Généralités de modélisation de la RAG

Sommaire

2.1	Intr	oduction	3 4
2.2	Modélisation chimie-transport de la RAG		34
	2.2.1	Modèle de Furusawa, Ohga et Uomoto	34
	2.2.2	Modèle de Bažant	35
	2.2.3	Modèle de Poyet	36
	2.2.4	Conclusion sur les modèles de chimie et de transport	36
2.3	Mod	lélisation micromécanique de la RAG	37
	2.3.1	Modélisations purement élastiques	3'
	2.3.2	Modèles à endommagement	40
	2.3.3	Modèles à fissuration à l'échelle microscopique	43
	2.3.4	Conclusion sur les modèles mécaniques à l'échelle microscopique	46
2.4	Mod	lélisation mécanique à l'échelle macroscopique	46
2.5	Con	clusion	48

2.1 Introduction

La première réponse face à l'alcali-réaction est d'éviter qu'elle se produise dans les ouvrages nouveaux. C'est l'objet des recommandations établies en 1994 par le LCPC en France [49]. Il s'agit principalement de ne plus utiliser les granulats très réactifs et de limiter la teneur en alcalins des ciments. On note cependant qu'il est en général beaucoup plus économique d'utiliser pour la construction des granulats locaux. Cette considération se heurte parfois à l'interdiction de l'utilisation de certains granulats locaux à cause d'un environnement propice à l'alcali-réaction. Toute compréhension des phénomènes microscopiques se produisant lors de l'alcali-réaction permettant d'utiliser des granulats qui sont interdits peut donc permettre des économies sur certains chantiers. On pense notamment à la possibilité pour un granulat réactif d'être beaucoup moins nocif s'il est broyé à une taille donnée.

Concernant les ouvrages existants, un certain nombre de techniques ont été tentées pour ralentir la réaction ou diminuer ses symptômes. L'addition de béton armé supplémentaire pour limiter le gonflement a par exemple été réalisée sur le stade de Lille. Sur d'autres ouvrages, comme des barrages ou des ponts, le béton a été mis hors eau de façon à diminuer l'apport d'eau pour le gonflement du gel. L'injection de résine dans les fissures à la surface a également été effectuée. Un des exemples de travaux très importants a été réalisé sur le barrage du Chambon, en France, qui a été scié de façon à relâcher les contraintes de compression importantes accumulées à cause du gonflement du béton lors de l'alcali-réaction. Ces dépenses importantes engagées pour garantir une durée de vie satisfaisante aux ouvrages atteints ne sont pas toujours couronnées de succès. Il est donc important de disposer d'outils de simulation pour pouvoir évaluer la durée de vie restante des structures attaquées, et éventuellement l'amélioration qui serait permise par une intervention sur l'ouvrage.

Ces considérations soulignent la nécessité de bien comprendre les mécanismes microscopiques de l'alcali-réaction, et de les intégrer dans des codes de calcul à l'échelle de structures qui permettent d'évaluer la durée de vie des ouvrages atteints. Nous allons dans cette partie présenter une étude bibliographique sur les modèles pour l'alcali-réaction, en les classant en trois grandes catégories : modèles de chimie et de transport, modèles mécaniques à l'échelle microscopique, modèles mécaniques à l'échelle de la structure.

2.2 Modélisation de la chimie et du transport lors de la réaction alcali-silice

Intéressons-nous tout d'abord aux modèles de chimie et de transport lors de l'alcali-réaction. Ces modèles ont pour objectif principal de prédire la quantité de gel produite au niveau d'un site réactif donné, en fonction de la disponibilité des espèces chimiques réactives dans les granulats (silice), dans le béton (ions alcalins, hydroxydes, calcium, eau), et apportées depuis l'extérieur (alcalins et eau).

2.2.1 Modèle de Furusawa, Ohga et Uomoto

Ce modèle [28], également appelé U.F.O., du nom des trois auteurs décompose l'alcali-réaction en un certain nombre d'étapes. Tout d'abord les ions hydroxydes et alcalins diffusent dans le granulat. Ces ions réagissent ensuite avec la silice des granulats. Comme les ions alcalins et hydroxyde interviennent dans la même réaction de dissolution, et que leur diffusion se fait ensemble, seule la diffusion des ions hydroxydes est considérée en réalité. L'étape limitante pour la dissolution est la diffusion qui permet la disponibilité des espèces, non la réaction chimique en tant que telle. La diffusion des ions hydroxydes suit une loi de Fick avec terme de puits pour représenter leur consommation par les réactions chimiques, et se fait depuis la surface vers l'intérieur de granulats sphériques. La concentration à la surface du grain, qui sert de condition aux limites à l'équation de diffusion, varie en fonction de la quantité totale d'ions alcalins disponible. Les produits de réaction sont ensuite considérés à la surface du granulat, et peuvent pénétrer dans une zone poreuse à la surface des granulats, la pression n'augmentant qu'une fois que cette zone est pleine. Le modèle est testé sur l'essai accéléré de 24h américain (ASTM C-289), lors duquel les granulats broyés sont plongés dans une solution alcaline. Les auteurs remarquent que comme la phase limitante est la diffusion, on peut simplifier l'équation de diffusion et obtenir une équation différentielle sur la profondeur d'attaque, et ainsi trouver que cette profondeur d'attaque évolue en racine carrée en fonction du temps (avec les hypothèses que la couche attaquée est fine par rapport à la taille du grain, et que tout le grain est attaqué). Leurs observations sont cohérentes avec cette évolution en racine carrée, la vitesse ne varie pas avec la taille des grains mais dépend de la concentration initiale en alcalins. La dépendance de la vitesse de réaction en la température est prise en compte par une loi d'Arrhenius. Le modèle est ensuite appliqué sur l'attaque d'une barre de mortier (ASTM C-227), les granulats considérés étant des verres. Une relation affine est trouvée expérimentalement entre la quantité de produits de réaction et le gonflement, le retard de démarrage du gonflement étant dû au remplissage des auréoles de transition. Un effet pessimum en fraction volumique et en taille de granulats est observé.

2.2.2 Modèle de Bažant

Le modèle se concentre sur la chimie et le transport lors de l'alcali-réaction [2]. Il se base sur le mécanisme réactionnel habituel, supposant en ce qui concerne les gels produits qu'une concentration élevée en calcium en fait des produits solides proches des C-S-H, tandis qu'à faible contenu en calcium, ce sont des produits visqueux susceptibles d'absorber de l'eau et de gonfler. La concentration en calcium est supposée suffisamment faible pour que ce dernier type de gel soit produit. Des granulats denses et sphériques, d'une unique taille, sont considérés (leur modèle vise la modélisation des bétons à granulats de verre recyclé). La dissolution de la silice se produit depuis la surface. La diffusion des espèces chimiques réactives à travers cette couche de gel est l'étape limitante de la dissolution des granulats. Les auteurs supposent un arrangement périodique des grains, de façon à pouvoir simuler des fractions volumiques plus importantes qu'avec les schémas de micromécanique classique, type auto-cohérent. La diffusion à travers la couche de gel suit une loi de Fick. Une seule espèce est considérée, en l'occurrence l'eau, qui représente l'ensemble des réactifs provenant de la solution interstitielle. Les gels produits migrent partiellement dans l'auréole de transition, d'épaisseur indépendante de la taille de grain. Le gel gonfle par absorption d'eau, et est élastique linéaire. La quantité d'eau absorbée est liée par des lois simples à la pression et à l'humidité relative dans les pores. La diffusion de l'eau nécessaire au gonflement du gel est considérée indépendamment de celle de l'eau qui représente l'ensemble des réactifs de la réaction de dissolution du granulat, et modélisée par une loi de Darcy. La perméabilité est adaptée en fonction de l'humidité.

Les auteurs étudient le comportement du modèle en faisant varier différents paramètres. Ils observent une taille de particule qui conduit à une pression maximale. La formation du gel accélère lorsqu'on diminue la taille des particules, à cause d'un effet de surface spécifique. Pour la même raison, l'humidité baisse plus pour les petites particules, ce qui laisse moins d'eau disponible pour faire gonfler le gel. Un effet pessimum sur la quantité de silice réactive est observé. La taille de grain pessimum augmente lorsque la perméabilité du gel augmente.

2.2.3 Modèle de Poyet

Le modèle de Poyet [70, 69] se place dans le sillage de celui de Sellier [75]. Le couplage entre les tailles de granulats par l'équilibre d'une quantité totale de réactif est inspiré de Furusawa, Ohga et Uomoto (voir [28] et \S 2.2.1), ceci pour prendre en compte l'effet de la distribution de tailles de granulat sur le développement de l'alcali-réaction. Les granulats sont supposés sphériques. Il appelle Volume Élémentaire Représentatif (VER), un granulat entouré d'une portion de pâte de ciment. Un problème de diffusion d'espèces chimiques réactives sur ce VER est traité de façon à calculer la quantité de réactifs en fonction du rayon, qui est couplée à l'avancement de la réaction de dissolution du granulat par un terme de puits dans l'équation de diffusion. Les espèces considérées sont : les alcalins, les ions calcium en solution, la portlandite, la silice réactive et les produits de réaction. Le déroulement de la réaction est le suivant : diffusion des réactifs dans les granulats, attaque du réseau siliceux par les ions hydroxydes, formation de produits silico-alcalins ou silico-calciques, les premiers étant des gels, les seconds proches des C-S-H. Une fois la porosité connectée au grain remplie, la montée en pression du gel débute, limitée par le niveau d'endommagement du VER. En parallèle, diffusion des réactifs dans la matrice vers les granulats, dissolution de portlandite et diffusion des ions calcium. La diffusion des ions est l'étape limitante. Ce formalisme permet une estimation du volume de gel créé, à partir d'une estimation de Lombardi du volume molaire des gels [54]. L'énergie développée par la précipitation (due à l'augmentation de volume) sert intégralement à endommager le matériau, ce qui donne une expression de l'endommagement, sous forme d'équation différentielle, en fonction du volume de gel. La déformation du mortier est enfin estimée par une relation empirique en fonction de l'endommagement, inspirée de Sellier [75].

Le modèle est ensuite enrichi de la prise en compte de la teneur en eau au niveau local, directement sur l'avancement de la réaction. La teneur en eau est calculée par résolution d'une équation de diffusion non linéaire, la diffusivité dépendant de la teneur en eau.

Le modèle se prolonge à l'échelle supérieure par un modèle de calcul de structures qui aurait sa place dans notre partie dédiée (§ 2.4), mais que nous décrivons ici. La déformation de la structure est composée de plusieurs contributions : déformation élastique, déformation due à l'alcali-réaction, fluage, déformation de séchage, déformation thermique. La déformation de séchage est liée au degré de saturation en eau par une équation empirique. Les déformations liées à la réaction alcali-silice sont calculées à partir de l'endommagement dans chaque direction. La cinétique de la réaction est liée au degré de saturation en eau. Enfin l'endommagement anisotrope est obtenu à partir de l'état de contrainte local.

2.2.4 Conclusion sur les modèles de chimie et de transport

La modélisation dans ce domaine semble avoir atteint sa maturité, c'est-à-dire qu'elle incorpore l'ensemble de ce que l'on connaît sur les mécanismes réactionnels mis en jeu lors de la réaction alcali-silice. Il nous semble que le modèle le plus élaboré, en particulier sur la question très importante de l'influence de la teneur en eau du béton, est celui de Poyet [70]. Ce modèle est de plus prolongé par un modèle de structure. Il ne lui manque qu'un lien solide avec les phénomènes mécaniques à l'échelle microscopique. Nous allons passer dans la section suivante les modèles microscopiques disponibles en revue.

2.3 Modélisation mécanique de la réaction alcali-silice à l'échelle microscopique

La modélisation mécanique à l'échelle microscopique a pour objectif principal, si l'on se donne le volume de gel créé aux abords d'un site réactif (ou qu'on l'a déterminé grâce à l'un des modèles présenté dans la section précédente), de déterminer les déformations et la variation des propriétés mécaniques de l'élément de béton auquel on s'intéresse. Certaines approches restent purement élastiques, tandis que d'autres considèrent une évolution de la microstructure par de l'endommagement ou de la fissuration microscopique.

2.3.1 Modélisations purement élastiques

Nous commençons avec les modèles élastiques. Certains de ces modèles considèrent la présence de fissure dans l'élément de béton attaqué, mais celles-ci ne se propagent pas. La microstructure du squelette solide ne varie donc pas. Commençons par les modèles poromécaniques.

2.3.1.1 Poromécanique appliquée à l'alcali-réaction

Nous présentons ici un point de vue développé par Dormieux et Lemarchand dans [52, 51, 20]. Le formalisme de la poromécanique est décrit dans le livre de Coussy [15], tandis que le livre de Dormieux fait référence pour la microporomécanique [19]. Nous commentons largement ce formalisme microporomécanique dans notre mémoire au § 3.4.

Lemarchand [52] L'alcali-réaction est en général décrite comme une réaction qui se fait en deux temps : tout d'abord, l'attaque de la silice mal cristallisée des granulats par les ions hydroxydes. Ce mécanisme est topochimique par nature, puisqu'une partie des réactifs n'est pas mobile, en l'occurrence la silice des granulats. Dans un second temps, la silice provenant des granulats, dissoute lors de la première phase, se combine avec les alcalins et le calcium provenant de la pâte de ciment pour donner un gel capable d'absorber de l'eau, donc de gonfler. L'objectif de cet article de Lemarchand est principalement de discuter la possibilité que la seconde phase soit une réaction topochimique ou trans-solution, à la lumière des conséquences mécaniques des deux types de réactions et de la forme connue des courbes de gonflement.

Ce débat concerne d'ailleurs plutôt les granulats rapides, pour lesquels on s'est longtemps demandé si les gels étaient créés à l'interface des granulats ou de manière plus homogène dans la pâte de ciment. Lemarchand teste les deux possibilités dans un modèle microporomécanique et compare les courbes de gonflement obtenues à celles mesurées.

- <u>Trans-solution</u>. Le gel est introduit de manière homogène dans la porosité du béton (pâte de ciment et granulats ne sont pas distingués), avec une cinétique imposée (vitesse d'injection constante pendant un temps fini). Les auteurs lient le gonflement macroscopique à l'injection de gel (la microstructure du béton est caractérisée par un coefficient de Biot et une porosité, et n'évolue pas).
- <u>Topochimique</u>. L'interface entre les granulats et la pâte de ciment est tout d'abord représentée comme une famille de fissures dans laquelle le gel est injecté (Fig. 2.1). Ces fissures étant ellipsoïdales, les auteurs utilisent une schéma de micromécanique utilisant le tenseur d'Eshelby pour déterminer les déformations macroscopiques. Les gonflements macroscopiques dépendent de la densité de fissures.
- <u>Transition entre les deux mécanismes.</u> Les auteurs supposent que le véritable mécanisme est probablement une combinaison des mécanismes trans-solution et topochimique, et testent la possibilité d'injecter le gel à la fois dans des fissures autour des grains et dans la porosité du béton.



FIGURE 2.1 – Une famille de fissures de l'option topochimique du modèle micromécanique de Lemarchand [52]

Ils obtiennent les résultats suivants :

- La compressibilité du gel est un paramètre qui influence les gonflements;
- La courbe d'expansion libre caractéristique en S est reproduite par les deux modèles testés, mais les temps caractéristiques de gonflement varient selon le mécanisme testé.

Dormieux [20] Dans cet article, les auteurs supposent l'existence d'un jeu de fissures représentant l'auréole de transition (ITZ), qui est une zone de porosité importante, à l'interface entre les granulats et la pâte de ciment. L'objectif est de tester l'option topochimique. La distribution des fissures est isotrope, ce sont des fissures en disque (penny-shaped), réparties en plusieurs familles caractérisées par leur rayon et rapport d'aspect (Fig. 2.2).



FIGURE 2.2 – Fissures représentant l'auréole de transition dans le modèle de Dormieux [20]

La vitesse de création du gel est, dans chaque famille, proportionnelle à la surface des fissures de la famille. Le temps nécessaire pour remplir une fissure est donc proportionnel à son rapport d'aspect. La pression augmente dans une famille lorsqu'elle est pleine, et la déformation est alors calculée par un modèle de micromécanique. L'effet d'une contrainte macroscopique est étudié. Les contraintes macroscopiques modifient le volume initial des fissures, donc le temps nécessaire à les remplir, et finalement l'instant de la montée en pression.

Lemarchand, prolongation des travaux précédents [51] Dans cet article, l'objectif est, en reprenant les idées de l'article précédent, d'expliquer l'anisotropie de la réaction alcalisilice sous chargement. Chaque grain est supposé entouré par six fissures occupant les six faces d'un cube englobant le granulat (Fig. 2.3). Ces fissures sont interconnectées et échanges donc du gel. La création du gel est stoppée dans une fissure si les chargements ont entraîné sa fermeture.

Ce modèle permet une reproduction qualitative des essais de Larive [48] qui montrent le report des déformations des directions les plus compressées vers les autres lors de l'alcali-réaction





sous chargement, et la diminution globale des gonflements à fort chargement.

2.3.1.2 Suwito, Jin et Xi

Le modèle de Suwito, Jin et Xi [81, 44] étudie l'attaque d'un granulat homogène et dense par les ions hydroxydes alcalins. L'application de ce modèle est le recyclage de verre comme granulats. L'objectif est de reproduire l'effet pessimum en taille dans le test américain standardisé de 14 jours sur éprouvettes de mortier placées dans une solution alcaline (ASTM C-1260). Le modèle



FIGURE 2.4 – Découpage du béton en un assemblage de sphères [81]

est en deux parties : d'un côté l'utilisation de la micromécanique pour calculer les gonflements et les pressions générées par l'alcali-réaction au sein de granulats de différentes tailles, de l'autre un calcul de diffusion. Dans la partie micromécanique, le béton est considéré comme un assemblage de sphères à deux phases (Fig. 2.4). La première phase, dans chaque VER, est la sphère intérieure qui représente le granulat et le gel, la seconde phase est la pâte de ciment. Le rapport entre les rayons des deux sphères permet de respecter la fraction volumique réelle des granulats. Le gonflement est supposé uniforme dans le granulat. Le gonflement libre macroscopique est calculé comme moyenne des gonflements de chaque VER. Le modèle de diffusion distingue deux phases pour ce qui est des réactifs : la diffusion des ions depuis la surface de l'éprouvette vers le granulat réactif, puis la diffusion depuis la surface du granulat vers son centre. La diffusion des gels d'alcali-réaction est ensuite considérée : le gel en excédent par rapport à la porosité du granulat et de l'auréole de transition diffuse dans la porosité de la pâte de ciment. Le béton est considéré saturé en eau. La diffusion suit une loi de Fick, les auteurs donnent une solution analytique pour la diffusion dans le granulat. La diffusion dans la pâte est considérée beaucoup plus rapide donc l'extérieur de chaque granulat est à la même concentration en réactifs. La migration du gel suit une loi de Darcy, le volume qui doit se déplacer étant égal au volume de gel diminué du volume de l'auréole de transition qui pour chaque grain, est proportionnel à sa surface. Le volume de gel par unité de volume de matrice cimentaire est considéré proportionnel à la pression de gel, ce qui est présenté comme une approximation. Le problème est finalement résolu analytiquement. L'effet pessimum en taille est reproduit.

2.3.1.3 Modèle de Shin

La procédure de Shin [77] pour reconstruire les expansions lors d'alcali-réaction provoquée dans le cadre de l'essai accéléré sur barre de mortier américain (ASTM C-1260) est assez originale. L'auteur découpe, puis observe des échantillons de mortier attaqué au microscope électronique à balayage, de façon à repérer les éléments suivants : fissures isolées et sans gel, fissures partiellement ou complètement remplies de gel, fissures sans gel connectées avec des fissures remplies de gel, granulat, pâte de ciment, pore. Les fissures du premier type sont considérées préexistantes à l'alcali-réaction et sont observées dans les granulats, à l'interface, et dans la pâte de ciment. Les deux autres types de fissures sont dus à l'alcali-réaction. Pour le type de granulat utilisé, il n'y a pas de gel dans les fissures de la pâte de ciment. Les fissures connectées à des fissures remplies de gel se trouvent à l'interface ou dans la pâte de ciment, et ont progressé à cause des contraintes induites par le gonflement du gel dans les fissures des granulats. Les images sont ensuite converties en modèle éléments finis (ce sont des zones assez petites en comparaison de la taille des hétérogénéités, en deux dimensions), et une pression est appliquée dans les zones de fissures remplies de gel, de façon à retrouver la déformation du mortier avant le séchage du gel qui intervient lors de la préparation de l'échantillon pour le passage au microscope.

Les auteurs suggèrent que pour améliorer leur travail, il serait nécessaire de passer à trois dimensions, de considérer des processus non linéaires comme la fissuration, et de mieux connaître les propriétés mécaniques du gel.

2.3.2 Modèles à endommagement

On considère qu'il s'agit d'endommagement même lorsque les auteurs parlent de fissures mais que leur propagation n'est pas calculée par les équations de la mécanique linéaire de la rupture.

2.3.2.1 Modèle de Nielsen

Le modèle proposé par Nielsen [62] se fonde sur le mécanisme réactionnel de Chatterji [11]. De l'eau et des ions entrent dans le granulat réactif, ce qui provoque son gonflement, et le met donc en compression, ce qui conduit à une fissuration de la pâte de ciment environnante. La réaction est ralentie lorsque le taux d'humidité baisse à la fin de l'hydratation, mais peut recommencer s'il y a un apport d'eau externe. Dans ce cas, le gel d'alcali-réaction devient plus fluide et s'écoule dans les fissures et les pores, ce qui stoppe la progression des fissures. Le modèle traite la phase où le gel est encore trop solide pour s'écouler, donc entraîne l'apparition de fissures.

Le modèle mécanique considère une cellule sphérique composée d'un granulat sphérique entouré d'une matrice de mortier ou de béton. La particule attaquée est représentée mécaniquement par une pression appliquée sur la surface de la matrice. Les fissures sont radiales, dans la partie attaquée de la matrice. Leur progression est définie par le fait qu'à l'interface entre la zone saine et la zone endommagée de la matrice, la contrainte orthoradiale est égale à la résistance en traction de la matrice. L'effet d'un chargement extérieur uniaxial est pris en compte. La présence de fissure est traduite en termes d'endommagement, puisqu'une surface effective de matériau est introduite. La diffusion de l'humidité dans la cellule est également prise en compte, avec pour condition aux limites l'humidité observée annuellement au Danemark. Une loi empirique lie l'expansion du grain à l'humidité. Les auteurs considèrent que les grandes déformations observées parfois lors de l'alcali-réaction sont dues à une fissuration entre plusieurs particules, qui donc ne peut être reproduite par leur modèle. Les temps caractéristiques de développement des contraintes sont de l'ordre du carré de la taille de l'élément, comme on l'attend lorsque le temps intervient principalement dans un processus de diffusion. Les auteurs montrent que la fraction volumique de particules réactives influe sur la pression entraînant la ruine de l'élément.

2.3.2.2 Modèle de Multon

Multon a proposé un modèle dont l'objectif est d'expliquer le rôle de la taille des granulats et de la quantité d'alcalins observé dans plusieurs séries d'expériences [60, 58, 59] et dans le travail de Poyet [70]. Le volume de gel produit par chaque taille de grain est calculé à partir de sa fraction volumique et de la quantité d'alcalins disponibles. Ce volume est corrigé pour prendre en compte le volume qui se déplace vers l'auréole de transition et limite ainsi pendant un temps la montée en pression du gel. Enfin, la déformation moyenne est reliée linéairement à la variation de volume des granulats par un paramètre à identifier, mais les phénomènes de rupture ne sont pas traités. L'effet pessimum en taille est cependant bien reproduit. Dans un modèle antérieur mais plus élaboré [59], l'endommagement de la pâte de ciment entourant le granulat est calculé, de façon à reproduire la microfissuration induite par la montée en pression du gel et à estimer ainsi les déformations macroscopiques par un vrai calcul mécanique et non simplement en supposant une relation linéaire entre pression du gel et déformation macroscopique. Ce modèle est également utilisé dans la thèse de Gao [31] et l'article [32] où sont discutés l'effet pessimum en taille et l'effet de taille d'éprouvettes lors d'essais en laboratoire.

2.3.2.3 Comby-Peyrot et Naar

Le modèle de Comby-Peyrot [13] se base sur le mécanisme réactionnel des Mines de Douai [7], et sur leur méthode de quantification de l'avancement de la réaction qui permet de relier le gonflement d'un mortier au gonflement des granulats. L'objectif de ce modèle est donc d'utiliser le gonflement des grains comme une entrée du modèle, de prendre en compte dans un code de calcul par éléments finis (FEMCAM) la distribution des granulats dans l'espace, et de calculer l'endommagement de la pâte de ciment environnante ainsi que les gonflements macroscopiques (par modèle d'endommagement de Mazars [55]). Les granulats sont considérés élastiques, sans endommagement, et leur variation de volume est l'entrée du modèle.

Les gonflements aux temps courts sont bien reproduits, mais après un certain temps de réaction, ils sont surestimés par rapport aux expériences. Cela peut venir, d'après les auteurs, de l'absence de prise en compte de l'endommagement des granulats, ou de l'absence de véritable fissuration dans la pâte de ciment. Les schémas d'endommagement semblent bien reproduire le type de fissuration habituellement observé en surface d'éléments de bétons attaqués. La diminution des modules élastiques du béton est également bien reproduite (diminution de l'ordre de 30 % pour un gonflement des grains de 10 %). Il y a une dépendance marquée de la vitesse de gonflement macroscopique en fonction de la concentration de granulats réactifs et de la taille de ces granulats.

Le modèle est enrichi de la possibilité d'avoir des fissures, mais la comparaison avec les expériences n'est pas effectuée pour ce qui est de la réaction alcali-silice. Les auteurs pensent qu'un autre enrichissement important est de prendre en compte le fluage du béton, ce qui pourrait permettre de moins surestimer les déformations après un long temps d'attaque.

Le travail de Naar prolonge celui de Comby-Peyrot [61]. Le modèle est enrichi d'une description beaucoup plus fine de la chimie de l'alcali-réaction et du transport. La diffusion de la silice et des alcalins est prise en compte. La réaction chimique de dissolution de la silice n'est pas instantanée, mais modérée par un paramètre cinétique. Un couplage de la mécanique sur le transport est également implémenté, avec la variation des coefficients de diffusion en fonction de l'état d'endommagement calculé par modèle non local de Mazars [55]. L'auteur juge cependant que la dégradation de l'élément en béton est surestimée avec ce modèle d'endommagement.

2.3.2.4 Modèle numérique de Dunant

Ce modèle reprend les conclusions de Ben Haha [4] pour construire un modèle dans lequel l'avancée de la réaction est liée à la fraction de vides et fissures, qui elle-même est reliée au gonflement macroscopique. Le modèle, décrit dans [23, 24], se base sur des éléments finis, dans lequel les granulats, sphériques, sont maillés explicitement. Les zones réactives sont placées aléatoirement dans les grains et gonflent. Les auteurs s'intéressent en effet à des granulats à réactivité lente pour lesquels les zones qui gonflent forment des poches à l'intérieur des grains. Le modèle permet de calculer l'endommagement des granulats et de la pâte de ciment sous l'effet du gonflement des zones réactives, en utilisant un critère de Mohr-Coulomb (Fig. 2.5). Les propriétés mécaniques sont distribuées aléatoirement. Le gel est élastique, presque incompressible. Les résultats sont en



FIGURE 2.5 – Schéma d'endommagement typique obtenu par le modèle de Dunant [24]

bon accord avec les résultats expérimentaux pour ce qui est des courbes de gonflement libre. Le gonflement est cependant surestimé car le fluage n'est pas pris en compte. Les auteurs constatent que l'endommagement démarre bien dans les granulats, ce à quoi on s'attend pour ce type de granulats à réactivité lente où le gel est présent sous forme de poches dans les grains. Une comparaison est faite des schémas d'endommagement selon que le gel est présent en poches dans les grains, de manière uniforme dans le grain ou à la surface du grain. Les auteurs trouvent que seule la première option permet de reproduire correctement les courbes de gonflement expérimentales et les schémas d'endommagement observés.

Dunant consacre un article plus récent à l'étude de l'anisotropie de l'alcali-réaction sous chargement [25]. Il présente des résultats expérimentaux de gonflement sous chargement uniaxial. Il utilise ensuite son modèle d'endommagement par éléments finis de bétons attaqués par l'alcaliréaction sur ces cas de chargement. Les schémas d'endommagement, dans les granulats (où se trouvent les poches de gel) et dans la pâte de ciment, sont orientés par le chargement macroscopique. Le modèle est en revanche limité à cause de sa nature bidimensionnelle, puisque cela favorise la coalescence des fissures. L'échantillon est donc fissuré de part en part artificiellement aux fortes charges (au dessus de 5 MPa). Ce modèle nous semble être le plus évolué pour ce qui est de l'étude de l'alcali-réaction sous chargement.

2.3.3 Modèles à fissuration à l'échelle microscopique

2.3.3.1 Articles d'Ichikawa

L'idée originale du modèle d'Ichikawa [43, 42] est de mettre l'accent sur la nature différente des précipités contenant du calcium de ceux qui n'en contiennent pas. Le gel silico-alcalin est supposé visqueux, tandis que le gel calco-silico-alcalin est supposé rigide, et confiné à l'anneau de réaction (reaction rim) à l'interface du granulat avec la pâte de ciment. L'anneau de réaction empêche l'écoulement des gels visqueux vers l'extérieur du granulat mais n'entrave pas la diffusion des ions hydroxydes d'alcalin vers l'intérieur du grain. L'attaque du granulat se poursuit donc, tandis que les produits de réaction visqueux s'accumulent dans le grain. La matrice est divisée en deux zones à symétrie sphérique : une partie fissurée et une partie saine. Ce modèle est pensé pour des granulats siliceux denses, pour lesquels l'attaque se produit depuis la surface vers le centre. Le gonflement est lié à la fissuration de l'anneau de réaction, non à celle de la pâte de ciment.

Dans ce modèle, les auteurs prennent en compte les différentes tailles de granulats, considérés sphériques. La diversité réelle des formes est prise en compte en affectant une résistance aléatoire aux anneaux de réaction. La probabilité qu'un anneau d'épaisseur donnée ne casse pas à une quantité de gel donnée suit une loi normale. Après fissuration de l'anneau, le gel dans le grain n'absorbe pas beaucoup de calcium car la formation de l'anneau de réaction consomme la majorité du calcium disponible. La pression maximale atteinte est de l'ordre de 400 GPa. Un facteur de gonflement est affecté au gel à sa création, les modules d'incompressibilité du gel et du granulat sont finis. Dans un premier temps, le gel est considéré immature. Il s'hydrate ensuite, puis réagit avec le calcium, ce qui le rend fragmentaire. La réaction du gel non hydraté avec le calcium forme l'anneau de réaction. Le gonflement macroscopique est ensuite relié au volume des grains dont l'anneau de réaction s'est fissuré sous pression du gel.

Ce modèle permet aux auteurs de reproduite l'effet pessimum lié à la fraction volumique des granulats. En revanche, pour reproduire l'effet de pessimum en taille, il est nécessaire de prendre en compte la cinétique de la réaction, ce qui est également fait dans l'article.

2.3.3.2 Modèles de Capra et Sellier

Nous avons regroupé sous le même titre ces deux modèles [9, 75] qui ont quelques points communs. La description microscopique dans le modèle de Sellier est cependant plus élaborée, ce qui justifie qu'on les ai placés avec les modèles à l'échelle microscopique décrivant la fissuration.

Capra Le modèle présenté dans cet article est très phénoménologique. Il permet cependant de prendre en compte l'effet de l'humidité relative, de la température et de l'anisotropie de gonflement. La cinétique chimique et la mécanique sont découplées. L'humidité relative est prise en compte grâce à une courbe empirique donnant le gonflement à un degré d'humidité relative donné en proportion de celui observé à 100 %. La cinétique de la réaction chimique est supposée du premier ordre. La fissuration se produit en mode I, et les facteurs d'intensité de contrainte sont calculés en prenant en compte l'angle de la fissure considérée par rapport au chargement macroscopique. Les tailles de fissures sont distribuées selon une loi normale.

Sellier Le modèle de Sellier contient d'abord une partie traitant du transport et de la chimie. La diffusion des ions alcalins et hydroxydes est modélisée par une loi de Fick à terme de puits pour les produits consommés par la réaction. Elle se fait dans un volume sphérique entourant le granulat, vers celui-ci. Les granulats sont sphériques également, et attaqués uniformément à leur surface. La vitesse d'attaque est imposée, et dépend de la température par une loi d'Arrhenius. La quantité de gel et la concentration en alcalins peuvent alors être calculées. Lorsque les alcalins sont en grande quantité aux abords du grain, en début de réaction, c'est la vitesse de la réaction chimique qui limite la production de gel, tandis qu'une fois que leur concentration a baissé, c'est leur diffusion depuis la pâte de ciment qui est l'étape limitante pour la création de gel.

Le modèle probabiliste est construit sur les hypothèses suivantes : les granulats sont distribués aléatoirement dans le béton, la réaction chimique est à l'origine de gradients d'alcalins dans le béton, le gel créé pénètre dans la porosité, monte en pression, et entraîne l'apparition de fissures, la migration du gel dans la porosité est pilotée par les tensions de surface. Les principales variables aléatoires sont la position des sites réactifs, leur taille, et la distribution de taille de pores dans la pâte de ciment. Du point de vue de la chimie et du transport, le modèle considère l'attaque des granulats par les ions alcalins (possible seulement si silice, alcalins et ions hydroxydes sont présents), prenant en compte la température par une loi d'Arrhenius, et la diffusion des ions selon une loi de Fick. Pour ce qui est de la mécanique, la loi de Laplace est utilisée pour le processus capillaire de migration du gel. La distribution de taille de pores est aléatoire mais calée sur des expériences de porosimétrie des bétons. La longueur de porosité connectée, accessible au gel autour de chaque granulat, définit la taille du vase d'expansion que constitue l'auréole de transition. La fissuration se fait en mode I, les fissures ne sont pas pleines à cause de phénomènes capillaires. Une distribution initiale de tailles de défauts (fissures) est choisie. Le volume de fissure étant calculé sous l'hypothèse que les fissures sont penny-shaped, que la pression est uniforme (sauf à la pointe de fissure où elle est nulle), et que le chargement extérieur est isotrope. Le gonflement macroscopique est enfin estimé à partir du volume de fissures.

Des simulations de Monte-Carlo sont enfin réalisées en variant la taille des sites réactifs. L'évolution de la pression dans le gel et des tailles de fissures est calculée, on arrive à une pression maximale de 70 GPa (Fig. 2.6). Les courbes de gonflement obtenues après identification de la longueur de porosité connectée sont réalistes pour diverses concentrations initiales en alcalins (Fig. 2.7). Le modèle donne une bonne estimation de la fraction volumique de granulats qui entraîne le gonflement maximal.



FIGURE 2.6 – Évolution de la pression et de la taille de fissure [75]

La partie macroscopique du modèle est assez proche du modèle de Capra [9]. Elle permet



FIGURE 2.7 – Gonflement en fonction de l'avancement de la réaction [75]

de reproduire l'anisotropie du gonflement sous chargement extérieur anisotrope, et l'effet de l'hétérogénéité du matériau initial sur l'anisotropie.

2.3.3.3 Modèle mécanique de Bažant

Ce modèle est strictement mécanique [3], et vise lui aussi à reproduire l'effet pessimum observé lorsqu'on utilise du verre broyé comme granulat dans du béton, afin de le recycler. Comme le modèle de Suwito [81], il se met dans le cadre du test standardisé (ASTM C-1260). Le volume de grain soumis à l'attaque dépend de la taille de granulat considéré et de la fraction volumique totale de grains. L'effet de la pression sur la cinétique de réaction est négligé. La profondeur d'attaque est identique pour toutes les tailles de grains. Au bout de 14 jours, certains granulats sont donc totalement attaqués. Lé béton est considéré comme constitué de cellules périodiques contenant chacune un grain de verre sphérique (Fig. 2.8). La particule est entourée d'une couche



FIGURE 2.8 – Cellules périodiques du modèle de Bažant [3]

de gel qui gonfle. Les fissures sont initiées dans la pâte de ciment à partir de défauts préexistants. Les lèvres des fissures sont soumises à la pression qui règne dans la cavité. La croissance des fissures est calculée avec un critère de Griffith, le facteur d'intensité de contrainte étant connu par interpolation entre deux solutions analytiques (Fig. 2.9). Au niveau macroscopique, la défor-



FIGURE 2.9 – Géométrie de la fissure considérée par Bažant [3]

mation est exprimée en fonction des efforts imposés et de la souplesse du matériau endommagé, elle-même calculée par intégration d'une expression faisant intervenir le facteur d'intensité de contrainte exprimé comme on l'a expliqué, par interpolation entre des solutions analytiques.

Le volume de gel dans les fissures est égal au volume total diminué du volume qui pénètre dans la porosité du béton sur une longueur de porosité connectée donnée. La taille des défauts initiaux est calculée en disant que ce sont ces défauts qui contrôlent la résistance en traction du béton non attaqué. Les défauts sont supposés penny-shaped. Le gel est supposé gonfler par absorption d'eau, sa compressibilité est choisie de l'ordre de celle de l'eau.

Ce modèle permet de reproduire l'effet de pessimum en taille de manière assez satisfaisante. Les résistances à la traction après alcali-réaction calculée présentent le même effet pessimum en taille que les mesures de résistance à la compression que les auteurs présentent, du moins qualitativement.

2.3.4 Conclusion sur les modèles mécaniques à l'échelle microscopique

Il y a une grande diversité dans ces modèles, puisqu'on trouve des modèles analytiques comme des modèles par éléments finis très évolués. Il nous semble que la lacune principale de ces tentatives de modélisation est l'absence d'un lien suffisamment clair entre le chargement extérieur et l'anisotropie de gonflement. Le modèle le plus évolué de ce point de vue là est celui de Dunant, mais il souffre de sa nature bidimensionnelle. Les approches numériques comme celle de Dunant [23] ou Comby-Peyrot [13] sont les seules capables de prendre d'une certaine façon en compte l'interaction entre les différents granulats et ses conséquences sur les schémas de fissuration. De même, les modèles numériques ont plus de chance, à terme, d'incorporer le fluage de manière satisfaisante que leurs concurrents analytiques. Nous pensons cependant que pour comprendre au maximum l'effet d'anisotrope de l'alcali-réaction, les modèles mécaniques analytiques à l'échelle microscopique ont encore beaucoup à apporter.

Pour terminer notre panorama des modèles d'alcali-réaction, citons quelques modèles à l'échelle de la structure.

2.4 Modélisation mécanique à l'échelle macroscopique

Les modèles à l'échelle macroscopique sont les plus proches des applications pratiques sur les structures. L'enjeu principal de ces modèles est l'évaluation de la durée de vie d'ouvrages dont on a constaté qu'ils étaient atteints de la réaction alcali-silice. Ces ouvrages peuvent la plupart du temps rester en service pendant des décennies, il est donc important de quantifier le temps pendant lequel l'ouvrage se comporte de façon satisfaisante et sûre, de façon à ne pas démolir inutilement des constructions coûteuses.

Ces modèles macroscopiques ne décrivent pas les mécanismes microscopiques, c'est-à-dire qu'ils ne représentent pas explicitement les granulats, et la nature topochimique de la réaction chimique, ni la fissuration qui se développe autour des sites de réaction. En revanche, ils décrivent des mécanismes à l'échelle de la structure et prennent en compte des phénomènes de plasticité et viscosité du béton à l'échelle macroscopique, de façon à synthétiser la complexité des mécanismes microscopiques.

Le modèle d'Ulm [84] propose une description de l'alcali-réaction faisant intervenir un couplage entre la diffusion de la chaleur et la cinétique de la réaction. Les gonflements sont obtenus à partir de l'avancement de la réaction par une loi empirique inspirée de celle de Larive [48] à trois paramètres : un gonflement asymptotique, un temps de latence lié à la dissolution de la silice, et un temps caractéristique de gonflement lié à la formation des gels. La diffusion de la chaleur suit une loi de Fourier. Les auteurs considèrent ce phénomène de couplage entre la température et la réaction alcali-silice important pour les structures épaisses mais soulignent que l'influence de l'eau doit également être prise en compte, surtout pour des structures moins massives. Ils suggèrent également de prendre en compte l'anisotropie des gonflements générés par l'alcali-réaction.

Steffens [79] a pour objectif de prendre en compte l'influence de l'eau sur la réaction dans un modèle mécanique à l'échelle de la structure. Les auteurs s'intéressent aussi au phénomène de vieillissement des gels, partant de l'observation que les gels ne réagissent pas de la même façon aux augmentations d'humidité selon leur âge, les gels jeunes semblant avoir des capacités importantes d'absorption d'eau qui diminuent progressivement. Le mécanisme réactionnel est constitué de deux étapes : tout d'abord la formation d'un gel amorphe selon une cinétique dépendant de l'humidité, puis gonflement de ce gel par absorption d'eau sont du premier ordre (leur vitesse décroît linéairement avec leur avancement). Un temps de latence provient du temps qu'il faut pour remplir la porosité. Les propriétés poromécaniques liant la variation de volume poreux aux contraintes macroscopiques n'évoluent pas, mais le comportement macroscopique est plastique. Le modèle permet sur un calcul de structure de mettre en évidence l'apparition d'une zone de délamination à cause des différences de gonflement entre zones plus ou moins exposées à l'humidité.

Le modèle de Li [53] est un modèle de structure pour l'alcali réaction. Le gel, supposé sec à sa création, a la propriété de s'imbiber d'eau si suffisamment d'eau est disponible. Les cinétiques de création du gel et d'absorption d'eau sont imposées, ce sont des cinétiques du premier ordre. Ce modèle thermo-chemo-élastoplastique a été implémenté dans CESAR-LCPC. Ce modèle peut reproduire des gonflements assez complexes, y compris des reprises de gonflement dues à la variation d'humidité ambiante, mais le nombre de paramètres le rend difficile à utiliser en pratique.

Bangert [1] propose un modèle poromécanique prenant en compte un squelette, une phase liquide, une phase gazeuse. La cinétique de dissolution de la silice est du premier ordre. La diffusion des phases liquides et gazeuses suit une loi de Darcy à perméabilité modifiée par l'équation de Van Genuchten [85]. Le matériau est endommageable. Les auteurs montrent que l'hétérogénéité de l'humidité est responsable d'une augmentation de l'endommagement des structures attaquées, en raison du gradient de gonflement qui apparaît.

Le modèle macroscopique de Grimal [36, 37, 38], sur lequel s'appuie la loi de comportement pour bétons attaqués par la RAG dans le code ASTER, a pour objectif principal de coupler, à l'échelle macroscopique, divers mécanismes dont les interactions sont habituellement négligées : fluage, retrait, endommagement et RAG. La pression de gel est calculée à partir du volume de gel grâce à une loi linéaire élastique, considérant qu'une partie du gel envahit la porosité entourant les sites réactifs, et une partie envahit les fissures nouvellement créées. La vitesse de création du gel, du premier ordre, dépend du degré de saturation en eau, et de la température. Les auteurs soulignent que les déformations atteintes à cause de la RAG devraient entraîner la ruine des éléments en béton attaqués si elles étaient obtenues par traction. Ils supposent donc que des mécanismes de viscosité limitent les concentrations de contraintes à l'échelle microscopique. Un module viscoplastique prend en compte la dépendance empirique entre l'endommagement et le gonflement. Un module visco-élasto-plastique rend compte de l'élasticité, du retrait et du fluage. L'endommagement est anisotrope, et deux critères, l'un en traction (Rankine), l'autre pour la compression (Drücker-Prager), sont utilisés, ce qui permet le report de gonflement depuis les directions les plus compressées vers les autres. Le transport de l'eau est modélisé. Le modèle permet de reproduire de manière satisfaisante les essais triaxiaux de Multon [60] et a été utilisé pour l'évaluation de la durée de vie d'un barrage.

Le modèle de Comi [14] est un modèle d'endommagement des bétons à l'échelle de la structure. Deux phases sont considérées : squelette et gel. La formation et le gonflement du gel sont décrits par une unique variable d'avancement, proportionnelle au volume de gel, par une cinétique du premier ordre. L'avancement de la réaction est indépendant de l'état de contraintes. La température est prise en compte par une loi d'Arrhenius. La température est découplée de la mécanique. L'humidité n'est pas prise en compte car le modèle est construit pour des structures massives dans lesquelles les gradients d'humidité sont plus limités. La microfissuration est traduite par un endommagement isotrope, décrit par deux variables pour rendre compte de l'endommagement en traction et l'endommagement en compression. Les paramètres du modèle sont calibrés sur les essais triaxiaux de Multon [60] (les gonflements asymptotiques sont différents dans les différentes directions pour rendre compte de l'anisotropie des échantillons due à la direction de coulage), puis le modèle est utilisé pour estimer la durée de vie de deux barrages attaqués.

Le modèle de Schrefler [74] est un modèle de transport en milieu poreux partiellement saturé. Le transport de chaleur est également considéré. La cinétique de la RAG est du premier ordre. Les déformations libres dues à l'alcali-réaction sont données en fonction de l'avancement de la réaction par une loi empirique. Le modèle reproduit des essais de Larive et Poyet en gonflement libre, sous différentes conditions d'humidité [48, 70].

L'ensemble de ces modèles est très complet en ce qui concerne le transport de l'eau, parfois la chaleur, prennent en compte un certain nombre de phénomènes de long terme comme le fluage ou le retrait du béton. Ils ont néanmoins besoin d'informations provenant des modèles microscopiques, à la fois du côté de la chimie et du côté de la mécanique, pour combler plusieurs lacunes. Par exemple, dans ces modèles, s'ils sont basés sur une description poromécanique, l'évolution du coefficient de Biot, qui permet de calculer la contrainte, à déformation nulle, en fonction de la pression dans les pores, devrait idéalement être ajusté au fur et à mesure que le matériau subit une microfissuration, mais aucun modèle ne fait cela grâce à l'utilisation d'information extraite d'une modélisation précise des phénomènes à l'échelle microscopique.

2.5 Conclusion

Nous avons, dans cette partie, présenté une bibliographie sur les modèles pour la réaction alcali-silice. Ce travail préparatoire à notre propre travail de modélisation nous a permis de tirer plusieurs conclusions. Il nous a tout d'abord semblé que la modélisation des mécanismes réactionnels et du transport à l'échelle microscopique est aussi développée que possible, notamment grâce au travail de Poyet [70]. Il est bien sûr possible de complexifier de tels modèles à l'infini, par exemple en considérant le transport d'un plus grand nombre d'espèces chimiques (ce qui nécessite d'ailleurs de prendre en compte l'effet du déséquilibre des charges sur la diffusion), ou en diversifiant les produits de réaction en fonction de l'environnement chimique de leur création. Il nous semble cependant que l'ensemble des connaissances sur la chimie et le transport dans l'alcali-réaction qui font consensus est présent chez Poyet. Pour ce qui est de la modélisation à l'échelle de la structure, nous avons de même considéré qu'elle a atteint un bon niveau de représentation des mécanismes en jeu. Elle s'appuie d'ailleurs sur les outils habituels pour décrire la durabilité des bétons. Cependant, l'incorporation d'informations spécifiques à l'alcaliréaction, comme l'anisotropie du gonflement d'un élément chargé, nous semble insuffisante. Ces informations doivent être extraites de modèles microscopiques, qui semblent demander encore un peu d'effort de modélisation pour expliquer ces mécanismes d'anisotropie et être suffisamment simples pour qu'on puisse identifier leurs paramètres sur des essais de laboratoire, et extraire les informations nécessaires pour les modèles à l'échelle de la structure.

La suite de ce mémoire sera donc consacrée à l'établissement d'un modèle mécanique à l'échelle microscopique pour l'alcali-réaction, avec pour objectif de combler certaines des lacunes que nous avons mentionnées.