

Modélisation couplée chimie-mécanique de la réaction alcali-silice dans le béton

R. Naar^{a&b}, F. Bay^a, P.O. Bouchard^a, E. Garcia-Diaz^b

a. Mines Paristech, CEMEF-Centre de Mise en Forme des Matériaux, CNRS UMR 7635, BP 207, 1 rue Claude Daunesse, 06904 Sophia Antipolis Cedex, France

b. Centre des Matériaux de Grande Diffusion, Ecole des Mines d'Alès, 6 avenue de Clavière, 30319 Alès Cedex

Résumé :

La réaction alcali-silice (RAS) joue un rôle majeur dans la dégradation de différents ouvrages en béton. Elle provoque le gonflement des granulats ce qui aboutit à une dégradation irréversible des structures en béton. Il est donc très important pour les applications du génie civil de comprendre et modéliser l'évolution de l'endommagement mais aussi des fissures dans des éprouvettes soumises à la RAS

L'outil numérique FEMCAM (Finite Element Model for Concrete Analysis Method) a été développé afin de mettre au point un modèle 3D couplé chimie-mécanique pour le béton. Dans ce logiciel, une approche mésoscopique est adoptée dans laquelle le béton est considéré comme un matériau hétérogène composé de granulats et d'une pâte de mortier. Le comportement de la pâte de mortier est modélisé par une loi élastique couplée à un modèle d'endommagement de type Mazars tandis que les granulats ont une loi de comportement purement élastique. Ce modèle numérique 3D nous permettra aussi de décrire les mécanismes réactionnels de la RAS et ses conséquences mécaniques sur le matériau.

Nous avons donc implémenté dans FEMCAM une procédure de résolution numérique de l'équation de diffusion réaction pour les ions alcalins. Le gonflement des agrégats réactifs est aussi modélisé afin de décrire l'endommagement provoqué par la RAS dans les structures en béton.

Abstract :

Alkali silica reaction (ASR) plays a major role in the degradation of various types of massive concrete structures. The alkali silica reaction induces aggregates swelling thus leading to irreversible degradation of concrete structures. Therefore, it is of prime importance for civil engineering applications to understand and model damage and cracks evolution in a concrete sample submitted to ASR.

The computational tool FEMCAM (Finite Element Model for Concrete Analysis Method) has been developed within this framework in order to carry out a 3D coupled chemical-mechanical analysis for concrete. In this software, a mesoscale approach is considered where concrete is modelled as a heterogeneous material with two main phases: the aggregates embedded in a mortar paste. The mortar paste behaviour is assumed to obey an elastic constitutive law coupled with the damage model Mazars, whereas aggregates are modelled using a purely elastic law. This 3D computational model will thus enable us to describe the reaction mechanisms of the ASR and its mechanical effects on the material.

We have thus implemented in FEMCAM a numerical procedure to solve the diffusion equation for the alkaline ions. The swelling of reactive aggregates is also modelled to describe damage due to ASR in concrete structures.

Mots clefs : béton, réaction alcali-silice, modélisation numérique, couplage chimie-mécanique

1 Introduction

Le béton est un matériau de construction composite complexe fabriqué à partir de granulats (sable, gravillons) agglomérés par un liant. Le béton est en perpétuelle recherche d'un état d'équilibre vis-à-vis des conditions externes (température, hygrométrie, composition chimique, intempéries...) et est donc normalement évolutif. Si ces conditions sont trop sévères et/ou la composition du béton inadéquate, cette évolution prend des

aspects anormaux qualifiés de pathologiques. Parmi ces pathologies, on distingue les réactions alcali-granulats qui sont des réactions chimiques entre les différents constituants du béton qui peuvent altérer la durabilité des ouvrages. La réaction alcali-silice ou RAS est la cause de la détérioration de nombreuses structures en béton tels que les barrages, les trottoirs ou encore les ponts. La réaction alcali-silice est une réaction chimique entre la silice amorphe présente dans les agrégats et les ions hydroxydes (OH⁻) associés avec les alcalins (Na⁺ et K⁺) présents dans la pâte de ciment. La réaction alcali-silice produit un gel capable d'augmenter de volume au contact de l'eau présente dans les porosités du béton. La pression développée par le gel est alors telle qu'elle conduit à l'amorçage de fissures. Ces fissures vont se propager sous l'action combinée de la pression due au gel et du chargement mécanique extérieur et ainsi réduire considérablement la résistance du matériau [1]. Cette pathologie est une cause sérieuse de la dégradation des bétons d'ouvrage, il apparaît donc nécessaire de la modéliser dans le but d'intégrer ses effets dans les logiciels de calcul de structures.

Le but de cet article est de présenter un modèle hétérogène tridimensionnel de couplage chimico-mécanique pour décrire le comportement du béton soumis à la réaction alcali-silice. Ce modèle sera implémenté dans le logiciel FEMCAM (Finite Element Model for Concrete Analysis method) qui nous permet de représenter le béton à une échelle mésoscopique.

2 Le modèle physique de la réaction alcali-silice

2.1 Le modèle d'endommagement mécanique

Pour modéliser le comportement mécanique du béton, nous considérons que c'est un matériau biphasique composé de granulats agglomérés dans une pâte de mortier. Les granulats sont disposés dans l'éprouvette de façon complètement aléatoire du plus gros au plus petit et en s'appuyant sur les éléments du maillage. Afin de pouvoir représenter n'importe quelle distribution granulaire, nous avons pris en compte deux principaux aspects physiques dans l'algorithme de génération : la distance d'exclusion et les effets de bord. Le comportement des granulats est considéré comme purement élastique.

Pour la pâte de mortier, un modèle non local de Mazars a été implémenté dans FEMCAM pour rendre compte de son comportement élastique endommageable. Ce modèle [2] vise à modifier le comportement élastique d'un matériau grâce à une variable isotropique d'endommagement D qui affecte la rigidité du matériau. Etant donné que le comportement du béton est extrêmement différent en traction et en compression, cette variable d'endommagement est décomposée en deux parties (1) :

$$D = \alpha_T^\beta D_T + \alpha_C^\beta D_C \quad (1)$$

Le paramètre β est identifié à partir de la réponse du matériau sollicité en cisaillement et il est couramment considéré comme une constante. D_T et D_C sont respectivement la composante en tension et la composante en compression de la variable d'endommagement D . Ces deux composantes sont fonction de 4 paramètres matériaux que l'on identifie grâce à une campagne expérimentale associée à l'analyse inverse. La variable D relie l'endommagement et le comportement mécanique du matériau à travers ses caractéristiques effectives. Ainsi, le module d'Young effectif E et la contrainte effective σ sont définis par (2) :

$$\begin{aligned} E &= E_0(1 - D) \\ \sigma &= \frac{\sigma_0}{1 - D} \end{aligned} \quad (2)$$

où E_0 et σ_0 sont respectivement le module d'Young initial et le tenseur des contraintes initial.

2.2 Le modèle chimique

La réaction alcali-silice a été largement étudiée depuis de nombreuses années et ses différents mécanismes réactionnels ont été mis en évidence par différents modèles [3-4]. Dans le cadre de notre travail, nous avons posé quelques hypothèses simplificatrices et les mécanismes que l'on considère sont :

- Diffusion des alcalins (Na⁺ et K⁺ confondus) présents dans la pâte de mortier vers les granulats
- Tous les ions pénétrant dans les grains réagissent avec la silice plus ou moins rapidement selon la cinétique définie

Quand il n'y a plus de silice à la surface des grains, nous considérons que la diffusion des alcalins se fait plus

profondément dans le granulat et il y a de nouveau réaction chimique entre les alcalins et la silice. Nous avons élaboré un modèle à deux variables couplées qui sont le champs de concentration en alcalins noté $[Na^+]$ et le champs de concentration en silice noté $[SiO_2]$. L'équation qui rend compte de la diffusion/réaction des alcalins dans le béton est un bilan de conservation de la matière (3) :

$$\frac{\partial [Na^+]}{\partial t} - \text{div}(\mathbf{D}_{\text{apparent}} \vec{\nabla}([Na^+])) = \lambda \frac{\partial [SiO_2]}{\partial t} \quad (3)$$

D_{apparent} le coefficient de diffusion apparent et λ le coefficient stoechiométrique de la réaction.

Pendant la réaction, les alcalins et la silice sont consommés pour créer le gel. La diminution des alcalins est prise en compte par le second membre de l'équation mais nous devons aussi considérer la disparition de la silice au cours du temps (4) :

$$\frac{\partial [SiO_2]}{\partial t} = -K[SiO_2]\Gamma_{[Na^+]} \quad (4)$$

Cette équation est une équation cinétique locale uniquement pour les granulats siliceux et qui n'est résolue que lorsque la concentration en alcalins dans le granulat est non nulle (cf. indicatrice). K est la constante qui rend compte de la cinétique de la réaction alcali-silice.

2.3 Le couplage chimico-mécanique

Afin de prendre en compte le gonflement engendré par la réaction chimique, nous allons modifier la loi de comportement des granulats réactifs. Nous considérons que le gonflement libre du béton est proportionnel à l'avancement de la réaction ξ . Si ξ est égal à 0 alors il n'y a pas de gel qui a été créé tandis que si ξ est égal à 1 alors tout le gel a été créé. Dans notre modèle, ξ sera calculé au cours du temps en fonction du nombre de moles de silice qui ont réagi. Les granulats réactifs ont donc désormais une loi de comportement isotropique élastico-chimique (5) :

$$\sigma_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij} + \gamma\varepsilon_{kk}\delta_{ij} - 3\varepsilon^\infty\chi\xi\delta_{ij} \quad (5)$$

où μ , γ et χ sont les paramètres élastiques classiques et ε^∞ est la déformation asymptotique pour un gonflement libre.

3 La résolution numérique

Le modèle précédemment décrit a été implémenté dans le logiciel FEMCAM, dérivé du logiciel Forge2005®. Ce logiciel utilise des éléments finis de type P1+/P1 c'est-à-dire que ces éléments possèdent un degré de liberté supplémentaire en vitesse en son centre (bulle). La discrétisation de notre domaine d'étude en éléments finis [5] nous amène à résoudre un système d'équations aux nœuds où les inconnus sont les champs de concentration en alcalins et en silice à chaque nœud du domaine et cela à chaque incrément de temps de la simulation.

Une fois la mise en donnée géométrique d'un cas (dimension, géométrie, maillage) effectuée grâce au post processeur du logiciel, l'utilisateur devra fournir des données de différentes sortes (chimiques, mécaniques, géométriques...). Certaines sont facilement accessibles par l'expérience mais d'autres ne le sont pas mais pourront être identifiées grâce à ce travail. Une fois ce jeu de données utilisateurs rentrées dans le logiciel, à chaque pas de temps, l'algorithme de résolution du problème va se dérouler ainsi :

- résolution de l'équation diffusion/réaction pour les ions alcalins
- résolution de l'équation différentielle pour la gestion de l'épuisement de la silice
- couplage chimie → mécanique via le gonflement des granulats
- impact du gonflement des granulats sur l'endommagement dans la matrice cimentaire

Comme données de sortie de ce modèle, l'utilisateur pourra visualiser via le post processeur du logiciel un grand nombre de variables, tant chimiques que mécaniques, telles que :

- la variation volumique et linéique de la pièce et la variation volumique du squelette granulaire,
- les cartes de concentrations des différentes espèces,
- l'endommagement dans la matrice que l'on pourra donc relier au module d'Young.

Ce modèle implémenté dans FEMCAM est donc capable de simuler les principaux mécanismes réactionnels

de la réaction alcali-silice ainsi que son impact sur les propriétés mécanique du béton.

4 Résultats

Afin de valider notre modèle numérique mais aussi d'identifier certains paramètres, nous avons utilisé des données expérimentales de différents travaux antérieurs [6-7] réalisés sur des éprouvettes parallélépipédiques de dimension 7*7*28 cm confectionnées à partir d'une formulation de béton testée comme étant particulièrement réactive vis-à-vis de la RAS. Cette formulation présente un rapport eau/ciment de 0,4 et le squelette granulaire est composé pour moitié de granulats siliceux réactifs.

4.1 Tests de validation et de sensibilité

La figure 1 représente un prisme dont le squelette granulaire a été généré grâce à notre modèle. Sur la partie droite du schéma seul un demi prisme est modélisé, nous pouvons y voir le maillage ainsi que les deux sortes de granulats, réactifs en gris foncé et non réactifs en gris clair.

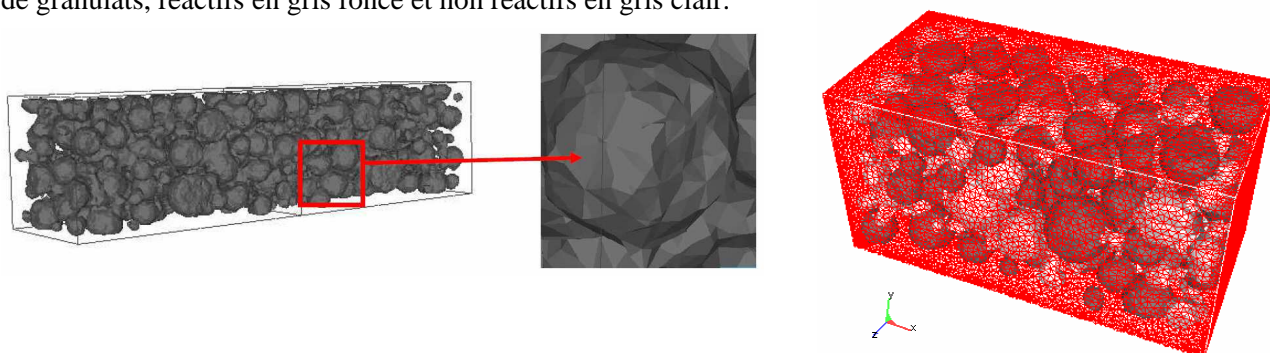


FIG. 1 – Eprouvette hétérogène de béton générée par FEMCAM

Avant de commencer toute étude de sensibilité ou encore d'identification, nous nous sommes assurés que notre modèle ne présentait pas une trop grande sensibilité au pas de temps choisi et que la partie résolution chimique prenait bien en compte la stoechiométrie définie par l'utilisateur. Après chaque calcul, nous pouvons visualiser les cartes d'isovaleurs des concentrations en chaque espèce présente dans l'éprouvette. Par exemple, la figure 2 représente l'évolution au cours du temps de la concentration en alcalins dans un plan de coupe d'une éprouvette parallélépipédique. La concentration initiale en alcalins dans la pâte de ciment est égale à $4,7 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mm}^3$ tandis qu'elle est initialement nulle dans les granulats. Au cours du temps, la concentration dans la matrice cimentaire diminue tandis qu'elle augmente dans les grains avant que les alcalins ne soient consommés par la réaction.

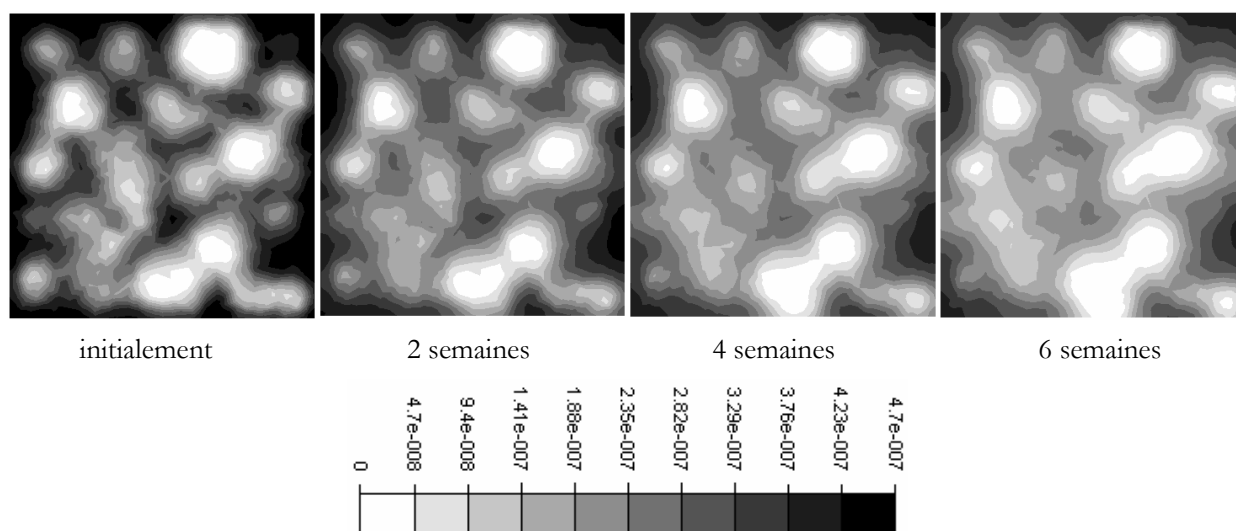


FIG. 2 – Evolution de la concentration en alcalins dans l'éprouvette en fonction du temps de réaction

Une première étude a permis d'identifier la constante cinétique. En effet, cette dernière, très difficile à déterminer expérimentalement, est un des points forts de notre modèle. Nous avons donc testé une large

gamme de valeurs comprises entre 10^{-2} et 10^{-10} s^{-1} et nous avons utilisé les données expérimentales sur la consommation du nombre de moles de silice en fonction du temps de réaction. Nous trouvons une constante cinétique égale à $4 \cdot 10^{-9} \text{ s}^{-1}$.

4.2 Etude du gonflement granulaire

Un des paramètres importants de notre modèle est le gonflement engendré par le gonflement des produits de la réaction alcali-silice. En effet, nous disposons de données sur le gonflement granulaire extrêmement local [8] mais pour notre de modèle nous avons besoin d'identifier une valeur plus globale c'est-à-dire à l'échelle d'un granulat. Pour cela nous avons testé une gamme de valeurs de gonflement, pour une mole de silice qui a réagit, comprises entre 0,5% et 2%. Nous avons identifié la valeur grâce aux données expérimentales sur la variation volumique du squelette siliceux. Ces données ont été obtenues grâce à un protocole expérimental complexe incluant des attaques à l'acide suivies d'analyses. Nous avons pu en conclure que le gonflement global relié à une mole de silice réagit est de 3,5%. Afin de valider cette valeur, nous avons aussi comparé les résultats numériques et expérimentaux sur deux autres observables : la variation volumique globale (figure 3) de l'éprouvette et l'allongement linéique de l'éprouvette suivant l'axe x (figure 4). En bleu sont représentés les données expérimentales et en rouge celles obtenues grâce au modèle numérique. Nous pouvons constater que nous avons une bonne corrélation en utilisant cette valeur de gonflement.

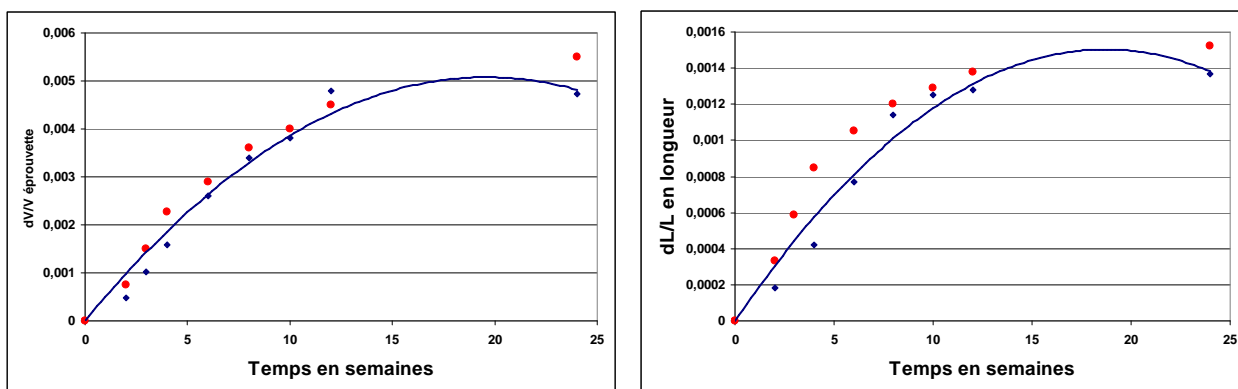


FIG. 3 et 4 – Evolution au cours du temps de la variation volumique de l'éprouvette parallélépipédique et de l'allongement linéique suivant l'axe x

4.3 Conséquences mécaniques de la RAS

Le couplage chimico-mécanique de notre modèle permet de rendre compte de l'endommagement généré par la réaction dans l'éprouvette. La figure 5 représente l'évolution de l'endommagement dans une éprouvette cylindrique de dimension 16*32 cm à différents temps de réaction, 2, 4 et 8 semaines ainsi qu'une vue en coupe en milieu de cylindre à 4 semaines de réaction :

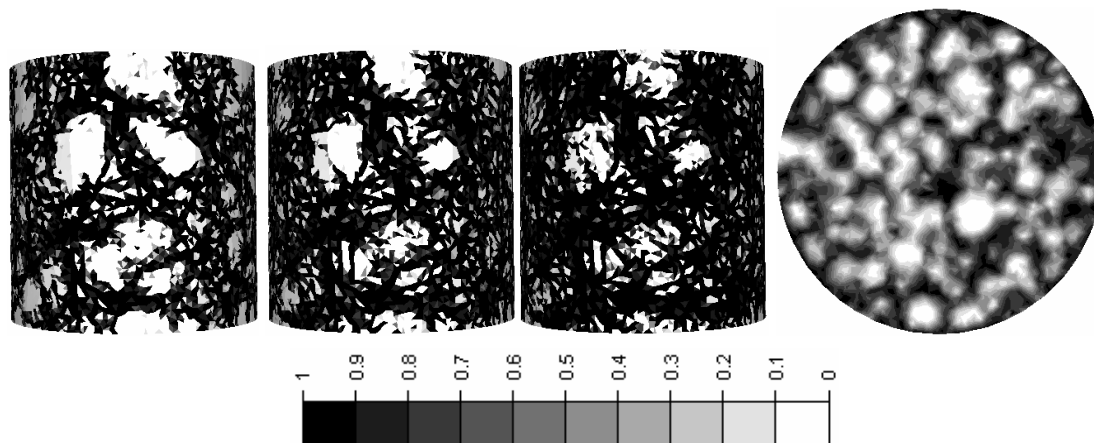


FIG. 5 – Evolution au cours du temps de l'endommagement dans une éprouvette cylindrique et vue en coupe

La variable d'endommagement D est comprise entre 0 (en blanc) et 1 (en noir) et est calculée pour chaque élément fini composant le maillage de l'éprouvette. Nous remarquons que l'endommagement apparaît très tôt mais qu'il est surtout localisé à la surface de l'éprouvette. Sur la vue en coupe, les granulats apparaissent tous en blanc. En effet, leur comportement étant purement élastique, ils ne s'endommagent pas.

Afin d'étudier les conséquences de la réaction alcali-silice sur la résistance mécanique des éprouvettes en béton, nous avons procédé à des tests numériques de compression sur des cylindres à différents temps de réaction. Il en résulte que la résistance à la rupture en compression des cylindres diminue de 26% après 8 semaines de réaction ce qui est de l'ordre de grandeur de ce que l'on peut trouver dans la littérature pour un béton réactif [6&9].

5 Conclusion

Ce travail présente un modèle pour décrire la réaction alcali-silice dans le béton. Ce modèle peut se décomposer en trois étapes principales. Il y a en premier lieu la création de l'éprouvette avec la géométrie souhaitée par l'utilisateur ainsi que la génération du squelette granulaire avec une granulométrie elle aussi définie par l'utilisateur. Il y a ensuite une étape de résolution chimique pour décrire les mécanismes réactionnels de la RAS. Cette étape permet d'évaluer les concentrations et nombres de moles en alcalins et en silice en tout point de l'éprouvette à chaque instant de la réaction. La dernière étape est la résolution mécanique pour simuler les effets mécaniques de la RAS sur l'éprouvette de béton en évaluant l'endommagement dans la matrice cimentaire. Cette dernière est couplée à la seconde, nous avons donc mis au point une résolution numérique complète couplée chimie-mécanique ce qui représente une réelle avancée par rapport aux modèles existants. De plus, ce modèle présente un paramètre « nouveau », la constante cinétique, qui pour l'instant n'a été intégré dans aucun autre modèle mésoscopique. Nous avons pu identifier une valeur pour cette constante ainsi que pour d'autres paramètres que nous avons validé grâce à des travaux expérimentaux. La corrélation entre les résultats numériques et expérimentaux est plutôt bonne que ce soit pour des données chimiques ou mécaniques. Les perspectives à plus long terme sont l'intégration de l'endommagement dans les granulats ainsi que la mise en place de la faisabilité du couplage mécanique → chimique. Pour cette dernière perspective, l'objectif est d'implémenter une loi qui relierait l'endommagement au coefficient de diffusion où à la constante cinétique afin de prendre en compte la rétroaction de la mécanique sur la chimie et ainsi d'avoir un couplage dit total.

Références

- [1] Sellier, A., Capra, B. 1997. Modélisation physico-chimique de la réaction alcali-granulats, apport au calcul des structures dégradées, *Revue Française de Génie Civil*, Vol. 1 n°3, pp. 445-481.
- [2] Mazars, J., Application de la mécanique de l'endommagement au comportement non linéaire et à la rupture du béton de structure, thèse de doctorat d'état de l'Univ. ParisVI, 1984.
- [3] Dent Glasser, L.S. and Kataoka, N., The chemistry of alkali-aggregate reaction, *Proceedings of the 5th International Conference on Alkali-Aggregate Reaction*, Cape Town (South Africa), Paper, vol. S252/23, National Building Research Institute of the CSIR, 1981.
- [4] Poole, A.B., Alkali-Silica reactivity mechanisms of gel formation and expansion, *Proceedings of the 9th International Conference on Alkali-Aggregate Reaction*, London (England), 104 (1), Concrete Society Publications CS, pp. 782-789, 1992.
- [5] Dhatt, G. and Touzot, G., Une présentation de la méthode des éléments finis, Edn Maloine (1981).
- [6] Dehaut, S., Etude de la dégradation d'un béton soumis à la réaction alkali-granulat, Thèse de doctorat, Université des sciences et technologies de Lille, 2002.
- [7] Comby, I., Development and validation of a 3D computational tool to describe damage and fracture due to alkali silica reaction in concrete structures, thèse de doctorat de l'Ecole des Mines de Paris, Décembre 2006.
- [8] Garcia-Diaz, E., Riche, J., Bulteel, D. and Vernet, C., Mechanism of damage for the alkali-silica reaction, *Cement and Concrete Research* 36 (2006) 395-400.
- [9] Institution of Structural Engineers (ISE), Structural effects of alkali-silica reaction, Technical guidance on the appraisal of existing structures, Juillet 1992, London.