hexahydrate étroit et centré autour de 250°C). De même une présence parasite de composés tels que de la portlandite ou autre conduisent à une perte de masse au delà de 400°C non attribuable à la déshydratation de l'hexahydrate (pour lequel la perte de masse sera assez peu dispersée au delà de la température de début de déshydratation compte tenu du faible taux de chauffage). La perte de masse associée à l'hexahydrate a donc été redéterminée à partir de ces essais en ôtant les pertes d'eau parasites. On peut alors identifier les paramètres de notre loi cinétique (tableau 2.3 et figure 2.17).

TABLEAU 2.3 - Paramètres de la loi de déshydratation pour l'hexahydrate



FIGURE 2.17 – Identification des paramètres cinétiques de déshydratation de l'hexahydrate, résultats expérimentaux en pointillés [Rivas-Mercury et al., 2008] et modèle en trait plein [Wang, 2016]

#### Déshydratation du monosulfoaluminate

La structure du monosulfoaluminate ( $C_4A\bar{S}H_{12}$ , AFm) est spécifique dans le sens où il contient, comme les C-S-H, une part d'eau interfeuillets (6 moles d'eau interfeuillets en moyenne par mole d'AFm selon les auteurs [Dilnesa et al., 2012; Leisinger et al., 2012; Pan Guoyao, 1997]) qu'il peut perdre progressivement à température modérée pour atteindre une structure cristalline contenant alors seulement 6 mol d'eau. Dilnesa met en évidence cette différence de structure à travers l'analyse d'essai ATG réalisés sur des AFm (à base d'aluminium et de fer) [Dilnesa et al., 2012]). Le degré de déshydratation du monosulfoaluminate sera donc associé à la perte de l'eau interfeuillet du  $C_3A\bar{S}H_{12}$  (noté AFm<sub>12-6</sub>) pour se stabiliser en  $C_3A\bar{S}H_6$ de structure cristalline puis de la décomposition de ce  $C_3A\bar{S}H_6$  (noté AFm<sub>6-0</sub>). Il sera calculé comme la moyenne des degrés de déshydratation associés à ces deux changements puisque chacun est associé à la perte de 6 mol d'eau (soit la moitié de la quantité d'eau liée initiale).

$$\dot{\xi}^{AFm} = 0.5 \cdot \dot{\xi}^{AFm_{12-6}} + 0.5 \cdot \dot{\xi}^{AFm_{6-0}}$$
(2.28)

### CHAPITRE 2. MODÉLISATION NUMÉRIQUE DE L'ÉVOLUTION CHIMIQUE DES MATÉRIAUX CIMENTAIRES

Comme pour les autres structures cristallines, la perte d'eau structurelle (décomposition du C<sub>3</sub>A $\bar{S}H_6$ ) est associée à un degré à l'équilibre  $\xi_e^{AFm_{6-0}}q$  égal à 1.

$$\dot{\xi}^{AFm_{6-0}} = \frac{1}{\tau^{AFm_{6-0}}} \exp\left(-\frac{E_a^{AFm_{6-0}}}{R} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T^{AFm_{6-0}}onset}\right]^{-}\right) \left(1 - \xi^{AFm_{6-0}}\right)$$
(2.29)

La perte d'eau interfeuillets (de 12 à 6 mol) est quant à elle modélisée par l'équation 2.30 dans laquelle le degré de déshydratation à l'équilibre est modélisé par une fonction de la température afin de reproduire la perte physique progressive liée à un mouvement d'eau et non à une destructuration complète comme dans le cas de structures cristallines.

$$\dot{\xi}^{\text{AFm}_{12-6}} = \frac{1}{\tau^{\text{AFm}_{12-6}}} \exp\left(-\frac{\mathbf{E}_{a}^{\text{AFm}_{12-6}}}{\mathbf{R}} \left[\frac{1}{\mathbf{T}} - \frac{1}{\mathbf{T}^{\text{AFm}_{12-6}}onset}}\right]^{-}\right) \left(\xi_{eq}^{\text{AFm}_{12-6}} - \xi^{\text{AFm}_{12-6}}\right)$$
(2.30)

$$\xi_{eq}^{\text{AFm}_{12-6}} = 1 - \exp\left(-a_{\text{AFm}_{12-6}} \left(\text{T} - \text{T}^{\text{AFm}_{12-6}} onset\right)^{b_{\text{AFm}_{12-6}}}\right)$$
(2.31)

Comme pour les autres hydrates, les paramètres de ces lois ont été identifiés sur des résultats disponibles dans la littérature sur des phases de synthèse. Les paramètres sont répertoriés dans le tableau 2.4 et le résultat du calage illustré sur la figure 2.18.

	T <sub>onset</sub>	τ	Ea	ξeq
Eau interfeuillet (AFm <sub>12–6</sub> )	40°C	0,2 h	10 kJ/mol	$1 - \exp\left(-0,06 (T - 40)^{0,8}\right)$
Eau structurelle (AFm <sub>6–0</sub> )	150°C	0,5 h	20 kJ/mol	1



FIGURE 2.18 – Identification des paramètres cinétiques de déshydratation de l'hexahydrate, résultats expérimentaux en pointillés [Dilnesa et al., 2012; Leisinger et al., 2012; Pan Guoyao, 1997] et modèle en trait plein [Wang, 2016]

#### Déshydratation des C-S-H

De part leur structure en feuillets, les C-S-H, comme les AFm dans leur première phase de déshydratation, admettent un degré de déshydratation à l'équilibre dépendant de la température. Leur cinétique de déshydratation s'exprime donc comme suit 2.32.

$$\dot{\xi}^{\text{CSH}} = \frac{1}{\tau^{\text{CSH}}} \exp\left(-\frac{E_a^{\text{CSH}}}{R} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T^{\text{CSH}}_{onset}}\right]^{-}\right) \left(\xi_{eq}^{\text{CSH}} - \xi^{\text{CSH}}\right)$$
(2.32)

Il faut donc, pour cette espèce, identifier les paramètres de cinétique  $\tau$  et E*a* mais aussi les paramètres de la loi exponentielle (similaire à l'équation 2.31) d'évolution du degré de déshydratation à l'équilibre.

TABLEAU 2.5 - Paramètres de la loi de déshydratation pour les C-S-H

Tonset	τ	Ea	ξeq
40°C	1 h	34 kJ/mol	$1 - \exp(-0,01(T - 40)^{0,9})$



FIGURE 2.19 – Identification des paramètres de la loi de déshydratation pour les  $C_x$ SH<sub>1.4</sub> (résultats expérimentaux issus de [Rodriguez et al., 2017], modèle en trait plein)

### 2.4.3 Application à différents ciments pour différents taux de chauffage

Le modèle a été testé vis-à-vis de sa capacité à reproduire, sans aucun recalage, la déshydratation subie par des ciments légèrement différents et deux taux de chauffage. Nous avons pour cela utilisé des essais réalisés au LMDC sur un même ciment mais avec 2 taux de chauffage [Wang, 2016] ainsi que deux résultats de la littérature [Alarcon-Ruiz et al., 2005; Morandeau et al., 2014] pour lesquels nous avions accès à la composition chimique du ciment utilisé, au rapport E/C de la pâte, aux conditions de préparation des échantillons et à la vitesse de chauffage utilisée dans l'essai ATG. Le modèle d'hydratation (paragraphe 2.2) nous permet de calculer pour chacune des pâtes la quantités de chaque hydrate et donc la quantité d'eau liée associée. Le tableau 2.6 présente la répartition de cette eau liée obtenue par le modèle d'hydratation dans chaque type d'hydrate pour les trois pâtes utilisées pour la validation.

Le modèle de déshydratation est appliqué sans aucun recalage. Les résultats du modèle comparés aux essais (pour 3 pâtes différentes et 2 vitesses de chauffage différentes) sont reportés sur la figure 2.20. On constate que le modèle permet de reproduire ces essais de façon acceptable.

	СН	AFm	C <sub>3</sub> AH <sub>6</sub>	C-S-H
LMDC [Wang, 2016]	24.7%	26.3%	8.2%	40.8%
[Morandeau et al., 2014]	22.9%	22.9%	11.4%	42.8%
[Alarcon-Ruiz et al., 2005]	23.2%	25%	10.7%	41%



FIGURE 2.20 – Prédiction de la perte d'eau liée lors d'essais sur différents ciments et à plusieurs taux de chauffage
## 2.5 Bilan

Ce chapitre s'est attaché à présenter les modèles d'évolution chimique des matériaux cimentaires développés au cours de mes activités de ces 10 dernières années. Le modèle d'hydratation multiphasique présenté dans un premier temps a été développé dans le cadre de notre fort partenariat avec VINCI Construction Grands Projets (Laurent Boutillon et Lionel Linger) afin d'assurer la maîtrise de l'élévation des températures dans les structures massives (pour limiter le risque de RSI) et d'éviter la fissuration au jeune âge pour des structures réalisées avec des liants composés (pour la plupart recomposés sur chantier à partir du ciment portland et des additions minérales locales). D'un point de vue industriel, le modèle est utilisé sur un grand nombre d'études de grands ouvrages réalisés par VINCI pour guider le choix du liant afin de limiter la température maximale pouvant être atteinte au sein d'une structure (LGV Paris-Bordeaux, Viaduc de la Grande Ravine à la Réunion, Pont de l'Atlantique au Panama, ...). Ce retour d'expertise sur la prédiction du comportement thermique jeune âge que nous avons via cette collaboration est très riche puisqu'il permet régulièrement de mettre à l'épreuve le modèle. D'un point de vue scientifique, le modèle a été développé à une échelle suffisamment fine (bien que restant à visée d'application structurale) pour qu'il puisse ensuite être utilisé comme donnée d'entrée à d'autres modèles d'évolutions chimiques :

- Modèle d'évolution chimique à plus long terme pour les liants composés (voir paragraphe 2.3). Il s'est en-effet avéré que lorsque l'on s'intéresse à l'évolution à plus long terme des matériaux cimentaires et en particulier dans le cas des matériaux fortement substitués le modèle court-terme atteint ses limites du fait de ses hypothèses de stœchiométrie fixe des hydrates une fois qu'ils ont été créés. Ceci nous a donc conduit à proposer un modèle d'évolution chimique long-terme se basant sur les résultats du modèle court-terme à 28 jours pour prédire l'évolution des stoechiométries des hydrates (en particulier C-S-H) à long terme (thèse de Y. El Bitouri, [El Bitouri et al., 2016])
- Modèles de dégradations potentielles telles que la déshydratation sous l'effet de hautes températures, la decalcification (thèse en cours de T. Bes, voir chapitre 6), ou encore la RSI (thèse en cours d'Y. Thiébaut, voir chapitre 5). Dans ces études le modèle est utilisé pour fournir les données d'entrée en terme de microstructure (nature et quantités d'hydrates) qui permettent d'appliquer les modèles chimiques y compris sur des liants composés.

Les résultats fournis par ces différents modèles en terme d'évolution de la microstructure (représentée dans nos approches par des variables internes macroscopiques telles que le degré d'hydratation des anhydres, la teneur en eau libre, la porosité, le degré de déshydratation des hydrates, la teneur en calcium des phases solides) peuvent alors être utilisées afin de prévoir les modifications de comportement hygro-thermique et mécaniques de ces matériaux cimentaires chimiquement évolutifs (voir chapitres3 et 4).

# **Chapitre 3**

# Modélisation numérique des transferts de masse et chaleur dans les matériaux cimentaires

## Sommaire

3.1	Introduction						
	3.1.1	Cadre général de travail	35				
	3.1.2	Principe de modélisation thermo-hydrique couplée	36				
3.2	Modé ture n	lisation unifiée des transferts d'eau pour les bétons durcis à tempéra- nodérées	39				
3.3	Influence de variations de la microstructure et de la température sur les						
	courb	es de rétention d'eau	43				
	3.3.1	Modélisation de l'effet de la microstructure sur les isothermes de sorp- tion et désorption	43				
	3.3.2	Modélisation macroscopique de l'effet de la température sur les courbes de rétention d'eau	45				
<b>3.4</b>	Bilan		47				

## CHAPITRE 3. MODÉLISATION NUMÉRIQUE DES TRANSFERTS DE MASSE ET CHALEUR DANS LES MATÉRIAUX CIMENTAIRES

## 3.1 Introduction

## 3.1.1 Cadre général de travail

Dans ce chapitre vont être présentés les développements en terme de modèles de comportement thermo-hydrique des bétons et de l'impact de variation microstructurales ou thermique sur les transferts thermo-hydriques dans les bétons. Ces travaux ont été initiés en 2009 dans le but de pouvoir prédire le développement du retrait endogène dans les bétons à partir des résultats issus du modèle d'hydratation présenté au chapitre 2. Ils ont ensuite été étendus au cas du comportement thermo-hydrique des bétons soumis à des températures élevées. Ils ont été menés ces dernières années grâce à deux soutiens financiers institutionnels (ANR) :

- l'ANR Mefisto *GeM Nantes, LMT Cachan, Siame Pau, 3SR Grenoble, Oxand, CEA*: Déposée comme support scientifique du PN CEOS, l'ANR Mefisto (2009-2012) nous a permis le financement de la thèse de Pierre Souyris (co-encadrement Alain Sellier) (montant indiqué sur la figure 3.1 comprenant le salaire). Cela nous a permis d'investiguer, pour ce qui concerne ce chapitre, l'effet de l'hydratation et de la température sur le comportement hydrique des bétons et plus particulièrement les courbes de rétention d'eau (caractéristique clé dans les transferts eau-vapeur) en se basant notamment sur l'impact de l'évolution de la microstucture sur ces isothermes.
- **l'ANR-PIA Macena** *UPPA, 3SR Grenoble, EDF, NECS, Oxand, CEA, CERIB, IFSTTAR* : Dans le cadre du Plan d'Investissement d'Avenir (PIA3) nous avons obtenu en 2013 un financement de l'ANR pour le projet Macena. L'objectif du projet a été de prédire le comportement des enceintes de confinement nucléaire lors d'un accident grave (température maintenue à 200°C pendant 15 jours dans l'enceinte). Le financement obtenu par le LMDC dans ce cadre là a permis le financement de la thèse de Ponleu Chhun (co-encadrement Alain Sellier) (montant indiqué sur la figure 3.1 comprenant le salaire). Cette thèse nous a permis de reprendre nos études sur l'effet de la température les courbes de rétention d'eau à une échelle plus macroscopique (puisque devant être implantée en vue d'une application sur structures massives) et d'étudier le comportement hydrique des bétons soumis à des températures élevées (jusqu'à 200°C).

La figure 3.1 résume les différents indicateurs associés à cette thématique en terme d'encadrement doctoral (avec % associés), de participation à des contrats industriels (avec les montants et le % d'implication), de relations avec l'international et de publications internationales (AI : revues de rang A, COI : chapitre d'ouvrage, CI : conférences avec actes).

	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	201	7	
M2R (1)						Chhun (50%)					
Th here (2)		Sou	uyris (50%)								
Theses (2)					-		Chhur	n (50%)			
Contrats (% si		ANR Mefisto	(170k€) (50%)								
act° partagée)						ANR-PIA	Macena (270	k€) (30%)			
Conf. Int et					CI13						
Rapports		R6	R8	R13						R23	

FIGURE 3.1 – Bilan comptable des activités liées au transport de chaleur et masse

### 3.1.2 Principe de modélisation thermo-hydrique couplée

#### Modélisation multiphysique des transport de gaz, liquide et chaleur

Dans le cas d'un matériau poreux comme le béton, le transport d'eau peut se faire sous forme liquide ou sous forme vapeur. La gestion de ces transports nécessite la résolution couplée des équations de conservations des différents fluides présents dans la porosité : l'eau liquide, la vapeur d'eau et l'air sec [Gawin et al., 2003]. Ces équations de conservation font no-tamment intervenir les échanges d'eau entre solide et liquide et le changement d'état liquide-vapeur et sont couplées à une équation de conservation de l'énergie.

$$\frac{\partial m_a}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(-\overrightarrow{w}_a\right) \tag{3.1}$$

$$\frac{\partial m_{\nu}}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(-\overrightarrow{w}_{\nu}\right) + \dot{\mu}_{l-\nu} \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial m_l}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(-\vec{w}_l\right) + \sum_j \dot{\xi}^j \cdot Q^W_{desj} - \sum_i \dot{\alpha}_i \cdot Q^W_{thi} - \dot{\mu}_{l-\nu}$$
(3.3)

$$\frac{\partial (c_b \cdot \mathbf{T})}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(-\lambda \overrightarrow{\operatorname{grad}} \mathbf{T}\right) + \sum_j \dot{\xi}^j \cdot \mathbf{Q}^{\mathrm{T}}_{desj} + \sum_i \dot{\alpha}_i \cdot \mathbf{Q}^{\mathrm{T}}_{thi} + \mathbf{L}_{l-\nu} \dot{\mu}_{l-\nu}$$
(3.4)

Où:

- $m_a$ ,  $m_v$  et  $m_l$  sont les quantités d'air sec, de vapeur et deau liquide;
- T est la température;
- $\vec{w}_a$ ,  $\vec{w}_v$  et  $\vec{w}_l$  sont les flux d'air sec, de vapeur (eq. 3.7) et d'eau liquide (eq. 3.8);
- *c*<sup>*b*</sup> est la capacité thermique volumique du béton;
- $\lambda$  est la conductivité thermique du béton;
- $\dot{\mu}_{l-v}$  est le taux d'évaporation d'eau liquide;
- ξ<sub>j</sub> est le degré de déshydratation de l'hydrate *j*;
- α<sub>i</sub> est le degré d'hydratation de l'anhydre *i*;
- $Q^{W}_{des j}$  est la quantité d'eau issue de la déshydratation de l'hydrate j (voir eq. 2.23);
- $Q^{W}_{thi}$  est le puits d'eau associé à la réaction de l'anhydre i (voir 2.3);
- $Q^{T}_{des j}$  est l'énergie associée à la déshydratation de l'hydrate j;
- $Q^{T}_{thi}$  est la source de chaleur associée à la réaction de l'anhydre *i* (voir 2.3);

L'implémentation et la résolution numérique de ces équations fortement couplées est délicate et couteuse en temps, avec de plus un nombre de paramètres à déterminer très important (perméabilités au gaz, à l'eau, coefficients de diffusion à l'air sec et à la vapeur, paramètres des lois représentant les effet des variations de température et de teneur en eau sur tous ces paramètres, effet de la structure poreuse sur ces paramètres, ...). C'est pourquoi, lors du développement de modèles en vue d'une application sur structures (et avec des couplages avec des évolutions chimiques ou physiques), il est généralement d'usage de simplifier le problème en considérant un couplage faible avec la thermique (donc pour lequel l'enthalpie de changement d'état liquide-vapeur est introduite de façon forfaitaire à travers la variation macroscopique de la capacité en fonction de la température) et en négligeant le transport de l'air sec. On se ramène ainsi aux équations suivantes :

$$\frac{\partial m_l + m_v}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(-\vec{w}_l - \vec{w}_v\right) + \underbrace{\sum_{j} \dot{\xi}^j \cdot Q^W}_{\substack{des \, j} - \sum_{i} \dot{\alpha}_i \cdot Q^W}_{\substack{th \, i}}_{\substack{th \, s-l}}$$
(3.5)

$$\frac{\partial (c_b(\mathbf{T}) \cdot \mathbf{T})}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(-\lambda \,\overrightarrow{\operatorname{grad}} \,\mathbf{T}\right) + \sum_j \dot{\xi}^j \cdot \mathbf{Q}^{\mathrm{T}}_{des\,j} + \sum_i \dot{\alpha}_i \cdot \mathbf{Q}^{\mathrm{T}}_{th\,i} \tag{3.6}$$

[Mainguy et al., 1999] montre, à partir de considérations thermodynamiques, et en supposant une distribution parallèle des phases dans chacun des pores (les flux étant donc additifs sur un pore), que le flux de vapeur se décompose en un flux darcéen (induit par le gradient de pression de gaz total) et un flux diffusif (dépendant de la concentration de charge phase dans le gaz). Connaissant les relations entre masse volumique des phases gazeuses et la pression de gaz (via la loi des gaz parfaits), le flux de vapeur s'écrit selon l'équation 3.7.

$$\vec{w}_{v} = -\frac{M_{v}}{RT} P_{v} \frac{k_{g0}}{\eta_{g}} \left( 1 + \frac{\Gamma}{P_{g}} \right) k_{rg} \overrightarrow{\text{grad}} P_{g} - \frac{M_{v}}{RT} R_{d} D_{va} P_{g} \overrightarrow{\text{grad}} \frac{P_{v}}{P_{g}}$$
(3.7)

Où:

- $P_v$  est la pression de vapeur, et  $P_g$  est la pression totale de gaz  $P_g = P_a + P_v$ ;
- M<sub>v</sub> est la masse molaire de la vapeur;
- *k*<sub>g0</sub> est la perméabilité intrinsèque du gaz;
- $\Gamma$  est le coefficient de Klinkenberg traduisant la dépendance de la perméabilité au gaz à la pression du gaz;
- $k_{rg}$  est la perméabilité relative du gaz en fonction du degré de saturation;
- η<sub>g</sub> est la viscosité dynamique du fluide;
- R<sub>d</sub> est la résistance à la diffusion dépendant du degré de saturation;
- $D_{va}$  est le coefficient de diffusion de l'air et de la vapeur.

Le flux d'eau liquide est quant à lui de nature purement darcéenne (eq. 3.8).

$$\vec{w}_l = -\rho_l \frac{k_{l0}}{\eta_l} k_{rl} \overrightarrow{\text{grad}} P_l$$
(3.8)

Où:

- P<sub>l</sub> est la pression de liquide;
- *k*<sub>l0</sub> est la perméabilité intrinsèque au liquide;
- ρ<sub>l</sub> est la masse volumique de l'eau liquide (supposée indépendante de la pression de liquide);
- $\eta_l$  est la viscosité dynamique de l'eau liquide.

#### Discussion sur les hypothèses conduisant à éliminer l'effet de l'air sec

Dans la littérature, selon le domaine d'application, on trouve 2 hypothèses permettant de s'affranchir de la gestion de l'air sec basées sur des considérations physiques distinctes :

• On peut, selon une première approche utilisée pour modéliser le séchage à température ambiante [Mainguy et al., 1999], considérer que la pression de gaz est constamment en équilibre avec la pression atmosphérique. On obtient alors une annulation du terme de transport de vapeur darcéen dans l'équation 3.7 et le flux d'eau total est donc égal à :

$$\vec{w}_{l} + \vec{w}_{v} = -\underbrace{\mathbf{R}_{d}\mathbf{D}_{va}}_{\mathbf{B}_{1}} \cdot \underbrace{\mathbf{M}_{v}}_{\mathbf{RT}} \cdot \overrightarrow{\mathbf{grad}} \mathbf{P}_{v} - \rho_{l} \frac{k_{l0}}{\eta_{l}} k_{rl} \overrightarrow{\mathbf{grad}} \mathbf{P}_{l}$$
(3.9)

• On peut également, selon une autre approche utilisée pour modéliser les transferts hydriques à hautes températures [Bary et al., 2012; de Morais et al., 2009], considérer que le gaz est uniquement constitué de vapeur. On obtient alors une annulation du terme de transport de vapeur diffusif dans l'équation 3.7 ( $P_v/P_g = 1$ ) et le flux d'eau total est donc égal à :

$$\vec{w}_{l} + \vec{w}_{v} = -\underbrace{P_{v} \frac{k_{g0}}{\eta_{g}} \left(1 + \frac{\Gamma}{P_{v}}\right) k_{rg}}_{B_{2}} \cdot \underbrace{\frac{M_{v}}{RT}}_{B_{T}} \cdot \overrightarrow{\text{grad}} P_{v} - \rho_{l} \frac{k_{l0}}{\eta_{l}} k_{rl} \overrightarrow{\text{grad}} P_{l}$$
(3.10)

Les deux approches, a priori plutôt distinctes, amènent donc à une formulation similaire du problème avec une part de transport d'eau liquide identique et une part de transport de vapeur d'eau exprimée en fonction du gradient de pression de vapeur dans les deux cas. Lorsque l'on compare l'évolution des termes  $B_1$  et  $B_2$  des équations 3.9 et 3.10, en utilisant les lois d'évolution classiquement utilisés par les différents auteurs [Chhun, 2017; Kameche et al., 2014; Ranaivomanana, 2010; Thiery et al., 2007], on s'aperçoit que l'identification des paramètres des lois dévolution des coefficients de diffusion et perméabilité conduit à une même évolution des termes  $B_1$  et  $B_2$  en fonction de  $S_l$  (voir figure 3.2).

TABLEAU 3.1 - Paramètres des termes diffusifs et perméatifs

R <sub>d</sub>	$D_{va}$	$k_{g0}$	$\eta_g$	Г	$k_{rg}$
$\phi^{2.74} \cdot (1 - S_l)^{4.2}$	2.17E-5 $m^2/s$	$1.5E-17 m^2$	9.85E-5 Pa.s	1E-5 Pa	$(1 - S_l)^4 \cdot (1 - S_l^2)$

Dans le cas où l'on sattache à la modélisation globale du transport d'eau, sans tenir compte donc des échanges liquide-vapeur comme dans l'approche complète (Eqs. 3.1 à 3.2 à travers le terme  $\mu_{l-v}$ ), les deux approches simplificatrices ci-dessous ( $P_g = cste$  ou  $P_g = P_v$ ) sont donc numériquement équivalente pour prévoir l'évolution de la quantité d'eau dans le matériau à températures modérées (en dessous de 100°C puisque dans ce cas  $P_{vsat}$  reste à des valeurs inférieures à  $P_{atm}$ ). Cependant, dans le cas de bétons soumis à des températures élevées, les modélisations complètes [de Morais et al., 2009; Gawin et al., 1999] montrent que la pression de vapeur augmente rapidement et le fait de la négliger conduirait à des erreurs de prédiction du comportement mécanique (et du risque de fissuration par exemple). Dans ce cas l'hypothèse  $P_g = P_v$  est alors à privilégier.



FIGURE 3.2 - Comparaison des termes B1 et B2 à 20°C

## 3.2 Modélisation unifiée des transferts d'eau pour les bétons durcis à température modérées

Dans un souci d'applicabilité des modèles développés aux structures réelles, il est important de considérer que celles-ci peuvent être présenter une co-existence de zones saturées et non saturées par exemple dans le cas de condensation importante de vapeur lors d'exposition rapide à des hautes températures mais aussi sous l'effet combiné des phénomènes de séchage et de resaturation pour des structures partiellement immergées (tunnels, barrage, pile de pont). Dans le cas où l'air sec est négligé (hypothèse de pression de gaz égale à la pression de vapeur comme expliqué précédemment) l'équation de conservation de l'eau totale en insaturé s'écrit en combinant les équations 3.5 et 3.10 en fonction de S<sub>1</sub>, P<sub>v</sub> et P<sub>1</sub>. Ces trois grandeurs peuvent être alors indépendamment utilisées comme variable détat, les autres devenant alors variables internes et s'exprimant en fonction de la variable d'état retenue à partir des lois de comportement des fluides. Afin d'assurer la continuité avec le domaine saturé, pour lequel S<sub>1</sub> et P<sub>v</sub> n'existent pas (absence de phase gazeuse dans la porosité), il a été choisi de retenir la pression de liquide comme variable d'état (thèse de [Chhun, 2017]).

On montre dans ce cas, et en considérant un couplage faible avec la thermique et la mécanique (température et porosité constante sur le pas de temps), que l'équation de conservation de la masse d'eau peut s'écrire selon l'équation 3.11. Elle est résolue de façon couplée (couplage faible) avec l'équation de conservation de la chaleur pour laquelle l'enthalpie de déshydratation est négligée compte tenu du faible taux de déshydratation obtenu pour des températures inférieures à 200°C, comme cela a été le cas pour les études menées ici.

$$C_l \frac{\partial P_l}{\partial t} = \operatorname{div} \left( D_l \operatorname{\overline{grad}} P_l \right)$$
(3.11)

$$\frac{\partial (c_b(\mathbf{T}) \cdot \mathbf{T})}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(-\lambda \,\overrightarrow{\operatorname{grad}} \,\mathbf{T}\right) \tag{3.12}$$

Dans le cas d'un milieu saturé, le transport d'eau est exclusivement liquide et va dépendre de la pression de liquide. celle-ci s'exprime en fonction de la masse d'eau liquide entrant dans le volume représentatif selon la loi ci-dessous.

$$P_l = M_l \cdot \left(\frac{m_l}{\rho_l} - \phi\right) \tag{3.13}$$

Où:

- *m*<sub>l</sub> est la masse d'eau liquide;
- P<sub>l</sub> est la pression de liquide;
- M<sub>l</sub> est le module de Biot;
- $\phi$  est la porosité et  $\rho_l$  la masse volumique de l'eau.

Dans le cas d'un couplage faible avec la température, l'équation de conservation de la masse d'eau en condition saturée (eq. 3.5), combinée à cette équation de pression liquide, devient donc :

$$\left(\frac{1}{M_l} + \frac{\partial \Phi}{\partial P_l}\right) \frac{\partial P_l}{\partial t} = \operatorname{div}\left(\frac{k_{l0}}{\eta_l} \cdot \overrightarrow{\operatorname{grad}} P_l\right)$$
(3.14)

Où:

- P<sub>l</sub> est la pression de liquide;
- *k*<sub>10</sub> est la perméabilité intrinsèque à l'eau;
- M<sub>l</sub> est le module de Biot;
- η<sub>l</sub> est la viscosité de l'eau;
- le terme  $\frac{\partial \Phi}{\partial P_1}$  traduit un éventuel couplage poro-mécanique.

Cette équation peut donc, dans le cas saturé, se mettre sous une forme similaire à celle obtenue dans le cas non saturé (eq. 3.13). Le tableau 3.2 récapitule les termes capacitifs et de transports obtenus pour les cas insaturé et saturé dans le cas d'un couplage faible avec la thermique de l'absence de couplage avec la mécanique ( $\frac{\partial \varphi}{\partial P_i} = 0$ ).

TABLEAU 3.2 – Expression de la capacité et diffusivité hydrique pour les cas saturé et insaturé [Chhun, 2017]

	Milieu saturé	Milieu insaturé
	$(m_l \ge \rho_l \phi)$	$(m_l \le \rho_l \phi)$
C <sub>l</sub>	$1/M_l$	$\rho_l \phi \frac{\partial S_l}{\partial P_l} + \frac{M_{\nu} \phi}{RT} \frac{\partial P_{\nu} (1 - S_l)}{\partial P_l}$
$D_l$	$k_l/\eta_l$	$\frac{k_{g0}k_{rg}}{\eta_g}\left(1+\frac{\Gamma}{P_v}\right)\frac{P_vM_v}{RT}\frac{\partial P_v}{\partial P_l}+\rho_l\frac{k_{l0}k_{rl}}{\eta_l}$

On constate dans le tableau 3.2 que l'expression des coefficients de transport et de capacité pour le cas insaturé fait intervenir le degré de saturation (notamment pour D<sub>l</sub> à travers  $k_{rg}$  et  $k_{rl}$  comme nous le verrons avec les équations 3.16 et 3.17) et la pression de vapeur ainsi que leur dérivée partielle vis à vis de la pression liquide. Les travaux menés dans le cadre du projet ANR Macena (thèse de [Chhun, 2017]) ont permis de déterminer une expression analytique pour la variable interne P<sub>v</sub> en fonction de P<sub>l</sub> permettant de respecter l'équation de Kelvin-Laplace quelque soit la température (comme le montre la figure 3.3). L'expression proposée est de forme exponentielle avec les coefficients  $A_{P_v}(T)$  et  $B_{P_v}(T)$  dépendant de la température (eq. 3.15).

$$P_{\nu} = A_{P_{\nu}}(T) \cdot \exp\left(B_{P_{\nu}}(T) \cdot P_{l}\right)$$
(3.15)



FIGURE 3.3 – Comparaison loi  $P_{\nu}(P_l)$  et loi de Kelvin [Chhun, 2017]

L'expression du degré de saturation en fonction de  $P_l$  se fait quant à lui à travers les isothermes de désorption comme nous le verrons au paragraphe suivant. L'utilisation de ces expressions  $P_v = f(T, P_l)$  et  $S_l = f(T, P_l)$  permet alors de résoudre le problème de conservation en utilisant  $P_l$  comme variable d'état continue pour le cas insaturé et saturé (comme illustré à la figure 3.4).



FIGURE 3.4 – Illustration de la continuite de l'équation de conservation au passage insaturé-saturé [Chhun, 2017]

Le coefficient de transport hydrique  $D_l$  est enfin fortement dépendant du degré de saturation à travers l'évolution des perméabilités relatives en fonction de l'état de saturation du matériau. Des lois dévolutions ont été proposées pour traduire macroscopiquement cet effet de la distribution poreuse de la pâte de ciment (non assimilable à un milieu purement série ou parallèle)(eqs. 3.16 et 3.17 [Van Genuchten, 1980]).

$$k_{rg} = (1 - S_l)^{q_{rg}} \cdot (1 - S_l^{1/m})^{2m}$$
(3.16)

$$k_{rl} = S_l^{q_{rl}} \left( 1 - \left( 1 - S_l^{1/m} \right)^m \right)^2$$
(3.17)

Ces lois ont été établies et les paramètres identifiés principalement à 20°C et on trouve classiquement dans la littérature un coefficient  $m = q_{rl} = 0.5$  et  $q_{rg} = [3.5..5.5]$  [Kameche et al., 2014; Monlouis-Bonnaire et al., 2004; Sogbossi, 2017]. Cependant peu d'études sont disponibles sur l'effet de la température sur ces paramètres, effet d'autant plus difficile à identifier que l'identification des paramètres ne peut être totalement découplé de l'effet de la pression de gaz sur la perméabilité représenté par l'effet de Klinkenberg. Une illustration de la loi pour un paramètre  $q_{rg} = 4.5$  (valeur retenue dans nos études) est présentée à la figure 3.5.





Cette approche a été appliquée à la modélisation d'une maquette en béton (cylindre creux) soumise à un échauffement interne et pour laquelle l'humidité relative et la pression de vapeur ont été mesurées le long du rayon du cylindre au cours du temps [Bary et al., 2012]. Le dispositif expérimental et la condition de chauffage à l'intérieur du cylindre sont présentés sur la figure 3.6.



FIGURE 3.6 – Dispositif de lessai à hautes températures réalisé sur la maquette Maqbeth [Bary et al., 2012]

Les résultats obtenus avec le modèle sont comparés aux résultats expérimentaux sur la figure 3.7 et on constate une bonne reproductibilité du modèle pour ce cas. Il serait cependant intéressant de pouvoir valider cela sur d'autres cas d'études avec des histoires thermiques différentes car il apparait que d'autres mesures (par exemple des données sur la quantité d'eau liquide) seraient nécessaires pour valider le modèle et notamment identifier si un effet de la température sur les perméabilités relatives serait à considérer.



FIGURE 3.7 – Evolution des profils dhumidité et de pression de vapeur au cours du temps [Chhun, 2017]

## 3.3 Influence de variations de la microstructure et de la température sur les courbes de rétention d'eau

## 3.3.1 Modélisation de l'effet de la microstructure sur les isothermes de sorption et désorption

#### Modèle simplifié de courbes de rétention d'eau et de l'hystérésis

Dans un cadre de recherche un peu plus amont, à travers l'ANR Mefisto, les travaux menés dans la thèse de Pierre Souyris [Souyris, 2012] sur les techniques d'homogénéisation pour la prédiction des propriétés hygro-mécaniques du béton (voir chapitre 4) nous ont amené à proposer une modélisation des courbes de rétention d'eau et de l'hystérésis associé en fonction de la connaissance de la microstructure de la pâte de ciment en cours d'hydratation (et notamment de la quantité de C-S-H). En effet les résultats de la littérature montrent qu'en dessous une certaine humidité relative (correspondant à la saturation des C-S-H et identifiée à 76%), les isothermes de sorption sont uniquement dus au remplissage des pores des C-S-H [Baroghel-Bouny, 2007; Nguyen, 2009]. On propose donc de modéliser les courbes de sorption selon le schéma illustré à la figure 3.8. En dessous une humidité correspondant à la saturation des C-S-H (HR<sub>CSH,sat</sub> soit 76% à 20°C), l'isotherme est modélisé par une loi de Van Genuchten 3.18 (partie violette sur la figure 3.8).

$$S_{lads} = \frac{m_{\text{CSH}}(\alpha)}{\rho_l \phi(\alpha)} \left( 1 + \left(\frac{P_c}{M_{shr}(\alpha)}\right)^{\frac{1}{1-m_{vg}}} \right)^{-m_{vg}} \text{ pour } 0 \le \text{HR} \le \text{HR}_{\text{CSH},sat}$$
(3.18)

Où:

- $P_c$  est la pression de capillaire  $(P_g P_l)$ ;
- $m_{vg}$  est un paramètre matériau;
- $m_{\rm CSH}$  est la masse des C-S-H;
- $\rho_l$  est la densité de l'eau liquide;
- φ est la porosité;
- M<sub>shr</sub>(α) est calculé avec l'équation 3.20 en fonction des résultats du modèle d'hydratation.

Au delà dune humidité relative notée  $HR_{hygro}$  le comportement du béton n'est plus considéré hygroscopique (partie rouge sur la figure 3.8). Cette partie (correspondant aux très fortes HR) est associée au remplissage par capillarité des plus gros pores ou défauts [Ranaivomanana, 2010] et correspond un degré de saturation noté  $S_{lhygro}$  qui dépend principalement du rapport E/C [Souyris, 2012]. Entre les deux, une parabole est proposée (respectant la continuité de pente à  $HR_{CSH,sat}$  et  $HR_{hygro}$ ) (partie verte sur la figure 3.8).

L'hystérésis sur les phénomène de sorption et désorption est prise en compte pour les humidités relatives comprises entre 20% et  $HR_{hygro}$  [Baroghel-Bouny, 2007; Powers and Brownyard, 1946].



$$\beta_{max} = \frac{0.95S_{lhygro}}{S_{lCSH,sat_{ads}}} - 1 \tag{3.19}$$

FIGURE 3.8 – Représentation schématique dune isotherme de sorption (points expérimentaux de [Ranaivomanana, 2010])

A 20°C les paramètres HR<sub>CSH,sat</sub> et HR<sub>hygro</sub> sont connus (HR<sub>CSH,sat</sub> = 76% [Nguyen, 2009] et HR<sub>hygro</sub> = 99% [Ranaivomanana, 2010]) donc les seuls paramètres à identifier sont S<sub>lhygro</sub>,  $m_{vg}$  et  $\beta$ .

#### Prise en compte de l'effet de l'hydratation

L'intérêt de cette approche de modélisation est que l'effet de l'hydratation sur l'isotherme est directement prise en compte à partir des résultats du modèle d'hydratation (quantité de C-S-H et porosité associée) sans aucun recalage. Le paramètre  $m_{vg}$  étant fixé, le paramètre  $M_{shr}$  est calculé de façon à ce que le degré de saturation obtenu à HR<sub>CSH,sat</sub> corresponde à un remplissage complet de la porosité des C-S-H. On obtient ainsi :

$$M_{shr}(\alpha) = -\frac{\rho_l RT}{M_v} \ln\left(HR_{CSH,sat}\right) \left( \left(\frac{m_{CSH}(\alpha)}{\rho_l \phi_{CSH}(\alpha)}\right)^{1/m_{vg}} - 1 \right)^{(m_{vg}-1)}$$
(3.20)

Un effet sur l'hystérésis est aussi automatiquement pris en compte puisque la grandeur H caractérisant l'hystérésis à  $HR = HR_{CSH,sat}$  est proportionnelle à la quantité de C-S-H. Cet effet de l'hydratation est illustré schématiquement sur la figure 3.9 (schématiquement faute de mesures disponibles sur un matériau à plusieurs degrés d'hydratation).



FIGURE 3.9 - Effet de l'hydratation sur les courbes de rétention d'eau

# 3.3.2 Modélisation macroscopique de l'effet de la température sur les courbes de rétention d'eau

Dans la littérature, et notamment dans les travaux de [Ranaivomanana, 2010], on constate que la température conduit à une diminution du phénomène d'hystérésis ainsi qu'à un décalage des courbes de désorption vers des saturations plus faibles (fig. 3.10). La température (pour ces températures étudiées inférieures à 100°C) n'affectant pas la structure des C-S-H, un décalage des courbes de désorption vers des saturations plus faibles correspond en réalité à une augmentation de la valeur d'humidité relative permettant la saturation des C-S-H (point de saturation des C-S-H à 76% HR à 20°C et à HR plus importante si T augmente).



FIGURE 3.10 – Effet de la température sur les courbes de rétention d'eau (points expérimentaux issus de [Ranaivomanana, 2010]

Cet effet peut être traduit dans le modèle de courbes de rétention d'eau présenté dans la section précédente en modifiant donc seulement  $\beta$  (qui pilote l'amplitude de l'hystérésis) et HR<sub>CSH,sat</sub>. Les paramètres identifiés par analyse inverse sur les essais de [Ranaivomanana, 2010] sont présentés dans le tableau 3.3.

Des courbes dévolution peuvent alors être proposées dans cette plage de température (20-100°C) pour extrapoler cet effet de la température. On constate sur la figure 3.11b que la prise en compte de la loi de Kelvin-Laplace pour traduire l'effet de la température sur la saturation des C-S-H n'est pas suffisant, ce qui tend à montrer que la capillarité n'est pas seule en cause. On se propose donc d'utiliser une loi empirique polynomiale. TABLEAU 3.3 – Effet de la température sur les paramètres des lois de rétention d'eau (identification par analyse inverse sur les résultats de [Ranaivomanana, 2010], voir fig. 3.10



FIGURE 3.11 - Effet de la température sur les paramètres des courbes de rétention d'eau

Ces approches restent une première étape, et le fait que les lois dévolutions ne puissent pas être ici phénoménologiques, de part la méconnaissance des phénomènes physiques pour l'instant, montre que des perspectives sont nombreuses sur ces aspects. Les évolutions mises en évidence ici ne sont entre autres pas valables au-delà de la plage d'études, ne serait-ce que parce que la structure des C-S-H peut être affectée par des températures plus élevées.

La prise en compte de l'effet de la température sur les courbes de désorption pour des températures plus élevées, comme celles pouvant être mises en œuvre lors de la survenue dune perte de refroidissement dans une enceinte nucléaire (cadre d'étude de l'ANR Macena), ne s'est donc faite pour l'instant qu'à une échelle plus globale et macroscopique, en imposant une évolution du module de la loi de Van Genuchten ( $M_{shr}$ ) permettant de reproduire les isothermes de [Ranaivomanana, 2010] et extrapolée jusqu'à 180°C (voir eqs. 3.21 et 3.22 et fig. 3.12).

$$Sl = \left(1 + \left(\frac{P_c}{M_{shr}(T)}\right)^{\frac{1}{1-m_{vg}}}\right)^{-m_{vg}}$$
 (3.21)

$$\frac{\mathbf{M}_{shr}(\mathbf{T})}{\mathbf{M}_{shrref}} = \mathbf{C}^{\mathbf{P}c,\mathbf{T}} = \exp\left(-\frac{\mathbf{T} - \mathbf{T}_{ref}}{\mathbf{T}_{k,vg} - \mathbf{T}_{ref}}\right)$$
(3.22)



FIGURE 3.12 – Modélisation de l'effet de la température sur l'isotherme de désorption de Van Genuchten [Chhun, 2017], points expérimentaux issus de [Khallel, 2016; Poyet and Charles, 2009; Ranaivomanana, 2010]

### 3.4 Bilan

Une partie des travaux menés dans le cadres des ANR Mefisto et Macena a conduit à proposer un modèle de comportement thermo-hydrique simplifié, puisque ne gérant que la conservation globale de la quantité d'eau, mais permettant de modéliser de façon continue les transports d'eau en milieu saturé et insaturé et sous conditions de températures élevées (bien que restant inférieures à 200°C). Cette continuité a été notamment rendue possible par le choix de prendre la pression de liquide comme variable d'état du problème de transport hydrique, celle-ci étant en-effet la seule variable qui existe dans toutes les configurations (contrairement au degré de saturation ou à la pression de vapeur qui n'ont pas de sens dans le cas saturé). L'écriture de la loi de conservation de l'eau totale est écrite en fonction de cette seule variable d'état grâce à une proposition de lois macroscopiques permettant de relier la pression de vapeur à la pression de liquide en respectant la loi de Kelvin-Laplace quelque soit la température, et de relier le degré de saturation à la pression de liquide à travers les courbes de rétention d'eau.

Un des points importants des développements a notamment été la prise en compte de l'évolution thermo-chimique du béton sur ces courbes de rétention d'eau et ce à travers deux approches à échelles distinctes. A l'échelle microscopique tout d'abord en se basant sur la connaissance des hydrates et de leur structure poreuse au cours de l'hydratation du matériau (données issues du modèle d'hydratation présenté au chapitre 2). A l'échelle du matériau enfin pour la prise en compte de l'effet de la température sur les courbes de rétention d'eau à travers des lois macroscopiques permettant de prendre en compte ces effets dans une modé-lisation éléments finis à la fois en terme d'effet sur les propriétés de rétention d'eau pour le transport hydrique mais aussi d'effet sur la dépression capillaire pour le comportement mécanique comme nous le verrons au chapitre 4.

## CHAPITRE 3. MODÉLISATION NUMÉRIQUE DES TRANSFERTS DE MASSE ET CHALEUR DANS LES MATÉRIAUX CIMENTAIRES

# **Chapitre 4**

# Prise en compte des évolutions physico-chimiques sur le comportement mécanique des bétons

### Sommaire

4.1	Intro	duction	51
	4.1.1	Cadre général de travail	51
	4.1.2	Principe général de couplage	53
	4.1.3	Rappel du modèle LMDC pour les bétons durcis sains	54
4.2	Comp	portement mécanique du béton sous sollicitations thermo-hydriques .	57
	4.2.1	Effet de la température	57
	4.2.2	Effet du degré de saturation	59
	4.2.3	Application	60
<b>4.3</b>	Comp	portement mécanique du béton en cours d'hydratation	61
	4.3.1	Écriture incrémentale des lois de comportement	61
	4.3.2	Comportement élastique du béton au jeune âge	62
	4.3.3	Fissuration du béton en cours d'hydratation	71
	4.3.4	Comportement mécanique du béton armé au jeune âge	71
	4.3.5	Comportement hydro-mécanique du béton au jeune âge	77
	4.3.6	Comportement différé du béton au jeune âge	80
4.4	Comp	oortement mécanique du béton soumis à une décalcification	83
<b>4.5</b>	Cumu	ıl des évolutions mécaniques en contexte thermo-hydro-chimique cou-	
	plé .	• • • • • • • • • • • • • • • • • • • •	86
	4.5.1	Cumul d'endommagement diffus et évolution des propriétés mécaniques	86
	4.5.2	Application à la prédiction de la durée de vie d'un ouvrage de stockagede déchets radioactifs	88
<b>4.6</b>	Bilan		92

## CHAPITRE 4. PRISE EN COMPTE DES ÉVOLUTIONS PHYSICO-CHIMIQUES SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES BÉTONS

## 4.1 Introduction

## 4.1.1 Cadre général de travail

Dans ce chapitre vont être présentés les développements faits dans le modèle de comportement mécanique du béton afin de prendre en compte l'effet des évolutions physicochimiques présentées aux chapitres 2 et 3. Comme pour les évolutions chimiques, ces travaux ont été initiés durant ma thèse en ce qui concerne le comportement du béton au jeune âge et durant mon stage de DEA pour le comportement du béton soumis à une lixiviation. Ils ont été poursuivis ces dernières années grâce à des soutiens financiers industriels mais aussi institutionnels :

- VINCI Construction Grands Projets (VCGP) *Laurent Boutillon et Lionel Linger* : comme pour les travaux sur l'hydratation, il s'agit du financement CIFRE et de l'accompagnement de la thèse de Batian Kolani (co-encadrement Alain Sellier et Gilles Escadeillas). Il s'agissait d'étendre le modèle de comportement jeune âge au cas du béton armé, no-tamment avec l'investigation du comportement de la liaison acier-béton au cours de l'hydratation.
- **Consortium groupe VINCI** (VINCI Construction Grands Projets et VINCI Construction France, Cofiroute, Concrete) - *Laurent Boutillon, Lionel Linger, Djemal Belili, Sofiane Hadji, François Cussigh* : Notre partenariat avec VINCI Construction Grands Projets s'est élargie en 2018 au groupe VINCI avec un consortium de plusieurs entités qui ont souhaité nous financer un projet de recherche de 4 ans (stage M2 et thèse CIFRE d'Yvan Thiebaut, co-encradrés par S. Multon, A. Sellier et moi-même) concernant le comportement des structures armées et précontraintes atteintes de RSI. L'objectif dans ce projet (toujours en cours) est de pouvoir comprendre et modéliser le développement de RSI et des propriétés mécaniques résiduelles d'un ouvrage armé et précontraint sous charge, les armatures et le chargement induisant une anisotropie des gonflements.
- l'Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs (ANDRA) *Xavier Bourbon et Guillaume Camps* : J'ai été en-effet impliquée après ma thèse dans un contrat passé vec l'ANDRA au sein du GL ESC (Matériaux Cimentaires). Ce contrat concernait la prédiction du comportement mécanique sous lixiviation des ouvrages de stockage radioactifs qui a permis le co-encadrement avec Alain Sellier du post-doctorat de M. El Gonouni.
- le Projet National CEOS.fr : J'ai eu la chance de pouvoir intégrer le PN CEOS.fr (Comportement et Evaluation des Ouvrages Spéciaux - Fissuration et Retrait) dès mon recrutement en 2008 sur l'axe concernant le comportement des ouvrages sous sollicitations THM (en particulier au jeune âge). Nous avons obtenu plusieurs contrats dans ce cadre entre 2008 et 2014 qui touchent plus particulièrement au chapitre 5 (application sur structures massives). Mais une partie du travail fait en fin de projet a consisté à réaliser des analyses paramétriques sur structures virtuelles (avec les modèles validés sur l'application aux structures comme nous le verrons au chapitre 5) afin d'évaluer l'impact du fluage et celui des armatures sur la fissuration au jeune âge, et ce en vue de faire évoluer les règlements à ce sujet.
- **l'ANR Mefisto** *GeM Nantes, LMT Cachan, Siame Pau, 3SR Grenoble, Oxand, CEA*: Déposée comme support scientifique du PN CEOS, l'ANR Mefisto (2009-2012) nous a permis le financement de la thèse de Pierre Souyris (co-encadrement Alain Sellier) (montant indiqué sur la figure 4.1 comprenant le salaire). Cela nous a permis d'investiguer l'effet de l'hydratation sur le comportement THM des bétons à une échelle plus fine en

se basant notamment sur les techniques d'homogénéisation afin d'en déduire des lois d'évolutions macroscopiques pertinentes.

- **l'ANR-PIA Macena** *UPPA, 3SR Grenoble, EDF, NECS, Oxand, CEA, CERIB, IFSTTAR* : Dans le cadre de Plan d'Investissement d'Avenir nous avons obtenu en 2013 un financement de l'ANR pour le projet Macena. L'objectif du projet est de prédire le comportement des enceintes de confinement nucléaire lors d'un accident grave (température maintenue à 200°C pendant 15 jours dans l'enceinte). Le financement obtenu par le LMDC dans ce cadre là a permis le financement de la thèse de Ponleu Chhun (co-encdrement Alain Sellier) (montant indiqué sur la figure 4.1 comprenant le salaire). Cette thèse nous a permis (comme nous le verrons au chapitre 5) de valider l'applicabilité du modèle de comportement au jeune âge sur une structure d'envergure, mais aussi de développer un modèle THM de comportement du béton sous température modérée, qui va être présenté ici.
- **l'ANR Mosaic** *IFSTTAR, LML, LMT* (implication personnelle seulement à 5% sur ce projet) : dans le cadre de cette ANR obtenue en 2014, j'ai seulement assisté aux réunions de suivi des campagnes expérimentales réalisées au LMDC, au LMT et à l'IFSTTAR ainsi qu'au suivi des campagnes de modélisations microscopiques réalisées au LML. L'objectif pour moi était de pouvoir en tirer des informations sur l'évolution des propriétés macroscopiques en fonction du degré de saturation afin de faire le lien avec les résultats de Macena et de proposer des lois compatibles avec les résultats des 2 projets (à température modérée pour Mosaic et à température plus élevée pour Macena).

La figure 4.1 résume les différents indicateurs associés à cette thématique en terme d'encadrement doctoral (avec % associés), de participation à des contrats industriels (avec les montants et le % d'implication), de relations avec l'international et de publications internationales (AI : revues de rang A, COI : chapitre d'ouvrage, CI : conférences avec actes).



FIGURE 4.1 – Bilan comptable des activités liées à l'effet des évolutions physico-chimiques sur le comportement mécanique des bétons

## 4.1.2 Principe général de couplage

Les évolutions chimiques et sollicitations thermo-hydriques que subit le béton au cours de sa durée de vie (du coulage jusqu'à long terme) vont affecter ses performances et son comportement mécanique. La modélisation de ces effets THC sur le comportement mécanique passe d'abord par une analyse de la nature de ces effets afin de savoir comment et à quel niveau le prendre en compte dans un modèle de comportement mécanique macroscopique. Pour les évolutions étudiées dans ce mémoire, on peut distinguer 3 effets (synthétisés dans le tableau 4.1 :

• Une modification de la microstructure : C'est le cas par exemple de l'hydratation court et long terme qui conduit à la création d'hydrates (néo-formés ou issus de rééquilibrages internes). On peut aussi considérer ici le cas de la déshydration à hautes températures (au delà de 200°C) qui conduit à une déstabilisation complète de certains hydrates (aluminates, CH) et à une perte d'eau dans les C-S-H suffisamment importante pour en modifier la structure et donc les propriétés de cohésion. On note aussi le cas de la lixiviation du calcium qui agit aussi sur une déstabilisation de certaines phases et une déstructuration progressive des C-S-H.

Cet effet de variations THC sur la microstructure est modélisée en utilisant des lois macroscopiques d'évolution des propriétés mécaniques (modules, résistances, paramètres de fluage, ...) en fonction de la variable globale pilotant l'évolution chimique.

Une micro-endommagement à l'échelle de la pâte : Lorsque le béton subit des évolutions thermo-hydriques la pâte va être soumise à des déformations qui peuvent être gênées par les granulats (phénomènes de déformation thermique différentielle par exemple) Ces incompatibilités de déformations, bien connues à l'échelle pâte-granulats, peuvent aussi être rencontrées à l'échelle des hydrates et anhydres de la pâte de ciment et conduisent à une microfissuration diffuse de la pâte. Cela peut être également le cas de bétons soumis à des gonflements internes tels que ceux induits par la RSI. Cet effet de microfissuration diffuse dans la pâte est traduite par l'introduction dans la loi de comportement (ainsi que dans la gestion de la vitesse de fluage) d'une variable d'endommagement isotrope augmentant avec la température et dont l'augmentation

d'endommagement isotrope augmentant avec la température et dont l'augmentation dépend du taux de saturation (ou avec l'avancement des réactions de gonflement pour la RSI par exemple).

• **Une "mise en précontrainte" de la pâte :** La pression capillaire induite par une variation de teneur en eau libre a un effet bénéfique sur les performances mécaniques du béton. Cet effet est pris en compte par une loi d'évolution macroscopique de la résistance en traction (la pression capillaire jouant comme une précontrainte bénéficie seulement au comportement en traction).

D'un point de vue numérique l'influence des évolutions thermiques, hydriques et chimiques du béton sur son comportement mécanique est prise en compte par un couplage faible (calcul chainé THC puis M). L'effet du comportement mécanique sur les réactions chimiques en soit peut en-effet être négligé puisqu'un tel effet n'est observé que pour de très forts taux de pression. Ce choix est plus discutable pour ce qui est de l'effet du comportement mécanique sur les propriétés de transferts. En effet la fissuration potentielle de la structure devrait affecter les cinétiques de transferts. Il est bien entendu possible, avec les modèles développés au LMDC par Alain Sellier, de considérer en partie un couplage fort avec la prise en compte de l'ouverture de fissure sur les propriétés de transferts [Rahal et al., 2017], mais cette possibilité n'a pas encore été explorée dans le cadre des études menées et présentées ici.

			Modification de micro- structure	Endommagement à l'échelle pâte-granulats	Mise en précontrainte
Hydratation	$\overline{\alpha}$		$X(\overline{\alpha})$	-	-
Décudratation	n ξ	T<200°C	NC	-	-
Desymatation		T>200°C	Χ(ξ)	-	-
Décalcification	$Ca_S$		$X(Ca_S)$	-	-
Elévation T<200°C	Т		-	$D^{TH}(T, S_l)$	-
Séchage	S <sub>l</sub>		-	NC	$S_l \downarrow => R_t \uparrow$

TABLEAU 4.1 – Effet de variations THC sur le comportement mécanique

### 4.1.3 Rappel du modèle LMDC pour les bétons durcis sains

Le modèle mécanique utilisé et adapté afin de réaliser les couplages avec les évolutions physico-chimiques présentées ici est issu de travaux menés au LMDC ces dernières années par Alain Sellier en collaboration plusieurs enseignants chercheurs : L. Lacarrière (2004-...), S. Multon et T. Vidal (2007-...), ainsi que G. Casaux-Ginestet (2011-2016). Il se base sur une loi de comportement non-linéaire prenant en compte endommagement, plasticité et comportement différé du béton.

#### Modèle d'endommagement et de plasticité

La contrainte est totale  $\sigma_{ij}$  est définie à partir de la contrainte effective sur le matériau sain  $\tilde{\sigma}_{kl}$  (Eq. 4.1) [Sellier et al., 2013].

$$\sigma_{ij} = (1 - D^{\text{TH}}) \cdot (1 - D^{\text{shear}}) \cdot \left[ (1 - D_0^t) \cdot (1 - D^t)_{ijkl} \cdot \tilde{\sigma}_{kl}^+ + (1 - D^r)_{ijkl} \cdot \tilde{\sigma}_{kl}^- \right]$$
(4.1)

Le modèle prend ainsi en compte 2 familles d'endommagements :

- Des endommagements isotropes caractérisant une mircofissuration diffuse :
  - Un endommagement thermique D<sup>TH</sup>: Comme nous le verrons au paragraphe 4.2, celui-ci permet de prendre en compte la microfissuration induite par les incompatibilités de déformations à l'échelle de la pâte hydratée et du béton.
  - Un endommagement de cisaillement D<sup>shear</sup> : Il traduit l'endommagement du béton induit par des contraintes de compression. C'est une fonction de la déformation plastique associée déterminée avec un critère de Drucker-Prager.
  - Un endommagement de traction pré-pic D<sup>t</sup><sub>0</sub>: Il traduit la microfissuration diffuse pré-pic lors d'une sollicitation de traction. Il est calculé à partir de la contrainte principale majeure de traction.

- Des endommagements anisotropes caractérisant une fissuration orientée :
  - Un endommagement de traction post-pic D<sup>t</sup> : Il traduit l'ouverture de fissures orientées sous l'effet de contraintes de tractions. Il est déterminé dans la base principale de fissuration à partir des ouvertures de fissures maximales atteintes w<sup>pl,t,max</sup> et d'une ouverture caractéristique w<sup>k,t</sup>.

$$D_{I}^{t} = 1 - \left(\frac{w_{I}^{k,t}}{w_{I}^{k,t} + w_{I}^{pl,t,max}}\right)^{2}$$
(4.2)

Les ouvertures de fissures plastiques sont déduites des déformations plastiques de traction (elle-même calculées à partir d'un critère de Rankine). Le modèle d'endommagement local est régularisé en énergie. En effet l'ouverture caractérisée est calculée à partir de la longueur de l'élément fini  $l_1$  de façon à ce que l'énergie dissipée au cours de l'endommagement localisé reste égale à l'énergie de fissuration en traction  $G_f^t$  (Eq. 4.3).

$$G_{f}^{t} \approx l_{I} \frac{(R^{t})^{2}}{2E(1-D_{0}^{t})} + R_{I}^{t} w_{I}^{pl,t,max}$$
(4.3)

Un endommagement de refermeture de fissure D<sup>r</sup> : Il est appliqué sur les contraintes de compression pour traduire la perte de transmission des contraintes de compression tant que la fissure précédemment ouverte en traction n'est pas refermée. Il est également calculé dans la base principale des ouvertures de fissures à partir de l'ouverture de fissure plastique réelle.

Dans le cas d'application sur structures massives, la méthode de régularisation peut conduire à une branche post-pic en traction trop fragile (voire un snap-back) sur les gros éléments finis (en particulier si  $l_{\rm I}$  est telle que  $w_{\rm I}^{pl,t,max}$  devienne négative dans l'équation 4.3). Afin de s'affranchir de problèmes de convergence inhérents à cela, une énergie de fissuration modifiée est introduite afin d'assurer une pente minimale de la branche descendante. Une variable d'erreur est alors construite, permettant la visualisation sur le maillage des zones à éventuellement remailler si l'erreur fait sur l'énergie de fissuration n'est pas acceptable.

Dans le cas d'application sur structures on doit également prendre en compte le fait que les hétérogénéités au sein du matériau vont conduire à un effet d'échelle probabiliste induisant une baisse des résistances avec l'augmentation de la taille de l'éprouvette ou la structure [Carpinteri et al., 1995; Rossi et al., 1994]. Les résultats obtenus sur des essais sur structures de taille relativement importante (poutre de section 50 cm x 80 cm) dans le cadre du projet national CEOS ont en-effet montré que seul cet effet sur la résistance en traction permettait d'expliquer l'occurrence de la fissuration pour un niveau de contrainte bien inférieur à la résistance mesurée sur éprouvette en laboratoire [Buffo-Lacarrière et al., 2016]. La prise en compte de cet effet dans les simulations numériques sur structures réelles sera détaillé dans le chapitre 5.

#### Modèle de fluage non linéaire

La contrainte effective pour un matériau hydraté  $\tilde{\sigma}$  est quant à elle calculée, à partir d'un modèle rhéologique reproduisant le comportement différé du béton, comme la somme de la contrainte élastique appliquée sur le squelette solide et de la contrainte induite par la dépression capillaire  $\sigma_W$  et celle induite par les pressions de gonflement RAG ou RSI  $\sigma_G$  (Eq. 4.4).

$$\tilde{\sigma}_{kl} = S^0_{klmn} \cdot \varepsilon^{el}_{mn} - \sigma_{Wkl} + \sigma_{Gkl} \tag{4.4}$$

$$\varepsilon_{mn}^{el} = \varepsilon_{mn} - \varepsilon_{mn}^{pl} - \varepsilon_{mn}^{th} - \varepsilon_{mn}^{Cr}$$
(4.5)

Où:

- $\varepsilon_{mn}$  est le tenseur de rigidité du matériau (fct° de E et v);
- $\sigma_{Wkl}$  est la contrainte hydrique qui sera déterminée en fonction de la dépression capillaire (voir paragraphe 4.3.5);
- $\sigma_{Gkl}$  est la contrainte induite par l'application de pressions de gonflement (gel de RAG ou précipitation RSI [Grimal, 2007], non détaillée dans ce mémoire);
- ε<sub>mn</sub> est la déformation totale;
- $\varepsilon_{mn}^{el}$  est la déformation élastique;
- $\varepsilon_{mn}^{pl}$  est la déformation plastique (issue de l'application des critères plastiques listés précédemment);
- $\varepsilon_{mn}^{th}$  est la déformation thermique (calculée à partir de la température subie par le matériau);
- $\varepsilon_{mn}^{Crl}$  est la déformation de fluage (issue du modèle rhéologique, voir ci-après).

Le modèle de fluage est un modèle visco-élastique non linéaire basé sur un module viscoélastique réversible de Kelvin  $\varepsilon^{Kl}$  et un module visqueux consolidant de Maxwell  $\varepsilon^{Kl}$  montés en série [Sellier et al., 2016] :

• **Module de Kelvin :** La déformation de l'étage réversible traduit le fluage court-terme du béton associé aux mouvements d'eau capillaire [Acker and Ulm, 2001; Sellier and Buffo-Lacarrière, 2009] (Eq. 4.6).

$$\dot{\varepsilon}_{mn}^{\mathrm{K}} = \frac{1}{\tau_{ref}^{\mathrm{K}} \cdot \frac{1}{\mathbb{C}^{\mathrm{W}} \cdot \mathbb{C}^{\mathrm{T},w}}} \left( \frac{\varepsilon_{mn}^{el}}{\psi^{\mathrm{K}}} - \varepsilon_{mn}^{\mathrm{K}} \right)$$
(4.6)

Où:

- $\tau_{ref}^{K}$  est le temps caractéristique
- C<sup>W</sup> et C<sup>T, w</sup> représentent l'effet de S<sub>1</sub> et de T sur la vitesse de fluage (voir paragraphe 4.2);
- $\psi^{K}$  est le module de Kelvin.
- **Module de Maxwell non linéaire :** La déformation de l'étage visqueux consolidant traduit le fluage permanent associé, entre autres, au glissement visqueux des feuillets de C-S-H [Acker and Ulm, 2001; Sellier et al., 2016] (Eq. 4.7).

$$\dot{\varepsilon}_{IJ}^{M} = \frac{\varepsilon_{IJ}^{el}}{\tau_{ref}^{M} \min(C_{I}^{C}, C_{J}^{C})}$$
(4.7)

Où:

- I, J sont les directions principales des déformations de Maxwell;
- $\tau_{ref}^{M}$  est le temps caractéristique de Maxwell;

-  $C^C$  est le coefficient de consolidation calculé en fonction de la déformation  $\epsilon^M$  selon l'équation 4.8.

$$C_{I}^{C} = \frac{1}{k^{M}} \cdot \exp\left(\frac{1}{k^{M}} \left(\frac{\varepsilon_{I}^{M}}{\varepsilon_{II}^{el}}\right)^{+}\right) \text{ et } k^{M} = \frac{\varepsilon_{ref}^{M}}{\varepsilon_{ref}^{el}} \cdot C^{T,w} C^{T,p} C^{W} C^{M}$$
(4.8)

Où:

- $\varepsilon_{ref}^{M}$  est le potentiel de fluage;
- $\epsilon_{ref}^{el}$  est la déformation élastique correspondant au chargement utilisé pour l'identification de  $\tau_{ref}^{M}$  et  $\epsilon_{ref}^{el}$ ;
- C<sup>M</sup> traduit la non-linéarité de la vitesse de fluage vis à vis de la contrainte;
- C<sup>T, *w*</sup> et C<sup>W</sup> représentent l'effet de la température et du degré de saturation sur la vitesse de fluage (voir paragraphe 4.2, Eqs. 4.13 et 4.9);
- C<sup>T, *p*</sup> représente l'effet de l'endommagement thermique sur la vitesse de fluage permanent (voir paragraphe 4.2, Eq. 4.10).

## 4.2 Comportement mécanique du béton sous sollicitations thermohydriques

#### 4.2.1 Effet de la température

La température va avoir, en plus de la déformation thermique induite, deux effets sur les propriétés mécaniques du béton : un effet sur la vitesse de fluage propre et un effet induit par un endommagement de la pâte.

La température a tout d'abord un effet physique sur la vitesse de fluage car elle modifie la viscosité de l'eau. La vitesse de fluage des étages de Kelvin et de Maxwel sont donc toutes les deux affectées par cet effet modélisé par  $C^{T,w}$ .

$$C^{T,w} = \exp\left(-\frac{E_w^a}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right)$$
(4.9)

Les variations de température au sein du matériau peuvent également conduire à un endommagement du béton. Comme rappelé en introduction du chapitre, on découple dans notre approche l'effet sur les propriétés mécaniques de températures très élevées (conduisant à la déshydratation et à la déstructuration de la pâte) de l'effet de température plus modérées pour lesquelles les variations de propriétés mécaniques sont plutôt attribuables aux conséquences d'incompatibilité de déformations à l'échelle de la pâte qu'à une déstructuration de celle-ci. Les évolutions des propriétés mécaniques considérées ici seront donc reliées aux variations de température et non aux variables caractérisant la déshydratation. Du point de vue du comportement différé du béton, ces incompatibilités de déformations vont conduire à une augmentation de la vitesse de fluage non linéaire. Cet effet est modélisé par le coefficient C<sup>T, p</sup> défini ci-dessous.

$$C^{T,p} = \exp\left(-\frac{E_w^a}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{seuil}}\right)\right)$$
(4.10)

Où:

- $E_p^a/R$  est l'énergie d'activation associée ( $E_p^a/R \approx 3000 K^{-1}$  [Ladaoui et al., 2013]);
- T<sub>seuil</sub> est la température seuil à partir de laquelle on constate un endommagement thermique (T<sub>seuil</sub> ≈ 45řC [Ladaoui et al., 2013]).

Etant liées à une micro-fissuration ou à la création de micro-défauts, l'effet de ces variations de température sur le comportement mécanique instantané est quant à lui reproduit par l'introduction d'une variable d'endommagement isotrope (D<sup>TH</sup> dans l'équation 4.1). Cet endommagement est déterminé avec l'équation 4.11 à partir du coefficient  $C_p^T$  introduit pour reproduire l'effet de cet endommagement sur la vitesse de fluage de l'étage de Maxwell (Eq. 4.10).

$$D^{\rm TH} = 1 - \frac{1}{A^{\rm TH} \left( C^{\rm T_p} - 1 \right) + 1}$$
(4.11)

 $A^{TH}$  est un paramètre de calage qui permet de contrôle le niveau d'endommagement à une température donnée (Eq. 4.12). Dans cette équation intervient le degré de saturation S<sub>l</sub> afin de limiter l'endommagement thermique dans le cas d'un matériau sec. Les incompatibilités de déformations thermiques étant en effet liées aux différences de coefficient de dilatation thermique, une pâte sèche aura un coefficient de dilatation plus faible et donc un potentiel d'incompatibilité de déformations plus faible. L'évolution de D<sup>TH</sup> en fonction de la température est donnée sur la figure 4.2 pour plusieurs degrés de saturation.

$$A^{\rm TH} = \frac{1}{C_p^{\rm T}({\rm T} = 80 \,{\rm \check{r}C}) - 1} \cdot \frac{{\rm S}_l \cdot {\rm D}_{80}^{\rm TH}}{1 - {\rm S}_l \cdot {\rm D}_{80}^{\rm TH}}$$
(4.12)

Où:

- $C_p^T(T = 80\text{ °C})$  est déterminé avec l'équation 4.10 pour une température de 80°C;
- $D_{80}^{TH}$  est l'endommagement thermique déterminé expérimentalement à 80°C en conditions saturés ([Ladaoui et al., 2013] donne  $D_{80}^{TH} = 0.1$ ).



FIGURE 4.2 – Evolution de l'endommagement thermique en fonction de la température pour différents degré de saturation [Chhun, 2017]

#### 4.2.2 Effet du degré de saturation

Le degré de saturation va tout d'abord influencer la vitesse de fluage. En effet, le fluage étant, à l'échelle microscopique, relié à des mouvements d'eau ou à des variations de pression de disjonction, celui-ci va être affecté par une baisse de saturation du matériau (conduisant à une vitesse de fluage plus faible). Les phénomènes à l'origine du fluage réversible (Kelvin) et du fluage permanent (Maxwell) étant légèrement différents (différentes échelle de mobilisation du matériau) on peut éventuellement attendre un effet également légèrement différent du degré de saturation sur les vitesses de fluage de ces deux étages. Mais par souci de simplification on supposera un effet commun, le coefficients C<sup>W</sup> des équations 4.6 (pour Kelvin) et 4.8 (pour Maxwell) étant donc dans les deux cas défini comme suit :

$$C^{W} = S_{l} \tag{4.13}$$

Cette hypothèse simplificatrice se justifie entre autres par le fait que, dans la pratique, il est difficile de discriminer cet effet sur les vitesses de chaque étage à partir d'un essai à l'échelle macroscopique, puisqu'il se superpose aux phénomènes de retrait et de fluage de dessiccation induits par  $P_l$ .

En effet, l'effet prépondérant de l'état de saturation d'un béton sur son comportement mécanique est bien entendu l'application d'une dépression capillaire sur le squelette solide conduisant à une déformation. Dans l'approche de modélisation adoptée ici, cet effet est directement pris en compte par l'introduction de la pression capillaire P<sub>l</sub> dans la loi de comportement (à travers  $\sigma_W$  dans l'équation 4.4). Cependant cette dépression capillaire va avoir également des effets indirects sur les propriétés mécaniques. On peut tout d'abord noter que, comme dans le cas des déformations thermiques, le retrait de la pâte peut conduire à une micro-fissuration par incompatibilité de déformation pâte-granulat, cet effet ayant été observé expérimentalement sur matériaux modèles par exemple dans [Bisschop and Mier, 2002], et confirmé par des analyses sous tomographe X dans le cadre du projet ANR Mosaic. Ceci conduirait donc à une perte de propriétés mécaniques que l'on pourrait traduire en terme d'endommagement (comme c'est le cas avec D<sup>TH</sup> pour l'effet de la température). Cependant, les résultats récents obtenus dans la cadre des essais menés au LMDC pour l'ANR Mosaic [BU-CHER et al., 2017] montrent au contraire une augmentation de la résistance en traction quand le degré de saturation diminue (voir figure 4.3). Cette augmentation de résistance s'explique par le fait que l'application de la dépression capillaire sur le squelette met en précontrainte la pâte [Burlion et al., 2005], effet qui est prépondérant par rapport à la perte de propriétés induite par la microfissuration.

Les essais menés au SIAME dans le cadre de Macena [Khallel, 2016] sur des bétons soumis à des températures et des degrés de saturations variables (mais contrôlées) confirment cette augmentation de résistances mais avec un effet décroissant avec la température (voir figure 4.3). Ces essais ayant également montré que l'effet du degré de saturation sur le module d'Young (indicateur macroscopique d'un endommagement) était assez limité, il apparaît cohérent de négliger l'effet au niveau macroscopique de la micro-fissuration induite par les granulats. L'effet de consolidation du matériau par le degré de saturation est donc seulement considéré, en proposant une loi d'évolution de la résistance en traction fonction du degré de saturation (Eq. 4.14).

La décroissance de l'effet de S<sub>l</sub> lorsque la température augmente est attribuée à l'effet de la température sur l'isotherme de désorption (voir paragraphe 3.3.2). En effet si la température augmente la dépression capillaire sera réduite pour un même degré de saturation. Cet effet est donc traduit dans l'équation 4.14 par le terme  $C^{Pc,T}$  qui a été défini au paraphe 3.3.2 pour prendre en compte cet effet sur les isothermes de désorption (Eq. 3.22).



FIGURE 4.3 – Evolution de la résistance en traction pour différents degrés de saturation et températures, résultats expérimentaux issus de [Khallel, 2016] et modèle issu de [Chhun, 2017]

$$\frac{\mathbf{R}_{t}}{\mathbf{R}_{0}^{t\,ref}} = 1 - \mathbf{K}^{w,\mathrm{R}t} \cdot \mathbf{C}^{\mathrm{P}c,\mathrm{T}}(\mathrm{T}) \cdot \left(\mathbf{S}_{l} - \mathbf{S}_{l}^{ref}\right)$$
(4.14)

Où:

- $R_0^{t \, ref}$  est la résistance de référence mesurée à T = T<sup>ref</sup> et S<sub>l</sub> = S<sub>l</sub><sup>ref</sup>;
- $K^{w,Rt}$  est un paramètre matériau identifié à T = T<sup>ref</sup> (0.85 pour 20°C []);
- $C^{Pc,T}(T)$  traduit la décroissance de l'effet de  $S_l$  lorsque la température augmente.

### 4.2.3 Application

Les lois d'évolutions des propriétés mécaniques et de l'endommagement en fonction de la température et de l'humidité ont été testées sur les essais réalisés dans le cadre de l'ANR Macena au SIAME [Khallel, 2016] pour les essais instantanés et au CERIB [Daval, 2015] pour les essais de fluage (fig. 4.4).

Les essais DCT ont été développés de façon à pouvoir maintenir à la fois la température et l'humidité relative constantes dans l'échantillon au cours de l'essai et se font donc sur des disques entaillés de petite taille (diamètre 15 cm, épaisseur 5 cm et entaille de 5.5 cm de long) (voir [Khallel, 2016] pour plus de détails). L'incertitude possible sur le contrôle des déplacements, de l'humidité relative réelle en fond d'entaille nous ont conduit à considérer, dans le cadre des 3 ans de la thèse de P. Chhun, que le modèle pouvait être considéré comme valable même s'il ne reproduit pas parfaitement la partie pré-pic pour les essais à haute température (fig. 4.4a).

Pour les essais de fluage (voir [Daval, 2015] pour plus de détails), l'humidité relative n'était pas contrôlée donc les éprouvettes étaient soumises à du séchage de façon concomitante à la montée en température et au chargement. Cet effet a été pris en compte dans le modèle (par modélisation du séchage en température car pas de mesures de teneur en eau en cours ou en fin d'essai) et les déformations de fluage de dessication associées sont automatiquement reproduites et permettent une bonne reproduction des déformations en cours d'essai (fig. 4.4b).



FIGURE 4.4 – Modélisation des essais mécanique en température [Chhun, 2017]

## 4.3 Comportement mécanique du béton en cours d'hydratation

### 4.3.1 Écriture incrémentale des lois de comportement

Le calcul de la contrainte subie par un matériau cimentaire en cours d'hydratation est particulier dans le sens où l'hydratation produit de nouveaux hydrates qui se forment dans une configuration déformée mais sont alors libres de contrainte. La loi de comportement ne peut donc être écrire en formulation par différentielle totale comme c'est le cas d'un matériau non évolutif. Bazant [Bažant and Prasannan, 1988] propose de prendre en compte cela en proposant la théorie de la solidification. La contrainte est ainsi calculée comme l'intégrale des contraintes agissant sur chaque hydrate, celle-ci étant fonction de l'âge de formation de l'hydrate et de l'incrément de déformation subie depuis (Eq. 4.15).

$$\sigma(t) = \int_{t'=0}^{t} S(t, t') \cdot d\alpha(t') \text{ et } S(t, t') = f\left(\varepsilon(t) - \varepsilon(t')\right)$$
(4.15)

Où:

- *t*<sup>′</sup> est la date de formation de l'hydrate;
- S est la contrainte dans l'hydrate à l'instant t;

Dans le cas d'une formulation totale, l'incrément total de contrainte élastique  $\dot{\sigma}$  subie par un matériau en cours d'hydratation se décompose en une partie induite par la variation de module élastique sous déformation constante et une partie induite par la variation de déformation pour un module élastique constant (Eq. 4.16).

$$\dot{\sigma} = \dot{E} \cdot \varepsilon + E \cdot \dot{\varepsilon} \tag{4.16}$$

En se basant sur la théorie de la solidification de Bazant, on constate que, comme les hydrates nouvellement formés pendant le pas de temps (correspondant donc à É) le sont à contrainte nulle ( $\varepsilon(t) = \varepsilon(t')$  dans l'équation 4.15), l'incrément de contrainte É  $\cdot \varepsilon$  est nul. Pour une application à une loi macroscopique la contrainte d'un matériau en cours d'hydratation doit donc être écrite selon l'équation 4.17.

$$\sigma(t) = \int_0^t \dot{\sigma}(\tau) d\tau = \int_0^t \mathbf{E}(\tau) \cdot \dot{\varepsilon}(\tau)_{el} d\tau$$
(4.17)

Afin d'illustrer l'erreur qui peut être faite à utiliser une loi de comportement en écriture totale pour un matériau en cours d'hydratation, la figure 4.5 présente le développement de la contrainte subie par un barreau isolé thermiquement, bloqué aux deux extrémités, et soumis à une hydratation. Il subit ainsi un échauffement puis un refroidissement (à partir de 20h) qui induisent des contraintes par blocage des déformations thermiques associées. On constate qu'en utilisant une écriture totale  $\sigma(t) = E(t) \cdot \varepsilon(t)$  on obtient pas de contraintes de traction et de fissuration du barreau comme classiquement observé dans ce genre de cas.





Le calcul de la contrainte effective au sens de l'endommagement (introduite à l'équation 4.4 du paragraphe 4.1.3) doit donc se faire en incrémental.

$$\dot{\tilde{\sigma}}_{kl} = \dot{\sigma}_{kl}^{el} - \dot{\sigma}_{kl}^{W} + \dot{\sigma}_{kl}^{G} \text{ et } \dot{\sigma}_{kl}^{el} = S_{klmn}^{0} \cdot \dot{\varepsilon}_{mn}^{el}$$
(4.18)

#### 4.3.2 Comportement élastique du béton au jeune âge

Une conséquence importante de l'hydratation sur le comportement mécanique des bétons est l'évolution des propriétés mécaniques au cours du développement de la microstructure. Dans les différentes études menées ces dernières années, la modélisation de l'évolution des caractéristiques mécaniques s'est faite, comme cela a pu être le cas pour le comportement hydrique des bétons (chapitre 3), à deux échelles.

Une échelle fine tout d'abord, échelle à laquelle les techniques d'homogénéisation permettent de faire un lien clair entre le développement des hydrates, prédit par le modèle d'hydratation présenté au chapitre 2, et l'évolution des propriétés élastiques. L'objectif d'une étude à cette échelle était de s'intéresser au passage à l'état solide (comportement au voisinage du seuil de percolation) ainsi que de pouvoir accéder, à partir des propriétés élastiques homogénéisées, aux évolutions de propriétés hygro-mécaniques telles que le coefficient de Biot (comme nous le verrons au paragraphe 4.3.5) pour lesquelles des essais au jeune âge sont peu réalisables.

Une échelle plus macroscopique ensuite, échelle à laquelle des lois d'évolution doivent être identifiées afin d'être utilisables pour le calcul de structures massives (nécessitant donc une implantation numérique simple, robuste et peu demandeuse en temps de calcul).

# Étude des propriétés élastiques à l'échelle de la pâte par homogénéisation avec prise en compte de la percolation

A l'échelle de la pâte tout d'abord, les propriétés élastiques sont donc prédites par l'utilisation du modèle auto-cohérent pour lequel le modèle d'Eshelby est appliqué en considérant la phase homogénéisée comme matrice et tour à tour chaque élément comme inclusion (Eq. 4.19). Ces hypothèses conduisent donc à un système implicite.

$$k_{hom} = \frac{\sum_{r=1}^{n} f_r k_r \left(1 + \alpha_0 \left(\frac{k_r}{k_0} - 1\right)\right)^{-1}}{\sum_{r=1}^{n} f_r \left(1 + \alpha_0 \left(\frac{k_r}{k_0} - 1\right)\right)^{-1}} \text{ et } \mu_{hom} = \frac{\sum_{r=1}^{n} f_r \mu_r \left(1 + \beta_0 \left(\frac{\mu_r}{\mu_0} - 1\right)\right)^{-1}}{\sum_{r=1}^{n} f_r \left(1 + \beta_0 \left(\frac{\mu_r}{\mu_0} - 1\right)\right)^{-1}}$$
(4.19)

Où:

- *k<sub>hom</sub>* et *mu<sub>hom</sub>* sont les caractéristiques du milieu homogénéisé;
- *k<sub>r</sub>* et *mu<sub>r</sub>* sont les caractéristiques de la phase r;
- *f<sub>r</sub>* est la fraction volumique de la phase r;
- $\alpha_0$  et  $\beta_0$  sont des paramètres du modèle autocohérents définis à partir des caractéristiques du milieu homogénéisé qui est ici considéré comme la matrice (Eq. 4.20). Ce sont ces termes qui rendent le système implicite.

$$\alpha_{0} = \frac{3k_{hom}}{3k_{hom} + 4\mu_{hom}} \text{ et } \beta_{0} = \frac{6k_{hom} + 12\mu_{hom}}{15k_{hom} + 20\mu_{hom}}$$
(4.20)

Dans l'application de ce modèle pour la prédiction du développement des propriétés élastiques au cours de l'hydratation, une attention particulière doit être portée au rôle de l'eau. On retrouve dans la littérature indépendamment des études considérant qu'il faut prendre en compte le coefficient de compressibilité de l'eau [Haecker et al., 2005; Smilauer and Bittnar, 2006; Stefan et al., 2010] et d'autres le négligeant considérant que l'eau est drainée [Bernard et al., 2003b; Sanahuja et al., 2007]. Cette prise en compte ou non de l'eau dans le calcul d'homogénéisation n'est pas sans conséquences, notamment sur la prédiction du coefficient de Poisson. On montre en-effet que le coefficient de Poisson dans le cas d'un matériau drainé (donc sans effet de la compressibilité de l'eau) part d'une valeur assez faible pour croître avec l'hydratation. Alors que dans le cas d'un matériau non drainé il part d'une valeur proche de 0.5 (matériau peu compressible) pour décroître avec l'hydratation [Bernard et al., 2003b; Souyris, 2012] (voir Fig. 4.6).

Il apparaît donc que seule une formulation poromécanique vraie permettrait de reproduire la réponse élastique d'une pâte en cours d'hydratation (surtout pour les faibles degrés d'hydratation pour lesquels le squelette est très compressible) en prenant en compte les mouvements d'eau induits par la déformation du squelette solide. Cependant, dans une approche analytique telle que celle proposée par le schéma auto-cohérent on peut se placer dans l'une des deux conditions extrêmes (système drainé ou non drainé) en fonction du type d'essai modélisé. Par exemple dans le cas d'essais de mesures de modules élastiques via techniques ultrasoniques [Boumiz et al., 1996; Bourissai, 2010] on se placera plutôt en conditions non drainées puisque la vitesse de propagation des ondes acoustiques ne conduit pas à un drainage de l'eau. Ceci explique par ailleurs que ces mesures donnent des valeurs de modules généralement plus élevées qu'un essai mécanique. Dans le cas d'essai statique, la vitesse de chargement (relativement lente) permet d'assimiler l'essai à des conditions drainées [Baroghel-Bouny et al., 1999; Bernard et al., 2003b; Rougelot et al., 2009] .

#### CHAPITRE 4. PRISE EN COMPTE DES ÉVOLUTIONS PHYSICO-CHIMIQUES SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES BÉTONS



FIGURE 4.6 – Comparaison des prédiction du coefficient de Poisson avec le modèle auto-cohérent en conditions drainées et non drainées [Souyris, 2012]

Bien qu'il s'avère bien adapté pour représenter la pâte à cette échelle, l'utilisation du modèle auto-cohérent seul conduit cependant à une surestimation du module d'Young pour des fortes teneurs en ciment (E/C<0.5) quelque soit l'essai modélisé (avec un effet plus marqué dans le cas de conditions non-drainées donc pour des essais acoustiques). Une première approche pour résoudre cette surestimation consiste à utiliser des formes de particules non sphériques [Sanahuja et al., 2007], ce qui permet d'augmenter la porosité critique en dessous de laquelle les propriétés élastiques sont non nulles.

Une autre approche consiste à expliquer cette surestimation par le fait que pour obtenir des propriétés élastiques non nulles à l'échelle du VER il faut qu'il y ait une percolation mécanique des phases solides. Cette notion de percolation peut alors être introduite en utilisant des algorithmes de percolation numérique [Bourissai, 2010; Smilauer and Bittnar, 2006; Stefan et al., 2010; Torrenti and Benboudjema, 2005]. Ces algorithmes de propagation permettent d'obtenir une probabilité de percolation mécanique à chaque instant en fonction de la quantités de phases solides et de l'avancement de l'hydratation (les hydrates étant les éléments permettant la percolation mécanique entre 2 phases solides). Ils sont cependant assez lourds à utiliser c'est pourquoi nous avons choisi de proposer une loi de percolation fonction du degré d'hydratation afin de reproduire cet effet de façon analytique.

La fonction de percolation  $P_p$  est utilisée pour séparer les phases solides en phases percolées mécaniquement et phases solides non percolées (respectivement  $f_r^P$  et  $f_r^{NP}$  dans l'équation 4.21). Contrairement à ce qui est proposé dans la littérature pour l'application de ces algorithmes [Stefan et al., 2010] les phases non percolées seront capables de transmettre les contraintes hydrostatiques. Les phases percolées quand à elles seront capables de transmettre à la fois les contraintes hydrostatiques et de cisaillement (voir Fig. 4.7). Cela se traduit par l'équation l'utilisation des paramètres  $f_r^P$ ,  $f^N P_r$ ,  $k_r^P$ ,  $k^N P_r$ ,  $\mu_r^P$  et  $\mu_r^{NP}$  définis par les équations 4.21 et 4.22 dans le calcul du modèle autocohérent pour les phases solides (ciment anhydre, portlandite, aluminates, CSH).

$$f_r^{\rm P} = {\rm P}_p \cdot f_r \,\,{\rm et}\, f_r^{\rm NP} = (1 - {\rm P}_p) \cdot f_r$$
(4.21)

$$k_r^{\rm P} = k_r^{\rm NP} = k_r, \ \mu_r^{\rm P} = \mu_r \text{ mais } \mu_r^{\rm NP} = 0$$
 (4.22)

Où:

- $f_r^{\rm P}$  et  $f_r^{\rm NP}$  sont respectivement les fractions percolées et non percolées de la phase r;
- $\forall r = \{anhydres, portlandite, aluminates, C-S-H HD et C-S-H LD\}.$



FIGURE 4.7 - Illustration de l'effet de la fonction de percolation Pp sur les phases solides de la pâte

Afin de traduire l'effet cohésif créé par les hydrates entre les phases solides, la fonction de percolation doit tout d'abord dépendre de la variable caractérisation l'hydratation (le degré d'hydratation moyen  $\bar{\alpha}$  obtenu avec le modèle d'hydratation du chapitre 2).

$$P_p = \left(\frac{\bar{\alpha}}{\bar{\alpha}_p^{CT} \left(1 - f_G\right)}\right)^{(1/m)} \tag{4.23}$$

Où:

- *f*<sub>G</sub> est la fraction de granulats;
- $\bar{\alpha}_n^{cr}$  et *m* sont des paramètres matériau.

L'application de cette approche de percolation sur le modèle autocohérent conduit à une bonne estimation de l'évolution du module d'Young de la pâte, y compris en conditions non drainées pour lequelles le modèle auto-cohérent surestime très largement les propriétés élastiques au jeune âge. La comparaison des résultats du modèle avec les mesures expérimentales de [Boumiz et al., 1996] est presentée à la figure 4.8.



FIGURE 4.8 – Prédiction de l'évolution des modules élastiques avec le modèle avec la fonction de percolation (trait plein) et sans (trait pointillé) en conditions non-drainées et drainées [Souyris, 2012], points expérimentaux issus de [Boumiz et al., 1996]

La percolation mécanique étant obtenue plus rapidement lorsque la fraction de solide augmente il faut également prendre en compte l'effet positif de la présence de granulats. En-effet, comme le montre la figure 4.9 les granulats permettent un pontage des phases solides qui donne une percolation plus grande que la pâte seule pour un même degré d'hydratation. Cet effet ne pouvant être reproduit par l'utilisation du modèle de Mori-Tanaka (utilisé classiquement pour prédire les propriétés du mortier à partir de la pâte comme nous le verrons au paragraphe suivant), la fonction de percolation doit dépendre de la quantité de granulats. C'est pourquoi la fraction de granulats est introduite dans la fonction de percolation à l'équation 4.23, et son effet est illustré à la figure 4.9.



FIGURE 4.9 – Illustration de l'effet des granulats sur la percolation Pp de la pâte

#### Homogénéisation à l'échelle du mortier et du béton

Le passage à l'échelle du mortier puis du béton se fait classiquement par l'application du modèle de Mori-Tanaka pour lequel la matrice est la pâte de ciment et les inclusions sont le sable et les granulats ( $\alpha_0$ , $\beta_0$ ,  $k_0$  et  $\mu_0$  dans l'équation 4.19 sont donc associés à la pâte) (Fig. 4.10).



FIGURE 4.10 - Schéma de principe de l'homogéneisation multi-échelle utilisée

La prédiction de l'évolution des propriétés élastiques à partir de cette homogénéisation à 3 niveaux avec prise en compte de la percolation a été notamment validée sur des essais réalisés sur pâte, mortier et béton.



FIGURE 4.11 – Validation de la méthode d'homogénéisation à 3 niveaux [Souyris, 2012]

#### Lois d'évolution des propriétés instantanées à l'échelle de la structure

Comme expliqué en introduction de cette partie, l'intérêt de cette étude multi-échelle était de pouvoir prédire le développement des propriétés au très jeune âge, à des degrés d'hydratation faibles pour lesquels on dispose généralement de peu de résultats expérimentaux. L'objectif étant d'affiner l'identification de lois d'évolutions macroscopiques afin qu'elles puissent être utilisées avec un minimum d'essais nécessaires à l'identification des paramètres dépendant de la formulation. Il est courant dans la littérature d'utiliser des lois reliant les propriétés mécaniques à une fonction puissance du degré de réaction (égal à 1 en fin d'essai) [De Schutter, 1999]. Ces lois prennent le parti de traduire le phénomène de percolation mécanique ([Torrenti and Benboudjema, 2005]) de façon macroscopique par l'utilisation d'un degré d'hydratation seuil à partir duquel les propriétés commencent à se développer.

Dans notre cas, afin d'être applicable aux liants composés, on se propose d'exprimer ces lois en fonction du degré d'hydratation moyen défini à partir de la quantité d'hydrates comme présenté au chapitre 2 (Eq. 2.21). Ceci permet de pouvoir prendre en compte une évolution des propriétés mécaniques même à long terme (voir rééquilibrage des liants fortement substitués au chapitre 2). On propose donc d'utiliser l'équation 4.24.

$$X(t) = X_{ref} \cdot \left(\frac{\overline{\alpha}(t) - \overline{\alpha}_s}{\overline{\alpha}_{ref} - \overline{\alpha}_s}\right)^{n_X}$$
(4.24)

Où:

- X(t) est la propriété mécanique à l'age considéré;
- *α*(*t*) est le degré d'hydratation moyen à ce même âge issu du modèle d'hydratation multiphasique présenté au chapitre 1 (eqs. 2.1 et 2.21);
- X<sub>ref</sub> est la propriété mécanique à un âge de référence (par ex. 28j);
- $\overline{\alpha}_{ref}$  est le degré d'hydratation moyen à ce même âge de référence;
- $\overline{\alpha}_s$  est le degré d'hydratation seuil traduisant la percolation mécanique;
- $n_X$  est l'exposant associé à la propriété X (voir tableau 4.2).

Dans cette loi, le paramètre  $n_X$  ne dépend pas du matériau mais seulement de la propriété mécanique considérée. Il est identifié pour le module d'Young sur le résultat de la méthode d'homogénéisation avec percolation (fig. 4.12), et pour les résistances sur plusieurs formulations différentes de béton (fig. 4.13). Les résultats sont présentés dans le tableau 4.2.



FIGURE 4.12 – Identification d'une loi macroscopique pour l'évolution du module d'Young. Mesures issues de [Kolani, 2012; Souyris, 2012], évolution prédite par homogénéisation en noir issus de [Souyris, 2012] et loi identifiée en rouge

On peut cependant remarquer que ces lois basées sur un seuil de percolation mécanique explicite conduisent pour les bétons à une surestimation du module entre les degrés d'hydratation de 0.2 et 0.4 pour les bétons, alors que les valeurs de degré seuil de percolation identifiées semblent adapté aux résultats de résistance (voir figure 4.13). La prédiction des propriétés élastiques au très jeune âge reste donc un phénomène complexe à prendre en compte et une modélisation macroscopique ne permettrait de l'appréhender plus finement qu'à travers des calculs de poromécanique permettant de prendre en compte les mouvements de l'eau (et donc de s'affranchir du choix entre configuration parfaitement drainée ou non drainée, configurations qui conduisent à des comportements différents de part l'effet du module de compressibilité de l'eau).

Cette loi est testée sur 2 autres formulations étudiées dans les différents travaux menés sur ce sujet (+ le mortier étudié dans ma thèse) et les paramètres pour les bétons testés sont donnés dans le tableau 4.2. On constate que les paramètres identifiés à partir de l'homogénéi-sation pour le module d'Young ( $\alpha_{seuil}$  et  $n_E$ , tableau 4.2) sont également valables pour les 2 autres formulations.

#### CHAPITRE 4. PRISE EN COMPTE DES ÉVOLUTIONS PHYSICO-CHIMIQUES SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES BÉTONS

On constate également qu'une même valeur de  $n_{Rc}$ ,  $n_{Rt}$  et  $n_{Gf}$  permet de reproduire les évolutions des résistances pour les 3 matériaux testés. L'effet du type de ciment semble donc ici seulement dans la prise en compte des cinétiques de développement du degré d'hydratation moyen. Dans le cas de simulations de structures en phase études, phase pour laquelle il est difficile de réaliser des essais de maturométrie sur les différentes formulations envisagées, les seuls paramètres à identifier seront donc les caractéristiques à un âge donné (28j par exemple, valeurs données dans le tableau 4.2 pour les matériaux testés).



FIGURE 4.13 – Evolution des propriétés mécaniques en fonction du degré d'hydratation pour un mortier, le béton des structures RG du PN CEOS.fr, et pour le BHP bas-pH à base de laitiers (Mesures issues de [Buffo-Lacarrière, 2007; Kolani, 2012; Leung Pah Hang, 2015])

TABLEAU 4.2 – Identification des paramètres des lois d'évolution des propriétés instantanées en fonction de l'hydratation

	Mor	tiers	Bétons					
	PS	LBL	PS	CEOS	Bas-pH	BHP	Détermination	
$\overline{\alpha}_s$	0	.3	0.15			fig. 4.12		
$n_{\rm E}$			0.4				fig. 4.12	
$n_{ m Rc}$	1				fig. 4.13			
$n_{\mathrm{R}t}$	0.7				fig. 4.13			
n <sub>Gf</sub>	0.7			fig. 4.13				
$\overline{\alpha_{28j}}$	0.83	0.7	0.83	0.9	0.57	0.8	Modèle d'hydratation	
E <sub>28<i>j</i></sub> (GPa)	30	24	38	35	39	38	Essai macro	
$Rc_{28j}$ (MPa)	-	29	-	65	66	-	Essai macro	
$Rt_{28j}$ (MPa)	-	2.4	-	5	3.7	-	Essai macro	
$Gf_{28j}$ (MPa)	-	50	-	160	-	-	Essai macro	

## 4.3.3 Fissuration du béton en cours d'hydratation

Outre la variation des propriétés instantanées gérant l'apparition de la fissuration et sa propagation (module d'élasticité, résistances, énergie de fissuration) la prise en compte de l'hydratation sur l'état de fissuration du matériau en cours d'hydratation nécessite également une mise à jour spécifique des variables internes. Afin de montrer l'importance de cette mise à jour, un exemple est schématisé dans la figure 4.14 pour un état de fissuration. Supposons que la fissuration est modélisée à l'aide d'une variable d'endommagement mécanique (d) définie comme le rapport volumique moyen (sur le volume élémentaire représentatif REV) entre les vides dus aux fissures (Vc) et le solide (Vs). Comme l'hydratation du liant produit des hydrates non endommagés, le volume des fissures n'est pas modifié par une variable d'état chimique choisie pour décrire le durcissement chimique, tandis que le volume des solides augmente proportionnellement au développement de l'hydratation. Cette observation physique peut être modélisée à l'aide d'état conduit à une diminution des dommages mécaniques sous l'effet de l'hydratation (qui agit alors comme un processus d'auto-cicatrisation de la pâte de ciment). En effet lorsque l'endommagement localisé de traction D<sup>t</sup> diminue sous l'effet de l'hydratation, l'ouverture de fissure  $w^{k,t}$  est recalculée en inversant l'équation 4.2.

$$\frac{\partial \mathbf{D}^t}{\partial \overline{\mathbf{\alpha}}} = -\frac{\mathbf{D}^t}{\overline{\mathbf{\alpha}}} \tag{4.25}$$



FIGURE 4.14 – Illustration de la prise en compte de l'hydratation sur l'endommagement [Buffo-Lacarrière and Sellier, 2011]

## 4.3.4 Comportement mécanique du béton armé au jeune âge

#### Modélisation de l'interface acier-béton au jeune âge

L'approche retenue dans le cadre de la thèse de Batian Kolani pour modéliser l'évolution du comportement du béton armé au cours de l'hydratation, et en particulier la mobilisation progressive de l'acier par le biais de l'interface acier-béton, a été d'utiliser un élément d'interface volumique, dont le comportement est élasto-plastique avec écrouissage négatif et vieillissant, qui occupe le volume réel de l'armature et au centre duquel on fait passer un élément barre qui a les propriétés de l'acier. Les lois de comportement d'interface pourraient être modélisées par des éléments joint élasto-plastiques avec des critères de type Mohr Coulomb. Toutefois l'usage de ces éléments nécessite un maillage orienté des surfaces servant d'appui au modèle joint. De plus les lois élasto-plastiques associées aux éléments joints sont assez similaires aux lois utilisées dans les éléments volumiques élasto-plastiques. Il est donc possible de modéliser les interfaces directement par des éléments volumiques, ce qui permet de conserver un maillage continu dans la zone d'interface. Le modèle développé est un modèle élasto-plastique non associé à écrouissage isotrope basé sur un critère de Drucker-Prager dont la cohésion initiale  $C_0$  et le module d'écrouissage H vont dépendre de l'hydratation [Kolani, 2012]. Afin de déterminer l'évolution de la cohésion initiale  $C_0$  et du module d'écrouissage isotrope H en fonction de l'hydratation, des essais d'arrachement à différents âges ont été réalisés. Les paramètres  $C_0$  et H sont déterminés par analyse inverse en modélisant numériquement des essais pull-out réalisés à différents âge. Sur le maillage montré à la figure 4.15 on voit l'élément d'interface volumique en couleur bleue, l'élément barre représentant l'acier en couleur rouge et le reste du maillage qui représente le béton.



FIGURE 4.15 - Principe de modélisation des armatures et de l'interface acier-béton

Le modèle mécanique de comportement du béton au jeune âge présenté précédemment est utilisé pour le comportement du béton, la barre d'acier est considérée comme élastique, donc seuls les paramètres de la loi d'interface sont à identifier. Le résultat de l'identification est illustré, en comparaison aux essais sur la figure 4.16 et les paramètres  $C_0$  et H sont tracés en fonction du degré d'hydratation (calculé pour chaque échéance d'essai) sur la figure 4.17.



FIGURE 4.16 – Lois d'arrachement par essais pull-out pour plusieurs degré d'hydratation (courbes pleines = essais, courbes pointillés = modèle)

#### CHAPITRE 4. PRISE EN COMPTE DES ÉVOLUTIONS PHYSICO-CHIMIQUES SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES BÉTONS

L'évolution de ces caractéristiques au cours de l'hydratation est modélisée, comme pour les autres propriétés mécaniques par une loi puissance dépendant du degré d'hydratation (équation 4.24) et les paramètres identifiés pour l'adhérence sont présentés dans le tableau 4.3. On peut s'interroger sur la pertinence d'exposants aussi grands pour la loi d'évolution des paramètres, ces exposants étant ici "forcés" par le fait qu'il ait été choisi de conserver un seuil de percolation unique sur toutes les propriétés mécaniques (égale à 0.15 pour les bétons), seuil de percolation qui convenait relativement bien aux propriétés élastiques comme illustré sur la figure 4.13. En effet il est pour l'heure délicat de remettre en cause ce choix de valeur de percolation unique faute de résultats ou d'études sur le développement de ces propriétés spécifiques d'adhérence sont disponibles au voisinage de la percolation permettant de comprendre la phénoménologie du développement de l'adhérence au très jeune âge.



FIGURE 4.17 – Evolution des paramètres de la loi d'interface en fonction de l'hydratation (points expérimentaux issus de [Kolani, 2012])

TABLEAU 4.3 – Identification des paramètres des lois d'évolution des propriétés d'interface en fonction de l'hydratation pour le béton CEOS

	C <sub>0</sub>	Н	Détermination
$n_x$	2.5	4	fig. 4.17
X <sub>28j</sub>	85 MPa	-110 MPa	fig. 4.17
$\overline{\alpha}_s$	0	.15	id cara. inst. (tableau 4.2)
$\overline{\alpha_{28j}}$		0.9	Modèle d'hydratation

Le modèle a ensuite été testé sur la prédiction d'un essai tirant réalisé à un âge intermédiaire aux deux âges utilisés pour l'identification des lois d'évolution (degré d'hydratation de 0.6) et les résultats présentés à la figure 4.18 montrent que la loi d'interface élasto-plastique vieillissante permet de reproduire le comportement de cette mini-structure.

#### CHAPITRE 4. PRISE EN COMPTE DES ÉVOLUTIONS PHYSICO-CHIMIQUES SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES BÉTONS



FIGURE 4.18 – Application à la modélisation d'un essai tirant au jeune âge

# Application à l'étude de l'effet du ferraillage sur la fissuration des structures armées au jeune âge

Le principe de modélisation de cette interface acier-béton au jeune âge a été validé, comme nous le verrons au chapitre 5, par comparaison des résultats de déformations et état de fissuration au jeune âge de structures massives armées obtenus par la modélisation et issus des essais structurels réalisés dans le cadre du projet national CEOS (géométrie reproduite sur la figure 4.19 et résultats présentés au chapitre 5).



FIGURE 4.19 – Géométrie des structures RG et dimensions [Buffo-Lacarrière et al., 2014]

Mais les travaux menés dans le cadre du projet CEOS ont aussi été l'occasion d'utiliser la modélisation pour des études paramétriques permettant de mettre en évidence l'effet du ferraillage (taux de ferraillage et enrobage) sur le développement de la fissuration au jeune âge, la seule analyse des résultats expérimentaux n'ayant pu permettre d'évaluer cet effet. En effet les structures réalisées, présentant pourtant plusieurs cas de ferraillage, avaient été coulées à des périodes différentes de l'année et avec des conditions aux limites thermiques différentes (notamment au niveau de la protection contre le flux solaire), ce qui a conduit à des sollicitations thermiques différentes (échauffement moindre pour certaines, cinétiques de refroidissement différentes). Les différences de comportement observées en terme de fissuration ne pouvaient pas être amputées de façon discriminante au ferraillage. Nous avons donc été sollicités afin de réaliser des études paramétriques numériques sur des structures virtuelles ayant toutes été soumise à la même histoire thermique. Le béton est le même que celui utilisée dans le projet CEOS [Buffo-Lacarrière et al., 2016] et les conditions aux limites thermiques ont été idéalisées (température extérieure constante, pas de flux solaire, isolation et coffrage sur toutes les faces enlevées 48h après le coulage). La géométrie a aussi été simplifiée puisque les têtes d'ancrage des butons n'ont pas été modélisées et remplacées thermiquement par une isolation des extrémités du tirant (de façon à reproduire une température plus élevée dans les parties extrêmes du tirant) et mécaniquement en idéalisant leur effet par un blocage parfait du béton (voir figure 4.20).



FIGURE 4.20 - Géométrie et conditions de blocage des structures virtuelles (RGv)

On peut tout d'abord observer le développement des contraintes au sein de l'acier obtenu par la modélisation des 5 premiers jours après le coulage (date à laquelle l'état de fissuration se stabilise). Dans la structure de référence (RG8v comprenant un taux de ferraillage de 2% et un enrobage de 30 mm), on constate sur la figure 4.21 que des contraintes de compression se développent dans l'acier au cours de l'échauffement du béton.



FIGURE 4.21 – Développement des contraintes dans l'acier au cours de l'essai virtuel de retrait gêné RG8v

En effet dans cette structure (comme cela peut être le cas sur des structures pour lesquelles les ancrages des aciers se font dans une zone plus massive) les zones extrêmes du tirant sont soumises à une élévation de température plus importante (du fait de la massiveté des têtes reproduite ici par une isolation thermique) et donc à une développement des propriétés mécaniques du béton plus rapide. L'acier s'ancre donc rapidement à ses extrémités, bloquant ainsi ses déformations thermiques dans la zone tirant. On constante également que l'acier reste comprimé même lors de la mise en traction du béton et lors de la première fissure (en dehors de la zone d'ancrage de la fissure), et qu'il faut attendre une forte densité de fissures localisées et ouvertes (comme observée à 110h) pour que l'acier soit entièrement tendu dans la zone tirant.

L'étude numérique idéalisée en termes de conditions aux limites thermiques et mécaniques a également été faite sur 2 autres structures avec des configurations de ferraillage différents : même enrobage et un taux de ferraillage plus faible (0.6%) pour la structure RG9v et le même taux de ferraillage mais un enrobage plus important (50 mm) pour le RG10v. Concernant l'impact de ce ferraillage sur la fissuration (voir figure 4.22), on constate tout d'abord que le ferraillage n'influence pas l'instant d'apparition de la première fissure localisée. Une diminution du taux de ferraillage conduit (passage de RG8v à RG9v), comme attendu, à des fissures moins nombreuses mais plus ouvertes. On constate également que dans ce cas, les fissures (initiées à cœur comme dans le cas du RG8v) ne sont pas stoppées par le lit d'armatures et se propagent jusqu'à la surface, alors qu'elles se diffusent après le lit d'armatures pour le taux de ferraillage plus important (RG8v et RG10v). L'effet de l'enrobage seul (RG8v-RG10v) est bien plus modéré puisqu'il ne modifie que très peu le faciès de fissuration, conduisant simplement à une très légère diminution de l'ouverture des deux fissures majeures.



FIGURE 4.22 - Effet du taux de ferraillage et de l'enrobage sur le faciès de fissuration au cours du temps

Enfin, on peut également s'intéresser à l'effet du ferraillage sur le profil de contraintes de cisaillement développées dans l'interface au moment de la fissuration et du transfert des efforts du béton vers l'acier. La figure 4.23 présente ce profil le long de l'armature principale inférieure dans le RG8v et le RG9v 110 heures après le coulage, c'est à dire lorsque la fissuration est stabilisée. On constate que pour la structure la moins armée (RG9v à 0.6%) on a bien une plastification de l'interface est une contrainte de cisaillement constante dans la zone de réancrage de l'acier autour de la fissure (comme c'est classiquement le cas dans les calculs règlementaires). Par contre, pour le cas le plus armé (RG9v à 2%), du fait de fissures plus nombreuses et moins ouvertes, la contrainte développée dans l'interface n'atteint pas la limite de plastification et l'interface reste donc en domaine élastique et la contrainte évolue linéairement dans la zone de réancrage de l'acier.



FIGURE 4.23 - Effet du taux de ferraillage sur la répartition des contraintes de cisaillement

## 4.3.5 Comportement hydro-mécanique du béton au jeune âge

L'originalité du modèle de comportement hygro-mécanique développé ces dernières années au LMDC réside notamment en l'utilisation d'une approche poro-mécanique permettant de voir les déformations d'origine hydrique comme des déformations du squelette solide sous l'effet d'une dépression capillaire (voir eq. 4.4) [Sellier and Buffo-Lacarrière, 2009]. Lors d'un essai de fluage en conditions de dessiccation, la déformation totale se révèle plus importante que la somme des déformations élastiques, de fluage endogène et de retrait de dessiccation (effet Pickett). En se basant sur notre approche de poro-mécanique du retrait hydrique, cette déformation supplémentaire observée en conditions de dessiccation sous charge peut être interprétée comme un supplément de retrait. En effet, lors d'un essai de retrait sur une éprouvette non chargée, une micro-fissuration va se développer au fur et à mesure du développement de la déformation de retrait sous l'effet de blocages locaux par les hétérogénéités du matériau (figure 4.24), gênant ainsi la transmission de la pression capillaire au squelette solide. Lorsqu'une contrainte est appliquée, la micro-fissuration dans la direction de la charge se referme et la transmission de la dépression capillaire s'en retrouve accrue.



FIGURE 4.24 – Hétérogénéités à l'échelle mesoscopique et conséquences en termes de transmission de la dépression capillaire à l'échelle macroscopique [Sellier et al., 2016]

L'effet d'une contrainte extérieure de compression sur la transmission de la dépression capillaire (mis en évidence sur la figure 4.24) s'applique donc ici sur l'incrément de dépression capillaire de façon à ce que dans le cas d'un matériau séché sous une contrainte donnée (et ayant donc subi un retrait important dans la direction chargée) ne voit pas l'amplitude du retrait subi décroitre après déchargement (eq. 4.26).

$$\dot{\sigma}_{\rm I}^{\rm W} = \frac{\partial (b_w S_l P_l)}{\partial t} \left( 1 + \frac{|\tilde{\sigma}_{\rm I}|}{\sigma_{dc}} \right) \tag{4.26}$$

Où:

- $\dot{\sigma}_{I}^{W}$  est l'incrément de contrainte hydrique dans la direction principale de la contrainte effective au sens de l'endommagement mais totale au sens poro-mécanique  $\tilde{\sigma}_{I}$ ;
- *b<sub>w</sub>* est le coefficient de Biot;
- $\sigma_{dc}$  est un paramètre matériau.

Cette approche a été testée sur plusieurs essais et notamment les essais de Granger [Granger, 1995] sur le béton de Chooz (essais pour lesquels des profils hydriques et perte de masse au cours du temps étaient disponibles pour identifier correctement les paramètres de transports hydriques). La figure 4.25 illustre l'application de cette approche unifiée, dans laquelle le paramètre  $\sigma_{dc}$  (avec pour ce béton  $\sigma_{dc} = 14.7$ MP*a*) est le seul paramètre à identifier pour reproduire le fluage total en conditions de dessication à partir de l'approche poromécanique.



FIGURE 4.25 – Modélisation unifiée des déformation hygro-mécaniques sur béton durci, valeurs expérimentales issues de [Granger, 1995] et modélisation issue de [Sellier and Buffo-Lacarrière, 2009]

Dans le cadre de bétons soumis à des évolutions chimiques (hydratation) et thermiques, le coefficient de Biot, le degré de saturation et la dépression capillaire vont être modifiés au cours du temps. Le degré de saturation est un résultat direct du modèle d'hydratation et de séchage (qui gère de façon concomitante la consommation d'eau issue de l'hydratation, le raffinement de porosité et la perte d'eau par séchage externe).

Le coefficient de Biot est supposé constant en fonction de la température mais va être modifié par le développement de la microstructure. Cette évolution du coefficient de Biot vis-à-vis de l'hydratation est difficile à identifier expérimentalement et l'utilisation des méthodes d'homogénéisation présentées précédemment montrent ici leur intérêt pour un passage à l'échelle du matériau de structures. Le coefficient de Biot peut en-effet être calculé à partir des modules de compressibilité du béton en conditions drainées  $(k_d)$  et de celui du squelette solide seul  $(k_s)$  selon l'équation 4.27.

$$b_w = 1 - \frac{k_d}{k_s} \tag{4.27}$$

L'évolution de  $b_w$  peut donc être obtenue en calculant pour chaque degré d'hydratation du matériau le module de compressibilité drainé, en négligeant le coefficient de compressibilité de l'eau dans la procédure d'homogénéisation, et celui de la phase solide, en retirant l'eau et les vides et en réévaluant les fractions volumiques des phases solides à partir du volume du solide seul. L'évolution obtenue pour un béton donné est présentée sur la figure 4.26 (courbe noire). Comme pour les propriétés élastiques, l'implantation de ces méthodes d'homogénéisation dans un code éléments finis permettant le calcul des structures n'est pas aisée et conduirait à un rallongement important des temps de calculs, c'est pourquoi on a recours à une loi macroscopique fonction de degré d'hydratation 4.28. Le seuil de percolation  $\overline{\alpha}_s$  est conservé égal à celui identifié pour les propriétés élastiques (0.15 pour un béton). L'exposant  $n_{b_w}$  de la loi sera également un paramètre intrinsèque au béton et est trouvé égal à 0.66.

$$b_{w}(\tilde{\alpha}) = 1 - \left(1 - b_{wref} \left(\frac{\overline{\alpha}(t) - \overline{\alpha}_{s}}{\overline{\alpha}_{ref} - \overline{\alpha}_{s}}\right)^{n_{b_{w}}}\right)$$
(4.28)



FIGURE 4.26 – Identification d'une loi macroscopique pour l'évolution du coefficient de Biot, évolution prédite par homogénéisation en noir issus de [Souyris, 2012] et loi identifiée en rouge

En conditions THC variables, l'évolution de la dépression capillaire  $P_l$  en fonction du degré de saturation peut être identifiée à partir de la modélisation des isothermes d'adsorption et désorption, comme montré au paragraphe 3.3.1 [Souyris, 2012]. Cependant, dans l'objectif d'une modélisation à l'échelle structure, cette approche n'est pas suffisamment avancée pour permettre une implantation numérique (rendue complexe notamment par la gestion des cycles d'hystérésis et des chemins de séchage-imbibition). C'est pourquoi, cette dépression capillaire  $P_l$  est pour l'instant déterminée en fonction du degré de saturation en utilisant un isotherme de désorption modélisé par une loi de Van Genuchten comme reporté dans l'équation 4.29.

$$P_{l} = M_{shr}(\overline{\alpha}, T) \left( S_{l}^{-1/m_{vg}} - 1 \right)^{1-m_{vg}}$$
(4.29)

Où:

- S<sub>l</sub> est le degré de saturation du matériau (issu du modèle d'hydratation et de séchage);
- $m_{vg}$  est un paramètre de la loi de Van Genuchten (pris égal à 0.5 par défaut);
- $M_{shr}(\overline{\alpha}, T)$  est une loi dépendant de l'avancement de l'hydratation  $\overline{\alpha}$  et de la température.

Dans cette équation, le module de Van Genuchten  $M_{shr}$  dépend de la température (comme vu au pagraphe 3.3.2, Eq. 3.22) mais aussi de l'avancement de la réaction à travers une loi du même type que pour les propriétés élastiques. Il s'exprime ainsi selon l'équation 4.30.

$$\mathbf{M}_{shr}(\overline{\alpha}, \mathbf{T}) = \mathbf{M}_{shrref} \cdot \exp\left(-\frac{\mathbf{T}(t) - \mathbf{T}_{ref}}{\mathbf{T}_{k,vg} - \mathbf{T}_{ref}}\right) \cdot \left(\frac{\overline{\alpha}(t) - \overline{\alpha}_s}{\overline{\alpha}_{ref} - \overline{\alpha}_s}\right)^{n_{\mathbf{M}_{shr}}}$$
(4.30)

Dans cette équation, le seuil de percolation  $\overline{\alpha}_s$  est conservé égal à celui identifié pour les propriétés élastiques (0.15 pour un béton). L'exposant  $n_{M_{shr}}$  de la loi sera également un paramètre intrinsèque au béton. On l'identifie par analyse inverse sur un essai de retrait endogène (essai pour lequel le modèle d'hydratation donne les variations de degré d'hydratation et de saturation au cours de l'essai). Le résultat de cette identification (illustrée sur la figure 4.27) donne  $n_{M_{shr}} = 5$ .



FIGURE 4.27 – Evolution  $M_{shr}(\alpha)$  identifiée sur les essais de retrait endogène

### 4.3.6 Comportement différé du béton au jeune âge

#### Nécessité de la prise en compte des déformations différées

Il pourrait paraître assez contradictoire de parler de déformations différées pour l'étude du comportement à court-terme d'un matériau mais ces déformations visco-élastiques jouent un rôle important sur le comportement global de structures dont les déformations au jeune âge sont bloquées partiellement ou totalement.

Si l'on détermine le développement de la contrainte dans un barreau bloqué aux extrémités et soumis à une évolution thermique correspondant à une hydratation, on obtient les résultats présentés sur la figure 4.28 où la courbe noire est obtenue par un calcul élastique et la rouge par un calcul prenant en compte le fluage et le retrait. On constate que si on néglige les déformations différées, on obtient une surestimation des contraintes en phase d'échauffement qui conduit à un passage en traction (à la suite du refroidissement global de la structure) et une fissuration retardée.

Si l'on fait la même étude sur un barreau en béton armé (pourcentage d'acier 2%) bloqué aux extrémités et soumis à la même évolution de température, on obtient un résultat similaire avec une apparition de la fissuration retardée si on néglige le fluage (courbe verte sur la figure 4.29) ainsi qu'une ouverture de la fissure principale légèrement supérieure (Fig. 4.30).



FIGURE 4.28 – Effet de la non prise en compte du fluage sur le risque de fissuration d'une structure à retrait gêné



FIGURE 4.29 – Effet de la prise en compte du fluage sur la force globale de réaction au cours du temps d'un élément en BA au jeune âge à déformation bloquées



FIGURE 4.30 – Effet de la prise en compte du fluage sur l'ouverture de fissure le long de l'axe d'un élément en BA au jeune âge à déformation bloquées

#### Adaptation du modèle de fluage

Le modèle de fluage présenté au paragraphe 4.1.3 est formulé de façon à ce que les vitesses et amplitudes de fluage soient directement fonction des propriétés élastiques du matériau (à travers la dépendance à  $\varepsilon^{el}$  dans les équations 4.6 et 4.7). La dépendance à l'hydratation est donc prise en compte à travers l'évolution des propriétés élastiques détaillées au paragraphe 4.3.2. Cette dépendance implicite suppose que les temps caractéristiques des vitesses de fluage ne soient pas affectés par l'hydratation, ce qui a été utilisé par différents auteurs [Benboudjema and Torrenti, 2008; Schutter, 1999]. Cependant, au même titre que la variable d'endommagement, les variables internes associées à la consolidation affectant la viscosité de l'étage non linéaire de Maxwell sont réactualisée en fonction du degré d'hydratation, conduisant à une déconsolidation progressive du matériau ayant subi une forte déformation visqueuse à un degré d'hydratation faible.

Par ailleurs, afin de rester compatible avec l'hydratation, il faut considérer le fait que les nouveaux hydrates sont créés dans la configuration déformée et sont donc libres de contraintes (voir paragraphe 4.3.1). Les déformations élastiques des étages élastiques  $\varepsilon^{el}$  et de Kelvin  $\varepsilon^{K}$ doivent donc être réactualisées (et gérées en tant que variables internes du modèle de fluage) afin de reproduire la diminution de déformation élastique à l'échelle macroscopique sous l'effet de la création, à l'échelle microscopique, d'hydrates dans la configuration déformée sans contrainte élastique associée. Ceci est traduit par l'équation 4.31.

$$\frac{\partial \sigma^{\text{elastique}}}{\partial \bar{\alpha}} = 0 \Longrightarrow \begin{cases} \frac{\partial S_{ijkl}}{\partial \bar{\alpha}} \cdot \varepsilon^{el}_{kl} + S_{ijkl} \cdot \frac{\partial \varepsilon^{el}_{kl}}{\partial \bar{\alpha}} = 0\\ \frac{\partial S_{ijkl}}{\partial \bar{\alpha}} \cdot \varepsilon^{K}_{kl} + S_{ijkl} \cdot \frac{\partial \varepsilon^{K}_{kl}}{\partial \bar{\alpha}} = 0 \end{cases}$$
(4.31)

Ces choix sont dans un premier temps vérifiés en testant la capacité du modèle à reproduire un essai de fluage incrémental au jeune âge [Buffo-Lacarrière and Sellier, 2011]. La figure 4.31 présente en effet les résultats donnés par le modèle lors de la simulation d'un essai de retrait endogène (induit par la variation de degré de saturation dû à l'hydratation) et fluage incrémental endogène réalisé sur mortier. L'application du modèle d'hydratation donne l'évolution du degré d'hydratation et du degré de saturation présentés sur la figure 4.31a.



gré d'hydratation

(points : mesures, courbes : modèle)

FIGURE 4.31 - Comparaison modèle-essais pour la prédiction des déformations obtenues au cours d'un essai de fluage incrémental et retrait endogène associé pour le mortier concerné

#### CHAPITRE 4. PRISE EN COMPTE DES ÉVOLUTIONS PHYSICO-CHIMIQUES SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES BÉTONS

Afin d'illustrer la pertinence de ces choix, on teste également les résultats que donnerait l'application du modèle de fluage sans effet de l'hydratation sur celui-ci (simulation avec paramètres de fluages fixés à 28j). On retrouve cette comparaison, ainsi que les résultats obtenus avec un calcul purement élastique sur la figure 4.32 pour les 50 premiers jours après le coulage (le chargement étant fait à 7j). On constate que malgré la maturité relativement avancée au moment du chargement ( $\bar{\alpha} \approx 0.5$  à 7j) le fait de négliger l'actualisation des variables internes du modèle par l'hydratation conduit à une sous-estimation du fluage de l'ordre de 10% (sous-estimation qui serait bien plus importante dans le cas d'un chargement à 2 ou 3 jours par exemple).



FIGURE 4.32 – Déformations de fluage propre sous chargement incrémental obtenu avec le modèle (trait pleine), avec les paramètres de fluage fixés à 28j (pointillés longs) et avec un calcul élastique (pointillés courts

# 4.4 Comportement mécanique du béton soumis à une décalcification

En parallèle des études du comportement mécanique de matériaux cimentaires en cours d'hydratation, nous avons pu également étudier le comportement mécanique des bétons sous une autre forme d'évolution chimique, la décalcification. Comme nous l'avons vu au paragraphe 4.3.1 et à travers l'équation 4.16, l'incrément de contrainte d'un matériau chimiquement évolutif se décompose en une partie induite par la variation de module élastique sous déformation constante et une partie induite par la variation de déformation pour un module élastique constant. Dans le cas de l'hydratation nous avons vu que le premier incrément est nul puisque correspondant à une formation d'hydrates libres de contraintes. Dans le cas d'une décalcification au contraire, la variation de module correspond à une dissolution d'hydrate (ou déstructuration progressive) qui était initialement chargé. L'incrément de contrainte associé ne peut donc être négligé.

On propose donc une écriture incrémentale adaptative [Buffo-Lacarrière and Sellier, 2011] qui permet de ne prendre en compte la part liée à l'incrément de module dans l'incrément de contrainte que si celui-ci est négatif (et correspond donc à une dégradation chimique) (Eq. 4.32).

$$\dot{\sigma} = \left[ \dot{E} \right]^{-} \cdot \varepsilon + E \cdot \dot{\varepsilon} \tag{4.32}$$

Dans le cas d'une décalcification de la matrice, par contact avec une eau acide ou une eau pauvre en calcium, on observe une perte de performance par dissolution de la portlandite (et donc création de porosité) et déstructuration progressive des C-S-H [Bernard et al., 2008, 2003a; Carde and François, 1999; Xie et al., 2008]. Ces changements étant d'ordre plutôt microstructuraux que liés à une micro-fissuration, leur effet sur le comportement mécanique sera, de façon analogue à l'hydratation (mais avec une pente opposée), modélisé en introduisant une loi d'évolution pour chaque propriété mécanique X.

Cette loi d'évolution sera écrite en fonction de la variable gérant l'avancement des réactions, c'est à dire la concentration en calcium. On rappelle en effet que la quantité de calcium contenue dans les C-S-H peut, par simplification, être reliée directement à la concentration en calcium en solution selon le diagramme d'équilibre présenté à la figure 2.10. Cependant, dans le cas de la portlandite, sa dissolution se fait à concentration en calcium quasiconstante (équilibre thermodynamique) et son effet mécanique prépondérant (visible sur la figure 4.33a), du fait de la création de porosité induite, ne peut pas être traduit à travers une dépendance à la seule concentration en calcium. C'est pourquoi on introduit de façon explicite la quantité de portlandite dans la loi d'évolution (Eq. 4.33).



(a) Perte de propriétés mécaniques en fonc- (b) Profil de calcium solide le long du rayon tion de la concentration en calcium dans la d'une éprouvette CEM I ayant été soumise solution (points expérimentaux issus de résul- 110j à une décacification accélérée tats de mico-identation [Danese, 1997])

FIGURE 4.33 – Effet de la décalcification sur les propriétés élastiques du béton, résultats pour  $\gamma = 0.2$ 

$$\frac{X}{X_0} = F(Ca) = \gamma + (1 - \gamma) \left[ \left( 1 - \frac{CH_0}{0.8} \right) \left( \frac{Ca(t)}{Ca_0} \right)^2 + \frac{CH(t)}{0.8} \right]$$
(4.33)

Où:

- X<sub>0</sub> est la propriété mécanique du béton sain;
- CH est la concentration en portlandite et CH<sub>0</sub> celle du béton sain;
- Ca est la concentration en calcium dans la solution et Ca<sub>0</sub> celle du béton sain;
- γ est un paramètre d'atténuation traduisant la perte de propriété pour un matériau totalement dégradé.

Le paramètre de cette loi d'atténuation  $\gamma$  va être différent pour chaque propriété mécanique. Il est identifié pour le module d'Young à travers les essais de micro-indentation (car relié directement à la microdureté) réalisés sur éprouvette dégradée, ceux-ci mettant en évidence (comme illustré à la figure 4.33a) un coefficient d'atténuation  $\gamma_E$  de 0.1 pour le module d'Young. Pour les résistances, ce paramètre d'atténuation doit être déterminé à partir d'essais à l'échelle macroscopique. En effet, dans le cas d'une dégradation exogène comme ici, contrairement à une réaction endogène (comme l'hydratation), il n'est pas possible d'obtenir un état de dégradation identique dans toute l'éprouvette, la dégradation étant la conséquence du transfert des ions calcium vers l'extérieur on a un front de dégradation dans l'éprouvette (voir par exemple le profil obtenu le long d'un rayon d'éprouvette de CEM I à une date donnée sur la figure 4.33b). La détermination ne peut donc se faire comme pour l'hydratation par mesure directe de caractéristique mécaniques macroscopique correspondant à un état d'avancement donné (ici à une concentration donnée en calcium dans la solution). L'analyse inverse sur les essais de compression et traction sur éprouvettes préalablement dégradées met en évidence un coefficient  $\gamma$  de 0.1 pour Rc et Rt [Sellier et al., 2011].

Pour les caractéristiques de fluage, l'hypothèse est faite que la proportionnalité des paramètres de fluage aux propriétés élastiques (module de Kelvin et viscosité de Maxwell définis au paragraphe 4.1.3) est conservée pour le béton lixivié. Par contre, le potentiel de déformation qui pilote la consolidation du matériau sera susceptible lui d'être plus fortement influencé par la dégradation du fait de la création importante de porosité (ceci a été notamment illustré dans les travaux de Bernard et Ulm avec des essais triaxiaux sur béton lixivié [Bernard et al., 2003a]). L'identification de l'atténuation de ce potentiel de déformation se fait par analyse inverse d'essais de fluage en compression couplé à une décalcification par nitrate d'ammonium [Hasni, 2004]. On montre que le coefficient d'attenuation  $\gamma$  pour le fluage montre que celui-ci est très faible (0.01) ce qui traduit une perte de consolidation très forte des bétons décalcifiés [Sellier et al., 2011]. L'analyse des déformations sur cet essai couplé (figure 4.34) montre un passage en fluage tertiaire pour l'éprouvette soumise à la décalcification. Ceci s'explique par le fait que la perte de propriétés mécaniques de la zone dégradée conduit à une concentration des contraintes sur le cœur sain qui passe en fluage tertiaire.



FIGURE 4.34 – Déformations de fluage en compression pour une éprouvette saine et une éprouvette soumise à une décalcification concomitante au chargement mécanique [Sellier et al., 2011]

La validité des lois et paramètres d'atténuation identifiés a été finalement été testée sur des essais couplés de fluage en flexion dans un bain de nitrate d'ammonium (figure 4.35).

#### CHAPITRE 4. PRISE EN COMPTE DES ÉVOLUTIONS PHYSICO-CHIMIQUES SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES BÉTONS



FIGURE 4.35 – Flèche de fluage en flexion pour une éprouvette soumise à une décalcification concomitante au chargement mécanique [Sellier et al., 2011]

# 4.5 Cumul des évolutions mécaniques en contexte thermo-hydrochimique couplé

# 4.5.1 Cumul d'endommagement diffus et évolution des propriétés mécaniques

Lorsque l'on souhaite prévoir la durabilité de structures à long terme, un cumul de ces endommagements et évolutions des propriétés mécaniques au cours du temps sous l'effet d'évolutions physico-chimique est donc à considérer. Le modèle d'endommagement localisé avec refermeture de fissures permet de prendre en compte le cumul d'endommagement "structurel" induit par les différents blocages ou gradients de déformations et le chargement extérieur tout au long de la vie de l'ouvrage. Ainsi les fissurations localisées apparaissant au jeune âge vont se cicatriser légèrement en conséquence de la poursuite de l'hydratation, se refermer éventuellement sous l'effet d'un chargement de compression, mais vont pouvoir se réouvrir préférentiellement à plus long terme si elles sont de nouveau sollicitées. Ce cumul d'endommagement localisé est géré automatiquement et ne fera pas l'objet de cette partie.

L'objectif ici est plutôt d'illustrer le cumul d'endommagement microscopique et d'évolutions de propriétés mécaniques sous l'effet de variations physico-chimiques du matériau. Ce cumul d'évolution de propriétés mécaniques a notamment été mis en évidence lors de la thèse d'Yvan Thieubaut (co-encadrée avec A. Sellier et S. Multon). Des essais de caractérisation mécaniques après gonflement par RSI (Réaction Sulfatique Interne) ont en effet été menés dans sa thèse afin d'identifier l'endommagement microscopique diffus induit par le développement de la réaction. En-effet, les réactions gonflantes (RAG, RSI) conduisent à une micro-fissuration par blocage interne des déformations (comme ça peut être le cas pour l'endommagement thermique) qui est donc représenté par une variable d'endommagement diffus dépendant de la déformation plastique induite par la réaction (voir travaux des doctorants encadrés récemment par A. Sellier et S. Multon sur ce sujet [Morenon, 2017; Salgues, 2013]).

Les essais réalisés pendant la thèse sur cette partie avaient pour objectif de quantifier cet endommagement diffus induit par la RSI pour une valeur de gonflement afin de vérifier si les lois existant pour la RAG afin de relier gonflement et endommagement diffus étaient valides pour la RSI (qui développe notamment des valeurs de gonflement plus élevés). Des mesures de modules d'Young, de résistance à la compression et de résistance à la traction par fendage ont été effectuées à différentes échéances et sur des matériaux ayant une histoire thermique différente. Des essais de module d'Young, résistances en compression et traction ont donc été réalisés en fin de suivi dimensionnel, soit 450 jours après immersion, sur des éprouvettes avant subi un traitement thermique au jeune âge (et dopées en alcalins) afin de provoquer la réaction sulfatique interne (éprouvettes notées C-I sur la figure 4.36). L'analyse de ces résultats, en comparaison avec les éprouvettes témoins testées à 28j (donc sans la phase d'immersion) et n'ayant pas subi de traitement thermique (éprouvettes notées NC-NI sur la figure 4.36) nécessite la prise en compte de plusieurs évolutions successives (voire simultanées) des propriétés mécaniques, et l'endommagement de RSI ne peut pas être déduit ainsi directement. Les éprouvettes développant la RSI ont en-effet été soumises, depuis leur coulage à différentes variations physico-chimiques conduisant à une évolution des propriétés mécaniques :

- une cure thermique à jeune âge induisant un endommagement thermique diffus (voir section 4.2.1),
- une resaturation du matériau après 28 jours induisant une chute de résistance en traction mais étant sans effet sur les autres propriétés (voir section 4.2.2),
- une poursuite d'hydratation pendant la période d'immersion induisant à une augmentation des propriétés mécaniques,
- le gonflement de RSI induisant un endommagement diffus.

TABLEAU 4.4 – Phénomènes induisant des variations de propriétés mécaniques pour les différentes éprouvettes testées

	Ref	NC-I	C-NI	C-I
Cure thermique	-	-	$D^{th}$	$D^{th}$
Immersion	-	$f_{\rm H}({\rm S}l)$	-	$f_{\rm H}({\rm S}l)$
Hydratation long-terme	-	$f_{\rm M}(\alpha)$	-	$f_{\rm M}(\alpha)$
Gonflement	-	-	-	D <sup>RSI</sup>

Les propriétés mécaniques du béton ayant subi le gonflement de RSI (C-I) s'obtiennent donc, dans notre approche de modélisation, à partir des propriétés de références à 28 jours (non chauffées et non immergées NC-NI) selon l'équation suivante :

$$\mathbf{E}_{\mathrm{C-I}} = \mathbf{E}_{ref} \cdot f_{\mathrm{M}}(\alpha) \cdot (1 - \mathbf{D}^{th}) \cdot (1 - \mathbf{D}^{\mathrm{RSI}})$$
(4.34)

$$R_{cC-I} = R_{cref} \cdot f_{M}(\alpha) \cdot (1 - D^{th}) \cdot (1 - D^{RSI})$$

$$(4.35)$$

$$\mathbf{R}_{tC-I} = \mathbf{R}_{tref} \cdot f_{\mathrm{M}}(\alpha) \cdot f_{\mathrm{H}}(\mathrm{S}l) \cdot (1 - \mathrm{D}^{th}) \cdot (1 - \mathrm{D}^{\mathrm{RSI}})$$
(4.36)

Ceci montre bien que l'effet des gonflements de RSI sur les propriétés mécaniques ne peut pas être identifié simplement en comparant les éprouvette avant subi le gonflement aux éprouvettes témoins à 28 jours (X<sub>C-I</sub> et X<sub>ref</sub>) mais que le cumul d'endommagement diffus et d'évolution des propriétés mécaniques, tel que développé dans les approches présentées dans ce mémoire, est nécessaire pour expliquer les différences de propriétés entre ces éprouvettes.

Dans le cadre de la thèse d'Yvan Thiébaut, des essais sur le même béton soumis à différentes conditions thermo-hydro-chimiques ont donc été réalisés afin de séparer les différents effets (figure 4.36). L'effet de l'endommagement thermique lié à la cure en température peut être caractérisé en comparant au témoin les résultats sur éprouvettes chauffées à jeune âge et testées à 28 jours (C-NI dans le tableau 4.4). L'effet de la maturation long terme peut être caractérisé en comparant au témoin les résultats de E et Rc sur éprouvettes immergées mais non chauffées (NC-I dans le tableau 4.4) tandis que l'effet opposé de la maturation et de la resaturaion peut être identifié sur ces mêmes éprouvettes testées en fendage (la saturation ayant seulement un effet sur la résistance en traction).



rée par fendage)

(b) Résistance en traction (mesu-(c) Résistance en compression

FIGURE 4.36 - Evolution des propriétés mécaniques d'éprouvettes sujettes à la RSI après traitement thermique [Thiebaut et al., 2017]

Ces études nous ont permis de confirmer que la valeur de l'endommagement induit par le gonflement était comparable à celles obtenues en RAG mais des questions restent encore cependant en suspens quant à la maturation des bétons immergés à long terme, car les résultats obtenus ici (et dans d'autres études relatives à la RSI avec pour la plupart des bétons dopés en alcalins) montrent une augmentation des propriétés mécaniques avec l'hydratation qui n'est pas compatible avec les lois établies au jeune âge (notamment pour la résistance en compression). On peut également s'interroger sur l'endommagement thermique induit en cours d'hydratation comme ici, ainsi que la part d'effet de températures élevées (supérieure à 80°C) sur la structure des hydrates formés, phénomènes qui ne sont pas encore pris en compte dans les modèles développés.

#### Application à la prédiction de la durée de vie d'un ouvrage de sto-4.5.2 ckage de déchets radioactifs

Cette approche de cumul d'endommagement, de consolidation et d'évolutions des propriétés mécaniques du béton au cours de la durée de vie d'un ouvrage, a été appliquée à la simulation du comportement de tunnels de stockage de déchets radioactifs. La structure en béton est constituée d'une première voûte en béton ordinaire (appelée B40 sur la figure 4.37) et d'une structure principale en béton haute performance (appelée HPC sur la figure 4.37).

### CHAPITRE 4. PRISE EN COMPTE DES ÉVOLUTIONS PHYSICO-CHIMIQUES SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES BÉTONS

Le béton est coulé un mois après le percement du tunnel et les colis de déchets nucléaires (voir Fig. 4.37) sont déposés progressivement sur plusieurs années. Pendant cette période d'exploitation (limitée à 100 ans), le tunnel est ventilé (et par conséquent le béton sèche). Ensuite, le tunnel est fermé et le processus de resaturation par l'eau commence. Selon des calculs effectués par l'Andra, cette période dure environ 1 300 ans en raison de la très faible perméabilité du béton et du COX. Après 1300 ans, le tunnel est saturé d'eau provenant du sol et, comme cette eau a une concentration naturelle en calcium très faible, un processus de lixiviation commence au sein du béton. Les contraintes chemo-mécaniques appliquées au tunnel en béton sont donc causées par plusieurs phénomènes successifs dans le temps :

- l'hydratation à jeune âge et ses conséquences : les propriétés mécaniques augmentent, de la chaleur est produite, de l'eau est consommée,
- l'exothermie des déchets nucléaires,
- · les déformations causées par l'effet de séchage,
- le fluage de la roche, qui entraîne une chargement de compression du tunnel en béton,
- la lixiviation du calcium à long terme et les pertes de propriétés mécaniques associées.



FIGURE 4.37 - Tunnel de stockage radioactif et maillage associé [Buffo-Lacarrière and Sellier, 2011]

Lors de cette simulation, le calcul est mené depuis le couplage ce qui permet un cumul de l'endommagement et de l'état de consolidation depuis le jeune âge jusqu'à long terme (endommagement localisé sous l'effet des retraits gênés à court terme, endommagement thermique diffus lors de l'élévation de température à jeune âge puis lors de l'exothermie des déchets, consolidation du matériau par fluage,...). L'effet des évolutions chimiques sur les propriétés du matériau est également cumulée au cours du temps (Eq. 4.37) puisque les propriétés mécaniques sont évaluées en fonction du degré d'hydratation (évoluant à court terme) et de la concentration en calcium solide (évoluant à partir de la resaturation du béton 1300 ans après le coulage).

$$X(t) = X_{ref} \cdot \left(\frac{\overline{\alpha}(t) - \overline{\alpha}_s}{\overline{\alpha}_{ref} - \overline{\alpha}_s}\right)^{n_X} \left(\gamma_X + (1 - \gamma_X) \left[ \left(1 - \frac{CH_{ref}}{0.8}\right) \left(\frac{Ca(t)}{Ca_{ref}}\right)^2 + \frac{CH(t)}{0.8}\right] \right)$$
(4.37)

Où:

- $\overline{\alpha}(t)$  est le degré d'hydratation moyen issu du modèle d'hydratation multiphasique (voir chapitre 2);
- Ca est la concentration en calcium dans la solution issu d'un modèle de lixiviation;
- CH est la concentration en portlandite;

- X<sub>ref</sub> est la propriété mécanique de référence (béton à hydratation stabilisée et sain);
- *α*<sub>ref</sub>, CH<sub>ref</sub> et Ca<sub>ref</sub> et sont le degré d'hydratation moyen, la concentration en calcium et en portlandite à ce même âge de référence issu du modèle d'hydratation multiphasique (voir chapitre 2);
- *α*<sub>s</sub> est le degré d'hydratation seuil traduisant la percolation mécanique au niveau macroscopique;
- $n_X$  et  $\gamma_X$  gèrent l'effet de l'hydratation et de la lixiviation sur la propriété X.

Une analyse quantitative de la variation des contraintes verticales dans le béton et le sol le long du rayon horizontal médian (AB sur la figure 4.37) est présentée sur la figure 4.38. Dans les premiers temps, le fort dégagement de chaleur attribuable aux réactions d'hydratation du ciment entraîne une augmentation de la température et des contraintes de compression induites par la dilatation du béton gênée par le sol environnant (phase 0-I à la figure 4.38). Lorsque la cinétique d'hydratation diminue (après environ 12 h), le béton refroidit progressivement car les colis de déchets nucléaires exothermiques n'ont pas encore été placés dans le tunnel. La diminution de la température entraîne des contraintes de traction en raison des contraintes thermiques bloquées (illustrées pour les contraintes verticales avec la phase I-II à la figure 4.38). Un risque de fissuration transversale est observé sur la figure 4.39. Ce risque est également en partie lié à l'hypothèse pessimiste de calcul 2D qui ne considère aucun flux de chaleur hors plan, ce qui correspond à un coulage du tunnel d'un seul coup. Il montre que la fissuration pourrait être atténuée par des techniques de construction appropriées (par exemple, coulée en plusieurs phases comme développé au chapitre 5).

Pendant la phase d'exploitation, le béton se dilate sous l'effet de la chaleur produite par les déchets nucléaires (illustré pour la contrainte verticale avec la phase II-III sur la figure 4.38). La contrainte de traction transitoire disparaît 200 ans après le coulage, et l'état de compression induit par le fluage du sol vers le tunnel conduit à une fermeture partielle des fissures qui se sont développées à un âge précoce. Les contraintes de compression dans le béton sont alors continuellement augmentées par la convergence du fluage du sol et conduisent à l'apparition de déformations irréversibles attribuables au fluage du béton.

Enfin, 1 500 ans après le coulage, la resaturation hydrique est terminée et le décalcification du béton se produit, conduisant à une diminution des propriétés mécaniques (Eq. 4.37). Cette diminution des propriétés mécaniques de la couronne extérieure du tunnel entraîne un transfert de contraintes vers la partie saine du tunnel (illustré pour les contraintes verticales avec la phase III-IV sur la figure 4.38). Le fluage et la lixiviation du béton provoquent une localisation de contrainte de compression dans le noyau sain à très long terme (phase IV de la figure 4.38) et l'apparition de dommages par écrasement aux angles du tunnel (Fig. 4.39).



FIGURE 4.38 – Evolution de la contrainte le long d'un rayon du tunnel depuis le coulage jusqu'à 10<sup>6</sup> ans [Buffo-Lacarrière and Sellier, 2011]



FIGURE 4.39 – Champs d'endommagement à jeune âge et à très long terme [Buffo-Lacarrière and Sellier, 2011]

# 4.6 Bilan

Les développements scientifiques présentés ici sont le cœur des activités menées ces 10 dernières années puisqu'il s'est agi, dans chaque projet ou thèse, de caractériser et modéliser l'impact de variations thermo-hydro-chimiques (évolutions prédites grâce au développement d'outils numériques adaptés présentés aux chapitres 2 et 3) sur le comportement mécanique des bétons. La méthodologie d'étude a généralement été multi-échelle, puisque des analyses à une échelle petite (pâte) ont permis d'identifier les phénomènes mis en jeu dans le développement ou la modification des propriétés mécaniques (homogénéisation analytique pour les matériaux en cours d'hydratation par exemple).

Les modifications de l'état hydrique du béton ont été traduites par l'application d'une pression capillaire qui conduit à une déformation de retrait mais aussi par une évolution de la résistance en traction (sous l'effet d'une forme de mise en précontrainte de la pâte induite par cette dépression capillaire). Les modifications de l'état thermique du béton (en particulier l'élévation de température) a été traduit, à l'échelle du matériau, par un endommagement diffus traduisant la microfissuration induite par les incompatibilités de déformations pâte granulats, ainsi que par une forte accélération des vitesses de fluage. Il faut noter qu'à l'échelle des structures, des désordres additionnels peuvent être observés dans le cas de gradients entre le cœur et la peau des structures. Ceci fera l'objet d'études de cas présentés au chapitre suivant puisqu'il s'agit de phénomènes mécaniques structurels, et non de phénomènes intrinsèques au matériau.

Les modifications chimiques des hydrates de la pâte de ciment (hydratation ou décalcification ici) conduisent à des modifications de la microstructure de la pâte en soit et ont donc quant à elles été traduites en terme d'évolution de propriétés mécaniques en fonction d'une variable considérée comme caractéristique de l'évolution chimique (degré d'hydratation pour l'hydratation et concentration en calcium solide pour la décalcification). Même si cela n'a pas été fait pour l'instant, une approche tout à fait similaire pourrait être adoptée pour modéliser l'effet d'une déshydratation qui conduit à la modification ou la dissolution d'hydrates de la pâte de ciment (de façon comparable à l'effet d'une décalcification mais avec les degrés de déshydratation comme variable caractérisant la chimie). Ces évolutions de propriétés matériaux en fonction de variables chimiques ont nécessité une écriture incrémentale spécifique des lois de comportement ainsi qu'une réévaluation des variables internes du modèle mécanique (endommagement et consolidation).

Ces phénomènes ont ensuite été systématiquement traduits en lois d'évolution ou de comportement macroscopiques afin d'être implantées dans un code élément fini (Cast3M en l'occurrence dans toutes nos études) en vue de la modélisation à l'échelle des structures. Les lois ont été validées ici à l'échelle d'éprouvettes de laboratoire mais leur applicabilité à l'échelle des structures réelles est présentée au chapitre suivant.

# **Chapitre 5**

# Application à la prédiction du comportement THCM de structures massives

# Sommaire

5.1	Intro	duction
5.2	Effet	d'échelle sur la résistance en traction du béton
	5.2.1	Mise en évidence et principe 96
	5.2.2	Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS 99
5.3	Modé	lisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-
	éléme	ents
	5.3.1	Principe de modélisation 101
	5.3.2	Loi de comportement des câbles de précontrainte 102
	5.3.3	Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE 105
5.4	Phasa	age de réalisation
	5.4.1	Principe de modélisation 107
	5.4.2	Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge 110

# 5.1 Introduction

Dans ce chapitre vont être présentés les applications des modèles précédemment présentés aux cas de structures massives réelles (poutres massives BA expérimentales du projet CEOS, structures enterrées de stockage de déchets radioactifs de l'Andra, maquette Vercors d'enceinte de confinement à l'échelle 1/3). Ce passage à une utilisation à l'échelle de structures réelles a nécessité quelques développements scientifiques spécifiques qui sont présentés dans ce chapitre en conditionnant notamment la structuration du chapitre :

- prise en compte de l'effet d'échelle sur la résistance en traction du béton (mise en évidence par l'exploitation des essais structures du projet national CEOS),
- prise en compte des armatures passives (et actives) sans maillage explicite des armatures (peu facilement réalisable sur des structures massives très ferraillées telles que les enceinte de confinement),
- prise en compte du phasage de construction étalé parfois sur plusieurs jours et ayant donc un impact sur le comportement thermo-mécanique jeune âge du béton.

Ces applications et développements ont été menés ces dernières années grâce à deux soutiens financiers institutionnels (PN et ANR) ainsi qu'un soutien financier industriel (Andra) :

- le projet national CEOS.fr : Mon implication dans la tâche concernant la fissuration des structures sous sollicitations THM s'est traduite dans le cadre des activités présentées ici par une participation au premier benchmark réalisé au démarrage du projet (en 2009 avec A. Sellier), par la coordination du benchmark international réalisé sur les structures en retrait gêné mises en œuvre dans le cadre du projet (en 2011), par une participation active au groupe de travail sur l'exploitation des mesures des structures en retrait gêné (participation pour laquelle nous avons obtenu avec A. Sellier le financement de 6 mois de postdoc en 2012), ainsi que par la participation en fin de projet à l'établissement de préconisations à destinations de l'ingénierie, en réalisant notamment des études numériques paramétriques.
- l'ANR-PIA Macena UPPA, 3SR Grenoble, EDF, NECS, Oxand, CEA, CERIB, IFSTTAR : Comme précisé dans les précédents chapitres, nous avons obtenu en 2013 un financement PIA de l'ANR pour le projet Macena. L'objectif du projet est de prédire le comportement des enceintes de confinement nucléaire. Le financement obtenu par le LMDC dans ce cadre là a permis le financement de la thèse de Ponleu Chhun (co-encadrement Alain Sellier) (montant indiqué sur la figure 5.1 comprenant le salaire). Cette thèse nous a permis, dans le cadre des activités présentées dans ce chapitre, d'appliquer le modèle de comportement jeune âge au cas d'une structure massive instrumentée (maquette d'une enceinte de confinement à l'échelle 1/3 - Vercors) et fortement armée à travers notamment une prise en compte des aciers par l'utilisation de macro-éléments reproduisant le comportement homogénéisé du béton armé.
- l'Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs (ANDRA) *Xavier Bourbon, Antoine Pasteau et Adrien Poutrel* : Suite à la présentation au sein de l'ANDRA des travaux précédemment effectués concernant la modélisation du comportement au jeune âge du béton ainsi que concernant la modélisation du comportement mécanique nonlinéaire du béton (A. Sellier), nous avons obtenu en 2011 un financement dans le cadre d'une Unité de Simulation (UPS4) pilotée par Antoine Pasteau. Il s'agissait de modéliser le comportement d'un tunnel en béton depuis son coulage à l'avancée du creusement (prise en compte du phasage de coulage) jusqu'à très long terme avec notamment le comportement en fluage suite aux contraintes appliquées par l'argilite environnante.

La figure 5.1 résume les différents indicateurs associés à cette thématique en terme d'encadrement doctoral (avec % associés), de participation à des contrats industriels (avec les montants et le % d'implication), de relations avec l'international et de publications internationales (AI : revues de rang A, COI : chapitre d'ouvrage, CI : conférences avec actes).



FIGURE 5.1 – Bilan comptable des activités liées aux applications des modèles THCM au calcul des structures

# 5.2 Effet d'échelle sur la résistance en traction du béton

# 5.2.1 Mise en évidence et principe

L'importance de la prise en compte l'effet d'échelle sur la résistance en traction du béton dans la prédiction du comportement des structures massives a été en particulier mis en évidence dans le cadre de l'analyse des structures massives en retrait gêné du projet national CEOS.fr. Les structures testées étaient des poutres massives en I composées d'une partie centrale (tirant) de 5.1 m de long et de section 0.5mx0.8m ainsi que de deux têtes de longueur 0.9m et de section 2.2mx0.9m. Ces têtes massives servaient d'ancrage au ferraillage interne du tirant mais aussi à 2 butons métalliques (diamètre 32.4 cm et épaisseur 5.5 cm) placés de part et d'autres du tirant et servant à gênées les déformations thermiques subies par le béton au cours des premiers jours après le coulage (figure 5.2). Trois structures ont été testées dans le projet avec 3 ferraillages différents comme le précise le tableau 5.1.



FIGURE 5.2 – Géométrie des structures RG et dimensions [Buffo-Lacarrière et al., 2014]

	RG9	RG8	RG10
% aciers longitudinaux	0.56%	2%	2%
Enrobage	30 mm	30 mm	50 mm

TABLEAU 5.1 - Ferraillage des structures RG

Ces structures étaient hautement instrumentées (cordes vibrantes, jauges de déformations, capteurs de températures, fibre optiques) afin de pouvoir être utilisées comme validation des modèles de comportement jeune âge. Une partie de l'analyse menées sur les résultats obtenus (notamment sur la structure RG8 qui était la plus instrumentée) a consisté à évaluer les contraintes développées au sein du béton au cours du temps [Buffo-Lacarrière et al., 2016]. Le but était notamment de pouvoir déterminer la contrainte au sein de la section centrale du béton lors de l'apparition, dans cette section, de la première fissure 72h après le coulage (sous l'effet du blocage partiel des déformations par les butons métalliques). Une valeur moyenne de la contrainte dans la section de béton peut en effet s'obtenir en écrivant l'équilibre global des efforts entre la cage d'armatures (issus des mesures de jauges d'extensométrie sur aciers, corrigées des déformations thermiques), les butons (également issues de mesures de jauges d'extensométrie, corrigées des déformations thermiques) et le béton (figure 5.3).



FIGURE 5.3 – Evaluation des efforts dans le béton par équilibre global des efforts dans les différentes éléments [Buffo-Lacarrière et al., 2016]

Le calcul nous donne un effort de 75 tonnes dans le béton avant l'apparition de la fissuration (72h) ce qui correspond à une contrainte moyenne de 1,9 MPa. Le calcul de la résistance en traction issue du fendage pour le degré d'hydratation calculé à 72h dans la structure (avec la thermoactivation associée à l'élévation de température) donne une résistance en traction du matériau de 4,1 MPa, mettant clairement en évidence une forte chute de résistance mécanique sur une structure massive par rapport à la résistance d'un échantillon de laboratoire.

Ce phénomène de baisse de résistance avec le volume de béton est connu comme l'effet d'échelle de Weibull, basé sur la théorie du maillon le plus faible et donc d'une probabilité plus grande de rencontrer ce maillon faible dans un volume plus grand [Bažant and Yavari, 2005; Carpinteri et al., 1995].

Cet effet a été étudié expérimentalement avec des essais en traction directe réalisés sur des bétons de classe de résistances allant de 30 à 130 MPa [Rossi et al., 1994], et il est montré que l'effet d'échelle diminue avec l'augmentation de la classe de résistance. Cet effet peut être alors représenté par la loi de Weibull reliant la baisse de résistance en traction au rapport entre les volumes de béton. Cette théorie a été adaptée par Sellier [Sellier and Millard, 2014] en proposant de relier la baisse de résistance au rapport des volumes chargés en traction (et non des volumes géométriques). Par ailleurs, afin d'éviter que la résistance en traction ne tende vers 0 pour des volumes importants, il propose de limiter le volume à considérer ( $V_{eq}$  dans l'équation 5.1) à un volume maximum relié à une longueur caractéristique identifiée à 1,2 m [Sellier and Millard, 2014].

$$\frac{\mathrm{R}t}{\mathrm{R}t_{ref}} = \left(\frac{\mathrm{V}_{ref}}{\mathrm{V}_{eq}}\right)^{1/m} \tag{5.1}$$

Où :

- $Rt_{ref}$  est la résistance en traction mesurée sur une éprouvette de volume chargé en traction  $V_{ref}$  ( $V_{ref} = 242 cm^3$  dans le cas d'un essai de fendage sur éprouvette 11cmx22cm);
- V<sub>eq</sub> est le volume chargé en traction limité en fonction d'une longueur caractéristique utilisé dans la fonction de pondération modélisant l'hétérogénéité probabiliste du matériau [Sellier and Millard, 2014];
- *m* est l'exposant de Weibull calculé à partir du coefficient de variation des résultats expérimentaux (C<sup>v</sup> dans l'équation 5.2).

$$m \approx \frac{1}{10} \left( \frac{12}{C^{\nu}} - 2 \right) \tag{5.2}$$

Si l'on ne dispose pas de suffisamment de résultats d'essais mécaniques pour déterminer le coefficient de variation  $C^{\nu}$ , on peut estimer la valeur du coefficient de Weibull à partir de la résistance en compression [Rossi et al., 1994] (équation 5.3).

$$m = \left(0.25 - 3.6\mathrm{E}^{-3} \cdot \mathrm{R}c + 1.3\mathrm{E}^{-5} \cdot \mathrm{R}c^{2}\right)^{-1}$$
(5.3)

Le volume équivalent  $V_{eq}$  étant dépendant de l'état de sollicitation en traction du matériau, la résistance en traction devient une grandeur à évaluer au cours du calcul et non une grandeur intrinsèque. Ceci est réalisable dans Castem par un calcul non local basé [Sellier and Millard, 2014]. Cependant, pour une approche simplifiée il peut être calculé comme le produit des dimensions de la zone estimée soumise à une sollicitation de traction, chaque dimension étant limitée à une longueur de 1,2 m [Barre et al., 2016] (déterminée en lien avec le calcul non local précédemment cité). Cet effet est illustré sur la figure 5.4 pour 4 bétons de classe de résistances différentes. Sur la figure 5.4 les valeurs calculées pour plusieurs structures représentatives de structures présentant un risque de fissuration au jeune âge sont reportées.

On voit ainsi que pour les structures en retrait gêné de CEOS, comme la partie tirant est entièrement sollicitée en traction au cours du refroidissement de la structure, la résistance à prendre en compte est égale à 46% de la résistance déterminée par fendage (courbe verte sur la figure 5.4 évaluée avec un coefficient m de 9.8), ce qui correspond à la chute de résistance expérimentalement observée.

Si l'on considère une structure en retrait géné très massive pour laquelle la zone de traction lors du refroidissement au jeune âge sera plus grande que les 1.2m dans les 3 directions, le volume équivalent sera égal à  $(1.2m)^3$  et la résistance en traction pourra être par exemple comprise entre 32% et 57% de la résistance mesurée en fendage (pour des classes de résistances de 40 à 70 MPa).



FIGURE 5.4 – Effet d'échelle pour plusieurs bétons

Pour des structures plus fines, comme par exemple un mur dont les déformations sont bloquées par le radier sur lequel il est coulé, on sait que les sollicitations de traction vont tout d'abord se développer en peau du fait du gradient thermique (conduisant à une fissuration superficielle) puis au cœur lors du refroidissement global (conduisant à une fissuration traversante). Dans ce cas, pour un mur d'épaisseur 1.2m comme le mur expérimental de Civaux [Buffo-Lacarrière et al., 2011], on voit que la résistance en traction à considérer pour le risque de fissuration superficielle est estimée à 60% de la résistance en fendage alors que pour la fissuration traversante elle est de 50%. On voit donc bien ici l'intérêt d'une prise en compte explicite dans le calcul éléments finis comme proposé par [Sellier and Millard, 2014].

### 5.2.2 Simulation du comportement jeune âge des poutres du projet CEOS

L'étude des structures du projet national CEOS nous a également permis de valider tous les développements faits concernant les modèles de comportement mécanique de structures armées au jeune âge (avec prise en compte d'une interface acier-béton comme expliqué au chapitre 4). Les structures ont été maillées en 3D sans prise en compte de symétrie (CL thermiques non symétriquse du fait de la prise en compte du flux solaire [Buffo-Lacarrière et al., 2014]). La figure 5.5 illustre le maillage de ces structures et le ferraillage associé (modélisé avec l'approche présentée au chapitre 4).



FIGURE 5.5 – Maillage des structures RG (ferraillage du RG8 sur cette illustration)

Les résultats thermiques issus du modèle ont été comparés et validés avec les mesures in situ [Buffo-Lacarrière et al., 2014] mais ne sont pas représentés ici. L'effet de ces évolutions de température sur le comportement mécanique jeune âge se traduit par des déformations thermiques au sein du béton qui sont partiellement gênées par la présence des butons métalliques et conduisant donc à l'apparition de contraintes au sein du matériau. La comparaison des prédictions du modèle mécanique pour les 3 structures présentant un ferraillage différent est représentée à travers les déformations en zone centrale du tirant (figure 5.6) et le faciès de fissuration obtenu après stabilisation de la fissuration (figure 5.7).



FIGURE 5.6 – Déformations en zone centrale des RG

On constate une bonne reproduction des évolutions des déformations induites au jeune âge (et partiellement empêchées par les butons métalliques) avec des déformations (totales ici) d'extension en phase d'élévation de température sous l'effet de l'exothermie des réactions, puis une progressive contraction lors du refroidissement global de la structure. La contraction observée pour les 3 structures (de l'ordre de 150  $\mu$ m/m) est inférieure à la déformation calculée sous le seul effet des variations de température, ce qui conduit à une mise en traction des structures lors du refroidissement et à l'apparition de fissures (initiées au cœur de la section droite) aux environs de 60h (figure 5.7).

Lors de la modélisation des structures RG (voir figure 5.5), le choix a été fait d'affecter un point faible dans la section centrale (propriétés mécaniques réduites de 5%) afin de reproduire l'effet de l'instrumentation très importante dans cette zone (nombreux capteurs et câbles associés). Ceci a conduit à une localisation systématique de la première fissure dans cette section, ce qui n'est pas exactement le cas pour la structure RG9 comme on peut le voir sur le relevé de fissuration présenté sur la figure 5.7.



FIGURE 5.7 – Faciès de fissuration numériques et expérimentaux pour les 3 structures en retrait gêné [Buffo-Lacarrière et al., 2014]

On constate que le faciès de fissuration est globalement bien reproduit avec un faciès de fissuration présentant moins de fissures mais des fissures plus ouvertes dans le cas de la structure faiblement armée (RG9). In situ, seule l'ouverture de fissure lors de l'apparition de la première fissure en zone centrale pour le RG8 était disponible à partir de relevés de déplacements par fibre optiques [Buffo-Lacarrière et al., 2016]. Les mesures donnaient une ouverture à cœur allant de 68  $\mu$ *m*/*m* en partie supérieure de la poutre à 107  $\mu$ m/m en partie inférieure. Numériquement on observe une ouverture moyenne au cœur de la section centrale de l'ordre de 60  $\mu$ m/m ce qui correspond à l'ordre de grandeur même si cela est légèrement sous-estimé. Il faut cependant noter que la mesure de l'ouverture de fissure expérimentale est issue d'une mesure de saut de déplacement sur 2,5m de longueur donc elle peut possiblement prendre en compte un cumul de plusieurs fissures peu ouvertes en plus de la fissure en section centrale.

# 5.3 Modélisation du comportement du béton armé et précontraint par macro-éléments

## 5.3.1 Principe de modélisation

Lors de la modélisation du comportement THCM de structures réelles sur une longue période, il serait couteux de mailler de façon explicite tous les aciers et leurs interfaces. Il s'avère intéressant dans ce cas de recourir à l'utilisation d'aciers répartis au sein des éléments finis. L'acier ne sera dans ce cas pas associé à des éléments finis propres mais son comportement sera homogénéisé avec celui du béton environnant dans des éléments finis "béton armé". Il sera ainsi défini par sa direction  $\overrightarrow{V}^r$  et un champs représentant son ratio dans la direction concernée  $\rho^r$ , avec  $r \in [1..n^r]$  où  $n^r$  est le nombre d'acier (voir par exemple la figure 5.8 pour des aciers dans la direction 1).



FIGURE 5.8 – Représentation du principe d'aciers répartis par champs de ratio d'acier (exemple dans la direction longitudinale) [Chhun, 2017]

Dans le cas de structures avec armatures passives seulement,  $n^r$  peut aller jusqu'à 3 (direction 1 = armatures longitudinales et directions 2 et 3= cadres). Dans le cas de structures armées et précontraintes  $n^r$  peut aller jusqu'à 6, les 3 premières directions étant associées au ferraillage passif et les 3 suivantes aux aciers de précontraintes.

La contrainte totale se décompose dans chaque élément en une partie de contrainte reprise par la matrice (béton) et une partie reprise par les aciers (équation 5.4). La contrainte dans l'acier est elle même décomposée en deux parties, puisque l'effort de couture des fissures localisées doit être considéré.

$$\sigma_{ij} = \left(1 - \sum_{r} \rho^{r}\right) \sigma_{ij}^{m} + \left(1 - D_{ijkl}^{t}\right) \sigma_{ij}^{H} + D_{ijkl}^{t} \sigma_{ij}^{R}$$
(5.4)

Où:

- $D_{ijkl}^{t}$  est l'endommagement localisé de traction (équation 4.2);
- $\sigma_{ij}^{R}$  est la contrainte de couture des fissures prenant en compte l'effet goujon lorsque l'acier a une orientation différente de la fissure [Sellier, 2018];
- $\sigma_{ij}^{\text{R}}$  est la contrainte homogénéisée dans l'acier contenu dans le béton sain, exprimée en fonction de la contrainte normale dans l'acier  $\sigma^r$  (équation 5.5).

$$\sigma_{ij}^{\rm H} = \sum_{r} \rho^r \sigma^r \left( \vec{\nabla}^r \bigotimes \vec{\nabla}^r \right)_{ij}$$
(5.5)

## 5.3.2 Loi de comportement des câbles de précontrainte

Dans le cas d'aciers précontraints, la contrainte dans le renforts  $\sigma^r$  va devoir prendre en compte l'effet de la relaxation de ce type d'aciers. En effet, notamment dans le cas de câbles sollicités à un taux de charge important ou de câbles soumis à une température (comme cela est rencontré dans les enceintes de confinement par exemple), cette relaxation va induire une perte de précontrainte importante et donc un impact non négligeable sur la fissuration éventuelle du béton.

Les travaux menés dans le cadre de l'ANR Macena et le partenariat avec l'équipe de l'IFST-TAR Nantes spécialisée sur le comportement des aciers (S. Chataigner et L. Gaillet) ont permis de montrer que la modélisation de cette relaxation peut être faite avec une formulation similaire au béton, faisant intervenir une part de fluage non linéaire (Maxwell consolidant  $\varepsilon^{r,m}$ ) et une part déformation visco-élastique réversible (module de Kelvin-Voigt  $\varepsilon^{r,kv}$ ), comme précisé dans l'équation 5.6 [Chhun et al., 2018]. La formulation adoptée permet d'utiliser ce modèle dans des codes d'éléments finis non linéaires capables de prendre en compte l'évolution incrémentale des conditions thermomécaniques. Comme pour le modèle de fluage du béton, le modèle de relaxation des aciers n'utilise pas de fonctions de relaxation explicite mais stocke l'état du matériau uniquement par le biais de variables internes qui sont les déformation élastiques, de Maxwell et de Kelvin-Voigt, la contrainte appliquée et le taux de charge maximum.

$$\sigma^{r} - \sigma_{0}^{r} = \mathbf{E}^{r} \left( \varepsilon^{r} - \varepsilon^{r, pl} - \varepsilon^{r, m} - \varepsilon^{r, kv} \right)$$
(5.6)

Où:

- $\sigma_0^r$  est la précontrainte initiale appliquée;
- $\varepsilon^{r,pl}$  est la déformation plastique;
- $\varepsilon^{r,m}$  est la déformation irréversible de l'étage de Maxwell (équation 5.7);
- $\varepsilon^{r,kv}$  est la déformation de l'étage de Kelvin-Voigt (équation 5.11).

Pour considérer la réduction progressive de la cinétique de relaxation, le niveau Maxwell est non linéaire et dépend de la déformation de fluage irréversible (équation 5.7) à travers un coefficient de consolidation  $C^{C,r}$  qui atténue la vitesse de relaxation au cours du temps. La vitesse de relaxation, comme montré dans la littérature [Toumi Ajimi et al., 2017], dépend également de façon non linéaire du taux de chargement et de la température. Ceci est reproduit par les coefficients  $k^{r,M}$  et  $k^{r,T}$  dont les paramètres d'évolution avec la contrainte et la température sont identifiés sur des essais réalisés à plusieurs taux de chargement et températures.

$$\dot{\varepsilon}^{r,m} = \frac{\varepsilon^{el}}{\tau_{ref}^{m,r} C^{C^r}} \text{ et } C^{C^r} = \frac{1}{k_{ref}^r \cdot k^{r,\mathrm{T}} \cdot k^{r,\mathrm{M}}} \cdot \exp\left(\frac{1}{k_{ref}^r \cdot k^{r,\mathrm{T}} \cdot k^{r,\mathrm{M}}} \frac{\varepsilon^{r,m}}{\varepsilon^{r,el}}\right)$$
(5.7)

Où:

- $\tau_{ref}^{m,r}$  est le temps caractéristique de Maxwell;
- C<sup>C<sup>r</sup></sup> est le coefficient de consolidation;
- $k_{ref}^r$  est un paramètre matériau déterminé sur un essai au taux de chargement et à la température servant aussi à l'identification de  $\tau_{ref}^{m,r}$ ;
- $k^{r,M}$  traduit la non-linéarité de la vitesse de fluage vis à vis de la contrainte (eq. 5.8);
- *k*<sup>*r*,T</sup> représente l'effet de la température sur la vitesse de fluage (eq. 5.9).

La non linéarité de l'amplification de la vitesse de relaxation lorsque le taux de chargement augmente est traduite par la fonction  $k^{r,M}$  définie par l'équation suivante. Le paramètre  $\chi$  permet de déterminer le taux de chargement critique  $\mu^{cr}$  gérant la non linéarité. Si  $\chi = 1$  la relaxation reste linéaire vis à vis du chargement. Il a été identifié pour les câbles de précontraintes contemporains (T15.2) égal à 1.45 [Chhun et al., 2018].

$$k^{r,M} = \frac{\mu^{cr}}{\mu^{cr} - \mu} \operatorname{avec} \mu = \frac{|\sigma|}{f_{y}} \operatorname{et} \mu^{cr} = \frac{2}{3} \frac{\chi}{\chi - 1}$$
(5.8)
La non linéarité vis à vis de la température est traduite par une fonction d'activation thermique (Eq. 5.9) dans lequel le paramètre d'activation  $A^T$  dépend du taux de chargement capable d'agir sur la thermoactivation  $\mu^{TM}$  (Eq. 5.10). Un paramètre constant et intrinsèque comme cela est le cas pour le béton, ne permettait en effet pas de reproduire les différents essais présentés sur la figure 5.9.

$$k^{r,\mathrm{T}} = \exp\left[\mathrm{A}^{\mathrm{T}}(\mathrm{T} - \mathrm{T}_{ref})^{n}\right] \text{ si }\mathrm{T} > \mathrm{T}_{ref}$$

$$(5.9)$$

$$A^{T} = A_{ref}^{T} \cdot \exp(\gamma \cdot \mu^{TM}) \text{ et } \mu^{TM}(t_{i+1}) = \max\left(\mu^{TM}(t_{i}), \mu^{(t_{i+1})}, 0.7\right)$$
(5.10)

Les résultats de la littérature montrent également qu'une déformation différée court-terme se produit (visible lors d'essais de chargement-déchargement successifs) [Toumi Ajimi et al., 2017]. Cet effet court-terme, réversible, est également influencé par la température, tant au niveau de l'amplitude que de la cinétique, qui augmentent avec la température. Par souci de simplification vis à vis de l'identification des paramètres, cet effet est traduit dans le modèle par la même fonction que pour l'étage de Maxwell en affectant le temps caractéristique et le module de Kelvin (équation 5.11).

$$\dot{\varepsilon}^{r,k\nu} = \frac{1}{\tau_{ref}^{r,k} \cdot \frac{1}{k^{r,\mathrm{T}}}} \left( \frac{\varepsilon^{r,el}}{\psi^r \cdot \frac{1}{k^{r,\mathrm{T}}}} - \varepsilon^{r,k\nu} \right)$$
(5.11)

Où:

- $\tau_{ref}^{r,k}$  est le temps caractéristique;
- $\psi^r$  est le module de Kelvin;
- *k*<sup>*r*,T</sup> représente l'effet de la température sur la vitesse et l'amplitude de fluage.

Les paramètres du modèle de relaxation sont identifiés sur des essais à chargement constant (mais avec plusieurs taux de chargement  $\mu$  sur la figure 5.9a) et à plusieurs températures d'essai ainsi que sur un essai réalisé à température variable avec des phases de déchargement et rechargement (permettant donc d'identifier de façon plus découplée de l'étage de Maxwell les paramètres de l'étage de Kelvin). Le résultat de cette identification est présenté sur la figure 5.9.



FIGURE 5.9 – Identification des paramètres du modèle de relaxtation des câbles de précontrainte [Chhun et al., 2018]

Une fois les paramètres identifiés, le modèle est validé sur la prédiction d'un autre essai pour lequel la température est maintenue à 20°C jusqu'à 200h. L'acier est ensuite déchargé et chauffé à 100°C avant d'être rechargé afin d'atteindre le même niveau de déformation élastique qu'avant déchargement. Cette configuration thermo-mécanique est maintenue jusqu'à 450h puis l'acier est de nouveau déchargé, chauffé jusqu'à 140°C et rechargé. La comparaison des résultats de relaxation obtenus expérimentalement par [Toumi Ajimi et al., 2017] et par la modélisation est présentée sur la figure 5.10.



FIGURE 5.10 – Validation du modèle de relaxation des cables en température [Chhun, 2017] sur un essai à incréments de température (résultats expérimentaux issus de [Toumi Ajimi et al., 2017])

### 5.3.3 Simulation du comportement de la maquette précontrainte PACE

La modélisation des aciers passifs par éléments homogénéisés et avec la prise en compte du comportement différé des câbles de précontrainte a été testée, dans le cadre de l'ANR Macena, par la simulation de l'essai PACE [Herrmann et al., 2009]. La maquette PACE a été conçue comme un volume de structure représentatif d'un mur d'enceinte de confinement nucléaire. Il s'agit d'un mur courbe de 3.5m de long, 1.8m de large et 1.2m d'épaisseur (Fig. 5.11).



FIGURE 5.11 – Modélisation de la mini-structure PACE et de son ferraillage actif et passif

La maquette est fortement ferraillée, comme le sont les enceintes de confinement, avec un ferraillage passif vertical et orthoradial de 1% en peau et des cadres représentant un ferraillage radial de 0.15%. Ce ferraillage est modélisé, comme on peut le voir sur la figure 5.11, par des éléments homogénéisés comprenant des aciers répartis sur tout le volume pour les cadres et seulement sur les surfaces pour les aciers longitudinaux. La structure est également précontrainte orthoradialement par 4 câbles répartis sur la hauteur à mi-épaisseur. La force de précontrainte initiale appliquée conduit à un état de contrainte de 12 MPa dans le béton.

La campagne expérimentale consiste à effectuer un essai sous différentes configurations de charge (appelées RUN), correspondant à l'état du confinement à différents stade de son cycle de vie. Afin de tenir compte du fluage de l'enceinte de confinement (béton et câbles) pendant sa durée de vie, la précontrainte des câbles horizontaux est réduite progressivement pendant l'essai pour passer de 100% dans le RUN1 à 60% dans le RUN4 (Fig. 5.12a). Pour chaque RUN, une pression est appliquée sur la face interne du spécimen avec une valeur de 5.3 bars pour les RUNs 1 à 3 puis 6 bars pour les RUNs 4 à 6. A chaque fois, les déformations radiales et orthoradiales sont mesurées et la fissuration est relevée.



FIGURE 5.12 – Prédiction du comportement mécanique du mur PACE [Chhun, 2017]

L'essai est modélisé dans sa totalité depuis le coulage afin de prendre en compte un éventuel effet du comportement au jeune âge sur les essais de mise en pression. La maquette n'étant pas bridée, on observe peu d'endommagement lié aux déformations au jeune âge, hormis un faible endommagement diffus sur les surfaces du fait du gradient cœur-peau au moment du pic de température. Les 6 RUNs sont ensuite prédits et les résultats sont comparés pour le RUN2 en terme de déformations (figure 5.12) (puisqu'aucune fissuration localisée n'est observée expérimentalement et numériquement au niveau de chargement de précontrainte de ce RUN) puis en termes de faciès de fissuration pour le RUN6 (figure 5.13).



FIGURE 5.13 – Prédiction du faciès de fissuration lors du RUN6 [Chhun, 2017]

Les déformations obtenues lors du RUN2 sont très bien reproduites par la modélisation utilisant les éléments homogénéisés BA-BP. Le faciès de fissuration pendant l'essai RUN 6 est, quant à lui, globalement bien reproduit mais l'ouverture de fissuration est sous-estimée (environ 200  $\mu$ *m* pour les résultats numériques et environ 400-500  $\mu$ *m* observés expérimentalement). Si nous comparons la somme de la largeur des fissures le long d'une ligne horizontale, les résultats sont plus similaires. En effet il est expérimentalement observé moins de fissures, mais plus ouvertes. Il faut noter que la version actuelle du modèle d'éléments BA homogénéisés considère une liaison parfaite entre les armatures et le béton. Avec la prise en compte d'un possible glissement entre les armatures et le béton, on s'attendra à obtenir une fissuration moins diffuse, et par conséquent une plus grande ouverture de fissure.

## 5.4 Phasage de réalisation

#### 5.4.1 Principe de modélisation

La question de prendre en compte le phasage de réalisation dans le calcul du comportement mécanique du béton au jeune âge s'est posée de façon prégnante lors du contrat obtenu auprès de l'Andra (UPS4 programme de simulation sur structures) puisqu'il s'agissait de prévoir le comportement des structures de soutènement d'un tunnel destiné au stockage de déchets radioactifs (diamètre de creusement du tunnel 10m), avec une mise place du soutènement au fur et à mesure de l'avancée du creusement (1m en recul du front de taille). Nous avons pour cette étude développé une technique d'incrémentation de maillage, modifiant celui-ci au creusement puis coulage de chaque nouvelle tranche d'1m. Cependant, cette technique nécessitait un lourd programme d'appel puisqu'à chaque nouvelle tranche coulée, il faut reprojeter toutes les variables internes du modèle d'hydratation et du modèle mécanique obtenues au pas d'avant dans les éléments déjà en place sur le nouveau maillage.

C'est pourquoi pour la suite de nos études (pour l'Andra ou dans le cadre de Macena par exemple), nous avons donc choisi de mettre au point une technique numérique de prise en compte du séquençage de coulage ne nécessitant pas d'incrémentation du maillage. La méthode consiste à mailler la structure complète et à n'activer le modèle d'hydratation que si l'élément est coulé. L'activation du modèle d'hydratation se fait en introduisant un coefficient retard dans la loi d'affinité d'hydratation (Eq. 5.12) qui est égal à zéro lorsque le temps est inférieur à la date de coulage de la zone géométrique considérée, et à 1 dès que le temps atteint la date de coulage ( $t_{coul}$ , Eq. 5.13). Ceci permet donc, à chaque pas de temps, d'avoir un champ continu de toutes les variables internes du modèle thermo-chimique d'hydratation ainsi que du modèle mécanique.

$$\dot{\alpha} = P_{coul} \cdot \widetilde{A}_{ref} \cdot \exp\left(-\frac{Ea}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right)$$
(5.12)

$$\mathbf{P}_{coul} = \begin{vmatrix} 0 & \operatorname{si} t < t_{coul} \\ 1 & \operatorname{si} t \geqslant t_{coul} \end{vmatrix}$$
(5.13)

Le principe a été appliqué à titre d'illustration sur un massif d'appui des tunnels de stockage de déchets radioactifs de l'andra. Ce massif (de diamètre 8m et de longueur 5m) sert à fermer les zones de stockage dont l'étanchéité est assurée par un bouchon en argile gonflante qui vient s'appuyer sur ces massifs en béton. Il s'est agi d'étudier 2 solutions de coulage différentes pour ce massif (coulage en 24h dans les 2 cas) : un coulage par tranches en avancement longitudinal et un par couches en avancement vertical. Le champ de  $t_{coul}$  rentré dans le modèle afin de modéliser cet avancement vertical est illustré sur la figure 5.14.



FIGURE 5.14 – Principe du coulage par phase avec activation progressive du modèle d'hydratation [El Bitouri et al., 2016]

La prise en compte du phasage de réalisation permet un meilleur réalisme du comportement thermo-mécanique jeune âge de la structure. Si l'on regarde par exemple le faciès d'endommagement obtenu pour le massif d'appui avec les 2 scénarios de coulage (fig. 5.15), on constate que l'on a un effet de ce séquençage sur la réponse mécanique globale. En effet lors de l'échauffement de la structure (en observant par exemple le faciès d'endommagement à 4j correspondant à cette phase d'échauffement) on constate que la fissuration de surface est plus importante dans la moitié supérieure du cas coulé verticalement (D<sup>t</sup>  $\approx$  0.7 sur la figure 5.15a). Lorsqu'on coule par tranche en avancement horizontal, la fissuration de surface due au gradient thermique cœur-peau est quant à elle négligeable (D<sup>t</sup> < 0.2 sur la figure 5.15c). Par contre l'impact sur la fissuration localisée se développant au refroidissement est peu notable (Figs. 5.15b et 5.15d), puisque le massif d'appui fissure dans les deux cas même si la fissure est légèrement retardée dans le cas du coulage vertical.



FIGURE 5.15 - Champs d'endommagement à 4j et lors de la première fissure pour 2 phasages différents

### 5.4.2 Simulation du comportement de la maquette Vercors au jeune âge

Cette technique, ainsi que la modélisation du ferraillage passif par éléments finis homogénéisés et de l'effet d'échelle, a été appliquée à la prédiction du comportement au jeune âge de l'enceinte interne de la maquette Vercors (maquette d'une enceinte de confinement à l'échelle 1/3). Cette application a été effectuée dans le cadre de notre participation au benchmarck international organisé par EDF sur ce sujet [Chhun et al., 2016].

Il s'agissait plus précisément d'évaluer les déformations et la fissuration de la partie inférieure de l'enceinte (gousset + partie inférieure du mur d'enceinte) lors des premières semaines après le coulage. La géométrie de la maquette ainsi que la partie modélisée dans cette étude sont représentées sur la figure 5.16.



FIGURE 5.16 – Géométrie de la maquette Vercors - Détails autour du gousset

La simulation de l'hydratation du béton est faite en respectant le phasage de réalisation, et en prenant compte comme instant initial la date de coulage du radier. En effet celui-ci étant très massif (avec aucune précautions spécifiques prises en compte lors de son coulage) on estime qu'il présente un risque de fissuration qui pourrait ensuite influencer le comportement du gousset. Le phasage pris en compte est donc le suivant :

- coulage du radier en continu et en 1 seule phase,
- coulage du gousset 35 jours après le radier (chauffage de l'air environnant sur chantier pendant 2 jours afin de conduire à une élévation de température représentative du cœur d'un gousset à l'échelle 1),
- coulage de la 1<sup>ère</sup> levée du mur interne 19 jours après le gousset,
- coulage de la 2<sup>ème</sup> levée du mur interne 10 jours après la 1<sup>ère</sup> levée.

Le principe de coulage par phase avec activation du modèle d'hydratation par zones, mais calcul sur le maillage complet, est illustré sur la figure 5.17. Cette figure présente les champs des variables d'état et internes du modèle THC d'hydratation environ 1 jour après le coulage du gousset. On constate logiquement que le radier est plus hydraté que le gousset et on voit que le modèle d'hydratation n'est pas activé sur les 2 zones du mur interne dont la date de coulage n'a pas encore été atteinte.



FIGURE 5.17 – Illustration du coulage par phase - Valeur des variables internes du modèle d'hydratation 16h après le coulage du gousset

Les résultats numériques obtenus aux points de mesure de température de la maquette sont comparés aux relévés expérimentaux sur la figure 5.18. On constate que, moyennant une bonne prise en compte des conditions aux limites thermiques (chauffage dans les 2 jours après coulage), les résultats numériques sont en adéquation avec les mesures, ce qui permet d'aborder avec confiance la modélisation du comportement mécanique du gousset au jeune âge.



FIGURE 5.18 - Températures par la simulation de la maquette Vercors [Chhun et al., 2016]

La simulation mécanique est faite depuis le coulage du radier (en prenant en compte le piédestal à hydratation stabilisée), sur la structure complète (jusqu'à la 2<sup>ème</sup> levée) avec une condition aux limites de blocage total de la face inférieure du piédestal comme illustré sur la figure 5.19 (seule la moitié est illustrée pour des soucis de visibilité).



FIGURE 5.19 – Maillage de la zone inférieure de la maquette Vercors et ferraillage associé (1=radial, 2=orthoradial et 3=vertical)

Le calcul mécanique jeune âge est effectué en prenant en compte la modélisation homogénéisée des armatures passives (la précontrainte n'étant pas encore mise en place aux dates étudiées) et les champs de ratios d'aciers pris en compte dans les différentes directions est illustré sur la figure 5.19. L'effet d'échelle est également pris en compte et l'exposant de Weibull est calculé à partir du coefficient de variation obtenu sur des mesures de résistances en traction réalisées par différents laboratoire à 28 jours. La maquette ayant été instrumentée et suivie en terme de faciès de fissuration, il est possible de comparer les résultats numériques au comportement de la structure in situ. On constate sur la figure 5.20 que les déformations totales (thermiques + mécaniques) sont bien reproduites par la modélisation.



FIGURE 5.20 - Déformations orthoradiales obtenues par la simulation de Vercors [Chhun et al., 2016]

### CHAPITRE 5. APPLICATION À LA PRÉDICTION DU COMPORTEMENT THCM DE STRUCTURES MASSIVES

Les résultats en termes de fissuration sont présentés sur la figure 5.21, sur la structure complète 3 jours après le coulage du gousset, et avec un détail sur tout le gousset 5 jours après son coulage. On constate tout d'abord que, bien que n'étant pas ici la zone d'intérêt du benchmark organisé par EDF, le radier présente une fissuration à cœur liée au blocage de ses déformations par le piédestal lors de son refroidissement. Le radier est en-effet très massif, coulé sans phasage et à une température de coulage élevée de 27°C. Celui-ci a donc subi un échauffement rapide et important au jeune âge qui a conduit à une fissuration de surface (comme on peut le voir sur la surface latérale extérieure) due au gradient de température puis à une fissuration de cœur due au refroidissement et au blocage des déformations induites par le piédestal.







La figure 5.21b permet de réaliser une comparaison avec les résultats obtenus in situ puisqu'un relevé de fissuration sur les faces internes et externes du gousset a été réalisé sur toute la circonférence de la maquette 5 jours après le coulage du gousset. Expérimentalement il a été observé environ 15 à 20 fissures d'ouvertures allant de 50  $\mu$ *m* à 100  $\mu$ *m* sur les deux faces (avec une grande partie des fissures en vis-à-vis, donc supposées traversantes) ce qui correspond à une ouverture cumulée sur toute la circonférence d'environ 800 à 1500  $\mu$ *m*. Numériquement plus de fissures sont observées, puisque nous dénombrons 25 fissures d'ouvertures toutes inférieures à 100  $\mu$ *m* en surface, pour une ouverture cumulée en surface d'environ 200  $\mu$ *m*. La similitude des résultats est donc acceptable compte tenu de la méconnaissance de certains paramètres (caractérisation de la résistance en traction au cours de l'hydratation, essai de fluage au jeune âge ,...), de certaines conditions aux limites (homogénéité du chauffage du gousset le long de la circonférence) et du fait que l'adhérence acier-béton soit prise comme parfaite dans les éléments finis homogénéisés.

# **Chapitre 6**

# Bilan et Perspectives de recherche

## Sommaire

<b>6.1</b>	1 Bilan global	
<b>6.2</b>	Transfert de connaissances	
<b>6.3</b>	Perspectives scientifiques à moyen terme	
	6.3.1	Évolutions chimiques de bétons à fort taux de substitution et consé- quences mécaniques
	6.3.2	Comportement hygro-mécanique des bétons au jeune âge 126
6.4	Vers une approche unifiée de la prédiction des évolutions physiques et mé- caniques au sein des nouveaux bétons au cours de la vie des ouvrages 136	

## 6.1 Bilan global

Comme l'indique le titre de ce mémoire, mes activités de recherche traitent de la modélisation numérique des couplages THCM (Thermo Hydro Chemo Mécanique) pour la prévision du comportement des grands ouvrages en béton armé. Il s'est agi d'étudier les évolutions physico-chimiques des bétons dans des contextes THCM variés ainsi que leur impact en termes de comportement mécaniques.



FIGURE 6.1 – Récapitulatif de l'approche THCM globale

La figure 6.1 schématise l'approche globale suivie durant ces 10 années de recherche, approche squi peut être qualifiée de multi-physique et multi-échelle.

Multi-physique tout d'abord, car les modélisations phénoménologiques développées pour prédire les évolutions physico-chimiques du béton au cours de la vie des ouvrages gèrent les évolutions simultanées de plusieurs variables caractérisant cet état physico-chimique. Elles font donc appel à la résolution couplée d'équations de conservation de la chaleur, de la quantité d'eau (pression de liquide) et de la variable caractérisant l'état chimique associée à chaque phénomène (degrés d'hydratation pour le jeune âge, quantité de calcium solide dans les hydrates pour le vieillissement des bétons ou leur comportement sous agression chimique, degré de déshydratation ...).

Multi-échelle en temps puisque, lorsqu'on considère les différentes évolutions physicochimiques en oeuvre tout au long de la durée de vie de l'ouvrage (comme illustré sur la figure 6.1), on constate que l'on se retrouve confronté à des phénomènes de cinétiques très différentes avec des phénomènes très rapides au jeune âge, où la plupart des évolutions se font en quelques jours, et phénomènes beaucoup plus lents avec les rééquilibrages chimiques lors du vieillissement ou lors d'une dégradation par une solution agressive. Les études présentées ici ont montré que, compte tenu de ces différences en terme de cinétique, les modélisations pouvaient être simplement chainées, les modèles de vieillissement (rééquilibrage chimique, séchage, déshydratation) ou de comportement en environnement agressif (attaques chimiques) utilisant comme données d'entrée les résultats de l'évolution chimique précédente. La continuité se fait par ce chainage des modèles chimiques et par une continuité des modèles hygrothermique et mécaniques qui vont capitaliser ces évolutions chimiques à travers l'évolution des propriétés physiques et mécaniques et les éventuels endommagement associés. Multi-échelle en espace enfin puisque, même si la finalité reste toujours l'application des modèles développés à la structure, le développement de ces modèles se fait en observant le comportement à l'échelle de la micro-structure afin de comprendre l'origine des évolutions micro-structurales, leur impact sur les propriétés mécaniques pour ensuite développer, à l'échelle du matériau, des lois d'évolution et modèles phénoménologiques permettant de traduire au niveau macroscopique ces évolutions micro-structurales.

Comme présenté en introduction de ce mémoire, et précisé dans chaque introduction de chapitre, ces travaux ont tous été menés dans le cadre de contrats de recherche institutionnels (ANRs et projet national) et industriels (Andra, VINCI, Lafarge). Ces projets ont permis le financement direct de 6 des 7 thèses et 11 des 12 stages recherche de master que j'ai encadrés ou co-encadrés depuis mon recrutement en 2008. La figure 6.2 reporte de façon chronologique ces différents contrats de recherche et encadrements.



FIGURE 6.2 - Bilan comptable des activités menées depuis l'obtention du doctorat

La progression de mes activités de recherche et de mes encadrements a finalement suivi la progression de la vie des structures en béton. Mes activités durant les premières années de mon recrutement ont en effet été plus centrées autour du comportement des structures au jeune âge avec le co-encadrement des thèses de Batian Kolani et Pierre Souyrsi, pour s'étendre, avec les thèses de Youssef El Bitouri, Jin Wang et Ponleu Chhun, au vieillissement des structures sous conditions thermo-hydriques, et enfin s'orienter également aujourd'hui vers le comportement des structures en environnement agressif (dégradation chimique) avec la thèse d'Yvan Thiébaut et celle en cours de Thomas Bes (qui sera développée dans les perspectives).

Cette ouverture progressive vers le comportement des matériau soumis à dégradation, se retrouve également dans mes activités en cours de démarrage : ANR Bibendom pour le comportement sous attaques acides, ANR PIA Inifuge pour le comportement au feu, et d'autres études encore en cours de négociation et apparaissant en italique sur la figure 6.2 (attaque magnésienne sur matériaux modèles par exemple).

Les travaux réalisés ces dix dernières années ont été valorisés par la publication de 17 articles dans des revues internationales de rang A, 2 chapitres d'ouvrage international, 23 conférences internationales et 10 conférences invitées et ont conduit à la rédaction de 25 rapports de contrats. Mes activités de recherche m'ont permis également de développer des relations à l'international avec dès 2010, dans le cadre du projet national CEOS, la coordination de la partie THM du benchmark international Concrack (env. 20 participants). Ces relations se sont plus étoffées depuis 2014 avec mon implication active dans un TC Rilem (TC-235 CMS, leader d'un chapitre du STAR), un projet Cost (TU 1404, membre du Core Group) et une commission de la fib (TG2-1), le tout en lien avec mes activités en termes de comportement au jeune âge.

On note enfin sur ce tableau bilan que toutes mes activités de recherche ont été menées depuis 2011 en parallèle d'une implication au sein de mon établissement d'accueil, que j'estime plutôt significative, puisque j'ai été, jusqu'à cette rentrée 2018, directrice d'études pour la deuxième année, ce qui correspond à la gestion de 150 étudiants, 29 modules d'enseignement et environ une trentaine d'enseignants.

## 6.2 Transfert de connaissances

Je souhaitais enfin terminer ce bilan par quelques mots sur le transfert de connaissances. En effet je pense qu'en tant qu'enseignant-chercheur mon rôle est bien entendu de tenter d'innover mais aussi, et même peut-être surtout, de transférer les connaissances que j'acquiers à travers mes travaux de recherche vers la société.

- Formation des étudiants : Dans *"enseignant-chercheur"* il y a *"enseignant"* donc ce transfert de connaissances se fait bien entendu en premier lieu auprès des étudiants que l'on forme au sein des différentes formations de Génie Civil auquel le LMDC est rattaché, soit près de 1200 élèves répartis à l'IUT, en licence, masters (IDRIMS et COAB), à l'UPSSITECH et à l'INSA.

Au sein de l'IUT (département GCCD de Toulouse au sein duquel j'ai été recrutée) une partie de mes enseignements (effectués en RDM) ne me permet pas de mettre directement en application les connaissances acquises par la recherche. Cependant, je pense que, même à un niveau bac+2 et bac+3 (la très grande majorité des étudiants de DUT poursuivant maintenant au moins en LPro), il est important d'initier ces futurs cadres intermédiaires du BTP aux notions d'évaluation de la durée de vie et au fait que le chargement des structures en béton n'est pas que mécanique pour certains ouvrages spécifiques, au vu notamment des évolutions progressives des normes sur ces aspects. J'ai donc eu l'occasion en ce sens de vulgariser mes connaissances du comportement THCM des ouvrages en béton au sein du module de Modélisation des Structures au semestre 4 et en proposant des PFE sur des projets de constructions dans lesquels ces notions là pouvaient être abordées (élévation de température lors du coulage de pièces massives, durabilité des structures enterrées, ...). A terme, une introduction de ces thématiques dans une licence professionnelle, ou en 3ème année dans le cadre de la possible réforme du DUT en 180 ECTS, pourrait être envisagée pour les spécialités ayant trait aux ouvrages d'art et ouvrages de Génie Civil pour lesquels les dimensionnements et les préconisations de mise en œuvre sont également faits sur ces critères de durabilité et de maintenance, et pas seulement sur des critères mécaniques.

J'ai pu également introduire ces notions de comportement THCM des structures dans le cadre des mes interventions au sein des 2 masters de Génie Civil habilités par l'UPS : COAB (Conception Ouvrages d'Art et Bâtiment) destiné à former des cadres de bureau d'études structures et IDRIMS (Ingénierie de la Durabilité, Innovation Matériaux et Structures) destiné à former de futurs chercheurs et des cadres entre autres pour des entreprises faisant du diagnostic et de l'expertise (les enjeux dans ce secteur étant importants). Dans le cadre de ces formations l'objectif de mes interventions est dans un premier temps de les initier aux non linéarités de comportement mécanique induits par les évolutions physicochimiques des matériaux. Il s'agit également de les former à l'utilisation d'outils éléments finis pour la modélisation de ces phénomènes. En effet même si peu de bureaux d'études ont à ce jour recours à ces outils là, les normes de dimensionnement tendent à évoluer pour autoriser, et même inciter, une plus large utilisation de logiciels éléments finis plus appropriés aux calculs non linéaires sur des structures complexes (il ne s'agit pas là d'applications de bâtiments ordinaires bien entendu). Nous avons fait le choix au sein de ces 2 masters de les former à l'utilisation de Castem, car bien que moins ergonomique, il permet d'utiliser des modèles mécaniques non linéaires couplés à la modélisation d'évolutions physico-chimiques. J'ai pu dans ce cadre développer une version simplifiée du modèle d'hydratation qu'ils peuvent ainsi utiliser couplé au modèle de comportement mécanique du LMDC de façon à prévoir le risque de fissuration au jeune âge. Ce modèle simplifié devrait d'ailleurs être versé à Castem sous peu pour une plus large diffusion au sein de la communauté.

- Transfert vers le monde industriel : La diffusion des compétences, au delà de la communauté académique, vers l'industrie du BTP est également pour moi quelque chose d'important. J'y ai été initiée dès mon doctorat, puisqu'en bourse CIFRE avec VINCI Construction Grands Projets. Cette collaboration forte avec Lionel Linger et Laurent Boutillon s'est poursuivie après ma thèse puisqu'ils utilisent sur leurs chantiers les outils de prédiction d'élévation de température au jeune âge afin de valider leurs choix de matériaux. Je continue à intervenir en support de leur ingénieur en charge de ces calculs, et j'estime que ce transfert de développements scientifiques vers le monde industriel est quelque chose de valorisant et important.

Ce soin de développement d'outils qui à terme pourraient être transférés vers l'industrie guide aussi en partie mes développements en recherche et je souhaite à l'avenir étendre ce soutien au transfert de compétences en aidant, par exemple, au développement au sein de la Division de Transfert de Technologie associée au LMDC d'une expertise en calculs numériques (souhait de développement de la direction du laboratoire et du responsable de la Division Transfert). L'implémentation d'une version du modèle d'hydratation en différences finies pourrait par exemple permettre facilement la prédiction de développement de températures au jeune âge dans une majorité des cas concernés pour lesquels le transfert thermique est seulement 1D (murs épais, radiers, piles de ponts, ...). Cette implémentation en différences finies pormettrait par exemple une capitalisation plus simple et un couplage avec d'autres modélisation chimiques développées au laboratoire sur d'autres outils que Castem.

Ce transfert vers le monde industriel se fait aussi à plus long terme à travers l'évolution des normes et règlements. Dans le cadre du projet national CEOS nous avons été impliqués dans la production de livrables présentant des préconisations à destination des professionnels en terme de dimensionnement des ferraillages des structures massives armées, notamment vis à vis de la problématique de la fissuration au jeune âge pour ce qui nous concerne. J'ai poursuivi dans cet esprit en m'impliquant dans un TC Rilem (TC-235 CMS) et un projet Cost (TU 1404) traitant, entre autres, du risque de fissuration des structures au jeune âge. Cela a donné lieu jusqu'à présent à la rédaction d'un State of The Art, plus visible il est vrai au niveau académique qu'industriel, et la rédaction de recommandations concernant la modélisation de ces phénomènes à destination des industriels est en cours de façon complémentaire au sein de ces deux projets. Je suis également impliquée au niveau international en étant membre du groupe TG2-1 de la fib traitant de la fissuration des bétons. Un groupe de travail spécifique sur le comportement au jeune âge des structures a été monté dans le cadre de cette commission afin de proposer une publication qui pourrait à terme faire également évoluer le Model Code, généralement précurseur des évolutions de l'Eurocode.

## 6.3 Perspectives scientifiques à moyen terme

Les perspectives de recherche envisagées pour les prochaines années s'inscrivent dans la droite ligne des activités présentées dans ce mémoire. Elles s'articulent autour de deux axes principaux qui sont les *évolutions chimiques de bétons à base de liants composés et leurs conséquences en terme de comportement mécanique* et le *comportement hygro-mécanique des bétons au jeune âge*.

### 6.3.1 Évolutions chimiques de bétons à fort taux de substitution et conséquences mécaniques

#### Lixiviation des bétons à base de ciments à faibles rapports C/S

Suite aux travaux réalisés dans le cadre du post-doctorat de M. El Gonounni (comportement mécanique des bétons lixiviés) et de la thèse de Y. El Bitouri (évolution chimique endogène des bétons bas pH), j'ai eu la chance d'obtenir récemment le financement d'un projet de recherche de 4 ans auprès de l'Andra. Cette étude s'appuie sur le recrutement d'un stagiaire M2R (co-encadré avec F. Cassagnabère) et d'un doctorant (Thomas Bes encadré à 100%). Elle s'inscrit dans le cadre du groupement de laboratoire MOUV sur le comportement mécanique des ouvrages de l'ANDRA.

Les bétons qui seront mis en œuvre par l'ANDRA dans les ouvrages enterrés de stockage des déchets moyenne activité vie longue (MAVL) seront en effet soumis à long terme à une dégradation chimique provoquée par l'eau du site, dégradation qui va altérer les propriétés mécaniques du béton risquant ainsi que la stabilité du stockage ne soit plus assurée. De précédentes études ont déjà été menées (et présentées au chapitre 4) sur le comportement mécanique résiduel de ces bétons dégradés ou en cours de dégradation pour les bétons hautes performances qui seront mis en œuvre sur les tunnels. Mais de nouveaux bétons sont envisagés pour une partie des éléments de structures de stockage (éléments de scellement des tunnels) et des études sont donc de nouveau nécessaires pour évaluer le comportement mécanique de ces bétons bas pH (à forte teneur en silice) lorsqu'ils sont exposés à une solution agressive (conduisant à une lixiviation).

Lors d'une étude préliminaire (stage d'Adrien Cabrerizo co-encadré avec F. Cassagnabère), nous avons mis en évidence que les bétons bas pH avaient une résistance importante vis-àvis de l'attaque sulfatique. En effet les gonflements observés au cours du protocole accéléré d'étude (saturation de l'éprouvette par la solution d'attaque) sont inférieurs à ceux observés pour un béton classé comme résistant au sulfates (SR en rouge sur la figure 6.3a).



FIGURE 6.3 – Comportement du béton bas pH sous protocole accéléré d'attaque sulfatique [Cabrerizo et al., 2016]

Les analyses au MEB et aux DRX ont mis en évidence l'absence de précipitation de phases sulfatiques expansives, les conséquences de l'attaque sulfatique sur ces bétons étant seulement une décalcification des hydrates (voir figure 6.3b).

C'est pourquoi pour la suite de l'étude, seul le scénario défavorable d'attaque de lixiviation accéléré a été retenu pour caractériser le comportement mécanique résiduels des bétons bas pH sous sollicitation chimique. La dégradation sera accélérée par utilisation d'une solution de nitrate d'ammonium dosée à 6 mol/l comme cela était fait dans les études précédentes sur les bétons ANDRA CEMI et CEMV, afin de pouvoir obtenir dans le temps de la thèse, des épaisseurs dégradées suffisamment importantes pour en voir l'effet sur les propriétés mécaniques au niveau macroscopique.

Une première partie de l'étude va consister à comprendre les mécanismes de dégradation de la pâte de ciment bas pH soumise à la lixiviation. Cette étape est en effet essentielle pour adapter le modèle de lixiviation développé au cours des études précédentes au cas du béton bas pH. On s'appuiera pour cela sur une caractérisation fine de la micro-structure et de la minéralogie de la matrice cimentaire à plusieurs échéances de dégradation.

Les modifications chimiques et minéralogiques des phases hydratées et de la microstructurales des matériaux seront analysés en mettant en œuvre un panel de techniques analytiques du solide et du liquide (DRX, MEB, Analyses thermique, microsonde électronique, ICP-OES...) dont les résultats seront croisés pour établir le diagnostic d'altération. L'objectif est de comprendre les mécanismes de dégradations pour ces liants qui ont, à l'état sain, un rapport C/S moyen des C-S-H déjà faible. Cette dégradation pourra ainsi ensuite être modéliser en étendant le modèle d'évolution chimique proposé dans la thèse de Y. El Bitouri (voir chapitre 2) au cas d'une dégradation exogène.

Il s'agira ensuite de caractériser et analyser le comportement mécanique d'éprouvettes en béton bas pH soumises ou ayant subi une dégradation chimique. Afin d'analyser et comprendre le comportement identifié sur ces essais couplés, une caractérisation à l'échelle du matériau sera nécessaire. Il s'agit d'identifier des lois de pertes de propriétés mécaniques en fonction de l'état de dégradation du matériau, puisque celles proposées dans les précédentes études sur les BHP ANDRA tenait compte de l'effet de la Portlandite qui n'est pas présente dans les liants bas pH et de l'effet de la décalcification des C-S-H avec des rapports C/S initialement élevés.

L'enjeu réside principalement dans le couplage entre la sollicitation mécanique (maintenue dans le temps afin d'être représentatif des sollicitations rencontrées dans l'ouvrage) et la sollicitation chimique avec le développement d'essai permettant de charger des échantillons en cours de dégradation sur tout ou partie de l'éprouvette. Un essai de fluage en cours de dégradation est donc en cours de mise en œuvre.

Afin de pouvoir discriminer l'effet de la dégradation de l'effet de la saturation de l'éprouvette (la vitesse de fluage étant fortement influencée par l'état de saturation du matériau), il est envisagé de réaliser en parallèle un essai sur éprouvette soumise à une eau en équilibre avec la solution interstitielle (reconstituée pour reproduire le cortège ionique qui aura été mesuré sur solution extraite). Le principe est présenté sur la figure 6.4.



FIGURE 6.4 - Montage de l'essai couplé fluage-lixiviation sur les bas pH [Bes and Lacarrière, 2018]

#### Déshydratation des bétons à base de ciments composés

La seconde perspective directe que l'on peut dégager des travaux menés et présentés dans ce mémoire concerne la déshydratation des bétons à base de liants composés. En effet, le modèle de déshydratation développé dans le cadre de la thèse de Jin Wang ouvre des perspectives intéressantes concernant son applicabilité aux liants à base de ciments composés. Comme il est basé sur des lois de déshydratation propres à chaque famille d'hydrates, un couplage avec le modèle d'hydratation multiphasique rend son application à ce type de liants théoriquement possible sans aucun recalage. A titre d'illustration on peut ainsi voir à la figure 6.5 la perte d'eau simulée (vitesse de chauffage de 5K/min) pour un ciment portland et pour un ciment riche en silice et dont la pâte hydratée ne contiendrait pas de portlandite mais beaucoup de C-S-H.



FIGURE 6.5 - Illustration de la déshydratation sous chauffage à 5K/min pour 2 ciments

On constate que le comportement est relativement différent avec une perte d'eau plus précoce dans le cas du liant composé, ce qui remettrait en cause l'hypothèse faite de négliger l'effet de la déshydratation en dessous de 150 ou 200°C dans le cas des liants composés. Des études complémentaires sont cependant nécessaires pour affiner la compréhension dans le cas de ces liants composés. En effet, dans ces liants, nous avons pu voir au chapitre 2 que les rapports C/S des C-S-H formés étaient très différents de ceux observés dans un portland, conduisant donc à une structure minéralogique aussi différente.

Même si les résultats obtenus par [Rodriguez et al., 2017] sur des C-S-H synthétiques semblent montrer que le comportement en déshydratation entre 100 et 450°C reste sensiblement similaire quelque soit le rapport C/S, il faut étudier la validité de ces observations sur des C-S-H réels. Par ailleurs, l'effet du taux de chauffage sur cette phase majeure de la pâte de ciment hydratée reste à ce jour non complètement validée puisqu'aucun essai sur C-S-H purs à différents taux de chauffage ne semble disponible dans la littérature.

Les travaux menés dans le cadre de la thèse de J. Wang devraient donc être complétés par une étude expérimentale plus poussée afin de caractériser le comportement des C-S-H de différentes natures en température. On pourrait ainsi envisager des essais d'ATG à différents taux de chauffage réalisés sur des matériaux modèles et sur des liants composés à divers pourcentages de substitution de ciment par des additions minérales.

D'un point de vue modélisation, le pas reste à franchir quant au couplage de cette déshydratation avec la modélisation du transport d'eau (développée au chapitre 3). Le principal verrou selon moi est la compréhension des variations de quantités d'eau au sein des C-S-H et la nature de cette eau : quelle part de l'eau doit être gérée par l'isotherme de rétention d'eau? quel découplage faire entre la dépendance de l'isotherme à la température et les phénomènes de déshydratation? Une approche globale est nécessaire mais devra s'appuyer sur une meilleure connaissance de la structure des C-S-H et de l'eau au sein de cette phase. Une collaboration avec d'autres laboratoires spécialisés sur la minéralogie des C-S-H pourrait être ici intéressante (équipe de F. Claret - BRGM). Ce n'est que lorsque cet aspect de couplage transport hydrique - déshydratation sera mieux compris et modélisé que l'on pourra envisager de prendre en compte l'effet de la déshydratation sur le comportement mécanique des bétons.

#### Comportement mécanique à petite échelle des C-S-H et C-(A)S-H soumis à une dégradation

Afin de pouvoir étendre les modèles de dégradation chimiques et de leur conséquence mécaniques à d'autres types d'attaques, il parait important, comme souligné précédemment pour la déshydratation par exemple, d'étudier plus finement le comportement mécanique des phases hydratées des matériaux cimentaires à l'état sain et sous dégradation chimique.

Le LMDC ne disposant pas d'appareil d'analyse des propriétés mécaniques à petite échelle (nanoindendation), cette étude plus amont devra se faire en collaboration avec d'autres équipes de recherches. Le montage d'un projet de collaboration entre le laboratoire LETIS de l'IRSN et le LMDC (A. Bertron et moi-même) est en cours afin d'investiguer le comportement mécanique de matériaux cimentaires modèles en conditions de dégradation. L'objectif serait de combiner leurs compétences en terme de synthèse de phases C-S-H et C-(A)S-H et nos compétences en terme de caractérisation physico-chimique et modélisation mécanique pour évaluer le comportement de matériau cimentaires sous d'autres types de dégradation, comme l'attaque magnésienne par exemple.

Les techniques d'homogénéisation mécaniques mises en oeuvre dans la thèse de Pierre Souyris pourraient être ici réemployées afin de prédire la perte de propriétés élastiques de matériaux cimentaires par remplacement progressifs des C-S-H et de la portlandite par des M-S-H dont les propriétés mécaniques semblent très mauvaises. Ce type d'approche porrait ensuite être étendu dans le cadre des perspectives aux travaux de l'ANR Bibeom afin d'évaluer l'effet de la formulation des matériaux cimentaires sur la résistance à la dégradation et sur le maintien des propriétés mécaniques (à condition d'étendre nos connaissances sur la minéralogie et les propriétés liantes des phases C-(A)-S-H).

#### Hydratation des liants à fort taux de substitution ou adjuvantation

La dernière perspective à moyen terme concernant les évolutions chimiques des liants composés concerne l'hydratation de liants à fort taux de substitution ou adjuvantation. Comme cela a été vu au chapitre 2, le modèle d'hydratation multiphasique développé durant ma thèse pour les liants composés, avec pourcentage modéré de remplacement du ciment par des additions pouzzolaniques, a été étendu au cas des laitiers avec la prise en compte d'une stœchiométrie adaptative des C-S-H produits par les laitiers lorsqu'ils sont combinés avec du ciment. Dans le cas de la substitution par du laitier, qui a une granulométrie comparable à celle du ciment, le fait de négliger, comme nous le faisons, la dépendance au taux de substitution de l'effet de nucléation du ciment n'a pas d'incidence. Nous avons en effet pu voir que le modèle permet de reproduire correctement les cinétiques de réactions pour des taux de substitutions allant jusqu'à 70%.

Cependant, si l'on veut étendre l'utilisation du modèle aux nouveaux matériaux cimentaires tels que les liants à fortes teneur en additions de diverses natures (additions réactives, fines) et formulés avec adjuvants (BUHP, bétons projetés, bétons préfabriqués, ...), les interactions physiques et chimiques entre les composés réactifs et celles avec les adjuvants sont à définir.

Lors de ma collaboration avec J. Verdier dans le cadre de la thèse de Thierry Leung, nous avons pu mettre en évidence, à partir de comparaison du modèle avec des résultats de la litté-rature, que pour des particules plus fines cet effet ne pouvait être négligé. En effet, on constate sur la figure 6.6 que le modèle (pour lequel les paramètres sont identifiés sur le cas d'une substitution avec un diamètre de grains inertes de 215  $\mu$ m) conduit à une sous-estimation de la cinétique de dégagement de chaleur pour les diamètres de grains inertes plus fins. Les résultats de la littérature semblent également montrer que cet effet de nucléation dépend non seulement du diamètre de la particule fines utilisée mais aussi du taux de substitution. Dans le cas de liants spécifiques tels que les liants bas pH pour lesquels les taux de substitutions sont importants (moins de 30% de ciment portland) avec un fort pourcentage de fumée de silice qui est une particule très fine, on peut s'attendre à ce que cet effet de nucléation soit significatif.



FIGURE 6.6 – Cinétiques de dégagement de chaleur pour un ciment avec substitution par des particules de quartz de tailles différentes (mesures issues de [Lawrence et al., 2003] reproduites dans [Leung Pah Hang, 2015]

Dans ce cadre, une première approche a été proposée lors de la collaboration pour la thèse de Thierry Leung et a consisté à proposer des lois empiriques faisant dépendre les paramètres du modèle d'hydratation actuel du diamètre du grain le plus fin et de son taux d'incorporation [Leung Pah Hang et al., 2013]. Mais des études complémentaires sur matériaux modèles avec additions inertes sont nécessaires.

Cette étude pourrait également permettre d'étendre le modèle aux cas de bétons incorporant d'autres types de particules fines (fillers calcaires par exemple). En effet les résultats actuellement disponibles dans la littérature sur la quantification de l'effet d'additions fines sur la réactivité du ciment à très jeune âge est faite sur des essais de calorimétrie semi-adiabatique pour lesquels la modification du taux de substitution influence les conditions d'essais, puisque modifiant la température au sein du spécimen testé. Il serait donc intéressant de compléter ces résultats par une étude de calorimétrie isotherme qui permet de découpler l'effet de la nucléation de celui de l'activation thermique.

En ce qui concerne en un second temps l'effet d'adjuvant on peut citer à titre d'illustration, les résultats obetnus lors de la thèse de Batian Kolani. Il a en effet été mis en évidence que le superplastifiant utilisé alors (Cimfluid Adagio 4019) avait un effet retardateur de prise mais aussi que ce retard de prise dépendait fortement de la température de gâchage. La figure 6.7 illustre les temps retard identifiés pour ce superplastifiant (utilisé avec un ciment portland) et la loi empirique proposée alors pour reproduire cet effet dans le modèle d'hydratation.



FIGURE 6.7 – Effet de la température de gâchage sur le temps retard induit par un SP [Kolani, 2012]

La proposition de lois empiriques (que ce soit pour l'effet de fines sur les cinétiques de réactions ou pour l'effet d'un adjuvant) ne permet pas de conserver l'une des forces du modèle d'hydratation développé ces dernières années puisque, avec ces lois empiriques, il perd sa capacité prédictive si on change de type de ciment et nécessite une réidentification des paramètres de ces lois empiriques. Si l'on veut pouvoir étendre l'utilisation du modèle d'hydratation à ces nouveaux bétons ayant des spécificités particulières (bétons bas pH, bétons projetés, BUHP, ...), et pouvoir prédire le développement des propriétés mécaniques de ces bétons, il est donc nécessaire d'adapter le modèle existant à la prise en compte de ces effets physiques de fines et adjuvants.

#### 6.3.2 Comportement hygro-mécanique des bétons au jeune âge

Concernant le comportement hyro-mécanique des bétons, il apparaît à mon sens tout d'abord important d'améliorer les connaissances et la modélisation du couplage hydratation/transferts ainsi que le couplage hydratation/comportement mécanique à très jeune âge. La prédiction du développement des contraintes à l'origine de risques de fissuration au jeune âge est en effet fortement conditionnée par la bonne prise en compte de l'évolution des déformations et des propriétés mécaniques au jeune âge. Ceci a fait l'objet d'études précédentes (exposées dans les premiers chapitres de ce mémoire) mais certains aspects restent encore à explorer en particulier au démarrage du développement des propriétés mécaniques.

#### Développement des propriétés instantanées au très jeune âge

D'un point de vue mécanique, un des aspects sur lequel les recherches à venir devraient se concentrer concerne le développement de propriétés mécaniques à très jeune âge (au voisinage du seuil de percolation). Les lois utilisées pour l'instant au niveau macroscopique par la communauté scientifique pour modéliser l'évolution des propriétés en fonction du degré de réaction ou d'hydratation sont inspirées des lois proposées par De Schutter. Dans les précédentes études menées et présentées dans les premiers chapitres de ce document, nous avons pu mettre en évidence que des paramètres indépendants de la formulation du béton pouvait être déterminés (seuil de percolation unique et exposant fonction de la propriété, voir tableau 4.2). Cette identification a été faite en considérant que le seuil de percolation était une propriété indépendante de la caractéristique mécanique étudiée (de façon à conserver un seul paramètre d'identification).

Cette approche permet notamment de faciliter l'utilisation des modèles de comportement jeune âge en phase d'études, lorsqu'une étude maturométrique complète sur le béton n'est pas réalisable, puisque l'effet du type de béton sur les lois d'évolution est seulement pris en compte à travers la valeur des propriétés mécaniques à 28 jours.

Quand on compare les évolutions de cette loi macroscopique à celle obtenue par homogénéisation sur les propriétés élastiques (voir méthodes développées et validées au chapitre 4), on constate, comme l'illustre la figure 6.8, que la loi macroscopique, si l'on impose un seuil de percolation mécanique commun à celui trouvé sur les résistances, peut conduire à très jeune âge à surestimer le développement du module élastique pour les bétons (courbes bleues) et à le sous-estimer pour les mortiers (courbes rouges). Dans le cas de l'étude du risque de fissuration traversante induite par le blocage des déformations au moment du refroidissement dans les structures massives, cette surestimation n'est pas préjudiciable car elle a lieu sur une très courte période et avant les instants de fissuration. Cependant, lorsqu'on s'intéresse au risque de fissuration par gradient cœur-peau par exemple, elle peut conduire à une surestimation du risque de fissuration (les contraintes se développant trop vite). Il apparait donc nécessaire de pouvoir proposer, notamment pour le développement du module élastique, une loi sans seuil mais avec évolution progressive qui permettrait de reproduire l'évolution observée par les calculs d'homogénéisation analytique.



FIGURE 6.8 – Comparaison des évolutions normalisées du module d'Young et de la résistance en compression pour béton et mortier

Lorsqu'on observe la figure 6.8, on constate également que le seuil de percolation semble très différent d'un béton (type BHP) à un mortier (E/C 0.5) alors que la percolation sur les propriétés élastiques (en conditions drainées) semble peu affectée par le type de matériau.

Il pourrait alors être intéressant d'étudier plus précisément l'effet du squelette granulaire ou du rapport E/C sur cette percolation mécanique (sur plusieurs propriétés telles que modules, résistances et énergie de fissuration).

La réalisation d'essais de maturométrie constitue une charge expérimentale importante, avec des contraintes organisationnelles fortes (essais nombreux à réaliser entre 10 h et 24 h après le coulage). C'est pourquoi le développement des propriétés élastiques est généralement appréhendé par des mesures dynamiques. Cependant le passage des valeurs ainsi obtenues au cas statique reste une question non totalement résolue notamment au voisinage du seuil de percolation puisqu'à cette date l'état de l'eau (drainée ou non drainée) a un impact important et que les essais dynamiques ne représentent en ça pas forcément bien la réponse réelle du matériau à une sollicitation mécanique (eau non drainée dans le cas dynamique). Une voie d'étude du développement des propriétés au voisinage du seuil de percolation et de l'effet du squelette granulaire pourrait être l'utilisation de méthodes d'homogénéisation numérique.

Ces compétences n'étant pas représentées au laboratoire, j'ai eu la chance d'obtenir 6 mois de CRCT pour aller, entre autres, me former à ces techniques au sein du laboratoire SIAME à Anglet, en collaboration avec Christian Laborderie qui avait développé ce genre d'outils dans Castem pour des bétons durcis. L'étude menée là-bas s'est concentrée sur la vérification de l'applicabilité de ces méthodes au cas de matériaux en cours d'hydratation, et en particulier à très jeune âge où les propriétés de la pâte sont très différentes de celle des granulats (beaucoup plus rigides). Nous avons pu constater que l'application de ces méthodes au jeune âge nécessitait un nombre plus important de tirages de la distribution granulaire afin d'avoir une réponse statistiquement représentative et qu'il fallait, si l'on souhaitait opter pour une modélisation 2D moins gourmande en ressources, recourir à une formulation en déformations planes (Fig. 6.9).



FIGURE 6.9 – Comparaison des prédictions des propriétés élastiques du mortier à partir de celles de la pâte avec le modèle analytique de Mori-Tanaka (MT) et de calculs mésoscopiques avec l'hypothèse de contraintes planes (CT) et déformations planes (DP)

Ces techniques s'avèrent donc utilisables à très jeune âge, et l'étude initiée avec C. Laborderie pourrait être étendue à l'étude du développement des résistances et de l'énergie de fissuration au voisinage du seuil de percolation, et en particulier sur l'impact du squelette granulaire qui semble éventuellement différent de celui observé sur les modules élastiques comme illustré précédemment sur la figure 6.8.

#### Effet de l'hydratation sur les propriétés de transferts hydriques et le retrait

Lorsqu'on prédit l'évolution du retrait endogène au cours de l'hydratation avec les modèles développés (approche poro-mécanique avec lois d'évolution macroscopiques des propriétés hygro-mécaniques) on constate (voir figure 6.10) que la cinétique de développement n'est pas correctement reproduite dans les tout premiers instants (mesures expérimentales à partir de 12h ici donc valeurs mises à zéro à un degré d'hydratation égal à 0.3) avec une très rapide augmentation entre 12h et 24h (avant 0.4 d'hydratation), augmentation que le modèle prédit plus tardivement).

Il apparait donc important de se concentrer sur la prise en compte de l'évolution des propriétés de transferts et hygro-mécaniques avec l'hydratation, puisque la structuration progressive de la porosité conditionne grandement le développement des dépressions capillaires et donc du retrait.



FIGURE 6.10 – Evolution du retrait endogène en fonction du degré d'hydratation pour le BHP à base de CEMI de l'Andra (mesures issues de [Ladaoui, 2010])

Tel que formulé, le modèle d'hydratation multiphasique développé ces dernières années permet un couplage fort hydratation-transferts hydriques à travers notamment la prise en compte d'un coefficient de diffusion dépendant de la porosité qui est une des variables internes du modèle d'hydratation. Cependant cette évolution est pour l'instant empirique et non reliée aux évolutions des isothermes que nous avons pu mettre en évidence par exemple avec les travaux de Pierre Souyris (chapitre 3). Le principal verrou scientifique est donc la prise en compte de l'évolution des isothermes de sorption et des perméabilités (intrinsèques mais aussi relatives, celles-ci étant liées aux isothermes) au cours du développement de la microstructure. Une première approche a été testée dans les travaux de l'ANR Mefisto à partir de la connaissance de la quantité de C-S-H au cours du temps mais le peu de données expérimentales rend complexe une réelle identification et validation de la forme de ces courbes de rétention d'eau. Les travaux menés au LMDC par [Ranaivomanana, 2010] (encadré par J. Verdier et A. Sellier) ont permis le développement d'un modèle fin de prédiction des courbes de rétention d'eau et des perméabilités relatives à partir de la connaissance de la micro-structure de la pâte de ciment. Il serait donc intéressant de pouvoir réinvestir ces travaux en les couplant au modèle d'hydratation afin d'améliorer la prise en compte de ces phénomènes.

Dans le cadre de ces perspectives à moyen terme, l'étude se concentrerait sur la modélisation analytique puis numérique de la courbe de désorption. En effet la prise en compte des cycles hystérétiques est complexe d'un point de vue numérique puisque l'état de saturation du matériau dépend du chemin de chargement hydrique. Cette prise en compte des cycles dans les modélisation éléments finis est un verrou non encore résolu et qui devra donc être étudié et résolu dans un premier temps sur un matériau hydraté pour lequel ces cycles ne se combinent pas à une évolution de la micro-structure. Cette réduction du champ d'application au cas de la désorption seule est cependant acceptable dans le cadre du comportement au jeune âge des bétons puisque celui-ci présente un degré de saturation élevé et que l'on est donc principalement confronté à de la désorption par consommation d'eau par les réactions d'hydratation et par séchage éventuel lors de la fin de la cure. Ce travail serait à envisager en collaboration avec Jérôme Verdier dont les compétences en termes de caractérisation expérimentales et modélisation analytique des propriétés de transferts sur matériaux durcis complèteraient mes compétences en développement de la micro-structure et modélisation numérique. La modélisation, en vue d'une utilisation à l'échelle du matériau dans les structures, nécessiterait deux étapes :

- une modélisation analytique basée sur l'approche développée par Ranaivomanana pour les bétons durcis. Le modèle s'appuie sur la prise en compte d'une distribution tri-modale des pores (pores des C-S-H, pores capillaires moyens et gros) ce qui pourrait certainement permettre une prise en compte de l'effet de l'hydratation à travers la variation du poids de chaque mode, voire une modification du nombre de modes à considérer.
- la détermination, à travers l'exploitation des résultats de la modélisation analytique, de lois macroscopiques d'évolution des propriétés de transport en fonction de l'avancement des réactions d'hydratation (ou pouzzolaniques) et du degré de saturation permettant une implantation dans les modèles éléments finis THCM développés ces dernières années et précédemment présentés dans ce mémoire.

La levée de ce verrou devra également passer par l'acquisition de données expérimentales sur ces transferts au sein des matériaux en cours d'hydratation, données qui ne sont pas disponibles dans la littérature et semblent inaccessibles par les outils ordinaires compte tenu du temps nécessaire à la réalisation des essais classiques de caractérisation (mise en équilibre hydrique), temps pendant lequel la structure poreuse évoluera avec l'hydratation. Un des enjeux sera donc de mettre au point une série d'essais qui, couplés à la modélisation, permettront par analyse inverse de remonter à la compréhension des évolutions poreuses au cours du temps et leurs impacts sur les transferts. La caractérisation des différentes porosités dans un matériau en cours d'hydratation n'est certainement pas possible quantitativement pour toutes les familles de pores mais on pourrait tirer profit de la combinaison de plusieurs techniques grâce auxquelles la compréhension pourrait être améliorée :

- la porosimétrie mercure, pour laquelle le laboratoire s'est récemment doté d'un appareillage permettant d'atteindre une plus large famille de pores, devrait permettre de qualifier l'évolution de la porosité vers une porosité plus fine au fur et à mesure de la formation des C-S-H;
- la microtomographie, pour laquelle un appareillage performant va bientôt être disponible dans la plateforme Fermat dont le LMDC est membre, pourrait permettre de quantifier l'évolution de la macroporosité. L'essai devrait cependant être réalisé sur pâte (étant donné la très petite taille des échantillons devant être testé pour permettre de capter la porosité capillaire moyenne) mais l'intérêt est ici que le même échantillon pourrait être utilisé tout au long de l'analyse. Une étude pourrait être envisagée en collaboration avec les équipes toulousaines spécialistes de l'analyse des images prises par microtomographie afin de tenter d'obtenir des analyses quantitatives pour ces tailles de pores.
- la caractérisation de la désorption par DVS, technique qui permet des caractérisations plus rapides que des classiques essais de mise en équilibre hydrique car les essais sont réalisés sur des échantillons de petite taille. Des essais sur des échantillons au jeune âge (et donc en cours d'hydratation) pourraient être envisagés et exploités par l'utilisation de la modélisation en couplant cette analyse avec des analyses plus macroscopiques comme des mesures de front de séchage ou de perte de masse globale.

Cette connaissance de l'évolution des courbes de rétention d'eau pourrait alors permettre de mieux comprendre le développement des pressions capillaires avec l'hydratation. Cette influence de l'hydratation sur les pressions capillaires est pour l'instant prise en compte de façon macroscopique par une évolution du module de Van Genuchten (voir chapitre 3) mais on peut s'interroger sur la validité de la loi identifiée car l'identification par analyse inverse sur un essai de retrait (après 48h) conduit à une loi fortement non liénaire (en puissance 5) ce qui semble pouvoir conduire à de plus fortes variabilités. Une investigation plus fine du développement du retrait endogène sera donc nécessaire afin d'identifier si la pression capillaire est le seul mécanisme responsable. Ceci est d'autant plus vrai pour les liants à fort taux de substitutions pour lesquels la pâte est essentiellement composée de C-S-H de faibles taux C/S.

#### Fluage du béton au jeune âge

Un autre verrou scientifique non encore complètement élucidé lorsque l'on s'intéresse au développement des contraintes au jeune âge dans des structures bridées concerne les phénomènes de fluage et relaxation dans ce contexte de matériau en cours de structuration. On a pu en effet montrer (voir figure 4.28 au chapitre 4) que le fluage en compression lors de la phase d'échauffement avait un rôle prépondérant dans la date d'apparition de la première fissure (plus important que le fluage en traction dans ce cas de structure totalement bridée). Dans les structures susceptibles de présenter un risque de fissuration, le béton au jeune âge est généralement soumis à des évolutions combinées de température, saturation et de micro-structure. L'effet de ces variations physico-chimiques sur le fluage du béton ont été par le passé étudiées et sont intégrées dans le modèle de comportement mécanique du LMDC mais un certain nombre de questions reste encore en suspens :

#### - L'impact du développement de la micro-structure sur les vitesses de fluage et en particulier la consolidation :

L'effet de l'hydratation sur la vitesse de fluage est pour l'instant prise en compte par l'évolution du module d'Young au cours du temps (les temps caractéristiques de fluage étant considérés non affectés par l'hydratation). Comme présenté dans les chapitres précédents, la vitesse de fluage, et en particulier sa décroissante dans le temps, dépend de la consolidation du matériau au cours de sa déformation (blocages à l'echelle meso et micro des déformations visqueuses). Cette consolidation est affectée par la température, la teneur en eau et le taux de chargement, et ces influences (au moins pour le fluage en compression) sont désormais assez bien connues et reproduites dans le modèle utilisé au LMDC. L'effet de l'hydratation sur cette consolidation est pour l'instant pris en compte par un effacement progressif de la consolidation au fur et à mesure du développement de l'hydratation (comme cela est fait pour l'endommagement).

Cependant peu de résultats sont disponibles (ou pas assez documentés pour permettre une modélisation du développement de l'hydratation qui permettrait de séparer l'effet de l'évolution des propriétés élastiques de celle du fluage) dans la littérature pour véritablement élucider l'influence de l'hydratation sur le fluage, en particulier en cas de chargements évoluant en même temps que l'hydratation et pour les ciments avec additions pouzzolaniques. On pourrait donc envisager une campagne expérimentale permettant d'affiner la prise en compte de l'effet de l'hydratation sur les déformations différées avec en particulier des essais sur éprouvettes sollicitées en compression au jeune âge avec des cycles de chargement (par exemple chargement à très jeune âge puis déchargement et rechargement à un taux d'hydratation élevée et comparaison avec des éprouvettes non chargées au jeune âge ou non déchargées). Ces essais devraient être bien entendu complétés de suivis en parallèle des propriétés élastiques et d'avancement de réaction. Comme cela a été le cas dans les différentes études présentées dans ce mémoire (en particulier par exemple pour les essais menés dans le cadre de CEOS), ces essais seraient exploités et analysés avec la modélisation macroscopique afin de caractériser l'effet de l'hydratation sur une éventuelle "déconsolidation" du matériau.

Comme pour la compréhension de l'évolution des propriétés mécaniques au voisinage du seuil de percolation, une étude numérique à une échelle inférieure pourrait ici peut être permettre de mettre en évidence l'impact du squelette granulaire sur l'évolution de la consolidation. On peut imaginer en effet qu'une part de cet effet de réduction de vitesse de fluage au cours de la déformation visqueuse va être influencée par le squelette granulaire. Cet effet, identifiable à un age donné pour une formulation, pourrait avoir un poids différent à un âge différent (notamment à plus jeune âge). Une des perspectives de mes séjours au laboratoire d'Anglet au cours de mon CRCT était notamment de pouvoir appliquer les techniques développées par C. Laborderie, et auxquelles j'ai été formée, à ce genre de problématiques. Il serait en effet intéressant de voir si cette analyse mesoscopique permet de pouvoir identifier la part de l'effet apporté par le squelette granulaire dans ce phénomène de consolidation, et, si celui-ci a un effet, comment évolue cet effet au cours de l'hydratation.

Ces études, expérimentales et numériques à une échelle mésoscopique, permettrait ensuite de proposer un éventuel enrichissement du modèle de fluage au jeune âge actuellement disponible (pour la partie compression tout du moins). Bien entendu, le risque de fissuration au jeune âge va également être influencé par le comportement en fluage en traction au jeune âge. Pour les structures massives, les contraintes en traction se développent seulement dans un second temps (puisque c'est l'échauffement dans un premier temps qui est bridé, conduisant à des contraintes de compression), donc le fluage en traction, contrairement à celui de compression, arrive sur un matériau un peu plus hydraté (généralement pour des degrés d'hydratation autour de 0.5 pour des ciments portland).

Le verrou scientifique, dans ce cas, est plus dans un premier temps sur la modélisation du fluage en traction lui-même (éventuelle anisotropie de la consolidation par exemple) que sur l'effet du développement de l'hydratation sur cette consolidation. Ces aspects sont en cours d'étude par d'autres chercheurs du laboratoire (A. Sellier et T. Vidal) et devraient être mieux connus d'ici quelques années. Dans le cas de structures avec un gradient thermique cœurpeau important (non limité par les procédés constructifs) ou pour des éléments plus minces par contre, le risque de fissuration au jeune âge est lié au développement de contraintes de traction dès la percolation mécanique (liées au retrait endogène et de séchage qui sont bridés) et on pourra alors, s'interroger sur l'effet du fluage en traction au jeune âge. Ceci est à envisager à plus long terme car, comme exposé au paragraphe précédent, un certain nombre de verrous sont encore à lever sur le développement en lui-même du retrait au jeune âge.

#### - L'effet d'une élévation de température concomitante avec le développement de la microstructure sur le fluage :

Dans les structures massives la température dépasse généralement la température seuil (45°C) à partir de laquelle on constate un endommagement thermique dont l'effet vient s'ajouter à l'activation de la vitesse de fluage. Cependant ces effets ont été identifiés sur des matériaux durcis (généralement âgés de plusieurs mois) et on peut s'interroger sur la validité de la transposition de ces effets de la température à un matériau en cours d'hydratation.

Concernant l'effet de la température sur le fluage, des travaux sont en cours au LMDC (thèse de F. Manzoni encadrée par A. Sellier et T. Vidal) sur la compréhension et la modélisation de la déformation thermique transitoire, déformation supplémentaire qui est observée lorsque le matériau est chauffé après avoir été chargé. Ce phénomène n'est pour l'instant pas pris en compte au jeune âge mais les résultats de cette première étude pourraient ouvrir des perspectives intéressantes pour l'adaptation des modèles développés au cas d'un matériau au jeune âge afin de voir si ce phénomène est à prendre en compte dans le cas de contraintes induites par un blocage des déformations (chargement concomitant à la montée en température).

Dans le cadre de ces perspectives à moyen terme, l'étude envisagée porterait donc sur une meilleure compréhension des phénomènes de fluage du béton dans le cas d'une élévation de température concomitante au développement de l'hydratation. Elle pourrait être menée en collaboration avec Alain Sellier (pour la partie modélisation) et Thierry Vidal (pour la partie expérimentale), dont le travail sur le fluage en conditions THM variables a permis d'améliorer le modèle de fluage du LMDC ces dernières années à travers la réalisation de campagnes expérimentales originales et dont les acquis pourraient être réinvestis pour cette nouvelle étude.

Une caractérisation expérimentale serait nécessaire et pourrait être faite facilement grâce aux équipement disponibles au LMDC permettant de réaliser des essais de fluage en pilotant la température de conservation. Ces équipements ont pour l'instant été utilisés pour des essais à température constante mais le pilotage de la chambre climatique pourrait tout à fait être fait de façon à reproduire le comportement thermique d'un béton au sein de structures plus ou moins massives. La modélisation de ces effets thermiques sur le fluage au jeune âge pourrait ainsi, grâce aux constatations expérimentales, être améliorée, afin de relier les paramètres influant (énergie d'activation, endommagement thermique, ...) aux variables caractérisant le développement de l'hydratation (y compris dans le cas de liants composés). On peut en effet se poser la question d'une dépendance du seuil d'endommagement thermique avec l'hydratation.

## Variabilité du comportement mécanique du béton au jeune âge lors de la construction de grands ouvrages

La dernière perspective concernant le comportement mécanque au jeune âge des bétons concerne la variabilité de ce comportement. En effet, lors de la construction de grands ouvrages de génie civil (ponts, tunnels, ...) ou d'ouvrages pour l'énergie (barrage, enceinte de confinement, ...) le coulage du béton se déroule sur plusieurs mois, conduisant à une variabilité du matériau qui peut être importante malgré une formulation identique et bien maitrisée. La prédiction du comportement THCM du béton dans l'ouvrage au jeune âge nécessite donc une prise en compte de cette problématique de coulage en plusieurs phases sur de longues périodes et certaines questions restent encore en suspens :

#### - L'impact de la variabilité matériaux sur le développement de l'hydratation :

L'étude de cette variabilité avait été initiée après ma thèse par une collaboration avec J-M Torrenti dans le cadre de l'ANR Mefisto. Il avait pu être mis en évidence une variabilité non négligeable des caractéristiques d'un ciment issus de plusieurs lots, à travers la résistance à 28 jours et le dégagement de chaleur à 12h (fig. 6.11), montrant ainsi un impact en terme d'aléa de cinétique et d'intensité de réaction. L'étude avait également montré que la procédure de calage des modèles thermo-chimiques ne présentait qu'une incertitude faible est dont l'effet était négligeable par rapport à l'effet des aléas matériaux. Cependant, les données manquaient concernant l'aléa sur les dégagements de chaleur totaux pour un même ciment issu de plusieurs lots (courbes de dégagement complètes sur plusieurs jours).

Une étude complémentaire devrait donc se concentrer dans un premier temps sur la caractérisation de l'aléa en terme de cinétique de réaction et de dégagement de chaleur maximal (paramètres clés en ce qui concerne l'élévation de température au sein des ouvrages massifs, cause du risque de fissuration précoce).



FIGURE 6.11 – Variabilité de résistance et dégagement de chaleur pour un même CEM I issu de plusieurs lots [Torrenti and Buffo-Lacarrière, 2009]

Un partenariat avec l'industrie cimentaire serait nécessaire afin de pouvoir disposer d'échantillons d'un même ciment (portland mais aussi CEM III ou CEM V) à plusieurs dates régulières au cours d'une année afin d'évaluer quantitativement la variabilité que l'on peut rencontrer en termes de composition chimique, dégagement de chaleur, et énergie d'activation. Un contact a déjà été établi dans ce sens avec l'antenne régionale de Lafarge (en lien avec les problématiques de préfabrication) et le projet est en cours de rédaction pour un financement prospectif d'un an pour le moment (stage M2 et étude complémentaire interne labo).

Une fois la quantification de la dispersion de ces données matériaux effectuée (aléa sur le ciment identifié expérimentalement et retour d'expérience chantier pour l'aléa sur la formulation notamment le dosage en eau), il est nécessaire de le prendre en compte objectivement dans les procédures de calcul. Pour cela un couplage des modèles déterministes avec des méthodes probabilistes capables quantifier les conséquences en terme de probabilité d'atteinte d'un état limite est nécessaire. On pourra avoir recours aux algorithmes fiabilistes mis au point entre 2004 et 2007 au LMDC (A. Sellier et F. Duprat) pour traiter les données aléatoires scalaires indépendantes du temps (méthode du gradient projeté avec contrôle d'erreur, méthode des surfaces de réponse adaptatives), ainsi qu'envisager une collaboration avec les équipes spécialistes au LMDC (F. Duprat et T. De Larrard) pour l'utilisation de méthodes adaptées aux données aléatoires variables dans le temps (conditions environnementales notamment). La prise en compte de l'effet de la variabilité matériaux en comportement mécanique (pour un état limite d'apparition de première fissure par exemple) reste pour l'instant à mon sens une perspective plus long terme, compte tenu des études à mener au préalable sur les modèles déterministes (voir perspectives précédentes en termes de fluage par exemple) mais aussi compte tenu de la forte corrélation avec les variabilités thermo-chimiques (la variabilité sur la résistance en compression par exemple est fortement corrélée à la variabilité sur le ciment par exemple).

#### - L'effet d'échelle sur la résistance en traction au jeune âge :

Outre cette variabilité liée à des aléas sur le matériau, nous avons vu au chapitre 5 que pour une application aux structures massives il est nécessaire de prendre en compte de l'effet d'échelle statistique. Cet effet d'échelle a été étudié sur bétons durcis et il a été montré que, si l'on ne disposait pas d'essais permettant de déterminer le coefficient de variation, on pouvait estimer l'intensité de l'effet d'échelle (à travers l'exposant de Weibull) en fonction de la résistance à la compression. On peut alors s'interroger quant à la pertinence de garder, comme cela est fait pour l'instant, cet exposant constant au cours de l'hydratation. La figure 6.12 présente l'effet d'échelle en fonction du volume équivalent de la structure pour 3 âges en supposant que l'on peut transposer l'effet de la résistance en compression sur l'exposant de Weibull tel que proposé à 28 jours et ce quelque soit l'âge.



FIGURE 6.12 - Illustration de l'effet d'échelle pour des Rc évoluant au cours du temps

A titre d'illustration, on rappelle qu'une poutre de section 50x80  $cm^2$  soumise à une traction uniforme présente un volume équivalent de 5E5  $cm^3$ . On constate ainsi sur la figure 6.12 qu'en prenant en compte l'intensité de l'effet d'échelle en fonction de la résistance en compression (comme cela est fait pour le calcul de structures plus âgées) on aurait, pour cette poutre, un effet d'échelle conduisant à une perte de résistance, par rapport à la valeur mesurée au même âge par essai brésilien, de 70% à 2 jours mais seulement de 45% à 28 jours.

Ces ordres de grandeur semblent importants pour des bétons jeunes et il apparaît donc nécessaire de réaliser une étude expérimentale plus adaptée afin d'identifier l'intensité de l'effet d'échelle au jeune âge. En considérant que le rapport entre le coefficient de variation de la résistance en traction sur éprouvette et l'intensité de l'effet d'échelle est indépendant de l'âge, ce qui paraît une hypothèse vraisemblable, on peut imaginer caractériser l'effet d'échelle en identifiant ce coefficient de variation pour plusieurs classes de béton et plusieurs âges. ceci permet en effet de s'affranchir d'une lourde campagne expérimentale sur des éprouvettes de tailles croissantes, tout en identifiant les phénomènes de variabilité statistique du matériau au sein d'une même gâchée en fonction de l'âge du béton.

#### - L'effet des reprises de bétonnage :

Enfin, nous avons vu au chapitre 5 que le phasage de réalisation des grands ouvrages en béton nécessitait un traitement spécifique afin de permettre une reproduction correcte du comportement thermique jeune âge, celui serait en effet largement surestimé par la prise en compte d'un coulage instantané. Même si cela n'a pour l'instant pas été pris en compte dans nos études, ce phasage de réalisation aura également un impact en termes de comportement mécanique. En-effet, les zones de reprises de bétonnage (entre 2 phases successives) sont reconnues pour constituer des points faibles dans le matériau car plus hétérogènes par exemple.

En plus d'un effet de surface qui peut conférer des propriétés légèrement différentes sur ces zones, on peut penser à une éventuelle absorption d'eau de gâchage de la nouvelle couche par la couche précédente déjà hydratée et ayant parfois même subi un séchage. Ceci conduirait à une hydratation de moins bonne qualité et donc à une faiblesse mécanique et vis-à-vis des transferts. L'étude du comportement spécifique de ces reprises de bétonnage est à mon sens à mettre en relation avec les perspectives d'amélioration de la compréhension des transferts hydriques et d'impact sur le développement de l'hydratation au jeune âge (avec toutes les problématiques inhérentes aux cinétiques de reprise d'eau des bétons).

## 6.4 Vers une approche unifiée de la prédiction des évolutions physiques et mécaniques au sein des nouveaux bétons au cours de la vie des ouvrages

Les différentes perspectives présentées s'inscrivent à plus long terme dans un besoin d'approche unifiée pour la prédiction des évolutions physiques et mécaniques au sein des ouvrages de Génie Civil. Le développement de cette approche unifiée, qui permettra ensuite une application à d'autres matériaux de nature similaire aux liants cimentaires, nécessite l'identification d'un modèle d'évolution de la micro-structure unique afin de s'affranchir du chainage de plusieurs modèles comme cela est fait actuellement (hydratation puis vieillissement puis dégradation éventuelle).

En effet, dans les modèles actuels, les évolutions chimiques sont modélisées en utilisant le degré d'hydratation au jeune âge, la concentration en calcium solide pour les matériaux vieillissants ou en cours de décalcification et par le degré de déshydratation si le matériau est soumis à une température élevée. Or tous ces phénomènes chimiques affectent la microstructure et il s'agit donc de pouvoir identifier de nouvelles variables internes qui caractériseraient l'évolution des hydrates au cours du temps (depuis l'hydratation jusqu'à la dégradation) afin d'utiliser des lois d'évolutions des propriétés physiques et mécaniques au cours du temps identiques quelque soit le moteur de l'évolution de la micro-structure (précipitation d'hydrates, dissolution, modification de la structure, etc...) (voir figure 6.13).



FIGURE 6.13 – Perspectives concernant l'évolution de la micro-structure et ses conséquences

Comme l'illustre la figure 6.13, l'**unification des modèles d'évolution chimique** devra passer par une meilleure connaissance de la micro-structure des phases hydratées de la pâte cimentaire. Il faudra pour cela envisager des études plus fines à l'échelle des hydrates concentrées sur deux points pour lesquels le laboratoire n'a pas forcément pour l'instant toutes les compétences :

- La **thermodynamique des hydrates cimentaires** : Une modélisation de tous les équilibres thermodynamiques n'est bien entendu pas compatible avec une application à l'échelle des structures, néanmoins la compréhension de ces équilibres est un pas à franchir afin d'améliorer la prise en compte de certains phénomènes à l'échelle macroscopique : équilibres à long terme conduisant à une poursuite d'hydratation, effet de la température sur la stabilité des phases (en particulier les C-S-H), ...

- Les **propriétés physco-chimiques et mécanique des hydrates** et en particulier des phases telles que les C-S-H et C-A-S-H. De la même façon, une compréhension à une échelle micro des propriétés des phases hydratées des pâtes de ciment est importante afin d'améliorer les lois macroscopiques de prise en compte de l'effet des évolutions physico-chimiques sur le comportement mécanique : propriétés de l'eau dans les hydrates, consolidation, hydratation en température, décalcification, ...

En parallèle de cette unification des modèles d'évolution chimique, une réflexion sera à mener sur la nécessité de couplages THCM forts. Ceci se pose en particulier pour les couplages entre comportement mécanique et comportement hygrothermique. L'effet de la mécanique sur les propriétés de transferts est pour l'instant négligé dans nos approches car la démarche de modélisation THCM avait été à la base établie pour le comportement au jeune âge des structures massives, structures pour lesquelles l'impact de la fissuration sur le séchage par exemple n'est que du second ordre par rapport aux phénomènes mis en jeu. Il en était de même pour le comportement des structures soumises à lixiviation puisque les sollicitations dans ce cas conduisaient seulement à l'apparition de contraintes de compression, sans fissuration localisée donc (tunnels). Or, lorsque l'on veut s'intéresser au risque de fuite d'enceintes de confinement vieillies ou en conditions d'accident grave, ou encore à la tenue d'ouvrages structurels (en dehors des tunnels) soumis à des dégradations chimiques, l'**effet de la fissuration sur les transferts** d'eau de vapeur et d'agent agressifs sera important. Une démarche complète pour la modélisation de ce type d'ouvrages en conditions THCM devra donc passer par la prise en compte de ce effet.

Enfin, l'unification des modèles d'évolution chimique à travers un modèle basé sur la microstructure permettra de gérer de façon plus phénoménologique l'effet des évolutions thermiques et hydriques sur le comportement mécanique à travers justement l'effet de ces variations sur la micro-structure. La figure 6.14 résume cette démarche qui serait à mettre en œuvre afin d'étendre les modélisations THCM développées jusqu'à présent à d'autres types d'applications (taux de fuite, comportement résiduel après incendie, attaques acides, ...).



FIGURE 6.14 - Schématisation des couplages à prendre en compte dans une approche unifié

A terme, les démarches développées et compétences acquises, aussi bien au cours des dernières années qu'à travers la réalisation des perspectives présentées ici et qui seront menées dans les années à venir, pourront être réinvesties afin d'investiguer le comportement THCM en environnement sévère des liants émergents et tendant à remplacer peu à peu le ciment sur certains nouveaux ouvrages spécifiques. Dans mon environnement de recherche actuel, ces perspectives s'insèrent en-effet bien au niveau des thématiques du laboratoire en faisant le lien entre le *pôle 1* lié au développement de *nouveaux matériaux* et le *pôle 2* lié à la *durabilité des ouvrages*. Les nouveaux matériaux en cours de développement ces dernières années au laboratoire seront en effet suffisamment au point pour nécessiter une modélisation de leur comportement THCM au sein des ouvrages. La modélisation pourra en-effet apporter une compréhension des phénomènes couplés qui serait utile à l'optimisation des matériau tout en assurant l'intérêt de leur utilisation dans les ouvrages au sein de leur environnement.

On peut citer par exemple les matériaux alcalis-activés qui se développent depuis un certain nombre d'années pour leur bonnes propriétés en durabilité (notamment vis à vis d'attaques acides ou du feu par exemple). Ces liants, bien que présentant des phénomènes réactionnels différents du ciment, présentent des structures minéralogiques qui peuvent être proches. On peut donc envisager d'étendre à terme les modèles THCM développés sur les liants cimentaires à ces liants plus spécifiques. On pourrait également envisager des applications aux nouveaux bétons plus performants en terme de résistance comme les BFUP dont les phénomènes réactionnels et de développement de résistances sont spécifiques du fait de leur forte adjuvantation et de la présence importante de fibres, ou des applications aux écomatériaux plus performants en terme de résistances mais dont le maintien des propriétés dans le temps pourrait être lié à des couplages physico-chimiques.

Les démarches développées, notamment avec la prise en compte d'un couplage fort à travers la modification des propriétés de transferts avec la fissuration (là où il n'est que faible pour l'instant), pourront être ensuite appliquées à la modélisation du comportement résiduel de structures ayant subi des variations physico-chimiques au cours de leur vie, servant ainsi de lien entre le *pôle 2 (Durabilité des ouvrages)* et le *pôle 3* lié au *diagnostic et à la requalification des structures*.

On peut enfin noter que ces perspectives s'insèrent aussi bien dans les axes thématiques prioritaires de l'Université Paul Sabatier. Dans *l'axe 11 (Energie : stockage conversion, transport, matériaux et optimisation)* tout d'abord puisque ces phénomènes de maintien des propriétés mécaniques dans le temps sont des problématiques importantes pour les ouvrages de l'énergie au sens large (structures du nucléaire, barrages, structure de méthanisation, ...). Ce sont en effet des structures généralement massives et exposées à des contextes THCM particuliers (jeune âge, hautes températures, dégradations chimiques, ...) et pour lequel les enjeux en terme de durée de vie sont grands. Elles s'inscrivent également dans *l'axe 5 (Modélisation, simulation numérique, modèles de calcul, calcul intensif)* puisque l'approche de modélisation multi-physique et multi-échelle qui a guidé mes recherches depuis le début sera poursuivie à travers ces perspectives.

## Bibliographie

- Acker, P. and Ulm, F.-J. (2001). Creep and shrinkage of concrete : physical origins and practical measurements. *Nuclear Engineering and Design*, 203(2) :143–158. 56
- Adenot, F. (1992). Durabilité du béton : caractérisation et modélisation des processus physiques et chimiques de dégradation du ciment. PhD thesis, Université d'Orléans. 14
- Alarcon-Ruiz, L., Platret, G., Massieu, E., and Ehrlacher, A. (2005). The use of thermal analysis in assessing the effect of temperature on a cement paste. *Cement and Concrete Research*, 35(3):609–613. **30**, **31**
- Arrhenius, S. (1915). *Quantitative laws in biological chemistry*. G. Bell and sons, ltd., London. 8
- Avrami, M. (1939). Kinetics of Phase Change. I General Theory. *The Journal of Chemical Physics*, 7(12) :1103–1112. 8
- Azenha, M. and Faria, R. (2008). Temperatures and stresses due to cement hydration on the R/C foundation of a wind tower—A case study. *Engineering Structures*, 30(9) :2392–2400. 9
- Bažant, Z. P. and Prasannan, S. (1988). Solidification theory for aging creep. *Cement and Concrete Research*, 18(6) :923–932. 61
- Bažant, Z. P. and Yavari, A. (2005). Is the cause of size effect on structural strength fractal or energetic–statistical? *Engineering Fracture Mechanics*, 72(1):1–31. 97
- Bach, T. t. h. (2010). *Evolution physico-chimique des liants bas PH hydratés : influence de la température et mécanisme de rétention des alcalins*. PhD thesis, Dijon. 19, 20
- Baroghel-Bouny, V. (2007). Water vapour sorption experiments on hardened cementitious materials : Part I : Essential tool for analysis of hygral behaviour and its relation to pore structure. *Cement and Concrete Research*, 37(3) :414 – 437. 43, 44
- Baroghel-Bouny, V., Mainguy, M., Lassabatere, T., and Coussy, O. (1999). Characterization and identification of equilibrium and transfer moisture properties for ordinary and high-performance cementitious materials. *Cement and Concrete Research*, 29(8) :1225–1238. 63
- Barre, F., Bisch, P., Chauvel, D., Cortade, J., Dubois, J.-P., Erlicher, S., Gallitre, E., Labbé, P., Mazars, J., Rospars, C., Sellier, A., Torrenti, J.-M., and Toutlemonde, F. (2016). *Control of cracking in reinforced concrete structures*. ISTE Ltd/John Wiley and Sons Inc, Hoboken, NJ. 98
- Bary, B., de Morais, M. V., Poyet, S., and Durand, S. (2012). Simulations of the thermo-hydromechanical behaviour of an annular reinforced concrete structure heated up to 200°C. *Engineering Structures*, 36:302–315. 38, 42
- Bary, B., Ranc, G., Durand, S., and Carpentier, O. (2008). A coupled thermo-hydro-mechanicaldamage model for concrete subjected to moderate temperatures. *International journal of heat and mass transfer*, 51(11) :2847–2862. 24
- Benboudjema, F. and Torrenti, J.-M. (2008). Early-age behaviour of concrete nuclear containments. *Nuclear Engineering and Design*, 238(10) :2495–2506. WOS :000259774300001. 9, 82
- Bernard, F., Kamali-Bernard, S., and Prince, W. (2008). 3d multi-scale modelling of mechanical behaviour of sound and leached mortar. *Cement and Concrete Research*, 38(4):449–458. 84
- Bernard, O., Ulm, F.-J., and Germaine, J. T. (2003a). Volume and deviator creep of calciumleached cement-based materials. *Cement and Concrete Research*, 33(8) :1127–1136. 84, 85
- Bernard, O., Ulm, F.-J., and Lemarchand, E. (2003b). A multiscale micromechanics-hydration model for the early-age elastic properties of cement-based materials. *Cement and Concrete Research*, 33(9) :1293–1309. 63
- Bes, T. and Lacarrière, L. (2018). Rapport avancement de thèse Analyse bibliographique et protocles d'essais. Technical report. 123
- Bisschop, J. and Mier, J. G. M. v. (2002). Effect of aggregates on drying shrinkage microcracking in cement-based composites. *Materials and Structures*, 35(8):453–461. 59
- Boumiz, A., Vernet, C., and Cohen Tenoudjit, F. (1996). Mechanical properties of cement pastes and mortars at early ages. *Advanced cement based materials*, 3 :94–106. 63, 65
- Bourissai, M. (2010). Comportement thermo-chimio-hydro-mécanique d'un ciment pétrolier au très jeune âge en conditions de prise HP/HT : approche expérimentale et analyse par changement d'échelle. PhD thesis, Paris Est, France. 63, 64
- BUCHER, R., VIDAL, T., SELLIER, A., and VERDIER, J. (2017). Effet du séchage sur les propriétés mécaniques des matériaux cimentaires. page 18, Lille, France. 59
- Buffo-Lacarrière, L. (2007). *Prévision et évaluation de la fissuration précoce des ouvrages en béton*. PhD thesis, Université de Toulouse, INSA de Toulouse, France. 10, 69
- Buffo-Lacarrière, L., Baron, S., Barré, F., Chauvel, D., Darquennes, A., Dubois, J.-P., Gayete, J., Grondin, F., Kolani, B., Lançon, H., and others (2016). Restrained shrinkage of massive reinforced concrete structures : results of the project CEOS. fr. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 20(7) :785–808. 55, 75, 97, 101
- Buffo-Lacarrière, L. and Sellier, A. (2011). Chemo-Mechanical Modeling Requirements for the Assessment of Concrete Structure Service Life. *Journal of Engineering Mechanics-Asce*, 137(9):625–633. WOS :000294779300004. 71, 82, 83, 89, 91
- Buffo-Lacarrière, L., Sellier, A., Escadeillas, G., and Turatsinze, A. (2007). Multiphasic finite element modeling of concrete hydration. *Cement and Concrete Research*, 37(2) :131–138. 10, 14
- Buffo-Lacarrière, L., Sellier, A., and Kolani, B. (2014). Application of thermo-hydro-chemomechanical model for early age behaviour of concrete to experimental massive reinforced structures with strain-restraining system. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 18(7) :814–827. WOS :000338768400008. 74, 96, 99, 100, 101

- Buffo-Lacarrière, L., Sellier, A., Turatsinze, A., and Escadeillas, G. (2011). Finite element modelling of hardening concrete : application to the prediction of early age cracking for massive reinforced structures. *Materials and Structures*, 44(10) :1821–1835. WOS :000296370200008.
  99
- Burlion, N., Bourgeois, F., and Shao, J.-F. (2005). Effects of desiccation on mechanical behaviour of concrete. *Cement and Concrete Composites*, 27(3):367–379. 59
- Cabrerizo, A., Cassagnabère, F., and Lacarrière, L. (2016). External sulphate resistance of low pH concrete. Portugal. 121
- Carde, C. and François, R. (1999). Modelling the loss of strength and porosity increase due to the leaching of cement pastes. *Cement and Concrete Composites*, 21:181–188. 84
- Carpinteri, A., Chiaia, B., and Ferro, G. (1995). Size effects on nominal tensile strength of concrete structures : multifractality of material ligaments and dimensional transition from order to disorder. *Materials and Structures*, 28(6) :311. 55, 97
- Cervera, M., Faria, R., Oliver, J., and Prato, T. (2002). Numerical modelling of concrete curing, regarding hydration and temperature phenomena. *Computers & structures*, 80(18) :1511–1521. 9
- Chen, W. (2007). Hydration of slag cement. PhD thesis, Twente. 14
- Chhun, P. (2017). Modélisation du comportement thermo-hydro-chemomécanique des enceintes de confinement nucléaire en béton armé-précontraint. PhD thesis, Université de Toulouse, Université Toulouse III Paul Sabatier, Toulouse. 38, 39, 40, 41, 42, 43, 47, 58, 60, 61, 102, 105, 106
- Chhun, P., Buffo-Lacarrière, L., and Sellier, A. (2016). Material and Geometric Heterogeneity Consideration for Cracking Risk Prediction of Young Age Behavior of Experimental Massive Reinforced Concrete Structure. *Key Engineering Materials*, 711:900–907. 110, 111, 112, 113
- Chhun, P., Sellier, A., Lacarriere, L., Chataigner, S., and Gaillet, L. (2018). Incremental modeling of relaxation of prestressing wires under variable loading and temperature. *Construction and Building Materials*, 163:337–342. 103, 104
- Danese, S. (1997). Etude du couplage fissuration dégradation chimique des bétons : fissure modèle sur pâte de ciment. Projet de fin d'études, Ecole nationale supérieure des arts et industries de Strasbourg. 84
- Daval, C. (2015). Rapport intermédiaire ANR Macena WP 2-2 : Essais de fluage sur béton à chaud (CERIB). Technical report. 60, 61
- de Morais, M. V. G., Bary, B., Ranc, G., Pont, S. D., and Durand, S. (2009). Comparative Analysis of Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Models for Concrete Exposed to Moderate Temperatures. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 55(7):654–682. 38
- De Schutter, G. (1999). Degree of hydration based Kelvin model for the basic creep of early age concrete. *Materials and Structures*, 32(4) :260–265. 67
- Dilnesa, B. Z., Lothenbach, B., Renaudin, G., Wichser, A., and Wieland, E. (2012). Stability of Monosulfate in the Presence of Iron. *Journal of the American Ceramic Society*, 95(10):3305– 3316. 28, 29

- El Bitouri, Y., Buffo-Lacarrière, L., Sellier, A., and Bourbon, X. (2016). Modelling of chemomechanical behaviour of low pH concretes. *Cement and Concrete Research*, 81 :70–80. 21, 22, 32, 108
- Feraille Fresnet, A. (2000). *Le rôle de l'eau dans le comportement à haute température des bétons.* PhD thesis, ENPC. 25
- García Calvo, J. L., Hidalgo, A., Alonso, C., and Fernández Luco, L. (2010). Development of low-pH cementitious materials for HLRW repositories. *Cement and Concrete Research*, 40(8):1290–1297. 19
- Gawin, D., Majorana, C., and Schrefler, B. (1999). Numerical analysis of hygro-thermal behaviour and damage of concrete at high temperature. *Mechanics of Cohesive-frictional Materials*, 4(1):37–74. 38
- Gawin, D. and Pesavento, F. (2012). An Overview of Modeling Cement Based Materials at Elevated Temperatures with Mechanics of Multi-Phase Porous Media. *Fire Technology*, 48(3):753– 793. 24
- Gawin, D., Pesavento, F., and Schrefler, B. (2003). Modelling of hygro-thermal behaviour of concrete at high temperature with thermo-chemical and mechanical material degradation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(13-14) :1731–1771. 36
- Gawin, D., Pesavento, F., and Schrefler, B. A. (2009). Modeling deterioration of cementitious materials exposed to calcium leaching in non-isothermal conditions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(37-40) :3051–3083. 21
- Granger, L. (1995). *Comportement differe du beton dans les enceintes de centrales nucleaires : analyse et modelisation*. PhD thesis, Marne-la-vallée, ENPC. 78
- Grimal, E. (2007). *Caractérisation des effets du gonflement provoqué par la réaction alcali-silice sur le comportement mécanique d'une structure en béton*. PhD thesis, Toulouse 3. 56
- Gutteridge, W. A. and Dalziel, J. A. (1990). Filler cement : The effect of the secondary component on the hydration of Portland cement. *Cement and Concrete Research*, 20(6) :853–861. 8
- Haecker, C.-J., Garboczi, E., Bullard, J., Bohn, R., Sun, Z., Shah, S., and Voigt, T. (2005). Modeling the linear elastic properties of Portland cement paste. *Cement and Concrete Research*, 35(10):1948–1960. 63
- Hansen, P. F. and Pedersen, E. J. (1977). Maturity computer for controlled curing and hardening of concrete. *Nordisk Betong*, 21(1):19–34. 8
- Hansen, T. C. (1986). Physical structure of hardened cement paste. A classical approach. *Materials and Structures*, 19(6) :423–436. 11
- Hasni, L. (2004). Rapport de Contrat N° 024624 EF/CC LOT 3 : Couplage Mécanique-Chimie CEBTP. Technical report. 85, 86
- Herrmann, N., Gerlach, L., Muller, H., Niklasch, C., Kiefer, D., Pape, Y. L., and Bento, C. (2009).
   PACE-1450 Experimental investigation of the crack behaviour of prestressed concrete containment walls considering the prestressing loss due to aging. Espoo, Finland. 105

- Jelica Zelic, L. U. and Jozic, D. (2007). Application of thermal mmethod in the chemistry of cement : Kinetic analysis of portlandite from non-isothermal thermogravimetric data. In *The First International Proficiency Testing Conference*. 27
- Kameche, Z. A., Ghomari, F., Choinska, M., and Khelidj, A. (2014). Assessment of liquid water and gas permeabilities of partially saturated ordinary concrete. *Construction and Building Materials*, 65:551–565. 38, 42
- Khallel, H. (2016). *Influence de la température et de l'hygrométrie sur le comportement instantané du béton*. PhD thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour, Anglet. 47, 59, 60, 61
- Knudsen, T. (1984). The dispersion model for hydration of portland cement I. General concepts. *Cement and Concrete Research*, 14(5):622–630. 8
- Kolani, B. (2012). Comportement au jeune âge des structures en béton armé à base de liants composés aux laitiers. phd, Université de Toulouse, Université Toulouse III Paul Sabatier, France. 17, 18, 68, 69, 72, 73, 126
- Kolani, B., Buffo-Lacarrière, L., Sellier, A., Escadeillas, G., Boutillon, L., and Linger, L. (2012). Hydration of slag-blended cements. *Cement and Concrete Composites*, 34(9) :1009–1018. 10, 14, 17
- Ladaoui, W. (2010). Etude expérimentale du comportement Thermo-Hydro-Mécanique à long terme des BHP destinés aux ouvrages de stockage des déchets radioactifs. phd, Université de Toulouse, Université Toulouse III - Paul Sabatier. 129
- Ladaoui, W., Vidal, T., Sellier, A., and Bourbon, X. (2013). Analysis of interactions between damage and basic creep of HPC and HPFRC heated between 20 and 80 °C. *Materials and Structures*, 46(1-2) :13–23. 58
- Lawrence, P., Cyr, M., and Ringot, E. (2003). Mineral admixtures in mortars : Effect of inert materials on short-term hydration. *Cement and Concrete Research*, 33(12):1939–1947. 125
- Leisinger, S. M., Lothenbach, B., Le Saout, G., and Johnson, C. A. (2012). Thermodynamic modeling of solid solutions between monosulfate and monochromate \$\mathrm3cao\cdot Al\_2o\_3\cdot Ca[(CrO\_4)\_x(SO\_4)\_1-x]\cdot nH\_2o\$. *Cement and Concrete Research*, 42(1):158–165. 28, 29
- Leung Pah Hang, T. (2015). *Les bétons bas pH : comportements initial et différé sous contraintes externes*. PhD thesis, Toulouse 3. 23, 24, 69, 125
- Leung Pah Hang, T., Verdier, J., Buffo-Lacarrière, L., Vidal, T., and Bourbon, X. (2013). Hydration of low pH concretes. In *Seventh International Conference on Concrete under Severe Conditions – Environment and Loading (CONSEC13)*, Nanjing (China). 125
- Mainguy, M., Coussy, O., and Eymard, R. (1999). *Modélisation des transferts hydriques isothermes en milieu poreux. Application au séchage des matériaux à base de ciment.* Number OA 32 in Série Ouvrages d'Art. Etudes et recherches des LPC, LCPC. 37, 38
- Mainguy, M., Tognazzi, C., Torrenti, J.-M., and Adenot, F. (2000). Modelling of leaching in pure cement paste and mortar. *Cement and Concrete Research*, 30(1):83–90. 21

- Monlouis-Bonnaire, J., Verdier, J., and Perrin, B. (2004). Prediction of the relative permeability to gas flow of cement-based materials. *Cement and Concrete Research*, 34(5):737–744. 42
- Morandeau, A., Thiery, M., and Dangla, P. (2014). Investigation of the carbonation mechanism of \uppercaseCH and \uppercaseCSH in terms of kinetics, microstructure changes and moisture properties. *Cement and Concrete Research*, 56 :153–170. **30**, **31**
- Morenon, P. (2017). *Modélisation des réactions de gonflement interne des bétons avec prise en compte des couplages poro-mécaniques et chimiques*. phd, Université de Toulouse, Université Toulouse III Paul Sabatier. 86
- Mounanga, P. (2003). Étude expérimentale du comportement de pâtes de ciment au très jeune âge : hydratation, retraits, propriétés thermophysiques. PhD thesis, Université de Nantes, France. 16
- Nguyen, M. D. (2009). *Modélisation des couplages entre hydratation et dessiccation des matériaux cimentaires à l'issue du décoffrage. Étude de la dégradation des propriétés de transfert.* PhD thesis, Ecole nationale des ponts et chaussées-ENPC PARIS/MARNE LA VALLEE. 43, 44
- Pan Guoyao, Mao Ruoqing, Z. h. (1997). Research of Dehydrated Calcium Sulphoaluminate Hydrates(\uppercaseAFm) and its Hydration. *Journal of Wuhan University of Technology*, 19(3):28–30. 28, 29
- Powers, T. C. and Brownyard, T. L. (1946). Studies of the Physical Properties of Hardened Portland Cement Paste. *Journal Proceedings*, 43(9) :249–336. 11, 44
- Poyet, S. and Charles, S. (2009). Temperature dependence of the sorption isotherms of cementbased materials : Heat of sorption and Clausius–Clapeyron formula. *Cement and Concrete Research*, 39(11) :1060 – 1067. 47
- Rahal, S., Sellier, A., and Casaux-Ginestet, G. (2017). Finite element modelling of permeability in brittle materials cracked in tension. *International Journal of Solids and Structures*, 113:85–99. 53
- Ranaivomanana, H. (2010). *Tranferts dans les milieux poreux réactifs non saturés : application à la cicatrisation de fissure dans les matériaux cimentaires par carbonatation*. PhD thesis, Toulouse 3. 38, 44, 45, 46, 47, 129
- Ranc, G., Sercombe, J., and Rodrigues, S. (2003). Comportement à haute température du béton de structure : Impact de la fissuration sur les transferts hydriques. *Revue Française de Génie Civil*, 7(4) :397–424. 24
- Rastrup, E. (1954). Heat of hydration in concrete. *Magazine of Concrete Research*, 6(17) :79–92. 8
- Richardson, I. G. and Groves, G. W. (1992). Microstructure and microanalysis of hardened cement pastes involving ground granulated blast-furnace slag. *Journal of Materials Science*, 27(22):6204–6212. 14, 15, 17, 18
- Rivas-Mercury, J., Pena, P., de Aza, A., and Turrillas, X. (2008). Dehydration of \$\mathrmCa\_-3al\_2(SiO\_4)\_4(3-y)\$(0< y< 0.176) studied by neutron thermodiffractometry. *Journal of the European Ceramic Society*, 28(9) :1737–1748. 28

- Rodriguez, E. T., Garbev, K., Merz, D., Black, L., and Richardson, I. G. (2017). Thermal stability of CSH phases and applicability of Richardson and Groves' and Richardson C-(A)-SH (I) models to synthetic CSH. *Cement and Concrete Research*, 93:45–56. **30**, 124
- Rossi, P., Wu, X., Lemaou, F., and Belloc, A. (1994). Scale Effect on Concrete in Tension. *Materials and Structures*, 27(172):437–444. WOS :A1994PN72600001. 55, 98
- Rougelot, T., Skoczylas, F., and Burlion, N. (2009). Water desorption and shrinkage in mortars and cement pastes : Experimental study and poromechanical model. *Cement and Concrete Research*, 39(1) :36–44. 63
- Salgues, M. (2013). Modélisation des effets structuraux des réactions sulfatiques internes : application aux barrages en béton. PhD thesis, Université de Toulouse, Université Toulouse III Paul Sabatier. 86
- Sanahuja, J., Dormieux, L., and Chanvillard, G. (2007). Modelling elasticity of a hydrating cement paste. *Cement and Concrete Research*, 37(10) :1427–1439. 63, 64
- Schutter, G. D. (1999). Degree of hydration based Kelvin model for the basic creep of early age concrete. *Materials and Structures*, 32(4) :260–265. 82
- Sellier, A. (2018). Anisotropic Damage and Visco-Elasto-Plasticity Applied to Multiphasic Materials. report, LMDC - Laboratoire Matériaux et Durabilité des Constructions de Toulouse; Université de Toulouse III - Paul Sabatier; INSA de Toulouse. 102
- Sellier, A. and Buffo-Lacarrière, L. (2009). Towards a simple and unified modelling of basic creep, shrinckage and drying creep of concrete. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 13(10) :1161–1182. WOS :000273865500001. 56, 77, 78
- Sellier, A., Buffo-Lacarrière, L., El Gonnouni, M., and Bourbon, X. (2011). Behavior of HPC nuclear waste disposal structures in leaching environment. *Nuclear Engineering and Design*, 241(1):402–414. 21, 85, 86
- Sellier, A., Casaux-Ginestet, G., Buffo-Lacarrière, L., and Bourbon, X. (2013). Orthotropic damage coupled with localized crack reclosure processing : Part II : Applications. *Engineering Fracture Mechanics*, 97 :168–185. 54
- Sellier, A. and Millard, A. (2014). Weakest link and localisation WL2 : a method to conciliate probabilistic and energetic scale effects in numerical models. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 18(10) :1177–1191. WOS :000343606400009. 98, 99
- Sellier, A., Multon, S., Buffo-Lacarrière, L., Vidal, T., Bourbon, X., and Camps, G. (2016). Concrete creep modelling for structural applications : non-linearity, multi-axiality, hydration, temperature and drying effects. *Cement and Concrete Research*, 79:301–315. 56, 77
- Smilauer, V. and Bittnar, Z. (2006). Microstructure-based micromechanical prediction of elastic properties in hydrating cement paste. *Cement and Concrete Research*, 36(9) :1708–1718. 63, 64
- Sogbossi, H. E. A. (2017). Etude de l'évolution de la perméabilité du béton en fonction de son endommagement : transposition des résultats de laboratoire à la prédiction des débits de fuite sur site. phd, Université de Toulouse, Université Toulouse III - Paul Sabatier. 42

- Souyris, P. (2012). *Prédiction des propriétés poro-élastiques et de sorption d'eau en fonction du développement de la microstructure des matériaux cimentaires*. PhD thesis, Université de Toulouse, Université Toulouse III Paul Sabatier. 43, 44, 63, 64, 65, 67, 68, 79
- Stefan, L., Benboudjema, F., Torrenti, J.-M., and Bissonnette, B. (2010). Prediction of elastic properties of cement pastes at early ages. *Computational Materials Science*, 47(3):775–784. WOS :000274222000021. 63, 64
- Taylor, H. F. (1990). Cement chemistry. Thomas Telford. 14
- Thiebaut, Y., Multon, S., Sellier, A., and Lacarrière, L. (2017). Rapport avancement de thèse Analyse des propriétés résiduelles après gonflement. Technical report. 88
- Thiery, M., Baroghel-Bouny, V., Bourneton, N., Villain, G., and Stéfani, C. (2007). Modélisation du séchage des bétons. *Revue Européenne de Génie Civil*, 11(5):541–577. 38
- Torrenti, J. M. and Benboudjema, F. (2005). Mechanical threshold of cementitious materials at early age. *Materials and Structures*, 38(3):299–304. 64, 67
- Torrenti, J.-M. and Buffo-Lacarrière, L. (2009). Variabilité du champ de température dû à la chaleur d'hydratation du béton. Rapport projet ANR Mefisto Livrable GT3-1-1. 134
- Toumi Ajimi, W., Chataigner, S., and Gaillet, L. (2017). Influence of low elevated temperature on the mechanical behavior of steel rebars and prestressing wires in nuclear containment structures. *Construction and Building Materials*, 134:462–470. 103, 104, 105
- Ulm, F.-J. and Coussy, O. (1998). Couplings in early-age concrete : From material modeling to structural design. *International Journal of Solids and Structures*, 35(31-32) :4295–4311. 8
- Van Genuchten, M. T. (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil science society of America journal*, 44(5) :892–898. 41
- Waller, V. (1999). Relations entre composition des bétons, exothermie en cours de prise et résistance en compression. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Paris, France.
   16
- Wang, J. (2016). Modeling of Concrete Dehydration and Multhiphase Transfer in Nuclear Containment Concrete Wall During Loss of Cooling Accident. PhD thesis, Université de Toulouse, Université Toulouse III - Paul Sabatier, France. 25, 27, 28, 29, 30, 31
- Xie, S., Shao, J., and Burlion, N. (2008). Experimental study of mechanical behaviour of cement paste under compressive stress and chemical degradation. *Cement and Concrete Research*, 38(12):1416–1423. 84
- Zhang, Q. and Ye, G. (2012). Dehydration kinetics of Portland cement paste at high temperature. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 110(1) :153–158. 24