



HAL
open science

Modélisation multi-échelle et simulation du comportement thermo-hydro-mécanique du béton avec représentation explicite de la fissuration

Amen Tognevi

► **To cite this version:**

Amen Tognevi. Modélisation multi-échelle et simulation du comportement thermo-hydro-mécanique du béton avec représentation explicite de la fissuration. Autre. École normale supérieure de Cachan - ENS Cachan, 2012. Français. NNT : 2012DENS0066 . tel-00861173

HAL Id: tel-00861173

<https://theses.hal.science/tel-00861173>

Submitted on 12 Sep 2013

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.

THÈSE DE DOCTORAT
DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE CACHAN
Présentée par
Amen TOGNEVI
pour obtenir le grade de
DOCTEUR DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE CACHAN
Domaine :
MECANIQUE- GENIE MECANIQUE – GENIE CIVIL

Modélisation multi-échelle et simulation du comportement thermo-hydro- mécanique du béton avec représentation explicite de la fissuration

Thèse présentée et soutenue à Cachan le 23/11/2012 devant le jury composé de :

- M. DUFOUR Frédéric (rapporteur)
- M. BURLION Nicolas (rapporteur)
- M. DELAPLACE Arnaud (directeur de thèse)
- M. BARY Benoit (co-encadrant)
- M. STORA Eric
- LABORDERIE Christian

LMT Cachan - ENS CACHAN/CNRS/UMR 8535/UPMC/PRES UniverSud Paris
61, avenue du Président Wilson, 94235 CACHAN CEDEX (France)

LECBA - CEA Saclay/DEN/DANS/DPC/SCCME
91191 GIF SUR YVETTE

Résumé

Les structures en béton des centrales nucléaires peuvent être soumises à des contraintes thermo-hydrauliques modérées, caractérisées par des températures de l'ordre de la centaine de degrés aussi bien en conditions de service qu'accidentelles. Ces contraintes peuvent être à l'origine de désordres importants notamment la fissuration qui a pour effet d'accélérer les transferts hydrauliques dans la structure. Dans le cadre de l'étude de la durabilité de ces structures, le modèle THMs a été développé au Laboratoire d'Etude du Comportement des Bétons et des Argiles (LECBA) du CEA Saclay pour simuler le comportement du béton face à des sollicitations couplées thermo-hydro-mécaniques. Dans cette thèse on s'est intéressé à l'amélioration dans le modèle THMs d'une part de l'estimation des paramètres mécaniques et hydromécaniques du matériau en conditions partiellement saturées et en présence de fissuration et d'autre part de la description de la fissuration. La première partie a été consacrée à la mise au point d'un modèle basé sur une description multi-échelle de la microstructure des matériaux cimentaires, en partant de l'échelle des principaux hydrates (portlandite, ettringite, C-S-H, etc.) jusqu'à l'échelle macroscopique du matériau fissuré. Les paramètres investigués sont obtenus à chaque échelle de la description par des techniques d'homogénéisation analytiques. Dans la seconde partie on s'est attaché à décrire numériquement de façon précise la fissuration notamment en termes d'ouverture, de localisation et de propagation. Pour cela une méthode de réanalyse éléments finis/éléments discrets a été proposée et validée sur différents cas-test de chargement mécanique. Enfin la procédure a été mise en œuvre dans le cas d'un mur chauffé et une méthode de recalcul de la perméabilité a été proposée permettant de montrer l'intérêt de la prise en compte de l'anisotropie du tenseur de perméabilité lorsqu'on s'intéresse à l'étude des transferts de masse dans une structure en béton fissurée.

Mots clés : matériaux cimentaires, homogénéisation, modélisation multi-échelle, microfissures, éléments discrets, éléments finis, chargements thermo-hydro-mécaniques.

Abstract

The concrete structures of nuclear power plants can be subjected to moderate thermo-hydric loadings characterized by temperatures of the order of hundred of degrees in service conditions as well as in accidental ones. These loadings can be at the origin of important disorders, in particular cracking which accelerate hydric transfers in the structure. In the framework of the study of durability of these structures, a coupled thermo-hydro-mechanical model denoted THMs has been developed at Laboratoire d'Etude du Comportement des Bétons et des Argiles (LECBA) of CEA Saclay in order to perform simulations of the concrete behavior submitted to such loadings. In this work, we focus on the improvement in the model THMs in one hand of the assessment of the mechanical and hydromechanical parameters of the unsaturated microcracked material and in the other hand of the description of cracking in terms of opening and propagation. The first part is devoted to the development of a model based on a multi-scale description of cement-based materials starting from the scale of the main hydrated products (portlandite, ettringite, C-S-H etc.) to the macroscopic scale of the cracked material. The investigated parameters are obtained at each scale of the description by applying analytical homogenization techniques. The second part concerns a fine numerical description of cracking. To this end, we choose to use combined finite element and discrete element methods. This procedure is presented and illustrated through a series of mechanical tests in order to show the feasibility of the method and to proceed to its validation. Finally, we apply the procedure to a heated wall and the proposed method for estimating the permeability shows the interest to take into account an anisotropic permeability tensor when dealing with mass transfers in cracked concrete structures.

Keywords : cement-based materials, homogenization, multi-scale modelling, microcracks, discrete element, finite elements, thermo-hydro-mechanical loadings.

Remerciements

Table des matières

Résumé	I
Abstract	II
Remerciements	III
Table des matières	IV
Liste des figures	IX
Liste des tableaux	XVI
Notations	XVII
INTRODUCTION GENERALE	1
CHAPITRE I : Généralités sur la microstructure des matériaux cimentaires	
I.1 Introduction	7
I.2 Microstructure des matériaux cimentaires	7
I.2.1- Le ciment Portland et son hydratation	7
I.2.2- Nature et structure des hydrates formés	9
I.2.2.1 - <i>Le silicate de calcium hydraté (C-S-H)</i>	9
I.2.2.2 - <i>La portlandite</i>	12
I.2.2.3 - <i>L'ettringite, les monosulfoaluminates</i>	13
I.2.2.4- <i>Le résidu de ciment anhydre</i>	14
I.2.2.5- <i>Fraction volumique des hydrates formés</i>	14
I.2.2.6- <i>Paramètres mécaniques des hydrates</i>	19
I.2.3- La porosité et la structure poreuse	21
I.2.3.1 <i>La porosité du gel de C-S-H</i>	22
I.2.3.2 <i>La porosité capillaire</i>	22
I.2.3.3 <i>La distribution de taille de pores</i>	23
I.2.4- L'état de l'eau dans la pâte de ciment	24
I.2.5-Modèles de microstructure de la pâte de ciment	27
I.2.5.1 <i>Le modèle CEMHYD3D</i>	27
I.2.5.2 <i>Le modèle HYMOSTRUC</i>	28
I.2.5.3 <i>Le modèle Integrated Particles Kinetic Model (IPKM)</i>	29
I.2.6- Microstructure du mortier/béton	30
I.2.6.1 <i>Les granulats</i>	30
I.2.6.2 <i>L'auréole de transition</i>	31
I.2.7- Influence de la microstructure sur le retrait des matériaux durcis	32

I.3 Impact de la température sur la microstructure	34
I.3.1 Evolution des différentes phases	34
I.3.2 Fissuration thermique	35
I.3.3 Evolution de la porosité	36
I.4 Conclusion	38

CHAPITRE II : Comportement thermo-hydro-mécanique des matériaux cimentaires

II.1 Introduction	40
II.2 Equations générales du système	40
II.2.1 Conservation de la masse	41
II.2.2 Conservation de l'énergie	44
II.2.3 Conservation de la quantité de mouvement	45
II.3 Equations constitutives du système	46
II.3.1 Loi de Fourier	48
II.3.2 Loi de changement de phase	49
II.3.3 Loi de description de l'écoulement	54
II.4 Le modèle THMs	59
II.5 Loi de comportement thermo-poro-élastique (approche <i>macro</i>)	61
II.5.1 Conditions saturées	61
II.5.2 Conditions partiellement saturées	66
II.6 Loi de comportement thermo-poro-élastique (approche <i>micro</i>)	68
II.6.1. Représentation : notion de VER	69
II.6.2. Localisation	69
II.6.2.1 Conditions aux limites en déformation	70
II.6.2.2 Conditions aux limites homogènes en contrainte	71
II.6.3. Homogénéisation	71
II.6.3.1 Lemme de Hill-Mandel	71
II.6.3.2 Approche directe	72
II.6.3.3 Approche énergétique	73
II.6.4. Schémas d'homogénéisation	74
II.6.4.1 Le problème de l'inclusion d'Esbelby	74
II.6.4.2 Tenseur de polarisation	77
II.6.4.3 Le problème de l'inhomogénéité d'Esbelby	78
II.6.4.4 Le schéma dilué d'Esbelby	79
II.6.4.5 Le schéma de Mori-Tanaka	81

II.6.4.6 Le schéma auto-cobérent classique	82
II.6.4.7 Assemblage des sphères de Hashin	82
II.6.4.8 Schéma à trois phases (schéma auto-cobérent généralisé)	83
II.6.4.9 Schéma « Effective Self-Consistent Scheme » (ESCS)	84
II.6.4.10 Comparaison des schémas d'homogénéisation	88
II.7 Application de la méthode d'homogénéisation aux milieux poreux	90
II.7.1 Conditions saturées	90
II.7.2 Conditions partiellement saturées	94
II.8 Conclusion	95
CHAPITRE III : Modélisation proposée	
III.1 Introduction	98
III.2 Représentation de la microstructure	98
III.2.1 Microstructure de la pâte de ciment	98
III.2.2 Microstructure du mortier /béton	100
III.3– Paramètres d'entrée du modèle	103
III.3.1 Les fractions volumiques des hydrates	103
III.3.1.1 fractions volumiques dans la pâte de ciment	104
III.3.1.2 Fractions volumiques dans le mortier/ béton	107
III 3.2 Paramètres mécaniques de la matrice de C-S-H	112
III.4– Aspects hydriques du modèle	113
III.4.1 Etat de l'eau dans la porosité	113
III.4.2 Isothermes de sorption-Distribution de tailles de pores	116
III.4.2.1 Loi de distribution de Schulz	117
III.4.2.2 Application : pâte de ciment CEM I $e/c = 0.3$	119
III.5 Estimation des paramètres mécaniques et hydromécaniques du matériau sain	124
III.5.1 Formulation générale du problème (Niveau I) : couches interne et externe	124
III.5.1.1 Modules d'élasticité drainés (k_{bom}^I, μ_{bom}^I)	126
III.5.1.2 Contrainte Σ^p	127
III.5.1.3 Les expressions de b_{bom}^I, N_{bom}^I et M_{bom}^I	129
III.5.2 Formulation générale du problème (Niveau II) : pâte de ciment	132
III.5.2.1 Modules d'élasticité drainés ($k_{bom}^{II}, \mu_{bom}^{II}$)	133
III.5.2.2 Expressions de $b_{bom}^{II}, N_{bom}^{II}$ et M_{bom}^{II}	133
III.5.3 Formulation générale du problème (Niveau III) : mortier, béton	136

III.5.3.1 Modules d'élasticité drainés (κ_{bom}^{III} , μ_{bom}^{III})	136
III.5.3.2 Expressions de b_{bom}^{III} , N_{bom}^{III} et M_{bom}^{III}	137
III.6 Applications et validations du modèle : conditions saturées	137
III.6.1 Matériaux étudiés	137
III.6.2 Résultats relatifs à la pâte de ciment CO	138
III.6.3. Influence de la forme des inclusions sur la pâte CO	141
III.6.3.1 Paramètre morphologique	141
III.6.3.2 Calibration de la forme des hydrates	143
III.6.3.3 Forme des pores	144
III.6.3.4 Conclusion sur la forme des inclusions	147
III.6.4 Résultats relatifs au Mortier MO et au Béton BO	147
III.6.4.1 Influence de l'épaisseur de l'ITZ	148
III.6.5 Influence du rapport e/c	151
III.7 Applications et validations du modèle en conditions insaturées	153
III.7.1 Isothermes de sorption	153
III.7.2 Contribution de la couche d'eau adsorbée	155
III.7.3 Application au séchage : comparaison avec des résultats expérimentaux	156
III.8 Couplage fissuration / paramètres hydromécaniques en conditions saturées	159
III.8.1 Géométrie des fissures	159
III.8.2 Comparaisons entre divers schémas d'homogénéisation	160
III.8.2.1 Microfissures orientées aléatoirement	160
III.8.2.2 Une famille de microfissures alignées	165
III.8.2.3 Deux familles de fissures perpendiculaires	171
III.9 Couplage fissuration / paramètres hydromécaniques en conditions partiellement saturées : application au béton BO	175
III.10 Conclusion	182
CHAPITRE VI : Couplage éléments finis / éléments discrets	
IV.1 Introduction	184
IV.2 Retour sur le comportement mécanique du béton	185
IV.2.1 Comportement en traction uniaxiale	185
IV.2.2 Comportement en compression uniaxiale	186
IV.2.3 Le caractère unilatéral du béton	187
IV.3 La théorie de l'endommagement	187
IV.3.1 Variable d'endommagement	187
IV.3.2 Endommagement isotrope	188

IV.3.3 Notion de contrainte effective	188
IV.4 Modèle d'endommagement du béton: le modèle de Mazars (Mazars 1984)	189
IV.4.1 Formulation locale	189
IV.4.2 Formulation non locale	191
IV.5 Couplage endommagement/perméabilité	193
IV.5.1 Les modèles continus du couplage endommagement/perméabilité	193
IV.5.2 Les modèles discrets du couplage endommagement/perméabilité	194
IV.5.3 Conclusion sur les modèles endommagement/perméabilité	198
IV.6 Modélisation discrète	199
IV.6.1 La méthode des éléments discrets	199
IV.6.2 Le modèle DEAP	200
IV.7 Couplage ED/EF	211
IV.7.1 Les différentes stratégies de couplage	211
IV.8 La méthode de réanalyse proposée	213
IV.8.1 Etude raffinée de la fissuration	213
IV.8.2 La procédure de réanalyse appliquée au cas THM	213
IV.9 Illustration de la méthode de réanalyse	214
IV.9.1 La poutre entaillée	214
IV.9.2 La poutre bi-entaillée	223
IV.9.3 L'essai brésilien	226
IV.10 Couplage EF-ED en THM avec recalcul de la perméabilité	233
IV.10.1 Cas de calcul envisagé	234
IV.10.2 Recalcul des tenseurs de perméabilité	237
IV.10.3 Simulations numériques	239
IV.11 Conclusion	246
 CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES	 248

Liste des figures

Figure 0.1 : Aéroréfrigérant de la centrale nucléaire de Civaux (www.edf.com).....	2
Figure 0.2 : Représentation d'un colis de déchets MAVL (Tiré de (Drouet 2010)).	2
Figure 1.1 : Image MEB d'une particule de clinker (Stutzman 2004).....	7
Figure 1.2 : Formation et croissance des hydrates au cours de l'hydratation d'une pâte de ciment (Locher 1976).....	9
Figure 1.3 : Image MEB d'une pâte de ciment CEM I 52.5, e/c=0.43 (Béjaoui et al. 2006).....	9
Figure 1.4 : Représentation schématique de la microstructure du gel de C-S-H (Feldman et Sereda 1968).....	10
Figure 1.5 : Répartition globulaire des amas de C-S-H (Jennings 2000).	11
Figure 1.6 : Images MET des deux types de C-S-H dans des pâtes de ciment CEM I à différents rapports e/c (Béjaoui et al. 2006).....	12
Figure 1.7 Observation MEB de cristaux de portlandite et d'aiguilles d'ettringite (Taylor 1997)..	13
Figure 1.8 : Particules de grains de ciment anhydre (Garboczi et Bullard 2004).....	14
Figure 1.9 : Evolution des fractions volumiques des différents constituants de la pâte de ciment selon le modèle de Powers (Jensen et Hansen 2001).....	16
Figure 1.10 : Evolution des fractions volumiques selon le modèle de (Tennis et Jennings 2000) des différentes phases dans une pâte de ciment CEM I e/c=0.5 (Composition du ciment : C ₃ S (55%), C ₂ S (18%), C ₃ A (10%), C ₄ AF(8%)) en fonction du degré d'hydratation.....	18
Figure 1.11 Essai d'indentation : P est la force appliquée, h la profondeur d'indentation, h _c est la profondeur de contact, A _c l'aire de contact entre le matériau et l'indenteur (Vandamme 2008). ..	19
Figure 1.12 : Courbe effort/déplacement (P-h) obtenu par nanoindentation du C ₃ S (Velez et al. 2001).....	20
Figure 1.13 : Relations entre les porosités d'une pâte de ciment durcie et le rapport e/c. Les courbes sont issues du modèle de (Powers et Brownyard 1947) ; A : porosité totale à l'eau, B : porosité de l'eau libre, C :porosité capillaire. Les données expérimentales correspondent à la porosité totale (symboles non remplis) et la porosité au mercure (symboles remplis) (Taylor 1997).....	23
Figure 1.14 : Résultats de porosimétrie par intrusion de mercure sur pâtes de ciment CEM I et CEM V à e/c = 0.4 (Gallé 2001).	24
Figure 1.15 : Etat de l'eau dans les matériaux cimentaires : eau évaporable et non évaporable (Delmi 2004).	25
Figure 1.16 : Etat de l'eau dans le gel de C-S-H (Sierra, 1974).	26
Figure 1.17 : Phénomène d'adsorption empêchée à l'origine de la pression de disjonction (Bazant 1972) tirée de (Benboudjema 2002).....	27
Figure 1.18 : Microstructure 3D 50 x 50 x 50 μm initiale (gauche) d'une pâte de ciment e/c = 0.25 et à un degré d'hydratation (droite) α = 0.63. (Rouge = C ₃ S, Vert = C ₃ A, Jaune = C ₄ AF, Noir = porosité, violet = C-S-H, Bleu = CH).....	28
Figure 1.19 : Représentation de la microstructure et des couches d'hydrates (Van Breugel 1995).	29
Figure 1.21 :Image MEB de l'interface de transition ITZ dans un béton (CEM I 52.5, e/c=0.44) (Ke et al. 2010).....	31

Figure 1.22 : Faciès de fissuration (indiqués par les flèches) observés au MEB dans un mortier traité à 300°C (Fu et al. 2004).....	36
Figure 1.23 : Volume poreux de pâtes de ciment exposées à des températures de 300, 600 et 900°C (Rostasy et al. 1980), tiré de (Cheng 2009).....	37
Figure 2.1 : Volume élémentaire représentatif Ω du milieu poreux partiellement saturé.	41
Figure 2.2 : Pression capillaire en fonction du degré de saturation obtenue pour une pâte de ciment ordinaire (CO) et une pâte de ciment contenant de la fumée de silice (CH) (Baroghel-Bouny et al. 1999).....	51
Figure 2.3 : Les différents types d’hystérésis d’après la classification de l’IUPAC.....	53
Figure 2.4 : Situations d’imbibition et de drainage de pores de tailles différentes reliés par des fins capillaires d’accès (Dangla 2000).....	54
Figure 2.5 : Restitution de la cinétique des pertes de masse obtenue pour un béton ordinaire (Coussy et al. 2001).	58
Figure 2.6 :Evolutions des perméabilités relatives au gaz noté kr,gz et au liquide kr, lq (tirée de (Briffaut 2010)).	59
Figure 2.7 : Représentation schématique d’un milieu poreux constituée d’une matrice homogène dans laquelle sont distribuées des pores et des fissures ellipsoïdales aplaties (Bary et al 2008).....	61
Figure 2.8 : Différentes échelles caractérisant la structure et son matériau constitutif.....	69
Figure 2.9 : Le problème de l’inclusion d’Eshelby ; a) : état initial – b) : incompatibilité de déformation – c) : équilibre final (Bornert 2001).....	75
Figure 2.10 : Principe du schéma dilué	80
Figure 2.11 : a) Sphère composite b) Assemblage des sphères de Hashin (Bornert 1996).	83
Figure 2.12 : principe du schéma ESCS (Zheng et Du 2001).....	85
Figure 2.13 : Cellule de distribution d’une famille d’inclusion.....	85
Figure 2.14 : Schématisation 2D de la configuration inclusion-cellule de distribution dans le schéma Full Range dans le cas $\phi > \phi_{max}$	88
Figure 3.1 : Représentation schématique de la pâte de ciment (assemblage de sphères concentriques).....	100
Figure 3.2 : Représentation schématique du caractère multi-échelle de la microstructure de la pâte de ciment, du mortier et du béton (Tognevi et al. 2010).....	102
Figure 3.3 : Fractions volumiques des phases dans la couche interne d’hydrates (Niveau I) en fonction du rapport e/c	106
Figure 3.4 : Fractions volumiques des hydrates dans la couche externe d’hydrates (Niveau I) en fonction du rapport e/c	107
Figure 3.5 : Fractions volumiques des phases du ciment anhydre, de la couche interne et de la couche externe du schéma à trois phases en fonction du rapport e/c	107
Figure 3.7 : Courbes granulométriques du sable 0/5, des granulats 5/12.5 et 12.5/25 des bétons de référence EDF (Granger 1996; Reviron 2009).....	111
Figure 3.8 : Evolution des fractions volumiques de l’ITZ et de la pâte de ciment saine dans le mortier et dans le béton.....	111
Figure 3.9: Etat de l’eau dans le matériau partiellement saturé : pores saturés et pores partiellement saturés.	113
Figure 3.10 : Comparaisons des expressions analytiques et des valeurs expérimentales de l’épaisseur de la couche d’eau adsorbée	116

Figure 3.11 : Evolution du rayon capillaire en fonction de l'humidité relative pour différentes températures $T=20^{\circ}\text{C}$, $T=80^{\circ}\text{C}$ et $T=200^{\circ}\text{C}$	116
Figure 3.12 : Fonctions de distributions pour différentes valeurs de m lorsque $\bar{R} = 20 \text{ nm}$	119
Figure 3.13 : Comparaison de l'isotherme d'adsorption du modèle avec des valeurs expérimentales sur pâte de ciment CEM I $e/c = 0.3$	121
Figure 3.14 : Isothermes d'adsorption dans les couches interne et externe (Niveau I) et dans la pâte de ciment CEM I $e/c = 0.3$ (Niveau II).....	121
Figure 3.15 : Isothermes d'adsorption de la pate CEM I=0.3 pour différentes valeurs de m et de R dans les couches interne et externe ($T=20^{\circ}\text{C}$).....	122
Figure 3.16 : Courbe capillaire dans les couches interne et externe (Niveau I), dans la pâte de ciment (Niveau II).....	123
Figure 3.17 : VER. à l'échelle I.....	124
Figure 3.18 : Un volume élémentaire à l'interface liquide-gaz d'après (Rusanov 2005).	128
Figure 3.19 : Pression exercée sur l'interface solide dans un pore sphérique.....	129
Figure 3.20 : Schéma auto-cohérent généralisé à n phases (Herve et Zaoui 1993).	132
Figure 3.21 : Evolution du paramètre morphologique ζ en fonction du rapport d'aspect α dans le cas d'une forme oblate.....	142
Figure 3.22 : Evolution du paramètre morphologique ζ en fonction du rapport d'aspect α dans le cas d'une forme prolata.	143
Figure 3.23 : Evolution du rapport E/E_{spb} en fonction du paramètre morphologique des hydrates pris séparément.	144
Figure 3.24 : Evolution des modules d'Young de la couche interne, de la couche externe et de la pâte de ciment en fonction du paramètre morphologique des pores.	145
Figure 3.25 : Evolution du coefficient de Biot normalisé des couches interne, externe et de la pâte de ciment en fonction du paramètre morphologique ζ pour les valeurs de porosité suivantes : 0.148 pour la couche interne, 0.56 pour la couche externe et 0.30 pour la pâte de ciment CO...146	146
Figure 3.26 : Evolution du module de Biot normalisé des couches interne, externe et de la pâte de ciment en fonction du paramètre morphologique ζ pour les valeurs de porosité suivantes : 0.148 pour la couche interne, 0.56 pour la couche externe et 0.30 pour la pâte de ciment.	146
Figure 3.27 : Evolution du rapport $a = E_{ITZ} / E_{bp}$ en fonction de l'épaisseur de l'ITZ.....	148
Figure 3.28 : Evolution du coefficient de Biot de l'ITZ, de la pâte de ciment saine et du mortier.	149
Figure 3.29 : Evolution du module de Biot de l'ITZ, de la pâte de ciment saine et du mortier...150	150
Figure 3.30 : Identification de l'épaisseur de l'ITZ pour le mortier MO.	151
Figure 3.31 : Evolution du module d'Young et du module de cisaillement des pâtes de ciment CEM I en fonction du rapport e/c	152
Figure 3.32 : Evolution du coefficient de Biot de la pâte de ciment en fonction du rapport e/c : comparaison avec les modèles de (Ulm et al. 2004) et (Ghabezloo 2010).....	152
Figure 3.33 : Evolution du Module de Biot de la pâte de ciment en fonction du rapport e/c : comparaison avec les résultats de (Ulm et al. 2004). ; $\epsilon_f = 2.2\text{GPa}$	153
Figure 3.34 : Isothermes d'adsorption du matériau CO : comparaison entre le modèle et les valeurs expérimentales extraites de (Baroghel-Bouny et al. 1999).	154

Figure 3.35 : Isothermes d'adsorption du matériau BO : comparaison entre le modèle et les valeurs expérimentales extraites de (Baroghel-Bouny et al. 1999).	154
Figure 3.36 : Evolution des coefficients de Biot des couches interne, externe et de la pâte de ciment en fonction du degré de saturation.....	155
Figure 3.37 : Comparaison entre les valeurs du modèle et les valeurs expérimentales (Baroghel-Bouny et al. 1999) du coefficient de Biot en fonction du degré de saturation (CO).....	157
Figure 3.38 : Comparaison entre les valeurs du modèle et les valeurs expérimentales (Baroghel-Bouny et al. 1999) du coefficient de Biot en fonction du degré de saturation (BO).....	157
Figure 3.39 : Comparaison entre les valeurs du modèle et les valeurs expérimentales (Baroghel-Bouny et al. 1999) du module de Biot en fonction du degré de saturation (CO).....	158
Figure 3.40 : Comparaison entre les valeurs du modèle et les valeurs expérimentales (Baroghel-Bouny et al. 1999) du module de Biot en fonction du degré de saturation (BO).....	158
Figure 3.41 : Configuration isotrope d'un matériau microfissuré : microfissures orientées aléatoirement.....	160
Figure 3.42 : Evolution du module de compressibilité a), du coefficient de cisaillement b), du module d'Young c) et du coefficient de Poisson d'un matériau avec des microfissures aléatoirement orientées. Comparaison des schémas dilué, MT, IDD et FIDD.....	163
Figure 3.43 : Evolution du coefficient de Biot a), du Module de Biot b) d'un matériau avec des microfissures aléatoirement orientées. Comparaison des schéma dilué, MT, IDD et FIDD.....	164
Figure 3.44 : Configuration isotrope transverse d'un matériau microfissuré (microfissures alignées).....	165
Figure 3.45 : Evolution du module d'Young normalisé E_3 / E_0 a) et du coefficient de Poisson normalisé ν_{13} / ν_0 b) : comparaison des schémas dilué, MT, IDD et FIDD.....	166
Figure 3.46 : Evolution du coefficient de Biot longitudinal b_1^{hom} en fonction de la densité de fissuration : comparaison des schémas dilué, MT, IDD et FIDD (Tognevi et al 2010).	167
Figure 3.47 : Evolution du coefficient de Biot transversal b_3^{hom} en fonction de la densité de fissuration : comparaison des schémas Dilué, MT, IDD et FIDD (Tognevi et al 2010).....	167
Figure 3.48 : Evolution de l'inverse du module de Biot solide en fonction de la densité de fissuration : comparaison des schémas dilué, MT, IDD et FIDD.....	168
Figure 3.50 : Evolution du module de Biot solide pour deux valeurs du rapport d'aspect (Schéma FIDD).	170
Figure 3.51 : Evolution du module de Biot poreux pour deux valeurs du rapport d'aspect (Schéma FIDD).....	170
Figure 3.52 : Configuration orthotrope d'un matériau fissuré : deux familles de microfissures à normales perpendiculaires.....	171
Figure 3.53 : Evolution des modules d'Young a), des coefficients de Poisson b) en fonction de la densité de microfissuration : cas du matériau orthotrope ($\rho_3 = 2\rho_1$)	172
Figure 3.54 : Evolution des coefficients de Biot dans les directions 1, 2 et 3 dans la configuration orthotrope ($\rho_1 = \rho_3$).....	173
Figure 3.55 : Evolution des coefficients de Biot dans les directions 1, 2 et 3 dans la configuration orthotrope ($\rho_3 = 2\rho_1$).....	174

Figure 3.56 : Evolution des inverses du module de Biot solide et du module de Biot poreux en fonction de la densité de microfissuration (deux familles de microfissures perpendiculaires).	174
Figure 3.57 : Représentation schématique du béton microfissuré (Niveaux III et IV).....	175
Figure 3.58 : Evolution du coefficient de Biot en fonction du degré de saturation pour différentes valeurs de densité de microfissuration (cas de microfissures orientées aléatoirement).	179
Figure 3.59 : Evolution du module de Biot en fonction du degré de saturation pour différentes valeurs de densité de microfissuration (cas de microfissures orientées aléatoirement).	180
Figure 3.60 : Evolution du coefficient de Biot en fonction du degré de saturation pour différentes valeurs de densité de microfissuration (cas de microfissures parallèles).	181
Figure 4.1 : Réponse en traction d'un béton ordinaire (Terrien 1980).....	186
Figure 4.2 : Réponse en compression d'un béton ordinaire (Torrenti et Boulay 1993) tirée de (Chambart 2009).....	186
Figure 4.3 : Élément endommagé (Lemaître et Desmorat 2005).....	188
Figure 4.4 : Réponse contrainte-déformation du modèle de Mazars pour une sollicitation en traction et en compression (Mazars 1984).....	191
Figure 4.5 : Profil de vitesse d'un fluide entre deux plaques planes et parallèles.....	195
Figure 4.6 : Estimation de la perméabilité macroscopique (Dormieux et Kondo 2004).....	196
Figure 4.7 : Assemblage de particules sphériques et forces de contact (Potyondy et Cundall 2004).	199
Figure 4.8 : Exemple du modèle de (Prado et Van Mier 2003) tiré de (Rousseau 2009).....	200
Figure 4.9 : Génération du maillage dans le modèle.	201
Figure 4.10 : Génération des centres de particules à l'intérieur des grilles (Delaplace 2008).....	202
Figure 4.11 : Exemple de deux maillages ($a = 0.7$). Maillage 2D de 10 x 10 particules (à gauche) et maillage 3D de 10 x 10 x 10 particules (à droite) (Delaplace 2008).....	202
Figure 4.12 : Effort de cohésion entre deux particules déformées (Delaplace 2008).	203
Figure 4.13 : Effort de contact entre deux particules (Delaplace 2008).....	204
Figure 4.14 Surface seuil obtenue par le modèle (Delaplace 2008).	205
Figure 4.15 Identification des paramètres élastiques (Delaplace 2008).....	207
Figure 4.16 Evolution de la contrainte maximale en fonction de ε_r (Delaplace 2008).....	208
Figure 4.17 Evolution de la contrainte maximale en fonction de θ_r (Delaplace 2008).....	209
Figure 4.18 Réponse contrainte-déformation en traction et compression du modèle (Delaplace 2008).....	209
Figure 4.19 Etude de l'indépendance au maillage pour le module d'Young et le coefficient de Poisson (Delaplace 2008).....	210
Figure 4.20 Couplage bord à bord (modèle éléments finis de part et d'autre du modèle discret)(Belytschko et Xiao 2003).	212
Figure 4.21 Couplage avec recouvrement (Belytschko et Xiao 2003).....	212
Figure 4.22 Zone d'intérêt à raffiner par les ED.	213
Figure 4.23 : Processus d'itération dans le cas d'un chargement THM.....	214
Figure 4.24 : Dimensions, conditions aux limites et chargement de la poutre entaillée	215
Figure 4.25 : Maillage de la poutre (25781 éléments TRI3) et le chevêtre servant à appliquer le chargement.	216
Figure 4.26 : Courbe contraintes-déformations en traction du modèle de Mazars avec les paramètres indiqués dans le Tableau 4.1.....	216

Figure 4.27 : Cartographies d'endommagement de la poutre à différents instants de chargement.	217
Figure 4.28 : Evolutions de l'effort appliqué en fonction a) du CMOD b) de δ et de c) du CMSD.	218
Figure 4.29 : Zone d'intérêt pour la ré-analyse avec les éléments discrets. Le champ de déplacement sur le bord non libre est noté \vec{u}	219
Figure 4.30 : 4 faciès de fissuration obtenus au cours du calcul discret à différents niveaux de chargement $P = 40\text{kN}$ (a) ; $P = 30\text{kN}$ (b) ; $P = 12\text{kN}$ (c) ; $P = 8\text{kN}$ (d)	220
Figure 4.31 : Superposition des faciès de fissuration numérique (en rouge) et expérimental (noir).	221
Figure 4.32 : Champ de déplacement ED de la zone d'intérêt (amplitude x 1000)	221
Figure 4.33 : Dimensions et chargement de la poutre bi-entaillée	223
Figure 4.34 : Carte d'endommagement de la poutre bi-entaillée.	224
Figure 4.35 : Zone de calcul ED de la poutre bi-entaillée	225
Figure 4.36 : Calcul ED : propagation de la fissuration pour la poutre bi-entaillée.	225
Figure 4.37 : Superposition des deux faciès de fissuration numérique (trait rouge) et expérimental (trait noir)	226
Figure 4.38 : Géométrie et conditions aux limites du disque (gauche) et maillage EF (droite)	227
Figure 4.39 : Courbe effort vertical F-COD : réponse globale du disque.	228
Figure 4.40 : Cartes d'endommagement du disque au cours du chargement : endommagement diffus et localisé.	229
Figure 4.41 : Délimitation de la zone de calcul discret (a) ; maillage de la zone par éléments discrets	230
Figure 4.42 : Cartes de fissuration obtenues à différents instants du calcul DEAP	231
Figure 4.43 : Faciès de fissuration obtenus expérimentalement lors d'un essai brésilien sur un Béton Hautes Performances (Picandet 2001).	231
Figure 4.44 : Evolution du rapport d'accroissement de la perméabilité en fonction du déplacement latéral du disque : comparaison avec des résultats expérimentaux issus de (Picandet 2001).	233
Figure 4.45 Chargement thermique sur la surface AD du mur	236
Figure 4.46 Géométrie et conditions aux limites du problème étudié.	236
Figure 4.47 Délimitation de la zone réanalysée par ED sur le faciès d'endommagement.	237
Figure 4.48 Macroélément fissuré : fissures isolées et macrofissure traversante	238
Figure 4.49 Faciès d'endommagement à 200 jours (gauche) ; profils de température (droite)	240
Figure 4.50 Faciès de fissuration obtenus avec DEAP pour 3 maillages ED et coefficients de perméabilité k_{11} correspondant à 200 jours.	241
Figure 4.51 Coefficient de perméabilité k_{11} (échelle logarithmique en valeur absolue) aux temps 10 (a), 50 (b), 100 (c) et 200 (d) jours.	242
Figure 4.52 Coefficient de perméabilité k_{22} (échelle logarithmique en valeur absolue) aux temps 10 (a), 50 (b), 100 (c) et 200 (d) jours.	243
Figure 4.53 Degré de saturation aux temps 10 (a), 50 (b), 100 (c) et 200 (d) jours.	243
Figure 4.54 Coefficient de perméabilité au liquide k_{11} (échelle logarithmique en valeur absolue) aux temps 10 (a), 50 (b), 100 (c) et 200 (d) jours.	244

Figure 4.55 Coefficient de perméabilité (gauche) et degré de saturation (droite) aux temps 100 (haut) et 200 (bas) jours dans le cas d'un tenseur de perméabilité isotrope.....	245
Figure 4.56 Evolutions de la perte de masse de la structure dans le cas d'un tenseur de perméabilité anisotrope et isotrope.	245
Figure 4.57 Evolutions de la perte de masse de la structure dans le cas des 3 maillages ED et d'un tenseur de perméabilité anisotrope.	246

Liste des tableaux

Tableau 0.1 : Classification des déchets radioactifs en fonction de leur niveau d'activité et période d'après le Plan National de Gestion des Matières et Déchets Radioactifs.....	3
Tableau 1.1 : Composition minéralogique moyenne d'un ciment Portland CPA-CEM I.....	8
Tableau 1.2 : Constantes de l'équation d'Avrami (Tennis et Jennings 2000)	17
Tableau 1.3 : Propriétés élastiques des différentes phases d'une pâte de ciment saine et dégradée. (extrait de (Stora 2007)).....	21
Tableau 1.4 : Classification des pores dans une pâte de ciment CEM I durcie selon (Jennings et Tennis 1994).....	22
Tableau 1.5 : Différents mécanismes de retrait de dessiccation et leur domaine d'action (d'après Soroka 1979 cité dans (Kovler et Zhutovsky 2006)).....	33
Tableau 1.6 : Principales décompositions dans un béton lors d'un chauffage (Noumowe 1995)..	35
Tableau 2.1 : Formulation de la courbe de rétention d'eau pour différents modèles	51
Tableau 3.1: Fractions volumiques d'hydrates dans une pâte de ciment CEM I pour différentes valeurs du rapport e/c. (Béjaoui et al. 2006).	103
Tableau 3.2 : Paramètres de la distribution poreuse.....	123
Tableau 3.3 : Composition minéralogique du ciment pour le CO et le BO.	138
Tableau 3.4 : Fractions volumiques d'hydrates dans le CO.	139
Tableau 3.5 : Composition minéralogique du ciment pour le MO	139
Tableau 3.6 : Fractions volumiques d'hydrates dans les couches interne et externe.....	140
Tableau 3.7 : Comparaison des propriétés déterminées analytiquement avec les valeurs expérimentales	140
Tableau 3.8 : Fractions volumiques d'hydrates dans la pâte de ciment du mortier MO	148
Tableau 4.1 : Paramètres du modèle de Mazars.....	216
Tableau 4.2 : Paramètres du modèle Eléments Discrets	219
Tableau 4.3 : Paramètres du modèle de Mazars (essai brésilien)	228
Tableau 4.4 : Paramètres matériau utilisés pour la simulation (Bary et al. 2012)	234
Tableau 4.5 : Paramètres utilisés pour la simulation	235
Tableau 4.6 : Paramètres du modèle Eléments Discrets	237

Notations

x :	Scalaire
\mathbf{x} :	Tenseur d'ordre 2
\mathbb{X} :	Tenseur d'ordre 4
\mathbb{I} :	Tenseur identité d'ordre 4
\mathbb{J} :	Partie sphérique du tenseur identité d'ordre 4
\mathbb{L} :	Partie déviatorique du tenseur identité d'ordre 4
\mathbb{C} :	Tenseur d'ordre 4 de rigidité
\mathbb{S} :	Tenseur d'ordre 4 de souplesse
\mathbb{A} :	Tenseur d'ordre 4 de localisation de la déformation
\mathbb{B} :	Tenseur d'ordre 4 de localisation de la contrainte
σ :	Tenseur symétrique d'ordre 2 de contrainte de cauchy
Σ :	Tenseur symétrique d'ordre 2 de contrainte macroscopique
ε :	Tenseur symétrique d'ordre 2 de déformation microscopique
\mathbf{E} :	Tenseur de déformation macroscopique
\mathbb{S}^{esh}	Tenseur d'ordre 4 d'Eshelby
\mathbb{P}	Tenseur d'ordre 4 d'Hill
$\mathbf{1}$	Tenseur identité d'ordre

INTRODUCTION GENERALE

En France l'industrie nucléaire est la principale source de production d'électricité. Elle représente en effet actuellement près de 80% de la production totale. La sûreté nucléaire et la gestion des déchets radioactifs constituent donc une préoccupation majeure des pouvoirs publics. A ce titre le Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives (CEA) participe à de nombreux projets de R&D relatifs à la conception, à la construction, au fonctionnement, à l'arrêt et au démantèlement des installations nucléaires de base, ainsi qu'au stockage et à l'entreposage des substances radioactives dont l'objectif est de prévenir les accidents ou d'en limiter les effets. Cette thèse est le fruit d'une collaboration entre le Laboratoire d'Etude du Comportement du Béton et des Argiles (LECBA) du CEA et le Laboratoire de Mécanique et de Technologies (LMT) de l'Ecole de Normale Supérieure de Cachan (ENS-Cachan).

Parmi les ouvrages de génie civil du parc nucléaire français qui nous intéressent dans cette étude, nous pouvons citer les parois en béton des enceintes de confinement, les aérorefrigerants (Figure 0.1), les ouvrages de stockage et d'entreposage des déchets radioactifs (Figure 0.2). Souvent le choix des matériaux cimentaires pour ces ouvrages relève d'un compromis entre des considérations économiques, technologiques et surtout scientifiques en termes de durabilité et de propriétés de confinement des radionucléides. On dispose en effet d'une large gamme de matériaux, avec la possibilité de les adapter afin d'avoir non seulement des résistances mécaniques très élevées, mais aussi de faibles perméabilités et de faibles coefficients de diffusion de solutés (diminution de la solubilité de certains radionucléides du fait de la barrière chimique que constitue le béton). De plus les matériaux cimentaires bénéficient d'un retour d'expérience non négligeable dans le domaine du génie civil depuis une centaine d'années.

Par exemple pour le projet EPR de Flamanville 3, il a été retenu une double paroi en béton sans peau d'étanchéité pour l'enceinte de confinement. La paroi interne est en béton à haute performance (BHP) précontraint de 130 cm d'épaisseur pour le cylindre et de 90 cm pour le dôme. La paroi externe est en béton armé de 130 cm d'épaisseur. Le béton joue dans ce cas à la fois le rôle de structure mais également de barrière étanche. Son comportement mécanique ainsi que sa faculté à ne pas se laisser traverser par des fluides sont des points essentiels pour l'évaluation de la sûreté des installations nucléaires. En France ces enceintes sont testées sous une pression équivalente à celle qui pourrait y apparaître en situations accidentelles afin de vérifier leur résistance et leur étanchéité. Une situation accidentelle est celle qui se produit lorsqu'il y a rupture d'une tuyauterie du circuit primaire ou d'un circuit secondaire provoquant un fort relâchement de vapeur d'eau dans l'enceinte. Il s'en suit une élévation de température et de pression importante de l'atmosphère de l'enceinte (environ 150°C, 4 bars relatifs). Selon que la rupture est apparue sur le circuit primaire ou secondaire l'accident est appelé APRP (Accident par Perte de Réfrigérant Primaire) ou RTV (Rupture de Tuyauterie de Vapeur). Les essais correspondants appelés épreuves de l'enceinte ont lieu avant la mise en service du bâtiment, puis périodiquement (normalement tous les dix ans, parfois tous les 5 ans).



Figure 0.1 : Aéroréfrigérant de la centrale nucléaire de Civaux (www.edf.com).

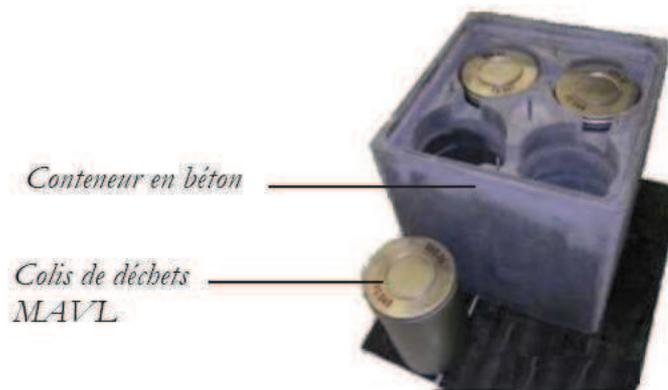


Figure 0.2 : Représentation d'un colis de déchets MAVL (Tiré de (Drouet 2010)).

Il est à noter que pour obtenir un chargement qui soit complètement représentatif des chargements des conditions de l'accident dans l'enceinte, il faudrait ajouter au chargement de pression, le chargement thermique qui lui ne peut être simulé lors de l'épreuve. Ajoutons que les parois internes de l'EPR eux devront en particulier résister à une pression accidentelle plus élevée que celle de l'APRP en l'occurrence environ 5.5 bars relatifs.

Malgré la qualité des essais effectués, des rapports de groupes d'experts français et allemands soulignent que l'absence de chargement thermique de l'enceinte lors des épreuves ne permet pas d'assurer la représentativité de ces essais vis-à-vis des situations accidentelles réelles (<http://www.sénat.fr>; Rapport sur le contrôle de la sûreté et de la sécurité des installations nucléaires). De plus le retour d'expérience montre que pour passer l'épreuve plusieurs enceintes ont dû faire l'objet de travaux destinés à améliorer l'étanchéité de la paroi interne (pose locale d'un revêtement d'étanchéité sur des zones dites singulières, initialement fissurées lors de la construction de l'ouvrage, ou difficiles à précontraindre). Par exemple, les résultats des dernières épreuves de tranches Cattenom 3, Flamanville 1 et Cattenom 2 montrent la particulière sensibilité

constituée par l'accès matériel, où des microfissures traversantes sont apparues, lors des épreuves après quelques années de perte de précontrainte due au fluage du béton. A ce titre, on estime que les simulations numériques permettant de prédire le comportement thermo-hydro-mécanique des parois en béton des enceintes de confinement avec prise en compte de la fissuration pourront donc servir d'appui technique et d'aide à la décision aux autorités de sûreté. La modélisation du comportement du béton face à ce type de sollicitations permettra également de mieux appréhender les dimensionnements des futures enceintes ou de simuler les taux de fuite lors des épreuves des enceintes existantes.

En ce qui concerne les déchets radioactifs, leur mode de gestion repose sur une classification tenant compte du niveau d'activité des déchets et de la période des radionucléides. Deux types de filières de prise en charge peuvent être identifiés en fonction de ces deux paramètres principaux (Tableau 0.1).

Tableau 0.1 : Classification des déchets radioactifs en fonction de leur niveau d'activité et période d'après le Plan National de Gestion des Matières et Déchets Radioactifs.

	Vie Très Courte (période < 100 jours)	Vie Courte (période \leq 31 ans)	Vie Longue (période > 31 ans)
Très Faible Activité (TFA)	Gestion par décroissance radioactive sur le site de production puis élimination dans les filières conventionnelles	Stockage de surface (Centre de stockage des déchets de très faible activité de l'Aube)	
Faible Activité (FA)		Stockage de surface (Centre de stockage des déchets de faible et moyenne activité de l'Aube)	Stockage à faible profondeur (à l'étude dans le cadre de la loi du 28 juin 2006)
Moyenne Activité (MA)		Stockage profond (à l'étude dans le cadre de la loi du 28 juin 2006)	
Haute Activité (HA)			

Une stratégie de gestion des déchets radioactifs est l'entreposage comme étape préalable et complémentaire au stockage (durée séculaire), afin de prendre en compte les flux de production et la décroissance radioactive. Après l'entreposage, le stockage en couche géologique profonde est considéré comme une solution pérenne (jusqu'à plusieurs centaines de milliers d'années) pour les déchets de hautes et moyennes activités à vie longue (HA-MAVL). La radioactivité des déchets est caractérisée par l'émission d'une forte puissance thermique au moment où ils sont produits. Dans le concept d'entreposage (ou de stockage en phase d'exploitation), il est prévu un procédé de ventilation permettant de dissiper la chaleur émise par les déchets et de limiter l'élévation de la température à 80°C aux points les plus chauds de la structure. Dans ces conditions, le béton est soumis simultanément à un échauffement dû à l'exothermie des déchets, au séchage lui-même accéléré par l'élévation de la température de l'air prélevé à l'extérieur entraînant la chute de l'humidité relative. Le béton peut dans ces cas se fissurer ce qui va accélérer les transferts hydriques à travers la structure.

En définitive le béton que ce soit dans les enceintes de confinement en fonctionnement accidentel, ou dans les ouvrages de stockage et d'entreposage en fonctionnement normal peut être soumis à des contraintes thermo-hydro-mécaniques (THM) modérées en présence de fissuration. Cette thèse s'inscrit dans le cadre de l'étude de la modélisation et de la simulation du

comportement THM et du fluage des bétons au CEA/LECBA mis en place depuis quelques années. Les études ont conduit notamment au développement du modèle THMs (Bary et al. 2008; Bary 2011). Elle rentre également dans le cadre du projet national CEOS.fr piloté par EDF auquel contribue le CEA/DPC/DM2S qui traite de la fissuration et du retrait des ouvrages spéciaux en béton, et dont l'objectif est de fournir des outils fiables et robustes capables d'estimer et de prédire l'état de fissuration lié à l'endommagement des éléments de structure en béton armé ou précontraint. En effet bien que les effets des chargements THM sur le comportement macroscopique soient relativement bien connus, les modèles restent encore insuffisamment précis, en particulier en présence de fissuration. De plus ils incorporent généralement peu, voire pas du tout d'informations microstructurales, si bien que des essais plus ou moins complexes pour identifier les paramètres des modèles phénoménologiques sont généralement nécessaires afin de pouvoir prédire le comportement d'un nouveau matériau. Le modèle THMs est un modèle simplifié dans le sens que la phase gazeuse est supposée constituée uniquement de vapeur d'eau, ce qui diminue le nombre d'équations à prendre en compte dans le système. En effet un grand nombre de paramètres et grandeurs physiques interviennent dans les équations du système, et ceux-ci varient généralement en fonction des variables d'état (par exemple le coefficient de perméation varie en fonction de l'état de saturation, de déshydratation de la phase solide, de la température, ...). Ainsi il n'est pas forcément nécessaire de développer un modèle extrêmement performant prenant en compte de nombreux phénomènes, si l'identification expérimentale des fonctions et paramètres introduits, indispensable à son utilisation, n'est possible qu'avec un degré de précision bien moindre que celui du modèle. Un premier objectif de cette thèse est de limiter dans le modèle THMs le nombre de paramètres phénoménologiques à identifier en intégrant des informations issues de l'échelle de la microstructure des matériaux cimentaires. L'idée est de construire une modélisation multi-échelle basée sur une description précise de la microstructure permettant d'estimer les paramètres mécaniques et hydromécaniques à l'aide de techniques d'homogénéisation analytiques. Le second objectif de cette thèse est de décrire numériquement de façon plus fine que les modèles macroscopiques existants, la fissuration du béton soumis à des chargements THM. En l'état actuel des recherches la fissuration reste assez bien maîtrisée en termes d'ouverture et d'espacement de fissures sur des structures élémentaires type tirant, poutres en flexion, mais les outils dont on dispose ne permettent pas toujours de déterminer un état représentatif de la fissuration lorsqu'il s'agit d'ouvrages spéciaux et où les chargements sont plus complexes (solllicitations thermiques et hydriques sévères)(www.ceos.fr). Afin de répondre à cet objectif, on a envisagé dans cette thèse le recours à la méthode des éléments discrets. Cette méthode se base sur une description du matériau non pas à l'échelle macroscopique, mais à une échelle proche de la microstructure du matériau. Ainsi, un modèle particulière représentant le matériau comme un assemblage de particules pouvant se rompre sous sollicitations est considéré. Avec cette approche, la fissuration est représentée explicitement, permettant une analyse directe de l'ouverture de fissure. Un des avantages de la méthode est qu'elle intègre naturellement une variabilité spatiale des propriétés physiques des matériaux telle que celle identifiée pour un matériau hétérogène quasi-fragile comme le béton. Le modèle utilisé est celui développé par Arnaud Delaplace au LMT Cachan (Delaplace et al. 2003; Delaplace et Desmorat 2007; Delaplace et Hild 2007), que nous avons intégré et couplé au modèle THMs, implanté dans le code de calcul par éléments finis Cast3M (www-cast3m.cea.fr). Outre l'apport concernant la représentation de la fissuration, l'intérêt de cette méthode réside dans le fait que les transferts hydriques dans les

fissures seront estimés de manière fiable à l'aide d'approches appropriées. Les flux obtenus seront réintroduits dans le calcul THM réalisé à l'échelle macroscopique. Cet aspect est en effet essentiel vis-à-vis de la prédiction de la durabilité et de la durée de vie des structures.

Ce manuscrit est subdivisé en quatre chapitres. Le premier chapitre est consacré à l'analyse bibliographique de la microstructure des matériaux cimentaires. Cette analyse est primordiale pour construire une représentation multi-échelle réaliste du matériau. On passe en revue dans ce chapitre les aspects microstructuraux qui caractérisent les matériaux obtenus à partir d'un mélange avec la pâte de ciment.

Le second chapitre est également consacré à une analyse bibliographique, cette fois-ci concernant la modélisation couplée THM des matériaux cimentaires. Dans la première partie l'accent est mis sur l'identification des paramètres de couplage HM notamment le coefficient et le module de Biot et ceci en conditions saturées mais également en conditions partiellement saturées. La deuxième partie présente les techniques d'homogénéisation en élasticité linéaire et leurs applications aux milieux poreux que sont les matériaux cimentaires. Cet aspect représente le soubassement de la modélisation proposée par la suite.

Le chapitre 3 a pour objectif la mise au point d'un modèle d'estimations des paramètres mécaniques et hydromécaniques dans les conditions du matériau saturé ou partiellement saturé, sain et fissuré, drainé et non drainé, estimations qui serviront de données d'entrées au modèle THMs. Les applications porteront respectivement sur une pâte de ciment, un mortier et un béton et les résultats seront confrontés à des valeurs expérimentales afin de procéder à la validation de la modélisation proposée.

Le dernier chapitre est consacré à la procédure de couplage éléments finis (EF)/éléments discrets (ED) dont l'objectif est principalement de raffiner l'étude de la fissuration dans une zone globale d'endommagement obtenue par EF. La procédure est présentée et appliquée à une série de cast-test correspondant en premier lieu à un chargement purement mécanique permettant de tester la faisabilité de la méthode et en second lieu, d'analyser la réponse du modèle en termes de transferts de masse dans un cas de chargement complet THM.

Enfin sont détaillées les conclusions et perspectives qui se dégagent de ce présent travail.

CHAPITRE I

GENERALITES SUR LA MICROSTRUCTURE DES MATERIAUX CIMENTAIRES

I.1 Introduction

L'objet de ce chapitre est de présenter les aspects microstructuraux des matériaux cimentaires qui rentrent dans le cadre de notre travail. Le terme « matériaux cimentaires » désigne les matériaux obtenus à partir d'un mélange de ciment et d'eau, constituant la pâte de ciment, et de granulats. La microstructure de la pâte de ciment est réputée complexe et exhibe un caractère multi-échelle. Une connaissance précise de cette microstructure est nécessaire pour appréhender l'approche micromécanique du comportement thermo-hydro-mécanique des matériaux cimentaires que nous aborderons dans le second chapitre. Nous commençons tout d'abord par rappeler brièvement le processus d'hydratation du ciment Portland CEM I, le ciment le plus utilisé dans les constructions en génie civil. Ensuite une collecte d'informations à la fois morphologiques, structurelles et puis mécaniques sur les principaux produits formés au cours de l'hydratation est effectuée. Il ne s'agit pas d'une revue exhaustive de toutes les propriétés des hydrates formés mais de mettre l'accent sur celles qui nous intéressent particulièrement dans le cadre de la modélisation. Ensuite les interactions eau/microstructure à l'origine de déformations macroscopiques dans les matériaux cimentaires sont brièvement rappelées. Enfin nous étudierons l'effet de l'augmentation de la température sur l'évolution de la microstructure, notamment sur la porosité.

I.2 Microstructure des matériaux cimentaires

I.2.1- Le ciment Portland et son hydratation

Le ciment est une poudre minérale obtenue par broyage du clinker (**Figure 1.1**) et de sulfate de calcium, le clinker étant issu de la cuisson à haute température (1450°C) d'un mélange d'argile (20%) et de calcaire (80%). Le ciment joue le rôle de liant hydraulique dans la fabrication des matériaux cimentaires, c'est-à-dire qu'il réagit avec l'eau pour former une matrice stable qui permet d'assurer la cohésion entre les granulats. Le ciment le plus fréquemment utilisé en génie civil est le ciment Portland artificiel ou ordinaire référencé CPA-CEM I, appartenant à la classe I selon la norme européenne du ciment EN 197-1. Il est composé de cinq constituants principaux que sont les oxydes de calcium, de silicium, d'aluminium et de fer, du gypse (sulfate de calcium) dans les fractions massiques indiquées dans le **Tableau 1.1** ci-dessous.

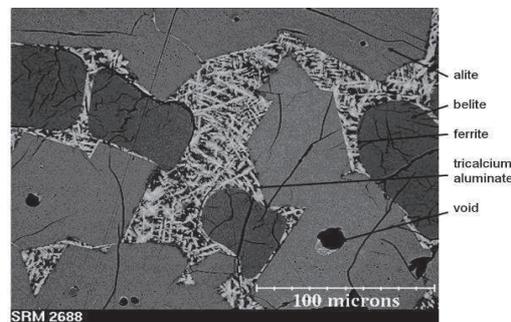


Figure 1.1 : Image MEB d'une particule de clinker (Stutzman 2004).

Tableau 1.1 : Composition minéralogique moyenne d'un ciment Portland CPA-CEM I

Constituants	Nom	Formule chimique	Notation cimentaire	% massique
Silicate tricalcique	Alite	$3\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$	C_3S	50-70
Silicate bicalcique	Bélite	$2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$	C_2S	15-30
Aluminate tricalcique	Aluminate	$3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$	C_3A	5-15
Aluminoferrite tétracalcique	Ferrite	$4\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$	C_4AF	5-15
Sulfate de calcium	Gypse	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	CSH	<5

NB : Afin de simplifier les écritures, la nomenclature conventionnelle de la chimie des ciments est utilisée : C = CaO; S = SiO₂; H = H₂O; A = Al₂O₃; F = Fe₂O₂.

Pour des besoins spécifiques, des ajouts minéraux ou additions peuvent être utilisés dans la fabrication du ciment afin de modifier les propriétés et d'influer sur les qualités de la pâte de ciment. On parle alors de ciments composés et la norme EN 197-1 en distingue quatre grandes classes qui se subdivisent en onze catégories suivant la nature exacte des additions et de leurs teneurs (Norme Européenne de ciment) :

- Classe II : CEM II, ciments Portland composés
- Classe III : CEM III, ciment de hauts fourneaux
- Classe IV : CEM IV, ciment pouzzolaniques
- Classe V : CEM V, ciments aux cendres et laitiers de haut fourneau

L'hydratation du ciment correspond à une série de réactions chimiques à cinétiques variables apparaissant simultanément entre les différentes composantes du clinker anhydre et l'eau. Le processus d'hydratation du ciment est complexe et certains détails sont encore sujets à débat aujourd'hui (Bullard et al. 2010). (Le Chatelier 1887) a proposé un processus de dissolution-précipitation confirmé par diverses constatations expérimentales : lors du gâchage, c'est-à-dire de la mise en contact du ciment avec l'eau, la surface des grains de ciment se recouvre de molécules d'eau. Les constituants du ciment se dissolvent et se retrouvent sous forme d'ions en solution. Lorsque la concentration ionique dépasse la solubilité du produit, la solution est sursaturée et les ions précipitent sous forme d'hydrates. Ceci va diminuer la concentration des espèces et donc permettre de nouveau un passage en solution des constituants anhydres. Le grain de ciment anhydre étant recouvert de plus en plus par des couches d'hydrates, la cinétique de cette hydratation diminue au fur et à mesure du temps, du fait de la diminution de la diffusion des ions vers le ciment anhydre. Ces différentes phases sont schématisées par (Locher 1976) sur la Figure 1.2.

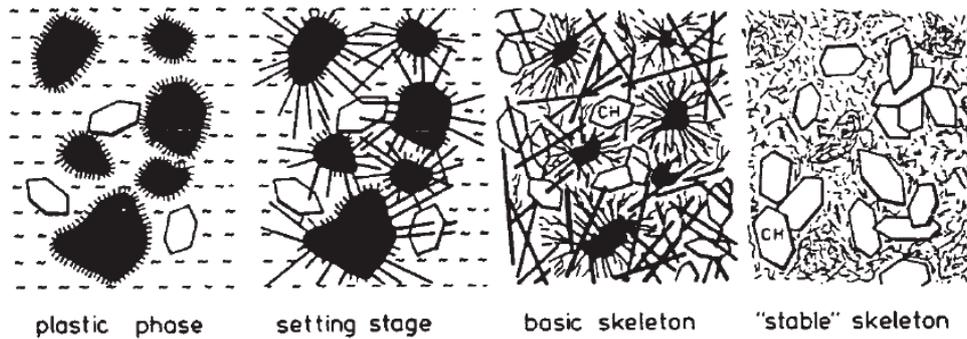


Figure 1.2 : Formation et croissance des hydrates au cours de l'hydratation d'une pâte de ciment (Locher 1976)

Les principaux hydrates formés au cours de l'hydratation d'un ciment de type CEM I sont :

- Le silicate de calcium hydraté C-S-H = $x \text{ CaO} \cdot \text{SiO}_2 \cdot y \text{ H}_2\text{O}$,
- La portlandite CH = $\text{Ca}(\text{OH})_2$,
- Le trisulfoaluminate de calcium ou l'ettringite AFt = $6 \text{ CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3 \text{ SO}_3 \cdot 24 \text{ H}_2\text{O}$,
- Le monosulfoaluminate AFm = $4 \text{ CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SO}_3 \cdot 12 \text{ H}_2\text{O}$,
- L'hydrogenat $3 \text{ CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 6 \text{ H}_2\text{O}$.

La **Figure 1.3** montre l'image MEB d'une pâte de ciment CEM I 52.5 à rapport $e/c = 0.43$ (Béjaoui et al. 2006).

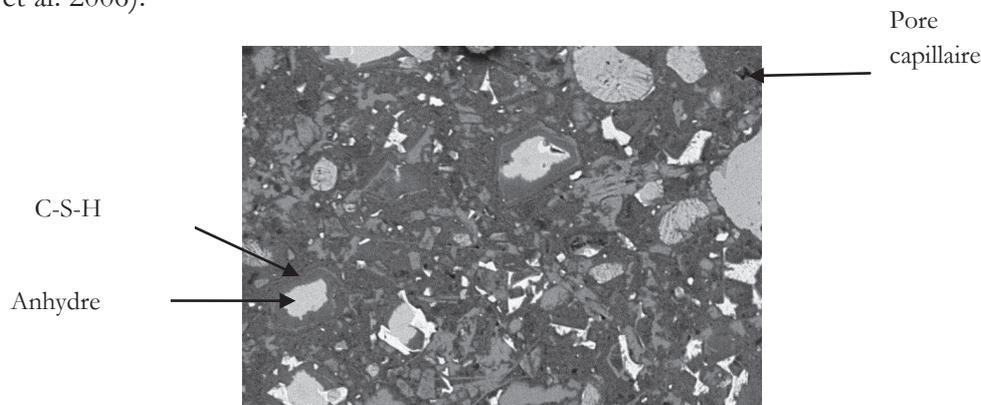


Figure 1.3 : Image MEB d'une pâte de ciment CEM I 52.5, $e/c=0.43$ (Béjaoui et al. 2006).

I.2.2- Nature et structure des hydrates formés

I.2.2.1 - Le silicate de calcium hydraté (C-S-H)

C'est le composé majoritaire (en volume) des produits de l'hydratation du silicate tricalcique et du silicate bicalcique. Il est caractérisé par une grande surface spécifique. Des mesures par adsorption de vapeur d'eau réalisées sur des échantillons de pâtes séchées ont révélé une surface spécifique d'environ 250 à $450 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$, soit trois ordres de grandeur plus élevés que celle de la

poudre de ciment anhydre (Mindess et Young 1981). La structure atomique exacte des C-S-H n'est pas connue, le rapport C/S varie entre 0.66 et 2 (Nonat et al. 1997; Nonat 2004) en fonction de la température et de la concentration en hydroxyde de calcium présente dans la solution interstitielle. (Powers et Brownyard 1947) sont les premiers à avoir étudié la structure des matériaux cimentaires avec l'hypothèse qu'elle est similaire à la tobermorite, un minéral appartenant à la famille des argiles ($C_5 S_6 H_9$, C/S = 0.8). La structure des C-S-H a aussi été assimilée à un autre minéral, la jennite ($C_9 S_6 H_{11}$, C/S = 1.5). Powers les nomme C-S-H (I) et C-S-H (II). Ils sont supposés avoir une porosité intrinsèque d'environ 28%, indépendamment du rapport e/c et du degré d'hydratation. Selon (Nonat 2004) il existe trois phases distinctes de C-S-H en fonction du rapport C/S :

- le C-S-H- α correspond à une concentration en Ca^{2+} dans la solution interstitielle inférieure à 2mmol.L^{-1} , pour un rapport C/S entre 0.66 et 1
- le C-S-H- β a un rapport C/S se situant entre 1 et 1.5 et correspond à une concentration en Ca^{2+} comprise entre 2 et 22mmol.L^{-1} .
- et le C-S-H- γ est obtenu lorsque la concentration en Ca^{2+} est supérieure à 22mmol.L^{-1} et un C/S allant de 1.7 à 2.

Powers (1947) a mis en évidence la structure colloïdale des C-S-H que plusieurs auteurs ont tenté de reproduire à travers divers modèles conceptuels. Feldman et Sereda (1968) ont proposé un modèle schématisé sur la **Figure 1.4** qui a été souvent utilisée pour décrire le retrait et le fluage des matériaux cimentaires. Ce modèle considère le gel de C-S-H comme un assemblage de fibres formées de lamelles enroulées sur elles mêmes. Chaque lamelle est constituée de 2 à 4 feuilletts. Ces feuilletts ont été mis en évidence par microscopie électronique à balayage avec des dimensions de l'ordre de $50*50*6$ nm (Hansen 1986). Les feuilletts peuvent avoir un mouvement relatif et la pénétration ou le départ de l'eau des espaces interfoliaires sont possibles et sont à l'origine du retrait ou du gonflement de la structure.

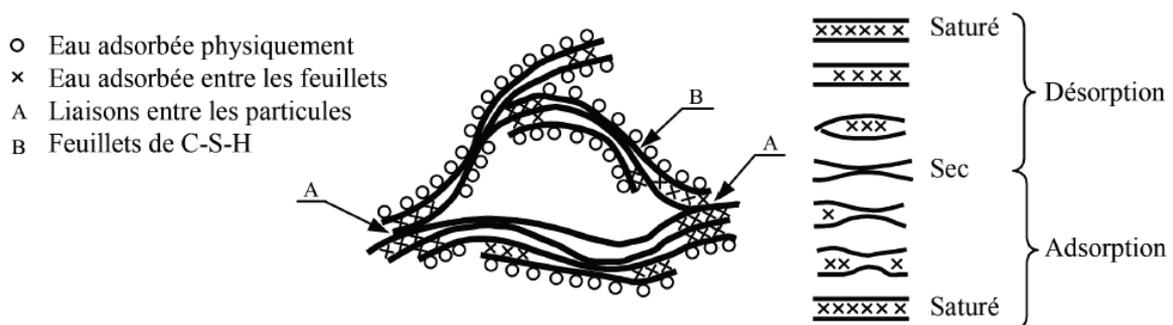


Figure 1.4 : Représentation schématique de la microstructure du gel de C-S-H (Feldman et Sereda 1968).

Plus tard Jennings (2000) puis (Tennis et Jennings 2000) proposent un modèle qui rend compte de la structure colloïdale et amorphe des C-S-H sous la forme d'un assemblage de globules

(Figure 1.5). La structure des C-S-H contient des petits pores de gel dont la taille se situe entre 1 et 3nm dans les espaces entre les globules voisins et de grands pores de gel (3-12nm) entre les assemblages de globules. Au cours du séchage à partir d'une humidité relative de 11%, une partie de l'eau située dans l'espace interfoliaire s'évapore mais une autre partie liée aux feuillettes de C-S-H reste dans la pâte de ciment. Les pores de taille plus grande eux se videraient à 40% d'humidité relative. Selon le modèle de (Tennis et Jennings 2000) , il se forme dès les premières heures de l'hydratation une première couche de C-S-H LD (Low Density) sur la surface des grains anhydres comblant la porosité capillaire. Par la suite le manque d'espace disponible associé à la diminution de la diffusion des ions vers la surface des grains favorise la formation d'une deuxième couche de produits plus compacte, les C-S-H HD (High Density). Richardson (2000) à la suite de Taplin (1959) et de Groves (1987) propose l'appellation de C-S-H internes (inner product) et de C-S-H externe (outer product) pour ces deux types de C-S-H. Tennis et Jennings identifient les proportions des deux phases grâce à des essais d'adsorption d'eau et d'azote. Ils observent que la totalité du volume des C-S-H est accessible par adsorption d'eau et que seule la porosité des C-S-H LD est accessible à des essais d'adsorption d'azote du fait de la taille des molécules. Par conséquent la différence entre l'adsorption d'eau et d'azote est attribuée au volume de C-S-H HD.

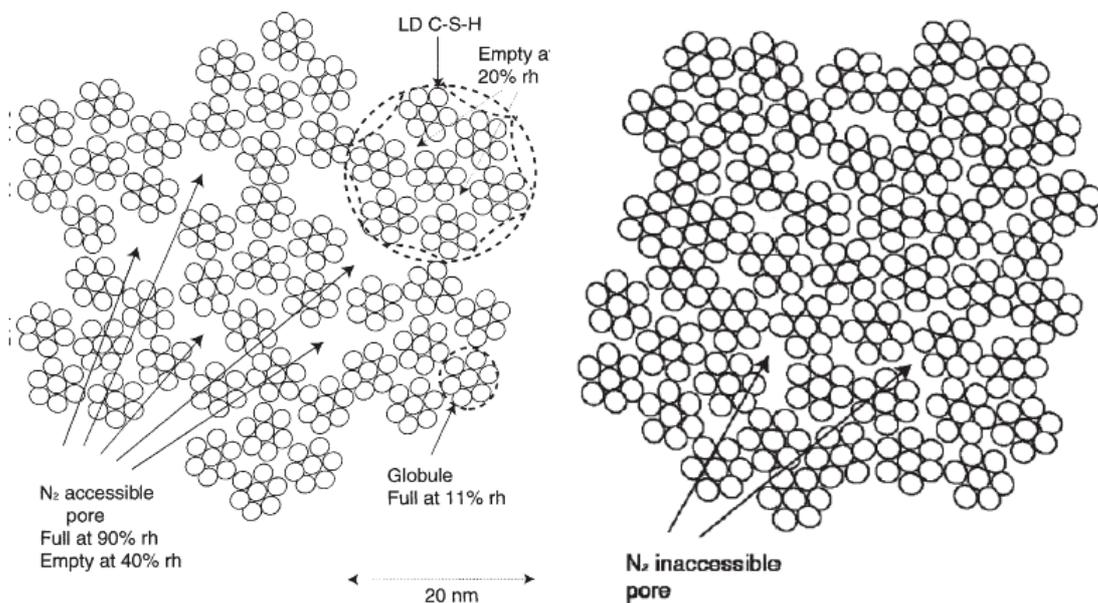


Figure 1.5 : Répartition globulaire des amas de C-S-H (Jennings 2000).

Les fractions volumiques des deux phases de C-S-H dépendent ainsi du degré d'hydratation α et du rapport e/c de la manière suivante :

$$f_{LD} = \frac{M_r M_t}{\rho_{LD}}$$

$$f_{HD} = \frac{M_t - (M_r M_t)}{\rho_{HD}} \quad (1.1)$$

$$M_r = 3.017(e/c)\alpha - 1.347\alpha + 0.538$$

avec M_t la masse sèche totale des C-S-H, M_r la fraction massique des C-S-H HD, ρ_{HD} , ρ_{LD} , f_{HD} et f_{LD} sont respectivement les densités et les fractions volumiques des C-S-H HD et LD. La **Figure 1.6** montre des images par Microscopie Electronique par Transmission (MET) de deux types de C-S-H dans des pâtes de ciment CEM I à différents rapports e/c .

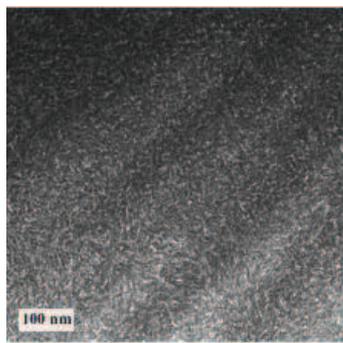
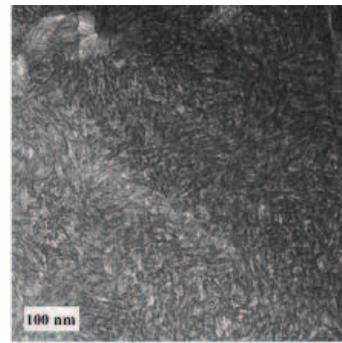
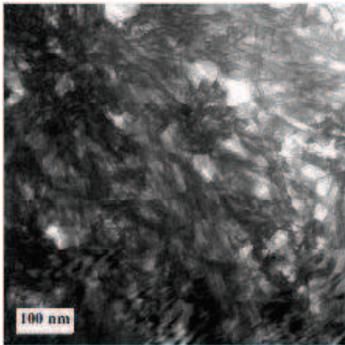
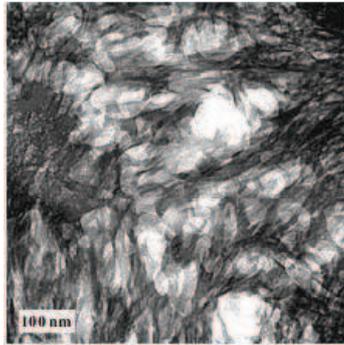
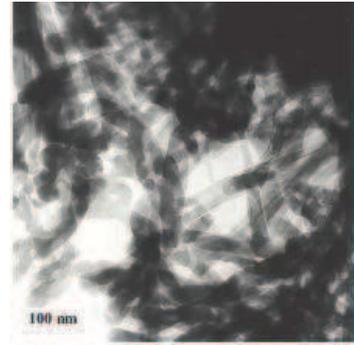
C-S-H HD (CEM I $e/c = 0.25$)C-S-H HD (CEM I $e/c = 0.5$)C-S-H LD (CEM I $e/c = 0.32$)C-S-H LD (CEM I $e/c = 0.43$)C-S-H LD (CEM I $e/c = 0.70$)

Figure 1.6 : Images MET des deux types de C-S-H dans des pâtes de ciment CEM I à différents rapports e/c (Béjaoui et al. 2006).

I.2.2.2 - La portlandite

Elle occupe 15 à 25% du volume des hydrates de la pâte de ciment CEM I. Elle se cristallise sous forme de plaquettes hexagonales ou prismatiques (Richardson 1999; Richardson 2008) empilées

dans les pores entre les grains de ciment anhydre au cours de l'hydratation (Figure 1.7). Ils forment des agglomérats dont la taille moyenne d'une dizaine de microns augmente avec le rapport e/c (Mehta et Monteiro 2005). Cette phase est décrite souvent comme soit constituée de massifs isolés (Jennings 2000), soit de petits cristaux imbriqués dans les C-S-H. Les variations de la microstructure de la portlandite dues aux conditions d'hydratation ont des répercussions notables sur les propriétés finales du matériau, par exemple sur ses propriétés mécaniques. La teneur en portlandite d'un matériau cimentaire peut être considérée comme un indicateur de durabilité (Baroghel-Bouny et al. 2009) vis-à-vis de la carbonatation. Dans le béton armé par exemple, elle constitue la barrière qui protège par passivation les armatures de la corrosion du fait de la réserve de basicité qu'elle représente. Une altération de type décalcification entraînant sa dissolution dans la matrice cimentaire est rapidement préjudiciable pour la structure.

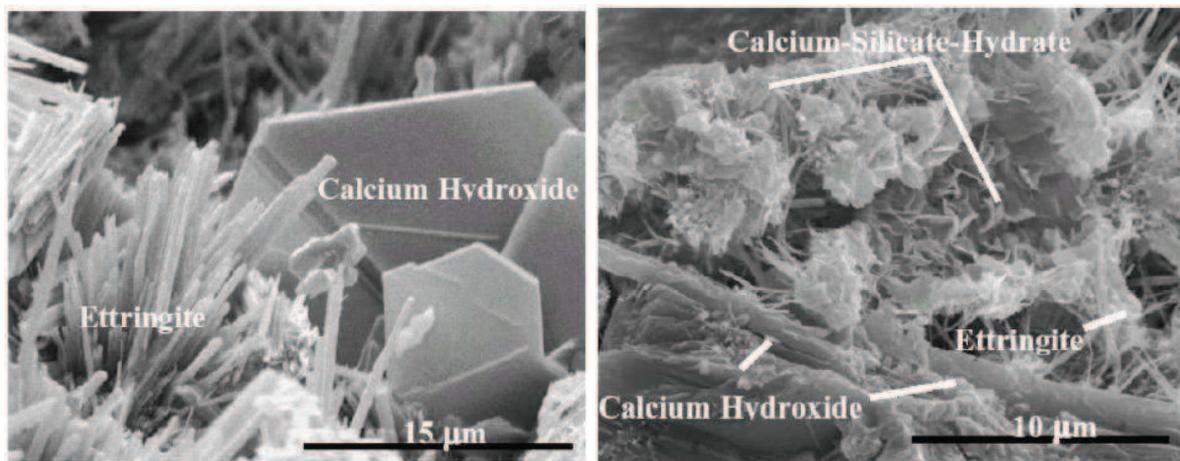


Figure 1.7 Observation MEB de cristaux de portlandite et d'aiguilles d'ettringite (Taylor 1997).

I.2.2.3 - L'ettringite, les monosulfoaluminates

Les principaux produits de l'hydratation des aluminates dans la pâte de ciment de type CEM I sont l'ettringite (AFt), les monosulfo-aluminates (l'AFm), et l'hydrogenat dans des proportions moins importantes que les deux premiers. L'ettringite cristallise sous forme d'aiguilles principalement hexagonales et les monosulfoaluminates plutôt sous forme de plaques hexagonales (Richardson 2000). Dans une pâte de ciment durcie, l'ettringite se trouve parsemée dans les C-S-H. Les cristaux d'ettringite formés au jeune âge (ettringite « primaire ») ne provoquent pas de gonflement car ils cristallisent avant la prise du béton, dans les espaces libres du matériau. Ils sont même bénéfiques pour le comportement mécanique du matériau, puisqu'ils contribuent à la cohésion de la pâte de ciment au jeune âge, leur formation étant accompagnée par une diminution de la porosité. L'ettringite peut se former aussi de manière différée après le durcissement du matériau. Il s'agit de l'ettringite « secondaire ». D'une part elle se forme soit par la transformation du monosulfoaluminate, soit par l'hydratation du C_3A résiduel suite à un apport interne ou externe (provenant de l'environnement, attaque sulfatique par exemple) d'ions sulfates. D'autre part suite à une cure thermique pour accélérer les processus d'hydratation, ou dans les

structures massives en béton, si la température à cœur est trop importante et dépasse 80°C, l'ettringite primaire se dissout et puis reprécipite après le refroidissement. Dans les deux cas elle est susceptible de générer des gonflements internes principalement attribués aux pressions de cristallisation, causant ainsi des désordres dans le matériau, comme de la fissuration.

I.2.2.4- Le résidu de ciment anhydre

Une partie du ciment entrant dans la fabrication de la pâte de ciment reste non hydratée et sa quantité dépend du rapport e/c et du degré d'hydratation. Les grains de ciment anhydre ont une taille allant de 1 à 50 μm . Pour des raisons de simplifications plusieurs auteurs modélisent les grains de ciment sous forme sphérique. En réalité une récente étude (Garboczi et Bullard 2004) de microtomographie sur environ 1200 particules de ciment de volume allant de 1 à 120000 μm^3 révèle une morphologie beaucoup plus complexe (**Figure 1.8**). Sur la base de ces travaux Stora (2006) propose la relation suivante entre le volume V et la surface A d'un grain de ciment :

$$\frac{V}{A} = \frac{1}{5.95} V^{1/3} \quad (1.2)$$

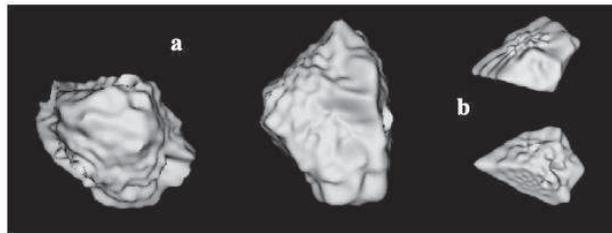


Figure 1.8 : Particules de grains de ciment anhydre (Garboczi et Bullard 2004)

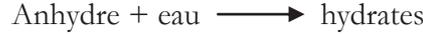
I.2.2.5- Fraction volumique des hydrates formés

Au cours de l'hydratation si la quantité d'eau dans le système est insuffisante pour hydrater tout le ciment, la réaction est incomplète et son état d'avancement est caractérisé par le degré d'hydratation α égal au rapport de la masse de ciment ayant réagi sur la masse de ciment initiale. Plusieurs modèles permettent de relier l'évolution des fractions volumiques des différents hydrates présentes en phase au degré d'hydratation α et au rapport e/c. De manière non exhaustive nous rappelons ici deux des modèles les plus utilisés.

Modèle de Powers

Ce modèle a été proposé par Powers et Brownyard (1947), et a été revisité récemment par (Brouwers 2004; Brouwers 2005). Il reste l'un des plus utilisés du fait de la simplicité de sa mise en œuvre. Il fournit sous la forme de fonctions très simples du rapport e/c et du degré d'hydratation α , les fractions volumiques de ciment anhydre (c), d'hydrates (h) (les différentes

phases d'hydrates ne sont pas considérées séparément) et de porosité capillaire dans la pâte de ciment. L'équation de la réaction de façon simplifiée est :



Soit V^0 le volume initial de réactifs (eau+ciment). Les volumes de ciment anhydre V_c^0 et d'eau V_e^0 sont déterminées par (Sanahuja 2008) :

$$V_c^0 = \frac{1}{1 + \frac{\rho_c}{\rho_e} e/c} V^0, \quad V_e^0 = \frac{e/c}{\frac{\rho_e}{\rho_c} + e/c} V^0 \quad (1.3)$$

avec ρ_e et ρ_c les masses volumiques de l'eau et du ciment anhydre.

Dans le modèle on distingue trois natures différentes de l'eau dans le système (Powers et Brownyard 1947; Taylor 1997; Jensen et Hansen 2001) :

- L'eau liée chimiquement : c'est l'eau dite non-évaporable et qui a réagi avec le ciment anhydre. Cette eau est libérée dans les pores seulement pour des températures supérieures à 105°C. Sa quantité est estimée à environ $w_n = 0.23g/g$ de ciment ayant réagi.
- Liée physiquement : elle est adsorbée sur la surface des hydrates et sa quantité vaut environ $w_a = 0.21g/g$.
- Eau libre : c'est l'eau contenue dans les gros pores capillaires liée ni chimiquement, ni physiquement.

La consommation de l'eau entraîne la création de vides dans la pâte de ciment, le volume des produits d'hydratation étant plus faible que le volume des réactifs. Cette contraction « chimique » est estimée à environ $0.064ml/g$ de ciment de type CEM I ayant réagi (Jensen et Hansen 2001). Initialement dans le mélange les pores capillaires n'existent pas encore. On désigne tout de même par porosité capillaire le domaine alors occupé par l'eau : $f_{pc}^0 = \frac{e/c}{\rho_e / \rho_c + e/c}$

Les volumes d'anhydre V_c , d'eau libre V_{ec} , d'eau contenue dans les hydrates V_{ea} et d'hydrates V_b à un degré d'hydratation α sont donc donnés par (Jensen et Hansen 2001) :

$$\begin{aligned} V_c &= (1-\alpha)(1-f_{pc}^0) \\ V_{ea} &= \alpha \frac{\rho_c}{\rho_e} (1-f_{pc}^0) w_a \\ V_{ec} &= f_{pc}^0 - \alpha \frac{\rho_c}{\rho_e} (w_a + w_n)(1-f_{pc}^0) \\ V_b &= \alpha \left(1 - \rho_c \delta + \frac{\rho_c}{\rho_e} w_n \right) (1-f_{pc}^0) \end{aligned} \quad (1.4)$$

Les fractions volumiques d'anhydre f_c , d'hydrates f_b et de pores capillaires f_{pc} s'écrivent avec les valeurs suivantes de $\rho_e = 1000 \text{ kg/m}^3$ et $\rho_c = 3150 \text{ kg/m}^3$:

$$f_c = \frac{0.32(1-\alpha)}{e/c+0.32} ; f_b = \frac{0.68\alpha}{e/c+0.32} ; f_{pc} = \frac{e/c-0.36\alpha}{e/c+0.32} ; f_e = \frac{e/c-0.42\alpha}{e/c+0.32} \quad (1.5)$$

Powers estime la porosité des hydrates (dans le gel de ciment) à 28%. La porosité totale dans la pâte de ciment est alors :

$$f_p = \frac{e/c-0.17\alpha}{e/c+0.32} \quad (1.6)$$

La réaction se termine lorsque l'un des réactifs est complètement épuisé. Ceci se traduit par $f_e = 0$ ou $f_c = 0$. Dans le premier cas la réaction s'arrête par épuisement de l'eau et il subsiste de l'anhydre dans la pâte de ciment : la valeur maximale du degré d'hydratation est $\alpha_{max} = e/0.42c$. Dans le second cas la quantité d'eau introduite initialement dans le système est suffisante pour hydrater complètement tout le ciment et α_{max} vaut alors 1. La **Figure 1.9** montre suivant le modèle de Powers l'évolution de la fraction volumique des différentes phases en fonction du degré d'hydratation dans une pâte de ciment CEM I (Jensen et Hansen 2001).

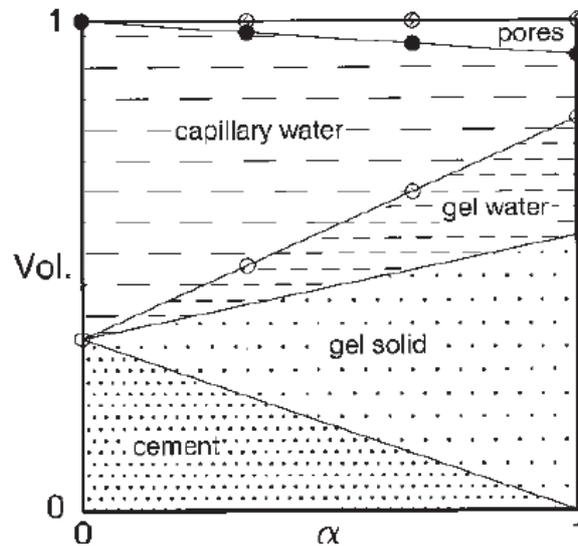
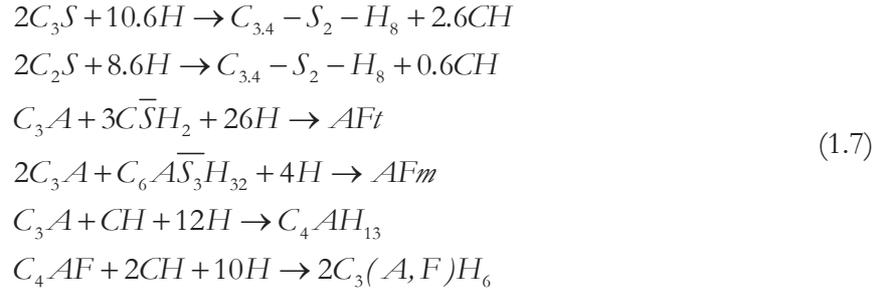


Figure 1.9 : Evolution des fractions volumiques des différents constituants de la pâte de ciment selon le modèle de Powers (Jensen et Hansen 2001).

Modèle de Tennis et Jennings

(Tennis et Jennings 2000) proposent un mécanisme d'hydratation dont les réactions sont régies par les équations bilans suivantes :



Les deux premières réactions de l'équation (1.7) sont celles des deux phases principales du clinker conduisant à la formation des C-S-H. Elles ne diffèrent que de par leur stœchiométrie. L'autre produit de leur hydratation est la portlandite. Les équations 3 à 6 décrivent la formation des aluminates à partir du C_3A et du C_4AF , et en présence de gypse. Le C_3A est très réactif et conduit à la formation rapide d'aluminates de calcium hydratés dont la forme la plus stable est l'hydrogenat. Le gypse vient jouer le rôle de régulateur dans le sens qu'il conduit à former encore plus rapidement de l'ettringite à la surface du C_3A , ce qui ralentit son hydratation.

Le degré d'hydratation des différents réactifs dans le modèle de Tennis et Jennings est donné par l'équation d'Avrami :

$$\alpha_i = 1 - e^{-a_i(t-b_i)^{c_i}} \tag{1.8}$$

avec α_i le degré d'hydratation du réactif $i \in (C_3S, C_2S, C_3A, C_4AF)$, a_i , b_i et c_i des constantes d'hydratation du réactif i et regroupées dans le Tableau 1.2. t est exprimée en jours. Le degré d'hydratation global de la réaction peut donc être s'écrire sous la forme (Bernard et al. 2003; Pichler et al. 2007) :

$$\alpha = \frac{\sum_i m_i \alpha_i}{\sum_i m_i} \tag{1.9}$$

avec m_i la fraction massique du réactif i .

Tableau 1.2 : Constantes de l'équation d'Avrami (Tennis et Jennings 2000)

Réactif	a	b	c
C_3S	0.25	0.90	0.70
C_2S	0.46	0	0.12
C_3A	0.28	0.90	0.77
C_4AF	0.26	0.90	0.55

De manière rigoureuse l'équation d'Avrami ne décrit précisément que les premiers instants (20-30%) de la réaction d'hydratation (Tennis et Jennings 2000). Béjaoui et Bary (2007) proposent pour cela dans le cas d'une pâte de ciment de type CEM I l'équation suivante obtenue à partir de divers résultats expérimentaux donnant le degré d'hydratation final en fonction du rapport e/c :

$$\alpha = 0.239 + 0.745 \tanh \left[3.62(e/c - 0.095) \right] \quad (1.10)$$

En se basant sur la stœchiométrie des différentes équations bilans de l'équation (1.7) on peut déterminer la fraction volumique de chacun des hydrates formés et de la porosité capillaire. Par exemple la fraction volumique des C-S-H est donnée par les deux premières réactions (Pichler et al. 2007) sous la forme :

$$f_{C-S-H} = \left[\alpha_{C_3S} \frac{m_{C_3S}}{M_{C_3S}} \frac{M_{C-S-H}}{2\rho_{C-S-H}} + \alpha_{C_2S} \frac{m_{C_2S}}{M_{C_2S}} \frac{M_{C-S-H}}{2\rho_{C-S-H}} \right] \bar{\rho} \quad (1.11)$$

avec

$$\bar{\rho} = \frac{1}{\sum_i \frac{m_i}{\rho_i} + \frac{e/c}{\rho_H} \sum_i m_i} \quad (1.12)$$

ρ_i et M_i sont respectivement la densité et la masse molaire du réactif i (Tennis et Jennings 2000). Sur la **Figure 1.10** on retrouve l'évolution des fractions volumiques des différentes phases présentes dans une pâte de ciment CEM I à $e/c = 0.5$ et calculées avec le modèle en fonction du degré d'hydratation (Tennis et Jennings 2000).

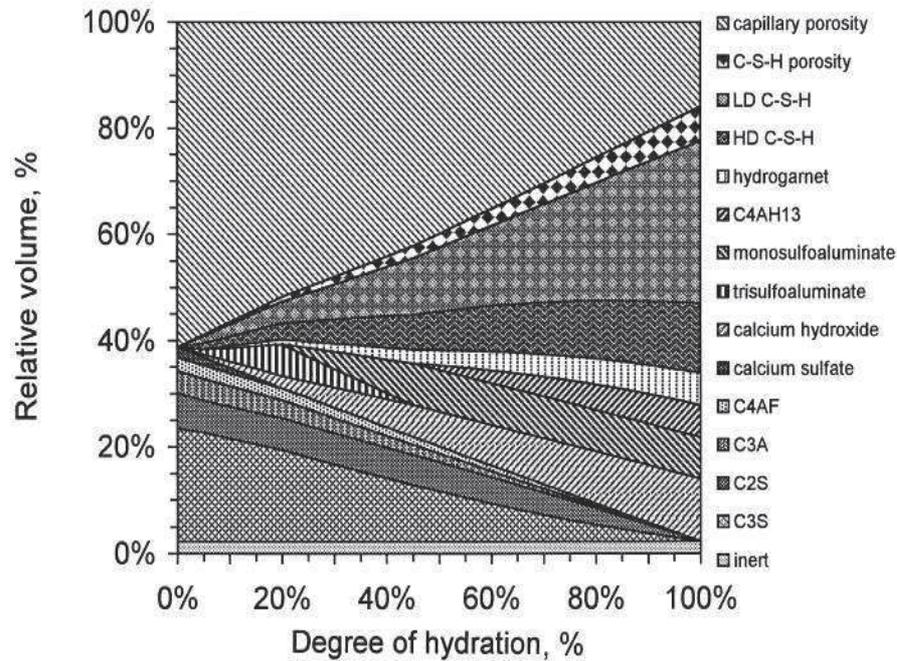


Figure 1.10 : Evolution des fractions volumiques selon le modèle de (Tennis et Jennings 2000) des différentes phases dans une pâte de ciment CEM I $e/c=0.5$ (Composition du ciment : C_3S (55%), C_2S (18%), C_3A (10%), C_4AF (8%)) en fonction du degré d'hydratation.

I.2.2.6- Paramètres mécaniques des hydrates

Récemment grâce à l'avancée de techniques de mesures comme la nanoindentation, on dispose désormais d'une base de données fournie sur les propriétés mécaniques intrinsèques des différentes phases constituant la pâte de ciment, notamment les C-S-H (Velez et al. 2001; Constantinides et Ulm 2004). L'indentation consiste à mesurer la profondeur d'enfoncement d'un indenteur de géométrie connue dans un matériau pour obtenir ses propriétés élastiques (**Figure 1.11**). Les principales propriétés mesurées localement sont le module d'Young E , le coefficient de Poisson ν et la dureté H . Un système d'acquisition enregistre la force appliquée P en fonction de la profondeur de pénétration de la pointe h . Ces deux paramètres sont continuellement mesurés lors d'une phase de charge et d'une phase de décharge. Le résultat est une courbe effort/déplacement (Figure 1.12) qui dépend fortement des conditions d'essais et en particulier de l'ordre de grandeur de la taille de l'indenteur sur le matériau testé. Si le matériau est fortement hétérogène comme les matériaux cimentaires, par exemple, il est indispensable d'avoir un rapport de dimensions d'un ordre de magnitude entre la phase du composite testée et l'indenteur pour être certain de mesurer une quantité intrinsèque à la phase et non pas une combinaison de la phase et de son environnement voisin. Si ces conditions sont réunies, il est alors possible d'évaluer le module d'Young de la phase indentée à travers l'équation (Constantinides et al. 2003) :

$$\frac{1}{E_r} = \frac{1-\nu^2}{E} + \frac{1-\nu_i^2}{E_i} \quad (1.13)$$

E et ν sont respectivement le module d'Young et le coefficient de Poisson de la phase indentée, E_i et ν_i le module d'Young et le coefficient de Poisson de l'indenteur utilisé. La décharge est supposée purement élastique et E_r le module « effectif » est donné par l'équation proposée par (Pharr et Oliver 1992) :

$$S = \frac{dP}{dh} = \beta \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{A_c} E_r \quad (1.14)$$

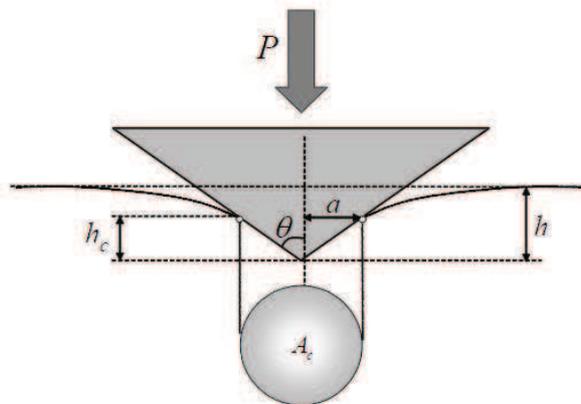


Figure 1.11 Essai d'indentation : P est la force appliquée, h la profondeur d'indentation, h_c est la profondeur de contact, A_c l'aire de contact entre le matériau et l'indenteur (Vandamme 2008).

A_c est l'aire de contact entre l'indenteur et l'échantillon et β est un facteur correctif dépendant du type d'indenteur ($\beta = 1.034$ pour l'indenteur de Berkovich (Velez et al. 2001)).

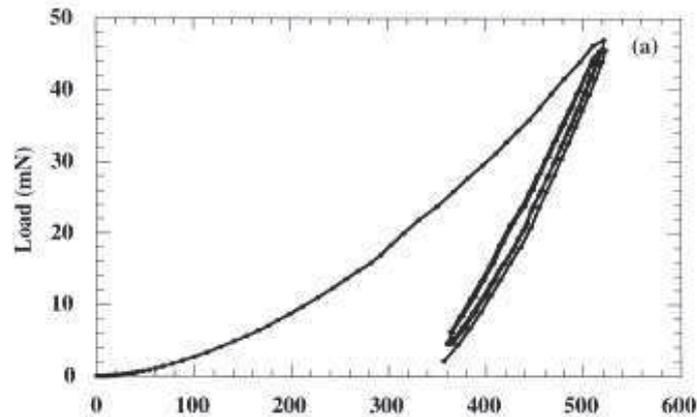


Figure 1.12 : Courbe effort/déplacement ($P-h$) obtenue par nanoindentation du C_3S (Velez et al. 2001).

Plusieurs résultats d'essais d'indentation sur les matériaux cimentaires ont été rapportés dans la littérature. D'abord (Igarashi et al. 1996), en utilisant un indenteur de type « Vickers » avec une profondeur de pénétration $h_{max} = 10^{-5}$ m a eu accès aux paramètres mécaniques de la pâte de ciment à une échelle caractéristique de plusieurs millimètres. Par la suite (Zhu et Bartos 2000) utilisent ce dispositif expérimental pour étudier de manière qualitative les propriétés mécaniques de la zone de transition entre le béton et les armatures dans un béton armé. (Velez et al. 2001) sont probablement les premiers à obtenir pour les principales phases du ciment Portland (C_3S , C_2S , C_4AF , C_3A) les modules d'Young et les coefficients de Poisson. (Acker 2001) de son côté effectue des essais d'indentation sur un matériau ultra haute performance DUCTAL en utilisant un indenteur de type « Berkovich » avec une pénétration d'environ $0.3-0.5 \times 10^{-6}$ m, permettant ainsi d'obtenir à une échelle micrométrique le module d'Young de la portlandite (CH) et du gel de C-S-H pour différents rapports C/S. Récemment sur la base d'essais réalisés sur une pâte de ciment CEM I à rapport e/c = 0.5 avec un indenteur de type « NanoTest 200 Berkovich » (Constantinides et Ulm 2004) proposent pour les deux types de C-S-H (HD et LD C-S-H) les module d'Young et les coefficients de Poisson dans le cas d'un matériau sain et d'un matériau dégradé. Les tests de nanoindentation sur les C-S-H sont effectués sur des surfaces de l'ordre d'au moins $1 \mu m^2$. Cette surface est susceptible de contenir une porosité fine ($< 1 \mu m$) et une certaine fraction des autres hydrates qu'il est assez difficile de quantifier. Cependant les deux phases de C-S-H sont considérées comme des phases dans lesquels se retrouvent les hydrates comme l'AFt et l'hydrogenat et qui sont supposés avoir les mêmes propriétés élastiques que celles mesurés pour les C-S-H. Le **Tableau 1.3** regroupe les valeurs du module d'Young et du coefficient de Poisson des principales phases présentes dans une pâte de ciment saine et dégradée.

Tableau 1.3 : Propriétés élastiques des différentes phases d'une pâte de ciment saine et dégradée. (extrait de (Stora 2007)).

Phases	Matériau sain		Matériau dégradé		Références
	E(GPa)	ν	E(GPa)	ν	
CH	42.3	0.324	0	0	(Monteiro et Chang 1995)
	38	0.1			(Constantinides et Ulm 2004)
Grain de ciment anhydre	117.6	0.314	117.6	0.314	(Boumiz et al. 1996)
Porosité	0	0	0	0	
AFt, Hydrogenat C ₄ AH ₁₃	22.4	0.25	0	0	(Kamali 2003)
	25	0.25			(Haecker et al. 2005)
AFm	42.3	0.324	0	0	(Kamali 2003)
C-S-H (gel de C-S-H sans distinction de LD et HD C-S-H)	22.4	0.25	22.4	0.5	(Velez et al. 2001)
LD C-S-H	21.7	0.24	3	0.24	(Constantinides et Ulm 2004)
HD C-S-H	29.4	0.24	3	0.24	(Constantinides et Ulm 2004)

I.2.3- La porosité et la structure poreuse

La porosité des matériaux cimentaires a un caractère multi-échelle, les familles de pores ont des dimensions s'étalant sur plusieurs ordres de grandeur, de quelques nm à plusieurs mm bulles d'air occlus comprises. Pour mesurer la porosité totale des matériaux cimentaires une des techniques est de mesurer la perte de masse entre le matériau saturé et le matériau séché (Gallé 2001). La caractérisation de la structure du réseau poreux des matériaux cimentaires peut aussi s'effectuer par d'autres techniques expérimentales telles que la porosimétrie mercure (MIP est le terme en anglais), l'adsorption de gaz, ou encore la microscopie électronique à balayage. Elles sont complémentaires entre elles, une seule n'étant pas en mesure de fournir une indication précise sur toute la gamme de diamètres de pores sondée. D'autres techniques plus récentes comme la microtomographie permettent d'augmenter la précision des mesures (Burlion et al. 2006; Bentz et al. 2008). La porosité des matériaux cimentaires à utiliser dans les formulations poro-mécaniques est toujours sujette à débat. En effet l'eau dans une partie de cette porosité étant considérée comme structurale, se pose la question de la validité de la poromécanique « classique » des milieux poreux à cette échelle de la microstructure ou la chimie rejoint la mécanique (Ulm et al. 2004). Récemment, suite à des résultats expérimentaux sur le comportement poro-mécanique des matériaux cimentaires, (Ghabezloo 2008) suggère que la porosité à utiliser dans les formulations poro-mécaniques doit être inférieure à la porosité totale de la pâte de ciment, mesurée en séchant l'échantillon à 105°C car celle-ci comprend une partie de la porosité interfoliaire. D'après l'auteur la porosité qui doit être utilisée est vraisemblablement la porosité de l'eau libre qui peut être mesurée en mettant le matériau en équilibre à 11% d'humidité relative. Cette porosité pour des pâtes de ciment à e/c inférieur à 0.5 peut dans ce cas être approximée par celle mesurée par MIP.

Tableau 1.4 : Classification des pores dans une pâte de ciment CEM I durcie selon (Jennings et Tennis 1994)

Nature des pores	Diamètre	Humidité relative (%)	Description	Influence
Bulle d'air	0.1 – 1 mm		Bulles quasi-sphériques	Cycles de gel-dégel
Pores capillaires (1)	50 nm -10 μ m	98	Grands capillaires	Résistance, Durabilité,
Pores capillaires (2)	10-50 nm	90	Petits capillaires	Résistance, Durabilité Retrait à haute HR
Pores de gel				
Open-gel (3)	1-10 nm	20	Pores dans les LD C-S-H	Retrait, Fluage
Dense-gel (4)	1.2 nm	0	Pores dans les HD C-S-H	Retrait, Fluage
Mono-layer (5)	< 0.5 nm	0	Pores intra-globulaires des C-S-H	Fluage

La frontière entre les différentes familles de pores des matériaux cimentaires n'est pas non plus clairement établie (Baroghel-Bouny 1994; Diamond 1999; Igarashi et al. 2004). Néanmoins une classification des pores est proposée par (Jennings et Tennis 1994) et illustrée dans le Tableau 1.4. Ils différencient trois grandes classes de pores, les bulles d'air, les pores capillaires et les pores du gel C-S-H. L'humidité relative à laquelle ils sont susceptibles de se vider ainsi que leurs rôles dans les déformations différées sont également précisés.

I.2.3.1 La porosité du gel de C-S-H

C'est la porosité intrinsèque du gel de C-S-H. Powers (1947) estime cette porosité à environ 28% indépendamment du rapport e/c et du degré d'hydratation. La taille moyenne est estimée à environ 1.8 nm. D'après le modèle morphologique de (Feldman et Sereda 1968), deux sortes de pores du gel de C-S-H sont considérées: les pores intra-cristallites correspondant aux espaces inter-feuillets et les pores inter-cristallites correspondant aux espaces inter-lamellaires créés par l'espacement désordonné des feuillets. Selon le modèle de Jennings cette porosité représente 24% des HD C-S-H et 36% des LD C-S-H (Tennis et Jennings 2000). Cette porosité est considérée comme étant en permanence partiellement saturée, par de l'eau qui est forcément adsorbée dans ces pores de très petite taille.

I.2.3.2 La porosité capillaire

C'est l'espace non rempli par les produits formés au cours de l'hydratation. Elle diminue avec le rapport e/c. Plus ce rapport est élevé, plus l'espace initialement compris entre les hydrates et à combler est important. Les pores capillaires ont une forme très irrégulière et sont d'assez grande taille pour être détectés par MEB ou par MIP. Beaucoup de paramètres macroscopiques des

matériaux cimentaires tels que la résistance mécanique ou encore la perméabilité sont directement reliés à la valeur de cette porosité.

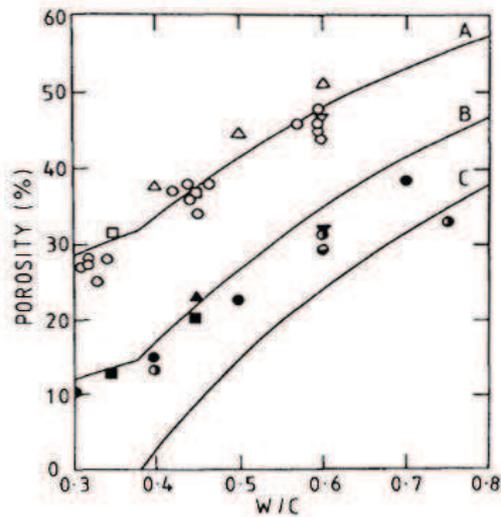


Figure 1. 13 : Relations entre les porosités d'une pâte de ciment durcie et le rapport e/c . Les courbes sont issues du modèle de (Powers et Brownnyard 1947) ; A : porosité totale à l'eau, B : porosité de l'eau libre, C : porosité capillaire. Les données expérimentales correspondent à la porosité totale (symboles non remplis) et la porosité au mercure (symboles remplis) (Taylor 1997).

A titre d'illustration, la **Figure 1. 13** présente la relation entre les différentes porosités (à l'eau, libre et capillaire) calculées à l'aide du modèle de (Powers et Brownnyard 1947) et le rapport e/c . Les données expérimentales correspondent aux mesures de la porosité totale à l'eau et de la porosité au mercure (Taylor 1997).

1.2.3.3 La distribution de taille de pores

La distribution de taille de pores a une importance significative sur les propriétés de transport de la pâte de ciment durcie de même que la porosité totale elle-même (Hagymassy et al. 1972; Mehta et Monteiro 2005). Sa détermination peut être effectuée par plusieurs méthodes dont la porosimétrie par intrusion mercure par exemple qui reste la plus utilisée et qui repose sur le caractère non mouillant du mercure. Dans ce cas l'échantillon est placé dans une cellule mise sous vide, puis remplie de mercure sous une pression qui augmente de façon incrémentale. On mesure alors le volume cumulé de mercure V_{HG} entrant dans les pores à chaque incrément. On suppose classiquement que les pores sont cylindriques et on calcule grâce à l'équation de Washburn, le rayon d'accès aux pores (Gallé 2001) :

$$r_p = -\frac{2\gamma_{HG} \cos \theta}{P_{HG}} \quad (1.15)$$

où r_p est le rayon d'accès des pores (m), γ_{HG} la tension superficielle de mercure (0.474N.m^{-1}), $\theta=141.3$ est l'angle de contact entre la surface solide et le mercure et P_{HG} la pression de mercure appliquée. On obtient la courbe d'intrusion du mercure qui représente le volume cumulé de mercure introduit en fonction des rayons des pores accessibles. Par différenciation logarithmique on construit également la distribution des volumes poreux en fonction des rayons de pores : $f(r_p) = \Delta V_{HG} / \Delta \ln(r_p)$. La **Figure 1.14** montre les distributions de la taille de pores obtenues sur deux pâtes obtenues par porosimétrie par intrusion de mercure de ciment CEM I et CEM V à $e/c = 0.4$ (Gallé 2001).

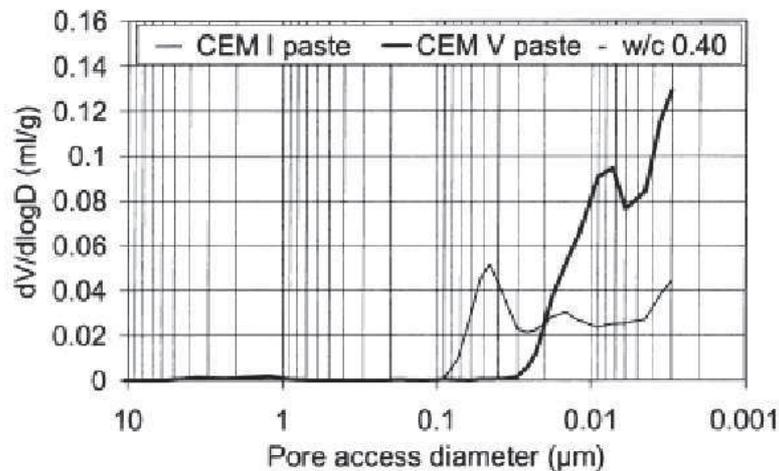


Figure 1.14 : Résultats de porosimétrie par intrusion de mercure sur pâtes de ciment CEM I et CEM V à $e/c = 0.4$ (Gallé 2001).

Il convient de rester prudent quant à l'exploitation des courbes de distribution poreuse obtenue par porosimétrie par intrusion de mercure comme l'a soulevé Diamond (2000). L'auteur met en évidence la différence significative remarquée entre la taille des pores obtenue par porosimétrie par intrusion mercure et celle obtenue par imagerie par électrons rétrodiffusés sur surface polie. Dans les pores de forme « de bouteille d'encre » par exemple, les pores internes ne sont accessibles que par des entrées beaucoup plus fines et sont considérés plus petits qu'ils ne le sont en réalité. En fait la méthode surestime (respectivement sous-estime) le volume réel des petits pores (respectivement des gros pores). De plus le préconditionnement auquel est soumis le matériau (séchage à 105°C) peut l'endommager et conduire notamment à l'apparition de microfissures, ce qui modifierait le réseau poreux.

I.2.4- L'état de l'eau dans la pâte de ciment

L'eau est présente dans les matériaux cimentaires sous plusieurs formes selon la nature de sa liaison avec la matrice cimentaire : l'eau capillaire (condensée dans les pores capillaires), l'eau adsorbée ou l'eau chimiquement liée. La **Figure 1.15** présente de façon schématique les

différentes sortes d'eau évaporable et non évaporable telle que distinguées dans (Powers et Brownyard 1947; Baroghel-Bouny 1994).

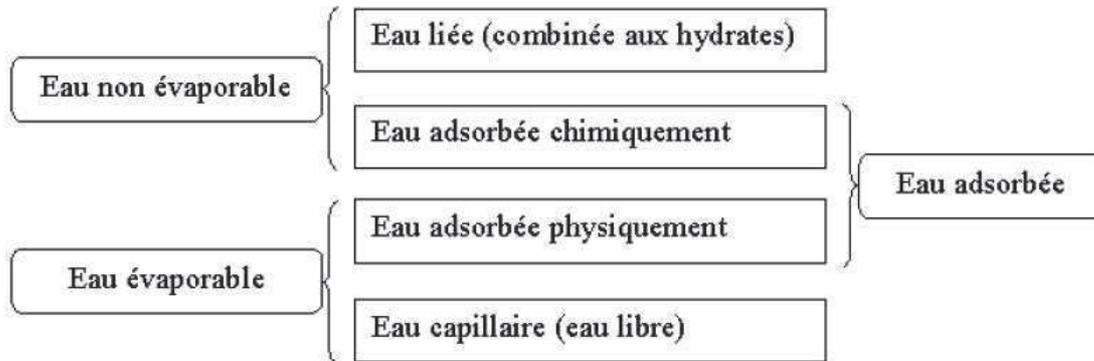


Figure 1.15 : Etat de l'eau dans les matériaux cimentaires : eau évaporable et non évaporable (Delmi 2004).

- L'eau capillaire

C'est la quantité d'eau qui n'a pas réagi avec le ciment et qui se retrouve dans les pores capillaires. Elle est dite libre, non soumise aux forces d'attraction des surfaces solides. Elle est la première à s'évaporer lors d'un chauffage ou d'un séchage.

- L'eau adsorbée

Une partie de l'eau présente dans les matériaux cimentaires se trouve adsorbée sur la surface des C-S-H. Cette eau est considérée comme non évaporable. Selon que l'énergie des forces de liaison est forte ou faible, on parle d'eau physio ou chimiosorbée. Dans le premier cas, les forces d'attraction sont de type Van Der Waals d'une intensité de l'ordre d'une centaine de Kilojoules. Le nombre de molécules adsorbées varie en fonction de l'humidité relative. Chimiquement l'adsorption s'établit par la mise en commun des électrons entre l'eau et la surface solide. C'est cette adsorption qui a lieu dans le mouillage des grains de ciment et forme par simple condensation un film relativement uniforme sur toute la surface qu'elle occupe.

- L'eau chimiquement combinée

Cette eau est combinée chimiquement aux produits formés au cours de l'hydratation. Elle fait partie intégrante du matériau et n'est plus considérée comme faisant partie de la phase liquide du matériau, c'est une eau structurelle. L'eau dans les C-S-H est à l'origine de déformations macroscopiques (retrait de dessiccation, fluage etc..) dans les situations de séchage ou d'humidification :

- L'eau dans les C-S-H

L'eau dans le gel de C-S-H a été identifiée sous trois formes différenciées ici par l'énergie de liaison avec le solide (**Figure 1.16**). Par ordre décroissante d'énergie de liaison on a (Sierra 1974).

- L'eau hydroxylique (groupement OH) : elle est liée aux atomes de calcium et de silicium à la surface des feuillets de CSH.
- L'eau interfoliaire : elle est liée aux feuillets par des groupements hydroxyles et intervient dans la cohésion intrinsèque des lamelles de CSH.
- L'eau interlamellaire : elle est soit fixée à la surface des lamelles par un hydroxyde, soit liée à d'autres molécules d'eau.

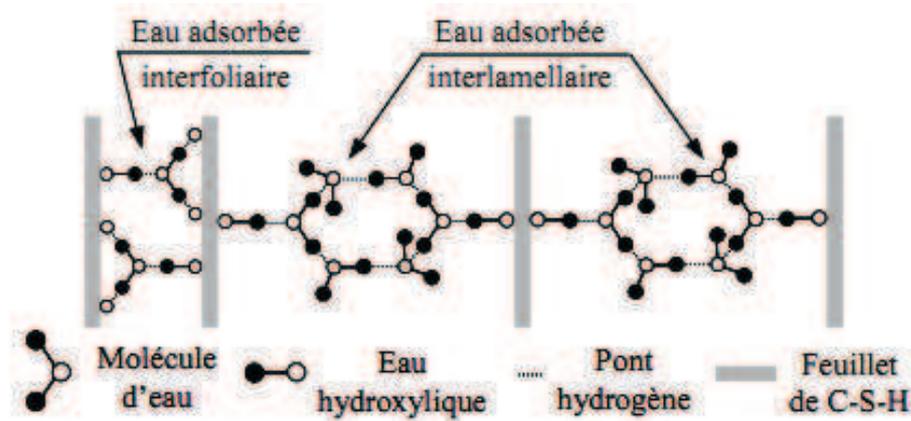


Figure 1.16 : Etat de l'eau dans le gel de C-S-H (Sierra, 1974).

- L'eau dans les zones d'adsorption empêchée

Pour une humidité relative proche de 100%, jusqu'à 5 molécules d'eau sont adsorbées sur une surface plane. L'épaisseur de la couche d'adsorption est donc de 13 Å puisque la taille d'une molécule d'eau est d'environ 2.6 Å. Pour une adsorption libre l'espace disponible entre deux surfaces absorbantes doit être au minimum de 26 Å. Or la distance interfoliaire (espace entre feuillets) dans les C-S-H est en moyenne proche de 17 Å. L'adsorption est empêchée, les surfaces absorbantes étant très proches. Cette pression appelée pression de disjonction s'oppose aux forces d'attraction, qui existent entre les particules de C-S-H et qui maintiennent la structure du squelette. Cette pression est ainsi un élément structurel à part entière du matériau. Ce phénomène est illustré par (Bazant 1972) sur la **Figure 1.17**.

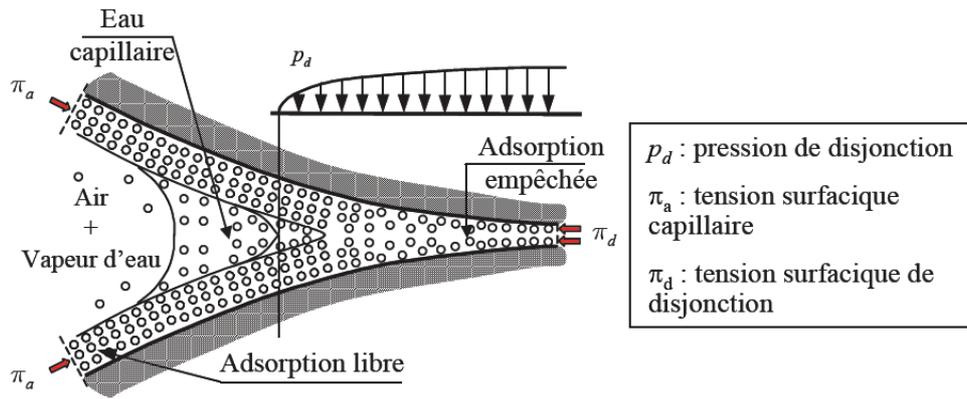


Figure 1.17 : Phénomène d'adsorption empêchée à l'origine de la pression de disjonction (Bazant 1972) tirée de (Benboudjema 2002).

I.2.5-Modèles de microstructure de la pâte de ciment

Dans une approche de type homogénéisation des propriétés effectives de la pâte de ciment, la microstructure sur laquelle repose le modèle est d'une importance significative. Nous nous intéressons ici à des modèles qui proposent une description de la microstructure de la pâte de ciment, c'est-à-dire de l'arrangement des phases hydratées les unes par rapport aux autres et à la phase anhydre. Ces modèles sont de deux sortes : les modèles analytiques qui sont souvent dédiés à l'estimation d'une ou plusieurs propriétés en particulier et les modèles numériques qui peuvent être utilisés pour reproduire de façon beaucoup plus globale le comportement de la pâte de ciment sous diverses sollicitations. Il s'agit souvent dans le deuxième cas de modèles couplés hydratation/microstructure. On présente à travers trois de ces modèles les plus en vue, à savoir les modèles CEMHYD3D (Bentz 1997), IKPM (Navi et Pignat 1996) et HYMOSTRU (Van Breugel 1991) la microstructure de la pâte de ciment telle qu'elle est représentée.

I.2.5.1 Le modèle CEMHYD3D

Le modèle CEMHYD3D (Bentz 1997) est développé par le NIST (National Institute of Standard and Technology). Il s'agit d'un ensemble d'algorithmes qui permettent de générer numériquement une pâte de ciment. C'est un modèle basé sur des voxels (l'équivalent en 3D d'un pixel) où les mécanismes physico-chimiques comme la dissolution, la nucléation et la croissance des hydrates sont pris en compte et implémentés par le biais de « cellules automates ». Les espèces solides en présence, une fois dissoutes sont transformées en espèces diffusantes comme du $C_3A^* = C_3A$ diffusant. Elles peuvent alors se déplacer de manière aléatoire au sein de la microstructure comme des ions en solution. Lorsqu'elles rencontrent d'autres espèces avec lesquelles elles sont susceptibles de réagir suivant les équations d'hydratation qui sont spécifiées dans le modèle, il se forme à l'endroit de la collision les produits de la réaction. A une phase donnée est attribuée différents paramètres comme la probabilité de dissolution, de nucléation etc... La microstructure est ainsi générée aléatoirement sous forme de voxels et se veut la plus proche possible d'une microstructure « réelle ». La **Figure 1.18** présente la microstructure initiale d'une pâte de ciment

à rapport $e/c = 0.25$ avant le début de l'hydratation (à gauche) et la microstructure correspondant à un degré d'hydratation $\alpha=0.63$ (à droite). Il existe une version du modèle qui prend en compte les formes réelles (Figure 1.8) des grains de ciment. Le point de départ est donc une observation par micrographie complétées par un retraitement informatique des images des grains de ciment permettant d'obtenir la granulométrie mais aussi la composition minéralogique des grains de ciment. Récemment une version améliorée du modèle permet de prendre en compte l'effet de l'ajout de fumée de silice sur les résultats d'hydratation. La microstructure générée par le modèle CEMHYD3D est souvent couplée à des codes éléments finis pour simuler numériquement le comportement des matériaux cimentaires. C'est le cas par exemple dans (Bernard et Kamali-Bernard 2010), où le modèle CEMHYD3D est utilisé pour générer les volumes élémentaires représentatifs de la pâte de ciment et du mortier dans une approche de type multi-échelle, et où les propriétés mécaniques et de transport du matériau lixivié sont déterminées par le code de calcul ABAQUS.

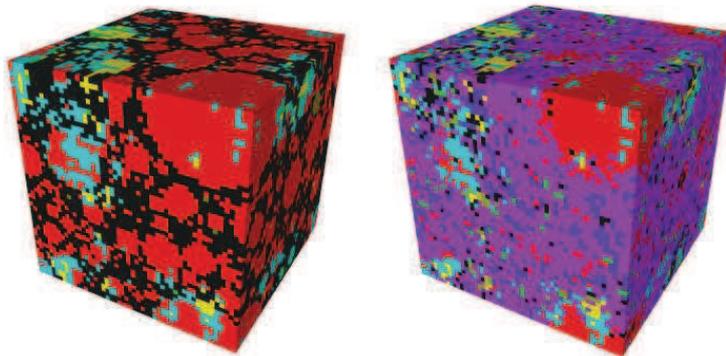


Figure 1.18 : Microstructure 3D $50 \times 50 \times 50 \mu\text{m}$ initiale (gauche) d'une pâte de ciment $e/c = 0.25$ et à un degré d'hydratation (droite) $\alpha = 0.63$. (Rouge = C_3S , Vert = C_3A , Jaune = C_4AF , Noir = porosité, violet = $C-S-H$, Bleu = CH).

I.2.5.2 Le modèle HYMOSTRUC

C'est le modèle développé par Van Breugel (Van Breugel 1991; Van Breugel 1995; Van Breugel 2004) à l'Université de Technologie de Delft (TU Delft). Il est basé sur la représentation des particules de grains de ciment anhydre sous forme circulaire en 2D et sphérique en 3D. Les paramètres d'entrée sont la granulométrie du ciment ainsi que sa composition minéralogique, le rapport e/c et la température. L'hydratation se traduit par une expansion des grains de ciment. La **Figure 1.19** présente les deux mécanismes d'expansion qui sont considérés dans le modèle. À gauche le grain de ciment est isolé et son accroissement de volume se fait librement, c'est-à-dire que les produits formés par dissolution se déposent de façon homogène autour du grain provoquant une augmentation radiale de volume. La dissolution et l'expansion des particules se produisent concentriquement. Dans la partie droite, il y a interaction entre les particules voisines en cas de percolation des phases solides. Deux types d'hydrates sont distingués dans ce modèle : les hydrates qui se forment autour du grain initial sont appelés « outer product » et les hydrates

qui se forment au sein du grain initial après consommation d'une couche de grains anhydre sont appelés « inner product ». Pour chaque particule, la cinétique d'hydratation est gérée par son degré d'hydratation. Cette cinétique dépend de l'humidité relative, de la consommation d'eau, de la température, de la diffusion de l'eau à travers la couche d'hydrate et du diamètre de la particule. Il est possible d'estimer des paramètres comme la porosité ou les caractéristiques diffusives du matériau (Van Breugel et Koenders 2000), ou d'autres grandeurs caractéristiques comme la résistance à la compression en couplant le modèle à un code aux éléments finis (Schlangen et al. 2007), ou encore le retrait endogène (Lura et al. 2003).

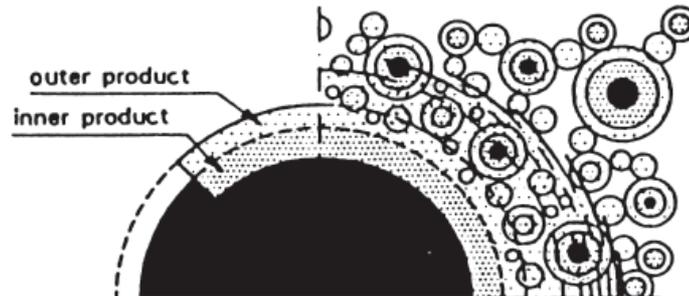


Figure 1.19 : Représentation de la microstructure et des couches d'hydrates (Van Breugel 1995).

I.2.5.3 Le modèle Integrated Particles Kinetic Model (IPKM)

Ce modèle est développé à l'EPFL par P. Navi et C. Pignat (Navi et Pignat 1996; Navi et Pignat 1999). Il est basé sur l'hydratation exclusive du C_3S , les auteurs considèrent que c'est la phase principale du ciment et que son hydratation prédomine dans l'ensemble du processus. Les produits formés sont la portlandite (CH) et le silicate de calcium hydraté (C-S-H). La microstructure 3D initiale est constituée de grains sphériques de diamètres et de dispositions aléatoires. Les C-S-H se forment autour des grains de ciment, tandis que les cristaux de portlandite, précipitent et croissent autour des sites de nucléation réparties aléatoirement dans le réseau et dont le nombre est déterminé par une formule empirique établie par (Bentz et Garboczi 1991). Le modèle considère les mêmes quantités de C-S-H HD et C-S-H LD formés. La microstructure ainsi générée numériquement donne une représentation en pixels de la pâte de ciment comme un milieu poreux dont la phase solide est triphasique, le grain de ciment anhydre, le CH et le C-S-H. La **Figure 1.20** présente les coupes d'un échantillon numérique d'une pâte de ciment avant et après l'hydratation complète. Bishnoi (Bishnoi et Scrivener 2009) a proposé une amélioration de ce modèle avec une approche vectorielle de la représentation de la microstructure (le modèle μic) et en considérant les phases anhydres autres que le C_3S . Les modèles que nous avons vus proposent une description de la microstructure de la pâte de ciment en fonction des cinétiques d'hydratation qui y sont spécifiées.

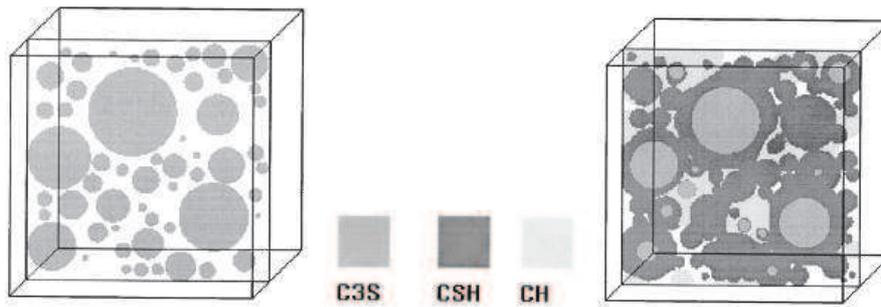


Figure 1.20 : Coupes d'échantillons numériques d'une pâte de ciment avant et après hydratation du modèle de (Navi et Pignat 1996).

La principale remarque qu'on pourrait retenir est que les modèles, notamment les modèles IKPM et HYMOSTRUC considèrent des grains de ciment anhydre sphériques et l'évolution de la microstructure est représentée par la formation d'hydrates autour de ces grains. Le modèle HYMOSTRUC considère l'hydratation des quatre constituants principaux et distingue deux sortes de produits, les « outer » et les « inner » alors que le modèle de Pignat ne considère que l'hydratation du C_3S et ne distingue qu'une seule phase de C-S-H. Par contre la morphologie adoptée dans le modèle CEMHYD3D est beaucoup plus aléatoire, le but principal étant de se rapprocher le plus possible d'une microstructure réelle. En résumé, de la comparaison de ces trois modèles, il n'en ressort aucun consensus sur la microstructure des matériaux cimentaires à l'échelle de la pâte de ciment.

I.2.6- Microstructure du mortier/béton

Dans les mortiers et les bétons la microstructure de la pâte de ciment est modifiée au voisinage des granulats. Cette interface entre la pâte de ciment et les granulats identifiée pour la première fois par (Farran 1956) est nommée « l'auréole de transition » ou la « zone de transition interfaciale » (ITZ). Dès lors beaucoup d'auteurs considèrent le mortier comme un matériau triphasique : les granulats, l'ITZ et la pâte de ciment. Malgré la pléthorie d'études relatives à l'ITZ, il existe encore beaucoup de désaccords entre les chercheurs sur la définition, les caractéristiques et même sur la réelle influence de l'ITZ sur les propriétés du mortier/béton.

I.2.6.1 Les granulats

Ils représentent à peu près 60 à 75% du volume dans les bétons. On distingue trois types de granulats dans les mortiers et dans les bétons. Les sables, ce sont des particules de diamètre inférieur à 5 mm et représentent environ 50% du volume des mortiers, les gravillons de diamètre entre 5 et 10 mm et les cailloux de diamètre compris entre 10 et 40 mm. Les granulats jouent un rôle important dans les performances mécaniques du matériau. En effet ils possèdent de meilleures caractéristiques mécaniques que la pâte de ciment. Les granulats ayant une porosité élevée vont particulièrement influencer sur le comportement hydrique du matériau, ceux-ci pouvant

absorber ou rejeter de l'eau dans les pores. En général plusieurs caractéristiques sont à prendre en compte dans le choix des granulats : la minéralogie, la forme de ces granulats et la granulométrie. Les granulats peuvent être d'origine naturels (d'origine minérale sans transformation autre que mécanique) artificiels (d'origine minérale, transformés, e.g. le schiste expansé ou les granulats de laitier) ou recyclés (e.g. les granulats concassés). Les plus couramment utilisés dans les constructions en béton sont les granulats naturels siliceux ou calcaire. La granulométrie représente la distribution de taille des granulats dans un matériau donné. Elle est choisie pour réduire au maximum le vide dans le matériau et optimiser la compacité du béton.

I.2.6.2 L'auréole de transition

L'interface de transition est souvent décrite comme une zone dont l'épaisseur varie de 15 à 40 μm (Garboczi et Bentz 1996) et même jusqu'à 100 μm (**Figure 1.21**) (Ke et al. 2010). Cette épaisseur est variable et dépend principalement du rapport e/c (Elsharief et al. 2003), de la granulométrie du ciment (Monteiro et al. 1985) ou encore des propriétés granulométriques et minéralogiques des granulats (Tasong et al. 1998; Tasong et al. 1998). La diminution du rapport e/c conduit par exemple à un rétrécissement de l'ITZ. En revanche la taille des granulats n'aurait aucun effet significatif sur la taille de l'ITZ. Ce qui permet dans les modélisations d'attribuer une épaisseur d'ITZ constante tout autour des granulats.

D'après les observations expérimentales (Diamond et Huang 2001), elle est constituée de C-S-H, d'ettringite et de cristaux de portlandite orientés perpendiculairement à la surface du granulat. Elle est considérée comme une zone de faiblesse du matériau du fait que la fissuration s'initie le plus souvent dans cette zone. En effet elle est beaucoup plus poreuse que la pâte de ciment (Lutz et Zimmerman 2005), ce qui lui confère des propriétés mécaniques très faibles. Cette faible résistance mécanique est aussi due en partie à de l'eau qui est restée sous les granulats lors du gâchage.

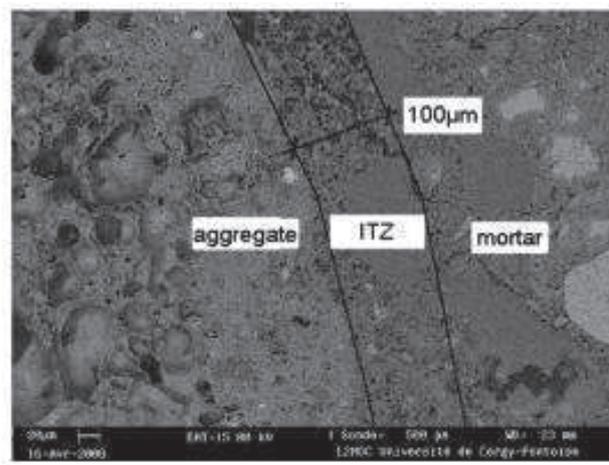


Figure 1.21 :Image MEB de l'interface de transition ITZ dans un béton (CEM I 52.5, e/c=0.44) (Ke et al. 2010).

Bourdette (Bourdette et al. 1995) obtient un rapport de 3 entre la porosité de l'ITZ (42%) et celle de la pâte de ciment (19%) pour un mortier CEM I ($e/c = 0.4$; 52% de sable). Ces résultats sont proches de ceux obtenus par (Scrivener et al. 1988) pour un mortier similaire. Les propriétés mécaniques de l'ITZ sont délicates à identifier expérimentalement, ce qui entraîne une dispersion non négligeable dans les résultats dans la littérature. Certains auteurs proposent une analyse inverse par des modèles d'homogénéisation pour déterminer le module d'Young de l'ITZ une fois que celui du mortier et de la pâte de ciment le constituant sont connus (Hashin et Monteiro 2002). La dispersion observée autour du module d'Young de l'ITZ est résumée par (Sun et al. 2007) à travers l'équation :

$$E_{ITZ} = aE_{hp} \quad (1.16)$$

avec E_{hp} et E_{ITZ} les modules d'Young de la pâte de ciment et de l'ITZ, a un paramètre qui est souvent compris entre 0.2 et 0.8 qui dépend de l'épaisseur de l'ITZ retenue par les différents auteurs (Ramesh et al. 1996; Yang 1998; Hashin et Monteiro 2002). Par exemple pour (Hashin et Monteiro 2002), l'épaisseur retenue est de 24 μm avec $a = 0.5$, tandis que pour (Yang 1998) l'épaisseur est de 40 μm pour un paramètre $a = 0.7$. Notons également que beaucoup d'études ont mis en évidence des gradients de propriétés (porosité, module d'Young etc..) dans l'ITZ (Nadeau 2002). A mesure que l'on s'approche de la surface des granulats dans l'ITZ on observe un déficit croissant de grains de ciment non hydratés. Il en résulte un arrangement des grains de ciment anhydre plus lâche et un rapport e/c qui diminue au cœur de la pâte de ciment vers la surface des granulats. Ce phénomène connu sous le nom d'« effet de paroi » produit des gradients microstructuraux entre le cœur de la pâte de ciment et la zone d'interface. Scrivener et Nematì (1996) ont noté une augmentation de la porosité de 25-30% dans une zone située à environ 35 à 45 microns de la surface des granulats. Néanmoins Neubauer *et al* (1996) estiment que les propriétés de l'ITZ peuvent être considérées homogènes sur une épaisseur de 20 μm .

I.2.7- Influence de la microstructure sur le retrait des matériaux durcis

Le déséquilibre hygrométrique créé entre le matériau et le milieu extérieur par l'humidification ou le séchage provoque des variations dimensionnelles telles que le gonflement ou le retrait pouvant entraîner la fissuration. Les mécanismes microstructuraux à l'origine de ces variations de volumes ont fait l'objet de plusieurs études (Powers 1968; Bazant 1972; Setzer et Wittmann 1974) mais ne font toujours pas l'unanimité parmi les auteurs. Néanmoins trois forces sont souvent considérées comme responsable du retrait. Si on se réfère aux trois modèles microstructuraux les plus cités proposant d'expliquer le phénomène de retrait à savoir le modèle de Munich (Wittmann 1968), le modèle de Feldman et Sereda (Feldman et Sereda 1968) et le modèle de Powers (Powers 1968), les domaines d'humidité relative des principales forces du retrait s'échelonnent entre eux tels que présentés dans le **Tableau 1.5**.

Tableau 1.5 : Différents mécanismes de retrait de dessiccation et leur domaine d'action (d'après Soroka 1979 cité dans (Kovler et Zbutovsky 2006)).

	Humidité relative (%)					
	0	20	40	60	80	100
Powers (1968)						
Feldman & Sereda (1968)						
Wittmann (1968)						

On propose d'expliciter brièvement les différentes contributions des trois principales forces responsables du retrait à savoir la pression capillaire, la pression de disjonction et les tensions superficielles.

La variation de la pression capillaire

La pression de vapeur saturante correspondant à une humidité relative $h_r = 100\%$ est la pression à laquelle on a un équilibre entre la phase liquide et la phase gazeuse. Une diminution de l'humidité relative dans le matériau cimentaire se traduit par une évaporation de la phase liquide. La coexistence des deux phases liquide et gazeuse conduit à la création d'un ménisque à l'interface liquide/gaz et par conséquent des forces capillaires. La diminution de la quantité d'eau accentue ces tensions capillaires. Ce phénomène est explicité par la relation de Kelvin-Laplace que nous verrons plus en détail dans le chapitre II. Afin que le système global soit en équilibre, il faut que le squelette solide subisse une contrainte en compression, d'où la diminution élastique du volume, c'est-à-dire le retrait. Selon (Ferraris 1986), à tous les stades on a équilibre entre la force de traction et celle de compression. Par conséquent on peut supposer qu'à un certain stade quand l'eau s'est totalement évaporée c'est-à-dire au moment où les forces capillaires n'agissent plus, le solide retrouve sa dimension initiale. Or on n'observe pas un gonflement, ce qui tend à indiquer qu'il faudrait mettre en jeu d'autres forces responsables du retrait.

La variation des tensions superficielles

Lorsqu'une molécule est à l'intérieur d'un corps, il subit des forces dans toutes les directions de façon uniforme. Par contre lorsqu'elle se trouve sur la surface d'un solide, une force résultante perpendiculaire à la surface agit sur elle. La force perpendiculaire induit une contrainte de compression dans le solide. La tension résultante est la tension superficielle. Dans le cas des matériaux cimentaires cette tension peut atteindre jusqu'à 250N/mm^2 . Les variations de volume que peuvent induire la variation de cette contrainte ne sont donc pas négligeables. On sait que la surface spécifique des C-S-H est très élevée. Une quantité importante d'eau peut être adsorbée sur la surface solide. L'énergie surfacique des C-S-H est directement liée à l'épaisseur du film

d'eau adsorbé. Lorsque l'humidité relative interne diminue, l'épaisseur de l'eau adsorbée à la surface diminue, ce qui produit une augmentation de la tension superficielle et pour rétablir l'équilibre il se produit une contraction du solide et donc une déformation de retrait. Cette théorie du retrait peut sembler non justifiée pour une humidité relative au dessus de 40-50%. En effet (Powers 1968) estime qu'au-delà de cette gamme d'humidité relative, les molécules adsorbées n'agissent plus sur les tensions superficielles.

La variation de la pression de disjonction

La pression de disjonction comme nous l'avons vu précédemment dépend de l'épaisseur de l'eau adsorbée, donc dépend de l'humidité relative. Lorsque l'épaisseur de la couche croît avec l'humidité, du fait de la pression de disjonction, il se produit un gonflement de la structure. Inversement, si l'humidité relative diminue, l'épaisseur diminue et donc un retrait est observé. Powers estime que ce mécanisme est applicable à tout le domaine d'humidité relative.

I.3 Impact de la température sur la microstructure

Lorsque les matériaux cimentaires sont exposés à un échauffement, il se produit des phénomènes physico-chimiques qui sont à l'origine de la modification de leur microstructure. Nous allons décrire ces modifications et la fissuration thermique qu'elles provoquent et qui affectent de manière non réversible la microstructure du matériau.

I.3.1 Evolution des différentes phases

Quand bien même les gammes de température qui concernent cette étude sont limitées à 200°C nous allons rappeler dans un cadre plus global les différentes transformations de la matrice cimentaire depuis la température ambiante jusqu'à 1300°C, température à laquelle le matériau se décompose totalement. Les différentes étapes identifiées (par des analyses de thermogravimétrie notamment) dans la modification de la microstructure sont présentées dans le **Tableau 1.6**. Tous les changements commencent par l'évaporation de l'eau libre et la décomposition de l'ettringite, avant la température de 100°C. Le début de déshydratation des C-S-H est comprise entre 105 et 145°C et se fait de manière continue jusqu'à 400°C. Entre 400 et 550°C on observe les premiers signes de la décomposition de la portlandite.

Tableau 1.6 : Principales décompositions dans un béton lors d'un chauffage (Noumowe 1995).

Températures	Phénomènes physico-chimiques
Entre 30 et 120°C	L'eau libre et une partie de l'eau adsorbée s'échappent du béton. L'eau non liée est totalement éliminée à 120°C
Entre 130 et 170°	Une double réaction endothermique peut avoir lieu correspondant à la décomposition du gypse $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
Autour de 180°C jusqu'à 300°C	On a la première étape de la déshydratation. Il ya rupture du gel de ciment. La chaleur brise le gel de ciment et arrache les molécules d'eau aux silicates hydratés. L'eau liée chimiquement commence à s'échapper du béton
A environ 250 et 370°C	On peut avoir des petits pics endothermiques indiquant des effets de décomposition et d'oxydation métallique (ferrique)
Entre 450 et 550°C	Il y'a décomposition de la portlandite en chaux libre $\text{Ca}(\text{OH})_2 \rightarrow \text{CaO} + \text{H}_2\text{O}$
Autour de 570°C	Il y'a transformation de structures du quartz α en quartz β accompagnée d'un gonflement
Entre 600 et 700°C	Il y a décomposition des phases de C-S-H et formation de $\beta\text{-C}_2\text{S}$. C'est la seconde étape de la déshydratation des silicates de calcium hydratés qui produit une nouvelle forme de silicates bicalciques
Entre 700 et 900°C	Il ya décomposition du carbonate de calcium. Le calcaire se décompose autour de 800°C en $\text{CaCO}_3 \rightarrow \text{CaO} + \text{CO}_2$, réaction fortement endothermique qui libère du gaz carbonique
Au dessus de 1300-1400°C	Le béton passe à l'état de boue

I.3.2 Fissuration thermique

Au cours du chauffage la pâte de ciment se dilate jusqu'à environ 150°C. A partir de cette température elle subit un retrait important qui provient essentiellement de la déshydratation du gel de C-S-H (Diederichs et al. 1989). La plupart des granulats, eux se dilatent continument avec la température. Par conséquent la déformation du béton résulte de la différence entre les déformations thermiques de la pâte de ciment et des granulats qui n'ont pas la même dilatation thermique. Dans la plupart des cas, jusqu'à 150 °C, l'expansion de la pâte est supérieure à celle du granulat. Suite à des déformations empêchées par la dilatation différentielle de la pâte et des granulats, des contraintes naissent aux interfaces pâte-granulat et peuvent entraîner la fissuration

thermique. (Fu et al. 2004) ont mis en évidence ces phénomènes grâce à des observations MEB sur un mortier traité à 300°C (**Figure 1.22**).

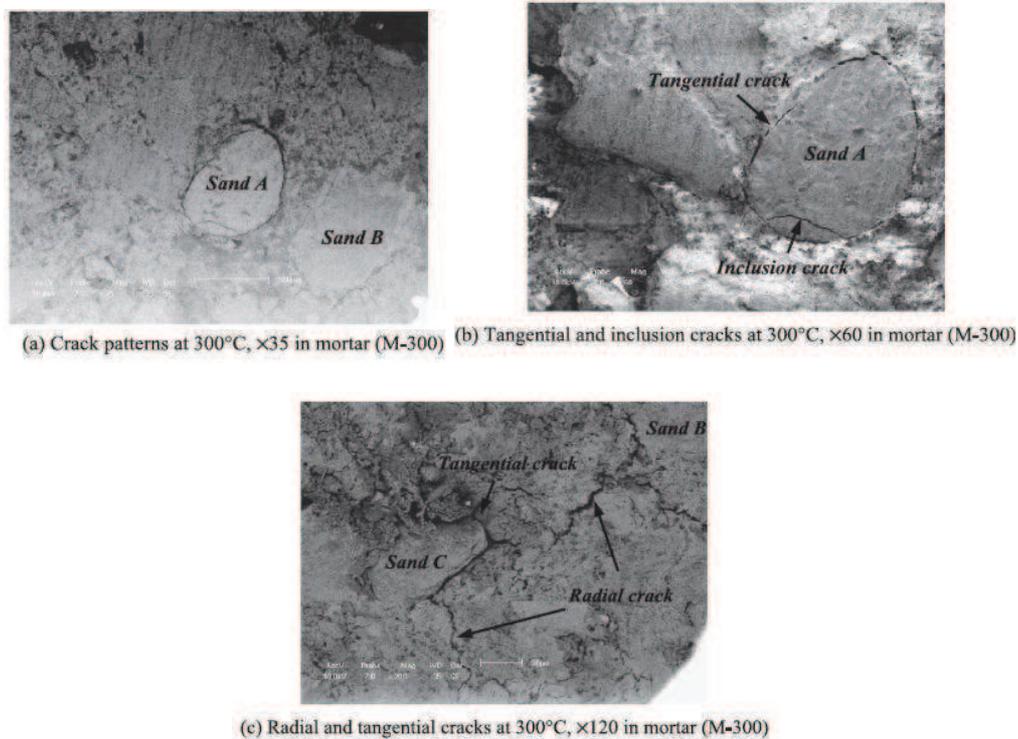


Figure 1.22 : Faciès de fissuration (indiqués par les flèches) observés au MEB dans un mortier traité à 300°C (Fu et al. 2004).

Au cours du chauffage, en dessous de 150°C lorsque les dilatations thermiques de la matrice sont beaucoup plus importantes que celles du granulat, des fissures tangentielles se développent à l'interface pâte-granulats par décohésion. Par contre pour des températures supérieures à 150°C, lorsque la dilatation due aux effets de la température de la matrice devient inférieure à celle de l'inclusion, des fissures radiales se forment au sein de la pâte. On observe également des fissures au sein des granulats. En ce qui concerne la pâte de ciment pure, la fissuration thermique est attribuée à la déshydratation et l'incompatibilité thermique entre les composés hydratés et non hydratés dans la matrice solide. Pour la pâte de ciment les fissures se sont formés en dessous de 100°C et leur ouverture et longueur augmentent rapidement avec la température (Fu et al. 2004).

I.3.3 Evolution de la porosité

Les phénomènes physico-chimiques qui se passent dans les matériaux cimentaires lorsqu'ils sont exposés à des températures élevées modifient significativement la géométrie des pores et la structure poreuse. Dans un premier temps le départ de l'eau, sans modifier la porosité totale, augmente tout de même le volume de pores accessibles à la phase gazeuse par rapport à la phase

liquide. Ensuite la fissuration thermique qui s'accompagne d'un élargissement des pores participe à augmenter notablement le volume total de pores. La variation totale de la porosité est donc la somme des contributions de la variation de porosité induite par l'endommagement thermo-chimique (provoquée par la déshydratation) et de l'endommagement thermo-mécanique (provoquée par la fissuration due à la dilatation différentielle de la pâte et des granulats) (Bary et al. 2008). Les techniques actuelles ne permettent pas de mesurer la porosité à chaud. Il faut attendre le refroidissement de l'échantillon pour pouvoir mesurer la porosité résiduelle. L'inconvénient est qu'on ne peut donc mesurer cette porosité que dans le cas des phénomènes irréversibles (Dal Pont 2004). (Rostasy et al. 1980), puis (Noumowe 1995), ont mis en évidence une augmentation significative de la porosité résiduelle à partir de 300°C. Cette variation est due essentiellement à la décomposition de la pâte de ciment suite à la déshydratation. Au-delà de cette température, et notamment lorsqu'on dépasse 500°C, le changement de porosité est aussi lié à la désintégration des agrégats calcaires (**Tableau 1.6**). Pour les bétons l'évolution de la porosité est souvent décrite par une relation linéaire de type $\phi(T) = \phi_0 + A_n(T - T_0)$, initialement proposée par (Schneider et Herbst 1989) et retenue par (Gawin et al. 2003) puis par (Dal Pont 2004). ϕ_0 est la porosité initiale, A_n et T_0 sont des paramètres qui dépendent du type de béton. A titre d'exemple, (Lion 2004) a identifié l'évolution de la porosité résiduelle pour un mortier normalisé ($e/c = 0.5$), soumis à un traitement thermique. La porosité initiale du mortier à l'état sain est de 14% elle augmente de façon significative jusqu'à 16.9% après un traitement à 250°C. (Rostasy et al. 1980) ont identifié la distribution de taille de pores en fonction de la température ($T=300, 600$ et 900°C) pour une pâte de ciment Portland. La **Figure 1.23** montre les résultats rapportés par (Cheng 2009). La distribution de taille de pores est de plus en plus étalée lorsqu'on monte en température, ce qui correspond à la création de pores. Il y'a apparition de très gros pores (de l'ordre du micron), alors qu'en parallèle on constate une augmentation significative de la proportion de petits pores (de l'ordre de 4 à 10 nanomètres correspondant aux pores du gel de C-S-H). D'après (Noumowe 1995), la création de très gros pores correspond à une expansion de gros pores capillaires suite à la destruction de leur paroi et l'augmentation de la proportion de petits pores serait liée à la création de microfissures.

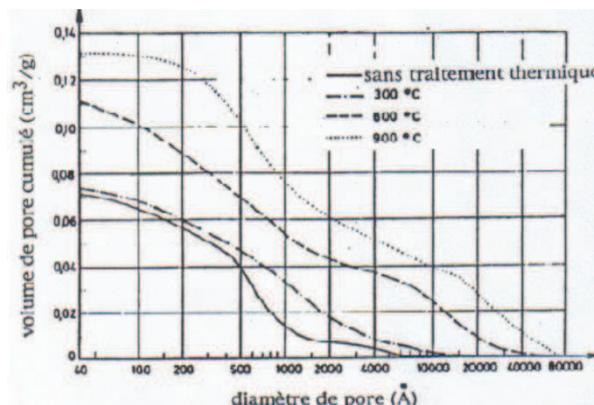


Figure 1.23 : Volume poreux de pâtes de ciment exposées à des températures de 300, 600 et 900°C (Rostasy et al. 1980), tiré de (Cheng 2009).

I.4 Conclusion

Ce premier chapitre est une synthèse de la microstructure des matériaux cimentaires. Il a permis de mettre en exergue leur caractère hétérogène et multi-échelle. A travers une brève analyse de l'hydratation du ciment les mécanismes chimiques qui s'opèrent au cours de l'hydratation et les propriétés des produits formés ont été précisés. La microstructure varie d'un matériau à un autre et le modèle de Jennings par exemple permet de prendre en compte cette variabilité à travers notamment la minéralogie du ciment utilisé, le rapport e/c ou encore le degré d'hydratation. Le passage de la microstructure de la pâte de ciment au mortier et au béton a nécessité l'étude de l'aurole de transition et les caractéristiques particulières de cette zone ont été développées. Nous avons également passé en revue certains paramètres comme la porosité, l'eau dans les matériaux cimentaires ou encore la distribution de tailles de pores qui sont d'importance capitale dans la modélisation du couplage hydromécanique dans les matériaux cimentaires. Notamment les deux grandes classes de pores, les pores du gel de C-S-H et les pores capillaires ont été rappelés. Par ailleurs les mécanismes à l'origine des déformations volumiques en cas de séchage ou d'humidification ont également été abordés. Ce chapitre a fourni les éléments nécessaires pour aborder le chapitre 2 consacré à la modélisation multi-échelle du couplage thermo-hydro-mécanique des matériaux cimentaires.

CHAPITRE II

COMPORTEMENT THERMO-HYDRO-MECANIQUE DES MATERIAUX CIMENTAIRES

II.1 Introduction

Ce chapitre aborde l'étude bibliographique de la modélisation couplée thermo-hydro-mécanique (THM) des matériaux cimentaires. L'accent sera porté sur l'identification des paramètres de couplage hydromécanique et ceci en conditions isothermes saturées mais aussi en conditions partiellement saturées. L'étude THM des matériaux cimentaires en tant que milieu poreux peut être envisagée à deux échelles différentes. La première est l'échelle microscopique dans laquelle on distingue les domaines occupés par le solide et les fluides occupant la porosité (Bachmat et Bear 1983; Lewis et Schrefler 1998). Cette échelle est pertinente pour décrire les interactions à l'interface fluide-solide (Bourgeois 1997). Elle permet également d'intégrer naturellement dans les équations, les relations qui existent entre certaines propriétés macroscopiques (par exemple le coefficient de Biot ou le module de Biot) et les paramètres microscopiques caractérisant les phases élémentaires (par exemple le module de compressibilité du squelette solide) et ainsi de limiter le nombre de paramètres à identifier. La seconde est l'échelle macroscopique où le volume élémentaire du milieu est considéré comme la superposition d'une particule fluide et d'une particule solide indiscernables géométriquement. Le cadre thermodynamique de cette approche a été établi par (Biot 1941) puis prolongé notamment par (Coussy 1995; Coussy 2004) par les outils classiques de la mécanique des milieux continus. Sous l'action des forces extérieures et/ou l'action des gradients de pression de fluide, le milieu poreux se déforme et les mouvements fluides sont définis par rapport à la cinétique du squelette solide.

L'identification des paramètres de couplage hydromécanique par ces deux approches sont présentées dans ce chapitre. Mais tout d'abord on commencera par rappeler brièvement les équations générales du système THM et les équations constitutives qui servent à compléter ce système d'équations. On présentera ensuite le comportement thermo-poro-élastique découlant des considérations thermodynamiques (approche macro) en se focalisant en particulier sur le coefficient et le module de Biot. Ensuite dans l'objectif de présenter l'approche micro, les résultats classiques des techniques d'homogénéisation en élasticité linéaire sont rappelés et commentés. Enfin l'approche alternative d'homogénéisation permettant de retrouver les paramètres hydromécaniques à partir d'informations de la microstructure est présentée.

II.2 Equations générales du système

Cette section a pour but d'établir les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie (premier principe de la thermodynamique). Ces équations écrites à l'échelle macroscopique ou à l'échelle microscopique sont formellement identiques (Gawin et al. 2003; Dal Pont 2004). Certaines équations sont introduites sans démonstration poussée ; le lecteur est invité à trouver plus de détails dans (Coussy 1995; Coussy 2004). On considère un système de volume élémentaire représentatif Ω délimité par sa frontière $\partial\Omega$. Il s'agit d'un milieu poreux partiellement saturé constitué d'une phase solide et de phases fluides circulant dans une porosité connectée et interagissant à la fois entre elles et avec le squelette solide (**Figure 2.1**). Ce dernier a un comportement élastique linéaire isotrope. La phase gazeuse est supposée composée

d'air sec et de vapeur d'eau. L'équation de conservation macroscopique peut prendre la formulation générale en variables eulériennes (Rutqvist et al. 2001; Bary 2004) :

$$\frac{\partial A_{\psi}^{\kappa}}{\partial t} + \nabla \cdot q_{\psi}^{\kappa} - Q_{\psi}^{\kappa} = 0$$

Dans cette équation A_{ψ}^{κ} désigne la grandeur thermodynamique (la masse, la quantité de mouvement ou encore l'énergie) par unité de volume, les indices ψ et κ se rapportent respectivement à la phase considérée (solide, liquide et gazeuse) et au constituant de la phase ψ (eau, air sec, vapeur, solide). q_{ψ}^{κ} est une densité de flux à travers la frontière $\partial\Omega$ par rapport au système spatial de référence et Q_{ψ}^{κ} est le taux de production du constituant κ par unité de volume.

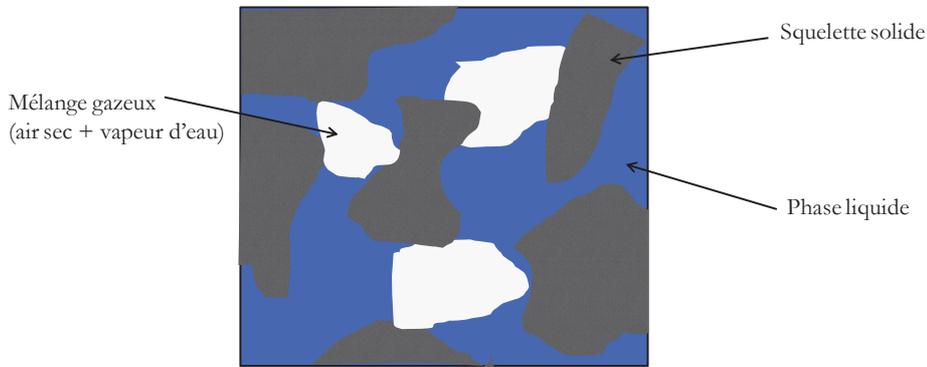


Figure 2.1 : Volume élémentaire représentatif Ω du milieu poreux partiellement saturé.

II.2.1 Conservation de la masse

Pour obtenir l'équation de conservation de la masse des différentes phases, on applique l'équation (2.1) avec les expressions suivantes des termes cités précédemment :

$$A_{\psi}^{\kappa} = \phi S_{\psi} \rho_{\psi}^{\kappa} \quad (2.2)$$

$$q_{\psi}^{\kappa} = \phi S_{\psi} \rho_{\psi}^{\kappa} v_{\psi}^{\kappa} \quad (2.3)$$

ϕ , S_{ψ} , ρ_{ψ}^{κ} et v_{ψ}^{κ} désignent respectivement la porosité, le degré de saturation de la phase ψ , la masse volumique du composant κ de la phase ψ et la vitesse du composant κ de la phase ψ .

Dans le cas de la conservation de la masse d'un fluide, le terme source Q_{ψ}^{κ} représente les échanges massiques entre fluides correspondant aux phénomènes d'évaporation et de condensation, mais aussi les apports d'eau lors de la déshydratation de la phase solide. L'équation de conservation de la masse d'un fluide s'écrit alors ($\psi = l$ pour la phase liquide et g pour la phase gazeuse) de façon générale :

$$\frac{\partial(\phi S_\psi \rho_\psi^\kappa)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi S_\psi \rho_\psi^\kappa v_\psi^\kappa) - Q_\psi^\kappa = 0 \quad (2.4)$$

De manière analogue l'équation de conservation de la masse du squelette s'écrit ($\psi = s$) :

$$\frac{\partial((1-\phi)\rho_s)}{\partial t} + \nabla \cdot ((1-\phi)\rho_s v_s) - Q_s = 0 \quad (2.5)$$

De même le terme source Q_s traduit les pertes ou apports de matière solide qui surviennent essentiellement lors du phénomène de déshydratation des phases solides. En posant $v_{r\psi}^\kappa$ la vitesse relative de κ par rapport au squelette solide, on peut écrire :

$$v_{r\psi}^\kappa = v_\psi^\kappa - v_s \quad (2.6)$$

v_s et v_ψ^κ sont les vitesses du solide et du constituant κ . La densité de flux q_ψ^κ peut donc se réécrire sous la forme :

$$q_\psi^\kappa = \phi S_\psi \rho_\psi^\kappa v_\psi^\kappa = \phi S_\psi \rho_\psi^\kappa (v_{r\psi}^\kappa + v_s) = \underbrace{\phi S_\psi \rho_\psi^\kappa v_{r\psi}^\kappa}_{q_{r\psi}^\kappa} + \phi S_\psi \rho_\psi^\kappa v_s \quad (2.7)$$

$q_{r\psi}^\kappa$ est le vecteur flux de masse de κ par rapport au squelette solide. Les équations de conservation de masse des phases fluides prennent la forme (Rutqvist et al. 2001; Bary 2004):

$$\frac{\partial(\phi S_\psi \rho_\psi^\kappa)}{\partial t} + \nabla \cdot (q_{r\psi}^\kappa) + \phi S_\psi \rho_\psi^\kappa \nabla \cdot v_s + v_s \nabla \cdot (\phi S_\psi \rho_\psi^\kappa) - Q_\psi^\kappa = 0 \quad (2.8)$$

On fait d'abord appel à la formulation classique de la dérivée matérielle par rapport au temps et rapportée à la phase solide définie de la façon suivante :

$$\frac{D(\bullet)}{Dt} = \frac{\partial(\bullet)}{\partial t} + v_s \nabla(\bullet) \quad (2.9)$$

Ensuite on l'applique à l'équation (2.8) et on a :

$$\phi \frac{D(S_\psi \rho_\psi^\kappa)}{Dt} + \nabla \cdot (q_{r\psi}^\kappa) + S_\psi \rho_\psi^\kappa \frac{D(\phi)}{Dt} + \phi S_\psi \rho_\psi^\kappa \nabla \cdot (v_s) - Q_\psi^\kappa = 0 \quad (2.10)$$

Cette dernière équation n'est autre que la forme lagrangienne de l'équation de conservation de la masse des phases fluides. Le troisième terme relatif à la variation de la porosité peut être obtenu, en écrivant de manière analogue la forme lagrangienne de l'équation de conservation de la masse du squelette solide, soit :

$$\frac{D(1-\phi)\rho_s}{Dt} + (1-\phi)\rho_s \nabla(v_s) = 0 \quad (2.11)$$

La variation de porosité s'obtient par :

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{(1-\phi)}{\rho_s} \frac{D\rho_s}{Dt} + (1-\phi)\nabla(v_s) = 0 \quad (2.12)$$

L'hypothèse de transformations infinitésimales permet d'écrire $\nabla \cdot (v_s)$ en fonction de la déformation volumique macroscopique ε_v du milieu poreux définie par $\varepsilon_v = \mathbf{1} : \boldsymbol{\varepsilon}$, où $\mathbf{1}$ est le tenseur identité d'ordre 2 et $\boldsymbol{\varepsilon}$ le tenseur des déformations macroscopiques :

$$\nabla \cdot v_s = \frac{D\varepsilon_v}{Dt} \approx \frac{d\varepsilon_v}{dt} \quad (\nabla \cdot \varepsilon_v \ll \partial\varepsilon_v / \partial t) \quad (2.13)$$

On peut alors substituer $\nabla \cdot (v_s)$ et $D\phi/Dt$ dans l'équation (2.10) par leurs expressions respectives, permettant ainsi d'obtenir :

$$\phi \frac{\partial(S_\psi \rho_v^\kappa)}{\partial t} + S_\psi \rho_v^\kappa \left[\frac{\partial\varepsilon_v}{\partial t} + \frac{(1-\phi)}{\rho_s} \frac{\partial\rho_s}{\partial t} \right] - Q_\psi^\kappa = -\nabla \cdot (q_{r\psi}^\kappa) \quad (2.14)$$

Dans l'équation ci-dessus le terme à droite représente les variations de masse des phases fluides, y compris celles induites par les phénomènes de diffusion sous l'effet du gradient de pression (Loi de Darcy), ou encore celles induites par les gradients de concentration. Le premier terme à gauche est celui qui décrit le taux de variation de l'eau liquide en fonction des variations du degré de saturation et de la densité de la phase fluide. Le deuxième terme correspond à la déformation volumétrique du milieu poreux et le troisième terme fait référence à la variation du squelette solide. Ce terme est nul si on fait l'hypothèse de squelette solide indéformable. Enfin le quatrième terme à gauche correspond au terme source de changement de phase (évaporation/condensation).

L'équation de conservation de la masse du milieu poreux est obtenue en additionnant les contributions des constituants de chaque phase. Pour l'air sec on a ($\psi = g$ et $\kappa = a$) :

$$\phi \frac{\partial}{\partial t} (S_l \rho_l^a + S_g \rho_g^a) + (S_l \rho_l^a + S_g \rho_g^a) \left[\frac{\partial\varepsilon_v}{\partial t} + \frac{(1-\phi)}{\rho_s} \frac{\partial\rho_s}{\partial t} \right] = -\nabla \cdot (q_{rl}^a + q_{rg}^a) \quad (2.15)$$

Concernant la phase fluide, comme le terme source Q_ψ^κ d'échange eau liquide –vapeur intervient dans les équations de conservations de l'eau liquide et de la vapeur d'eau au signe près, en général on exprime directement la somme de ces deux équations de manière à éliminer le terme source, dont la connaissance n'est donc plus nécessaire pour la résolution du problème (Bary 2004). On a alors pour les différentes phases de l'eau ($\kappa = w$) (Rutqvist et al. 2001) :

$$\phi \frac{\partial}{\partial t} (S_l \rho_l^w + S_g \rho_g^w) + (S_l \rho_l^w + S_g \rho_g^w) \left[\frac{\partial\varepsilon_v}{\partial t} + \frac{(1-\phi)}{\rho_s} \frac{\partial\rho_s}{\partial t} \right] = -\nabla \cdot (q_{rl}^w + q_{rg}^w) \quad (2.16)$$

Ces deux dernières relations déterminent complètement la conservation de la masse dans le milieu poreux partiellement saturé. On peut cependant simplifier ce système d'équations en considérant que la phase gazeuse n'est constituée que de vapeur d'eau : l'air sec dans le mélange gazeux est négligé. C'est typiquement le cas dans le modèle THMs (Bary et al. 2008). Cette hypothèse peut être justifiée dans la gamme de température qui nous intéresse dans cette étude (20 – 200°C) par le fait que le degré de saturation initial dans les matériaux cimentaires en général se situe aux environs de 0.9-0.95 et que pendant l'évaporation la vapeur d'eau produite vient chasser le peu d'air sec dans le système dès que les gradients de pression sont assez élevées pour permettre les transferts hydriques.

II.2.2 Conservation de l'énergie

Par définition l'énergie totale d'un système matériel Ω est la somme de son énergie cinétique, de son énergie potentielle et de son énergie interne. Le premier principe de la thermodynamique stipule que cette énergie ne peut évoluer que dans le cas d'un écoulement à travers les frontières $\partial\Omega$ de Ω soit (de Groot et Mazur 1984) :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho E d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} = - \int_{\partial\Omega} J_E n dS \quad (2.17)$$

E est l'énergie spécifique par unité de masse, J_E est le flux d'énergie par unité de surface et \underline{n} le vecteur normal à la frontière $\partial\Omega$. Pour aboutir à la forme la plus classique retrouvée dans la littérature, où la dérivée matérielle de l'énergie interne est équilibrée par le taux de travail des efforts internes et le taux de chaleur reçue, on applique l'équation (2.26) avec les expressions suivantes pour les phases fluides :

$$A_{\psi}^b = \phi S_{\psi} \rho_{\psi} e_{\psi} \quad (2.18)$$

$$q_{\psi}^b = i_{\psi} + \sum_{\kappa} e_{\psi}^{\kappa} q_{r\psi}^{\kappa} + \phi S_{\psi} \rho_{\psi} e_{\psi} v_s = i_{\psi} + q_{r\psi}^b + \phi S_{\psi} \rho_{\psi} e_{\psi} v_s \quad (2.19)$$

dans lesquelles e_{ψ} , q_{ψ}^b et i_{ψ} sont respectivement l'énergie interne par unité de masse, la densité de flux d'énergie et le flux de chaleur de conduction de la phase ψ . Dans ce cas on suppose qu'il n'y a pas de source de chaleur volumique. e_{ψ}^{κ} est l'énergie spécifique interne du composant κ de la phase ψ . Pour la phase solide les expressions deviennent :

$$A_s^b = (1-\phi) \rho_s e_s \quad (2.20)$$

$$q_{\psi}^b = i_s + e_s q_{rs} + (1-\phi) \rho_s e_s v_s = i_s + q_{rs}^b + (1-\phi) \rho_s e_s v_s \quad (2.21)$$

avec les mêmes notations que ci-dessus. On fait ensuite l'hypothèse d'équilibre thermique local en supposant que la température est égale en chaque point pour les trois phases, l'équation de conservation globale pour toutes les phases s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S_l \rho_l e_l + \phi S_g \rho_g e_g + (1-\phi) \rho_s e_s) + \nabla \cdot (\mathbf{i}_m + q_{rl}^b + q_{rg}^b + q_{rs}^b) = Q^b \quad (2.22)$$

où \mathbf{i}_m désigne le flux de chaleur de conduction de l'ensemble des phases, Q^b est le terme source d'apport d'énergie interne dû au travail des forces mécaniques. Dans le cas quasi-statique, en négligeant les forces de volume et en faisant l'hypothèse de transformations infinitésimales, le terme source prend la forme (Coussy 1995) :

$$Q^b = \mathbf{s} : \mathbf{d}_s + \boldsymbol{\sigma}_l : \mathbf{d}_l + \boldsymbol{\sigma}_g : \mathbf{d}_g \quad (2.23)$$

avec \mathbf{s} la contrainte effective agissant sur le squelette solide tel que $\mathbf{s} = (1-\phi)\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\sigma}_\psi$ est la contrainte de la phase fluide ψ et \mathbf{d}_ψ son taux de déformation défini par : $2\mathbf{d}_\psi = \nabla \cdot \mathbf{v}_\psi + {}^T \nabla \cdot \mathbf{v}_\psi$. Dans le cas où les termes dissipatifs d'énergie dus aux effets visqueux sont considérés le terme source peut prendre la forme (Rutqvist et al. 2001; Bary 2004) :

$$Q^b = -3(1-\phi)K_D \beta_{DT} \frac{\partial \varepsilon_\psi}{\partial t} + (\tau_l - \phi S_l p_l \nabla \cdot \mathbf{v}_l) + (\tau_g - \phi S_g p_g \nabla \cdot \mathbf{v}_g) \quad (2.24)$$

où τ_l et τ_g sont les termes de dissipation d'énergie d'origine visqueuse associés à chacune des phases fluides. K_D et β_{DT} sont les modules de compressibilité et le coefficient de dilatation thermique du milieu poreux. Le premier terme à droite de cette équation est relatif à l'énergie élastique (réversible) de déformation du squelette solide. Dans le cas où on adopte un comportement de fluide de type hydrostatique, c'est-à-dire que les contraintes de cisaillement dues à la viscosité sont négligées, on a $\boldsymbol{\sigma}_\psi = -\phi_\psi p_\psi \mathbf{1}$ pour le fluide ψ . On montre alors que l'équation (2.23) prend la forme (Coussy 1995; Bary 2004) :

$$Q^b = \mathbf{s} : \mathbf{d}_s - \nabla \cdot \left(\frac{p_l}{\rho_l} \mathbf{w}_l + \frac{p_g}{\rho_g} \mathbf{w}_g \right) \quad (2.25)$$

II.2.3 Conservation de la quantité de mouvement

L'équation de la conservation de la quantité de mouvement repose sur le principe selon lequel, sous l'effet des forces externes la dérivée matérielle de la quantité de mouvement de la matière contenue dans le volume élémentaire Ω est égale au taux de production correspondant. Ces forces externes sont de deux sortes : les forces volumiques de densité massique F ne dépendant que de la position du point considéré et les forces surfaciques de contact s'exerçant sur les frontières $\partial\Omega$. Soit Γ la densité surfacique des forces agissant au point \underline{x} de $\partial\Omega$ et de normale sortante \underline{n} . L'équation de conservation de la quantité de mouvement prend la forme :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} (\rho v_s + \rho_l \phi_l v_{rl} + \rho_g \phi_g v_{rg}) d\Omega = \int_{\Omega} F d\Omega + \int_{\partial\Omega} \Gamma d\Omega \quad (2.26)$$

où la masse totale de matière contenue dans Ω est : $\rho = (1 - \phi)\rho_s + \phi_l\rho_l + \phi_g\rho_g$.

L'équation (2.26) peut se mettre sous la forme (Coussy 1995) :

$$\int_{\Omega} (\rho\gamma_s + \rho_l\phi_l\gamma_{rl} + \rho_g\phi_g\gamma_{rg}) d\Omega = \int_{\Omega} \rho F d\Omega + \int_{\partial\Omega} \Gamma dS \quad (2.27)$$

dans laquelle γ_s et $\gamma_{r\kappa}$ désignent respectivement l'accélération des particules du squelette solide et celle des particules du fluide κ relativement au solide.

En introduisant le tenseur des contraintes de Cauchy s'écrivant $\sigma = \Gamma \underline{n}$, on obtient :

$$\int_{\Omega} (\nabla \sigma + \rho(F - \gamma_s) - \rho_l\phi_l\gamma_{rl} - \rho_g\phi_g\gamma_{rg}) d\Omega = 0 \quad (2.28)$$

Sous l'hypothèse de déformations quasi-statiques (accélérations nulles) l'énergie de conservation de la quantité de mouvement prend la forme locale bien connue faisant intervenir le tenseur des contraintes totales :

$$\nabla \sigma + \rho F = 0 \quad (2.29)$$

II.3 Equations constitutives du système

Les équations de conservation précédentes ne suffisent pas à déterminer entièrement le problème THM, le nombre d'inconnues étant supérieur au nombre d'équations. On introduit classiquement des lois dites constitutives décrivant l'état de chaque phase à savoir :

- L'équation de Clausius-Clayperon,
- Les lois de description de l'écoulement (Loi de Darcy et de Fick),
- L'équilibre de sorption (eau liquide-eau vapeur) et l'équation de Clausius-Clapeyron,
- L'équation d'état de l'eau etc....

Ces lois constitutives sont en général dérivées du second principe de la thermodynamique qui stipule l'existence d'une fonction d'état S appelée entropie et dont les variations au cours des transformations subies par le système sont bornées inférieurement. Cette borne inférieure correspond au taux de production d'entropie fournie au système par son environnement et définie à l'aide de la variable T , température absolue. Cette production interne d'entropie est définie positive (Coussy 1995; Bary 2004) :

$$\frac{dS}{dt} + \nabla \cdot (s_j w_j) + \nabla \cdot \frac{q}{T} - \frac{r}{T} \geq 0 \quad (2.30)$$

S est l'entropie volumique du système et s_j l'entropie massique de la phase fluide j . r désigne une source volumique de chaleur. Il est parfois préférable de faire apparaître l'énergie libre volumique définie par :

$$\psi = e - TS \quad (2.31)$$

L'équation (2.30) devient, compte tenu de la relation (2.22) donnant l'expression de la dérivée interne (Coussy 1995; Bary 2004) :

$$\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} - g_j \nabla \cdot (\mathbf{w}_j) - S \frac{d\Gamma}{dt} - \frac{d\psi}{dt} - w_j (\nabla g_j + s_j \nabla T) - \frac{q}{T} \nabla T \geq 0 \quad (2.32)$$

dans laquelle $\mathbf{d} = d\boldsymbol{\varepsilon}/dt$ sous l'hypothèse de transformations infinitésimales. g_j désigne l'enthalpie libre massique de la phase fluide j ou le potentiel de Gibbs spécifique définie par (Dangla 2000) :

$$g_j = e_j + \frac{p_j}{\rho_j} - Ts_j \quad (2.33)$$

En introduisant les équations de conservation de la masse de chacune des phases fluides, on obtient l'inégalité fondamentale de Clausius-Duheim qui est importante car elle permet d'une part de définir les différents mécanismes dissipatifs et d'autre de part d'introduire de manière rigoureuse les lois complémentaires ou constitutives (Coussy 1995; Bary 2004) :

$$\underbrace{\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{d} - g_j \frac{dm_j}{dt} - S \frac{d\Gamma}{dt} - \frac{d\psi}{dt}}_{\varphi_1} - \underbrace{\frac{q}{T} \nabla T}_{\varphi_2} - \underbrace{w_j (\nabla g_j + s_j \nabla T)}_{\varphi_3} + \varphi_{\rightarrow} \geq 0 \quad (2.34)$$

m_j est la masse de la phase fluide j $m_j = \phi(S_j) \rho_j$. φ_1 est la dissipation intrinsèque (ou mécanique), φ_2 est la dissipation due au transport de chaleur et φ_3 la dissipation due au transport de fluides. φ_{\rightarrow} représente l'énergie dissipée lors des processus de transformations des différentes phases qui se résument ici au changement de phase liquide/vapeur et à la déshydratation de la phase solides sous l'effet de la température. Comme le postulat de l'état local stipule que les différentes fonctions d'état ne dépendent que des variables d'état et non de leurs gradients et taux de variations, φ_{\rightarrow} , φ_2 et φ_3 peuvent prendre des valeurs quelconques indépendamment de φ_1 : en particulier elles peuvent être nulles, ce qui permet d'imposer la non-négativité de φ_1 indépendamment de celle de $\varphi = \varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_{\rightarrow}$, soit :

$$\varphi = \varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_{\rightarrow} \geq 0 \quad \text{et} \quad \varphi_1 \geq 0 \quad (2.35)$$

Les équations d'état sont alors introduites à partir de l'inégalité $\varphi_1 \geq 0$ et en supposant que les variables d'état sont indépendantes les unes des autres (ensemble de variables dites normales) :

$$\psi = \psi(\boldsymbol{\varepsilon}, m_j, T, \zeta) \quad (2.36)$$

avec ζ l'ensemble de variables internes. Compte tenu de l'équation (2.34) et du fait que les évolutions des variables sont totalement indépendantes les unes des autres, on définit les équations d'état par (Coussy 1995; Bary 2004) :

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{d\psi}{d\boldsymbol{\varepsilon}} \quad ; \quad g_j = \frac{d\psi}{dm_j} \quad ; \quad S = \frac{d\psi}{dT} \quad (2.37)$$

Dans le cas où il n'y a pas de variables internes, la dissipation intrinsèque est toujours nulle (Equation 2.34) et le comportement du matériau est appelé thermo-poro-élastique. Pour introduire les lois de conduction de la chaleur et de transport des phases fluides, il faut faire des hypothèses concernant les termes de l'inégalité (2.35). L'hypothèse la plus restrictive consiste à découpler les dissipations φ_2 et φ_3 et à imposer leur non-négativité de manière indépendante soit :

$$\varphi_2 \geq 0 \quad \text{et} \quad \varphi_3 \geq 0 \quad (2.38)$$

A partir de ces inégalités, comme on le verra dans les sections suivantes, on obtient les lois complémentaires de conduction de chaleur (Loi de Fourier) et de transport des phases fluides (loi de Darcy et de Fick).

II.3.1 Loi de Fourier

C'est la loi de conduction de la chaleur. Pour l'obtenir on adopte l'hypothèse de normalité des mécanismes dissipatifs thermiques qui consiste à postuler l'existence d'un potentiel de dissipation D fonction du vecteur flux de chaleur q/T et convexe et nul en 0, tel que (Lassabatere 1994; Coussy 1995) :

$$\frac{\partial D}{\partial (q/T)} = -\nabla T \quad (2.39)$$

ce qui permet d'assurer automatiquement la non-négativité de φ_2 quelles que soient les évolutions du système. En plus on choisit classiquement pour le potentiel de dissipation D une forme quadratique de q/T pour obtenir la loi de Fourier qui relie le vecteur flux de chaleur au gradient de la température sous la forme :

$$q = -\mathbf{L}_{eff} \nabla T \quad (2.40)$$

où \mathbf{L}_{eff} est le tenseur des coefficients de conductivité thermique effective défini positif, et dans le cas d'un matériau isotrope on a : $\mathbf{L}_{eff} = l_{eff} \mathbf{1}$. Pour les matériaux poreux partiellement saturés (Lewis et Schrefler 1998) propose l'équation suivante sur la base des résultats expérimentaux de (Bomberg et Shirliffe 1979) :

$$l_{eff} = l_{dry} \left(1 + 4 \frac{\phi S_l \rho_l}{(1-\phi) \rho_s} \right) \quad (2.41)$$

où l_{dry} est le coefficient de conductivité thermique du matériau sec.

II.3.2 Loi de changement de phase

Equation de Kelvin-Laplace

Dans notre cas les changements de phases font référence aux phénomènes d'évaporation-condensation. L'équilibre thermodynamique entre les deux phases de l'eau est régi par l'égalité des enthalpies libres massiques :

$$g_l(p_l, T) = g_v(p_v, T) \quad (2.42)$$

Le cas d'un changement de phase non dissipatif ($\varphi_{\rightarrow} = 0$) donc instantané conduit à la relation :

$$dg_l(p_l, T) = dg_v(p_v, T) \quad (2.43)$$

De plus les équations d'état des fluides s'écrivent :

$$\frac{\partial g_j}{\partial p_j} = \frac{1}{p_j} ; \quad \frac{\partial g_j}{\partial T} = -s_j \quad (2.44)$$

L'équation (2.43) devient :

$$\frac{dp_v}{\rho_v} - \frac{dp_l}{\rho_l} = (s_v - s_l) dT = L_{l \rightarrow v} \frac{dT}{T} \quad (2.45)$$

avec $L_{l \rightarrow v}$ la chaleur latente de vaporisation. Cette dernière relation porte le nom de Clapeyron généralisée. Sous les conditions de changement isotherme, de comportement de gaz parfait pour la vapeur (la masse volumique intervenant dans l'équation est remplacée par son expression donnée par la loi des gaz parfaits) et d'incompressibilité de l'eau, l'intégration de la loi de Clapeyron conduit à :

$$\ln \left(\frac{p_v}{p_{v0}(T)} \right) = \frac{M_v}{\rho_l(T) RT} (p_l - p_{l0}(T)) \quad (2.46)$$

où $p_{v0}(T)$ et $p_{l0}(T)$ définissent un état de référence de la vapeur et l'eau liquide. L'état de référence retenu est le cas particulier est l'équilibre thermodynamique liquide-vapeur de l'eau sans effet capillaire et à pression atmosphérique. Dans ce cas particulier $p_{l0} = p_{atm}$, p_{atm} est la pression atmosphérique et $p_{v0} = p_{vs}^{atm}$ avec p_{vs}^{atm} la pression de vapeur saturante sous une pression du mélange gazeux égale à p_{atm} , on en déduit la loi Kelvin :

$$\ln(h_r) = \frac{M_v}{\rho_l(T) RT} (p_c^{atm}) \quad (2.47)$$

dans laquelle l'humidité relative h_r est par définition le rapport entre la pression de vapeur et la pression de vapeur saturante. p_c^{atm} est la pression capillaire pour une pression du mélange gazeux égale à p_{atm} . De fait cette relation ne devrait être utilisée que sous la condition $p_g = p_{atm}$.

Cependant on remplace couramment p_c^{atm} par la pression capillaire $p_c = p_g - p_l$ et p_{vs}^{atm} par la pression de vapeur saturante du corps pur p_{vs} . La pression de vapeur saturante p_{vs}^{atm} évolue avec la température. Il est rapporté dans (Bary 2004) que l'erreur commise lorsque p_{vs} remplace p_{vs}^{atm} demeure acceptable tant que la température reste inférieure à 600°K. (Gawin et al. 1996; Feraille-Frenet 2000). Notons aussi que lorsque l'humidité relative approche de 0, ce qui correspondrait à un degré de saturation en eau nul, la loi de Kelvin conduit à des pressions capillaires tendant vers l'infini, ce qui n'est pas physiquement envisageable. Or pour les problèmes THM appliqués au béton on peut rencontrer le cas où l'eau libre est quasiment totalement évaporée à la suite d'un chauffage conséquent et de transport de vapeur, ce qui rend la loi de Kelvin théoriquement inapplicable.

Courbe capillaire

La courbe capillaire ou courbe de rétention d'eau est celle qui décrit la relation entre le degré de saturation en eau et la pression capillaire. Une bonne description des transferts d'eau liquide dans les matériaux cimentaires passe par la capacité des modèles à décrire correctement cette relation. Dans le cas d'un milieu poreux à matrice indéformable et en conditions isothermes, la pression capillaire ne dépend que de la saturation en eau liquide. Dans la littérature le modèle le plus fréquemment rencontré pour décrire de telles relations est celui de (van Genuchten 1980) :

$$S_l = \left[\frac{1}{1 + (ap_c)^n} \right]^m \quad (2.48)$$

avec en général $m = 1 - 1/n$ (Mualem 1976) mais d'autres expressions de m peuvent être retrouvées. Cette formulation a été initialement proposée pour les sols avant d'être plus tard étendue aux bétons par (Savage et Janssen 1997). La relation (2.48) est complètement déterminée par la connaissance des paramètres a et n . Ils peuvent être obtenus par ajustement (par la méthode des moindres carrés par exemple) au moyen des données expérimentales de saturation en eau en fonction de la pression capillaire obtenue à partir de l'humidité relative (équation de Kelvin-Laplace). La **Figure 2.2** illustre les courbes de pression capillaire obtenues sur une pâte de ciment ordinaire (CO) et sur une pâte de ciment contenant de la fumée de silice (CH) (Baroghel-Bouny et al. 1999). Pour les pâtes de ciment étudiées, les paramètres obtenus sont $a = 37.5 \text{ MPa}^{-1}$ et $m = 0.46$ pour la pâte CO et $a = 96.28 \text{ MPa}^{-1}$ et $m = 0.51$ pour la pâte de ciment CH. A part la relation de Van Genuchten, d'autres expressions sont proposées pour décrire les courbes capillaires, mais la plupart d'entre elles peuvent être vues comme des extensions de modèles existants, à savoir des modèles de (Brooks et Corey 1964), de (van Genuchten 1980) et de (Kosugi 1999).

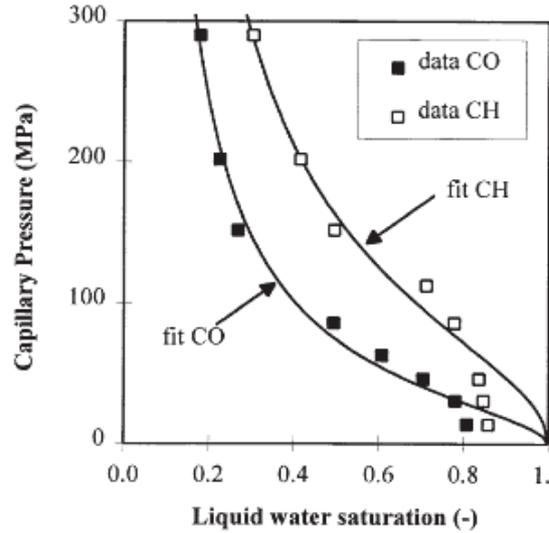


Figure 2.2 : Pression capillaire en fonction du degré de saturation obtenue pour une pâte de ciment ordinaire (CO) et une pâte de ciment contenant de la fumée de silice (CH) (Barogbel-Bouny et al. 1999).

Le Tableau 2.1 récapitule quelques modèles de rétention d'eau tels que répertoriés dans (Kosugi et al. 2002).

Tableau 2.1 : Formulation de la courbe de rétention d'eau pour différents modèles

Références	Formulation	Paramètres
Van Genuchten (1980)	$S_l = 1 / \left[1 + (ap_c)^n \right]^m$	$m = 1 - 1/n$ n, a : paramètres de forme
Brutsaert (1966)	$S_l = 1 / \left[1 + (ap_c)^n \right]$	n, a : paramètres de forme
Fredlung et Xing (1994)	$S_l = 1 / \left[\ln \left(e + (ap_c)^n \right) \right]^m$	$\alpha = 1 / p_c^{\text{inf}}$ m, n : paramètres de forme
Brooks et Corey (1964)	$S_l = \left(p_{c0} / p_c \right)^\lambda$ si $p_c > p_{c0}$ Sinon $S_l = 1$	λ : paramètres liés aux tailles de pores p_{c0} : pression d'entrée d'air
Tani (1982), Russo (1988)	$S_l = \left[1 + \alpha p_c \right] \exp(-\alpha p_c)$	$\alpha = 1 / p_c^{\text{inf}}$
Kosugi (1996)	$S_l = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\ln(p_c / p_{CMD}) / \sqrt{2\sigma} \right)$	p_{CMD} : pression capillaire correspondant au rayon de pore médian σ : étalement de la distribution de la taille de pores

Notons que le modèle de Kosugi fait appel à une distribution de tailles de pores dans le matériau. D'autres expressions considérant des propriétés fractales du milieu poreux existent (voir par exemple (Bird et al 2000)). Plusieurs auteurs ont montré en comparant les expressions avec des données expérimentales que ce type de relations permettait de décrire efficacement les propriétés de rétention d'un grand nombre de sols. Dans (Carlier et Burlion 2011), il est rapporté que les expressions classiques ne reproduisent pas correctement l'évolution de la pression capillaire avec la teneur en eau à proximité de la saturation dans les matériaux cimentaires. (Carlier et Burlion 2011) ont donc proposé un modèle basé sur celui de Van Genuchten mais qui considère que le matériau présente une double porosité. Deux types de porosités possédant leurs propres paramètres n et a sont alors prises en compte. Cette approche « distribution bimodale » a été étendue à plusieurs expressions citées précédemment. Les expressions analytiques obtenues sont comparées entre elles dans (Carlier et al. 2012) et confrontées aux données expérimentales obtenues sur plusieurs types de matériaux cimentaires (deux mortiers à $e/c = 0.5$ et 0.8 et deux pâtes de ciment $e/c = 0.5$ et 0.8). Il en ressort qu'entre autres les modèles utilisant de nombreux paramètres, notamment les modèles faisant appel à une distribution de tailles de pores bimodale conduisent à des résultats qualitativement meilleurs en particulier à proximité de la saturation. Néanmoins l'amélioration apportée en termes de modélisation est modérée par le coût supplémentaire engendré par l'identification d'un plus grand nombre de paramètres.

Isothermes d'adsorption

Dans le cas de matériaux suffisamment perméables comme les sables, ou encore les roches la courbe de pression capillaire peut être déterminée expérimentalement par invasion capillaire, en contrôlant la pression capillaire. Mais pour les matériaux peu perméables comme les argiles et les bétons, cette méthode trouve rapidement ces limites à mesure que la saturation décroît, la pression capillaire à exercer devient trop élevée. En pratique en dessous d'une saturation de l'ordre de 90%, elle ne peut être déterminée qu'à l'aide de l'isotherme de sorption. Les isothermes de sorption représentent à une température donnée et à l'équilibre, la quantité d'eau évaporable en fonction de l'humidité relative. Pendant l'expérience la pression de vapeur ou plus exactement l'humidité relative h_r est contrôlée. Entre deux paliers successifs d'humidité relative imposée, la variation de la porosité au liquide ϕ_l est mesurée par pesée (la masse volumique du liquide est supposée constante). La mesure de la déformation volumique donne accès à la porosité qui permet de calculer le degré de saturation. La sorption est le terme général : l'état d'adsorption décrit la pénétration et l'enrichissement en absorbant (la vapeur d'eau dans notre cas) et celui de désorption correspond à sa réduction (Ishida et al. 2007). La comparaison des résultats obtenus en adsorption et en désorption révèle un phénomène d'hystérésis entre les deux courbes (Baroghel-Bouny 2007). La quantité d'eau adsorbée augmente avec l'humidité relative mais les isothermes d'adsorption ont des formes variées. (Brunauer et al. 1938) a proposé une classification en six types d'isothermes (**Figure 2.3**) :

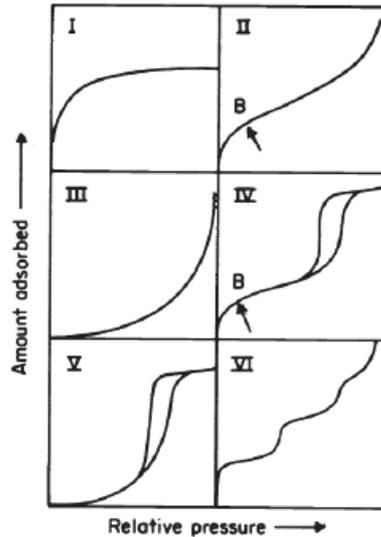


Figure 2.3 : Les différents types d'hystérésis d'après la classification de l'IUPAC

Type I : Il correspond à des matériaux qui contiennent des micropores ($r < 20 \text{ \AA}$) de telle sorte qu'ils ne peuvent contenir qu'une seule épaisseur de molécule d'eau. On parle dans ce cas d'adsorption monomoléculaire après laquelle le matériau est saturé donnant lieu au long palier horizontal de l'isotherme (aucune adsorption n'a lieu lorsque P_r augmente).

Type II : Il s'agit d'un milieu non poreux ou macroporeux ($r > 500 \text{ \AA}$). Ce type d'isotherme est caractérisé par une adsorption monomoléculaire, puis multimoléculaire. On observe un épaissement de la couche d'eau adsorbée notamment aux fortes humidités relatives.

Type III : Le milieu est du même type que dans le cas des isothermes de type II mais correspond à de très faibles chaleurs d'adsorption. Les interactions milieu poreux/gaz adsorbées sont faibles. Ces isothermes sont rencontrées très rarement.

Type IV : L'isotherme est identique à celle du type II aux basses pressions. Elle correspond à des solides contenant des mésopores ($20 \text{ \AA} < r < 500 \text{ \AA}$). Ce type d'isotherme correspond à un milieu mésoporeux dans lequel se produit une condensation capillaire. Il est caractérisé par une hystérésis importante.

Type V : il s'apparente à celui du type IV mais les interactions milieu poreux /gaz adsorbé sont faibles. Il est rarement rencontré.

Type VI : Il s'agit d'une adsorption par paliers, couche par couche.

Soulignons que les isothermes réelles obtenues expérimentalement ne correspondent que rarement à ces types précités. Ils correspondent le plus souvent à des cas intermédiaires. Le phénomène de l'hystérésis qui apparaît lors des cycles d'imbibition et de drainage ont fait l'objet d'un bon nombre d'études (Houpeurt 1974; Fredlund et Rahardo 1993). Ce phénomène est assez complexe et la pertinence physique des modèles permettant de l'expliquer n'est pas toujours établie. Nous proposons ici d'illustrer de façon schématique l'une des situations à l'origine de ce

phénomène et rapportée dans (Dangla 2000). Il s'agit d'une analyse de la courbe capillaire à l'échelle microscopique pour une géométrie particulière de l'espace poreux. On considère les deux situations d'imbibition et de drainage comme schématisées sur la **Figure 2.4**. Ces deux situations sont analysées respectivement en termes de remplissage et de vidange de pores de rayons différents reliés par des fins capillaires d'accès.

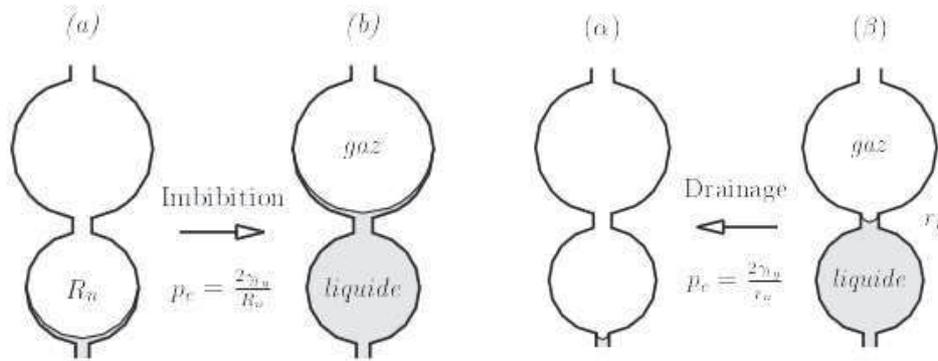


Figure 2.4 : Situations d'imbibition et de drainage de pores de tailles différentes reliés par des fins capillaires d'accès (Dangla 2000).

On suppose que le réseau poreux est constitué d'une succession de pores de rayons décroissants R_i reliés par des fins capillaires de rayon r_i . On suppose également que le liquide mouille parfaitement le solide entraînant un angle de contact nul. Les pores appartenant à une classe donnée seront soit entièrement remplis ou totalement vides de liquide, le ménisque étant systématiquement localisé dans les fins capillaires. Au cours de l'imbibition (adsorption) la pression capillaire p_c varie en fonction de la classe R_n de pores à remplir $p_c = 2\gamma_{gl} / R_n$. Une imbibition infinitésimale fait passer l'état (a) de la **Figure 2.4** à l'état (b). Si par exemple on augmente maintenant la pression capillaire, il n'y aura dans un premier temps, aucune variation notable de la saturation. En effet le pore de rayon R_n ne va se désaturer que lorsque la pression capillaire atteint celle ajustée au rayon du capillaire fin soit $p_c = 2\gamma_{gl} / r_n$. Lorsque cette relation est vérifiée on passe de l'état (b) de la **Figure 2.4** à l'état (a). On en conclut que la désorption dans le pore se fait à une pression capillaire supérieure à celle qui est nécessaire pour son adsorption. Ainsi pour la géométrie particulière des pores considérée ici on assiste à une hystérésis de la courbe capillaire et donc de l'isotherme de sorption.

II.3.3 Lois de description de l'écoulement

Loi de Darcy

C'est la loi de conduction des phases fluides lorsqu'on considère qu'il n'y a pas de mélange des constituants. De manière analogue à la loi de Fourier l'hypothèse de normalité des mécanismes dissipatifs dus aux transports des fluides permet de relier le flux volumique de la phase fluide j

w_j / ρ_j à la force thermodynamique $-\nabla p_j$. La loi de Darcy étendue aux n fluides saturant la porosité s'écrit :

$$\frac{w_j}{\rho_j} = -\mathbf{K}_{jk} \nabla p_k \quad (2.49)$$

Le tenseur \mathbf{K}_{jj} (sans sommation sur les indices) est le tenseur de perméabilité relative de la phase j en présence des autres phases. Il décrit la pénétration d'un liquide ou d'un gaz à travers un milieu poreux sous l'effet d'un gradient de pression. \mathbf{K}_{jk} avec $j \neq k$ permet d'introduire les couplages entre mouvements de fluides : un mouvement de la phase j sous l'effet d'un gradient de pression $-\nabla p_j$ peut provoquer un mouvement de la phase k et réciproquement. Ces couplages sont attribués aux forces visqueuses et aux forces d'interface entre fluides. Mais le plus souvent les termes de couplage \mathbf{K}_{jk} sont négligés dans le cas où le rapport de viscosité entre les fluides saturant la porosité est très différent de 1 (Whitaker 1986) ce qui est vrai dans le cas d'un matériau partiellement saturé par de l'eau et de l'air sec. A 20°C le rapport de la viscosité de l'eau sur l'air vaut approximativement 6.10^{-3} (Mainguy 1999). Dans le cas d'un milieu isotrope, le tenseur de perméabilité est réduit au coefficient de perméabilité k_{jj} tel que $\mathbf{K}_{jj} = k_{jj} \mathbf{1}$. Ce coefficient de perméabilité dépend du degré de saturation et évidemment de la porosité. De manière générale on a :

$$k_{jj} = \frac{K_{int}}{\eta_j} k_{e_j}(S_j) \quad (2.50)$$

avec K_{int} la perméabilité intrinsèque qui dépend de la microstructure du réseau poreux, η_j la viscosité dynamique de la phase considérée et $k_{e_j}(S_j)$ la perméabilité relative au fluide $j = l, g$ et fonction de la saturation. Remarquons qu'aucun couplage hygrothermique n'apparaît dans les équations de conduction de chaleur et des fluides. Ceci est dû à l'hypothèse que les deux dissipations correspondantes φ_2 et φ_3 sont découplées.

Loi de Fick

Lorsqu'une phase fluide est constituée d'un mélange idéal de composants occupant la même fraction volumique, un autre mécanisme de transport se produit. Les gradients de concentration d'un composant sont à l'origine d'un mouvement relatif d'un autre composant par rapport au mouvement de la phase. C'est le cas dans un mélange d'air sec et de vapeur d'eau. La loi de Fick traduit le fait que les concentrations molaires tendent spontanément à s'homogénéiser sous l'effet de gradients de concentrations (Coussy 2004) :

$$\phi_g (v_g - v_{r\chi}) = \phi_g v_\alpha^\chi = -D_{\alpha\kappa} \nabla \cdot C_\kappa \quad (2.51)$$

Dans cette équation v_{rg} est la vitesse moyenne molaire du mélange par rapport au squelette tel que $v_{rg} = C_\alpha v_{r\alpha}$ avec C_α la fraction molaire du constituant α de ce mélange. $v_{r\chi}$ est la vitesse relative du composant χ jouant le rôle de solvant c'est-à-dire que le transport diffusif est exprimé par rapport à ce composant. v_α^χ désigne la vitesse du constituant α par rapport à celle du solvant χ et $\mathbf{D}_{\alpha\kappa}$ est le tenseur d'ordre 2 symétrique de diffusion. Si $\alpha = \kappa$ et que le matériau est isotrope alors $\mathbf{D}_{\alpha\alpha} = d_\alpha \mathbf{1}$ avec d_α le coefficient de diffusion de α sous l'effet de son gradient de concentration.

Perméabilité intrinsèque

Comme son nom l'indique, la perméabilité intrinsèque est une grandeur intrinsèque au matériau (ne dépend que du matériau). Elle caractérise sa capacité à se laisser traverser par un fluide. La perméabilité d'un matériau cimentaire dépend notamment de la porosité, de la tortuosité, la connectivité et la constrictivité du réseau poreux. Ces quatre paramètres dépendent de la nature du ciment utilisé, du rapport e/c , de la nature et de la quantité des granulats.

La perméabilité intrinsèque K_{int} est généralement obtenue par mesure directe au perméamètre ou indirectement par la formule proposée par Katz-Thompson. La mesure directe au perméamètre consiste à saturer un échantillon cylindrique en fluide mouillant (eau ou gaz), à imposer une différence de pression entre ses deux faces et à mesurer le débit de fluide le traversant pendant un temps donné. Lorsque le fluide mouillant est de l'eau, cette mesure est délicate à effectuer pour des bétons qui sont faiblement perméables, les bétons hautes performances par exemple. D'une part l'état de saturation de l'échantillon est toujours difficile à atteindre, et d'autre part une forte pression d'eau liquide en entrée du matériau s'avère nécessaire pour obtenir des débits mesurables. Pour les bétons de faible porosité, en particulier les bétons hautes performances pour lesquels la perméabilité est très faible, typiquement inférieure à $K_{int} < 10^{-21} m^2$, (Coussy et al. 2001) montrent que la mesure de la perméabilité est problématique : la viscosité dynamique de l'eau vaut environ $\eta_l = 10^{-3} kg.m^{-1}.s^{-1}$ (à 20°C) et les perméamètres à eau permettent d'exercer des différences de pressions allant jusqu'à 10 MPa. Pour l'ordre de grandeur de $10^{-21} m^2$ de la perméabilité, une épaisseur d'échantillon de l'ordre de 5cm et pour une saturation complète la loi de Darcy prévoit une vitesse de filtration de l'ordre de $10^{-19} m.s^{-1}$ soit à peu près $1.2cm / an$.

On observe également des différences significatives entre la perméabilité mesurée à l'eau et celle mesurée au gaz alors que la perméabilité intrinsèque, comme son nom l'indique est théoriquement indépendante de la nature du fluide. Par exemple une mesure de perméabilité intrinsèque sur des bétons courants (résistance caractéristique en compression à 20 jours de 30 MPa) peut donner des valeurs de l'ordre de $10^{-16} - 10^{-17} m^2$ en faisant la mesure avec un gaz tel que l'azote ou l'oxygène et de l'ordre $10^{-18} - 10^{-19} m^2$ en faisant les mesures avec l'eau (Dal Pont 2004). Les hypothèses les plus rencontrées pour expliquer ces écarts sont les suivantes : l'eau liquide ne serait pas totalement inerte vis-à-vis de la pâte de ciment. Les interactions de l'eau, ayant un comportement acide vis-à-vis de la matrice cimentaire dont les constituants forment un

milieu basique prononcé se traduisent par la dissolution de la portlandite et par un phénomène de précipitation de carbonate de calcium très peu soluble, qui accroît momentanément la compacité du béton en diminuant la taille des pores. La perméabilité à l'eau serait donc sous évaluée. Le fait que la mesure de la perméabilité au gaz nécessite un séchage du matériau et qui est suspecté de modifier la structure poreuse du matériau est aussi souvent évoquée. Compte tenu de ces différences certains auteurs dans leurs modèles considèrent séparément une perméabilité intrinsèque au gaz K_{int}^g et une perméabilité K_{int}^l .

La théorie de Katz-Thompson permet d'estimer de manière indirecte la perméabilité intrinsèque. Elle a été élaborée initialement et vérifiée pour les roches sédimentaires. La méthode consiste à évaluer K_{int} à partir des mesures d'un rayon critique de percolation, le rayon du plus petit pore r_p devant être rempli pour qu'il existe un chemin continu de fluide traversant l'échantillon. r_p est un facteur de formation qui est défini comme le rapport entre les conductivités électriques de la solution interstitielle saturante ζ et du matériau ζ_0 . Ce rapport ζ/ζ_0 correspond à une mesure de la tortuosité :

$$K_{int} = \frac{4}{226} r_p^2 \left(\frac{\zeta}{\zeta_0} \right) \quad (2.52)$$

r_p est défini comme le point d'inflexion de la courbe d'intrusion de mercure dans une expérience MIP. Le facteur de formation peut être aussi obtenu en mesurant les coefficients de diffusion des ions chlorure (par exemple) au lieu des conductivités. Néanmoins sa détermination est problématique du fait de la complexité des équilibres chimiques dans la matrice cimentaire. (Garboczi et Bentz 1996) proposent de remplacer ce paramètre en l'exprimant à l'aide de relations empiriques en fonction de la porosité capillaire critique de percolation et la porosité totale. Même si sur la base d'une étude comparative entre différents modèles, (Thierry et al. 2007) concluent que ce modèle peut être étendu aux matériaux cimentaires, il n'existe pas de réel consensus autour de la méthode du fait des biais inhérents aux procédures expérimentales utilisées (prétraitement invasif dû au broyage des échantillons, état sec mal défini, difficulté d'estimation du rayon critique de percolation pour certains matériaux en particulier pour ceux possédant une distribution bimodale des tailles de pores, estimation délicate de la conductivité électrique du fluide saturant etc) mais aussi de la texture des matériaux cimentaires (Baroghel-Bouny 1994; Thierry et al. 2007; Fen-Chong 2008). Contrairement aux roches, les matériaux cimentaires contiennent des C-S-H dont la perméabilité est plus faible que celle des pores capillaires. De plus théoriquement une partie de la porosité des C-S-H n'est pas accessible par MIP. La formule de Katz-Thompson devrait être pertinente lorsque la porosité est supérieure à la valeur de la porosité capillaire critique de percolation estimée à 18%. Dans le cas contraire, pour des matériaux faiblement perméables elle conduirait à une surestimation. Face à ces difficultés, (Mainguy 1999), puis (Coussy et al. 2001) ont envisagé la détermination de la perméabilité à partir de la cinétique de pertes de masse observées au cours d'une expérience de séchage. Cette méthode est indirecte puisqu'elle nécessite le recours à une modélisation des phénomènes mis en jeu. L'hypothèse principale est que le séchage d'un milieu très peu perméable se fait par déplacement de l'eau interstitielle sous forme liquide jusqu'au bord de l'échantillon ou elle

s'évapore ensuite au contact de l'atmosphère environnante. L'écoulement de l'eau à travers l'échantillon est modélisé par une équation (Equation de Richards) faisant intervenir entre autres la pression capillaire et la perméabilité intrinsèque et l'identification de la valeur de K_{int} est celle qui permet de restituer au mieux les pertes de masse mesurées expérimentalement. Nous ne détaillerons pas ici cette équation. Pour plus de détails, voir (Mainguy 1999). A titre d'exemple la **Figure 2.5** illustre la méthode sur un béton ordinaire (BO) (Coussy et al. 2001) et où la perméabilité intrinsèque identifiée est égal à 3.10^{-21} m^2 .

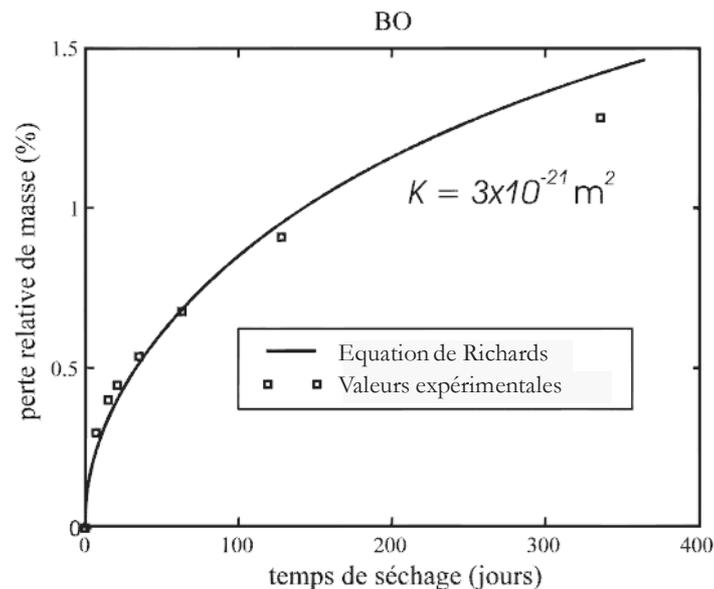


Figure 2.5 : Restitution de la cinétique des pertes de masse obtenue pour un béton ordinaire (Coussy et al. 2001).

Perméabilités relatives à l'eau et au gaz k_{r1} et k_{rg}

Elles dépendent du degré de saturation et sont comprises entre 0 et 1. Cette dépendance en saturation permet de rendre compte de l'influence de l'écoulement d'un fluide sur l'autre. Lorsque le matériau est totalement saturé d'eau par exemple $k_{r1} = 1$ et $k_{rg} = 0$ et inversement lorsqu'il est totalement sec $k_{r1} = 0$ et $k_{rg} = 1$. Ces paramètres sont également difficiles à obtenir expérimentalement, mais de nombreuses lois empiriques ont été proposées. On peut citer notamment celles de (van Genuchten 1980), de (Corey, 1957) ou encore de (Bazant et Thongutai 1978). Les expressions de différentes évolutions proposées sont résumées dans sur la **Figure 2.6**.

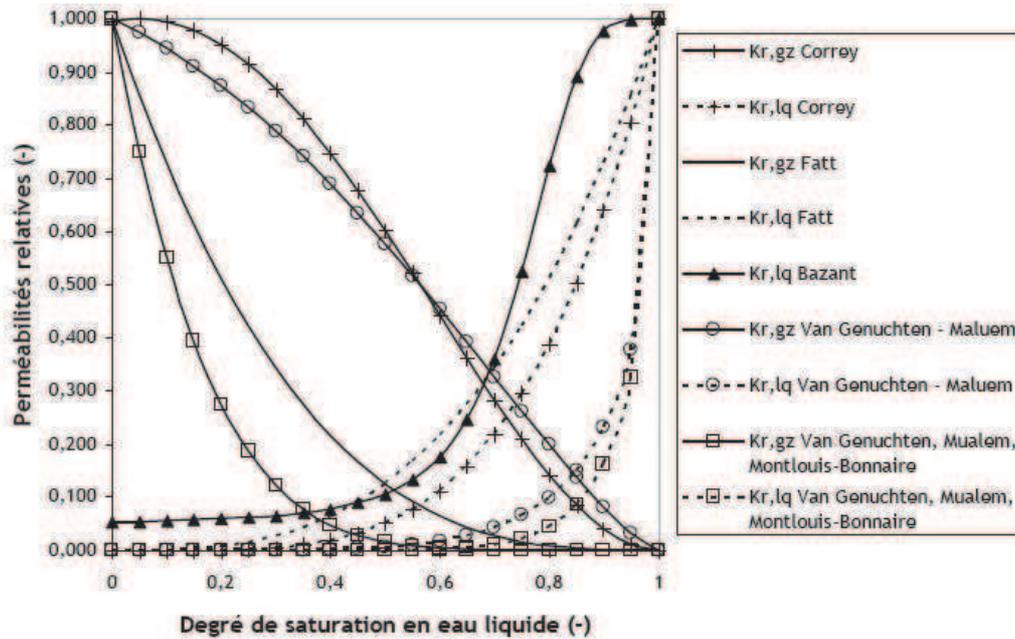


Figure 2.6 :Evolutions des perméabilités relatives au gaz, noté $k_{r,gz}$ et au liquide $k_{r,lq}$ (tirée de (Briffaut 2010)).

Notons également que d'autres modèles qui reposent sur des hypothèses de la microstructure du matériau (par exemple sur la distribution de la taille de pores dans (Dal Pont 2004)) permettent aussi de déterminer ces paramètres. Enfin rappelons que l'état de fissuration qui est l'un des aspects qui impacte également la perméabilité effective des bétons sera abordé dans le chapitre IV.

II.4 Le modèle THMs

Le modèle THMs (l'indice s pour simplifié) développé au Laboratoire d'Etude et du Comportement des Bétons et des Argiles (LECBA) du CEA par B. Bary (Bary et al 2008) introduit une hypothèse simplificatrice dans le formalisme thermodynamique présenté précédemment, hypothèse selon laquelle la phase gazeuse est composée uniquement de vapeur d'eau. Cette hypothèse se justifie lorsque les températures et les cinétiques de montée en température sont importantes puisqu'à priori les phénomènes d'évaporation et de transferts convectifs sont prépondérants. Le degré de saturation initial dans les matériaux cimentaires étant situé aux environs de 0.9-0.95 pour des matériaux standards, on peut considérer que lorsque la température augmente, va se produire le phénomène d'évaporation et la vapeur viendrait chasser rapidement le peu d'air sec qu'il y a dans le matériau dès que les gradients de pression sont assez élevés pour permettre la migration des espèces. De plus certains auteurs montrent que pour des températures ambiantes et pour des matériaux de bonne qualité, le phénomène de transfert principal lors du séchage du béton est la convection de la phase liquide, largement prépondérante par rapport à la diffusion de la vapeur et la convection de la phase gazeuse qui peuvent être négligées (Mainguy et al 2001). La conservation des masses d'eau liquide et vapeur s'écrivent à partir de l'équation (2.4) (Bary et al 2008) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(m_l) = -\nabla \cdot (m_l v_l) - \mu_{l \rightarrow v} + \dot{d} \quad ; \quad \frac{\partial}{\partial t}(m_v) = -\nabla \cdot (m_v v_v) + \mu_{l \rightarrow v} \quad (2.53)$$

avec m_l et m_v les quantités d'eau liquide et vapeur par unité de volume. Données en fonction du degré de saturation et de la porosité, elles s'écrivent (Bary et al 2008) :

$$m_l = \phi(d) \rho_l(T, p_l) S_l \quad ; \quad m_v = \phi(d) \rho_v(T, p_v) (1 - S_l) \quad (2.54)$$

où $\rho_l(T, p_l)$ et $\rho_v(T, p_v)$ sont respectivement la masse volumique de l'eau liquide et de l'eau de vapeur, dépendant de la température et de la pression. $\mu_{l \rightarrow v}$ représente la quantité d'eau liquide transformée en eau vapeur par unité de volume $d\Omega$ et de temps. Enfin \dot{d} représente la quantité d'eau liée libérée sous forme liquide par unité de volume et de temps. Cette quantité peut être reliée à la masse du squelette solide m_s par unité de volume par (Bary 2008) :

$$\frac{\partial m_s}{\partial t} = -\dot{d} \quad (2.55)$$

Le phénomène de déshydratation consécutif aux échauffements dans les matériaux cimentaires est pris en compte à travers ce terme, en particulier le relâchement de l'eau liée dans les hydrates de la pâte de ciment vers le réseau poreux du matériau. L'hypothèse simplificatrice de départ permet de regrouper les deux équations de conservation de la phase liquide et de la phase gazeuse en une seule équation de conservation de l'espèce eau (Bary et al. 2008)

$$\begin{aligned} (S_l \rho_l + S_v \rho_v) \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \left(\rho_l \frac{\partial S_l}{\partial t} + \rho_v \frac{\partial S_v}{\partial t} + S_l \frac{\partial \rho_l}{\partial t} + S_v \frac{\partial \rho_v}{\partial t} \right) \\ + \nabla \cdot (w_l + w_v) + \phi (S_v \rho_v + S_l \rho_l) \frac{\partial \varepsilon_v}{\partial t} = \dot{d} \end{aligned} \quad (2.56)$$

Dans cette équation est faite l'approximation $d_s(\cdot)/dt \approx \partial(\cdot)/\partial t$.

Afin de juger de la pertinence de cette hypothèse simplificatrice, le modèle THMs a été confronté à un modèle jugé plus complet THHM (Gawin et al 1999 ; Gawin et al 2003). La principale différence entre le modèle THM et le modèle THHM est la prise en compte d'une équation de conservation pour l'air sec. Les modèles ont été comparés sur un cas applicatif simple pour lequel des données expérimentales sont disponibles. Les résultats de la comparaison confirment la pertinence de l'hypothèse simplificatrice. En effet les résultats numériques pour les modèles THMs et THHM sont en assez bon accord avec les résultats expérimentaux. Aussi les deux modèles ont un comportement similaire nonobstant quelques différences observées pour les pressions de gaz. Pour l'application visée, l'avantage du modèle THMs est sa meilleure convergence et son temps CPU nettement inférieur à celui du modèle THHM, d'environ 3.5 fois (de Morais et al 2007).

Mise à part cette hypothèse simplificatrice, d'autres aspects font la particularité du modèle THMs. Par exemple les techniques de changement d'échelle analytiques sont souvent utilisées dans le modèle pour estimer les propriétés associées aux phénomènes physiques du problème THM

(paramètres mécaniques, hydromécaniques, diffusivité) en fonction de la microstructure et de l'état hydrique du matériau. L'endommagement est introduit à l'aide d'une approche micromécanique qui considère les fissures comme des microvides de forme ellipsoïdale dans une matrice homogène, le tout à deux échelles de représentation (voir **Figure 2.7**). Tous les paramètres impactés par la fissuration (module d'Young, coefficient de Biot, perméabilité, conductivité thermique, etc....) sont estimés à l'aide de schémas d'homogénéisation appropriés, ceux-ci ayant l'avantage de fournir des expressions analytiques et relativement simples pour ces estimations, ce qui cadre bien avec le caractère pratique de calcul de structures du code voulu par l'auteur.

Le modèle THMs est implanté dans le code de calcul par éléments finis Cast3m du CEA.

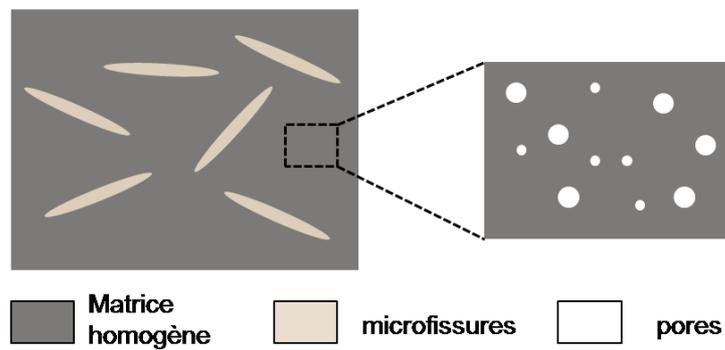


Figure 2.7 : Représentation schématique d'un milieu poreux constituée d'une matrice homogène dans laquelle sont distribuées des pores et des fissures ellipsoïdales aplaties (Bary et al 2008).

II.5 Loi de comportement thermo-poro-élastique (approche *macro*)

II.5.1 Conditions saturées

On aborde ici la question de la formulation de la loi de comportement thermo-poro-élastique en conditions saturées. Cette loi est dérivée de l'énergie libre ψ du système ouvert qui échange de la chaleur et une masse de fluide avec l'extérieur. Les variables d'état de ce système sont le tenseur des déformations de Green-Lagrange Δ , de la température T et la masse de fluide échangée par unité de volume initial m . Le matériau est élastique si la dissipation intrinsèque est identiquement nulle au cours de toute évolution du milieu. La loi de comportement thermo-poro-élastique est définie par les équations d'état de l'équation (2.37). Un cas particulier important est celui où l'énergie libre est une fonction quadratique des variables d'état Δ , m et T (Coussy 1995). Sous l'hypothèse de transformations infinitésimales le tenseur de Green-Lagrange s'identifie au tenseur des déformations $\boldsymbol{\varepsilon}$ et le tenseur de Piola-Kirchhoff au tenseur des contraintes de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$. La loi de comportement élastique pour un milieu poreux par rapport à un état de référence indicé par 0 s'écrit sous la forme (Coussy 1995; Coussy 2004) :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_0 + \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} - \left(\frac{m}{\rho_0^\mu} \right) \mathbf{M}\mathbf{B} - \mathbf{A}(T - T_0) \quad (2.57)$$

$$p = p_0 + M \left(-\mathbf{B} : \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{m}{\rho_0^f} + 3\alpha_m (T - T_0) \right) \quad (2.58)$$

$$S = S_0 + s_0 m + \mathbf{A} : \boldsymbol{\varepsilon} - 3 \left(\frac{m}{\rho_0} \right) M \alpha_m + C_{th} \frac{T - T_0}{T_0} \quad (2.59)$$

avec

- $\boldsymbol{\sigma}$: le tenseur des contraintes de Cauchy
- \mathbb{C} : le tenseur d'élasticité isotherme du 4^{ème} ordre non drainé
- \mathbf{A} : le tenseur d'ordre 2 du couplage thermo-mécanique non drainé
- \mathbf{B} : le tenseur de Biot, le tenseur de couplage hydro-mécanique
- M : le module de Biot
- ρ_0^f : la masse volumique du fluide à l'état de référence
- p : la pression de fluide
- C_{th} : la capacité de chaleur volumique non drainé à déformation nulle
- s_0 : l'entropie massique du fluide à l'état de référence

En éliminant m / ρ_0^f entre les équations (2.57) et (2.58) on obtient :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_0 + \mathbb{C}_0 : \boldsymbol{\varepsilon} - (p - p_0) \mathbf{B} - \mathbf{A}_0 (T - T_0) \quad (2.60)$$

Où l'on a posé :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_0 &= \mathbb{C} - M \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} \\ \mathbf{A}_0 &= \mathbf{A} - 3\alpha_m M \mathbf{B} \end{aligned} \quad (2.61)$$

\mathbf{A}_0 et \mathbb{C}_0 sont les équivalents en conditions drainées de \mathbf{A} et de \mathbb{C} . Dans le cas d'un matériau isotrope le tenseur d'élasticité isotherme drainé s'écrit $\mathbb{C}_0 = 3k_0 \mathbb{L} + 2\mu_0 \mathbb{J}$ et l'équation (2.60) prend la forme classique :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_0 + (3k_0 \mathbb{L} + 2\mu_0 \mathbb{J}) : \boldsymbol{\varepsilon} - b \mathbf{1} (p - p_0) - 3\alpha_m k_0 (T - T_0) \mathbf{1} \quad (2.62)$$

avec k_0 et μ_0 les coefficients de compressibilité et de cisaillement drainé, b le coefficient de Biot tel que $\mathbf{B} = b \mathbf{1}$ et α_b le coefficient de dilatation, \mathbb{L} et \mathbb{J} sont les opérateurs de projection orthogonaux : tels que $\mathbb{L} = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$ et $\mathbb{J} = \mathbb{I} - 1/3 \mathbb{L}$. Les équations (2.57) et (2.58) (ou de manière équivalente (2.60) et (2.61)) constituent les équations du comportement thermo-poro-élastique linéaire. Ces dernières exigent l'identification d'un certain nombre de paramètres physiques et mécaniques notamment les paramètres du couplage squelette-fluide. Il convient avant de passer à la suite de spécifier clairement les fonctions de couplage, leur interprétation physique ainsi que les notions de concept de conditions drainées et non drainées.

Conditions drainées

Il s'agit d'un système ouvert qui permet l'échange de matière avec l'extérieur et donc la dissipation des surpressions interstitielles (la pression de fluide est constante $p - p_0 = 0$).

Conditions non drainées

Le milieu est un système fermé qui ne permet pas l'échange de matière avec l'extérieur. La variation de la masse de fluide est nulle ($dm = 0$). Il en résulte la création de surpressions interstitielles qui affectent le comportement du squelette solide. Ces surpressions sont exprimées à travers le coefficient de Skempton par :

$$B_s = \left(\frac{\partial p}{\partial \sigma} \right)_{m_f, T} \quad (2.63)$$

Il est important de noter que ces deux définitions se rapportent au volume élémentaire du milieu poreux et non pas à la structure étudiée.

Le coefficient de Biot et le module de Biot quant à eux rendent compte de l'effet de la présence d'eau dans les pores sur le comportement macroscopique du matériau.

Coefficient de Biot

C'est le paramètre non dimensionné du couplage squelette-fluide qui traduit la variation de la contrainte totale engendrée par une variation de la pression interstitielle dans des conditions isothermes et à déformation nulle (Dormieux et al. 2006).

Module de Biot

Le module de Biot, homogène à une contrainte est le paramètre du couplage squelette-fluide qui traduit la variation de la pression interstitielle engendrée par l'apport de masse fluide dans des conditions isothermes et sans déformations (Dormieux et al. 2006).

Couplages poro-élastiques : relations de compatibilités

On s'intéresse dans cette section à l'établissement de relations complémentaires dites de compatibilité (Biot et Willis 1957) pour le milieu poreux. Ces relations permettent de diminuer le nombre de paramètres à identifier dans la formulation générale de la loi de comportement thermo-poro-élastique et qui sont à priori fortement couplés. On écrit la relation existant entre la variation de la porosité et les déformations volumiques du squelette et du matériau (Coussy 2004) :

$$e(1 - \phi_0) = (1 - \phi_0)e_s + \phi - \phi_0 \quad (2.64)$$

et la moyenne de la contrainte macroscopique à partir de celle du squelette et des pores :

$$s - s_0 = (1 - \phi_0)(s_s - s_{s,0}) - \phi_0(p - p_0) \quad (2.65)$$

Dans ces équations e et e_s représentent les déformations volumiques moyennes du matériau et du squelette solide ($e = (\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon})/3$; $e_s = (\text{tr}\boldsymbol{\varepsilon}_s)/3$). Dans l'état de référence elles sont égales à e_0 et e_{s0} . De même les contraintes hydrostatiques moyennes du matériau et du squelette s'écrivent : $s = (\text{tr}\boldsymbol{\sigma})/3$, $s_s = (\text{tr}\boldsymbol{\sigma}_s)/3$ et s_0 , s_{s0} sont leurs correspondants à l'état de référence. On suppose que le squelette solide est homogène avec un comportement élastique linéaire tel que :

$$s_s - s_{s0} = k_s e_s - k_s e_{s0} \quad (2.66)$$

avec k_s son module de compressibilité. En conditions isothermes les équations (2.62) et (2.58) peuvent prendre les formes :

$$s - s_0 = k_0 e - b(p - p_0) \quad (2.67)$$

$$p - p_0 = M \left(b e + \frac{m}{\rho_\beta^0} \right) \quad (2.68)$$

L'équation d'état du fluide saturant s'écrit :

$$p - p_0 = k_\beta \frac{\rho_\beta - \rho_\beta^0}{\rho_\beta^0} \quad (2.69)$$

On rappelle l'expression de l'apport de masse fluide introduit $m = \phi \rho_\beta - \phi_0 \rho_\beta^0$. On peut écrire donc :

$$\frac{m}{\rho_\beta^0} = \phi - \phi_0 + \phi_0 \frac{(p - p_0)}{k_\beta} \quad (2.70)$$

En combinant dans un premier temps les équations (2.64), (2.65) et (2.66) on a :

$$(s - s_0) \left(\frac{1}{k_s} - \frac{1}{k_0} \right) = -k_s (\phi - \phi_0) + \left(\frac{b}{k_0} - \frac{\phi_0}{k_s} \right) (p - p_0) \quad (2.71)$$

On élimine dans un second temps de l'équation (2.71) le terme $\phi - \phi_0$ à l'aide des équations (2.67), (2.68) et (2.70) et on la réécrit sous la forme :

$$(s - s_0) \left[\frac{1 - b}{k_0} - \frac{1}{k_s} \right] = (p - p_0) \left[\frac{1}{M} - \frac{b(1 - b)}{k_0} + \phi_0 \left(\frac{1}{k_s} - \frac{1}{k_\beta} \right) \right] \quad (2.72)$$

s et p sont des variables d'état indépendantes, ce qui permet d'identifier à 0 les termes entre crochets et d'en déduire :

$$b = 1 - \frac{k_0}{k_s} \quad (2.73)$$

Puis en remplaçant k_0 par $k_s(1-b)$ dans le crochet de droite :

$$\frac{1}{M} = \frac{b-\phi_0}{k_s} + \frac{\phi_0}{k_{ff}} \quad (2.74)$$

Cette dernière équation se retrouve aussi sous la forme

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{N} + \frac{\phi_0}{k_{ff}} \quad ; \quad \frac{1}{N} = \frac{b-\phi_0}{k_s} \quad (2.75)$$

N est dans ce cas le module de Biot du squelette solide tandis que M est le module de Biot du milieu poreux (squelette + porosité).

On remarque que le coefficient et le module de Biot dépendent de la porosité du matériau. Plus le matériau est poreux, plus le coefficient de Biot est élevé. La borne de Voigt qui repose sur le principe de minimisation de l'énergie potentielle conduit par exemple à une minoration du coefficient de Biot sous la forme :

$$\phi_0 \leq b = 1 - \frac{k_0}{k_s} \leq 1 \quad (2.76)$$

qui à son tour assure la positivité du module de Biot du solide N et du milieu poreux M . Beaucoup de résultats expérimentaux sur ces paramètres existent dans la littérature pour les argiles et les roches mais rares sont ceux qui concernent les matériaux cimentaires. Dans le cadre de la modélisation plusieurs auteurs abordent le problème sous l'angle de « contrainte effective ». Par définition c'est une fonction de la contrainte totale et de la pression interstitielle de l'eau, qui contrôle les effets mécaniques dus à une modification de l'état de contrainte auquel est soumis un élément de matériau. Terzaghi (1936) a été le premier à identifier le rôle important de la pression interstitielle dans la déformation des sols. Il définit la contrainte effective, la seule variable de contrainte à gouverner la réponse en déformation du milieu poreux saturé comme la différence entre la contrainte totale σ et la pression du fluide p :

$$\sigma_{eff} = \sigma - p\mathbf{1} \quad (2.77)$$

En réalité cette hypothèse n'est valable que dans le cas où l'on considère que la matrice solide est incompressible. (Lade et De Boer 1997) montrent que le principe de Terzaghi s'applique à la plupart des cas géotechniques mais que les écarts qu'il produit sont importants lorsque les contraintes sont élevées. (Biot et Willis 1957) à la suite des travaux de Terzaghi présentent une extension de ces résultats dans le cas où les grains solides ne sont pas incompressibles. Ils montrent que la contrainte effective doit s'écrire comme la différence entre la contrainte totale et une fraction χp de la pression interstitielle soit :

$$\sigma_{eff} = \sigma - \chi p\mathbf{1} = \sigma - bp\mathbf{1} \quad (2.78)$$

La condition $\chi = b = 1$ correspond à l'hypothèse initiale d'incompressibilité des grains solides de Terzaghi ($k_s \rightarrow \infty$). La notion de contrainte effective est souvent utilisée en mécanique des sols et des roches. D'autres expressions du coefficient χ ont été proposées :

$\chi = \phi$ (Pietruszczak et Pande 1995) pour les matériaux cimentaires ;

$\chi = 1 - a$ (Skempton et Bishop 1954; De Buhan et Dormieux 1999) pour les roches, a étant la surface de contact du squelette solide avec le fluide saturant la porosité ;

$\chi = 1 - \frac{(1-\phi)k_0}{k_s}$ (Suklje 1969) pour les sols.

II.5.2 Conditions partiellement saturées

Comme dans la condition saturée, la démarche est la même pour l'obtention de la loi de comportement. La variable lagrangienne $m_j = J\rho_j\phi_j - \rho_{j0}\phi_{j0}$ caractérise l'apport de la masse du fluide j par unité de volume du matériau poreux, avec J le jacobien de la transformation infinitésimale et l'indice 0 se rapportant toujours aux valeurs initiales. Les trois expressions qui constituent la base de la formulation thermo-poro-élastique dans la condition partiellement saturée s'écrivent (Bary 2004) :

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma}_0 + \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} - \left(\frac{m}{\rho_0^j} \right)_j M_{jk} \mathbf{B}_k - \mathbf{A}(T - T_0) \\ p &= p_{0j} + M_{jk} \left(-\mathbf{B}_k : \boldsymbol{\varepsilon} + \left(\frac{m}{\rho_0^j} \right)_k + 3\alpha_{m_k} (T - T_0) \right) \\ S &= S_0 + s_{0j} m_j + \mathbf{A} : \boldsymbol{\varepsilon} - 3 \left(\frac{m}{\rho_0} \right)_j M_{jk} \alpha_{m_k} + C_{tb} \frac{T - T_0}{T_0}\end{aligned}\quad (2.79)$$

On peut regrouper les deux premières équations sous la forme (Coussy 2004, Bary 2004) :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_0 + \mathbb{C}_0 : \boldsymbol{\varepsilon} - (p_j - p_{0j}) \mathbf{B}_j - \mathbf{A}_0 (T - T_0) \quad (2.80)$$

\mathbf{B}_j est le tenseur de Biot de la phase fluide j , M_{jk} est le module de Biot de la phase j lorsque $j=k$ et un module de couplage entre phases lorsque $j \neq k$ (définissant la variation de pression de la phase j quand la masse de la phase k varie). Rappelons que \mathbb{C} et \mathbb{C}_0 sont liés par la relation $\mathbb{C}_0 = \mathbb{C} - M_{jk} \mathbf{B}_j \otimes \mathbf{B}_k$ et $\mathbf{A}_0 = \mathbf{A} - 3\alpha_{m_j} M_{jk} \mathbf{B}_k$. Enfin $M_{jk} \alpha_{m_k}$ (avec sommation) caractérise l'évolution de la pression de la phase j quand la température relative $T - T_0$ change. Dans le cas isotrope la dernière équation s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_0 + (3k_0 \mathbb{L} + 2\mu_0 \mathbb{J}) : \boldsymbol{\varepsilon} - b_j \mathbf{1} (p_j - p_{0j}) - 3\alpha_{tb} k_0 (T - T_0) \mathbf{1} \quad (2.81)$$

b_j est le coefficient de Biot de la phase j .

Dans le cas où un ou plusieurs fluides ont un comportement fortement compressible (gaz), la linéarisation des enthalpies libres massiques g_j n'est plus possible car la masse volumique varie de manière importante en fonction de la pression ; de plus le degré de saturation des phases peut évoluer théoriquement de 0 à 100% (pour des cas courants de chargements en température même d'intensité modérée mais de longue durée on peut assister à un séchage quasi-complet du béton, soit une variation d'environ 90% à quelques % (Bary 2004)), ce qui interdit également le recours au développement limité. Le comportement devient alors non linéaire, certains des paramètres dépendent de la solution. Dans ce cas on peut par exemple postuler la forme des équations de la loi de comportement, ou plus couramment utiliser une forme incrémentale obtenue par différenciation. Les paramètres et tenseurs induits gardent la même signification mais correspondent alors à des propriétés tangentes.

Pour finir les relations de compatibilité dans le cas partiellement saturé (une phase liquide « l » et deux phases gazeuses (« v » pour la vapeur et « a » pour l'air sec) s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 b_l + b_g &= 1 - \frac{k_0}{k_s} \\
 (M_{\alpha j})^{-1} + (M_{\beta j})^{-1} &= \frac{b_j - \phi_j}{k_s} + \frac{\phi_j}{k_j}, \quad j = \alpha \text{ ou } l \text{ et } \alpha = v \text{ ou } a \\
 (M_{\alpha\alpha})^{-1} + (M_{\beta\alpha})^{-1} &= \frac{\phi_g}{k_\alpha}, \quad M_{\beta\alpha} = M_{\alpha\beta}, \quad \alpha = v \text{ ou } a \\
 \alpha_{m_\alpha} + \alpha_{m_l} &= \frac{-k_0}{k} \alpha_{m_0} + (1 - \phi) \alpha_{m_s} + \phi_g \bar{\alpha}_{m_\alpha} + \phi_l \bar{\alpha}_{m_l}, \quad \alpha = v \text{ ou } a
 \end{aligned} \tag{2.82}$$

Comme dans le cas des matériaux saturés, une seconde approche est de faire appel à la notion de contrainte effective. L'approche la plus connue dans le cas partiellement saturé est le modèle de (Bishop 1959) qui propose d'introduire une pression moyenne obtenue en pondérant la pression de la phase mouillante (eau) et des phases non mouillantes (mélange gazeux = vapeur d'eau + air sec) pour décrire la contrainte agissant effectivement sur le squelette solide :

$$\sigma_{eff} = \sigma + [\chi p_l + (1 - \chi) p_g] \tag{2.83}$$

avec p_l la pression de la phase liquide, p_g la pression du mélange gazeux et χ le paramètre de Bishop. Ce paramètre dépend du degré de saturation (Bishop et Bligh 1963). L'expression de χ la plus fréquemment rencontrée reste (Hassanizadeh et Gray 1980; Bear et Bachmat 1983; Lewis et Schrefler 1987) :

$$\chi = S_l \tag{2.84}$$

Ce paramètre est donc supposé varier de 0 pour un matériau sec à 1 pour un matériau saturé. On retrouve l'expression de la contrainte effective de Terzaghi en conditions saturées. Cette approche est très souvent rencontrée même si son utilisation sous entend l'hypothèse

d'incompressibilité des grains solides faite par Terzaghi. D'autres auteurs font intervenir par la suite d'autres poids dans la moyenne des pressions de fluides dans les pores (Lewis et Schrefler 1998; Gray et Schrefler 2001). (Coussy et al. 2004) en opposition à la pression moyenne de pores propose le concept de pression de pore équivalente π en procédant à l'extension de l'approche énergétique de la poroélasticité des milieux saturés aux milieux insaturés :

$$\pi = p_l - S_l (p_g - p_l) - U \quad (2.85)$$

Dans cette expression U l'énergie libre des interfaces, représente la contribution des effets de tensions superficielles qui devient de plus en plus prépondérante lorsque l'humidité relative diminue :

$$U = \int_{S_l}^1 p_c(S_l) dS_l \quad (2.86)$$

Les auteurs montrent que la prise en compte de ce terme peut rendre compte des effets de l'énergie de surface sur le retrait de séchage des matériaux cimentaires. Notons que certains auteurs obtiennent les relations de compatibilité à partir de raisonnements micromécaniques. Ce sera l'objet de la section suivante. Les différents modèles présentés ci-dessus supposent que le squelette solide du milieu poreux est homogène. Dans le cas des matériaux cimentaires fortement hétérogène avec un caractère multi-échelle, il est difficile de mettre en œuvre ce genre de modèles pour estimer les propriétés poro-élastiques quand on sait par exemple que le coefficient de compressibilité de la phase solide k_s intervient directement dans les différentes expressions. Une alternative à ce type de modèles est l'approche micromécanique et qui a été privilégiée dans cette étude. Il s'agit d'incorporer à l'échelle macroscopique des informations dont on dispose au sujet de la microstructure et de la physique se jouant à l'échelle microscopique. Un des intérêts de l'approche réside dans le fait que les formulations macroscopiques homogénéisées sont établies en considérant les constituants de base du milieu poreux et en estimant de façon plus réaliste leurs interactions compte tenu de leurs dispositions, formes, orientations etc....

II.6 Loi de comportement thermo-poro-élastique (approche *micro*)

L'approche micromécanique vise à déduire à partir d'informations sur les différentes phases constitutives du matériau à une échelle qu'on qualifie de microscopique, les propriétés homogénéisées du matériau à une échelle qui elle est macroscopique. Il s'agit d'une substitution des propriétés locales par des propriétés moyennes ou équivalentes. Cette démarche de manière générale se décline en trois phases : la représentation du volume élémentaire représentatif du matériau qui permet de bien séparer les deux échelles, la localisation qui est la résolution du problème posé sur les frontières du volume élémentaire et enfin l'homogénéisation des propriétés effectives du matériau.

II.6.1. Représentation : notion de VER

La démarche micromécanique repose sur la définition d'un volume élémentaire représentatif VER du matériau hétérogène. Il s'agit du volume qui représente le mieux possible les informations issues de la microstructure du matériau (mécanismes locaux, morphologie et orientation des différentes phases constituantes, etc...) mais malgré tout suffisamment simple pour permettre une résolution du problème posé. Le choix de ce volume élémentaire représentatif doit répondre aux conditions de séparation d'échelles. Dans le cas d'un milieu aléatoire on différencie trois longueurs caractéristiques : L est la longueur caractéristique de la taille de la structure ou de l'ouvrage étudié, l la longueur caractéristique du VER et d la longueur caractéristique de la taille des hétérogénéités. Pour que la méthode d'homogénéisation puisse être valable, l'ordre de grandeur de la longueur caractéristique du VER doit satisfaire les deux conditions suivantes :

- l est suffisamment petit devant L de façon à garantir que le matériau homogène équivalent défini à l'échelle macroscopique puisse être traité comme un milieu continu sur lequel les outils classiques de différenciation et d'intégration sont applicables et sur lequel on est en mesure de déterminer les champs de contraintes et de déformations.
- l est suffisamment grand devant la taille des hétérogénéités ou des pores, ce qui confère au VER son caractère représentatif de la statistique des hétérogénéités et permettant ainsi de caractériser son comportement par une loi homogène.

En résumé les deux conditions s'écrivent : $d \ll l \ll L$. Ces deux conditions sont illustrées sur la **Figure 2.8**.

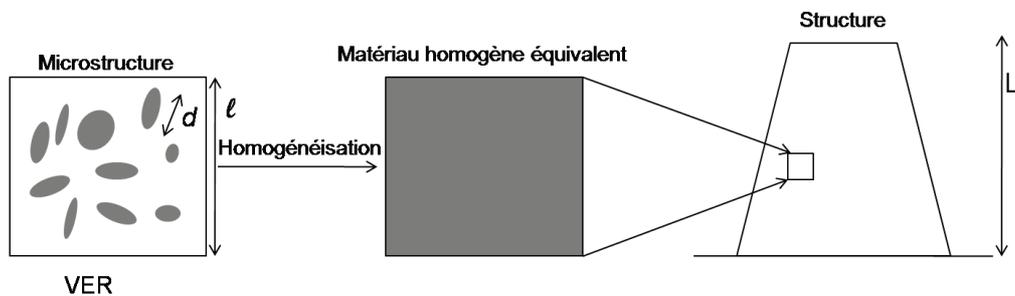


Figure 2.8 : Différentes échelles caractérisant la structure et son matériau constitutif

II.6.2. Localisation

Lorsque le VER est défini, la seconde étape du processus est la « localisation ». Il s'agit ici d'obtenir les relations entre les grandeurs microscopiques et macroscopiques par la résolution du problème posé sur le domaine Ω occupé par le VER. Deux sortes de conditions aux limites sont possibles à imposer : les conditions aux limites homogènes en déformation et les conditions aux limites homogènes en contrainte.

II.6.2.1 Conditions aux limites en déformation

Dans ce cas on impose sur le contour $\partial\Omega$ du VER le champ de déplacement affine $\underline{u}(\underline{x}) = \mathbf{E} \cdot \underline{x}$ avec \mathbf{E} la déformation macroscopique homogène et $\underline{u}(\underline{x})$ le champ de déplacement local. L'équilibre du domaine devant être assuré en l'absence des forces de volumes, on a (Dormieux et al. 2006) :

$$\begin{cases} \underline{u}(\underline{x}) = \mathbf{E} \cdot \underline{x} & (\partial\Omega) \\ \text{div}\boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) = 0 & (\Omega) \end{cases} \quad (2.87)$$

Compte tenu de la relation entre le déplacement $\underline{u}(\underline{x})$ et la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x})$, l'application du théorème de Gauss donne :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{\Omega} (u_{i,j} + u_{j,i}) d\Omega &= \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (u_{i,j} + u_{j,i}) dS = \frac{1}{2} \left[\mathbf{E}_{ik} \int_{\partial\Omega} x_k n_j dS + \mathbf{E}_{jk} \int_{\partial\Omega} x_k n_j dS \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\mathbf{E}_{ik} \int_{\Omega} x_{k,j} d\Omega + \mathbf{E}_{jk} \int_{\Omega} x_{k,i} d\Omega \right] = \frac{1}{|\Omega|} \mathbf{E}_{ij} \end{aligned} \quad (2.88)$$

On a alors :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) d\Omega = \mathbf{E} \quad (2.89)$$

Cette équation traduit le fait que la déformation homogène macroscopique \mathbf{E} est la moyenne spatiale des déformations locales induites par le champ de déplacement appliqué. En se plaçant dans le cadre de l'élasticité linéaire, le problème de localisation posé sur Ω est le suivant :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) = \mathbb{C}(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) & (\Omega) \\ \text{div}\boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) = 0 & (\Omega) \\ \underline{u}(\underline{x}) = \mathbf{E} \cdot \underline{x} & (\partial\Omega) \\ \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) = \frac{1}{2} (\nabla \underline{u} + {}^T \nabla \underline{u}) & (\Omega) \end{cases} \quad (2.90)$$

$\mathbb{C}(\underline{x})$ est le tenseur d'ordre 4 d'élasticité dans le domaine Ω . Le problème est linéaire et admet une solution unique. Le champ de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ associé au champ de déplacement dépend linéairement de la déformation macroscopique \mathbf{E} sous la forme :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) = \mathbb{A}(\underline{x}) : \mathbf{E} \quad \forall \underline{x} \in \Omega \quad (2.91)$$

\mathbb{A} est un tenseur du quatrième ordre appelé tenseur de localisation en déformation. En utilisant l'équation (2.89) on montre aisément que sa moyenne dans tout le VER est le tenseur identité d'ordre 4 :

$$\langle \mathbb{A} \rangle = \mathbb{I} \quad (2.92)$$

Par ailleurs il dépend de la position \underline{x} dans le domaine Ω et possède les propriétés de symétrie mineures c'est-à-dire $\mathbb{A}_{ijkl} = \mathbb{A}_{jikl} = \mathbb{A}_{ijlk} = \mathbb{A}_{jilk}$. Par contre la symétrie majeure n'est pas assurée : $\mathbb{A}_{ijkl} \neq \mathbb{A}_{klij}$.

II.6.2.2 Conditions aux limites homogènes en contrainte

Ici on impose sur la frontière $\partial\Omega$ une condition en effort \underline{T}^d tel que $\underline{T}^d = \underline{\Sigma} \cdot \underline{n}$. $\underline{\Sigma}$ est le tenseur des contraintes macroscopiques de Cauchy et \underline{n} le vecteur normal unitaire extérieur au domaine. En appliquant le théorème de Gauss on trouve de la même manière que dans le cas des conditions aux limites en déformation que la contrainte macroscopique $\underline{\Sigma}$ est la moyenne spatiale des contraintes locales induites par l'effort appliqué sur le contour $\partial\Omega$ soit :

$$\langle \underline{\sigma} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \underline{\sigma}(\underline{x}) d\Omega = \underline{\Sigma} \quad (2.93)$$

De manière analogue au cas des conditions homogènes en déformations le problème posé sur le VER s'écrit :

$$\begin{cases} \underline{\varepsilon}(\underline{x}) = \mathbb{S}(\underline{x}) : \underline{\sigma}(\underline{x}) & (\Omega) \\ \text{div} \underline{\sigma}(\underline{x}) = 0 & (\Omega) \\ \underline{\sigma} \cdot \underline{n}(\underline{x}) = \underline{\Sigma} \cdot \underline{n}(\underline{x}) & (\partial\Omega) \end{cases} \quad (2.94)$$

avec $\mathbb{S}(\underline{x})$ le tenseur de souplesse microscopique. La linéarité du problème permet de relier la contrainte à chaque point \underline{x} à la contrainte macroscopique par la relation suivante :

$$\underline{\sigma}(\underline{x}) = \mathbb{B}(\underline{x}) : \underline{\Sigma} \quad (2.95)$$

\mathbb{B} est le tenseur d'ordre 4 de localisation en contraintes et possède les mêmes caractéristiques que le tenseur \mathbb{A} (symétrie mineure et absence de symétrie majeure) :

$$\langle \mathbb{B} \rangle = \mathbb{I} \quad (2.96)$$

II.6.3. Homogénéisation

Il s'agit ici de déterminer l'expression du comportement moyen du milieu équivalent. Pour cela deux approches sont envisageables : l'approche directe et l'approche énergétique. Introduisons tout d'abord le lemme de Hill-Mandel.

II.6.3.1 Lemme de Hill-Mandel

Soient un champ de contrainte statiquement admissible ($\text{div}(\underline{\sigma}(\underline{x})) = 0$ dans Ω) et $\underline{\varepsilon}(\underline{x})$ un champ de déformation cinématiquement admissible. Si ces deux champs, non nécessairement

associés, vérifient la condition de contrainte homogène au contour ou déformation homogène au contour, alors on a :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle : \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \quad (2.97)$$

Et comme $\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ et $\mathbf{E} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$ on en déduit :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \boldsymbol{\Sigma} : \mathbf{E} \quad (2.98)$$

L'interprétation mécanique est que la moyenne spatiale du travail des efforts internes microscopiques correspond au travail macroscopique.

II.6.3.2 Approche directe

La loi de comportement à l'échelle microscopique permet d'écrire pour les deux sortes de conditions aux limites en déformation :

$$\boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) = \mathbb{C}(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) = \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) : \mathbf{E} \quad (2.99)$$

et en contraintes :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) = \mathbb{S}(\underline{x}) : \boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) = \mathbb{S}(\underline{x}) : \mathbb{B}(\underline{x}) : \boldsymbol{\Sigma} \quad (2.100)$$

Les tenseurs de rigidité et de souplesse homogénéisés \mathbb{C}^{hom} et \mathbb{S}^{hom} peuvent alors être obtenus en posant d'une part :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \langle \mathbb{C}(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) \rangle = \langle \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) : \mathbf{E} \rangle = \langle \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle : \mathbf{E} \quad (2.101)$$

$$\mathbf{E} = \langle \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) \rangle = \langle \mathbb{S}(\underline{x}) : \boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) \rangle = \langle \mathbb{S}(\underline{x}) : \mathbb{B}(\underline{x}) : \boldsymbol{\Sigma} \rangle = \langle \mathbb{S}(\underline{x}) : \mathbb{B}(\underline{x}) \rangle : \boldsymbol{\Sigma} \quad (2.102)$$

et d'autre part :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E} \quad (2.103)$$

$$\mathbf{E} = \mathbb{S}^{hom} : \boldsymbol{\Sigma} \quad (2.104)$$

ce qui permet d'écrire :

$$\mathbb{C}^{hom} = \langle \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle \quad (2.105)$$

$$\mathbb{S}^{hom} = \langle \mathbb{S}(\underline{x}) : \mathbb{B}(\underline{x}) \rangle \quad (2.106)$$

II.6.3.3 Approche énergétique

Une deuxième façon de caractériser le comportement équivalent consiste à travailler avec des grandeurs énergétiques. En se basant sur le principe des puissances virtuelles, on peut écrire que l'énergie du matériau homogénéisé (macroscopique) est égale à la moyenne des énergies microscopiques dans le VER, et ceci toujours pour les deux sortes de conditions aux limites soit en déformations :

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{E}) &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) : \mathbb{C}(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x})) = \frac{1}{2}(\mathbf{E} : {}^T \mathbb{A}(\underline{x}) : \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) : \mathbf{E}) \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{E} : ({}^T \mathbb{A}(\underline{x}) : \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x})) : \mathbf{E} = \frac{1}{2} \mathbf{E} : \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E}\end{aligned}\quad (2.107)$$

et en contraintes :

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{\Sigma}) &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) : \mathbb{S}(\underline{x}) : \boldsymbol{\sigma}(\underline{x})) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\Sigma} : {}^T \mathbb{B}(\underline{x}) : \mathbb{S}(\underline{x}) : \mathbb{B}(\underline{x}) : \boldsymbol{\Sigma}) \\ &= \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma} : ({}^T \mathbb{B}(\underline{x}) : \mathbb{S}(\underline{x}) : \mathbb{B}(\underline{x})) : \boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma} : \mathbb{S}^{hom} : \boldsymbol{\Sigma}\end{aligned}\quad (2.108)$$

A partir de l'application du Lemme de Hill-Mandel on montre que :

$$\langle {}^T \mathbb{A}(\underline{x}) : \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle = \langle \mathbb{C}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle \quad (2.109)$$

$$\langle {}^T \mathbb{B}(\underline{x}) : \mathbb{S}(\underline{x}) : \mathbb{B}(\underline{x}) \rangle = \langle \mathbb{S}(\underline{x}) : \mathbb{B}(\underline{x}) \rangle \quad (2.110)$$

Ces deux dernières équations montrent que les deux approches directe et énergétique sont équivalentes. Mais il faut préciser que la détermination du comportement homogénéisé dépend du type de conditions aux limites considérées sur le contour $\partial\Omega$. En effet les tenseurs \mathbb{C}^{hom} établi en déformations homogènes et \mathbb{S}^{hom} établi en contraintes homogènes sur le contour ne sont pas rigoureusement inverses l'un de l'autre. Hill et Mandel ont en effet montré que (Zaoui 2002) :

$$\mathbb{C}^{hom} : \mathbb{S}^{hom} = \mathbb{I} + o\left(\frac{d^3}{l^3}\right) \quad (2.111)$$

On rappelle que d est la taille des hétérogénéités et l la taille du VER. Les deux estimations du comportement effectif ne coïncident donc que pour une extension infinie du VER. Mais comme l'explique (Bornert 1996) et comme l'impose les deux conditions de validité du VER on peut toutefois se contenter d'une extension finie, à condition que la différence entre les deux estimations soit inférieure à la précision souhaitée ($d \ll l$). Dans la suite on considérera que cette condition est vérifiée de telle sorte que :

$$\mathbb{C}^{hom} : (\mathbb{S}^{hom})^{-1} = \mathbb{I} \quad (2.112)$$

Le comportement effectif est complètement déterminé si l'on connaît les tenseurs de localisation \mathbb{A} et \mathbb{B} en tout point \underline{x} ou leurs moyennes spatiales sur une phase dans le cas d'un matériau multi-phasique :

$$\mathbb{C}^{hom} = \sum_{j=1}^r f_j \mathbb{C}_j : \mathbb{A}_j^{moy} \quad (2.113)$$

avec f_j et \mathbb{C}_j la fraction volumique et le tenseur de rigidité de la phase j , r étant le nombre de phases. \mathbb{A}_j^{moy} est la moyenne du tenseur de localisation opérée sur la phase j . La détermination du comportement homogénéisé se résume donc à l'estimation des tenseurs \mathbb{A} et \mathbb{B} . Dans la pratique il est très rare de disposer de l'information suffisante (morphologie, distribution spatiale des différentes phases) pour déterminer exactement ces tenseurs. Les schémas d'homogénéisation que nous allons présenter proposent des estimations de ces tenseurs, moyennant des hypothèses sur la description géométriques des phases.

II.6.4. Schémas d'homogénéisation

Certains des schémas d'homogénéisation que nous présenterons par la suite comme par exemple le schéma de Mori-Tanaka ou le modèle auto-cohérent s'inspirent directement de la solution du problème de l'inclusion d'Eshelby. Nous reportons ici quelques résultats classiques relatifs à ce problème.

II.6.4.1 Le problème de l'inclusion d'Eshelby

La situation considérée par Eshelby est celle d'un domaine d'extension finie Ω^i « l'inclusion » et de rigidité \mathbb{C}^i plongé dans un milieu élastique infini Ω , « la matrice » isotrope, homogène et de rigidité \mathbb{C}^0 . Le milieu est considéré dans son état naturel c'est-à-dire que la contrainte (interne ou résiduelle) est nulle en tout point \underline{x} dans la configuration considérée. La configuration dans laquelle on a $\mathbb{C}^i = \mathbb{C}^0$ est classiquement appelée le problème de l'inclusion d'Eshelby. Les champs de contraintes et de déformations dans l'inclusion en réponse à une sollicitation appliquée à l'infini sont obtenus naturellement par l'élasticité des deux milieux homogènes : il n'y a pas de contraste mécanique entre les deux phases. Considérons à présent la situation où l'inclusion subit une transformation physique (transformation de phase, dilatation thermique consécutive à une élévation locale de la température, ou encore à une transformation liée à une propriété électrique ou magnétique du matériau) qui conduirait s'il n'était pas inséré dans Ω à un changement de forme et ou de taille. Le reste du domaine Ω n'est pas soumis à cette transformation et l'interface $\partial\Omega^i$ entre Ω et Ω^i de normale \underline{n} est supposée parfaite. La présence du matériau non transformé autour de l'inclusion va empêcher cette dernière de se déformer comme si elle était libre : c'est l'incompatibilité des déformations. Le milieu infini s'oppose à la déformation de l'inclusion et l'état d'équilibre correspond à l'état dans lequel l'inclusion s'est déformée dans un état différent de son état de déformation libre, mais dans lequel le milieu d'extension infini s'est aussi déformé, quittant son état relâché. Les contraintes dans cet état d'équilibre sont donc non

Les champs de contrainte et de déformation solutions du problème dépendent linéairement de la déformation libre homogène $\boldsymbol{\varepsilon}^*$: il en est donc de même de la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}^i$ (Eshelby 1957; Bornert et al. 2001) :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^i = \mathbb{S}^E : \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (2.115)$$

avec \mathbb{S}^E le tenseur du quatrième ordre, appelé tenseur d'Eshelby dont l'expression est donnée par :

$$\mathbb{S}^E = -\frac{\mathbb{C}_{mnlk}^0}{2} \int_{\Omega^i} [\boldsymbol{\Gamma}_{ij}(y-x)] d\Omega_y \quad (2.116)$$

où $\boldsymbol{\Gamma}_{ij}(y-x)$ est l'opérateur de Green reliée à la fonction de Green $\mathbf{G}_{jm,ni}(y-x)$ par :

$$\boldsymbol{\Gamma}_{ij}(y-x) = \mathbf{G}_{im,nj}(y-x) + \mathbf{G}_{jm,ni}(y-x) \quad (2.117)$$

Le tenseur d'Eshelby dépend des modules d'élasticité \mathbb{C}^0 du milieu infini ainsi que de la forme et de l'orientation de l'inclusion. On vérifie facilement (Eshelby 1957) que le problème ne comporte pas de taille caractéristique : la taille de l'inclusion ne modifie pas la solution. Le tenseur d'eshelby ne dépend en tout que de deux rapports de forme et de trois angles (d'Euler par exemple). Il vérifie les symétries $\mathbb{S}_{ijkl}^E = \mathbb{S}_{jikl}^E = \mathbb{S}_{ijlk}^E$ mais on a $\mathbb{S}_{ijkl}^E \neq \mathbb{S}_{klij}^E$. L'expression analytique de ce tenseur est difficile à obtenir analytiquement sauf dans certaines configurations particulières comme par exemple une inclusion sphérique et homogène plongée dans une matrice élastique et isotrope. Dans ce cas le tenseur d'Eshelby s'écrit :

$$\mathbb{S}_{sph}^E = \frac{3k^0}{(3k^0 + 4\mu^0)} \mathbb{I} + \frac{6(3k^0 + 2\mu^0)}{5(3k^0 + 4\mu^0)} \mathbb{L} \quad (2.118)$$

avec k^0 et μ^0 les modules de compressibilité et de cisaillement de la matrice. Dans le cas d'un ellipsoïde homogène de rapport d'aspect α , on dispose également des expressions analytiques des termes du tenseur d'Eshelby. En notant a le rayon du grand axe de l'ellipsoïde et c la dimension de l'ellipsoïde suivant le petit axe, le rapport d'aspect est donné par $\alpha = c/a$. En supposant que l'axe de révolution de l'ellipsoïde est orienté selon la direction e_3 les termes du tenseur d'Eshelby s'écrivent (écriture de Voigt) (Torquato 2001) :

$$\begin{aligned}
\mathbb{S}_{11}^E = \mathbb{S}_{22}^E &= \frac{1}{4(1-\nu^0)} \left[\frac{3\alpha^2}{2(\alpha^2-1)} + \left((1-2\nu^0) - \frac{9}{4(1-\alpha^2)} \right) q \right], \\
\mathbb{S}_{33}^E &= \frac{1}{4(1-\nu^0)} \left[1-2\nu^0 + \frac{(3\alpha^2-1)}{2(\alpha^2-1)} + \left((1-2\nu^0) + \frac{3}{(1-\alpha^2)} \right) q \right], \\
\mathbb{S}_{12}^E = \mathbb{S}_{21}^E &= \frac{1}{4(1-\nu^0)} \left[\frac{\alpha^2}{2(\alpha^2-1)} - \left((1-2\nu^0) + \frac{3}{4(1-\alpha^2)} \right) q \right], \\
\mathbb{S}_{31}^E = \mathbb{S}_{13}^E &= \frac{1}{4(1-\nu^0)} \left[-\frac{\alpha^2}{2(\alpha^2-1)} - \left((1-2\nu^0) - \frac{3}{(1-\alpha^2)} \right) q \right], \\
\mathbb{S}_{23}^E = \mathbb{S}_{32}^E &= \frac{1}{2(1-\nu^0)} \left[-1+2\nu^0 \frac{\alpha^2}{2(\alpha^2-1)} + \left((1-2\nu^0) + \frac{3}{2(1-\alpha^2)} \right) q \right], \\
\mathbb{S}_{44}^E = \mathbb{S}_{55}^E &= \frac{1}{2(1-\nu^0)} \left[1-2\nu^0 + \frac{(\alpha^2+1)}{2(\alpha^2-1)} - \frac{1}{2} \left((1-2\nu^0) + \frac{3}{(1-\alpha^2)} \right) q \right], \\
\mathbb{S}_{66}^E &= \frac{1}{2(1-\nu^0)} \left[\frac{\alpha^2}{2(\alpha^2-1)} + \left((1-2\nu^0) - \frac{3}{4(1-\alpha^2)} \right) q \right],
\end{aligned} \tag{2.119}$$

avec

$$q = \begin{cases} \frac{\alpha}{(\alpha^2-1)^{3/2}} \left[r\sqrt{\alpha^2-1} - \cosh^{-1}(\alpha) \right], & \alpha \geq 1 \\ \frac{r}{(1-\alpha^2)^{3/2}} \left[-r\sqrt{1-\alpha^2} + \cos^{-1}(\alpha) \right], & \alpha \leq 1 \end{cases}$$

et ν^0 le coefficient de Poisson de la matrice.

II.6.4.2 Tenseur de polarisation

Dans l'inclusion, l'équation de comportement peut être réécrite sous la forme :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\tau} ; \boldsymbol{\tau} = -\mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad \text{dans } \Omega^i \tag{2.120}$$

Le tenseur d'ordre deux $\boldsymbol{\tau}$ est appelé le tenseur de polarisation. Il s'interprète comme la contrainte qui apparaîtrait dans l'inclusion après la transformation de phase de cette dernière si on bloquait totalement sa déformation ($\boldsymbol{\varepsilon} = 0$). Il peut être plus intéressant d'exprimer la solution d'Eshelby en fonction de la polarisation plutôt que de la déformation libre, soit :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^i = -\mathbb{P} : \boldsymbol{\tau} \quad \text{avec} \quad \mathbb{P} = \mathbb{S}^E : \mathbb{C}^{-1} = \mathbb{S}^E : \mathbb{S} \tag{2.121}$$

Il dépend aussi des modules d'élasticité de la matrice, ainsi que de la forme et de l'orientation de l'inclusion. Généralement le tenseur de Hill, défini positif est plus commode d'utilisation que le tenseur d'Eshelby puisqu'il est symétrique mineure et majeure. Pour un comportement isotrope de l'inclusion, le tenseur de Hill se réduit à :

$$\mathbb{P} = \frac{1}{3} \frac{3k^0}{k^0(3k^0 + \mu^0)} \mathbb{I} + \frac{6}{5} \frac{(k^0 + 2\mu^0)}{\mu^0(3k^0 + \mu^0)} \mathbb{L} \quad (2.122)$$

II.6.4.3 Le problème de l'inhomogénéité d'Eshelby

Intéressons nous maintenant au cas où il existe un contraste mécanique entre l'inclusion et la matrice ($\mathbb{C}^0 \neq \mathbb{C}^i$). Pour aborder ce problème, la solution fondamentale d'Eshelby qu'on vient de voir va être réutilisée. La situation envisagée est toujours un milieu Ω élastique linéaire, infini et homogène dans laquelle une petite zone bornée « l'inclusion » Ω^i , de forme ellipsoïdale présente une inhomogénéité des modules d'élasticité. Les autres conditions sont les mêmes que dans le problème de l'inclusion d'Eshelby (confère équation (2.114)). Comme précédemment, supposons que l'inclusion subisse une transformation caractérisée par une polarisation $\boldsymbol{\tau}$ qui en l'absence de Ω conduirait à une déformation libre homogène $\boldsymbol{\varepsilon}^* = -\mathbb{S}^i : \boldsymbol{\tau}$. De la même manière que précédemment, il y a une incompatibilité des déformations, ce qui induit un état mécanique non relâché caractérisé par les équations suivantes :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^i : \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\tau} & (\Omega^i) \\ \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon} & (\Omega) \\ \underline{u} \rightarrow 0 & (\|\underline{x}\| \rightarrow \infty) \\ \text{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0 & (\Omega) \\ \|\boldsymbol{\sigma}\| = 0 \text{ et } \|\boldsymbol{\varepsilon}\| = 0 & (\partial\Omega^i) \end{cases} \quad (2.123)$$

Afin d'appliquer la propriété d'Eshelby, on peut réécrire la relation de comportement de l'inclusion sous la forme $\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\tau}'$ avec $\boldsymbol{\tau}' = \boldsymbol{\tau} + (\mathbb{C}^i - \mathbb{C}^0) : \boldsymbol{\varepsilon}$. A ce stade, on ne peut toutefois appliquer le problème d'Eshelby que lorsque la polarisation $\boldsymbol{\tau}'$ est homogène dans Ω^i , ce qui n'est à priori pas assuré puisque le champ de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ peut varier dans Ω^i . On fait tout de même l'hypothèse qu'il est homogène et égal à $\boldsymbol{\varepsilon}^i$. La propriété d'Eshelby peut alors s'appliquer. La déformation dans l'inclusion satisfait l'équation :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^i = -\mathbb{P} : \boldsymbol{\tau}' = \mathbb{P} : (\boldsymbol{\tau} + (\mathbb{C}^i - \mathbb{C}^0) : \boldsymbol{\varepsilon}^i) \quad (2.124)$$

Et comme le tenseur de Hill est inversible on a :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^i = -\left(\mathbb{I} + \mathbb{P} : (\mathbb{C}^i - \mathbb{C}^0)\right)^{-1} : (\mathbb{P} : \boldsymbol{\tau}) \quad (2.125)$$

Nous considérons le cas où on soumet la matrice à un chargement homogène à « l'infini » : les conditions aux limites sur la frontière de Ω sont supposées telles que la déformation tend vers la déformation homogène $\boldsymbol{\varepsilon}^\infty$ lorsqu'on s'éloigne de Ω^i ($\|\mathbf{x}\| \rightarrow \infty$). Dans ces conditions les contraintes tendent vers :

$$\boldsymbol{\sigma}^\infty = \mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}^\infty \quad (2.126)$$

(Eshelby 1957) montre que la résolution du problème ainsi posé (problème classique d'Eshelby auquel on ajoute un chargement à l'infini) est équivalente à la résolution du problème classique de l'inclusion à laquelle on superpose des champs de contraintes et de déformations homogènes en tout point et respectivement égaux à $\boldsymbol{\sigma}^\infty$ et $\boldsymbol{\varepsilon}^\infty$. On a alors :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^i = \left(\mathbb{I} + \mathbb{P} : (\mathbb{C}^i - \mathbb{C}^0) \right)^{-1} : (\boldsymbol{\varepsilon}^\infty - \mathbb{P} : \boldsymbol{\tau}) \quad (2.127)$$

Dans le cas particulier où la déformation initiale ou la précontrainte est nulle on retrouve :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^i = \left(\mathbb{I} + \mathbb{P} : (\mathbb{C}^i - \mathbb{C}^0) \right)^{-1} : \boldsymbol{\varepsilon}^\infty \quad (2.128)$$

Dans le cas particulier d'une inhomogénéité sphérique on a :

$$\mathbf{e}_b^i = \frac{1}{1+b \frac{\mu^i - \mu^0}{\mu^i}} \mathbf{e}_b^\infty \quad ; \quad \mathbf{e}_d^i = \frac{1}{1+a \frac{k^i - k^0}{k^i}} \mathbf{e}_d^\infty \quad (2.129)$$

ou \mathbf{e}_b^i et \mathbf{e}_d^i sont les parties hydrostatiques et déviatoriques du tenseur champ de déformation dans l'inclusion $\boldsymbol{\varepsilon}^i$. De même \mathbf{e}_b^∞ et \mathbf{e}_d^∞ sont respectivement les parties hydrostatiques et déviatoriques du champ de déformation imposé à l'infini $\boldsymbol{\varepsilon}^\infty$. Les coefficients a et b sont fonctions des modules de compressibilité et de cisaillement de l'inclusion tels que :

$$a = \frac{3k^i}{3k^i + 4\mu^i} \quad ; \quad b = \frac{6(k^i + 2\mu^i)}{5(3k^i + 4\mu^i)} \quad (2.130)$$

La solution du problème de l'inhomogénéité d'Eshelby constitue le soubassement de nombreux schémas d'homogénéisation. Nous proposons dans la suite de passer en revue certains d'entre eux qu'on retrouve fréquemment dans le cadre de l'homogénéisation des matériaux cimentaires.

II.6.4.4 Le schéma dilué d'Eshelby

On considère un matériau constitué de n familles d'inclusions, de rigidité \mathbb{C}^i dispersées dans une matrice de rigidité \mathbb{C}^0 . Le schéma dilué admet qu'on peut négliger les interactions entre les inclusions. C'est le cas selon (Christensen 1990) lorsque la fraction volumique de chaque famille d'inclusions est suffisamment faible pour que l'on ait $\sum_j^n f_j \ll 1$ typiquement dans le cas où la

fraction volumique des inclusions est inférieure à 3%. Dans cette configuration l'estimation du tenseur de localisation de la déformation se fait pour chaque inclusion comme si elle était isolée et noyée dans le milieu de référence, la matrice (voir **Figure 2.10**).

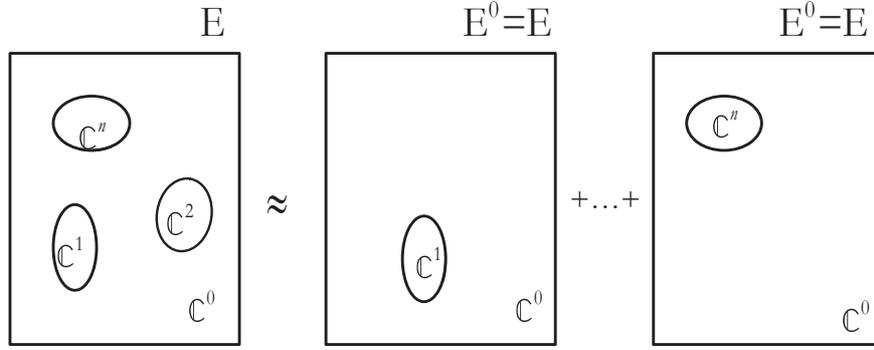


Figure 2.10 : Principe du schéma dilué

La solution du problème d'Eshelby s'applique alors pour chaque inclusion j et la déformation moyenne de chaque famille d'inclusion s'écrit ($\boldsymbol{\varepsilon}^\infty = \mathbf{E}$) :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_r = \left(\mathbb{I} + \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}^0) \right)^{-1} : \mathbf{E} \quad (2.131)$$

On en déduit le tenseur de localisation de la déformation :

$$\mathbb{A}_j^{dil} = \left(\mathbb{I} + \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}^0) \right)^{-1} \quad (2.132)$$

Finalement le tenseur de rigidité homogénéisé prend la forme :

$$\mathbb{C}^{dil} = \mathbb{C}^0 + \sum_j^n f_j (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}^0) : \left[\mathbb{I} + \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}^0) \right]^{-1} \quad (2.133)$$

Dans le cas particulier du matériau biphasé où les inclusions de comportement élastique isotrope et de forme sphérique (indiquées 1) sont noyées dans la matrice également de forme sphérique, les modules de compressibilité et de cisaillement s'écrivent :

$$\kappa_{dil} = \kappa_0 \left(1 + f_1 \frac{\kappa_1 - \kappa_0}{\kappa_1 + a(\kappa_0 - \kappa_1)} \right) ; \quad \mu_{dil} = \mu_0 \left(1 + f_1 \frac{\mu_1 - \mu_0}{\mu_1 + b(\mu_0 - \mu_1)} \right)$$

Le domaine de validité du modèle est assez limité. Il faut que les inclusions soient suffisamment dispersées pour que leur interaction puisse être négligée.

II.6.4.5 Le schéma de Mori-Tanaka

Ce schéma a été proposé par (Mori et Tanaka 1973). Il est comparable au schéma dilué d'Eshelby mais est étendu pour une fraction volumique d'inclusions plus élevée. Le principe de l'estimation consiste à remplacer toutes les inclusions de même forme et de même orientation par une inclusion unique ellipsoïdale équivalente ayant les modules d'élasticité \mathbb{C}^0 de la matrice et soumise à l'infini à un champ de déformation moyen égal au champ de la matrice. Ce champ de déformation \mathbf{E}^0 est la somme du champ macroscopique appliqué \mathbf{E} et d'un champ homogène qui représente « l'effet moyen » des autres inclusions, ce qui permet de prendre en compte partiellement l'interaction entre les inclusions. La moyenne du champ de déformation pour une phase est donnée par :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_j = \left(\mathbb{I} + \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}^0) \right)^{-1} : \mathbf{E}^0 \quad (2.134)$$

Il est possible d'obtenir une relation entre les champs de déformation \mathbf{E}^0 et \mathbf{E} en utilisant la condition $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \mathbf{E}$, soit :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \sum_j^n f_j \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_j = \left\langle \left(\mathbb{I} + \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}^0) \right)^{-1} : \mathbf{E}^0 \right\rangle = \mathbf{E} \quad (2.135)$$

On en déduit que :

$$\mathbf{E}^0 = \left\langle \left(\mathbb{I} + \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}^0) \right)^{-1} \right\rangle^{-1} : \mathbf{E} \quad (2.136)$$

Le tenseur de localisation par phase qui relie la moyenne des déformations à la déformation macroscopique par $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_j = \mathbb{A}_j^{MT} : \mathbf{E}$ est donc obtenu par :

$$\mathbb{A}_j^{MT} = \left(\mathbb{I} + \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}^0) \right)^{-1} : \left\langle \left(\mathbb{I} + \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}^0) \right)^{-1} \right\rangle^{-1} \quad (2.137)$$

Le tenseur de rigidité effectif s'obtient par le processus classique d'homogénéisation (moyenne volumique) :

$$\mathbb{C}_{hom}^{MT} = \left\langle \mathbb{C}^j : \left(\mathbb{I} + \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}^0) \right)^{-1} \right\rangle : \left\langle \left(\mathbb{I} + \mathbb{P}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}^0) \right)^{-1} \right\rangle^{-1} \quad (2.138)$$

Le comportement homogène équivalent dépend des propriétés d'élasticité et de la fraction volumique des inclusions ainsi que de leurs orientations à travers le tenseur \mathbb{P}^0 .

Dans le cas particulier du matériau biphasé, les modules d'élasticité homogénéisés s'écrivent :

$$\kappa^{MT} = \kappa_0 \left(1 + f_1 \frac{(\kappa_1 - \kappa_0)}{\kappa_0 + a(1 - f_1)(\kappa_1 - \kappa_0)} \right) ; \mu^{MT} = \mu_0 \left(1 + f_1 \frac{(\mu_1 - \mu_0)}{\mu_0 + b(1 - f_1)(\mu_1 - \mu_0)} \right) \quad (2.139)$$

II.6.4.6 Le schéma auto-cohérent classique

Ce modèle a été initialement conçu pour décrire le comportement élastique des polycristaux (Hill 1965). L'idée générale consiste comme dans le schéma Mori-Tanaka à remplacer le problème de localisation relatif à une famille j de grains (ou plus généralement à une phase) de même orientation et caractérisé par un tenseur de rigidité \mathbb{C}^j par le problème de l'inclusion d'Eshelby. Mais cette fois-ci la déformation moyenne dans cette phase est supposée égale à la déformation moyenne homogène dans l'inclusion qui serait noyée dans un milieu infini qui possède le comportement du milieu homogène équivalent recherché \mathbb{C}_{hom}^{AC} . En effet le schéma considère qu'aucune phase n'est dominante et que le voisinage direct de chaque inclusion est le milieu effectif c'est-à-dire $\mathbb{C}^0 = \mathbb{C}_{hom}^{AC}$. La déformation moyenne dans chaque phase s'écrit alors :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_j = \left(\mathbb{I} + \mathbb{P}_{AC}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}_{hom}^{AC}) \right)^{-1} : \mathbf{E}^0 \quad (2.140)$$

Le tenseur de localisation de la déformation est déterminée comme précédemment ce qui permet d'obtenir le tenseur effectif à partir de l'équation implicite suivante :

$$\mathbb{C}_{hom}^{AC} = \left\langle \mathbb{C}^j : \left(\mathbb{I} + \mathbb{P}_{AC}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}_{hom}^{AC}) \right)^{-1} \right\rangle : \left\langle \left(\mathbb{I} + \mathbb{P}_{AC}^0 : (\mathbb{C}^j - \mathbb{C}_{hom}^{AC}) \right)^{-1} \right\rangle^{-1} \quad (2.141)$$

La résolution de cette équation se fait selon une procédure itérative. Celle-ci peut être réalisée à partir du module donné par le schéma Mori-Tanaka \mathbb{C}_{hom}^{MT} qui est utilisé comme module initial et qui procure une première estimation de \mathbb{C}_{hom}^{AC} réutilisée comme nouvelle matrice, et ceci ainsi de suite jusqu'à nouvelle convergence en fonction d'un critère qu'on s'est fixé initialement. La procédure peut être aussi initialisée à partir des bornes de Voigt et de Reuss. La nature implicite du schéma auto-cohérent rend son utilisation plus difficile que le schéma Mori-Tanaka. Pour un matériau biphasé dont les inclusions isotropes sont sphériques, l'équation tensorielle (2.141) se réduit au système d'équations suivant :

$$\begin{aligned} (1-f_1) \frac{k^0 - k^{AC}}{1+a \frac{k^0 - k^{AC}}{k^{AC}}} + f_1 \frac{k^1 - k^{AC}}{1+a \frac{k^1 - k^{AC}}{k^{AC}}} &= 0 \\ (1-f_1) \frac{\mu^0 - \mu^{AC}}{1+b \frac{\mu^0 - \mu^{AC}}{\mu^{AC}}} + f_1 \frac{\mu^1 - \mu^{AC}}{1+b \frac{\mu^1 - \mu^{AC}}{\mu^{AC}}} &= 0 \end{aligned} \quad (2.142)$$

II.6.4.7 Assemblage des sphères de Hashin

L'assemblage de sphères composite ou le modèle de sphères composites a été proposé par (Hashin 1962). Il s'agit de représenter le VER comme un assemblage formé d'une inclusion assimilée à une sphère et entourée d'une couronne de matrice qui lui est associée. Les dimensions de ces sphères composites peuvent être variables mais les rayons des sphères sont tels que les fractions volumiques de l'inclusion et de la matrice sont les mêmes, le ratio R_i/R_m étant

constant pour toutes les sphères composites (**Figure 2.11**). La distribution des sphères composites nécessite une diminution infinitésimale de la taille des inclusions pour que le VER soit totalement rempli.

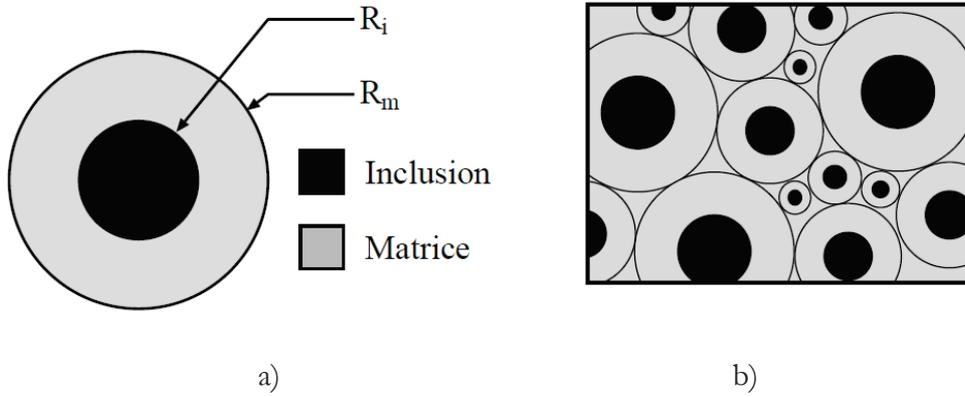


Figure 2.11 : a) Sphère composite b) Assemblage des sphères de Hashin (Bornert 1996).

Le comportement effectif est obtenu en considérant que les deux représentations suivantes sont équivalentes. La première est celle du VER considéré comme homogène : les conditions aux limites \mathbf{E} ou $\mathbf{\Sigma}$ étant homogènes, les champs de déformation et de contrainte $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbb{C}_{hom})$ ou $\boldsymbol{\sigma}(\mathbb{C}_{hom})$ sont également homogènes dans le VER. La deuxième représentation consiste à isoler une sphère composite qu'on va noter Ω_j et soumise à sa frontière $\partial\Omega_j$ aux mêmes conditions aux limites macroscopiques \mathbf{E} ou $\mathbf{\Sigma}$. Rigoureusement les deux représentations sont identiques si pour la condition aux limites en contraintes $\mathbf{\Sigma}$, (resp \mathbf{E}) les champs de déformation (resp champs de contraintes) sont parfaitement identiques sur la frontière $\partial\Omega_j$. L'inclusion composite est alors dite neutre. Lorsque le comportement des phases est isotrope on obtient une solution analytique relativement simple pour un chargement sphérique $\mathbf{\Sigma} = p\mathbf{1}$. Hashin en déduit une borne supérieure et une borne inférieure pour le module de compressibilité homogène équivalent et qui sont connus sous le nom de bornes d'Hashin. Pour le module de compressibilité ces deux bornes sont confondues et correspondent à la valeur exacte d'une telle représentation de la structure :

$$k^{Hashin} = k^0 + (k^1 - k^0) \frac{f(4k^1 + 3\mu^1)}{4\mu^0 + 3k^1 + 3f(k^0 - k^1)} \quad (2.143)$$

II.6.4.8 Schéma à trois phases (schéma auto-cohérent généralisé)

Sur la base du modèle des sphères composite d'Hashin, (Christensen et Lo 1979) ont développé le schéma à trois phases composites ou encore appelé le schéma auto-cohérent généralisé. Les auteurs utilisent la solution analytique d'une sphère à composites isotropes, noyée dans un milieu

infini homogène et soumis à un chargement homogène à l'infini. Comme dans le cas du schéma auto-cohérent classique ce milieu infini est caractérisé par les propriétés du milieu homogénéisé équivalent dont on cherche à déterminer les propriétés effectives. Les auteurs utilisent le « principe d'énergie équivalente » rappelé par (Bornert 1996) et qui stipule que l'énergie ψ contenue dans la structure complète c'est-à-dire la sphère composite et le milieu infini soumise à un chargement donné est égale à l'énergie ψ_0 contenue dans le milieu infini sans hétérogénéité et soumis au même chargement. Ces deux énergies sont reliées par l'équation suivante lorsque les conditions aux limites sont imposées en déplacement :

$$\psi(\mathbb{C}_{hom}, \mathbb{C}^j, \mathbb{C}^0) = \psi_0(\mathbb{C}_{hom}) - \frac{1}{2} \int_S (\underline{T}^{d0} \underline{u} - \underline{T}^d \underline{u}^0) dS \quad (2.144)$$

Ou en effort imposé :

$$\psi(\mathbb{C}_{hom}, \mathbb{C}^j, \mathbb{C}^0) = \psi_0(\mathbb{C}_{hom}) + \frac{1}{2} \int_S (T^{d0} \underline{u} - T^d \underline{u}^0) dS \quad (2.145)$$

\underline{T}^d et \underline{u} sont respectivement le vecteur contrainte et le vecteur déplacement dans le problème avec inclusion, \underline{T}^{d0} et \underline{u}^0 sont les mêmes grandeurs dans le cas du problème sans inclusions. La neutralité énergétique ou le principe d'énergie équivalente revient à annuler le terme sous intégrale soit :

$$\frac{1}{2} \int_S (T^{d0} \underline{u} - T^d \underline{u}^0) dS = 0 \quad (2.146)$$

Cette condition permet de déterminer les modules de compressibilité et de cisaillement effectifs du modèle. Le module de compressibilité est le même que celui déterminé par Hashin dans le cas des sphères composites. Le module de cisaillement lui est donné par la racine positive de l'équation du second degré sous la forme :

$$A\mu_{hom}^2 + B\mu_{hom} + C = 0 \quad (2.147)$$

A , B et C sont des expressions qui dépendent des paramètres élastiques des différentes phases ainsi que de leur fraction volumique (annexe 1). (Herve et Zaoui 1993) ont étendu le schéma à trois phases au modèle à $n+1$ phases. Il s'agit de n inclusions concentriques noyées dans un milieu homogène équivalent (phase $n+1$). L'interface entre les phases est supposée parfaite.

II.6.4.9 Schéma « Effective Self-Consistent Scheme » (ESCS)

Dans les approches décrites jusqu'à présent la distribution spatiale des inclusions n'est pas prise en compte explicitement (sauf dans le cas du schéma Mori-Tanaka d'une certaine manière). Une des particularités de ce modèle-ci est de la prendre en compte. Le principe du modèle est schématisé sur la **Figure 2.12**.

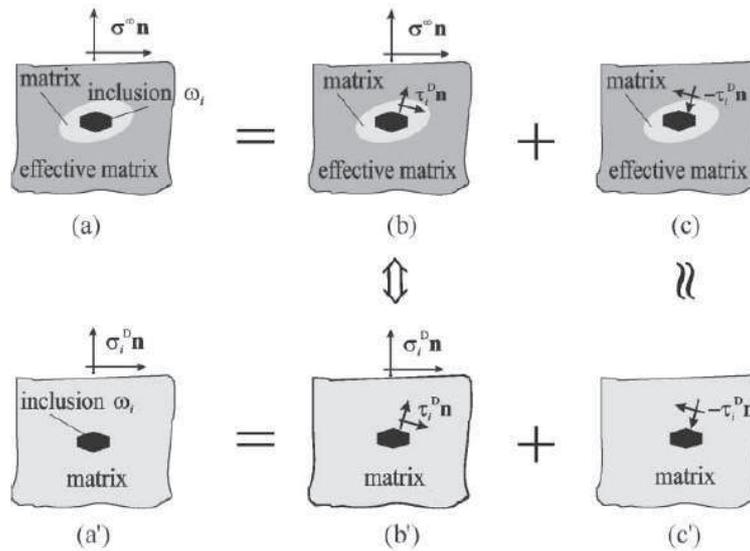


Figure 2.12 : principe du schéma ESCS (Zheng et Du 2001).

Chaque famille d'inclusion est supposée être entourée d'une couche de matrice formant avec elle une « cellule » dont la forme et l'orientation sont censées être représentative de la distribution spatiale de cette famille d'inclusions. La **Figure 2.13** montre un exemple de cellule géométrique en 2D formée par des inclusions sphériques avec une distribution spatiale ellipsoïdale. Le rapport d'aspect de l'inclusion est noté α et celui de la cellule géométrique β .

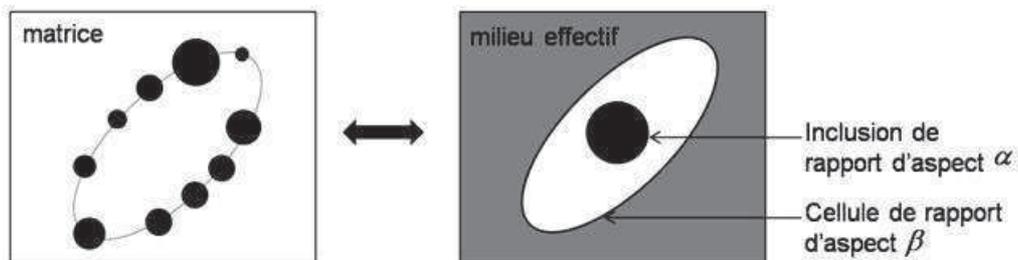


Figure 2.13 : Cellule de distribution d'une famille d'inclusion

La cellule qui est l'ensemble de l'inclusion w_i et de la couche de matrice, notée w_{Di} (D pour distribution) est immergée dans le milieu effectif dont on cherche à déterminer les propriétés homogénéisées. On fait l'hypothèse que le rapport du volume de l'inclusion sur celui de la cellule est un infiniment petit de la fraction volumique de la famille de l'inclusion dans le composite soit (Zheng et Du 2001) :

$$\frac{\text{vol } w_i}{\text{vol } w_{Di}} = o(f) \quad (2.148)$$

On décompose le problème initial (a) en deux problèmes élémentaires (b) et (c) comme sur la **Figure 2.12**. Dans le premier problème on considère que la cellule est composée uniquement de matrice, en d'autres termes l'inhomogénéité que constitue l'inclusion est supprimée. La contrainte et la déformation dans l'inclusion sont alors homogènes (solution du problème d'Eshelby) et s'écrivent :

$$\boldsymbol{\sigma}_D^i = (\mathbb{I} - \boldsymbol{\Omega}_{D_i} \mathbb{H})^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^\infty \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\varepsilon}_D^i = \mathbb{S}^0 \boldsymbol{\sigma}_D^i \quad (2.149)$$

avec \mathbb{S}^0 le tenseur de souplesse de la matrice et où on a posé $\mathbb{H} = \mathbb{S}^{ESCS} - \mathbb{S}^0$.

Le second problème correspond à celui où on impose une précontrainte $\boldsymbol{\tau}_D^i \underline{n}$ sur la frontière ∂w_i de sorte à retrouver la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}_D^i$ dans la configuration initiale (Zheng et Du 2001) :

$$\boldsymbol{\tau}_D^i = (\mathbb{C}^i - \mathbb{C}^0) \boldsymbol{\varepsilon}_D^i = -\mathbb{H}^i (\mathbb{I} - \boldsymbol{\Omega}_{D_i})^{-1} \boldsymbol{\sigma}^\infty \quad (2.150)$$

avec $\mathbb{H}^i = \mathbb{S}^i - \mathbb{S}^0$. La prise en compte de la distribution est effectuée par l'intermédiaire du tenseur « eigenstress tensor » de la cellule : $\boldsymbol{\Omega}_{D_i} = \mathbb{C}^0 (\mathbb{I} - \mathbb{S}_{ED})^{-1}$; \mathbb{S}_{ED} est le tenseur d'Eshelby de la cellule. Zheng et Du (2001) montrent qu' en faisant l'hypothèse que la cellule est maintenant plongée dans la matrice et non plus dans le milieu effectif comme au départ (**Figure 2.12** (c')), que la contrainte homogène $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_D^i$ dans l'inclusion est telle que :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_D^i = \boldsymbol{\sigma}_D^i + o(f^2) \quad (2.151)$$

On considère par la suite le problème biphasé de l'inclusion w_i plongée dans un milieu infini : le VER est soumis à la contrainte homogène $\boldsymbol{\sigma}_D^i$ et l'inclusion à la contrainte $\boldsymbol{\tau}_D^i$ sur sa frontière (**Figure 2.12** (b')). La superposition des problèmes (c') et (b') conduit au problème (a') qui est à son tour équivalent au problème (a) de départ. Finalement la contrainte homogène dans l'inclusion dans le modèle ESCS s'écrit (Zheng et Du 2001) :

$$\boldsymbol{\sigma}^{ESCS} = (\mathbb{I} + \boldsymbol{\Omega}_{D_i} \mathbb{H}^i)^{-1} \boldsymbol{\sigma}_D^i = (\mathbb{I} + \boldsymbol{\Omega}_i \mathbb{H}^i)^{-1} (\mathbb{I} - \boldsymbol{\Omega}_{D_i} \mathbb{H}) \quad (2.152)$$

Ce qui permet d'écrire pour plusieurs familles d'inclusions suite à l'équation (2.151) (Zheng et Du 2001) :

$$\mathbb{H} = \sum_i f_i \left[(\mathbb{H}^i)^{-1} + \boldsymbol{\Omega}_i \right]^{-1} (\mathbb{I} - \boldsymbol{\Omega}_{D_i} \mathbb{H})^{-1} + o(f^3) \quad (2.153)$$

où on a en négligeant $o(f^3)$:

$$\mathbb{H} = \sum_i \mathbb{H}_d^i (\mathbb{I} - \boldsymbol{\Omega}_{D_i} \mathbb{H})^{-1} \quad (2.154)$$

$\mathbb{H}_d^i = \sum_i f_i \left[\left(\mathbb{H}^i \right)^{-1} + \Omega_i \right]^{-1}$ peut être interprété comme l'estimation diluée de l'incrément du tenseur de souplesse lorsqu'on considère une seule famille d'inclusions. La somme des estimations diluées de l'incrément du tenseur des souplesses est $\mathbb{H}_d = \sum_i \mathbb{H}_d^i$. L'équation (2.154) est implicite d'où le nom de « Effective Self-Consistent Scheme (ESCS) » proposée par les auteurs.

Version explicite du modèle : Interaction Direct Derivative (IDD)

Pour obtenir une version explicite du modèle, les auteurs procèdent à un développement limité du terme de droite de l'équation (2.154) :

$$\mathbb{H} = \mathbb{H}_d + \sum_i \mathbb{H}_d^i \Omega_{Di} \mathbb{H} + o(f^3) \quad (2.155)$$

Dans cette équation on a utilisé le fait que l'erreur commise respectivement sur les estimations de \mathbb{H}_d^i , \mathbb{H}_d et Ω_{Di} est égale à $o(f)$. En négligeant le terme $o(f^3)$ on trouve l'expression de l'incrément du tenseur des souplesses du schéma IDD :

$$\mathbb{H}^{IDD} = \left(\mathbb{I} - \sum_i \mathbb{H}_d^i \Omega_{Di} \right)^{-1} \mathbb{H}_d \quad (2.156)$$

Le schéma Full range IDD (FIDD)

Il se distingue du schéma IDD par le fait qu'il autorise à partir d'une certaine fraction volumique d'inclusions, que les cellules de distributions entourant les inclusions aient des formes différentes. Pour l'illustrer considérons initialement des cellules de distributions sphériques entourant les inclusions de rapport d'aspect α . Pour s'assurer de la condition de non inter-pénétrabilité (au sens physique du terme) des cellules entourant chaque inclusion, la concentration des inclusions doit alors être telle que la fraction volumique totale des inclusions soit inférieure à un maximum ϕ_{max} soit :

$$\phi_{max} = \frac{\frac{4\pi}{3} \alpha a^3}{\frac{4\pi}{3} a^3} = \alpha \quad (2.157)$$

Lorsque $\phi > \phi_{max}$, les cellules de distribution ne peuvent plus être sphériques. Le schéma FIDD autorise que la cellule de distribution ne reste plus sphérique et puisse prendre par exemple la forme indiquée sur la **Figure 2.14**, soit un ellipsoïde de rapport d'aspect β .

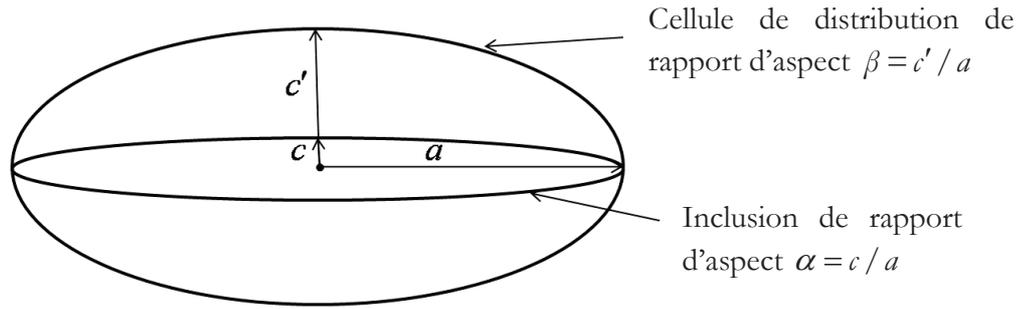


Figure 2.14 : Schématisation 2D de la configuration inclusion-cellule de distribution dans le schéma Full Range dans le cas $\phi > \phi_{max}$.

Dans ce cas on a :

$$\phi_c = \frac{\frac{4\pi}{3}ca^2}{\frac{4\pi}{3}c'a^2} = \frac{\frac{4\pi}{3}\alpha a^3}{\frac{4\pi}{3}\beta a^3} = \frac{\alpha}{\beta} \quad (2.158)$$

Le rapport β à considérer pour les cellules de distribution dans une configuration donnée dépend donc de la fraction volumique totale des inclusions. Comparativement au schéma IDD le schéma Full Range IDD comme son nom l'indique semble donc plus adapté à des configurations où la fraction volumique des inclusions est élevée (Zheng et Du 2001). En résumé pour le schéma FIDD, en considérant initialement des cellules de distributions sphériques, le rapport d'aspect β est donnée par :

$$\beta = \begin{cases} 1 & \text{si } \phi \leq \phi_{max} \\ \frac{\alpha}{\phi_c} & \text{si } \phi > \phi_{max} \end{cases} \quad (2.159)$$

II.6.4.10 Comparaison des schémas d'homogénéisation

Nous avons listé et décrit ci-dessus un certain nombre de schémas d'homogénéisation fréquemment utilisés dans le cadre de l'homogénéisation des matériaux cimentaires. La pertinence et la précision de ces schémas sont délicates à comparer puisqu'ils sont basés chacun sur des représentations différentes de la microstructure. Une façon de comparer ces schémas entre eux est par exemple de les confronter à des résultats de tests expérimentaux ou encore des résultats de simulations numériques sur la base d'une représentation simplifiée de la microstructure. Par exemple, (Segurado et Llorca 2002) ont réalisé des simulations 3D sur des matériaux renforcés par des inclusions sphériques rigides ou fragilisés par des microvides sphériques. Les simulations ont été réalisées pour des inclusions dispersées de manière isotrope et pour des fractions volumiques allant de 0 à 50%. Des résultats obtenus, il en ressort que le modèle auto-cohérent généralisé fournit des estimations proches des simulations EF même pour une fraction volumique d'inclusions de 50% alors que les estimations du schéma de Mori-Tanaka

diffèrent significativement des simulations EF dès lors que la fraction volumique atteint 30%. Une autre étude comparative a été réalisée par (Zheng et Du 2001) en 2D sur une matrice homogène fragilisée par des vides de forme circulaire distribués aléatoirement. Contrairement aux résultats de (Segurado et Llorca), le schéma de Mori-Tanaka fournit de meilleures estimations que le schéma auto-cohérent généralisé. (Beryman et Berge 1996) ont quant à eux confronté des résultats expérimentaux des modules mécaniques de verre fritté de porosité variable (forme sphérique) aux estimations fournies par le modèle MT. A partir des conclusions de cette étude, les auteurs estiment que les estimations du schéma de Mori-Tanaka ne sont fiables que pour une fraction volumique de pores inférieure à 20%. A partir de ces observations, il n'est pas facile d'identifier le schéma d'homogénéisation qui donne les résultats les plus pertinents et les plus réalistes dans un cadre général d'homogénéisation des matrices cimentaires. (Stora 2007) a effectué une série de comparaisons entre des résultats de simulations 3D et divers schémas d'homogénéisation afin d'identifier lequel des schémas est préférable dans trois cas de microstructures bien définis, à savoir :

- Un béton constitué d'une matrice (mortier) dans laquelle sont plongés des granulats de forme sphérique (Wriggers et Moftah 2006),
- Un mortier constitué d'une matrice de ciment rigidifié par des inclusions de sphères concentriques représentant le granulat et l'ITZ (Garboczi et Berryman 2001)
- Un milieu poreux (Robert et Garboczi 2000) représenté par une matrice cimentaire fragilisée par des vides de forme sphéroïdale.

Les résultats de ces simulations (module d'Young) ont été comparés entre autres aux schémas de Mori-Tanaka et auto-cohérent généralisé (Stora 2007). Dans le premier cas les estimations des différents schémas d'homogénéisation sont tous en bonne concordance avec la simulation EF, le schéma auto-cohérent généralisé donnant les meilleures prédictions. Dans le deuxième cas de microstructure, le paramètre qui a servi de comparaison est le rapport entre le module d'Young de l'ITZ et le module d'Young du mortier ($a = E_{ITZ} / E_{mortier}$). Là encore c'est le schéma auto-cohérent généralisé qui donne les meilleures estimations comparées aux simulations EF même si les autres schémas donnent également des résultats proches des simulations. L'auteur précise tout de même que la précision du schéma auto-cohérent contraste avec son coût numérique nettement supérieur aux autres schémas. Notons également que dans le cas d'inclusions sphériques distribués aléatoirement, plusieurs schémas donnent des résultats identiques (par exemple les schémas MT, IDD), ce qui ne permet pas de les discriminer. Dans le troisième cas de microstructure où les inclusions sont de forme sphéroïdale, les résultats des schémas diffèrent significativement des simulations EF.

De manière générale nous pouvons constater que le choix du schéma d'homogénéisation doit être influencé par la finalité de l'étude. Nous avons vu par exemple que le schéma dilué ne prenait pas en compte les interactions entre les inclusions et n'est donc adapté qu'à des faibles fractions volumiques d'inclusions ($< 3\%$ (Christensen 1990)). Le schéma de Mori-Tanaka prend en compte les interactions entre les inclusions et il est souvent rapporté dans la littérature que les estimations fournies par ce schéma ne sont fiables que jusqu'à peu près 20-30% de fraction volumique. De plus plusieurs auteurs (par exemple (Berryman 2006)) estiment qu'un schéma d'homogénéisation robuste doit vérifier les bornes d'Hashin et Shtrikman (HS) ou même les bornes de Willis qui

sont des bornes rigoureuses. Or Norris (1989) a par exemple mis en évidence un cas de microstructure à trois phases avec des inclusions en forme d'ellipsoïdes aplatis où la conductivité thermique effective estimée par le modèle MT viole les bornes d'HS. Il conviendrait donc de rester prudent en ce qui concerne l'utilisation du schéma MT dans le cas de microstructures multiphasiques avec des inclusions de formes particulières.

Le schéma IDD peut être considéré comme le plus robuste d'entre ceux que l'on a présenté. En effet il est utilisable pour différentes sortes de microstructures, multiphasiques ou non, avec des inclusions de forme variées, des formes sphériques aux ellipsoïdes aplatis en passant par des ellipsoïdes allongés (Zheng et Du 2001 ; Stora 2008 ; Bary 2011). Selon son auteur aucun cas n'a été identifié où les bornes rigoureuses de Hashin et Shtrikman par exemple ont été violées. Ce schéma permet la prise en compte de distribution non isotrope d'inclusions (ce que permet également le schéma MT mais que d'une certaine manière). Tout comme le schéma MT il a une structure explicite et fournit des estimations analytiques simples et facilement manipulables. Pour ces raisons nous avons choisis dans le cas de la modélisation proposée dans le chapitre suivant de travailler avec le schéma IDD dans les cas de microstructures matrice/inclusions et le schéma auto-cohérent généralisé lorsque la microstructure l'impose en quelques sortes (assemblage de sphères concentriques par exemple).

II.7 Application de la méthode d'homogénéisation aux milieux poreux

Cette partie concerne l'application de l'approche micromécanique aux milieux poreux saturés et partiellement saturés. Ceci a fait l'objet de plusieurs études dans la littérature notamment (Bourgeois 1997; Chateau et Dormieux 1998; Dormieux et al. 2002; Dormieux et al. 2006; Giraud et al. 2007). Les équations du comportement thermo-poro-élastique présentées précédemment sont établies en s'appuyant sur les outils classiques de la thermodynamique des milieux continus. Dans cette section on vise à déterminer ces mêmes équations par homogénéisation. La démarche consiste par un changement d'échelle à caractériser le comportement effectif macroscopique du milieu poreux à partir de l'exploitation des informations issues de l'échelle microscopique.

II.7.1 Conditions saturées

On se place dans le cas d'une condition aux limites en déformation homogène. On considère un VER constitué d'une phase solide élastique linéaire Ω^s et de la porosité Ω^p telle que $\Omega = \Omega^s \cup \Omega^p$. On suppose que la frontière $\partial\Omega$ du VER est constituée uniquement de la phase solide. On s'intéresse particulièrement à la part du comportement liée aux déformations du squelette et non pas aux phénomènes de transport de la phase liquide par rapport au squelette solide. On représente les efforts intérieurs dans le fluide par un champ de pression uniforme et on néglige les contraintes visqueuses et les fluctuations de la pression de fluide p . La formulation du problème (P) s'écrit :

$$(P) \begin{cases} \boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) = \mathbb{C}_s(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) & \Omega_s \\ \text{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0 & \Omega_s \\ \boldsymbol{\xi}(\underline{x}) = \mathbf{E} \cdot \underline{x} & \partial\Omega \\ \boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) = -p \cdot \underline{n} & \Gamma_{sl} \end{cases} \quad (2.160)$$

où Γ_{sl} désigne l'interface entre la phase solide et liquide et \underline{n} la normale unitaire sortant du solide. La connectivité du réseau poreux est prise en compte par le fait que la pression du fluide p est considérée comme un paramètre de chargement indépendant. On peut réécrire la loi de comportement microscopique de façon unifiée de telle sorte qu'elle décrive à la fois ce qui se passe dans le réseau poreux Ω^p et dans la phase solide Ω^s :

$$\boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) = \mathbb{C}(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) + \boldsymbol{\sigma}_p(\underline{x}) \quad (2.161)$$

avec $\boldsymbol{\sigma}_p$ la contrainte agissant dans les pores :

$$\boldsymbol{\sigma}_p(\underline{x}) = \begin{cases} 0 & \text{si } \underline{x} \in \Omega^s \\ -p\mathbf{1} & \text{si } \underline{x} \in \Omega^p \end{cases} \quad (2.162)$$

Cette contrainte $\boldsymbol{\sigma}_p$ peut donc être interprétée comme une « précontrainte » dans les pores. On rappelle que l'on veut exprimer la loi de comportement macroscopique, i.e. la relation entre $\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ et $\mathbf{E} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$. Compte tenu de la linéarité du problème, il paraît judicieux de le séparer en deux sous-problèmes élémentaires.

- 1- Le premier problème (P') correspond à celui où la précontrainte est nulle. Seule la déformation macroscopique \mathbf{E} est considérée ($\boldsymbol{\sigma}_p = 0$) :

$$(P') \begin{cases} \text{div}(\boldsymbol{\sigma}') = 0 & \Omega \\ \boldsymbol{\xi}'(\underline{x}) = \mathbf{E} \cdot \underline{x} & \partial\Omega \\ \boldsymbol{\sigma}'(\underline{x}) = \mathbb{C}_s(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\underline{x}) & \Omega \end{cases} \quad (2.163)$$

Ce problème n'est autre que le problème classique d'homogénéisation présentée dans la section II.5. La déformation microscopique est reliée à la déformation macroscopique par la relation :

$$\boldsymbol{\varepsilon}'(\underline{x}) = \mathbb{A}(\underline{x}) : \mathbf{E}' \quad (2.164)$$

La contrainte macroscopique correspondant s'écrit :

$$\boldsymbol{\Sigma}' = \langle \boldsymbol{\sigma}' \rangle = \langle \mathbb{A}(\underline{x}) : \mathbb{C}(\underline{x}) \rangle_{\Omega} : \mathbf{E}' = \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E}' \quad (2.165)$$

avec \mathbb{C}^{hom} le tenseur d'élasticité homogénéisé.

- 2- Le second problème est celui où on considère uniquement la précontrainte $\boldsymbol{\sigma}_p$ ($\mathbf{E} = 0$) :

$$(P'') \begin{cases} \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}'') = 0 & \Omega \\ \boldsymbol{\xi}''(\underline{x}) = 0 & \partial\Omega \\ \boldsymbol{\sigma}''(\underline{x}) = \mathbb{C}_s(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}''(\underline{x}) + \boldsymbol{\sigma}^p & \Omega \end{cases} \quad (2.166)$$

La contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}''$ s'obtient comme dans le premier cas par la moyenne de la contrainte microscopique $\boldsymbol{\sigma}''$ sur Ω soit :

$$\boldsymbol{\Sigma}'' = \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega} = \langle \mathbb{C}(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}''(\underline{x}) + \boldsymbol{\sigma}^p(\underline{x}) \rangle_{\Omega} \quad (2.167)$$

En appliquant le lemme de Hill au couple du tenseur de la déformation microscopique du problème (P') $\boldsymbol{\varepsilon}'$ et de la contrainte microscopique $\boldsymbol{\sigma}''$ du problème (P'') :

$$\langle \boldsymbol{\sigma}''(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}'(\underline{x}) \rangle_{\Omega} = \boldsymbol{\Sigma}'' : \mathbf{E}' \quad (2.168)$$

L'équation (2.168) permet alors d'écrire :

$$\langle \boldsymbol{\sigma}''(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}'(\underline{x}) \rangle_{\Omega} = \langle \boldsymbol{\varepsilon}''(\underline{x}) : \mathbb{C}(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}'(\underline{x}) \rangle_{\Omega} + \langle \boldsymbol{\sigma}^p(\underline{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}'(\underline{x}) \rangle_{\Omega}$$

Et comme $\boldsymbol{\varepsilon}''(\underline{x}) = 0$, on en déduit :

$$\boldsymbol{\Sigma}'' = \langle \boldsymbol{\sigma}^p(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle_{\Omega} \quad (2.169)$$

En utilisant l'expression de la précontrainte de l'équation (2.162), on a :

$$\boldsymbol{\Sigma}'' = -p\phi_0 \mathbf{1} \langle \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle_{\Omega} \quad (2.170)$$

avec ϕ_0 la fraction volumique de pores. Cette contrainte s'interprète comme la contrainte macroscopique générée par la variation de la pression dans les pores sous une déformation macroscopique nulle : $\boldsymbol{\Sigma}'' = -p\mathbf{B}$. On obtient donc pour le tenseur de Biot la relation :

$$\mathbf{B} = \phi_0 \mathbf{1} : \langle \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle_{\Omega} \quad (2.171)$$

Finalement la contrainte du problème initial (P) $\boldsymbol{\Sigma}$ est obtenue en superposant les contraintes macroscopiques des problèmes (P') $\boldsymbol{\Sigma}'$ et (P'') $\boldsymbol{\Sigma}''$ soit :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E} - p\mathbf{B} \quad (2.172)$$

C'est la première équation d'état de la poro-élasticité. Lorsque la phase solide est isotrope on a $\mathbb{C}^{hom} = 3k^{hom}\mathbb{J} + 2\mu^{hom}\mathbb{L}$ avec $k^{hom} = (1 - \phi_0)k_b^s$ et le tenseur de Biot se réduit à un coefficient :

$$\mathbf{B} = b\mathbf{1}; \quad b = 1 - (1 - \phi_0)A_b^s = 1 - \frac{k^{hom}}{k^s} \quad (2.173)$$

avec A_b^s la composante hydrostatique du tenseur de localisation de la déformation de la phase solide : $\mathbb{A} = A_b^s \mathbb{J} + A_d^s \mathbb{L}$.

Pour obtenir la seconde équation d'état du milieu poreux, on utilise la variation de la porosité lagrangienne dans les deux problèmes (P') et (P''). Elle s'écrit de manière générale :

$$\phi - \phi_0 = \phi_0 \text{tr} \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{\Omega^p} \quad (2.174)$$

et comme $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}' + \boldsymbol{\varepsilon}''$ on a $\phi - \phi_0 = \phi_0 (\text{tr} \langle \boldsymbol{\varepsilon}' \rangle_{\Omega^p} + \text{tr} \langle \boldsymbol{\varepsilon}'' \rangle_{\Omega^p})$.

Dans le problème (P') la combinaison des équations (2.164) et (2.171) donne :

$$\phi_0 \mathbf{1} : \langle \boldsymbol{\varepsilon}' \rangle_{\Omega^p} = \phi_0 \mathbf{1} : \langle \mathbb{A} \rangle_{\Omega^p} = \mathbf{B} : \mathbf{E} \quad (2.175)$$

Ensuite dans le problème (P'') la moyenne volumique de la déformation macroscopique sur Ω étant nulle on peut écrire :

$$\phi_0 \langle \boldsymbol{\varepsilon}'' \rangle_{\Omega^p} = -(1 - \phi_0) \langle \boldsymbol{\varepsilon}'' \rangle_{\Omega^s} \quad (2.176)$$

où $\langle \boldsymbol{\varepsilon}'' \rangle_{\Omega^s}$ est la moyenne volumique de la déformation sur la phase solide. Le comportement élastique de cette phase solide permet d'écrire :

$$(1 - \phi_0) \langle \boldsymbol{\varepsilon}'' \rangle_{\Omega^s} = (1 - \phi_0) \mathbb{S}^s : \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega^s} \quad (2.177)$$

En utilisant en plus le fait que $\langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega^s} = -p \mathbf{1}$, et que $\boldsymbol{\Sigma}'' = \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega} = -p \mathbf{B}$ on peut en déduire $(1 - \phi_0) \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega^s}$ puisque $\boldsymbol{\Sigma}'' = (1 - \phi_0) \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega^s} + \phi_0 \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega^p}$ soit :

$$(1 - \phi_0) \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega^s} = p (\phi_0 \mathbf{1} - \mathbf{B}) \quad (2.178)$$

En combinant cette dernière relation avec l'équation (2.177) on obtient :

$$\phi_0 \mathbf{1} : \langle \boldsymbol{\varepsilon}'' \rangle_{\Omega^p} = p \mathbf{1} : \mathbb{S}^s : (-\phi_0 \mathbf{1} + \mathbf{B}) \quad (2.179)$$

Finalement la variation totale de porosité peut s'écrire sous la forme :

$$\phi - \phi_0 = \mathbf{B} : \mathbf{E} + \frac{p}{N} \quad (2.180)$$

dans laquelle le module de Biot solide N est donné par :

$$\frac{1}{N} = \mathbf{1} : \mathbb{S}^s : (-\phi_0 \mathbf{1} + \mathbf{B}) \quad (2.181)$$

Dans le cas d'une matrice homogène et isotrope le module de Biot du squelette solide prend la forme :

$$\frac{1}{N} = \frac{b - \phi}{k_s} \quad (2.182)$$

II.7.2 Conditions partiellement saturées

On considère ici une phase solide linéaire élastique et un réseau poreux partiellement saturé constitué d'une phase liquide et d'une phase gazeuse. La particularité de cette configuration réside dans les tensions de surface générées par l'interface liquide/gaz. Ces tensions de surface sont connues pour impacter le comportement macroscopique et sont prises en compte explicitement dans ce paragraphe. Les tensions de surface en l'occurrence liquide/solide existent aussi dans le cas du matériau saturé mais sont souvent négligées pour des raisons pratiques. Dans le domaine poreux Ω^p on distingue la partie occupée par la phase liquide Ω_l^p et celle occupée par la phase gazeuse Ω_g^p . On note p_l la pression de la phase liquide et p_g la pression de la phase gazeuse.

La configuration initiale est celle du matériau saturé et caractérisée par une contrainte macroscopique nulle $\Sigma = p_l = 0$. Les contraintes microscopiques σ_0^s dans la phase solide dans cette même configuration initiale ne sont donc pas nulles puisqu'elles sont équilibrées par les tensions qui s'exercent sur l'interface liquide/solide γ_{sl} (Dormieux et al 2004) :

$$\sigma_0^s \cdot \underline{n} = \gamma^{sl} (\mathbf{1}_T : \mathbf{q}) \underline{n} \quad (2.183)$$

$\mathbf{1}_T$ est le tenseur identité dans le plan tangent à l'interface liquide/solide et \mathbf{q} le tenseur de courbure de l'interface défini par $\mathbf{q} = -\text{grad } \underline{n}$. Dans la configuration actuelle, la précontrainte dans les pores s'écrit (Dormieux et al 2004) :

$$\sigma^p = -p_l \mathbf{1} X^l(\underline{x}) - p_g \mathbf{1} X^g(\underline{x}) + \sigma_0^s X^s(\underline{x}) + \gamma^{\alpha\beta} \mathbf{1}_T \delta_{\Gamma^{\alpha\beta}} \quad (2.184)$$

avec $X^i(\underline{x})$ la fonction caractéristique du domaine Ω_i^p , $\alpha, \beta \in \{s, l, g\}$. $\delta_{\Gamma^{\alpha\beta}}$ est le dirac de l'interface $\Gamma^{\alpha\beta}$. Cette dernière équation peut se réécrire sous la forme :

$$\sigma^p = -p_l \mathbf{1} X^l(\underline{x}) - p_g \mathbf{1} X^g(\underline{x}) + \sigma_0^s X^s(\underline{x}) + \gamma^{sl} \mathbf{1}_T \delta_{\Gamma^{sl}} + \bar{\gamma}^{\alpha\beta} \mathbf{1}_T \delta_{\Gamma^{\alpha\beta}} \quad (2.185)$$

où l'on a posé :

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}^{sg} &= \gamma^{sg} - \gamma^{sl} \\ \bar{\gamma}^{sl} &= 0 \\ \bar{\gamma}^{lg} &= \gamma^{lg} \end{aligned} \quad (2.186)$$

La décomposition du problème en sous problèmes élémentaires comme dans le cas du problème du matériau saturé conduit à l'expression suivante de la précontrainte macroscopique :

$$\begin{aligned}
 \Sigma'' &= \langle \boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) : \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle_{\Omega} = \\
 & -\phi_l p_l \mathbf{1} : \langle \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle_{\Omega_l^p} - \phi_g p_g \mathbf{1} : \langle \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle_{\Omega_g^p} + \left\langle \left(\boldsymbol{\sigma}_0^s(\underline{x}) \mathbf{X}^s(\underline{x}) + \gamma^{sl} \mathbf{1}_T \delta_{T^{sl}} \right) : \mathbb{A}(\underline{x}) \right\rangle_{\Omega} \\
 & + \left\langle \bar{\gamma}^{\alpha\beta} \mathbf{1}_T \delta_{T^{\alpha\beta}} : \mathbb{A}(\underline{x}) \right\rangle_{\Omega}
 \end{aligned} \quad (2.187)$$

Compte tenu de l'équation (2.184) de la configuration initiale, le 3^{ème} terme de l'expression de droite de cette dernière équation est nulle et on a :

$$\Sigma'' = -p_g \mathbf{B}_g - p_l \mathbf{B}_l - \left\langle \bar{\gamma}^{\alpha\beta} \mathbf{1}_T \delta_{T^{\alpha\beta}} : \mathbb{A}(\underline{x}) \right\rangle_{\Omega} \quad (2.188)$$

avec \mathbf{B}_g et \mathbf{B}_l respectivement les tenseurs de Biot gazeux et liquide du milieu poreux :

$$\mathbf{B}_g = \phi_g \mathbf{1} : \langle \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle_{\Omega_g^p} \quad \text{et} \quad \mathbf{B}_l = \phi_l \mathbf{1} : \langle \mathbb{A}(\underline{x}) \rangle_{\Omega_l^p} \quad (2.189)$$

Finalement on peut écrire comme dans le cas du matériau saturé la loi de comportement sous la forme :

$$\Sigma + p_g \mathbf{B}_g - p_l \mathbf{B}_l - \left\langle \bar{\gamma}^{\alpha\beta} \mathbf{1}_T \delta_{T^{\alpha\beta}} : \mathbb{A}(\underline{x}) \right\rangle_{\Omega} = \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E} \quad (2.190)$$

ou de manière équivalente sous la forme :

$$\Sigma + p_g \mathbf{B}_g - p_c \mathbf{B} - \left\langle \bar{\gamma}^{\alpha\beta} \mathbf{1}_T \delta_{T^{\alpha\beta}} : \mathbb{A}(\underline{x}) \right\rangle_{\Omega} = \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E} \quad (2.191)$$

avec \mathbf{B}_g le tenseur de Biot du milieu partiellement saturé. On remarque qu'en négligeant le terme associé aux tensions de surface on retrouve l'expression de la contrainte effective de Bishop présentée soit :

$$\Sigma + p_g \mathbf{B}_g - p_c \mathbf{B} = \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E} \quad (2.192)$$

En outre dans le cas du matériau totalement saturé, on retrouve également la loi de comportement présentée dans la section précédente.

II.8 Conclusion

Nous avons à travers ce chapitre tout d'abord montré la complexité des phénomènes intervenant dans les problèmes THM pour les matériaux cimentaires. Un grand nombre de paramètres et grandeurs physiques interviennent dans les équations, et ceux-ci varient généralement en fonction des variables d'état du système. L'identification expérimentale de ces paramètres est souvent coûteuse et n'est souvent possible qu'à un degré de précision relativement faible. L'approche « macro » basée sur la thermodynamique des processus réversibles permettant d'identifier un certain nombre de paramètres du couplage THM à savoir le coefficient de Biot et le module de Biot a été exposée. La seconde approche qui consiste à utiliser les informations de la microstructure du matériau et d'en déduire à travers des techniques d'homogénéisation les

propriétés macroscopiques du matériau a également été abordée. C'est cette dernière approche que nous avons adoptée dans la modélisation proposée dans le chapitre suivant. Elle est totalement liée aux schémas d'homogénéisations choisis. C'est en cela que nous avons passé en revue les schémas qui sont fréquemment utilisés dans le cadre de l'homogénéisation des matériaux cimentaires. Une analyse comparative entre ces schémas a ensuite été faite permettant de discriminer ceux qui seraient à priori les plus adaptés à notre cas d'étude.

Chapitre III

Modélisation proposée

III.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à la mise au point d'un modèle permettant d'estimer les propriétés mécaniques et hydromécaniques des matériaux cimentaires. L'objectif est d'améliorer dans le modèle THMs l'estimation de ces paramètres dans le cas de sollicitations couplées thermo-hydro-mécaniques. Il s'agit de fournir des estimations à la fois fines, réalistes et facilement intégrables dans le code THMs permettant ainsi de profiter de sa simplicité, de sa robustesse et aussi de son coût de calcul faible. On s'intéressera notamment aux modules de compressibilité et de cisaillement, ou de manière équivalente au module d'Young et au coefficient de Poisson, au coefficient et module de Biot dans les conditions du matériau saturé ou partiellement saturé, drainé et non drainé, sain, et microfissuré. Les valeurs expérimentales relatives au coefficient et au module de Biot des matériaux cimentaires sont extrêmement rares dans la littérature car elles sont souvent délicates à obtenir. A ce titre les travaux de (Obeid et al. 2001) consacrés à l'identification expérimentale du coefficient de Biot illustrent quelques unes des difficultés rencontrées. Nous avons choisi d'aborder l'estimation de ces paramètres par une approche micromécanique au travers d'une représentation multi-échelle de la microstructure. Cette approche offre entre autres la possibilité d'enrichir la modélisation en intégrant des informations issues de la microstructure des matériaux cimentaires, qui comme nous l'avons évoqué précédemment, se manifeste à plusieurs échelles d'observation. Les paramètres macroscopiques sont obtenus sur la base des connaissances des propriétés intrinsèques des différents constituants et de celles de leurs fractions volumiques qui dépendent bien sûr de la formulation du matériau. Ceci permet d'intégrer naturellement la variabilité des propriétés des matériaux cimentaires en fonction du rapport e/c , de la porosité etc... Cependant un aspect qui peut constituer un obstacle pour les techniques de changement d'échelle est le fait que la morphologie des matériaux cimentaires n'est pas clairement élucidée. La première partie de ce chapitre sera donc consacrée à la présentation et à la justification du modèle de microstructure qui a été retenue. Ensuite nous précisons le calcul des paramètres d'entrée du modèle à chaque échelle de la microstructure. Puis on présente à chaque échelle l'estimation des paramètres qui nous intéressent effectuée en adaptant les résultats classiques de la poro-élasticité aux milieux hétérogènes et partiellement saturés. Nous aborderons également l'impact de la fissuration sur les paramètres hydromécaniques. Dans la seconde partie, une série d'applications et d'études paramétriques sur les propriétés les plus influentes du modèle est faite aussi bien dans le cas de la pâte de ciment que du mortier et du béton, permettant de valider les résultats en les confrontant aux résultats expérimentaux disponibles dans la littérature.

III.2 Représentation de la microstructure

III.2.1 Microstructure de la pâte de ciment

L'approche de changement d'échelle que nous avons choisie nécessite la connaissance de la morphologie de la pâte de ciment aux différentes échelles. Or cette morphologie est particulièrement complexe, si bien qu'aucun consensus n'existe vraiment sur ce sujet à l'heure actuelle. Par exemple, deux des modèles de microstructure des matériaux cimentaires les plus en vue, le modèle CEMHYD3D et le modèle HYMOSTRUC donnent des morphologies ayant très peu de points communs (confère chapitre 1). Ceci confirme le manque de clarté vis-à-vis de la morphologie à l'échelle de la pâte. A notre connaissance, les premiers travaux qui abordent

L'estimation des paramètres élastiques de la pâte de ciment sous l'approche micromécanique sont probablement ceux de (Zimmerman et al. 1986). La pâte de ciment est modélisée comme un matériau biphasé, une matrice cimentaire dans laquelle sont immergées des pores de forme ellipsoïdale. Le schéma d'homogénéisation utilisé est celui de Mori-Tanaka. Les travaux de (Neubauer et al. 1996) peuvent également être cités. Récemment grâce à l'avancée de techniques de mesures comme la nanoindentation, des modèles plus sophistiqués ont été développés (Heukamp 2002; Bernard et al. 2003; Constantinides et Ulm 2004). Les résultats obtenus, en ce qui concerne les paramètres mécaniques sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Le modèle de (Constantinides et Ulm 2004) distingue pour la pâte de ciment deux échelles : l'échelle I (10 nm - 0.1 μm) est caractéristique des deux types de C-S-H et l'échelle II (1 - 100 μm) est celle où les C-S-H jouent le rôle de matrice homogène dans laquelle sont plongées respectivement la portlandite, l'ettringite, les grains de ciment anhydre et les pores capillaires qui jouent eux le rôle d'inclusions. La première étape du processus d'homogénéisation est celle où les auteurs calculent les propriétés effectives de la matrice de C-S-H à partir des propriétés intrinsèques des deux types de LD C-S-H et HD C-S-H. La seconde étape est la détermination des propriétés effectives de la pâte de ciment à partir des propriétés effectives de la matrice de C-S-H calculées précédemment et des propriétés intrinsèques des inclusions, et ceci avec le modèle d'homogénéisation de Mori-Tanaka. A l'échelle I les auteurs considèrent les LD C-S-H comme la matrice homogène et les HD C-S-H comme des inclusions sphériques avec une taille caractéristique de 10^{-8} - 10^{-7} m. Cependant en se référant notamment aux travaux de (Taylor 1997; Richardson 2000; Bary et Béjaoui 2006), la distinction entre les HD C-S-H et LD C-S-H doit se faire à une échelle supérieure puisque celles-ci sont supposées se former successivement à la surface du grain de ciment anhydre.

Le modèle de microstructure retenu a été inspiré de celui proposé par (Bary et Béjaoui 2006) pour l'estimation des propriétés de diffusion et du coefficient de Biot de la pâte de ciment durcie. Ce modèle a été repris par (Stora 2007) pour l'étude du comportement chimie-mécanique des matériaux cimentaires (pâte de ciment, mortier) dégradés. Xi et Jennings utilisent un modèle similaire pour évaluer le retrait de séchage des matériaux cimentaires (Xi et Jennings 1997). Ce modèle s'appuie notamment sur des observations expérimentales de l'hydratation d'un grain de ciment anhydre. On considère que les grains de ciment supposés sphériques (de taille 0.1 - 100 μm), s'hydratent de l'extérieur de leur surface vers l'intérieur en formant successivement une couche externe que l'on identifie aux LD C-S-H, puis une couche interne identifiée aux HD C-S-H. Au fur à mesure de l'hydratation, il y a nucléation puis croissance d'une couche externe d'hydrates poreuse qui s'accompagne progressivement d'une diminution de l'espace disponible pour la formation d'autres hydrates. Il se forme par la suite une couche interne d'hydrates plus dense. De manière conceptuelle, la pâte de ciment est remplie de sphères concentriques formées par les résidus de grains de ciment non hydratés au centre, entourée des deux couches d'hydrates externe et interne comme le montre la **Figure 3.1**. Le VER de la pâte de ciment ainsi décrit est une sphère concentrique plongée dans le milieu effectif dont on cherche à estimer les propriétés effectives. La pâte de ciment durcie est donc caractérisée par une percolation des sphères concentriques.

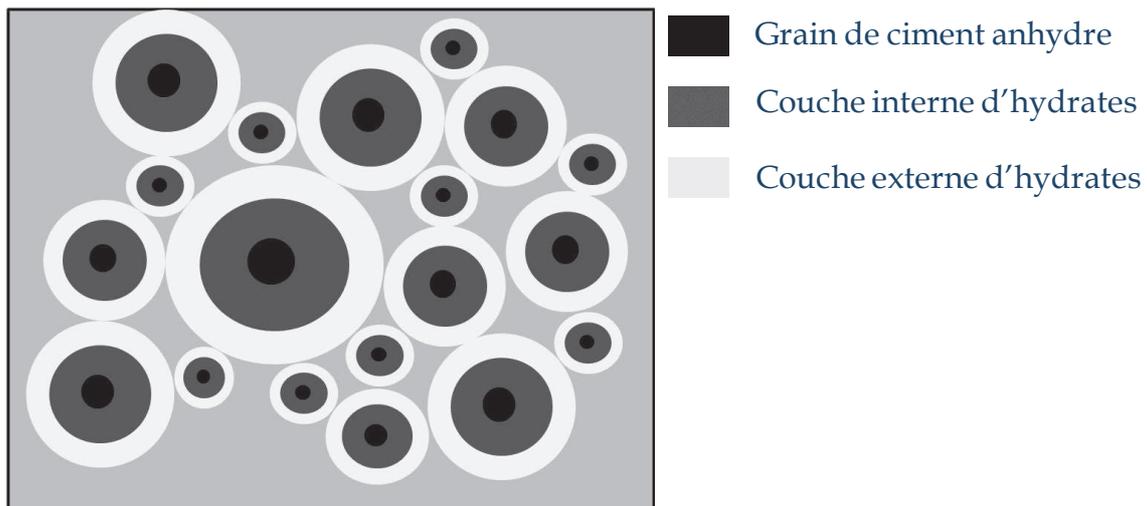


Figure 3.1 : Représentation schématique de la pâte de ciment (assemblage de sphères concentriques).

L'intérêt de cette représentation est que le schéma auto-cohérent généralisé s'applique naturellement (confère chapitre précédent). Les principaux hydrates formés à savoir, la portlandite, l'ettringite et les monosulfoaluminates sont considérées comme des inclusions dispersées dans les couches interne et externe de C-S-H. La porosité est de deux types : la porosité capillaire ($> 0,2\mu\text{m}$) est supposée se retrouver essentiellement dans la couche externe (plus poreuse) tandis que les pores du gel de C-S-H se retrouvent à la fois dans les deux couches d'hydrates. Notre contribution en termes de modélisation se situe dans l'extension de cette représentation de la microstructure à des conditions partiellement saturées et en présence de fissuration.

III.2.2 Microstructure du mortier /béton

Le mortier et le béton sont considérés comme des matériaux hétérogènes avec des inclusions granulaires enchâssées dans la pâte de ciment durcie. Le passage de la pâte de ciment au mortier/béton s'effectue au travers de l'interface entre les granulats et la pâte de ciment communément nommée « l'auréole de transition » (ITZ). Sa microstructure est liée à l'arrangement des grains de ciment anhydre autour du granulat. Cette zone est connue pour être plus poreuse que la pâte de ciment saine et représenter une zone de faiblesse dans le matériau. Elle n'a pas la même microstructure que la pâte de ciment saine sans la présence des granulats. On sait par exemple que cette zone est riche en cristaux de portlandite orientés perpendiculairement à la surface du granulat, mais peu de données expérimentales existent sur les propriétés effectives (module d'Young, coefficient de Poisson, etc...) de cette zone. Pour contourner ce déficit en résultats expérimentaux, certains auteurs par exemple, (Hashin et Monteiro 2002), (Ramesh et al. 1996; Yang 1998) ont estimé par analyse inverse le module d'Young de l'ITZ, connaissant le module d'Young du mortier et celui de la pâte de ciment qui le constitue. Cependant une variabilité importante sur les valeurs existe et est résumée dans l'équation 1.16. Certains auteurs considèrent carrément que l'influence de cette zone est négligeable sur les propriétés du mortier et du béton à l'échelle macroscopique. Une autre

difficulté concernant l'ITZ concerne son épaisseur. Elle n'est pas clairement définie dans la littérature, et ceci est en partie due au gradient de propriétés observé à partir de la surface de granulat jusqu'à la pâte de ciment « saine ». Ici nous considérons l'ITZ comme un prolongement de la couche externe d'hydrates : il s'agit donc d'une matrice de LD C-S-H dans laquelle les autres hydrates et la porosité sont considérés comme des inclusions. Son épaisseur est supposée constante autour des granulats (Garboczi et Bentz 1997). A l'échelle du mortier/béton la représentation de la microstructure est la même que celle de la pâte de ciment, le pendant du résidu de grain de ciment anhydre étant le granulat (considéré sphérique pour des raisons de simplification), celui de la couche interne est l'ITZ et enfin celui de la couche externe est la pâte de ciment « saine ». Ceci permet une nouvelle fois d'utiliser le schéma auto-cohérent généralisé pour estimer les propriétés effectives à cette échelle.

La variabilité de la taille des hétérogénéités des matériaux cimentaires impose pour chaque échelle dans la représentation multi-échelle du matériau (**Figure 3.2**), un choix de VER devant satisfaire les conditions de séparation d'échelles. Chaque échelle doit être séparée de la suivante par au moins un ordre de grandeur de taille d'hétérogénéité. En résumé les conditions de séparation d'échelle proposée ici sont :

- Niveau I : Couches interne et externe de C-S-H

Ce niveau correspond aux deux types de LD et HD C-S-H qui constituent les composants majoritaires du squelette de la pâte de ciment. Ils sont considérés comme des matrices homogènes qui englobent les autres hydrates formés, les cristaux de portlandite (CH) et les aluminates (AFt, AFm) qui jouent le rôle de phases inclusionnaires. L'ettringite cristallise par exemple sous forme d'aiguilles principalement hexagonales (confère Figure 1.7). La prise en compte de la forme réelle de l'ettringite serait d'une part compliquée et nécessiterait à coup sûr des méthodes d'homogénéisation numérique coûteuses, ce qui ne correspond pas au type d'approche développée ici. Pour contourner ce problème on peut approximer les plaquettes hexagonales de portlandite par un ellipsoïde aplati (disque) par exemple, et les aiguilles d'ettringite par un ellipsoïde allongé (Stora et al. 2006). La taille caractéristique des hétérogénéités à cette échelle est de l'ordre de 10^{-8} – 10^{-6} m et correspond à la plus petite taille accessible lors d'essais de nanoindentation. La porosité des deux sortes de C-S-H est de 24% pour le HD C-S-H et 37% pour le LD C-S-H (Constantinides et Ulm 2004). En ce qui concerne le comportement effectif de ces deux couches, les schémas d'homogénéisation les plus adaptés sont ceux de type matrice – inclusions. Dans la suite compte tenu de l'étude comparative effectuée dans le chapitre 2, c'est le schéma IDD qui a été retenu.

- Niveau II : Pâte de ciment durcie

C'est l'échelle qui est associée à la pâte de ciment homogénéisée. La taille caractéristique est typiquement inférieure à $100 \mu\text{m}$. A cette échelle la morphologie de sphères concentriques adoptée traduit la percolation mécanique de la pâte de ciment durcie observée au cours de l'hydratation du ciment pour un degré d'hydratation avancé. Le schéma le plus approprié pour estimer les propriétés effectives de la microstructure à cette échelle est comme nous l'avons évoqué le schéma auto-cohérent généralisé.

- Niveau III : Mortier - Béton

C'est l'échelle suivante qui est associée à la fois au mortier et au béton. La microstructure retenue est celle des granulats entourés successivement de l'auréole de transition et de la pâte de ciment « saine » (Li et al. 1999; Hashin et Monteiro 2002; Stora et al. 2006). La taille caractéristique est de l'ordre du centimètre (1cm) pour le mortier et d'une dizaine de centimètre (10cm) pour le béton. Certains modèles de microstructure dans la littérature observent une différence d'échelle entre le mortier et le béton (Bernard et al. 2003; Constantinides et Ulm 2004). Du fait de la similitude de la microstructure pour les deux matériaux à savoir « sable - ITZ – pâte de ciment » pour le mortier et « sable+gravier - ITZ – pâte de ciment » pour le béton, et l'ordre de grandeur du rapport entre les deux tailles caractéristiques, nous avons choisi de ne pas tenir compte de cette différence d'échelle. La prise en compte de cette différence d'échelle ne serait pas compliquée (dans ce cas, béton = « granulats –ITZ- mortier ») mais risquerait d'encombrer la modélisation. Les granulats sont considérés sphériques pour des raisons de simplifications. En réalité la forme réelle des granulats est loin d'être sphérique. Le schéma auto-cohérent généralisé a été étendue à des formes autres que sphériques, en particulier à des formes ellipsoïdales dans (Riccardi et Montheillet 1999), mais sa mise œuvre devient alors très complexe.

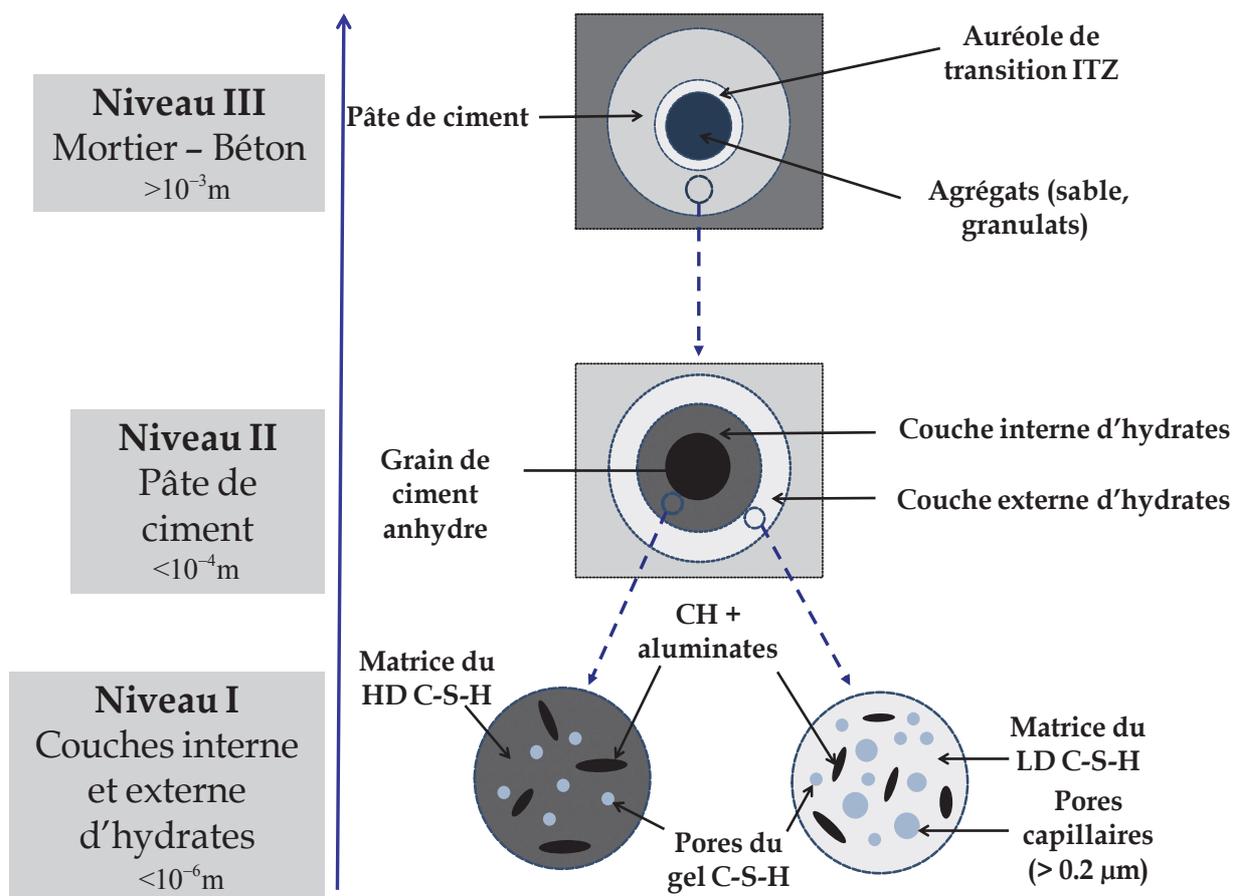


Figure 3.2 : Représentation schématique du caractère multi-échelle de la microstructure de la pâte de ciment, du mortier et du béton (Toghevi et al. 2010).

III.3 Paramètres d'entrée du modèle

III.3.1 Les fractions volumiques des hydrates

Les estimations des paramètres mécaniques et hydromécaniques qui vont suivre nécessitent d'obtenir les fractions volumiques d'hydrates présents dans les couches interne et externe (Niveau I), les proportions des deux couches d'hydrates (Niveau II) et la fraction volumique d'ITZ considérée (Niveau III). Ces valeurs dépendent de la composition minéralogique du ciment, mais aussi des rapports e/c , s/c (sable/ciment) ou encore du rapport g/c (granulats/ciment). A défaut de données expérimentales, plusieurs modèles d'hydratation, sur la base d'une approximation de la stœchiométrie des réactions d'hydratation du ciment fournissent des estimations réalistes des volumes d'hydrates présentes en phase. Compte tenu du type d'approche développé dans ce travail, et du souci de construire un modèle analytique qui nécessite un minimum d'informations initiales, nous avons retenu le modèle de Jennings (Tennis et Jennings 2000) qui comme souligné dans le chapitre 1 présente quelques avantages par rapport au modèle de Powers (Powers et Brownyard 1947; Brouwers 2004; Brouwers 2005). Il différencie en effet les deux types de C-S-H (LD et HD C-S-H) et donne séparément pour chaque hydrate formé sa fraction volumique. Le **Tableau 3.1** regroupe pour plusieurs valeurs du rapport e/c les fractions volumiques d'hydrates formés calculées avec le modèle de Jennings. Nous avons utilisé pour cela un code développé au LECBA par Syriac Béjaoui dans lequel les réactions d'hydratation du modèle de Jennings sont mises en équations. Dans le **Tableau 3.1** la deuxième colonne relative aux degrés d'hydratation est obtenue à partir la formule de l'équation 1.1. Il convient par la suite sur la base de ces fractions volumiques de clarifier la répartition volumique de chacune des phases présentes dans le matériau aux différentes échelles.

Tableau 3.1: Fractions volumiques d'hydrates dans une pâte de ciment CEM I pour différentes valeurs du rapport e/c . (Béjaoui et al. 2006).

e/c	Degré d'hydratation	Porosité capillaire (CP)	LD C-S-H	HD C-S-H	CH	AFt-AFm-C ₄ AH ₁₃	C ₃ (A,F)H ₆	Grain de ciment anhydre (UC)
0.3	70.8	7.1	12.0	37.4	15.2	7.4	7.2	13.7
0.35	78.2	9.7	16.8	33.9	15.6	7.5	7.2	9.4
0.4	83.8	12.7	22.6	28.3	15.5	7.2	7.3	6.4
0.45	87.9	15.4	28.8	21.6	15.1	6.9	7.3	4.3
0.5	90.8	19.2	34.8	14.6	14.4	6.5	7.5	3.0
0.6	94.6	25	47.0	1.0	13.1	5.8	6.8	1.4

III.3.1.1 fractions volumiques dans la pâte de ciment

- Niveau I

Soit f_j les fractions volumiques globales des différentes phases en présence, $j \in (\text{AFt}, \text{AFm}, \text{CH}, \text{LD C-S-H}, \text{HD C-S-H}, \text{CP}, \text{GP}, \text{UC})$ telles qu'on ait :

$$\sum_j f_j = 1 \quad (3.1)$$

Ces fractions volumiques sont celles dans le **Tableau 3.1**. Les notations suivantes correspondent à :

- CP : pores capillaires,
- GP : pores du gel de C-S-H,
- UC : Grain de ciment anhydre.

A ce niveau il s'agit de répartir les fractions volumiques entre les couches interne et externe. Les hydrates qui jouent le rôle d'inclusions sont répartis dans les couches interne et externe, de manière proportionnelle à la fraction volumique des HD C-S-H et LD C-S-H contenus initialement dans le matériau. Pour cela on définit les ratios η et η' qui s'écrivent :

$$\eta = \frac{f_{\text{HD C-S-H}}}{f_{\text{HD C-S-H}} + f_{\text{LD C-S-H}}} \quad (3.2)$$

et

$$\eta' = \frac{f_{\text{LD C-S-H}}}{f_{\text{HD C-S-H}} + f_{\text{LD C-S-H}}} \quad (3.3)$$

ce qui implique $\eta' = 1 - \eta$.

Dans les couches interne et externe, la fraction volumique de l'hydrate qu'on veut distribuer est donnée par :

$$\bar{f}_j^{int} = \eta f_j \quad j \in (\text{AFt}, \text{AFm}, \text{CH}) \quad (3.4)$$

et

$$\bar{f}_j^{ext} = \eta' f_j = (1 - \eta) f_j \quad j \in (\text{AFt}, \text{AFm}, \text{CH}) \quad (3.5)$$

Les indices « int » et « ext » se réfèrent respectivement aux couches interne et externe. On rappelle que la porosité capillaire CP se trouve exclusivement dans la couche externe et les pores du gel de C-S-H constituent la porosité des LD et HD C-S-H. Pour retrouver les fractions volumiques globales d'hydrates f_j^{int} et f_j^{ext} dans chacune des couches interne et externe, il suffit donc d'additionner les fractions volumiques des hydrates présentes dans cette couche soit :

$$f^{int} = f_{HD\ C-S-H} + \sum_j \bar{f}_j^{int} \quad j \in (\text{AFt}, \text{AFm}, \text{CH}) \quad (3.6)$$

et

$$f^{ext} = f_{LD\ C-S-H} + f_{CP} + \sum_j \bar{f}_j^{ext} \quad j \in (\text{AFt}, \text{AFm}, \text{CH}) \quad (3.7)$$

Ceci implique de recalculer la nouvelle fraction volumique des hydrates à l'intérieur de chaque couche en rapportant les fractions volumiques initiales \bar{f}_j^{int} ou \bar{f}_j^{ext} à la fraction volumique globale des couches f^{int} ou f^{ext} , soit dans la couche interne :

$$f_j^{int} = \frac{\bar{f}_j^{int}}{f^{int}} \quad j \in (\text{AFt}, \text{AFm}, \text{CH}) \quad (3.8)$$

$$f_{HD\ C-S-H}^{int} = 1 - \sum_j f_j^{int} \quad j \in (\text{AFt}, \text{AFm}, \text{CH}) \quad (3.9)$$

Le gel du LD C-S-H est vu comme une matrice dense dans laquelle on retrouve la porosité GP de 24%. La fraction volumique des pores du gel LD C-S-H et de la matrice C-S-H^{int} de LD C-S-H sont donc respectivement dans la couche interne :

$$f_{GP}^{int} = 0.24 f_{HD\ C-S-H}^{int} \quad ; \quad f_{C-S-H^{int}}^{int} = f_{HD\ C-S-H}^{int} - f_{GP}^{int} \quad (3.10)$$

et de même dans la couche externe :

$$f_j^{ext} = \frac{\bar{f}_j^{ext}}{f^{ext}} \quad j \in (\text{AFt}, \text{AFm}, \text{CH}, \text{CP}) \quad (3.11)$$

$$f_{LD\ C-S-H}^{ext} = 1 - \sum_j f_j^{ext} \quad j \in (\text{AFt}, \text{AFm}, \text{CH}, \text{CP}) \quad (3.12)$$

La porosité GP dans le LD C-S-H est de 37% ce qui donne :

$$f_{GP}^{ext} = 0.37 f_{LD\ C-S-H}^{ext} \quad ; \quad f_{C-S-H^{ext}}^{ext} = f_{LD\ C-S-H}^{ext} - f_{GP}^{ext} \quad (3.13)$$

On désigne par ϕ^{int} la porosité totale (pores du gel + pores capillaire) dans la couche interne et par ϕ^{ext} celle dans la couche externe :

$$\phi^{int} = f_{GP}^{int} \quad (3.14)$$

$$\phi^{ext} = f_{GP}^{ext} + f_{CP}^{ext} \quad (3.15)$$

Les **Figure 3.3** et **3.4** montrent la variation des fractions volumiques des différents hydrates dans les couches interne et externe, et de la porosité en fonction du rapport e/c. On peut s'apercevoir que les fractions volumiques varient peu en fonction du rapport e/c dans les couches, ce qui peut

sembler à priori paradoxal. En réalité cette constatation est tempérée par le fait que ce sont plutôt les fractions volumiques globales de la couche externe (resp. interne) qui augmentent (resp. diminuent) quand le rapport e/c augmente comme l'illustre la **Figure 3.5**.

- Niveau II

Une fois que les différents hydrates sont répartis dans les couches interne et externe, on peut facilement en déduire les proportions volumiques à l'échelle II des trois phases du schéma auto-cohérent généralisé. La fraction volumique du ciment anhydre reste celle calculée par le modèle de Jennings, elle diminue suivant que le rapport e/c augmente. Les fractions volumiques globales des deux couches s'écrivent :

$$\begin{cases} f_1 = f_{UC} \\ f_2 = f_{int} = f_{C-S-H^{int}} + f_{GP}^{int} + \sum_j \bar{f}_j^{int} \\ f_3 = f_{ext} = f_{C-S-H^{ext}} + f_{GP}^{ext} + f_{CP} + \sum_j \bar{f}_j^{ext} \\ f_1 + f_2 + f_3 = 1 \end{cases} ; j \in (\mathbf{AFt}, \mathbf{AFm}, \mathbf{CH}) \quad (3.16)$$

La porosité totale ϕ_p de la pâte de ciment s'écrit donc :

$$\phi_{hp} = f_2 \phi^{int} + f_3 \phi^{ext} \quad (3.17)$$

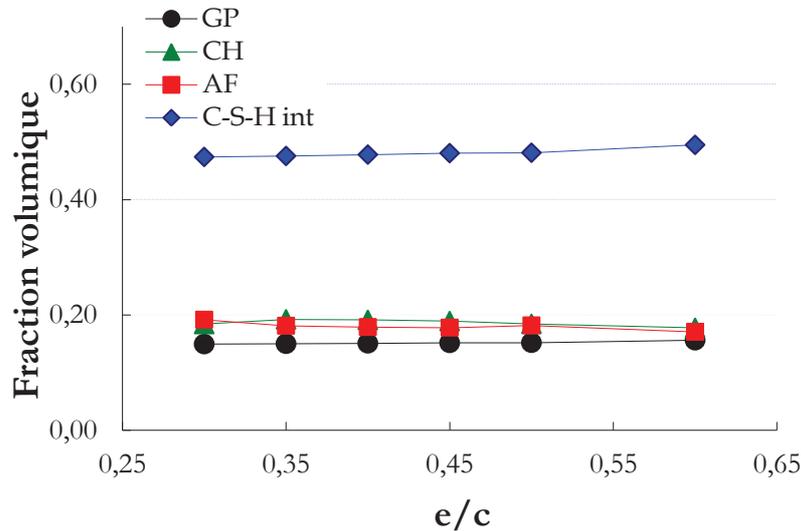


Figure 3.3 : Fractions volumiques des phases dans la couche interne d'hydrates (Niveau I) en fonction du rapport e/c

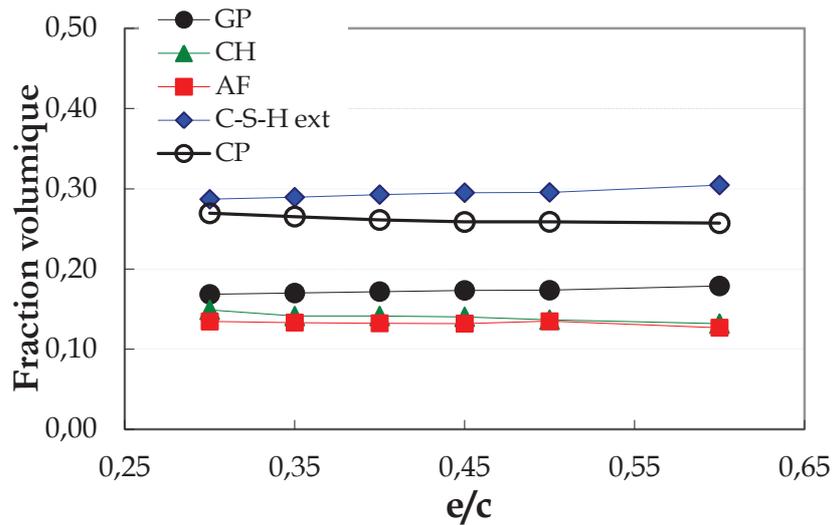


Figure 3.4 : Fractions volumiques des hydrates dans la couche externe d'hydrates (Niveau I) en fonction du rapport e/c

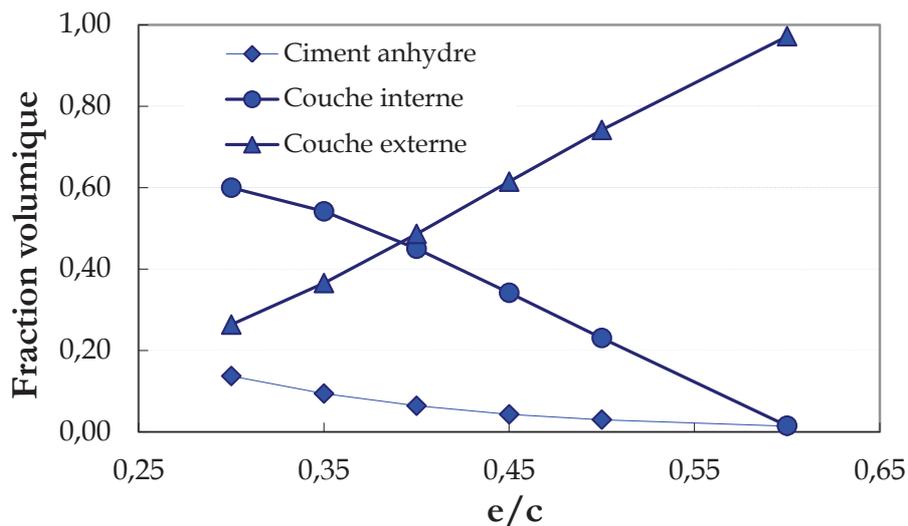


Figure 3.5 : Fractions volumiques des phases du ciment anhydre, de la couche interne et de la couche externe du schéma à trois phases en fonction du rapport e/c .

III.3.1.2 Fractions volumiques dans le mortier/béton

La démarche ici est de déterminer dans un premier temps les fractions volumiques de l'ITZ f_{ITZ} et de la pâte de ciment « saine » f_{bp} à partir des données sur la formulation du mortier/béton (granulométrie, e/c , s/c , ag/c etc...). Dans un second temps les volumes d'hydrates calculés initialement (Tableau 3.1) seront répartis entre la pâte de ciment « saine » et l'ITZ proportionnellement à leurs fractions volumiques. On peut d'ores et déjà écrire que :

$$f_{bp} + f_g + f_{ITZ} = 1 \quad (3.18)$$

avec f_g la fraction volumique des granulats.

- Estimation des fractions volumiques de l'ITZ et de la pâte de ciment « saine »

L'ITZ est supposée uniforme et son épaisseur constante autour des granulats (Neubauer et al. 1996; Garboczi et Bentz 1997; Li et Zheng 2007). (Lu et Torquato 1992) sur la base de la théorie du « nearest-neighbor distribution » qui caractérise la probabilité de trouver une particule voisine à une certaine distance à partir d'un point de référence dans un système de particules interagissant, ont proposé une méthode analytique permettant d'estimer la fraction volumique de couronnes autour de particules sphériques de tailles différentes et distribuées aléatoirement. (Garboczi et Bentz 1998) ont appliqué la formule à l'estimation de la fraction volumique de l'ITZ dans le béton. La méthode prend en compte les recouvrements éventuels de l'ITZ qu'on peut observer lorsque sa fraction volumique est importante dans le matériau (**Figure 3.6**).

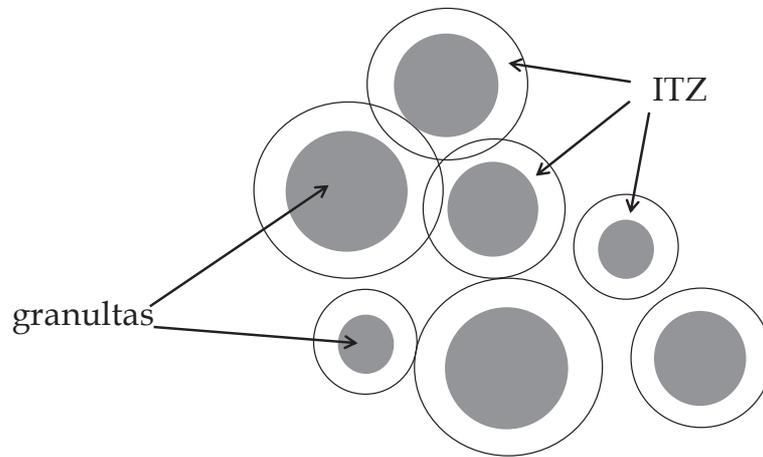


Figure 3.6 : Schéma de recouvrement de l'aurole de transition d'épaisseur constante autour des granulats.

La fraction volumique de la pâte de ciment « saine » est obtenue par la variable statistique $e_v(t)$, t étant l'épaisseur de la couronne. Pour une épaisseur de l'ITZ $r = t_{ITZ}$ sa fraction volumique est donnée par (Lu et Torquato 1992) :

$$f_{ITZ} = 1 - f_g - e_v(t_{ITZ}) \quad (3.19)$$

avec f_g la fraction volumique des granulats et le terme $e_v(t_{ITZ})$ est donné par (Lu et Torquato 1992) :

$$e_v(t_{ITZ}) = (1 - f_{ag}) \exp(-\pi\rho(ct_{ITZ} + dt_{ITZ}^2 + gt_{ITZ}^3)) \quad (3.20)$$

avec ρ le nombre de granulats par unité de volume ; c , d et g des coefficients moyennés sur la distribution de la taille des granulats obtenue en exploitant la courbe granulométrique (Garboczi et Bentz 1998) :

$$c = \frac{4\langle R^2 \rangle}{1-f_g} \quad (3.21)$$

$$d = \frac{4\langle R \rangle}{1-f_g} + \frac{12\zeta\langle R^2 \rangle}{(1-f_g)^2} \quad (3.22)$$

$$g = \frac{4}{3(1-f_g)} + \frac{8\zeta\langle R \rangle}{(1-f_g)^2} + \frac{16\mathcal{A}\zeta^2\langle R^2 \rangle}{3(1-f_g)^3} \quad (3.23)$$

où $\zeta = 2\pi N\langle R^2 \rangle/3$ et $\langle \rangle$ désigne l'opérateur de moyenne sur la distribution de la taille des granulats. Le paramètre \mathcal{A} peut prendre les valeurs 0, 2 ou 3 et découle directement de l'approximation analytique choisie dans (Lu et Torquato 1992). (Garboczi et Bentz 1997) expliquent que le terme contrôlé (3^{ème} terme à droite de l'équation (3.23)) par ce paramètre est négligeable devant la fraction volumique totale de l'ITZ. De plus selon les auteurs, sur la base de comparaisons avec des résultats numériques exacts, le choix $\mathcal{A}=0$ donne systématiquement les plus petits écarts. Dans la suite \mathcal{A} est pris égal à zéro. L'estimation des paramètres N , $\langle R \rangle$ et $\langle R^2 \rangle$ nécessite la connaissance de la granulométrie des granulats utilisés. Elle est donnée sous la forme de pourcentages massiques de particules passant au travers de tamis successifs de maille D_i . Considérant M le nombre de mailles utilisées et c_i la fraction volumique de particules ayant un diamètre compris entre D_i et D_{i+1} , on a la relation (Garboczi et Bentz 1998) :

$$\sum_i^M c_i = 1 \quad (3.24)$$

Les pourcentages massiques considérés s'identifient à des pourcentages volumiques pour des granulats de même densité. Souvent la distribution de taille de granulats entre deux tamis successifs n'est pas connue. Elle peut être assimilée soit à une distribution uniforme de volume soit à une distribution uniforme de diamètre de granulats. Dans le premier cas la fraction volumique de granulats $p(V)$ ayant un volume compris entre V et $V+dV$ et passant au travers du tamis D_{i+1} est donnée par :

$$p(V)dV = \frac{c_i dV}{(V_{i+1} - V_i)} \quad (3.25)$$

de telle sorte qu'entre V_i et V_{i+1} on ait $p(V)=c_i$. Soit N le nombre total de granulats contenus dans le volume V_{TOT} du mortier/béton tel que $\rho = N/V_{TOT}$, V_g le volume total de granulats tel que $f_g = V_g/V_{TOT}$, le nombre de granulats ayant un volume compris entre V et dV passant au travers du tamis D_{i+1} est donnée par (Garboczi et Bentz 1998) :

$$n(V)dV = p(V) \frac{3f_g}{\rho V} = \frac{3f_g c_i dV}{\rho V (V_{i+1} - V_i)} \quad (3.26)$$

ou en posant $V = 4\pi r^3 / 3$ et $dV = 4\pi r^2$, r étant le rayon du granulat on a (Garboczi et Bentz 1998) :

$$n(r)dr = \frac{9f_g c_i r^{-1} dr}{4\pi \rho (r_{i+1}^3 - r_i^3)} \quad (3.27)$$

La relation (3.24) peut se réécrire sous forme intégrale :

$$\sum_i^M \int_{r_i}^{r_{i+1}} n(r)dr = 1 \quad (3.28)$$

On en déduit l'expression de ρ sous la forme (Garboczi et Bentz 1998)

$$\rho = \sum_i^M \frac{9f_g c_i}{4\pi (r_{i+1}^3 - r_i^3)} \ln \left(\frac{r_{i+1}}{r_i} \right) \quad (3.29)$$

et les moyennes du rayon, du carré du rayon s'écrivent respectivement sous la forme (Garboczi et Bentz 1998) :

$$\langle R \rangle = \sum_i^M \frac{9f_g c_i}{4\pi \rho (r_{i+1}^3 - r_i^3)} (r_{i+1} - r_i) \quad (3.30)$$

$$\langle R^2 \rangle = \sum_{i=1}^M \frac{9f_g c_i}{4\pi \rho (r_{i+1}^3 - r_i^3)} \frac{1}{2} (r_{i+1}^2 - r_i^2) \quad (3.31)$$

Notons que les grandeurs $2\langle R \rangle$, $\pi\langle R^2 \rangle$ représentent le rayon et la surface moyens des granulats dans le matériau. Nous proposons d'illustrer la méthode avec les formulations d'un mortier CEM I à $e/c = 0.5$ et $s/c = 3$ et d'un béton $e/c = 0.48$ et $g/c = 5.48$. La fraction volumique du sable dans le mortier est de 50% et celle des granulats dans le béton est de 66%. Les courbes granulométriques utilisées correspondent aux spécifications EDF (Granger 1996) et sont tracées sur la **Figure 3.7**. On montre sur la Figure 3.8 l'évolution des fractions volumiques de l'ITZ et de la pâte de ciment saine dans le mortier et le béton. On constate qu'à une même épaisseur de l'ITZ, sa fraction volumique est évidemment beaucoup plus importante dans le mortier que dans le béton.

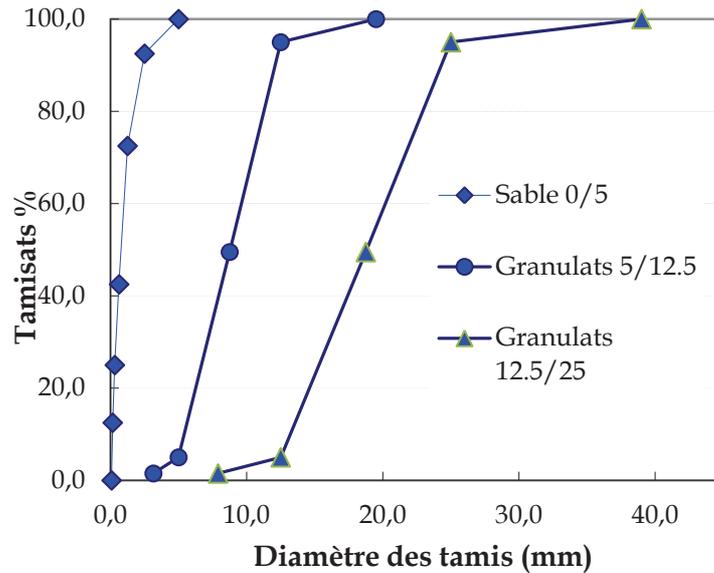


Figure 3.7 : Courbes granulométriques du sable 0/5, des granulats 5/12.5 et 12.5/25 des bétons de référence EDF (Granger 1996; Reviron 2009).

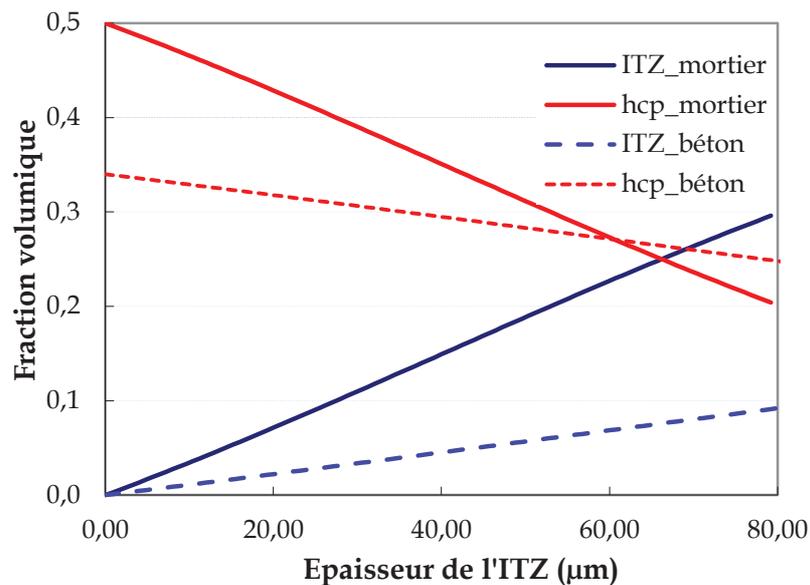


Figure 3.8 : Evolution des fractions volumiques de l'ITZ et de la pâte de ciment saine dans le mortier et dans le béton.

- Répartition des phases et porosité dans l'ITZ

On ne détaille ici que l'estimation de la porosité dans l'ITZ, les hydrates sont répartis de la même manière que dans le cas des couches interne et externe. Cette manière-ci de répartir les hydrates rend en partie compte du fait que la microstructure de la pâte de ciment n'est pas la même que celle-ci était comprise dans un mortier/béton. Le rapport entre la porosité de l'ITZ et celle de la

pâte de ciment est souvent estimé à environ 1.5 avec une certaine dispersion dans la littérature (Bourdette et al. 1995). On propose comme alternative ici d'estimer la porosité de l'ITZ en fonction de la porosité à l'eau ϕ du mortier/béton obtenu expérimentalement. Cette façon de procéder suppose que l'on attribue à l'ITZ l'excédent de la porosité du mortier par rapport à la pâte de ciment « saine » qui la constitue, telle que (Stora 2007) :

$$\phi_{ITZ} = \frac{\phi - f_{b\phi} \phi_{b\phi}}{f_{ITZ}} \quad (3.32)$$

avec ϕ_{ITZ} , la porosité globale de l'ITZ, soit la somme de la porosité capillaire et de la porosité du gel de LD C-S-H contenues dans l'ITZ.

III 3.2 Paramètres mécaniques de la matrice de C-S-H

Les propriétés mécaniques des hydrates utilisés dans le modèle sont celles présentées dans la partie bibliographique de ce rapport. On souhaite néanmoins apporter quelques précisions sur les propriétés mécaniques du gel de C-S-H. La prise en compte explicite des pores du gel comme jouant le rôle d'inclusions suppose que l'on identifie les propriétés mécaniques de la matrice C-S-H (sans les pores du gel). A cette échelle de la microstructure, on peut se poser la question de la validité d'une approche micromécanique. Néanmoins en se basant sur les travaux de (Ulm et al. 2004), une méthode inverse d'homogénéisation permet de retrouver les coefficients de compressibilité et de cisaillement de la matrice de C-S-H. En adoptant le schéma d'homogénéisation IDD qui compte tenu de la forme sphérique des pores est identique au schéma MT, et connaissant les modules de compressibilité et de cisaillement du LD C-S-H $k_{LD\ C-S-H} = 13.71GPa$, $\mu_{LD\ C-S-H} = 8.62GPa$ et HD C-S-H $k_{HD\ C-S-H} = 18.84GPa$, $\mu_{HD\ C-S-H} = 11.85GPa$ (Constantinides et Ulm 2004), on peut déterminer ceux de la matrice de C-S-H. Il suffit dans ce cas de résoudre le système de deux équations à deux inconnues suivant :

$$\begin{cases} x \left(1 - f_{GP}^i \frac{3x + 4y}{3f_{GP}^i x + 4y} \right) = k_j \\ y \left(1 - f_{GP}^i \frac{15x + 20y}{(9 + 6f_{GP}^i)x + (8 + 12f_{GP}^i)y} \right) = \mu_j \end{cases} \quad (3.33)$$

Le couple d'indices (i,j) est mis soit pour (int, HD C-S-H), soit pour (ext, LD C-S-H). Les inconnues x et y sont respectivement les modules de compressibilité et de cisaillement de C-S-H^{int} lorsque $(i,j) = (\text{int}, \text{HD C-S-H})$ et de C-S-H^{ext} lorsque $(i,j) = (\text{ext}, \text{LD C-S-H})$. On trouve de cette manière que $k_{C-S-H}^{\text{int}} = 32.65GPa$, $\mu_{C-S-H}^{\text{int}} = 19.36GPa$; $k_{C-S-H}^{\text{ext}} = 32.33GPa$; $\mu_{C-S-H}^{\text{ext}} = 18.49GPa$; ce qui donne pour les modules d'Young $E_{C-S-H}^{\text{int}} = 48.48GPa$ et $E_{C-S-H}^{\text{ext}} = 46.60GPa$. Soulignons que les paramètres mécaniques des deux matrices dans les couches externe et interne sont très proches. Ces résultats tendent à confirmer l'hypothèse souvent faite selon laquelle, les LD-C-S-H et HD C-S-H ne diffèrent d'un point de vue purement mécanique que de par leur porosité. A titre de comparaison, dans (Ulm et al. 2004), les auteurs ne

distinguent pas de LD et HD C-S-H et trouvent pour une matrice de C-S-H uniforme $E_{C-S-H} = 47.74GPa$.

III.4 Aspects hydriques du modèle

III.4.1 Etat de l'eau dans la porosité

Plusieurs études ont mis en évidence l'influence de l'état de l'eau sur les propriétés macroscopiques des matériaux cimentaires (Powers et Brownyard 1947; Wittmann 1968; Bazant 1972). La description multi-échelle retenue permet d'aborder le comportement hydrique des matériaux cimentaires sous l'angle de la théorie de la micro-poro-mécanique en partant d'une échelle décrite à la fois par la mécanique et la physico-chimie. En particulier l'eau sous la forme de mince couche adsorbée sur les parois solides et qui coexiste avec l'eau capillaire dans les pores recevra un traitement particulier. Cette quantité d'eau adsorbée dépend de l'humidité relative et sa variation est en partie responsable du retrait de dessiccation dans les matériaux cimentaires. On définit le rayon capillaire r_c , le plus petit rayon de pore dans lequel se forme le ménisque entre les phases liquide et gazeuse en équilibre sous l'effet de la pression capillaire (**Figure 3.9**). Le rayon de ménisque est plus faible que le rayon capillaire et on va distinguer deux familles de pores : les pores de taille inférieure à r_c sont saturés d'eau et les pores de plus grande taille partiellement saturés par la fine couche d'eau adsorbée assurant ainsi l'équilibre thermodynamique. La forme des pores est sphérique. Ceci permet de prendre en compte facilement l'épaisseur de la couche d'eau adsorbée. Des pores de forme ellipsoïdales ont été considérés dans (Dormieux et al. 2006) en conditions partiellement saturées, mais la configuration adoptée de l'eau liquide dans les pores ne permet pas de l'adapter dans le cas de la couche d'eau adsorbée. En effet dans leur configuration, dans les pores, il existe une interface gaz/solide, ce qui n'est pas le cas dans une situation réelle puisque une couche d'eau est toujours adsorbée sur les parois du squelette solide, et ceci quelque soit l'humidité relative. Néanmoins une étude paramétrique sur la forme des pores, en conditions saturées est faite par la suite afin de voir à quel point l'hypothèse de forme sphérique peut être discutable.

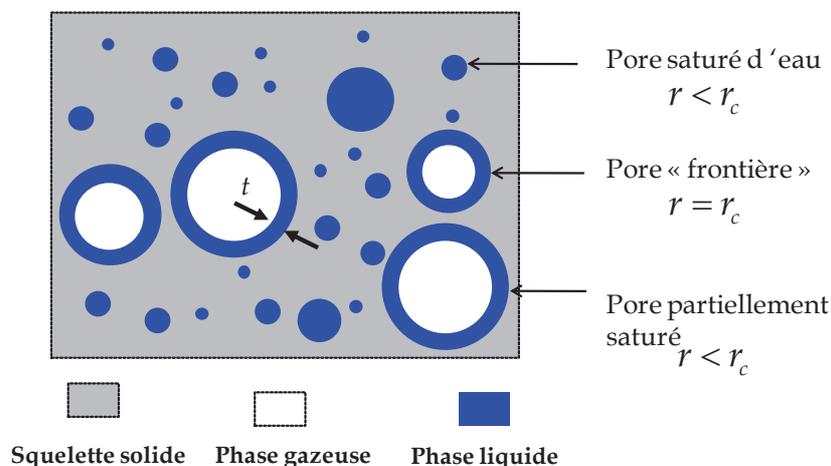


Figure 3.9: Etat de l'eau dans le matériau partiellement saturé : pores saturés et pores partiellement saturés.

Si on note $t(h_r)$ l'épaisseur équivalente qui caractérise la couche d'eau adsorbée et r le rayon du ménisque d'eau formé, on a la relation :

$$r_c = r + t(h_r) \quad (3.34)$$

et r est donné par les lois de Kelvin et de Laplace, ce qui permet d'obtenir l'expression du rayon capillaire en fonction de l'humidité relative :

$$r_c = \frac{2\sigma_{gl}}{p_c} + t(h_r) = -\frac{2\sigma_{gl}M_v}{\rho_l RT \ln(h_r)} + t(h_r) \quad (3.35)$$

Epaisseur de la couche d'eau adsorbée

D'après (Brunauer et al. 1938; Hagymassy et al. 1969; Baroghel-Bouny 2007) en se plaçant dans les conditions où l'on peut considérer que la phase adsorbée est la seule phase présente dans le réseau poreux, il est possible, grâce entre autres, à la méthode B.E.T (Brunauer-Emmet-Teller) d'accéder à différents paramètres relatifs au couple adsorbant/adsorbat. La méthode consiste à faire adsorber sur la surface du matériau, en général du diazote à sa température de liquéfaction à différentes humidités relatives. Par traitement analytique de l'isotherme d'adsorption (Brunauer et al. 1938), on peut déterminer la surface spécifique du squelette solide ainsi que le volume adsorbé. L'épaisseur moyenne du film adsorbé en fonction de l'humidité relative est donnée par :

$$t = \frac{V_{ads}(h_r)}{S_{s_BET}} \quad (3.36)$$

où V_{ads} est le volume adsorbé et S_{s_BET} la surface spécifique du solide. La méthode B.E.T est limitée à un domaine d'humidité relative $0.05 < h_r < 0.4$ pour les isothermes de type IV dans lesquelles on classe généralement les matériaux cimentaires et à la quasi-totalité du domaine d'humidité relative pour les isothermes de type II et III ($h_r > 0.05$). Pour obtenir $t(h_r)$ sur tout le domaine d'humidité relative pour les matériaux cimentaires, il est courant de faire appel aux méthodes de « courbes t » de la littérature qui donnent en fonction de la pression partielle p_v de l'adsorbat (ou de manière équivalente de l'humidité relative $h_r = p_v / p_{vs}$, p_{vs} étant la pression de vapeur saturante) l'épaisseur moyenne du film adsorbé sur des adsorbants non poreux, pour lesquels les interactions adsorbant/adsorbat sont équivalentes, d'un point de vue énergétique, aux interactions eau/pâte de ciment. En ce qui concerne l'adsorption de vapeur d'eau, les premières courbes t ont été proposées par (Hagymassy et al. 1969). Par la suite (Badmann et al. 1981) à partir d'un grand nombre de courbes expérimentales, valables pour une large gamme de matériaux proposent l'expression analytique suivante, adoptée dans (Bentz et al. 1998; Bary et al. 2008) :

$$t_1 = 3.85 - 1.89 \ln(\ln(h_r)) \quad \text{en \AA} \quad (3.37)$$

Une caractéristique de cette expression est que $\lim_{h_r \rightarrow 1} t(h_r) = \infty$. Une autre forme d'expression est rencontrée dans la littérature. Il s'agit de celle adaptée de résultats expérimentaux de Harkins et Jura, sous la forme (Rigby 2000) :

$$t_2 = \left(\frac{2.4}{0.85 + (-\log h_r)^{0.57}} \right)^{2.785} \text{ en } \text{\AA} \quad (3.38)$$

Notons que ces deux expressions ne dépendent pas de la température. En effet des résultats expérimentaux obtenus par (Baroghel-Bouny 2007) à $T = 23^\circ\text{C}$ et à $T = 44^\circ\text{C}$ semblent mettre en évidence l'effet quasi négligeable de la température sur la quantité d'eau adsorbée. Ces résultats vont dans le sens de (Gruszkiewicz et al. 2001) qui montrent à base d'essais sur des minerais à adsorption multi-couches que seule la quantité d'eau résultant de la condensation capillaire dans les pores diminue significativement avec l'augmentation de la température. Les deux expressions t_1 et t_2 sont confrontées à des valeurs expérimentales obtenues par B.E.T. par (Baroghel-Bouny 2007) sur pâte de ciment (CO) et béton (BO) ordinaires sur la **Figure 3.10**. Cette comparaison révèle une meilleure concordance des résultats expérimentaux avec l'expression t_1 qu'avec t_2 . On remarque également la relative coïncidence des courbes t_1 et expérimentales dans le domaine « d'isotherme d'adsorption universelle » mise en évidence par (Baroghel-Bouny 1994; Baroghel-Bouny 2007) et correspondant à environ $h_r < 63.2\%$. L'auteur explique que dans cette gamme d'humidité, l'augmentation de l' h_r se traduit par une augmentation de la teneur en eau dans le matériau qui équivaut à une augmentation de l'épaisseur d'un film d'eau qui serait adsorbé sur la surface solide comme un adsorbant non poreux. Au dessus de 63.2% d' h_r , les valeurs expérimentales sont plus importantes que celles que l'on obtiendrait sur un matériau non poreux. Cet écart marque une apparition importante de condensation capillaire qui provoque un remplissage en volume, éventuellement partiel, du réseau poreux. Dans la suite c'est l'expression t_1 (l'équation (3.37)) qui est utilisée dans les calculs. L'évolution du rayon « frontière » r_c en fonction de l'humidité relative est illustrée sur la **Figure 3.11**. La tension superficielle σ_{gl} à l'interface liquide/gaz et la masse volumique de l'eau dépendent de la température et leurs expressions sont données par (Le Neindre 1993) :

$$\sigma_{gl} = 0.1558 \left(1 - \frac{T}{647.1} \right)^{1.26} \text{ en N/m} \quad (3.39)$$

et (Ranznjevic 1970) :

$$\rho_l = 314.4 + 685.6 \left[1 - \left(\frac{T - 273.15}{374.14} \right)^{0.55} \right]^{0.55} \text{ en kg/m}^3 \quad (3.40)$$

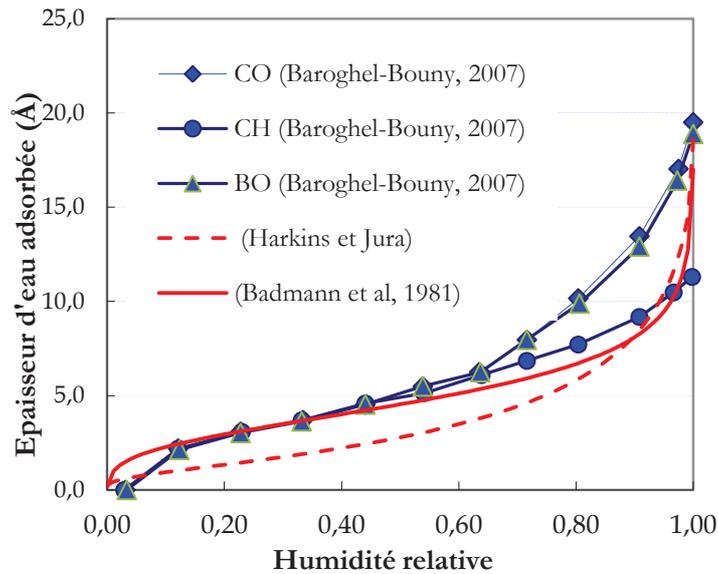


Figure 3.10 : Comparaisons des expressions analytiques et des valeurs expérimentales de l'épaisseur de la couche d'eau adsorbée

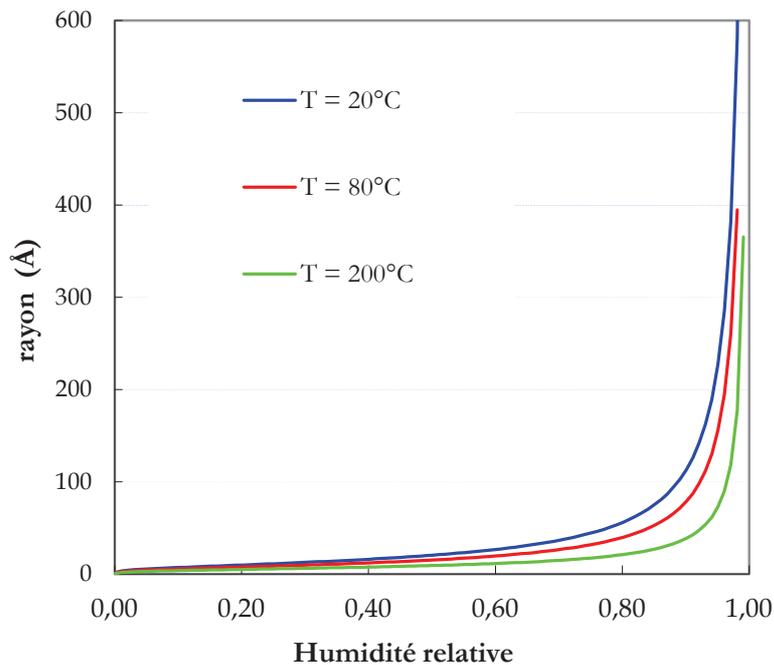


Figure 3.11 : Evolution du rayon capillaire en fonction de l'humidité relative pour différentes températures $T=20^{\circ}\text{C}$, $T=80^{\circ}\text{C}$ et $T=200^{\circ}\text{C}$.

III.4.2 Isothermes de sorption-Distribution de tailles de pores

Les isothermes de sorption sont nécessaires pour la connaissance du comportement hydrique des matériaux cimentaires et dépendent fortement de leur microstructure, notamment de la distribution poreuse. Expérimentalement, l'essai qui permet d'obtenir l'isotherme de sorption,

consiste à contrôler la perte de masse d'un échantillon soumis à la dessiccation à plusieurs humidités relatives données (désorption) et la reprise de masse lors du chemin inverse (adsorption). Pour tenir compte de la cinétique très lente des processus, les paliers de stabilisation à différentes humidités relatives doivent être suffisamment longs. Par conséquent l'essai peut durer plusieurs mois. Il est courant d'approcher l'isotherme expérimentale par une fonction continue, en se basant sur une approche mathématique permettant une interprétation physique de la structure poreuse du matériau. En s'inspirant de l'exploitation des résultats de porosimétrie au mercure, on définit une fonction de distribution de rayon de pores qui s'écrit :

$$f(r) = \frac{\partial V(r)}{\partial(\ln(r))} = r \frac{\partial V(r)}{\partial r} \quad (3.41)$$

avec $V(r)$ le volume cumulé de pores ayant un rayon r' inférieur à r . En présence de plusieurs classes de pores, la distribution de la taille des pores peut être représentée par une somme de plusieurs sous-distributions telle que :

$$f(r) = \lambda_i f_i(r) \quad (3.42)$$

avec λ_i le poids de la sous-distribution i . Cette description permet de représenter la porosité sur une large gamme de tailles de pores. (Diamond et Dolch 1972) ou encore (Roy et al. 1993) ont proposé une description de la porosité des matériaux cimentaires par une somme de distributions log-normales généralisées. Ce type de fonctions représente correctement les densités de probabilité de la taille des pores mais a l'inconvénient d'exiger en données d'entrée le spectre de porosité (tailles de pores minimale et maximale) sur lequel il s'applique. Une autre fonction, qui elle s'affranchit de cette condition et souvent rencontrée dans la littérature est la fonction de distribution de Schulz initialement proposée par (Schulz 1939) et utilisée notamment par (Lu et Torquato 1992; Torquato 2001; Bary et al. 2008). Cette fonction possède des propriétés mathématiques intéressantes et a été choisie dans le cas de notre étude.

III.4.2.1 Loi de distribution de Schulz

La fonction de densité de Schulz s'écrit :

$$f_i(r) = \frac{1}{\Gamma(m_i + 1)} \left(\frac{m_i + 1}{\bar{R}_i} \right)^{m_i + 1} r^{m_i} \exp\left(-\frac{m_i + 1}{\bar{R}_i} r\right) \quad (3.43)$$

avec $\Gamma(x)$ la fonction Gamma ; pour des valeurs entières de x , $\Gamma(x+1) = x!$. Dans le contexte de la porosité des matériaux cimentaires la variable r joue le rôle de rayon de pores et \bar{R}_i représente le rayon moyen de la classe i permettant de décrire la localisation du mode poreux. Il peut s'écrire en fonction de la distribution par :

$$\bar{R}_i = \langle R_i \rangle \quad ; \quad \langle X(R) \rangle = \int_0^\infty X(R) f_i(R) dR \quad (3.44)$$

m_i est un paramètre qui peut être apparenté à l'écart type de la distribution et qui indique si le mode poreux est plus ou moins étalé sur l'axe des abscisses (**Figure 3.12**). Le réseau est d'autant plus étalé que m est grand et le cas limite $m_i \rightarrow \infty$ correspond à une distribution de tailles de pores identiques. A partir de la fonction de densité de la classe i , on la fraction volumique cumulée de pores sous la forme (Bary 2011) :

$$\phi_i(r) = \int_0^r \frac{f(R)}{R} dR \quad (3.45)$$

$\phi_i(r)$ est la fraction volumique cumulée de pores de la sous distribution i ayant un rayon r' inférieur à r . La fraction volumique totale de pores de la distribution ayant un rayon inférieur à r s'obtient donc par :

$$\phi(r) = \lambda_i \phi_i(r) \quad (3.46)$$

Lorsque le paramètre m_i est identique pour toutes les classes de pores, $m_i = m_f$, la fraction volumique totale des pores ayant un rayon r' inférieur à r peut se réécrire sous la forme discrète (Bary 2011) :

$$\phi_i(r) = \frac{-\kappa_i}{m_f} \left[\exp(-\kappa_i r) \sum_{j=1}^{m_f} \frac{(\kappa_i r)^j}{(j-1)!} - 1 \right] \quad (3.47)$$

avec :

$$\kappa_i = (m_f + 1) / \bar{R}_i \quad (3.48)$$

Dans le cas où les pores de rayon $r' < r$ sont saturés, le degré de saturation correspondant est obtenu en rapportant la fraction volumique des pores remplis d'eau $\phi(r)$ à la fraction volumique totale soit (Bary 2011) :

$$S_i(r) = \phi(r) / \phi \quad (3.49)$$

avec $\phi = \phi(r \rightarrow \infty) = \lambda_i \kappa_i / m_f$. Les paramètres λ_i s'obtiennent en combinant cette dernière relation avec l'équation (3.48) (Bary 2011) :

$$\lambda_i = \frac{m_f \phi_i \bar{R}_i}{m_f + 1} \quad (3.50)$$

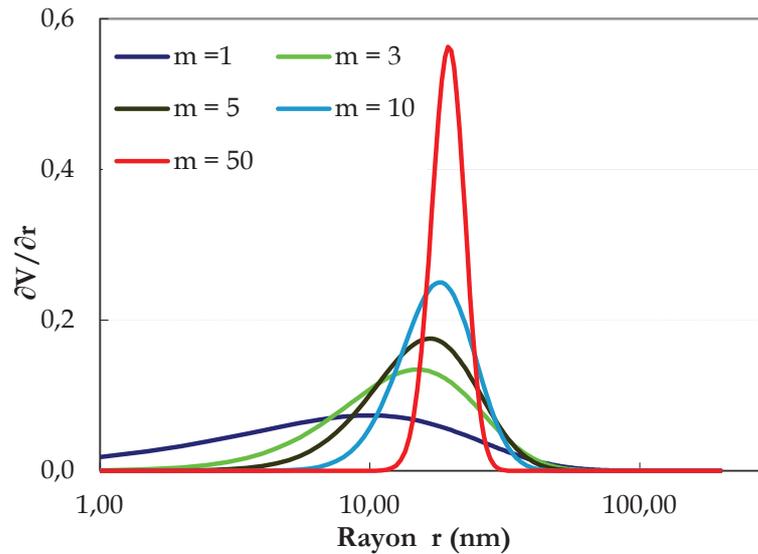


Figure 3.12 : Fonctions de distributions pour différentes valeurs de m lorsque $\bar{R} = 20 \text{ nm}$

III.4.2.2 Application : pâte de ciment CEM I $e/c = 0.3$

Nous avons vu précédemment que la loi de Schulz permet de décrire une distribution de taille de pores par la somme de plusieurs sous-distributions. Nous allons décomposer la porosité des matériaux cimentaires en deux grandes classes de pores : les pores du gel de C-S-H et les pores capillaires. Une autre classe pourrait être attribuée à la porosité grossière (bulles d'air occlus, air entraîné) mais il est généralement admis que cette porosité n'intervient quasiment pas dans les forces responsables du comportement macroscopique, le retrait par exemple (Houst et Wittmann 1989). En conditions de séchage, l'eau dans ces pores est rapidement évaporée et le rayon du ménisque formé est trop grand pour que la pression capillaire soit importante (Equation de Laplace). De plus la présence de cette porosité dépend des conditions de malaxage et de mise en œuvre du matériau. Dans la suite on ne s'attardera pas à décrire de façon précise cette classe de porosité. Si on se réfère à la section précédente, la distribution poreuse du matériau est totalement connue si les paramètres \bar{R}_1 , m_1 et \bar{R}_2 , m_2 (les indices 1 et 2 correspondent respectivement aux classes de pores du gel de C-S-H et de la porosité capillaire) sont identifiés pour chaque classe de pores dans les couche interne et externe, les porosités $\phi_1 = \phi_{GP}$ et $\phi_2 = \phi_{CP}$ étant données par le modèle de Jennings (cf section III.3). Pour identifier ces paramètres la première approche serait d'utiliser des résultats de porosimétrie par intrusion de mercure par exemple, ou des résultats obtenus par une autre technique expérimentale et d'en déduire l'isotherme de sorption par la suite. Nous avons plutôt fait le choix d'identifier ces paramètres directement sur des isothermes de sorption obtenues expérimentalement plutôt que sur des distributions de porosité brutes. La première raison étant que les résultats de porosimétrie ne représentent pas forcément toutes les gammes de pores présentes dans le matériau et qu'il faut par conséquent rester prudent sur l'exploitation de ces résultats. De plus le but ultime de la modélisation du réseau poreux reste pour nous la courbe d'isotherme de sorption qui selon (Baroghel-Bouny 1994) est une véritable carte hygro-structurale du matériau. La première étape dans l'identification des paramètres de la distribution poreuse est d'explicitier la relation

$S_l = f(h_r)$ pour les couches interne et externe, au niveau I de la microstructure schématisée sur la **Figure 3.2**. Rappelons qu'indépendamment des classes de pores explicitées plus haut il existe dans chaque couche deux catégories de pores, celle saturée par l'eau capillaire et la deuxième partiellement saturée par l'eau adsorbée, ces deux classes sont délimitées par le rayon capillaire r_c . Le degré de saturation au niveau I s'obtient par :

$$S_l^j = \frac{\phi_{sat}^j + \phi_{ads}^j}{\phi^j} \quad j \in (\text{int} ; \text{ext}) \quad (3.51)$$

avec :

- ϕ_{sat} la quantité d'eau capillaire rapportée au volume total de vides
- ϕ_{ads} la quantité d'eau adsorbée rapportée au volume total de vides
- ϕ^j la porosité totale dans les couches interne et externe.

Ces deux premières quantités s'obtiennent en moyennant les volumes d'eau dans les pores sur la gamme de pores auxquels ils correspondent et ceci en faisant intervenir l'opérateur de moyenne $\langle X(R) \rangle$ définie précédemment. On a dans le cas de pores sphériques :

$$\phi_{sat}^j = \int_0^{r_c(h_r)} \frac{4\pi}{3} r^3 (\lambda_1^j f_1^j(r) + \lambda_2^j f_2^j(r)) dr \quad (3.52)$$

$$\phi_{ads}^j = \int_{r_c(h_r)}^{\infty} \frac{4\pi}{3} \left(1 - \frac{(r - t(h_r))^3}{r^3} \right) (\lambda_1^j f_1^j(r) + \lambda_2^j f_2^j(r)) dr \quad (3.53)$$

avec $j \in (\text{int}, \text{ext})$. Le degré de saturation au niveau II correspondant à la pâte de ciment est directement obtenu par :

$$S_l^{h\phi} = \frac{\phi^{int} S_l^{int} + \phi^{ext} S_l^{ext}}{\phi^{int} + \phi^{ext}} \quad (3.54)$$

La méthode est appliquée à une pâte de ciment CEM I ($e/c = 0.3$). L'isotherme obtenue est comparée aux résultats expérimentaux d'une isotherme réalisée sur une pâte de ciment au même rapport $e/c = 0.3$ et effectué à $T = 23^\circ\text{C}$ (Drouet 2010). Les deux courbes sont illustrées sur la **Figure 3.13**. On peut remarquer que l'isotherme obtenu par le modèle est très proche des valeurs expérimentales. Les paramètres identifiés \bar{R}_i et m_i pour les deux classes de pores dans les couches internes et externes sont : $\bar{R}_1^{int} = \bar{R}_1^{ext} = 2 \text{ nm}$, $\bar{R}_2^{ext} = 25 \text{ nm}$, $m_1^{int} = m_1^{ext} = 3$ et $m_2^{ext} = 5$. Ces valeurs de rayons sont cohérentes aux rayons de pores dans les matériaux cimentaires si on se réfère par exemple à la classification des tailles de pores proposée par Jennings (**Tableau 1.4**). Dans cette classification les pores du gel LD et HD C-S-H (ici \bar{R}_1^{int} et \bar{R}_1^{ext}), responsables des phénomènes de retrait sont de tailles comprises entre 1 et 10 nm. Les pores capillaires (ici \bar{R}_2^{ext}) eux responsables du retrait et du fluage à haute humidité relative seraient de tailles comprises

entre 10 et 50 nm. On peut donc supposer que les ordres de grandeur des tailles de pores identifiés sont satisfaisants.

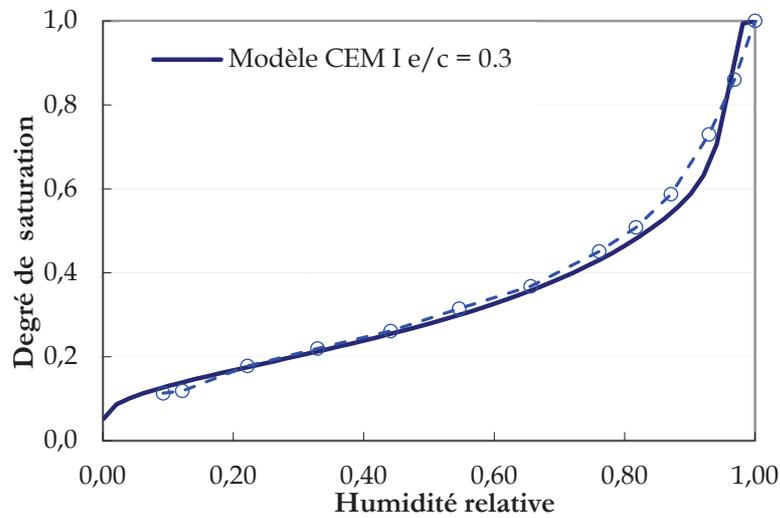


Figure 3.13 : Comparaison de l'isotherme d'adsorption du modèle avec des valeurs expérimentales sur pâte de ciment CEM I $e/c = 0.3$

Les porosités de la couche interne et externe pour la pâte de ciment $e/c = 0.3$ calculées par le modèle de Jennings sont $\phi^{int} = 0.15$ et $\phi^{ext} = 0.43$. La **Figure 3.14** montre simultanément l'évolution du degré de saturation des couches interne et externe qui représentent le niveau I et celle de la pâte de ciment (niveau II).

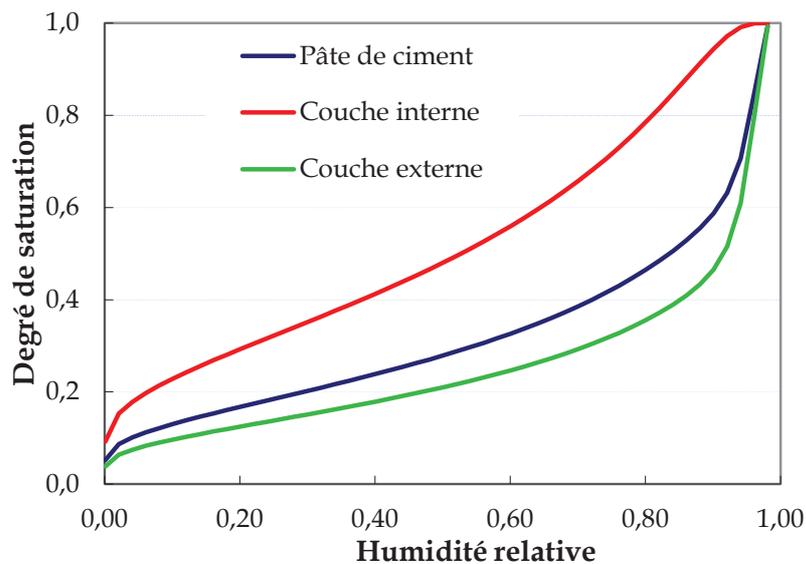


Figure 3.14 : Isothermes d'adsorption dans les couches interne et externe (Niveau I) et dans la pâte de ciment CEM I $e/c = 0.3$ (Niveau II).

A humidité relative donnée le degré de saturation dans la couche interne est supérieur à celui de la couche externe. En effet les plus petits pores (pores du gel C-S-H) sont les premiers à se remplir lorsque l'humidité relative augmente. Les plus gros pores (pores capillaires) qui sont contenus dans la couche externe ne contiennent qu'une fine couche d'eau adsorbée et ne sont remplis que pour des humidités relatives proches de 1. On peut remarquer également que le degré de saturation de la pâte de ciment (équation (3.54)) est évidemment comprise entre les degrés de saturation des couches interne et externe, puisqu'il est calculé comme leur moyenne.

Afin d'évaluer l'effet des paramètres \bar{R}_i et m_i sur la forme des isothermes, nous avons testé plusieurs jeux de paramètres (\bar{R}_i, m_i) (voir Tableau 3.2) avec les mêmes valeurs de porosité des couches interne et externe correspondant au matériau e/c = 0.3 ($\phi^{int} = 0.15$ et $\phi^{ext} = 0.43$). Les résultats sont présentés sur la **Figure 3.15**. On peut voir sur le début des isothermes que les courbes avec $\bar{R}_1^j = 2$ nm (isotherme CEM I e/c = 0.3, isothermes 1, 2 et 3) se distinguent nettement des courbes avec $\bar{R}_1^j = 10$ nm (isothermes 4 et 5). Ces deux dernières sont évidemment en dessous de l'isotherme CEM I e/c = 0.3 en traits discontinus sur la figure, car elles correspondent à des matériaux avec des gros pores capillaires ($\bar{R}_2^{ext} = 80$ et 50 nm). Si on suit ce raisonnement l'isotherme 4 serait donc en dessous de l'isotherme 5. Ce qui n'est pas le cas puisque le réseau poreux est beaucoup plus étalé pour l'isotherme 5 ($m_2^{ext} = 5$) que pour l'isotherme 4 ($m_2^{ext} = 1$). On est capable avec la méthode d'estimation d'isothermes qui a été présentée de représenter les isothermes de plusieurs gammes de matériaux.

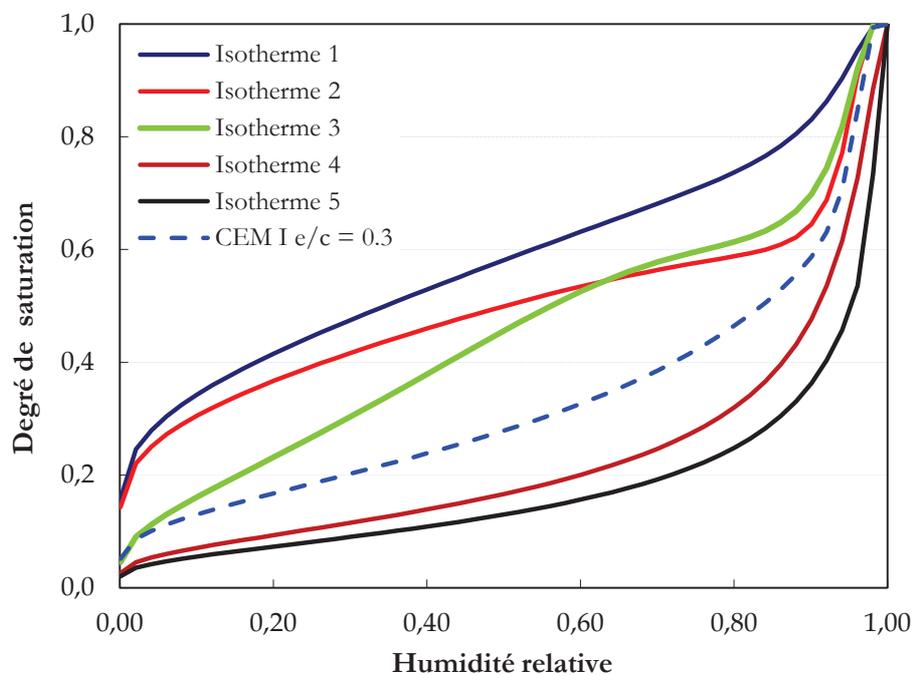


Figure 3.15 : Isothermes d'adsorption de la pâte CEM I=0.3 pour différentes valeurs de m et de R dans les couches interne et externe ($T=20^\circ\text{C}$).

Tableau 3.2 : Paramètres de la distribution poreuse

Matériaux	\bar{R}_1^{int} (nm)	\bar{R}_1^{ext} (nm)	\bar{R}_2^{int} (nm)	\bar{R}_2^{ext} (nm)	m_1^{int}	m_1^{ext}	m_2^{int}	m_2^{ext}
CEM I e/c = 0.3 (référence)	2	2	-	25	3	3	-	5
Matériau 1	2	2	-	25	1	1	-	1
Matériau 2	2	2	-	25	1	1	-	3
Matériau 3	2	2	-	25	3	3	-	1
Matériau 4	10	10	-	80	5	5	-	1
Matériau 5	10	10	-	50	5	5	-	5

Il peut être parfois plus utile dans la modélisation d'obtenir la courbe capillaire plutôt que l'isotherme de sorption. La pression capillaire dans le matériau est reliée à l'humidité relative h_r à travers l'équation de Kelvin. Comme la relation entre le degré de saturation et l'humidité relative que nous venons d'explicitier est connue, la courbe capillaire donnant la pression capillaire en fonction du degré de saturation est directement obtenue. Les courbes capillaires correspondant aux isothermes de la **Figure 3.14** sont illustrées sur la **Figure 3.16**. On y voit l'évolution de la pression capillaire dans le matériau en fonction des degrés de saturation des couches interne, externe et de la pâte de ciment.

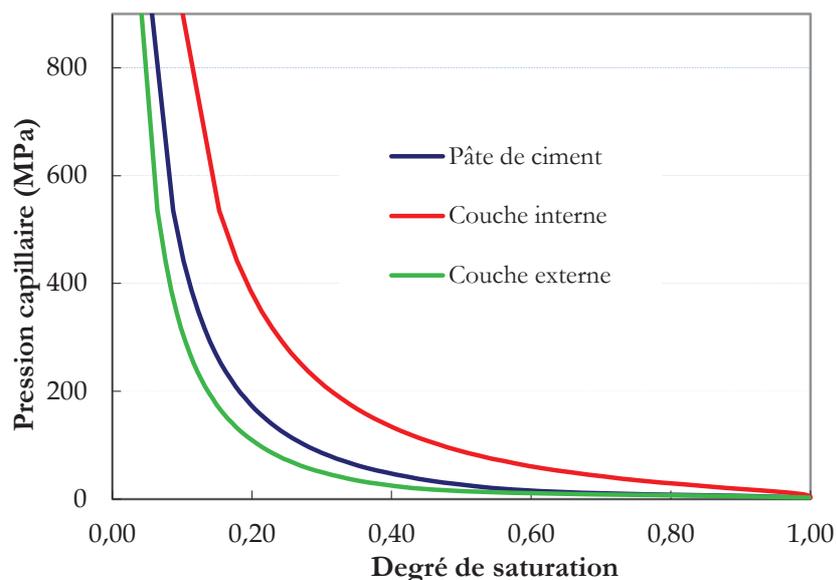


Figure 3.16 : Courbe capillaire dans les couches interne et externe (Niveau I), dans la pâte de ciment (Niveau II).

III.5 Estimation des paramètres mécaniques et hydromécaniques du matériau sain

III.5.1 Formulation générale du problème (Niveau I) : couches interne et externe

La démarche suivie dans cette section est valable à la fois pour la couche interne et la couche externe. Les indices «int» et «ext» seront donc délibérément omis dans la formulation du problème. Il s'agit d'étendre ici les résultats généraux de l'homogénéisation des milieux poreux saturés aux matériaux hétérogènes insaturés au travers d'une approche permettant de rendre compte de l'effet des tensions de surface sur le comportement macroscopique. Le VER (couches interne et externe) considéré apparaît comme un milieu hétérogène poreux occupant le domaine Ω dont la phase solide Ω^s est constituée d'une matrice élastique linéaire, de domaine Ω_m^s et de plusieurs inclusions solides (Ω_j^s) comme sur la **Figure 3.17**. On rappelle que dans la configuration « actuelle » du matériau partiellement saturé, l'espace poreux (Ω^p) est scindé en deux domaines, le premier est celui des pores saturés Ω_{sat}^p , et le second, Ω_{ads}^p celui des pores partiellement saturés contenant un film d'eau adsorbée dont l'épaisseur dépend de l'humidité relative. En résumé on a : $\Omega = \Omega^p \cup \Omega^s$; $\Omega^p = \Omega_{sat}^p \cup \Omega_{ads}^p$; $\Omega^s = \Omega_m^s \bigcup_{j=1}^r \Omega_j^s$, r étant le nombre d'hétérogénéités dans le VER.

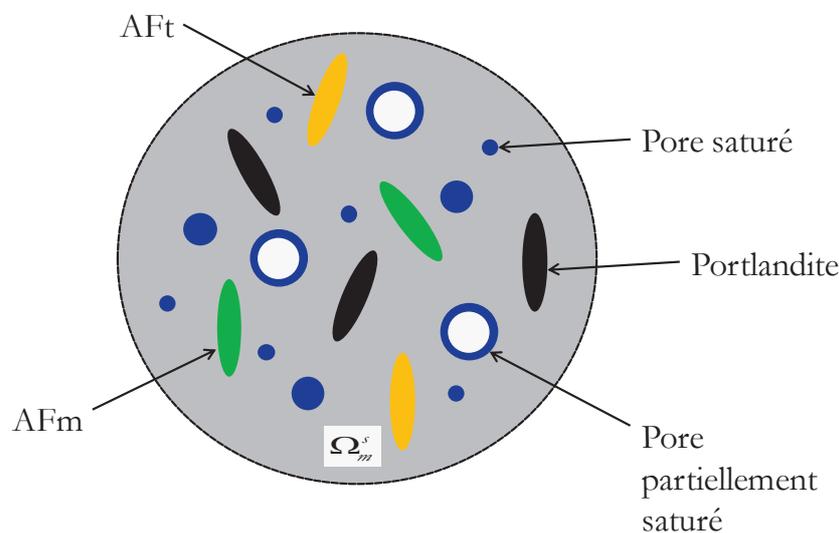


Figure 3.17 : VER, à l'échelle I

- Configuration initiale

L'état initial du matériau correspond au matériau totalement saturé, caractérisé par l'absence de déformation $\boldsymbol{\varepsilon} = 0$ et une contrainte macroscopique nulle $\boldsymbol{\Sigma}_0 = p_0' \mathbf{1} = 0$. Dans cette

configuration initiale, il existe toutefois des contraintes microscopiques $\sigma_0^s(\underline{x})$ équilibrées par les efforts internes dans les interfaces liquide-solide tels que (Dormieux et al. 2006) :

$$\sigma_0^s \underline{n} = \gamma^{sf} (\mathbf{1}_T : \mathbf{b}) \underline{n} \quad (I^{sf}) \quad (3.55)$$

avec I^{sf} la surface de séparation solide/fluide, $\mathbf{1}_T$ l'identité du plan tangent à la surface I^{sf} et $\mathbf{b} = -\nabla \underline{n}$ et \underline{n} désignent respectivement le tenseur de courbure et la normale unitaire extérieure de la surface I^{sf} . L'opérateur de moyenne volumique appliquée à l'équation (3.55) donne :

$$\left\langle \left(\sigma_0^s \chi^s + \gamma^{sf} \mathbf{1}_T \delta I^{sf} \right) : \mathbb{A} \right\rangle = 0 \quad (3.56)$$

avec χ^s la fonction caractéristique de la phase solide.

- Configuration actuelle

Si on considère la configuration initiale comme état de référence il est alors possible d'écrire la loi de comportement mécanique pour l'ensemble du VER. sous la forme unifiée (Dormieux et al. 2006) :

$$\sigma(x) = \mathbb{C}(x) : \varepsilon(x) + \sigma^p(x) \quad (3.57)$$

avec

$$\mathbb{C}(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in (\Omega^p) \\ \mathbb{C}_m^s & \text{si } x \in (\Omega_m^s) \\ \mathbb{C}_j^s & \text{si } x \in (\Omega_j^s) \end{cases} \quad (3.58)$$

où \mathbb{C}_j^s représente le tenseur de rigidité de l'hétérogénéité j .

La contrainte $\sigma^p(x)$ est explicitée dans les différents domaines de Ω par :

$$\sigma^p(x) = \begin{cases} -p_{sat} \mathbf{1} & \text{si } x \in (\Omega_{sat}^p) \\ -p_{ads}(i) \mathbf{1} & \text{si } x \in (\Omega_{ads}^{p(i)}) \\ \sigma_0^s(x) & \text{si } x \in (\Omega^s) \\ \gamma^{sf} \mathbf{1}_T \delta_{I^{sf}} & \text{si } x \in (I^{sf}) \end{cases} \quad (3.59)$$

avec p_{sat} la pression s'exerçant dans les pores du domaine Ω_{sat}^p et $p_{ads}(i)$ la pression qui règne dans le pore i de Ω_{ads}^p , et on a $\Omega_{ads}^p = \bigcup_{i=1}^{np} \Omega_{ads}^{p(i)}$ avec np le nombre de pores de Ω_{ads}^p . En effet la

pression p_{ads} n'est pas identique dans tous les pores. Elle dépend notamment de la taille du pore. En appliquant le théorème de Levin à l'équation(3.57), l'équation d'état à l'échelle macroscopique prend la forme :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}_{hom} : \mathbf{E} + \boldsymbol{\Sigma}^p \quad (3.60)$$

avec \mathbb{C}_{hom} le tenseur de rigidité drainé homogénéisé du VER.

$$\mathbb{C}_{hom} = \left\langle \mathbb{C}(x) : \mathbb{A}(x) \right\rangle_{\Omega} \quad (3.61)$$

et $\boldsymbol{\Sigma}^p$ la « précontrainte » :

$$\boldsymbol{\Sigma}^p = \left\langle \boldsymbol{\sigma}^p(x) : \mathbb{A}(x) \right\rangle_{\Omega} \quad (3.62)$$

En développant $\boldsymbol{\sigma}^p(x)$ on a :

$$\boldsymbol{\Sigma}^p = - \left(\left\langle p_{sat} \mathbf{1} : \mathbb{A} \right\rangle_{\Omega_{sat}^p} + \left\langle p_{sat} \mathbf{1} : \mathbb{A} \right\rangle_{\Omega_{ads}^p} \right) + \left\langle \left(\boldsymbol{\sigma}_0^s \boldsymbol{\chi}^s + \gamma^{sf} \mathbf{1}_T \delta I^{sf} \right) : \mathbb{A} \right\rangle \quad (3.63)$$

Et compte tenu de l'équation (3.56) on obtient :

$$\boldsymbol{\Sigma}^p = - \left(\left\langle p_{sat} \mathbf{1} : \mathbb{A} \right\rangle_{\Omega_{sat}^p} + \left\langle p_{sat} \mathbf{1} : \mathbb{A} \right\rangle_{\Omega_{ads}^p} \right) \quad (3.64)$$

Le problème posé est entièrement déterminé une fois que l'on connaît le tenseur d'élasticité drainé homogénéisé et la contrainte $\boldsymbol{\Sigma}^p$. Dans la prochaine section on s'intéresse donc à la détermination de ces paramètres.

III.5.1.1 Modules d'élasticité drainés (k_{hom}^I, μ_{hom}^I)

Il s'agit ici d'appliquer l'équation (3.61) aux couches interne et externe de la pâte de ciment. On suppose de façon classique (Bernard et al. 2003; Ulm et al. 2004) que les inclusions que forment les hydrates et la porosité sont distribuées de manière aléatoire dans les matrices de LD et HD C-S-H de telle manière que le comportement mécanique macroscopique soit isotrope. Les composantes des tenseurs d'élasticité drainés se réduisent donc aux deux coefficients de compressibilité et de cisaillement (k_{hom}^I, μ_{hom}^I) , $\mathbb{C}_{hom}^I = k_{hom}^I \mathbb{L} + \mu_{hom}^I \mathbb{J}$. On suppose de plus que le tenseur de localisation de la déformation d'une phase j est constant sur le domaine occupé par cette phase $\left\langle \mathbb{A}_j(x) \right\rangle_{\Omega_j} = \mathbb{A}_j$, l'équation (3.61) peut alors se réécrire :

$$\mathbb{C}_{hom}^I = \left(1 - \sum_j f_j \right) \mathbb{C}_m^s : \mathbb{A}_m^s + \sum_j f_j \mathbb{C}_j^s : \mathbb{A}_j \quad (3.65)$$

f_j est la fraction volumique de $j \in (\text{CP}, \text{GP}, \text{AFt}, \text{AFm}, \text{CH})$. Les tenseurs de localisation \mathbb{A}_j et de la matrice solide \mathcal{A}_m^s dans le cas du schéma IDD s'écrivent respectivement (Bary 2011) :

$$\mathbb{A}_j^{IDD} = \mathbb{T}_j^s \left(\mathbb{I} - \sum_k^r f_k \mathbb{T}_k^s (\mathbb{I} - \mathbb{C}_m^s \boldsymbol{\Omega}_{Dk}^s) (\mathbb{C}_m^s)^{-1} (\mathbb{C}_k^s - \mathbb{C}_m^s) \right)^{-1} \quad (3.66)$$

et

$$\mathbb{A}_m^{s,IDD} = \frac{1}{1 - \sum_j f_j} \left(\mathbb{I} - \sum_j f_j \mathbb{A}_j^{IDD} \right) \quad (3.67)$$

\mathbb{T}_j^s est le tenseur de localisation dilué de l'hétérogénéité j , $\mathbb{T}_j^s = (\mathbb{I} - \mathbb{S}_j^{Es})^{-1}$ avec \mathbb{S}_j^{Es} le tenseur d'Eshelby de l'inclusion j dans la matrice solide. Les modules de compressibilité et de cisaillement s'en déduisent (Bary 2011) :

$$\kappa_{\text{hom}}^I = \kappa_m^s \left(1 + \frac{\sum_j f_j T_j^{s,b} \left(1 - \frac{\kappa_j^s}{\kappa_m^s} \right)}{1 - \sum_j f_j \left(\Xi_j^{s,b} - T_j^{s,b} \frac{\kappa_j^s}{\kappa_m^s} \right)} \right)^{-1} ; \quad \mu_{\text{hom}}^I = \mu_m^s \left(1 + \frac{\sum_i f_i T_i^{s,d} \left(1 - \frac{\mu_j^s}{\mu_m^s} \right)}{1 - \sum_j f_j \left(\Xi_j^{s,d} - T_j^{s,d} \frac{\mu_j^s}{\mu_m^s} \right)} \right)^{-1} \quad (3.68)$$

Dans ces équations $T_j^{s,b}$, $\Xi_j^{s,b}$ et $T_j^{s,d}$, $\Xi_j^{s,d}$ représentent respectivement les coefficients hydrostatique et déviatorique des tenseurs isotropes \mathbb{T}_j^s et $\Xi_j^s = \left\{ \mathbb{T}_j^s (\mathbb{T}_{Dj}^s)^{-1} \right\}$. \mathbb{T}_{Dj}^s est le tenseur de localisation dilué de la « cellule » entourant l'inclusion j définie dans le chapitre 2. Le module d'Young et le coefficient de Poisson homogénéisés s'obtiennent classiquement par :

$$E_{\text{hom}}^I = 9 \frac{\kappa_{\text{hom}}^I \mu_{\text{hom}}^I}{3\kappa_{\text{hom}}^I + \mu_{\text{hom}}^I} ; \quad \nu_{\text{hom}}^I = \frac{3\kappa_{\text{hom}}^I - 2\mu_{\text{hom}}^I}{2(3\kappa_{\text{hom}}^I + \mu_{\text{hom}}^I)} \quad (3.69)$$

III.5.1.2 Contrainte $\boldsymbol{\Sigma}^p$

L'idée ici consiste à regarder la contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}^p$, non pas comme un paramètre de chargement caractérisant des conditions aux limites sur le solide Ω^s , mais comme une précontrainte (Chateau et Dormieux 1998), sous la forme $\boldsymbol{\Sigma}^p = b_{\text{hom}}^I p_c \mathbf{1}$. Le tenseur de Biot est donc déterminé par la connaissance de $\boldsymbol{\Sigma}^p$, i.e. de la moyenne des pressions dans les pores (Equation (3.63)). L'originalité de cette approche tient du fait que les tensions de surface sont prises en compte à travers $\boldsymbol{\Sigma}^p$, donc à travers b_{hom}^I , qui relève de la problématique très débattue de la contrainte effective en milieu poro-élastique non saturé (Chateau et Dormieux 1998). Nous nous intéressons à présent à l'estimation de la précontrainte $\boldsymbol{\Sigma}^p$. Comme expliqué

précédemment, à une certaine humidité relative, les pores de taille en dessous d'un rayon r_c sont remplis d'eau de condensation capillaire. La pression s'exerçant dans ces pores n'est autre que la pression capillaire donnée par l'équation de Laplace. Dans les pores partiellement saturés ($r > r_c$) par la couche d'eau adsorbée, la pression équivalente s'exerçant sur les parois solides est significativement modifiée par les tensions de surface. Le film d'eau adsorbé est en équilibre sur la surface solide à une certaine pression dite de disjonction qui est due à la très faible distance séparant les deux interfaces liquide-gaz et solide-liquide. On se base ici sur les travaux de (Rusanov 1975; Rusanov 2005; Rusanov 2007) effectués sur l'équilibre thermodynamique de couches minces de fluides sur des parois adsorbantes pour estimer la pression équivalente qui règne dans ces pores.

Soit un film d'eau adsorbé sur une surface solide. Lorsque l'interface liquide/gaz est plane, la pression de disjonction Π qui est la pression d'équilibre du film d'eau est donnée selon (Derjaguin et al. 1985) par :

$$\Pi \equiv p^\beta - p^\alpha \quad (3.70)$$

avec p^α la pression dans la phase liquide dans les mêmes conditions de température et de potentiel chimique que le film d'eau. p^β est la pression de la phase gazeuse. Lorsque l'interface liquide-gaz est courbe (Figure 3.18), cette équation est corrigée par l'introduction du rayon de courbure local c du ménisque formé :

$$\Pi = p^\beta - p^\alpha + 2\sigma_{gl}c \quad (3.71)$$

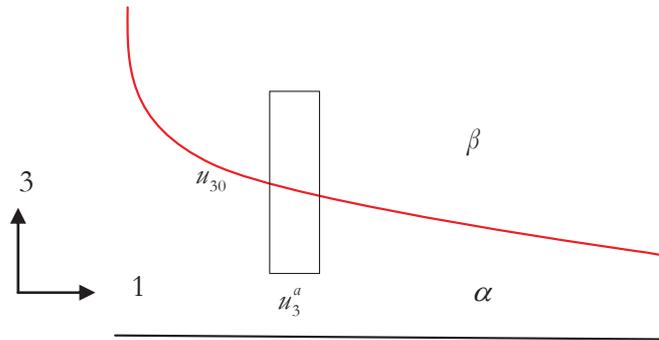


Figure 3.18 : Un volume élémentaire à l'interface liquide-gaz d'après (Rusanov 2005).

De part la forme du film d'eau, le système de coordonnées choisi est le système de coordonnées curvilignes (u_1, u_2, u_3) . Localement, la condition d'équilibre d'un volume élémentaire à l'interface liquide/gaz peut s'écrire (Rusanov 2005) :

$$p^\alpha - p^\beta = \frac{\sigma_{11}}{R_{10}} + \frac{\sigma_{22}}{R_{20}} - \left[p_{33}(u_3^\alpha) - p^\alpha \right] \frac{h_1(u_3^\alpha) h_2(u_3^\alpha)}{h_{10} h_{20}} \quad (3.72)$$

avec σ_{11} et σ_{22} les valeurs principales du tenseur de tension superficielle, R_{10} et R_{20} sont les deux rayons de courbure principaux de l'interface. On désigne par $p_{33}(u_3^\alpha)$ la pression dans la direction 3 (direction verticale sur la Figure 3.18) dans l'élément considéré et par h_i les coefficients de Lamé des coordonnées curvilignes. Dans le cas d'un film sphérique (**Figure 3.19**), on se place en coordonnées sphériques $u_1 = \theta$, $u_2 = \varphi$ et $u_3 = r$ et les coefficients de Lamé de l'interface deviennent $h_1 = r$, $h_2 = r \sin \theta$ et $h_3 = 1$ (Rusanov 2005). Comme dans ce cas $R_{10} = R_{20} = R_0$ et $R_n = R_0 + t$, l'équation (3.72) devient (Bary 2011) :

$$p^\beta - p^\alpha = \frac{2\sigma_{gl}}{R_0} + (p_N^s - p^\alpha) \frac{R_n^2}{R_0^2} \quad (3.73)$$

et où $p_N^s - p^\alpha$ joue le rôle de pression de disjonction, p_N^s étant la pression équivalente exercée sur l'interface solide. Dans la présente configuration $\alpha = l$ et $\beta = g$.

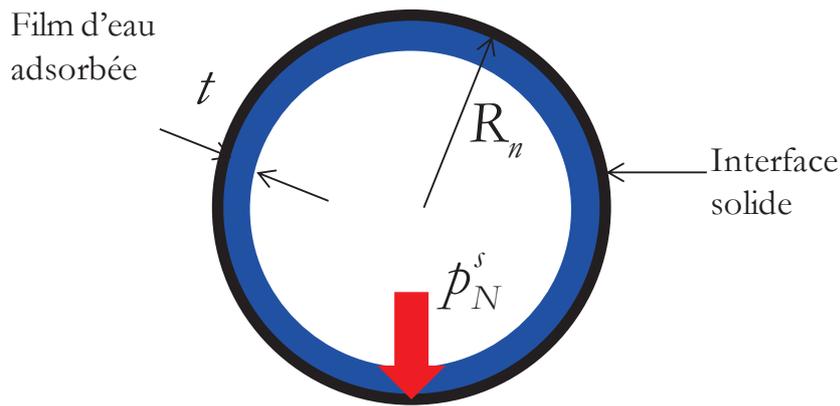


Figure 3.19 : Pression exercée sur l'interface solide dans un pore sphérique.

III.5.1.3 Les expressions de b_{hom}^l , N_{hom}^l et M_{hom}^l

La contrainte macroscopique Σ^p prend en compte les pressions dans les pores saturés et partiellement saturés. On reprend l'équation (3.64) en remplaçant p_{sat} et p_{ads} respectivement par p_c et p_N^s :

$$\Sigma^p = \langle p_c \mathbf{1} : \mathbb{A}(x) \rangle_{\Omega_{sat}} + \langle p_N^s \mathbf{1} : \mathbb{A}(x) \rangle_{\Omega_{ads}} \quad (3.74)$$

On peut réécrire cette dernière équation sous la forme :

$$\Sigma^p = p_c \langle \mathbf{1} : \mathbb{A}(x) \rangle_{\Omega_{sat}} + \langle p_N^s \mathbf{1} : \mathbb{A}(x) \rangle_{\Omega_{ads}} \quad (3.75)$$

La pression équivalente p_N^s dépend du rayon du pore dans lequel elle s'exerce (voir l'équation (3.73)). La contrainte macroscopique moyenne Σ^p dans le matériau est donc une moyenne de la pression capillaire et de la pression équivalente pondérée par la fraction volumique de pores dans lesquels s'exerce cette pression. Lorsque tous les pores ont la même morphologie et que les variations du tenseur de localisation sont négligeables à l'échelle du pore, $\langle \mathbb{A}(x) \rangle_{\Omega^p} = \mathbb{A}^p$ et on a plus précisément :

$$\Sigma^p = \left(\phi_{sat} p_c + \int_{r_c}^{\infty} p_N^s \phi(r) dr \right) \mathbf{1} : \mathbb{A}^p \quad (3.76)$$

En identifiant l'équation (3.76) à $\Sigma^p = b_{hom}^I p^c \mathbf{1}$, on en déduit le coefficient de Biot homogénéisé (Bary, 2011) :

$$b_{hom}^I = \frac{1}{3} \mathbf{1} : \mathbb{A}^p : \mathbf{1} \left(\phi_{sat} + \int_{r_c}^{\infty} \frac{p_N^s}{p_c} \phi(r) dr \right) \quad (3.77)$$

Dans le cas particulier où le matériau est totalement saturé $p_N^s = p_c$, et $\int_{r_c}^{\infty} \frac{p_N^s}{p_c} \phi(r) dr = 0$, on retrouve l'écriture classique du coefficient de Biot du matériau saturé en fonction de la porosité totale du matériau $\phi = \phi_{sat}$ et du tenseur de localisation des pores \mathbb{A}^p :

$$b_{hom,sat}^I = \frac{1}{3} \phi \mathbf{1} : \mathbb{A}^p : \mathbf{1} \quad (3.78)$$

Si on néglige la quantité d'eau adsorbée sur les parois, c'est-à-dire que l'on pose $\phi_{ads} = 0$, on retrouve :

$$b_{hom}^I(S_l) = \frac{1}{3} \phi_{sat} \mathbf{1} : \mathbb{A}^p : \mathbf{1} = b_{hom,sat}^I S_l \quad (3.79)$$

De manière conceptuelle la pression p_N^s peut être envisagée comme une pression équivalente s'exerçant dans le pore comme s'il était saturé d'eau. Ceci permet d'adapter à notre configuration du matériau partiellement saturé les équations de variation de la porosité donnant le module de Biot solide dans le cas d'un matériau saturé. On peut de manière générale écrire cette variation de porosité sous la forme (Dormieux et al. 2006) :

$$\phi - \phi_0 = b \mathbf{1} : \mathbf{E} + \frac{p}{N} \quad (3.80)$$

On s'intéresse à présent au paramètre suivant à déterminer, le module de Biot solide N . Pour cela on va décomposer le problème posé en deux sous problèmes élémentaires P' et P'' comme cela a été fait dans le chapitre 2 (Dormieux et Bourgeois 2002; Ulm et al. 2004; Dormieux et al. 2006; Giraud et al. 2007).

- Le premier problème élémentaire P' correspond à celui posé sur le VER en l'absence de précontrainte, lorsqu'il est soumis à la déformation macroscopique $\mathbf{E} : P'(\mathbf{E}, \boldsymbol{\Sigma}^p = 0)$. La solution de ce problème permet de déterminer le tenseur de rigidité drainé \mathbb{C}_{bom} et le coefficient de Biot, mais aussi la variation du volume poreux qui s'écrit :

$$(\phi - \phi_0)' = \mathbf{1} : \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{\Omega} = \mathbf{1} : \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_{\Omega^p} = \phi_0 \mathbf{1} : \mathbb{A}^p : \mathbf{E} \quad (3.81)$$

- Le second problème P'' est celui qui correspond au cas où le matériau est sollicité seulement par la précontrainte $\boldsymbol{\Sigma}^p : P''(\mathbf{E} = 0, \boldsymbol{\Sigma}^p)$.

$$\mathbf{E} = 0 \Rightarrow \phi_0 \langle \boldsymbol{\varepsilon}'' \rangle_{\Omega^p} + \sum_{j=1}^r f_j \langle \boldsymbol{\varepsilon}'' \rangle_{\Omega_j} = 0 \quad (3.82)$$

En combinant cette dernière équation avec l'équation (3.80) on a :

$$\mathbf{E} = 0; \quad (\phi - \phi_0)'' = \mathbf{1} : \langle \boldsymbol{\varepsilon}'' \rangle_{\Omega^p} = -\mathbf{1} : \sum_{j=1}^r f_j \langle \boldsymbol{\varepsilon}'' \rangle_{\Omega_j} \equiv \frac{p}{N} \quad (3.83)$$

On sait aussi que la contrainte moyenne dans la phase solide peut être reliée à la déformation moyenne par la relation (Ulm et al. 2004) :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon}'' \rangle_{\Omega_j} = (\mathbb{C}_j^s)^{-1} : \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega_j} \quad (3.84)$$

Compte tenu de cette dernière relation on a :

$$\mathbf{E} = 0; \quad (\phi - \phi_0)'' = \mathbf{1} : \langle \boldsymbol{\varepsilon}'' \rangle_{\Omega^p} = -\mathbf{1} : \sum_{j=1}^r f_j (\mathbb{C}_j^s)^{-1} : \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega_j} \quad (3.85)$$

De plus l'opérateur de moyenne volumique appliquée aux contraintes microscopiques dans la phase solide et dans la porosité donne :

$$\langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega^s} + \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega^p} = -bp\mathbf{1} \quad (3.86)$$

On a alors :

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega^s} &= \sum_{j=1}^r f_j : \langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega_j} = -p\mathbf{1}(b - \phi) \\ &= -p\mathbf{1} : \left(\mathbb{I} - \sum_{j=1}^r f_j \langle \mathbb{A} \rangle_{\Omega_j} \right) \end{aligned} \quad (3.87)$$

ce qui permet d'en déduire que :

$$\langle \boldsymbol{\sigma}'' \rangle_{\Omega_j} = p\mathbf{1} : \left(\langle \mathbb{A} \rangle_{\Omega_j} - \mathbb{I} \right) \quad (3.88)$$

En combinant cette expression avec l'équation (3.85) la variation totale de porosité des deux problèmes peut s'écrire :

$$\phi - \phi_0 = \phi_0 \mathbf{1} : \mathbb{A}^p : \mathbf{E} - \mathbf{1} : \sum_{j=1}^r f_j (\mathbb{C}_j)^{-1} : \left(-p \mathbf{1} : \left(\mathbb{I} - \sum_{j=1}^r f_j \langle \mathbb{A} \rangle_{\Omega_j} \right) \right) \quad (3.89)$$

Par identification ($\mathbf{E} = 0$) dans l'équation (3.80) on peut en déduire le module de Biot solide sous la forme (Ulm et al. 2004) :

$$\frac{1}{N_{hom}^I} = \mathbf{1} : \sum_{j=1}^r f_j (\mathbb{C}_j)^{-1} : \left(\mathbf{1} : \left(\mathbb{I} - \langle \mathbb{A} \rangle_{\Omega_j} \right) \right) \quad (3.90)$$

et le module de Biot du milieu poreux sous la forme :

$$\frac{1}{M_{hom}^I} = \frac{1}{N_{hom}^I} + \frac{\phi S_f}{k_f} \quad (3.91)$$

avec k_f le module de compressibilité de l'eau : $k_f = 2.2$ GPa. Cette dernière équation traduit le fait que le matériau partiellement saturé de porosité ϕ se comporte comme un matériau saturé de porosité ϕS_f . Les modules de compressibilité et de cisaillement non drainés s'obtiennent directement par (Dormieux et al. 2006) :

$$\mathbb{C}_{hom}^{I,un} = \mathbb{C}_{hom}^I + M_{hom}^I \left(b_{hom}^I \mathbf{1} \otimes b_{hom}^I \mathbf{1} \right) \Rightarrow \begin{cases} k_{hom}^{I,un} = k_{hom}^I + M_{hom}^I \left(b_{hom}^I \right)^2 \\ \mu_{hom}^{I,un} = \mu_{hom}^I \end{cases} \quad (3.92)$$

III.5.2 Formulation générale du problème (Niveau II) : pâte de ciment

La microstructure ici correspond au modèle à n phases schématisé sur la **Figure 3.20**.

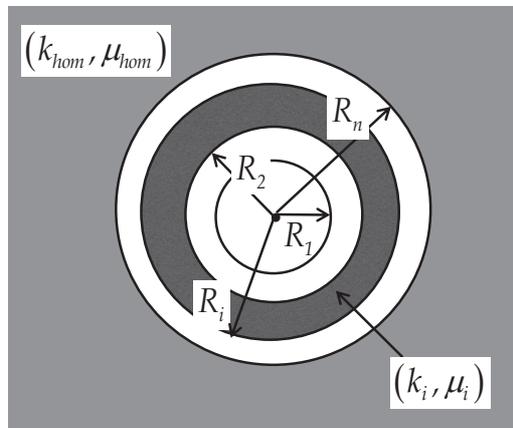


Figure 3.20 : Schéma auto-cohérent généralisé à n phases (Herve et Zaoui 1993).

Chaque phase est caractérisée par ses propriétés élastiques k_i et μ_i et sa fraction volumique

$$f_i = (R_i^3 - R_{i-1}^3) / R_n^3$$

III.5.2.1 Modules d'élasticité drainés ($k_{hom}^{II}, \mu_{hom}^{II}$)

Les paramètres élastiques et poro-élastiques qui viennent d'être obtenus pour les couches interne ($k_{hom}^I = k_{hom}^{int}$ et $\mu_{hom}^I = \mu_{hom}^{int}$) et externe ($k_{hom}^I = k_{hom}^{ext}$ et $\mu_{hom}^I = \mu_{hom}^{ext}$) vont servir à déterminer ceux de la pâte de ciment à l'échelle II. Le schéma auto-cohérent généralisé à 3 phases s'applique classiquement et on a (Herve et Zaoui 1993) :

$$k_{hom}^{II} = k_{hom}^{ext} + \frac{f_{UC} + f^{int}}{1 / (k^* - k_{hom}^{ext}) + 3 f^{ext} / (3 k_{hom}^{ext} + 4 \mu_{hom}^{ext})} \quad (3.93)$$

avec

$$k^* = k_{hom}^{int} + \frac{f_{UC} / (f_{UC} + f^{int})}{1 / (k_{UC} - k_{hom}^{int}) + 3 f^{int} (f_{UC} + f^{int}) / (3 k_{hom}^{int} + 4 \mu_{hom}^{int})} \quad (3.94)$$

k^* n'est rien d'autre que le module de compressibilité de l'ensemble formé par les $n-1$ sphères concentriques.

Le module de cisaillement est donné par la solution positive unique de l'équation de second degré suivante :

$$A(\mu_{hom}^{II})^2 + B\mu_{hom}^{II} + C = 0 \quad (3.95)$$

où A , B et C s'écrivent en fonction des caractéristiques élastiques des phases par les relations rappelées en annexe A1. Le module Young et le coefficient de Poisson s'obtiennent classiquement comme précédemment par :

$$E_{hom}^{II} = 9 \frac{k_{hom}^{II} \mu_{hom}^{II}}{3k_{hom}^{II} + \mu_{hom}^{II}} \quad ; \quad \nu_{hom}^{II} = \frac{3k_{hom}^{II} - 2\mu_{hom}^{II}}{2(3k_{hom}^{II} + \mu_{hom}^{II})} \quad (3.96)$$

III.5.2.2 Expressions de b_{hom}^{II} , N_{hom}^{II} et M_{hom}^{II}

(Bary et Béjaoui 2006) ont déterminé pour un matériau à $(n+1)$ sphères concentriques la solution exacte du coefficient de Biot effectif en fonction des fractions volumiques, des paramètres élastiques et du coefficient de Biot de chacune des différentes phases. Les auteurs considèrent le cas où les phases sont supposées isotropes, élastiques linéaires, avec une porosité soumise à une pression uniforme p^* . Les modules de compressibilité et de cisaillement de chacune des phases

sont notés k_i et μ_i , et le coefficient de Biot b_i . Localement, la loi de comportement de la phase i s'écrit :

$$\boldsymbol{\Sigma}_i = 2\mu_i \mathbf{e}_i + k_i (\mathbf{E}_i : \mathbf{1}) : \mathbf{1} - b_i p^* \mathbf{1} \quad (3.97)$$

avec $\boldsymbol{\Sigma}_i$, \mathbf{E}_i respectivement les tenseurs de contrainte et de déformation de la phase i , \mathbf{e}_i étant la partie déviatorique de \mathbf{E}_i . On considère tout d'abord le cas particulier du matériau composite biphasé ($n+1$, $n=1$) qu'on généralisera par la suite.

Le problème posé sur le VER est décomposé en deux sous problèmes élémentaires $(\mathbf{E}, p^* = 0) \equiv P'$ et $(\mathbf{E} = 0, p^*) \equiv P''$. Le premier problème correspond à un chargement purement mécanique et permet d'obtenir explicitement le module de compressibilité \bar{k}_2 qui correspond à la borne de l'assemblage des sphères d'Hashin et qu'on rappelle ici :

$$\bar{k}_2 = k_2 + \frac{(3k_2 + 4\mu_2)(k_1 - k_2)f_1}{4\mu_2 + 3k_1f_2 + 3k_2f_1} \quad (3.98)$$

Compte tenu de la symétrie du second problème P'' , le déplacement résultant du chargement peut s'écrire dans le système de coordonnées sphériques en fonction du rayon r par :

$$u_i = \left(c_i r + \frac{d_i}{r^2} \right) r \quad ; \quad u_\theta = 0 \quad ; \quad u_\varphi = 0 \quad (3.99)$$

c_i et d_i sont des paramètres qui sont déterminés à partir des conditions de continuité à l'interface entre les phases 1 et 2 (conditions d'interface parfaite), ces conditions s'écrivent en déplacement et en contraintes (Bary et Béjaoui 2006) :

$$\begin{aligned} u_1(0) = \zeta \quad ; \quad u_1(R_1) = u_2(R_2) \\ \boldsymbol{\Sigma}_1(R_1) \underline{r} = \boldsymbol{\Sigma}_2(R_2) \underline{r} \quad ; \quad u_2(R_2) = 0 \end{aligned} \quad (3.100)$$

De même la continuité du vecteur contrainte à travers l'interface entre la phase 2 et le milieu effectif permet d'obtenir :

$$\boldsymbol{\Sigma}_2(R_2) = \boldsymbol{\Sigma}(R_2) = -\bar{b}_2 p^* \underline{r} \quad (3.101)$$

avec \bar{b}_2 le coefficient de Biot effectif de l'assemblage. De la résolution de l'équation (3.99) avec les conditions aux limites de (3.100), on trouve l'expression de \bar{b}_2 sous la forme (Bary et Béjaoui 2006) :

$$\bar{b}_2 = b_2 + \frac{(3k_2 + 4\mu_2)(b_1 - b_2)f_1}{4\mu_2 + 3k_1f_2 + 3k_2f_1} \quad (3.102)$$

Soulignons que les seuls paramètres de la phase 1 qui interviennent dans l'expression du coefficient de Biot effectif sont le module de compressibilité et le coefficient de Biot (le

coefficient de cisaillement n'apparaît pas). Dans le cas plus général du composite à $n+1$ sphères concentriques, les n premières sphères sont considérées comme une phase unique caractérisée par le module de compressibilité \bar{k}_n et le coefficient de Biot \bar{b}_n . La combinaison des équations (3.98) et (3.102) peut dans ce cas être généralisée sous la forme (Bary et Béjaoui 2006) :

$$\bar{b}_{n+1} = b_{n+1} + \frac{(3\bar{k}_{n+1} + 4\mu_{n+1})(\bar{b}_n - b_{n+1})(1 - \xi_{n+1})}{4\mu_{n+1} + 3\bar{k}_n \xi_{n+1} + 3\bar{k}_{n+1}(1 - \xi_{n+1})} \quad (3.103)$$

avec $\xi_{m+1} = f_{m+1} \left(\sum_{j=1}^{m+1} f_j \right)^{-1}$.

On propose maintenant d'appliquer cette relation au cas de la pâte de ciment. Le grain de ciment anhydre est supposé non poreux, et son coefficient de Biot est pris égal à 0, $b_1 = 0$. Le coefficient de Biot de la pâte de ciment s'écrit donc (Bary et Béjaoui 2006) :

$$b_{bom}^{II} = b_{bom}^{ext} + \frac{(3k_{bom}^{ext} + 4\mu_{bom}^{ext})(1 - f^{ext}) \left[(b_{bom}^{int} - b_{bom}^{ext}) (4\mu_{bom}^{int} (1 - f^{ext}) + 3\tilde{k}_{12}) - f_{UC} (b_{bom}^{int} - 1) (3k_{bom}^{int} + 4\mu_{bom}^{int}) \right]}{9k_{UC} k_{bom}^{int} f^{ext} (1 - f^{ext}) + 12\mu_{bom}^2 \hat{k}_{12} f^{ext} + (4\mu_{bom}^{ext} + 3k_{bom}^{ext} (1 - f^{ext})) (4\mu_{bom}^{int} (1 - f^{ext}) + 3\tilde{k}_{12})} \quad (3.104)$$

avec $\tilde{k}_{12} = k_{bom}^{int} f_{UC} + k_{UC} f^{int}$ et $\hat{k}_{12} = k_{UC} f_{UC} + k_{bom}^{int} f^{int}$.

Cette expression en plus d'être analytique présente l'avantage de faire apparaître les coefficients de Biot des couches interne et externe, ce qui permet d'intégrer explicitement la spécificité du modèle concernant la couche d'eau adsorbée à l'échelle de la pâte de ciment. Pour déterminer le module de Biot solide on peut choisir de suivre le même raisonnement que pour le coefficient de Biot (voir par exemple (NGuyen 2010)), en estimant la variation de la porosité des sphères concentriques, aboutir au module de Biot solide N_{bom}^{II} et en déduire le module de Biot du milieu poreux M_{bom}^{II} . Une alternative qui nous a paru plus simple et plus efficace est de faire appel aux modules de compressibilité non drainés des couches interne et externe en posant (cf équation 3.92) :

$$M_{bcp} = \frac{k_{bom}^{II,un} - k_{bom}^{II}}{(b_{bom}^{II})^2} \quad (3.105)$$

avec $k_{bom}^{II,un}$ le module de compressibilité non drainé de la pâte de ciment obtenu en remplaçant dans l'équation (3.93) les expressions de k_{bom}^{int} et k_{bom}^{ext} respectivement par celles de $k_{bom}^{int,un}$ et $k_{bom}^{ext,un}$

soit :

$$k_{bom}^{II,un} = k_{bom}^{ext,un} + \frac{f_{UC} + f^{int}}{1 / (k^* - k_{bom}^{ext,un}) + 3f^{ext} / (3k_{bom}^{ext,un} + 4\mu_{bom}^{ext})} \quad (3.106)$$

avec

$$k^* = k_{bom}^{int,un} + \frac{f_{UC} / (f_{UC} + f^{int})}{1 / (k_{UC} - k_{bom}^{int,un}) + 3f^{int} / (f_{UC} + f^{int}) / (3k_{bom}^{int,un} + 4\mu_{bom}^{int})} \quad (3.107)$$

Le module de Biot est ainsi obtenu en remplaçant ces dernières expressions dans l'équation (3.105).

III.5.3 Formulation générale du problème (Niveau III) : mortier, béton

A cette échelle on se retrouve dans la même configuration qu'à l'échelle précédente (confère **Figure 3.20**). Les équations obtenues précédemment restent valables en remplaçant respectivement les valeurs relatives au grain de ciment anhydre, à la couche interne et à la couche externe par celles du granulat, de l'ITZ et de la pâte de ciment saine. On rappelle que l'auréole de transition est une matrice de LD C-S-H dans laquelle sont plongées la portlandite, l'AFt, l'AFm et la porosité capillaire. Les expressions sont données ici sans démonstration poussée (confère les échelles précédentes).

III.5.3.1 Modules d'élasticité drainés (k_{bom}^{III} , μ_{bom}^{III})

On commence par calculer les modules de compressibilité et de cisaillement de l'ITZ (cf équation 3.68) :

$$k_{bom}^{ITZ} = k_{LD\ CSH} \left(1 + \frac{\sum_j f_j^{ITZ} T_j^{s,b} \left(1 - \frac{k_j^s}{k_{LD\ CSH}} \right)}{1 - \sum_j f_j^{ITZ} \left(\Xi_j^{s,b} - T_j^{s,b} \frac{k_j^s}{k_{LD\ CSH}} \right)} \right)^{-1} ; \quad \mu_{bom}^{ITZ} = \mu_{LD\ CSH} \left(1 + \frac{\sum_i f_j^{ITZ} T_j^{s,d} \left(1 - \frac{\mu_j^s}{\mu_{LD\ CSH}} \right)}{1 - \sum_j f_j^{ITZ} \left(\Xi_j^{s,b} - T_j^{s,d} \frac{\mu_j^s}{\mu_{LD\ CSH}} \right)} \right)^{-1} \quad (3.108)$$

avec $j \in (\text{CP, GP, AFt, AFm, CH})$. f_j^{ITZ} est la fraction volumique de l'hydrate j dans l'ITZ. Le module d'Young et le coefficient de Poisson s'en déduisent par :

$$E_{bom}^{ITZ} = 9 \frac{k_{bom}^{ITZ} \mu_{bom}^{ITZ}}{3k_{bom}^{ITZ} + \mu_{bom}^{ITZ}} ; \quad \nu_{bom}^{ITZ} = \frac{3k_{bom}^{ITZ} - 2\mu_{bom}^{ITZ}}{2(3k_{bom}^{ITZ} + \mu_{bom}^{ITZ})} \quad (3.109)$$

A partir de ces expressions on peut ensuite déterminer k_{bom}^{III} , μ_{bom}^{III} et E_{bom}^{III} , ν_{bom}^{III} (cf équations 3.93 et 3.94) :

$$k_{bom}^{III} = k_{bom}^{II} + \frac{f_g + f_{ITZ}}{1 / (k^* - k_{bom}^{II}) + 3f_{bcP} / (3k_{bom}^{II} + 4\mu_{bom}^{II})} \quad (3.110)$$

avec

$$k^* = k_{bom}^{ITZ} + \frac{f_g / (f_g + f_{ITZ})}{1 / (k_g - k_{bom}^{int}) + 3f_{ITZ} (f_g + f_{ITZ}) / (3k_{bom}^{ITZ} + 4\mu_{bom}^{ITZ})} \quad (3.111)$$

$$E_{bom}^{III} = 9 \frac{k_{bom}^{III} \mu_{bom}^{III}}{3k_{bom}^{III} + \mu_{bom}^{III}} ; \quad \nu_{bom}^{III} = \frac{3k_{bom}^{III} - 2\mu_{bom}^{III}}{2(3k_{bom}^{III} + \mu_{bom}^{III})} \quad (3.112)$$

III.5.3.2 Expressions de b_{bom}^{III} , N_{bom}^{III} et M_{bom}^{III}

Les équations sont de la même forme qu'à l'échelle II (équations 3.104 et 3.105). Le coefficient de Biot du mortier/béton dépend du coefficient de Biot de l'ITZ b_{bom}^{ITZ} et celle de la pâte de ciment b_{bom}^{II} ainsi que de leurs paramètres élastiques, soit :

$$b_{bom}^{III} = b_{bom}^{II} + \frac{(3k_{bom}^{II} + 4\mu_{bom}^{II})(1 - f_{bc\phi}) \left[(b_{bom}^{ITZ} - b_{bom}^{II})(4\mu_{bom}^{ITZ}(1 - f_{bc\phi}) + 3\tilde{k}_{12}) - f_g (b_{bom}^{ITZ} - 1)(3k_{bom}^{ITZ} + 4\mu_{bom}^{ITZ}) \right]}{9k_g k_{bom}^{ITZ} f_{bc\phi} (1 - f_{bc\phi}) + 12\mu_{bom}^2 \hat{k}_{12} f_{bc\phi} + (4\mu_{bom}^{II} + 3k_{bom}^{II}(1 - f_{bc\phi}))(4\mu_{bom}^{ITZ}(1 - f_{bc\phi}) + 3\tilde{k}_{12})} \quad (3.113)$$

avec $\tilde{k}_{12} = k_{bom}^{ITZ} f_g + k_g f_{ITZ}$ et $\hat{k}_{12} = k_g f_g + k_{bom}^{ITZ} f_{ITZ}$.

De la même manière le module de Biot du mortier/béton s'obtient par (cf équation 3.105) :

$$M_{bom}^{III} = \frac{k_{bom}^{III,sm} - k_{bom}^{III}}{(b_{bom}^{III})^2} \quad (3.114)$$

III.6 Applications et validations du modèle : conditions saturées

III.6.1 Matériaux étudiés

Les applications qui vont suivre concernent une pâte de ciment ordinaire CO, CEM I $e/c = 0.34$ (Baroghel-Bouny et al. 1999), un mortier, CEM II MO $e/c = 0.5$ (Rougelot et al. 2009) et un béton CEM I BO $e/c = 0.48$ (Baroghel-Bouny et al. 1999). Nous avons souhaité travailler sur des matériaux dont les formulations sont représentatives des matériaux couramment utilisés (ciment Portland, rapport e/c , granulats). De plus ces matériaux ont fait l'objet d'une vaste campagne expérimentale (module d'Young, isothermes de sorption, déformations de séchage etc...), ce qui nous a naturellement conduits à les choisir. La composition minéralogique du ciment utilisé et la formulation des matériaux impactent directement les fractions volumiques d'hydrates à considérer : nous nous proposons de rappeler ici ces caractéristiques pour les matériaux étudiés.

Composition minéralogique du ciment pour le CO et BO

Le ciment utilisé pour la fabrication du CO et du BO est de type Portland CEM I. Il s'agit d'un ciment riche en C_3S (57.28%). Sa composition minéralogique est présentée dans le Tableau 3.3 (Baroghel-Bouny et al 1996).

Composition minéralogique pour le mortier MO

Le ciment utilisé dans la fabrication du mortier MO est un ciment de type Portland CEM II 32.5 R. Sa composition minéralogique est donnée dans le Tableau 3.4. Il s'agit d'un ciment composé.

Tableau 3.3 : Composition minéralogique du ciment pour le CO et le BO.

Composition chimique	Formule	% massique	Composition minéralogique (d'après la formule de Bogue)	% massique
Silice soluble	SiO_2	23.44	C_3S	57.28
Alumine	Al_2O_3	2.74	C_2S	23.98
Oxyde de titane	TiO_2	0.15	C_3A	3.03
Oxyde ferrique	Fe_2O_3	2.50	C_4AF	7.59
Oxyde de calcium	CaO	66.20	$CaCO_3$	1.84
Oxyde de magnésium	MgO	0.80	Gypse	4.39
Oxyde de sodium	Na_2O	0.43	CaO	0.53
Oxyde de potassium	K_2O	0.43	Na_2O eq.	0.48
Anhydride sulfurique	SO_3	2.04		
Chlore des chlorures		traces		
Soufre des sulfures		0.00		
Perte au feu		1.11		
Oxyde de manganèse	MnO	0.03		

III.6.2 Résultats relatifs à la pâte de ciment CO

Les fractions volumiques d'hydrates présents dans la pâte de ciment CO sont calculées avec le modèle de Jennings et sont regroupées dans le Tableau 3.5. Ces fractions volumiques correspondent à un degré d'hydratation final de 76.8% obtenu par l'équation (1.1).

Tableau 3.4 : Composition minéralogique du ciment pour le MO

Composition chimique	Formule	% massique	Composition minéralogique (d'après la formule de Bogue)	% massique
Silice soluble	SiO ₂	15.90	C ₃ S	45.22
Alumine	Al ₂ O ₃	3.90	C ₂ S	11.47
Oxyde de titane	TiO ₂	-	C ₃ A	6.70
Oxyde ferrique	Fe ₂ O ₃	2.15	C ₄ AF	6.49
Oxyde de calcium	CaO	62.00	Gypse	
Oxyde de magnésium	MgO	0.80		
Oxyde de sodium	Na ₂ O	0.14		
Oxyde de potassium	K ₂ O	0.80		
Anhydride sulfurique	SO ₃	2.65		
Chlore des chlorures		-		
Soufre des sulfures		-		
Perte au feu		11.05		
Oxyde de manganèse	MnO	-		

Tableau 3.5 : Fractions volumiques d'hydrates dans le CO.

e/c	Degré d'hydratation	Porosité capillaire (CP)	LD C-S-H	HD C-S-H	CH	AFt- AFm- C ₄ AH ₁₃	(UC)
0.34	0.768	0.204	0.169	0.289	0.124	0.152	0.0684

Le ratio η introduit à la section III.3.1 est égale à : $\eta = 0.289 / (0.289 + 0.169) = 0.643$. Sur la base de ce ratio les fractions volumiques des hydrates sont distribuées dans les couches interne et externe conformément à la démarche qui a été présentée dans cette même section. Par exemple la fraction volumique de la portlandite est 0.124. La fraction de cette valeur qui sera attribuée à la couche interne est $0.124 * 0.643 = 0.079$ et celle qui sera attribuée à la couche externe est $0.124(1 - 0.643) = 0.044$. On fait de même pour l'AFt et l'AFm, on trouve pour leurs fractions dans la couche interne respectivement 0.061 et 0.035. La fraction volumique totale de la couche interne

est donc $0.289+0.079+0.061+0.035 = 0.464$. On en déduit la fraction volumique de la portlandite dans la couche interne soit $0.079/0.464 = 0.171$. Les fractions volumiques obtenues pour les autres hydrates dans les couches interne et externe sont regroupées dans le Tableau 3.6. La porosité totale à l'eau obtenue expérimentalement par (Baroghel-Bouny et al. 1999) est de 0.30. Celle que nous avons obtenue avec le modèle est de 0.33. Cette valeur peut être considérée comme acceptable.

Tableau 3.6 : Fractions volumiques d'hydrates dans les couches interne et externe

Couches	C-S-Hint	C-S-Hext	GP	AFm	CP	CH	AFt
Couche interne	0.470	-	0.148	0.076	-	0.171	0.132
Couche externe	-	0.217	0.127	0.042	0.44	0.095	0.074

Les propriétés (module d'Young, coefficient de Poisson, coefficient et module de Biot) déterminées pour les couches interne et externe et à l'échelle supérieure pour la pâte de ciment CO découlent des applications des équations présentées précédemment à chaque niveau de la microstructure et sont regroupées dans le Tableau 3.7. On y retrouve également les valeurs expérimentales correspondantes. Il faut noter que les valeurs expérimentales du coefficient et du module de Biot ne sont pas fournies dans (Baroghel-Bouny et al. 1999). Pour pallier ce manque nous les avons identifiées à l'aide de la déformation macroscopique de séchage ϵ^{exp} qui a été mesurée.

Tableau 3.7 : Comparaison des propriétés déterminées analytiquement avec les valeurs expérimentales

Propriétés	Module d'Young (GPa)		Coefficient de Poisson		Porosité		Coefficient de Biot		Module de Biot (GPa)	
	Modèle	Exp	Modèle	Exp	Modèle	Exp	Modèle	Exp	Modèle	Exp
Couche interne	31.15	-	0.259	-	0.148	-	0.268	-	13.68	-
Couche externe	12.06	-	0.240	-	0.569	-	0.734	-	3.57	-
Pâte de ciment	20.49	17	0.251	0.25	0.30	0.33	0.571	0.568	6.06	-

Le module d'Young de la couche interne obtenu est de 31.15 GPa alors que celui de la couche externe est de 12.06 GPa. Cette différence s'explique par le fait que la couche interne est beaucoup plus dense que la couche externe. On rappelle que toute la porosité capillaire est incluse dans la couche externe. Cela se ressent également dans l'analyse des paramètres hydro-mécaniques, en l'occurrence le coefficient de Biot qui est de 0.734 pour la couche externe et qui correspond à environ trois fois celui de la couche interne. La porosité dans la couche interne est de 0.148 et celle dans la couche externe de 0.569. A l'échelle de la pâte de ciment le modèle surestime le module d'Young. On peut par exemple tenter d'expliquer cette surestimation par le fait que l'on a considéré des formes sphériques pour les inclusions. On a rappelé que la morphologie exacte des hydrates et de la porosité n'est pas totalement connue dans la littérature mais n'est en aucun cas sphérique. Les observations au MEB ne permettent pas non plus de se faire une idée exacte sur la forme des inclusions. On sait néanmoins que l'ettringite par exemple se retrouve préférentiellement sous forme d'aiguilles et la portlandite sous forme de plaquettes. De nombreuses études ont mis en évidence l'influence de ces formes sur les paramètres mécaniques des matériaux avec une microstructure de type matrice-inclusions (Stora et al. 2006; Sanahuja et al. 2007). Afin d'investiguer à notre tour l'influence de la forme des inclusions sur notre modèle (notamment sur les paramètres hydromécaniques), nous avons suggéré par exemple de remplacer les inclusions identifiées sous forme de plaquette par des ellipsoïdes aplatis (forme oblate) et les inclusions identifiées sous forme de cylindre allongés (forme prolate) par des ellipsoïdes allongés. Le choix des ellipsoïdes peut sembler restrictif mais il facilite la mise en œuvre des schémas analytiques d'homogénéisation et permet donc d'avoir des coûts de calcul très faibles.

III.6.3. Influence de la forme des inclusions sur la pâte CO

On se propose ici d'étudier l'influence de la forme des inclusions sur la réponse du modèle. On souhaite évaluer à quel point l'hypothèse initiale qui consiste à modéliser les inclusions (hydrates + porosité) par des sphères affecte les résultats du modèle. Une étude similaire a été conduite par (Stora 2007) sur les paramètres mécaniques d'une pâte de ciment. Il s'agit d'une microstructure de type matrice/inclusions, le C-S-H jouant le rôle de matrice et les grains de ciment anhydre, les autres hydrates et la porosité jouent eux le rôle d'inclusions. Sur la base des résultats obtenus nous proposons d'investiguer l'influence de la forme des inclusions supposées ellipsoïdales non seulement sur les paramètres mécaniques mais aussi sur les paramètres hydromécaniques (coefficient et module de Biot aussi bien à l'échelle des couches interne et externe qu'à celle de la pâte de ciment).

III.6.3.1 Paramètre morphologique

Afin de quantifier de façon appropriée l'influence de la forme des inclusions, indépendamment de leur taille, (Stora et al. 2006; Stora 2007) proposent d'analyser une inclusion j ellipsoïdale en considérant son volume V_j et sa surface S_j tel que :

$$\frac{V_j}{S_j} = f\left(\frac{b}{a}\right) a \quad (3.115)$$

$b/a = \alpha$ étant le rapport d'aspect de l'inclusion. On définit ensuite le paramètre morphologique ζ en posant (Stora et al. 2006) :

$$\zeta = \frac{V_j}{S_j} \frac{1}{R_{eq}} \quad (3.116)$$

avec R_{eq} le rayon de la sphère équivalente ayant le même volume que l'inclusion considérée. Dans les cas particuliers d'une inclusion sphérique par exemple, il vient $\zeta = 1$, dans le cas d'un disque ($\alpha \rightarrow 0$) ou encore d'une aiguille ($\alpha \rightarrow \infty$), on a $\zeta = 0$. Ce paramètre morphologique présente l'avantage de varier entre 0 et 1. Moins la forme de l'inclusion est proche d'une sphère, plus le paramètre morphologique tend vers 0. Pour ce cas d'études, le paramètre le plus utilisé dans la littérature reste le rapport d'aspect α (Deudé et al. 2002; Dormieux et al. 2006). Mais pour des raisons pratiques nous avons préféré utiliser comme dans (Stora et al. 2006) le paramètre morphologique ζ car cela nous permet d'analyser simultanément sur une même courbe, l'influence des formes prolates et oblates sur un paramètre donné. La relation qui existe entre le classique rapport d'aspect α et le paramètre morphologique ζ dans les deux cas (formes prolate et oblate) est illustrée sur les **Figure 3.21** et **Figure 3.22**.

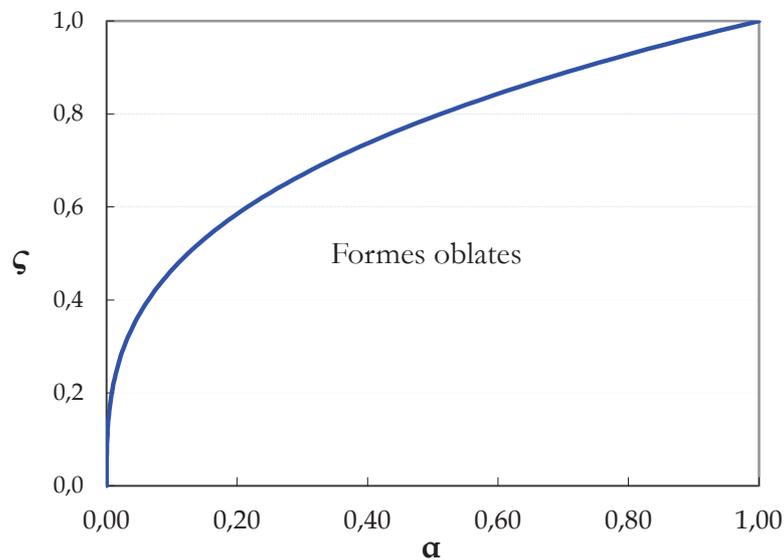


Figure 3.21 : Evolution du paramètre morphologique ζ en fonction du rapport d'aspect α dans le cas d'une forme oblate.

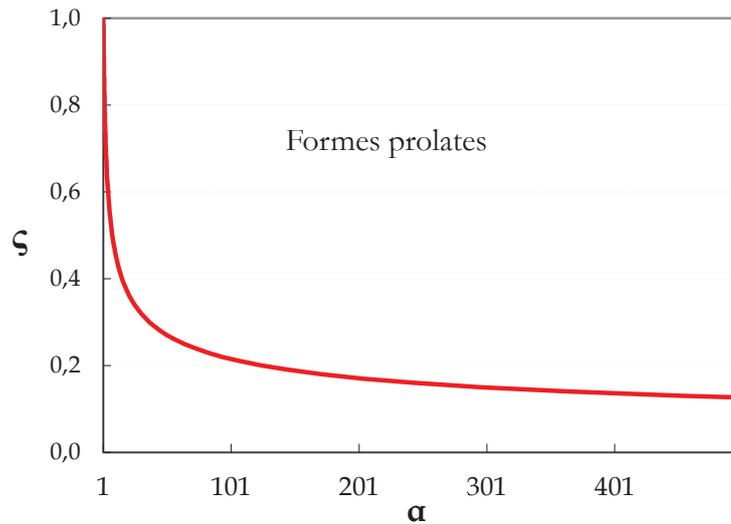


Figure 3.22 : Evolution du paramètre morphologique ζ en fonction du rapport d'aspect α dans le cas d'une forme prolate.

III.6.3.2 Calibration de la forme des hydrates

On procède ici à une étude paramétrique des effets de la forme de toutes les inclusions sur les paramètres mécaniques et hydromécaniques. Il s'agit dans un premier temps de la portlandite, de l'ettringite et de l'AFm à l'échelle des couches interne et externe puis à l'échelle supérieure de la pâte de ciment. Les formes de la portlandite et de l'AFm qui sont décrites dans la littérature sous formes de plaquettes hexagonales ou prismatiques vont être assimilées à des formes oblates tandis que celle de l'ettringite décrite sous forme d'aiguille va être assimilée à une forme prolate. Il faut souligner que c'est une hypothèse forte puisqu'il y'a très peu de chance que toutes les inclusions (de portlandite par exemple) aient la même forme.

On commence par faire varier dans les couches interne et externe le paramètre morphologique de la portlandite, et ceci en gardant constants et égaux à 1 (les autres inclusions sont considérées sphériques) ceux des autres hydrates en suivant les évolutions du module d'Young, du coefficient de Biot et du Module de Biot de la couche en question. On remonte par la suite naturellement à l'échelle de la pâte de ciment. On poursuit l'opération pour l'ettringite et l'AFm. On montre sur la **Figure 3.23** l'évolution du rapport entre le module d'Young E et le module d'Young correspondant à des inclusions considérées toutes sphériques que l'on note E_{sph} . On peut aisément remarquer que la forme des hydrates ne modifie pratiquement pas le résultat obtenu lorsque toutes les inclusions sont considérées sphériques puisque le rapport varie entre 0.997 et 1.004, et ceci aussi bien pour les couches interne et externe que pour la pâte de ciment. On peut noter que globalement les formes oblates aussi bien que les formes prolates tendent à augmenter les effets des inclusions.

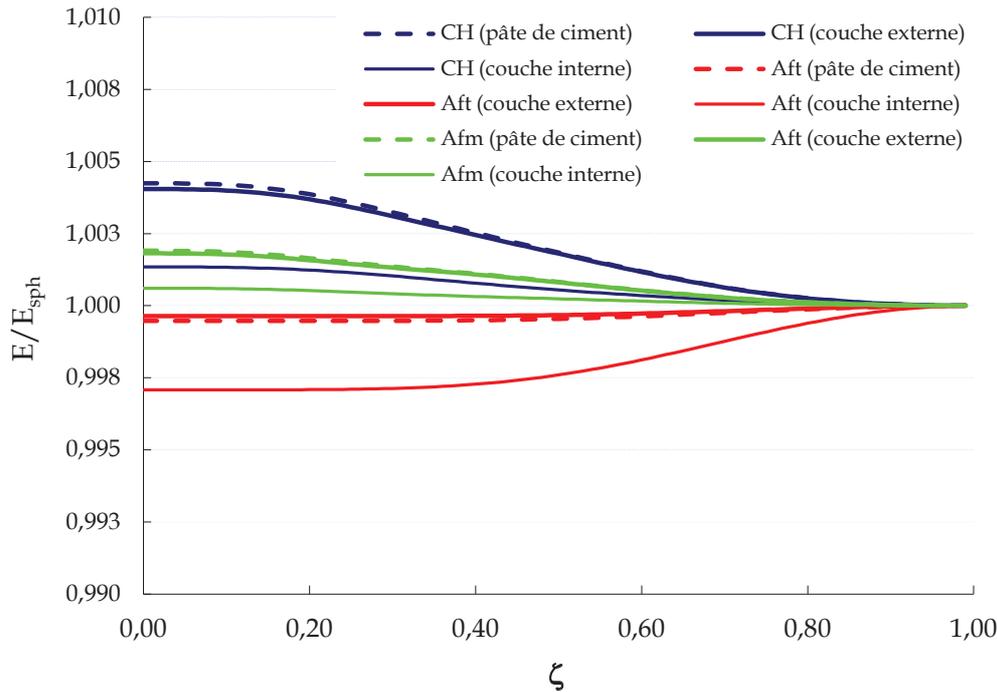


Figure 3.23 : Evolution du rapport E / E_{sph} en fonction du paramètre morphologique des hydrates pris séparément.

On constate une diminution du module d'Young du matériau lorsque les inclusions ont un module d'Young inférieur à celui de la matrice. Par contre on observe une augmentation du module d'Young du matériau lorsque le module d'Young des inclusions est supérieur à celui de la matrice.

III.6.3.3 Forme des pores

On procède ici à la même analyse, mais cette fois-ci sur la forme des pores en considérant toutes les autres inclusions sphériques. Sur la **Figure 3.24** on présente la variation du rapport $E(\zeta) / E_{sph}$ en fonction du paramètre morphologique ζ , lorsque les pores sont considérés comme des formes oblates (courbes en bleu) et lorsqu'ils sont considérés comme des formes prolates (courbes en rouge). A première vue, on constate une influence plus marquée lorsque les pores sont considérés de forme oblate que lorsqu'ils sont considérés de forme prolate. De plus si on ne s'intéresse par exemple qu'aux courbes en bleu, on constate que l'influence est d'autant plus importante pour une microstructure que lorsque la porosité totale est plus élevée. Ainsi on peut voir que pour un même rapport d'aspect le rapport $E(\zeta) / E_{sph}$ est systématiquement plus proche de 1 dans le cas de la couche interne ($\phi^{int} = 0.14$) que dans le cas de la couche externe ($\phi^{ext} = 0.56$). L'« erreur » faite sur l'estimation des paramètres macroscopiques en considérant les pores sphériques sur le module d'Young par exemple est croissante avec la porosité totale. Un autre aspect qu'il est intéressant de souligner sur cette figure est le fait que dans le cas des formes

oblates, lorsque le paramètre morphologique ζ tend vers 0, le rapport $E(\zeta)/E_{sph}$ lui aussi tend vers 0, c'est-à-dire que le module d'Young devient nul (Stora 2006). Cela est dû au fait qu'en dessous d'une certaine valeur du paramètre morphologique les formes oblates se rapprochent plus de la forme de disques infinis, alors que les prolates sont sous forme d'aiguilles. Certains auteurs assimilent d'ailleurs les fissures à des formes oblates avec un rapport d'aspect $\alpha = 0.001$ (Shao et al. 2005) ce qui correspond à $\zeta = 0.21$. Le module d'Young que l'on a estimé en considérant les pores sphériques est de 20.49GPa. La valeur expérimentale est $E_{exp} = 17GPa$. Le rapport E_{exp}/E_{sph} est donc égal à 0.829 et correspond si l'on considère exclusivement des pores de formes oblates, à un paramètre morphologique $\zeta = 0.74$ ($\alpha = 0.90$) ou si l'on considère exclusivement des pores de formes prolates à $\zeta = 0.6$ ($\alpha = 4.62$). Il faut noter qu'on peut aussi envisager de représenter une moitié de la porosité par des formes oblates et l'autre moitié par des formes prolates (Stora et al. 2006), mais cette option n'a pas été choisie dans cette étude.

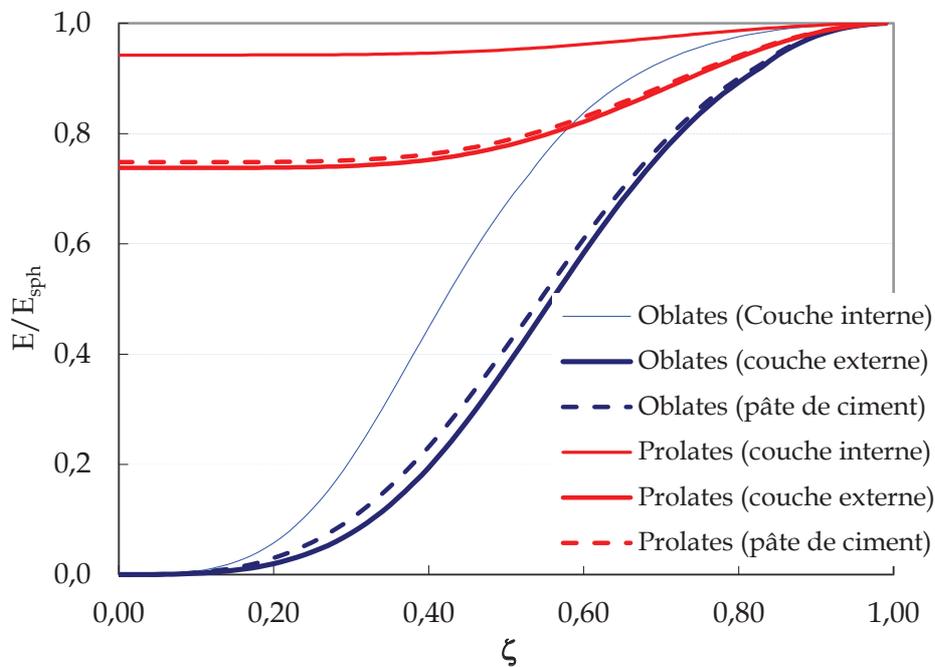


Figure 3.24 : Evolution des modules d'Young de la couche interne, de la couche externe et de la pâte de ciment en fonction du paramètre morphologique des pores.

Les **Figure 3.25** et **Figure 3.26** qui montrent respectivement l'évolution des coefficient et module de Biot normalisés $b(\zeta)/b_{sph}$ et $M(\zeta)/M_{sph}$ en fonction du paramètre morphologique confirment à leur tour l'influence beaucoup plus marquée des formes oblates sur les paramètres macroscopiques que les formes prolates. Contrairement au module d'Young, l'asphéricité des pores a systématiquement tendance à augmenter le coefficient de Biot, jusqu'à environ 3.7 fois b_{sph} .

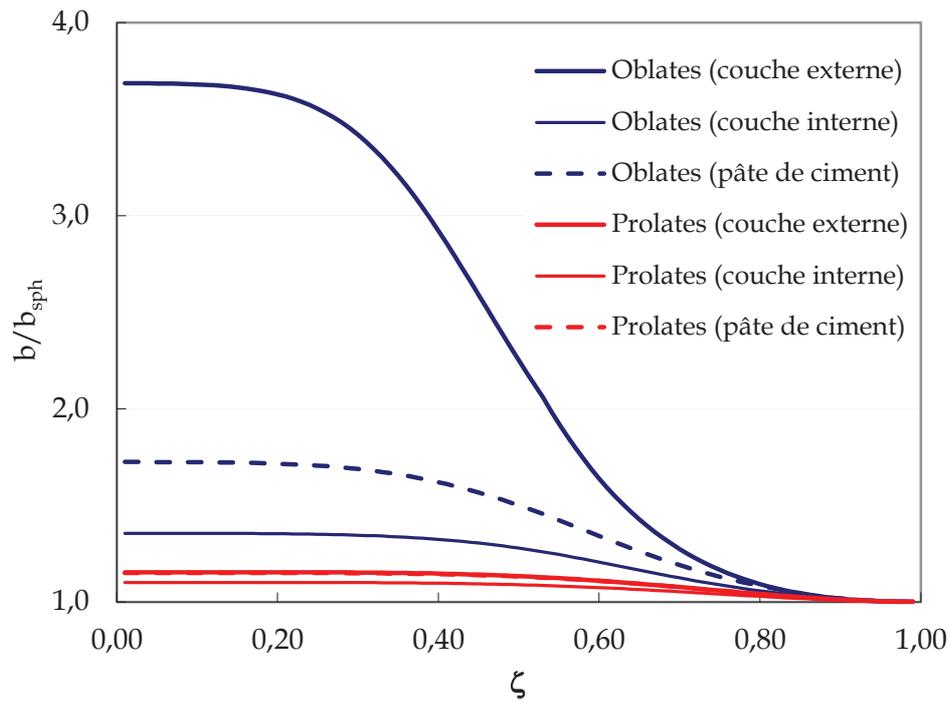


Figure 3.25 : Evolution du coefficient de Biot normalisé des couches interne, externe et de la pâte de ciment en fonction du paramètre morphologique ζ pour les valeurs de porosité suivantes : 0.148 pour la couche interne, 0.56 pour la couche externe et 0.30 pour la pâte de ciment CO.

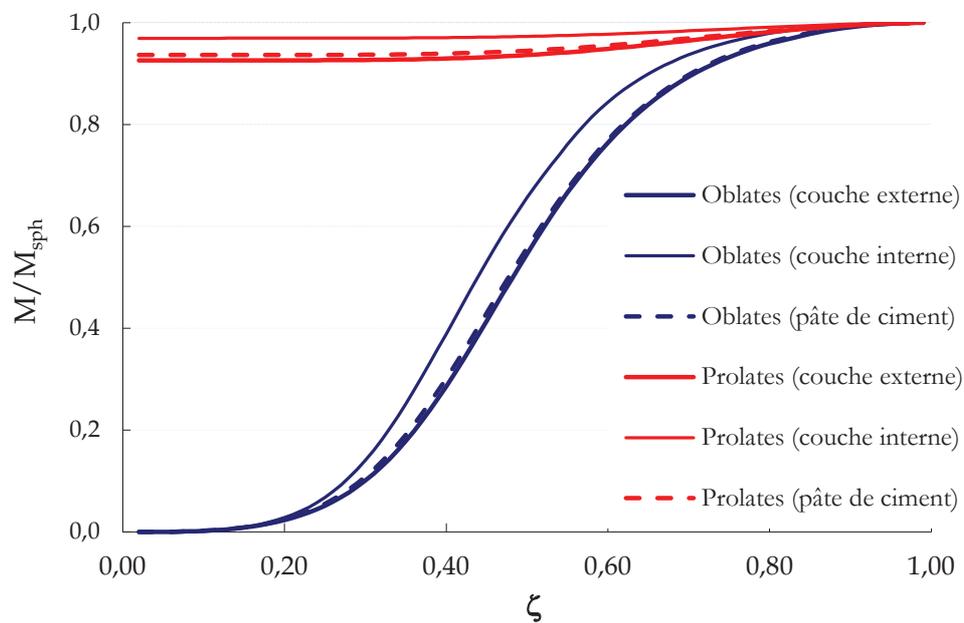


Figure 3.26 : Evolution du module de Biot normalisé des couches interne, externe et de la pâte de ciment en fonction du paramètre morphologique ζ pour les valeurs de porosité suivantes : 0.148 pour la couche interne, 0.56 pour la couche externe et 0.30 pour la pâte de ciment.

Evidemment l'effet est beaucoup plus prononcé lorsque la porosité est élevée. Les paramètres morphologiques identifiés plus haut permettant de retrouver le module d'Young expérimental auraient un effet non bénéfique puisqu'il éloignerait encore un peu plus le coefficient de Biot estimé du coefficient de Biot expérimental. Mais cette augmentation reste faible aussi bien pour les formes oblates que pour les formes prolates. En ce qui concerne le module de Biot l'évolution est semblable à celle du module d'Young. Evidemment lorsque le module d'Young tend vers 0 ($\zeta = 0$), le module de Biot correspond à celui d'un milieu sans aucune rigidité, la moindre variation de pression entrainerait une variation importante de porosité ($1/M \rightarrow \infty$). Dans la pratique ceci peut être le cas d'un matériau totalement fissuré, ce qui fera en partie l'objet des sections suivantes.

III.6.3.4 Conclusion sur la forme des inclusions

Nous retrouvons dans notre cas de représentation de la microstructure utilisée certains résultats (voir par exemple (Stora 2006, Bary 2011)) selon lesquels la forme des hydrates n'a qu'une faible influence sur les paramètres macroscopiques. Ceci a été mis en évidence aussi bien sur le module d'Young que sur le coefficient et le module de Biot. L'hypothèse de forme sphérique peut être donc faite sans précautions particulières. En revanche, en ce qui concerne la forme des pores, les conclusions sont plus contrastées. La forme des pores influence significativement les paramètres macroscopiques surtout lorsque ceux-ci sont approximés par des formes oblates. A partir de l'étude sur la pâte de ciment CO en conditions saturées, les résultats relatifs au module d'Young indiquent qu'il conviendrait de choisir pour les pores soit un paramètre morphologique $\zeta = 0.74$ s'ils sont approximés par des formes oblates, ou $\zeta = 0.6$ lorsqu'ils le sont par des formes prolates. Cependant en conditions partiellement saturées, la prise en compte de l'asphéricité de la porosité devient complexe. En effet la prise en compte de l'épaisseur de transition de l'eau adsorbée entre les deux rayons de courbure est assez délicate (Rusanov 2005). Des études concernant des ellipsoïdes non saturés existent (Chateau et Dormieux 1998), mais les configurations adoptées en ce qui concernent les couches d'eau adsorbée ne correspondent pas à notre cas d'étude. Dans la suite pour des raisons de simplification, toutes les inclusions sont considérées sphériques.

III.6.4 Résultats relatifs au Mortier MO et au Béton BO

Les granulométries du sable 0/2 et des granulats 5/20 utilisés dans la fabrication du mortier et du béton sont montrées sur la Figure 3.7. Le sable utilisé pour le mortier est un sable normalisé de Leucate (France) conformément à la norme EN 196-1 (Rougelot 2008). Le diamètre du plus gros grain est de 2 mm. Le rapport sable/ciment est de 3 et le rapport e/c est de 0.5. Le module d'Young du sable est $E_s = 80$ GPa et son coefficient de Poisson est fixé à $\nu_s = 0.2$ (Bernard et Kamali 2010). Les porosités mesurées à l'état sec (étuvage à 90°C) et par désorption sur le mortier sont respectivement de 0.16 et 0.17. Les fractions volumiques dans la pâte de ciment saine et dans l'ITZ constituant le mortier MO sont calculées en suivant la démarche explicitée dans la section III.1. On considère pour un rapport e/c donné que la présence des granulats ne modifie pas la formation des produits hydratés. Les fractions volumiques d'hydrates formés sont

obtenues naturellement avec le modèle de Jennings comme si les granulats ne jouaient aucun rôle dans le processus d'hydratation. Ceci n'est pas tout à fait exact, en tout cas pour certains types de granulats qui peuvent absorber ou relarguer de l'eau de gâchage pendant le processus d'hydratation, ce qui va modifier significativement les fractions volumiques au travers du degré d'hydratation final. Les fractions volumiques d'hydrates dans la pâte de ciment du mortier sont regroupées dans le Tableau 3.8. Notons que ces valeurs doivent être rapportées à la somme de la fraction volumique de la pâte saine et de l'ITZ soit $f_{ITZ} + f_{hcp} = 1 - f_g = 0.49$. A partir de ces valeurs on peut estimer la porosité de la pâte de ciment constituant le mortier à $\phi_p = f_{CP} + 0.24f_{HD\ CSH} + 0.37f_{HD\ CSH} = 0.296$. Cette valeur va nous servir par la suite à déterminer la porosité de l'ITZ. Nous ne disposons d'aucune information expérimentale concernant la taille de l'auréole de transition dans le mortier MO. Il conviendrait de faire une étude paramétrique sur l'épaisseur de cette zone afin d'analyser son influence sur les paramètres macroscopiques.

Tableau 3.8 : Fractions volumiques d'hydrates dans la pâte de ciment du mortier MO

e/c	Degré d'hydratation	Porosité capillaire (CP)	LD C-S-H	HD C-S-H	CH	AFt- AFm- C ₄ AH ₁₃	(UC)
0.5	0.908	0.1976	0.103	0.251	0.0992	0.3	0.0489

III.6.4.1 Influence de l'épaisseur de l'ITZ

Afin de pouvoir comparer nos résultats avec les valeurs de la littérature, nous avons tracé sur la **Figure 3.27** l'évolution du rapport entre le module d'Young de l'ITZ et celle de la pâte de ciment saine $a = E_{ITZ} / E_{hcp}$ en fonction de l'épaisseur de l'ITZ.

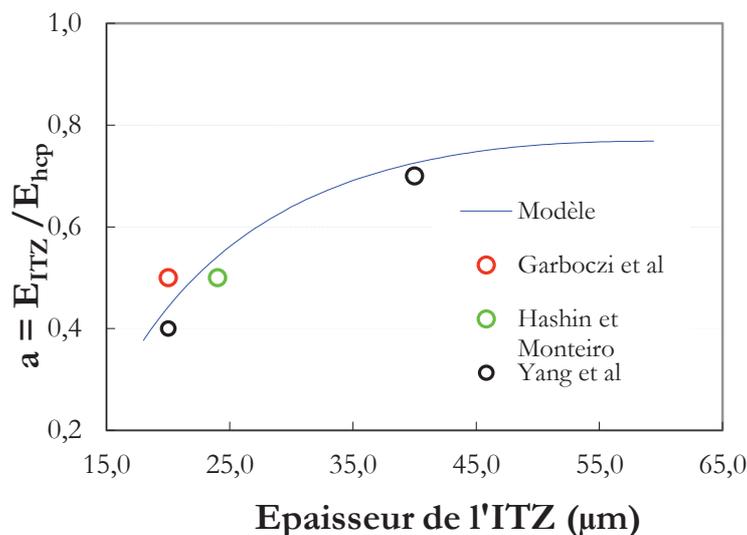


Figure 3.27 : Evolution du rapport $a = E_{ITZ} / E_{hcp}$ en fonction de l'épaisseur de l'ITZ.

Le modèle fournit des valeurs qui sont assez proches de celles estimées notamment par Hashin et Monteiro (2002), Garboczi et al (1998) et Yang (1998), aussi bien pour des petites épaisseurs d'ITZ (20-25 μm) que pour des valeurs plus élevées (40 μm). Il faut noter également que le rapport $a = E_{ITZ} / E_{hp}$ augmente avec l'épaisseur de l'ITZ. Le module d'Young de l'ITZ augmente en effet avec son épaisseur, puisque la porosité à distribuer dans cette couche (la différence de porosité entre le mortier et la pâte de ciment saine) étant constante, sa fraction volumique diminue avec l'augmentation de l'épaisseur.

En ce qui concerne le coefficient de Biot de l'ITZ, il diminue lorsque son épaisseur augmente puisque sa porosité elle aussi diminue et que E_{ITZ} augmente (**Figure 3.28**). Le coefficient de Biot dans l'ITZ est évidemment plus grand que ceux de la pâte de ciment saine et du mortier. Il est particulièrement élevé aux alentours d'une épaisseur de 20 μm , atteignant 0.80. Notons également que le coefficient de Biot du mortier aussi diminue avec l'épaisseur de l'ITZ mais de manière limitée. Cela semble a priori logique, puisque plus l'épaisseur de l'ITZ augmente, plus cette zone se confond avec la pâte de ciment saine, et plus son caractère de zone de faiblesse diminue.

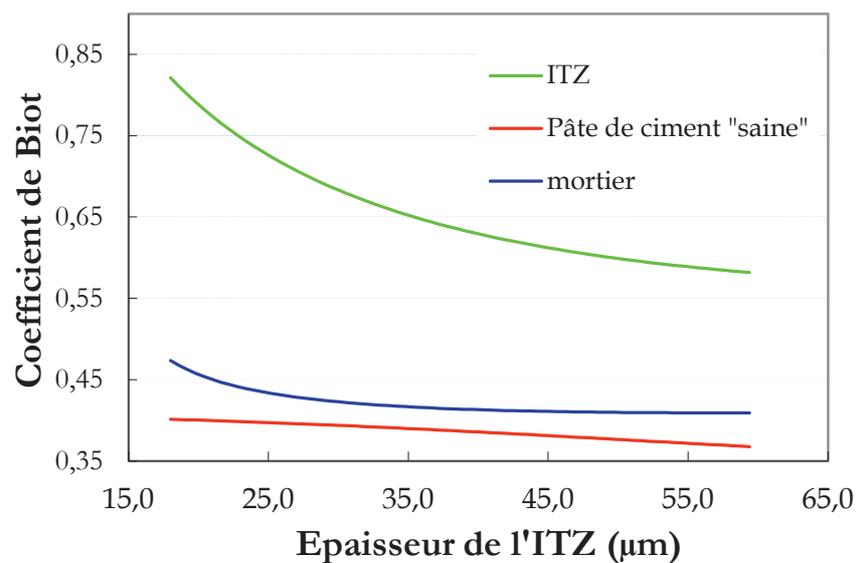


Figure 3.28 : Evolution du coefficient de Biot de l'ITZ, de la pâte de ciment saine et du mortier.

Concernant les modules de Biot poreux de l'ITZ, de la pâte de ciment et du mortier, les évolutions sont également sensibles à l'épaisseur de l'ITZ (cf **Figure 3.29**). Ils augmentent avec l'épaisseur de l'ITZ. On rappelle que la microstructure retenue pour l'ITZ et la pâte de ciment est de type matrice/inclusions. Dans cette configuration le module de Biot dépend à la fois de la porosité, des fractions volumiques et des tenseurs de localisation des différentes hétérogénéités (cf équation 3.90). Lorsque l'épaisseur de l'ITZ augmente, sa porosité diminue, les fractions volumiques des autres inclusions augmentent ce qui conduit ici à une augmentation du module de Biot dans cette zone. Dans le cas de la pâte de ciment le réarrangement des hétérogénéités dans les couches interne et externe conduit également à une augmentation du module de Biot dans

cette zone. En effet les porosités dans les couches interne et externe sont rééquilibrées entraînant une augmentation des paramètres mécaniques de l'assemblage formé par ces deux couches avec le grain de ciment anhydre, ce qui conduit donc à une augmentation du module de Biot. Pour le mortier l'augmentation de son module de Biot est cohérente avec celles de l'ITZ et de la pâte de ciment. Enfin remarquons que ces évolutions sont en accord avec celles du coefficient de Biot obtenues sur la **Figure 3.28**.

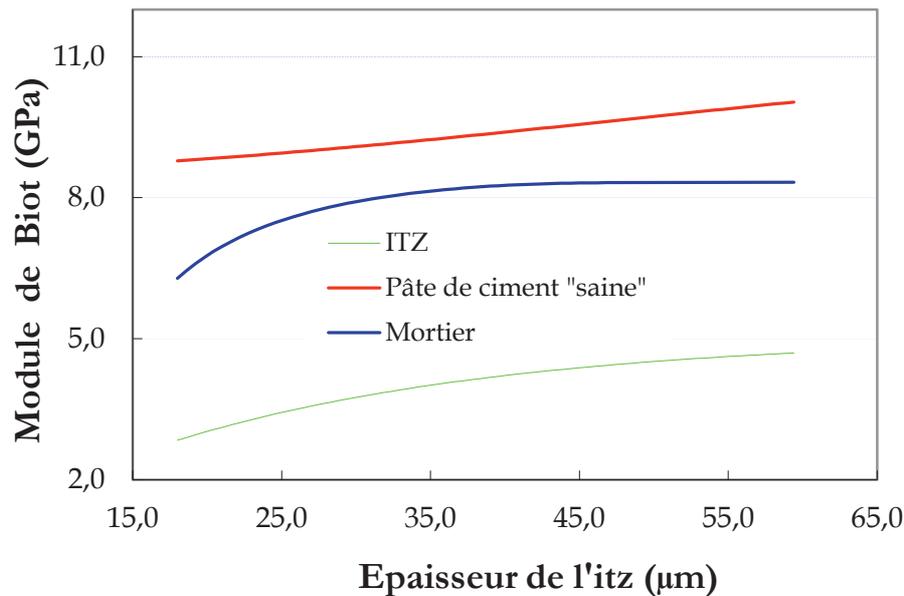


Figure 3.29 : Evolution du module de Biot de l'ITZ, de la pâte de ciment saine et du mortier.

Identification d'une épaisseur d'ITZ

Les précédents résultats concernant l'influence de l'épaisseur de l'ITZ montrent que les propriétés estimées sont particulièrement sensibles à ce paramètre. On dispose rarement des observations expérimentales permettant d'identifier l'épaisseur de l'ITZ. On propose ici de caler ce paramètre à partir d'une propriété macroscopique dont on connaît la valeur expérimentale. On choisit ici d'identifier l'épaisseur de l'ITZ adéquate à partir du coefficient de Biot. A partir de l'évolution de ce coefficient en fonction de l'épaisseur on choisit tout simplement la valeur qui correspond au coefficient de Biot expérimental, comme le montre la **Figure 3.30**. Le coefficient Biot expérimental est $b_{ext} = 0.42$. Il a été obtenu de manière indirecte à partir de la valeur expérimentale du module de compressibilité drainé et du module de compressibilité uniquement lié à la phase solide du mortier MO (Rougelot 2008). L'épaisseur d'ITZ correspondant à cette valeur du coefficient de Biot est $t_{ITZ} = 32\mu\text{m}$. Cette valeur semble acceptable si l'on considère la gamme d'épaisseur de 20 à 40 μm que l'on rencontre fréquemment dans les modèles dans la littérature (cf **Figure 3.27**).

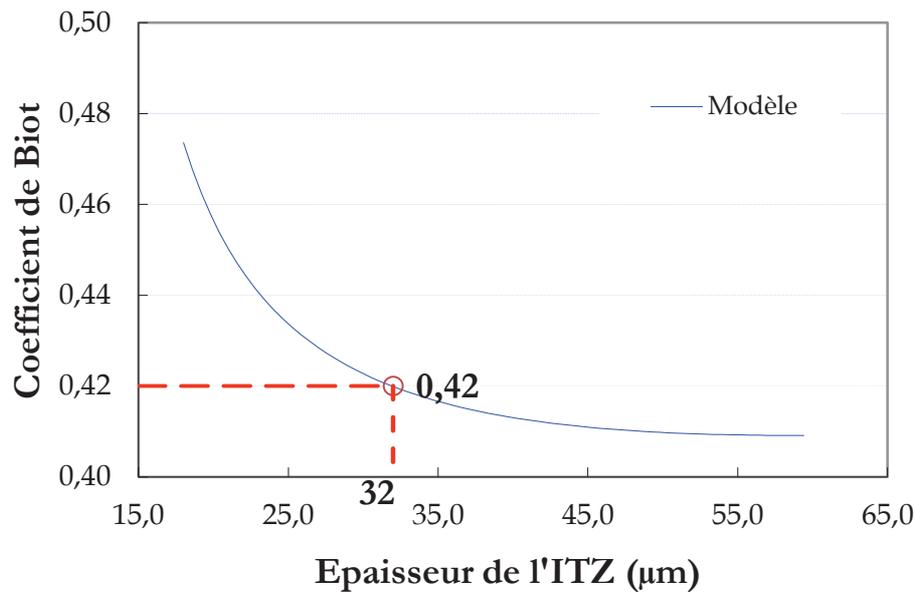


Figure 3.30 : Identification de l'épaisseur de l'ITZ pour le mortier MO.

III.6.5 Influence du rapport e/c

La **Figure 3.31** représente l'évolution du module d'Young E et du module de cisaillement μ pour différentes pâtes de ciment durcies en fonction du rapport e/c . Le rapport e/c varie de 0.3 à 0.6. Il s'agit des pâtes de ciment CEM I dont les degrés d'hydratation et les fractions volumiques d'hydrates sont regroupés dans le Tableau 3.1. Les courbes représentent les évolutions que nous avons estimées et les points correspondent aux valeurs expérimentales de (Haecker et al. 2005). Les valeurs prédites sont en accord avec les données expérimentales aussi bien pour les faibles valeurs du rapport e/c , que pour les valeurs élevées même si pour $e/c = 0.3$ la valeur est légèrement sous-estimée. En ce qui concerne les paramètres mécaniques, le modèle tel que présenté est capable de fournir des estimations correctes pour une large gamme de matériaux.

Parallèlement aux paramètres mécaniques, nous avons également estimé le coefficient et le module de Biot des différentes pâtes de ciment étudiées. Malheureusement peu de données dans la littérature concernent l'évolution de ces paramètres en fonction du rapport e/c . Sur la **Figure 3.32** la courbe correspond aux valeurs estimées par le modèle et les points aux valeurs obtenues par les modèles d'Ulm (2004) et de Ghabezloo (2010) sur des pâtes de ciment à base de ciment Portland classe G.

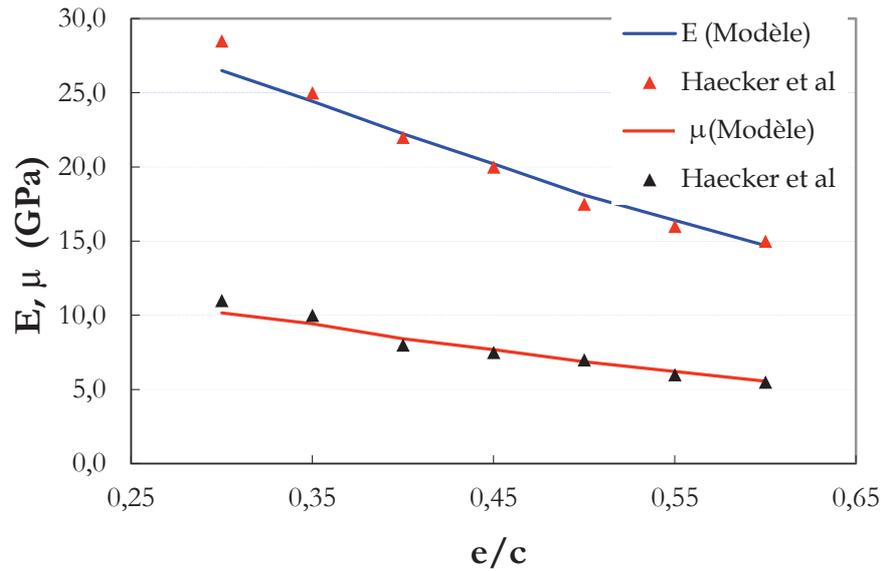


Figure 3.31 : Evolution du module d'Young et du module de cisaillement des pâtes de ciment CEM I en fonction du rapport e/c .

L'évolution du coefficient de Biot estimé est quasi-linéaire et comme on peut s'y attendre le modèle prédit une évolution croissante en fonction du rapport e/c . Il varie entre 0,42 pour un rapport $e/c = 0,30$ et 0,64 pour un rapport $e/c = 0,6$. Comparativement aux valeurs de modèles disponibles dans la littérature, ces estimations semblent a priori correctes mais des résultats expérimentaux ou mêmes numériques permettraient de les valider.

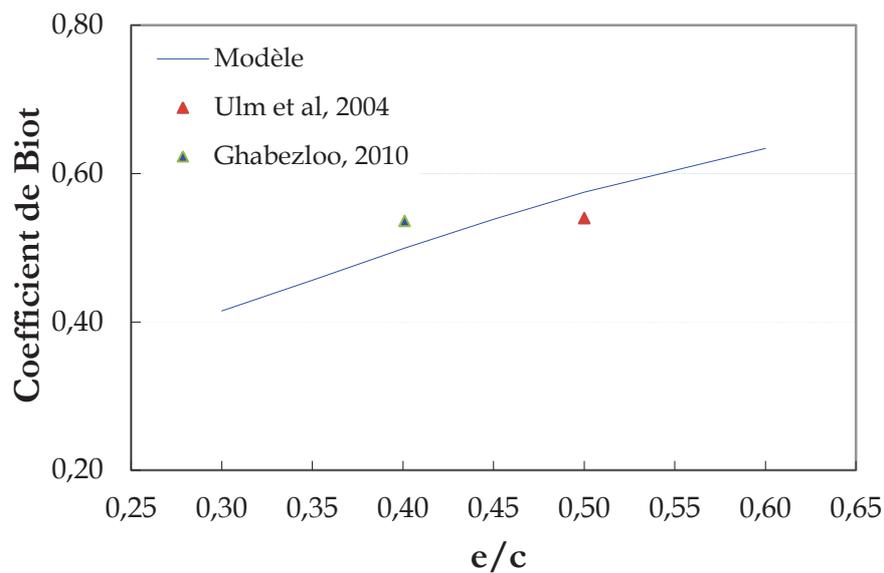


Figure 3.32 : Evolution du coefficient de Biot de la pâte de ciment en fonction du rapport e/c : comparaison avec les modèles de (Ulm et al. 2004) et (Ghabezloo 2010).

En ce qui concerne le module de Biot des pâtes de ciment l'évolution est comme attendu de façon intuitive décroissante avec le rapport e/c . Sur la **Figure 3.33** la courbe correspond aux valeurs estimées du module de Biot et le point à la valeur obtenue dans Ulm (2004). Le module de Biot est compris entre 4 et 10 GPa pour les valeurs de e/c étudiées.

Ces différents résultats obtenus sur le coefficient de Biot et le module de Biot montrent que les paramètres hydromécaniques sont particulièrement sensibles à un certain nombre de facteurs, le rapport e/c , la porosité etc..., sensibilité qu'il convient de maîtriser pour pouvoir les estimer correctement.

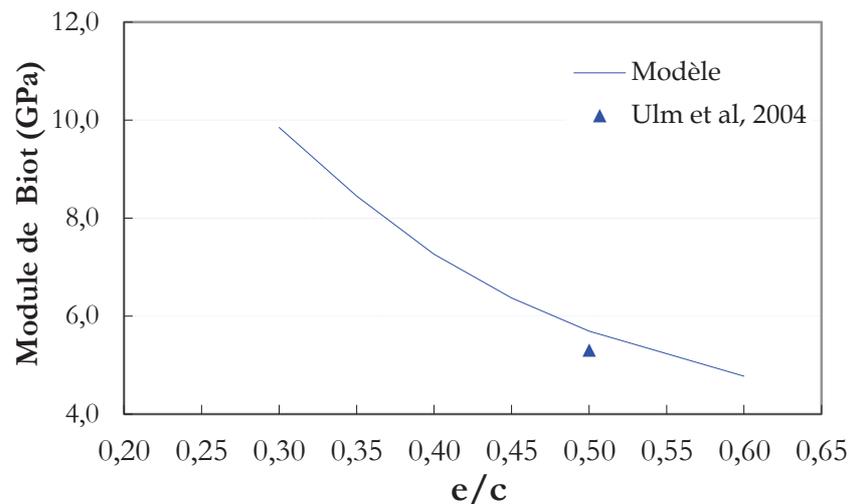


Figure 3.33 : Evolution du Module de Biot de la pâte de ciment en fonction du rapport e/c : comparaison avec les résultats de (Ulm et al. 2004). ; $k_f = 2,2\text{GPa}$

III.7 Applications et validations du modèle en conditions insaturées

Les analyses qui viennent d'être faites concernent les matériaux dans les conditions saturées. On s'intéresse ici à des conditions partiellement saturées. On rappelle que par hypothèse la configuration du matériau partiellement saturé est celle où une partie des pores est recouverte d'eau adsorbée tandis que l'autre partie est saturée d'eau. Les résultats qui suivent sont relatifs à la pâte de ciment CO et au béton BO.

III.7.1 Isothermes de sorption

Les isothermes d'adsorption des matériaux CO et BO sont calculées et comparées aux isothermes expérimentales. Pour le matériau CO les rayons de pores choisis pour les deux classes de pores (pores du gel de C-S-H et pores capillaires) des couches internes et externes sont $\bar{R}_1^{int} = \bar{R}_1^{ext} = 2\text{ nm}$, $\bar{R}_2^{ext} = 25\text{ nm}$, $m_1^{int} = m_1^{ext} = m_2^{ext} = 3$. Pour le matériau BO ces valeurs ont été conservées pour les couches internes et externes, par contre dans l'ITZ elles correspondent à

$\bar{R}_1^{ITZ} = 2.5 \text{ nm}$ et $\bar{R}_2^{ITZ} = 50 \text{ nm}$. Les paramètres d'écart type eux sont $m_1^{ITZ} = m_2^{ITZ} = 5$. (3.73)). On rappelle également que ces paramètres ont été ajustés sur les résultats expérimentaux d'isothermes. Les isothermes obtenues pour les deux matériaux sont montrées sur les **Figure 3.34** et **3.35**. Globalement les isothermes du modèle sont cohérentes avec celles obtenues expérimentalement. L'écart sensible entre les deux courbes aux humidités relatives élevées ($h_r > 0.8$) dans le cas du matériau BO peut s'expliquer par l'introduction de paramètres supplémentaires dans le modèle pour décrire la couche de l'ITZ.

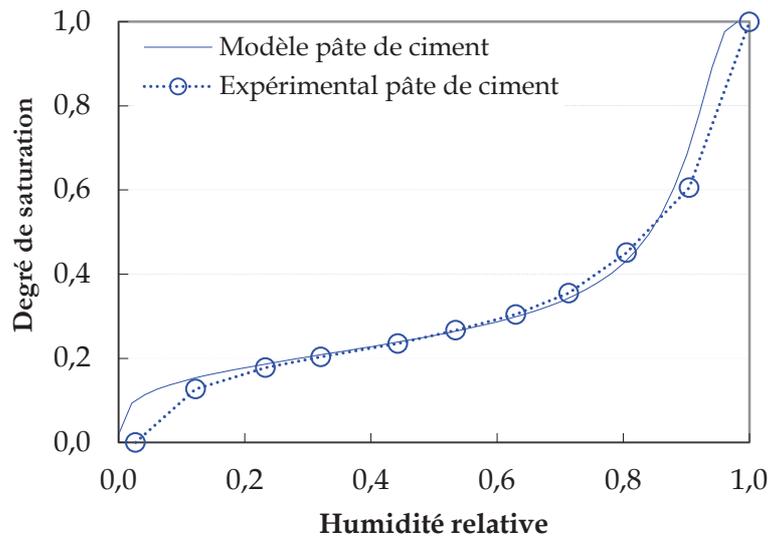


Figure 3.34 : Isothermes d'adsorption du matériau CO : comparaison entre le modèle et les valeurs expérimentales extraites de (Baroghel-Bouny et al. 1999).

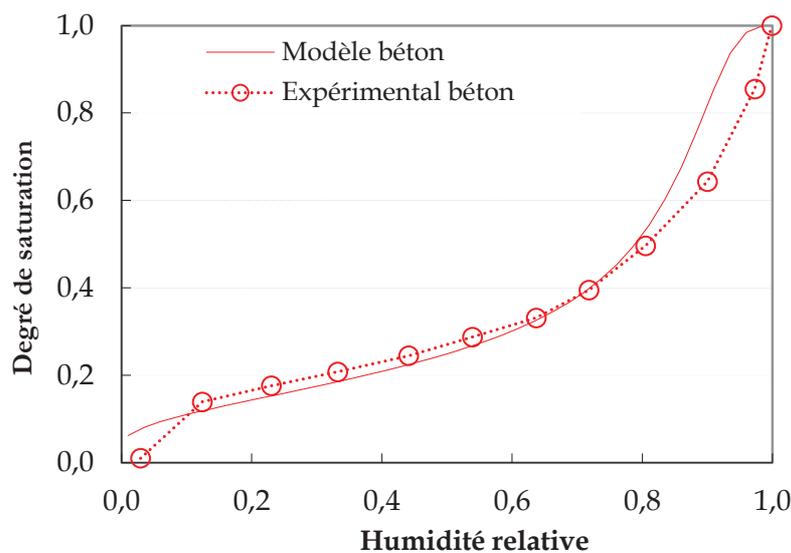


Figure 3.35 : Isothermes d'adsorption du matériau BO : comparaison entre le modèle et les valeurs expérimentales extraites de (Baroghel-Bouny et al. 1999).

III.7.2 Contribution de la couche d'eau adsorbée

L'eau adsorbée dans les pores modifie non seulement les contraintes dans les pores mais aussi la quantité d'eau présente dans le matériau. On rappelle que les pores sont considérés sphériques et la pression agissant mécaniquement sur les parois solides des pores est une combinaison de la pression de disjonction et de la pression d'eau liquide dans les pores. Nous investiguons ici l'influence de la prise en compte de cette eau adsorbée sur le paramètre matériau qu'est le coefficient de Biot. La **Figure 3.36** présente les évolutions des coefficients de Biot des couches interne, externe et de la pâte de ciment en fonction du degré de saturation. Les courbes en trait continu représentent les évolutions lorsqu'on prend en compte la couche d'eau adsorbée aussi bien dans le calcul des pressions que dans le calcul du degré de saturation. Les courbes en pointillé correspondent au cas où l'eau adsorbée dans les pores est négligée.

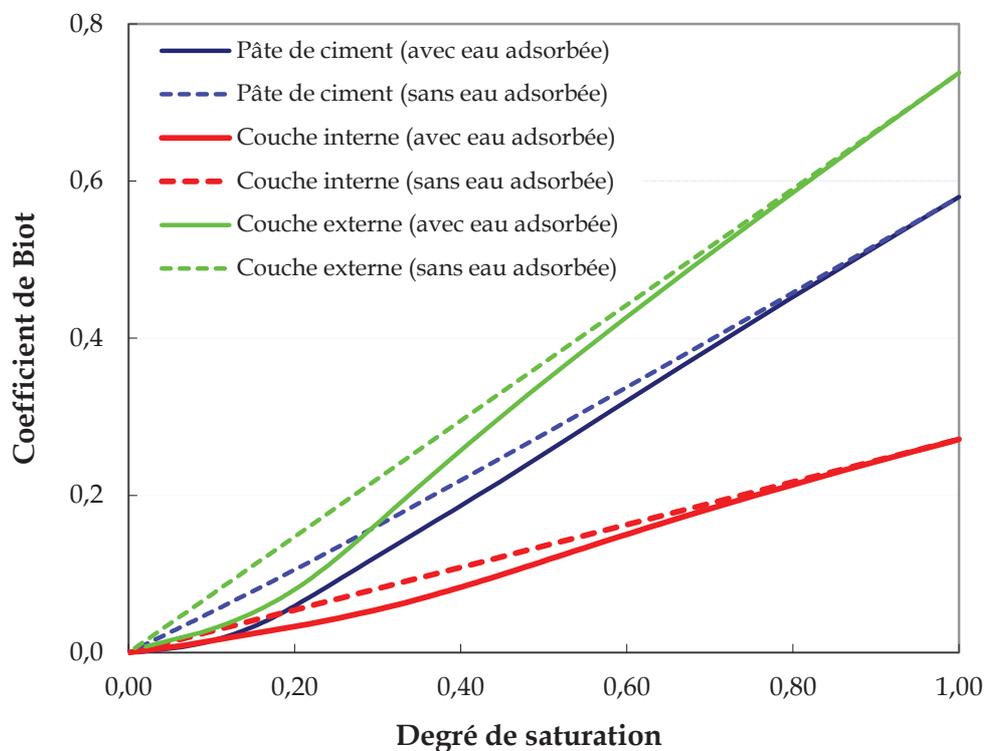


Figure 3.36 : Evolution des coefficients de Biot des couches interne, externe et de la pâte de ciment en fonction du degré de saturation

A première vue on remarque une influence significative de la couche d'eau adsorbée pour des faibles degrés de saturation comme dans (Bary 2011). Cette influence est d'autant plus marquée que la porosité en question est importante (l'écart le plus important se situe entre les courbes de la couche externe). Aux faibles humidités relatives, le rayon r_c en dessous duquel les pores sont saturés est peu élevé (voir par exemple **Figure 3.11**). Ceci fait que la plus grande partie de l'eau dans le matériau se trouve sous forme adsorbée d'où son influence marquée aux faibles humidités relatives. On note également que la prise en compte de l'eau adsorbée a tendance à diminuer le

coefficient de Biot surtout aux faibles humidités relatives. Cependant pour des humidités relatives plus élevées $b_r > 0.6-0.7$ l'effet de la couche d'eau adsorbée devient moins prononcé. Ces humidités relatives correspondent à des pores de grande taille saturés d'eau, ce qui fait que la quantité d'eau adsorbée devient négligeable par rapport à la quantité d'eau saturante dans le matériau. Remarquons par ailleurs que mis à part le début des courbes, l'évolution est quasi-linéaire. L'approximation $b(S_l) = b_{sat} S_l$ est valable lorsqu'on s'intéresse à des humidités relative élevées, mais n'est plus pertinente lorsque les phénomènes physiques qui se produisent conduisent à des faibles humidités relatives et donc à des faibles degrés de saturation comme souvent en pratique dans le cas des problèmes THM. Une résolution rigoureuse des problèmes THM nécessite donc de prendre en compte ces phénomènes.

III.7.3 Application au séchage : comparaison avec des résultats expérimentaux

Nous allons confronter les résultats obtenus pour le coefficient et le module de Biot de la pâte de ciment CO et du béton BO à des valeurs expérimentales. On appelle ici valeurs expérimentales celles qui sont obtenues de manière indirecte à partir de la déformation de séchage mesurée à différentes humidités relatives (Baroghel-Bouny et al. 1999). Le coefficient de Biot expérimental s'écrit (voir par exemple Gawin et al 2007) :

$$b^{exp} = \frac{3k}{p_c(S_l)} \varepsilon^{exp}(S_l) \quad (3.117)$$

avec k le module de compressibilité et ε^{exp} les déformations de séchage mesurées expérimentalement. Cette équation repose sur l'hypothèse selon laquelle le module de compressibilité ne varie pas en fonction du degré de saturation. Elle permet de prendre en compte à travers le coefficient de Biot les phénomènes de tension de surface et de pression de disjonction qui opèrent dans le matériau lors de la variation de l'humidité relative. Les résultats obtenus pour la pâte de ciment sont présentés sur la **Figure 3.37**. On obtient pour la pâte de ciment un accord satisfaisant entre le modèle et les valeurs expérimentales. En se référant aux valeurs expérimentales, l'évolution du coefficient de Biot de la pâte de ciment CO est quasi-linéaire alors que dans le cas du béton BO (**Figure 3.38**), elle est caractérisée par une partie presque horizontale ($S_l > 0.5$) où la variation est très faible en fonction du degré de saturation. Bien que le degré de saturation augmente de manière significative, le coefficient de Biot n'est affecté que très faiblement par cette augmentation. La différence entre cette évolution et celle du coefficient de biot de la pâte de ciment s'explique par l'introduction dans le modèle des paramètres relatifs à la PTTZ.

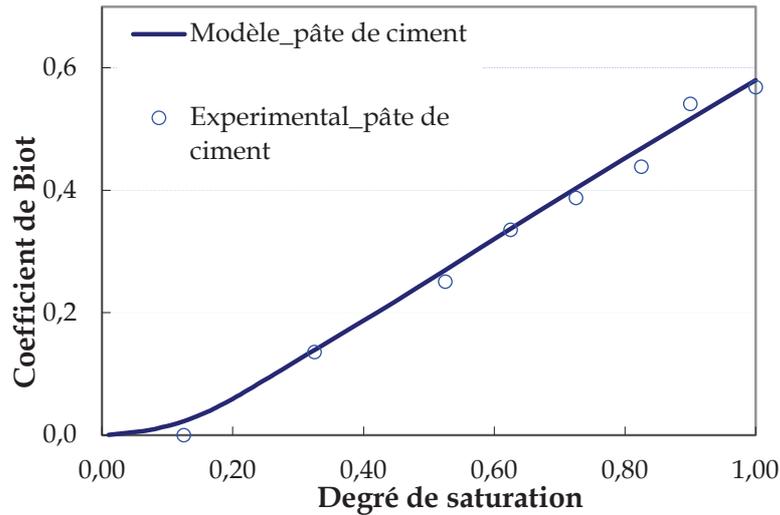


Figure 3.37 : Comparaison entre les valeurs du modèle et les valeurs expérimentales (Barogbel-Bouny et al. 1999) du coefficient de Biot en fonction du degré de saturation (CO).

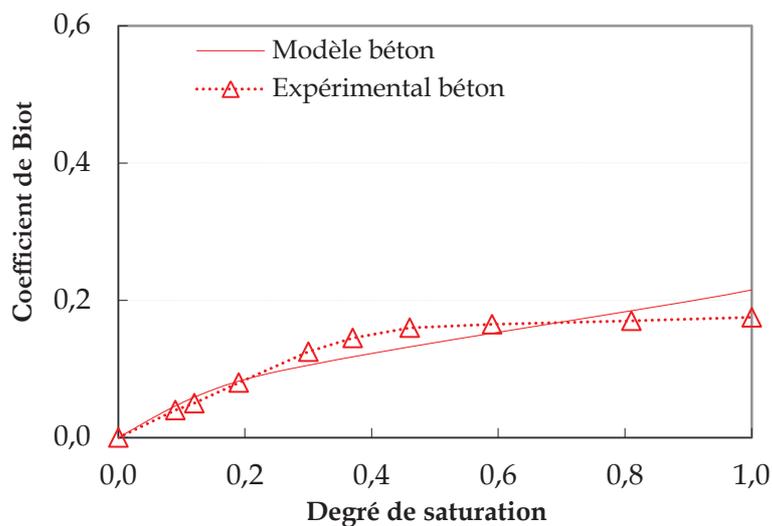


Figure 3.38 : Comparaison entre les valeurs du modèle et les valeurs expérimentales (Barogbel-Bouny et al. 1999) du coefficient de Biot en fonction du degré de saturation (BO).

En ce qui concerne le module de Biot, sa valeur expérimentale peut être déterminée par (voir par exemple (Burlion 2004)) :

$$M^{exp} = -\frac{1}{\phi + \varepsilon^{exp}} \left(\frac{dp_c}{dS_l} \right) \quad (3.118)$$

Les résultats obtenus pour la pâte de ciment CO et le béton BO sont montrés sur les **Figure 3.39** et **3.40**. On observe également une bonne concordance entre les résultats du modèle et les valeurs expérimentales. On rappelle que les résultats expérimentaux du module de Biot pour le

CO et le BO ont été calculés à l'aide des courbes capillaires expérimentales disponibles dans (Baroghel-Bouny *et al.*, 1999).

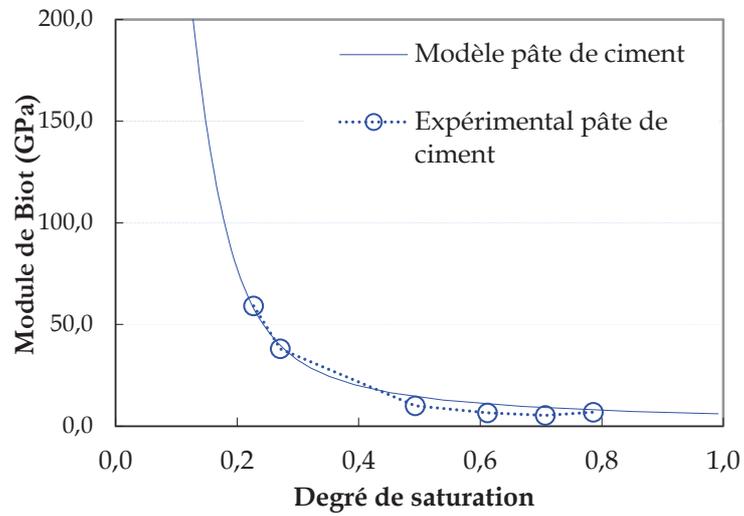


Figure 3.39 : Comparaison entre les valeurs du modèle et les valeurs expérimentales (Baroghel-Bouny *et al.* 1999) du module de Biot en fonction du degré de saturation (CO).

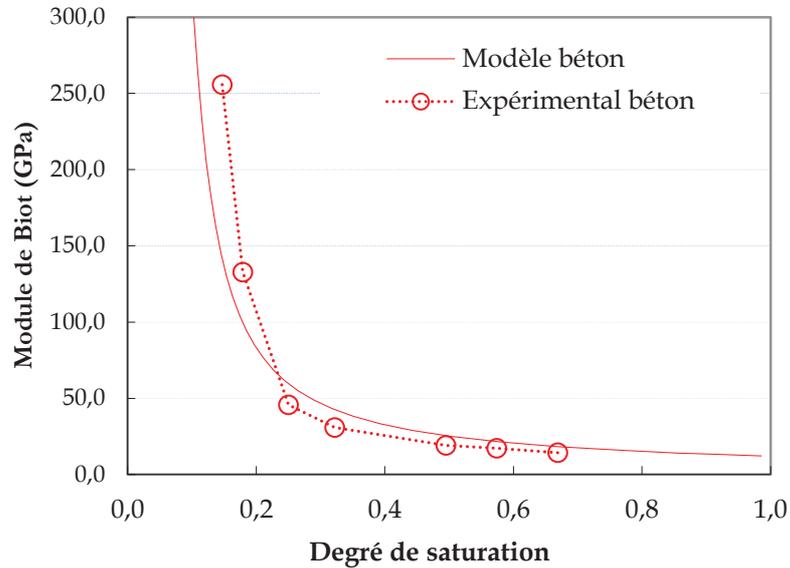


Figure 3.40 : Comparaison entre les valeurs du modèle et les valeurs expérimentales (Baroghel-Bouny *et al.* 1999) du module de Biot en fonction du degré de saturation (BO).

III.8 Couplage fissuration / paramètres hydromécaniques en conditions saturées

On s'intéresse ici au comportement mécanique et hydromécanique du matériau fissuré. On considère une phase solide, la matrice cimentaire avec un comportement élastique linéaire. On se limite dans un premier temps au matériau saturé (les fissures sont saturées d'eau). L'initiation et la propagation de la fissuration ne seront pas traitées ici. Ces aspects seront abordés dans le chapitre IV. L'échelle ici peut être considérée comme une échelle supplémentaire (échelle IV) à la représentation de la microstructure qui a été faite à la Figure 3.2. On considère que la taille caractéristique des fissures permet de supposer qu'elles sont immergées dans la matrice cimentaire homogénéisée à l'échelle III.

III.8.1 Géométrie des fissures

Les fissures sont modélisées par des ellipsoïdes aplatis possédant la symétrie de révolution autour du petit axe. Une famille de fissures est caractérisée par leurs orientation et taille, leur rapport d'aspect α et la fraction volumique de la porosité induite. Le domaine occupé par une fissure est défini par l'équation suivante (Aboudi et Benveniste 1986 ; Horii et Nemat-Nasser 1983) :

$$\frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1 \quad (3.119)$$

avec $\alpha = c/a \ll 1$. a est le rayon de l'ellipsoïde et c la demi-longueur du petit axe.

On introduit classiquement la densité de microfissures ρ (Budiansky et O'Connell 1976) telle que la porosité induite par les microfissures s'écrit :

$$\phi_c = \frac{4}{3} \pi \rho \alpha \quad \text{avec } \rho = \mathcal{N} a^3 \quad (3.120)$$

avec \mathcal{N} le nombre de fissures par unité de volume. Une microfissure est représentée par un milieu isotope de module de compressibilité et de cisaillement nuls. Dans le cas de microfissures fermées, on représente une fissure par un milieu isotrope de même module de compressibilité k^0 que la matrice solide, et de module de cisaillement nul. Le cas de microfissures fermées ne sera pas traité, on considère que dans les cas de chargement traités par la suite toutes les fissures sont ouvertes. Dans la suite on procède à la comparaison entre divers schémas d'homogénéisation, le schéma dilué, le schéma de Mori-Tanaka, le schéma IDD et le schéma Full Range IDD et ceci, dans les cas d'une famille de microfissures orientées aléatoirement, d'une famille de microfissures parallèles et de deux familles de microfissures parallèles mais de normales perpendiculaires. L'utilisation des schémas d'homogénéisation a l'avantage de fournir des expressions analytiques et relativement simples des paramètres impactés par la microfissuration, ce qui correspond au cadre pratique de cette étude.

III.8.2 Comparaisons entre divers schémas d'homogénéisation

III.8.2.1 Microfissures orientées aléatoirement

On considère dans un premier temps des microfissures orientées aléatoirement de telle manière que le milieu homogénéisé reste isotrope (**Figure 3.41**). Ce cas a été largement traité dans la littérature avec une prise en compte ou non des interactions entre les fissures. Les tenseurs d'élasticité et de Biot sont obtenus avec le schéma dilué (Deudé et al. 2002), le schéma de Mori-Tanaka (Dormieux et al. 2006) ou encore récemment avec le schéma IDD (Bary 2011). Nous nous permettons de revenir sur l'analyse des expressions de ces tenseurs qui serviront de base pour la suite.

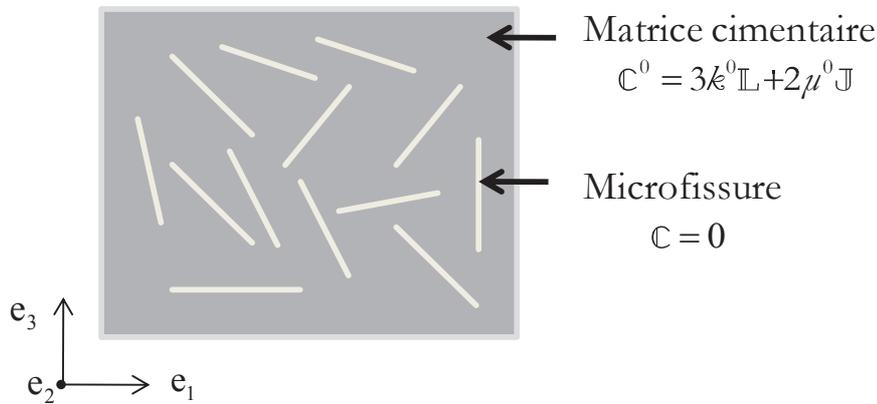


Figure 3.41 : Configuration isotrope d'un matériau microfissuré : microfissures orientées aléatoirement

On rappelle que pour chacun des schémas étudiés, en notant \mathbb{C}^{hom} le tenseur d'élasticité homogénéisé du matériau microfissuré le tenseur de Biot \mathbf{B}^{hom} prend la forme (Dormieux et al. 2006) :

$$\mathbf{B}^{hom} = \mathbf{1} - \mathbb{C}^{hom} : \mathbb{C}^{0^{-1}} : \mathbf{1} \quad (3.121)$$

Schéma dilué

Dans le cas du schéma dilué, les interactions entre les fissures ne sont pas prises en compte. L'expression du tenseur d'élasticité homogénéisé n'est autre que la somme des contributions de chacune des fissures à la rigidité initiale du milieu. On note \mathbb{C}^0 le tenseur d'élasticité du matériau sain non fissuré supposé isotrope et non poreux. D'un point de vue mécanique le tenseur d'élasticité de la fissure est nul. Pour une unique famille de microfissures, le tenseur d'élasticité homogénéisé dans le cas du schéma dilué s'écrit (Dormieux et al. 2006) :

$$\mathbb{C}^{dil} = \mathbb{C}^0 \left(\mathbb{I} - \frac{4\pi}{3} \rho \alpha (\mathbb{I} - \mathbb{S}^E)^{-1} \right) \quad (3.122)$$

Contrairement à $(\mathbb{I} - \mathbb{S}^E)^{-1}$, le tenseur $\alpha (\mathbb{I} - \mathbb{S}^E)^{-1}$ admet une limite finie quand $\alpha \rightarrow 0$ (Torquato 2001). Le tenseur d'élasticité homogénéisé s'écrit donc :

$$\mathbb{C}^{dil} = \mathbb{C}^0 : \left(\mathbb{I} - \frac{4\pi}{3} \rho \mathbb{T} \right) \quad \text{avec} \quad \mathbb{T} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \alpha \left(\mathbb{I} - \mathbb{S}^E \right)^{-1} \quad (3.123)$$

Le tenseur \mathbb{T} ne dépend que de l'orientation des microfissures et du coefficient de Poisson de la phase solide. Dans le cas des microfissures orientées aléatoirement le tenseur \mathbb{T} est isotrope et vaut (Torquato 2001) :

$$\langle \mathbb{T} \rangle = \mathbb{T}^b \mathbb{I} + \mathbb{T}^d \mathbb{J} \quad \text{avec} \quad \mathbb{T}^b = \frac{4(1-\nu^{0^2})}{3\pi(1-2\nu^0)} \quad \text{et} \quad \mathbb{T}^d = \frac{8}{15\pi} \frac{(1-\nu^0)(5-\nu^0)}{(2-\nu^0)} \quad (3.124)$$

On peut alors en déduire les coefficients de compressibilité et de cisaillement du milieu fissuré sous les formes :

$$\kappa^{dil} = \kappa^0 \left(1 - \frac{16\rho(1-\nu^{0^2})}{9(1-2\nu^0)} \right) \quad \text{et} \quad \mu^{dil} = \mu^0 \left(1 - \frac{32\rho(1-\nu^0)(5-\nu^0)}{45(2-\nu^0)} \right) \quad (3.125)$$

Le tenseur de Biot et le module de Biot solide s'obtiennent aussi directement :

$$\mathbf{B}^{dil} = \frac{4\pi}{3} \rho \mathbf{1} : \mathbb{T} = b^{dil} \mathbf{1} \quad \text{avec} \quad b^{dil} = \frac{16}{9} \rho \frac{(1-\nu^{0^2})}{(1-2\nu^0)} \quad ; \quad \frac{1}{N^{dil}} = \frac{b^{dil}}{\kappa^0} \quad (3.126)$$

Schéma de Mori-Tanaka

Comme nous l'avons rappelé dans le chapitre précédent, le schéma de Mori-Tanaka permet contrairement au schéma dilué de prendre en compte d'une certaine manière les interactions entre les microfissures. Les expressions des tenseurs d'élasticité et de Biot du milieu fissuré peuvent s'écrire (Dormieux et al. 2006) :

$$\mathbb{C}^{MT} = \mathbb{C}^0 : \left(\mathbb{I} + \frac{4}{3} \pi \rho \mathbb{T} \right)^{-1} \quad ; \quad \mathbf{B}^{MT} = \mathbf{1} : \left(\mathbb{I} - \left(\mathbb{I} + \frac{4}{3} \pi \rho \mathbb{T} \right)^{-1} \right) \quad (3.127)$$

Les modules de compressibilité et de cisaillement correspondants s'obtiennent par :

$$\kappa^{MT} = \frac{\kappa^0}{1 + \frac{16}{9} \frac{(1-\nu^{0^2})}{(1-2\nu^0)}} \quad ; \quad \mu^{MT} = \frac{\mu^0}{1 + \frac{32(1-\nu^0)(5-\nu^0)}{45(2-\nu^0)}} \quad ; \quad (3.128)$$

ce qui conduit aux coefficient et module de Biot solide suivants :

$$\mathbf{B} = b^{MT} \mathbf{1} \quad \text{avec} \quad b^{MT} = \frac{1}{1 + \frac{16}{9} \frac{(1-\nu^{0^2})}{(1-2\nu^0)}} \quad ; \quad \frac{1}{N^{MT}} = \frac{b^{MT}}{\kappa^0} \quad (3.129)$$

Schémas IDD, FIDD

Des expressions analytiques peuvent être également fournies dans le cas des schémas IDD et FIDD. Les tenseurs d'élasticité et de Biot homogénéisé peuvent s'écrire (Tognevi et al. 2010; Bary 2011) :

$$\mathbb{C}^{FIDD} = \mathbb{C}^0 : \left(\mathbb{I} + \frac{4}{3} \pi \rho \mathbb{T} \left(\mathbb{I} - \frac{4}{3} \pi \rho \mathbb{Z} \right)^{-1} \right)^{-1} \quad (3.130)$$

Les coefficients de compressibilité et de cisaillement correspondants sont :

$$k^{FIDD} = k^0 \left(1 + \frac{\rho \frac{4\pi}{3} \mathbb{T}^b}{1 - \frac{4\pi}{3} \rho \mathbb{Z}^b} \right)^{-1} ; \mu^{FIDD} = \mu^0 \left(1 + \frac{\rho \frac{4\pi}{3} \mathbb{T}^d}{1 - \frac{4\pi}{3} \rho \mathbb{Z}^d} \right)^{-1} \quad (3.131)$$

avec \mathbb{Z}^b et \mathbb{Z}^d les parties hydrostatique et déviatorique du tenseur $\mathbb{Z} = \mathbb{C}^{0^{-1}} : \langle \mathbb{T} : \boldsymbol{\Omega}_p \rangle$. La moyenne qui intervient dans cette dernière expression est celle qui est opérée suivant toutes les orientations possibles des microfissures. Les expressions de \mathbb{Z}^b et \mathbb{Z}^d s'écrivent (Bary 2011) :

$$\mathbb{Z}^b = \frac{4}{3\pi} (1 + \nu^0) q ; \mathbb{Z}^d = \frac{1}{5} \left(\frac{\beta^2 (4\nu^0 + 12(1 - \nu^0)q) + 6(\nu^0 - 2)q}{\pi(2 - \nu^0)(\beta^2 - 1)} - \mathbb{Z}^b \right) \quad (3.132)$$

On obtient aisément les coefficient et module de Biot par :

$$b^{FIDD} = \left(1 + \frac{\rho \frac{4\pi}{3} \mathbb{T}^b}{1 - \frac{4\pi}{3} \rho \mathbb{Z}^b} \right)^{-1} ; \frac{1}{N^{FIDD}} = \frac{b^{FIDD}}{k^0} \quad (3.133)$$

On rappelle que le paramètre β qui intervient dans les expressions de \mathbb{Z}^b et de \mathbb{Z}^d est le rapport d'aspect de la cellule entourant l'inclusion, dans ce cas la microfissure. $q(\beta)$ est la fonction introduite dans l'écriture du tenseur d'eshelby d'un ellipsoïde et définie dans l'équation 2.121. Dans le cas du schéma IDD on a fait le choix de $\beta = 1$, ce qui donne $q(\beta) = 2/3$. Dans le cas du schéma FIDD on a comme on le verra dans la suite $\beta \neq 1$ lorsque $\rho > 3/4\pi$. Dans le cas particulier du schéma IDD où $\beta = 0$, $q(\beta) = 0$ et les composantes hydrostatique et déviatorique s'annulent également $\mathbb{Z}^b = \mathbb{Z}^d = 0$. On constate alors que les paramètres obtenus (coefficient de compressibilité et de cisaillement, coefficient et module de Biot) s'identifient aux paramètres obtenus avec le schéma Mori-Tanaka :

$$k^{IDD(\beta=0)} = k^{MT} ; \mu^{IDD(\beta=0)} = \mu^{MT} \quad \text{et} \quad b^{IDD(\beta=0)} = b^{MT} \quad (3.134)$$

Ce résultat découle en fait du caractère implicite du choix de la distribution spatiale des inclusions dans le schéma de Mori-Tanaka. En effet le rapport d'aspect de la cellule de distribution est imposé par le rapport d'aspect de l'inclusion qu'elle entoure dans le schéma de Mori-Tanaka. Ce résultat a été démontré dans (Zheng et Du, 2001).

Comparaison des résultats issus des divers schémas d'homogénéisation

Les **Figure 3.42** a, b, c et d montrent l'évolution des coefficients de compressibilité et de cisaillement, du module d'Young et du coefficient de Poisson d'un matériau élastique isotrope et microfissuré avec une distribution isotrope de microfissures en fonction de la densité de fissuration ρ .

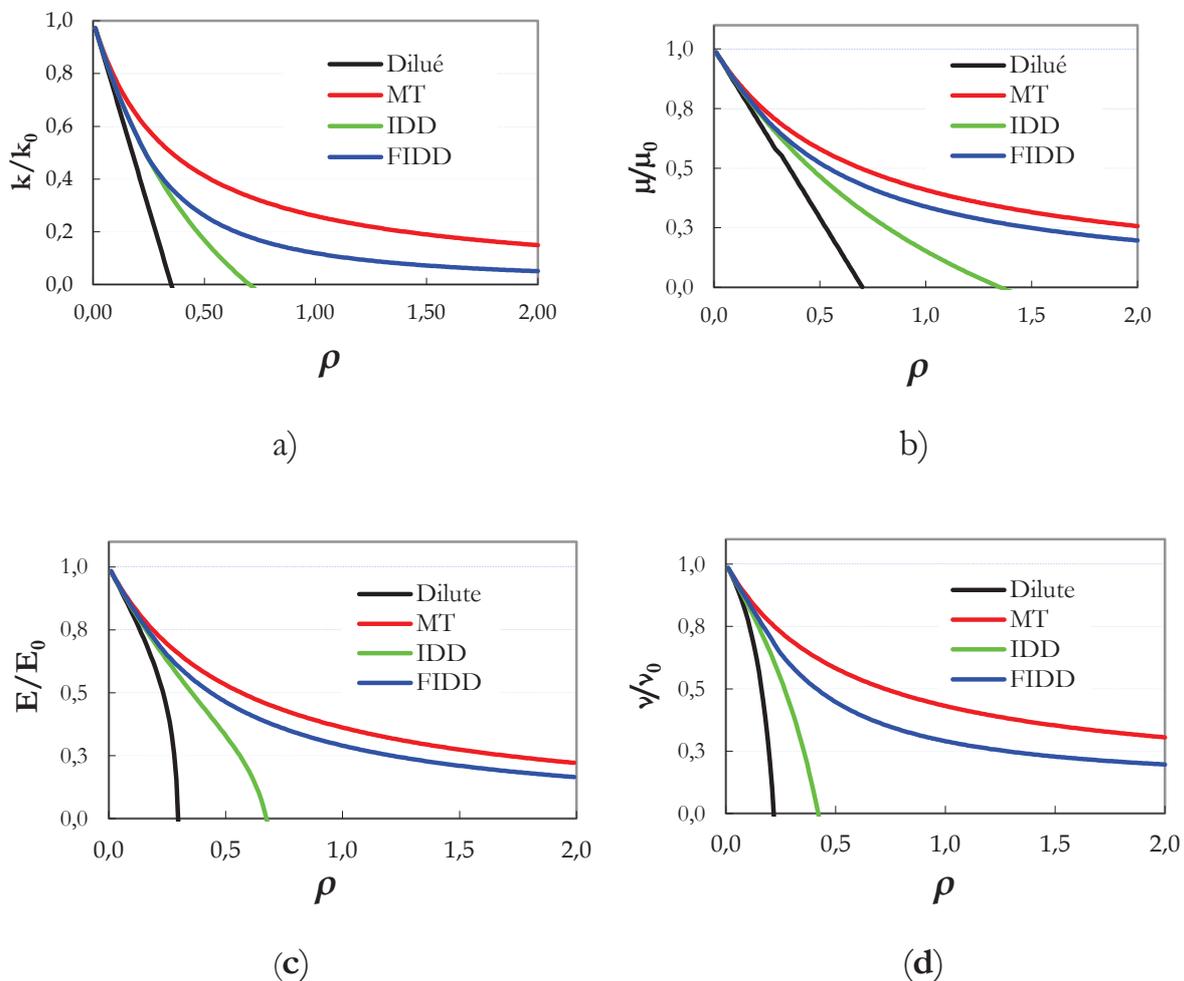


Figure 3.42 : Evolution du module de compressibilité a), du coefficient de cisaillement b), du module d'Young c) et du coefficient de Poisson d'un matériau avec des microfissures aléatoirement orientées. Comparaison des schémas dilué, MT, IDD et FIDD.

Le coefficient de Poisson choisi pour le matériau est $\nu = 0.25$. Pour des valeurs assez faibles de la densité de fissuration, les schémas dilué et IDD mènent à des valeurs nulles des paramètres étudiés. Le schéma dilué est d'ailleurs souvent considéré à juste titre dans la littérature comme la borne inférieure des schémas d'homogénéisation dans le cas de la microfissuration (Krajcinovic 1996). Les schémas IDD et Full Range IDD divergent lorsque la fraction volumique des microfissures ne permet plus de considérer des cellules de distribution sphériques autour des microfissures (Zheng et Du, 2001). Cette limite correspond ici à $\rho = 3/4\pi = 0.238$. Des valeurs expérimentales ou numériques permettraient d'identifier les schémas qui se rapprochent le plus du comportement réel d'un matériau microfissuré, mais on peut d'ores et déjà supposer que les schémas MT et FIDD sont les plus adaptés dans le cadre de cette étude. En effet les valeurs des paramètres obtenus par les autres schémas ne semblent pas cohérentes puisqu'ils donnent des valeurs négatives au-delà d'une certaine densité de microfissures (par exemple $\rho \approx 0.34$ pour le schéma dilué et $\rho \approx 0.69$ pour le schéma IDD en ce qui concerne le module de compressibilité). L'évolution du coefficient et du module de Biot en fonction de la densité de microfissuration est illustrée sur la **Figure 3.43**. On peut remarquer que le coefficient de Biot évolue significativement en fonction de la densité de microfissuration. Ceci confirme le fait que la microfissuration impacte de façon non négligeable les paramètres hydromécaniques en conditions saturées. Les valeurs du coefficient de Biot évoluent rapidement vers 1 qui est la valeur limite physiquement admissible pour ce paramètre. L'inverse du module de Biot solide est obtenu en considérant un module d'Young de la phase solide saine $E^0 = 30GPa$, correspondant à un module de compressibilité $k^0 = 20GPa$. La valeur limite atteinte par l'inverse du module de Biot est donc $1/20GPa = 0.05GPa^{-1}$.

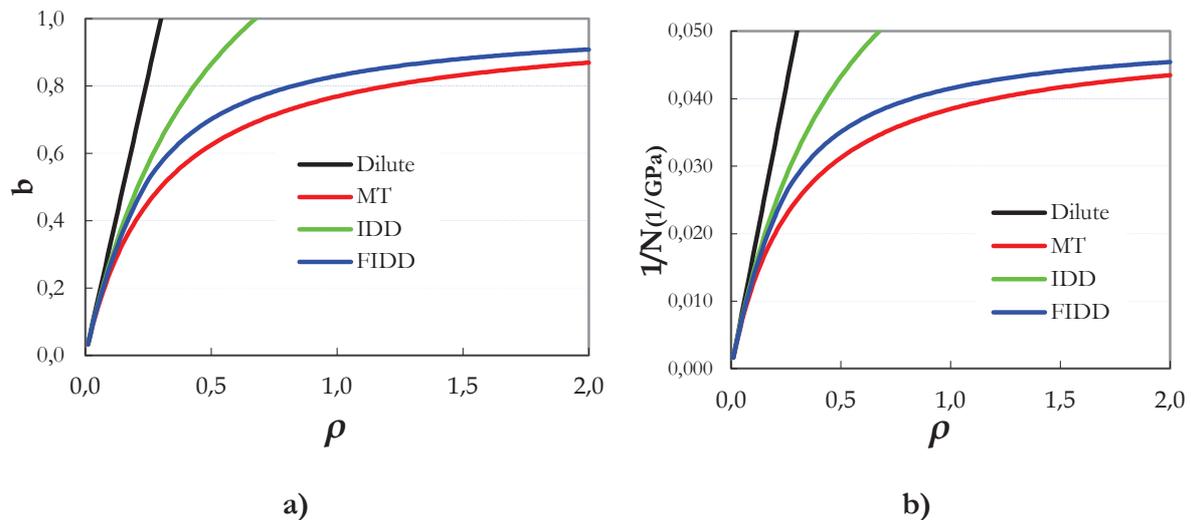


Figure 3.43 : Evolution du coefficient de Biot a), du Module de Biot b) d'un matériau avec des microfissures aléatoirement orientées. Comparaison des schéma dilué, MT, IDD et FIDD.

III.8.2.2 Une famille de microfissures alignées

On considère maintenant une famille de microfissures alignées. Cette configuration correspond par exemple à un essai de traction sur une éprouvette de béton : on observe des microfissures perpendiculaires à la direction du chargement (**Figure 3.44**). Le comportement à l'échelle macroscopique du matériau est alors isotrope transverse. Toutefois les expressions des différents paramètres obtenues précédemment sont toujours valables. La seule différence est que la moyenne du tenseur $\mathbb{T} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \alpha (\mathbb{I} - \mathbb{S}^E)^{-1}$ sur les orientations des microfissures ne sera pas opérée ici. On note e_1 une direction parallèle au plan des microfissures et e_3 la direction parallèle à la normale des microfissures. En adoptant une notation de Voigt, les termes non nuls du tenseur \mathbb{T} s'écrivent (Torquato, 2001) :

$$\mathbb{T}[3,3] = \frac{4(1-\nu)^2}{\pi(1-2\nu)}; \quad \mathbb{T}[3,1] = \mathbb{T}[3,2] = \frac{4(1-\nu)\nu}{\pi(1-2\nu)}; \quad \mathbb{T}[5,5] = \mathbb{T}[6,6] = \frac{4(1-\nu)}{(2-\nu)}$$

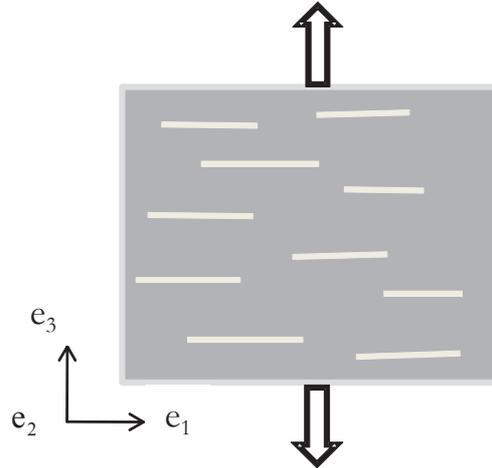


Figure 3.44 : Configuration isotrope transverse d'un matériau microfissuré (microfissures alignées).

Les tenseurs d'élasticité homogénéisés \mathbb{C}^{hom} et \mathbf{B}^{hom} ne sont plus isotropes mais isotropes transverses. Le tenseur de Biot par exemple peut se réécrire sous la forme :

$$\mathbf{B}^{hom} = b_1^{hom} (e_1 \otimes e_1 + e_2 \otimes e_2) + b_3^{hom} e_3 \otimes e_3 \quad (3.135)$$

avec $b_1^{hom} = b_2^{hom}$. Les expressions analytiques des termes du tenseur d'élasticité sont assez lourdes.

A défaut de les expliciter ici on montre sur la **Figure 3.45** l'évolution des rapports E_3/E_0 et ν_{13}/ν_0 dans le cas des différents schémas étudiés. Notons que le module d'Young dans la direction e_1 parallèle aux fissures n'est pas affecté par la microfissuration (Ponte Castañeda et Willis 1995). Ces résultats ont été également obtenus dans (Stora 2007).

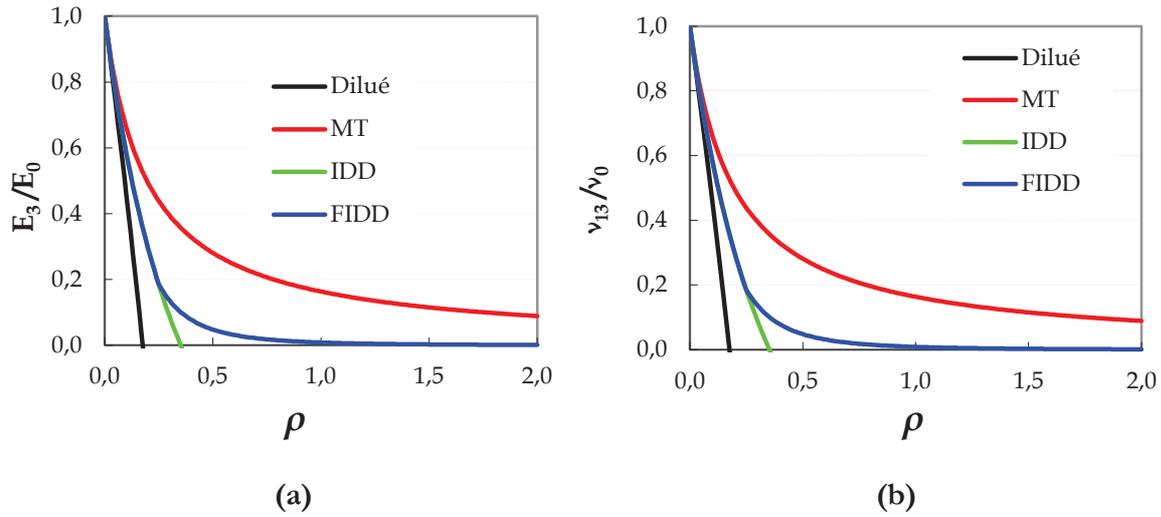


Figure 3.45 : Evolution du module d'Young normalisé E_3 / E_0 a) et du coefficient de Poisson normalisé ν_{13} / ν_0 b) : comparaison des schémas dilué, MT, IDD et FIDD.

On se propose de n'expliciter que les termes du tenseur de Biot. Ces derniers découlent directement de l'équation (3.121). Dans le cas du schéma FIDD on a :

$$b_1^{\text{FIDD}} = \frac{16\rho(\nu^0 - 1) \left[9\nu^0 - 4\pi\rho(Z_b(1 - 2\nu^0) - Z_d(\nu^0 + 1)) \right]}{27(2\nu^0 - 1) - 36\rho \left[4(\nu^0 - 1)^2 + \pi(Z_b + Z_d)(2\nu^0 - 1) \right] + 16\pi\rho^2 \left[Z_b(2\nu^0 - 1)(8(\nu^0 - 1) + 3\pi Z_d) - 4\pi Z_d(1 - \nu^{0^2}) \right]}$$

$$b_3^{\text{FIDD}} = b_1^{\text{FIDD}} \left(\frac{9 - 9\nu^0 - 4\pi\rho(2Z_b(1 - 2\nu^0) + Z_d(1 + \nu^0))}{9\nu^0 - 4\pi\rho(2Z_b(2\nu^0 - 1) + Z_d(1 + \nu^0))} \right) \quad (3.136)$$

Dans le cas particulier ($\beta = 0, Z_b = Z_d = 0$) correspondant au schéma de Mori-Tanaka, ces expressions se simplifient et prennent les formes :

$$b_1^{\text{MT}} = \frac{16\rho(1 - \nu^0)\nu^0}{3(1 - 2\nu^0) + 16(1 - \nu^0)^2} ; b_3^{\text{MT}} = b_1^{\text{MT}} \frac{1 - \nu^0}{\nu^0} \quad (3.137)$$

Le module de Biot solide dans cette configuration isotrope transverse est obtenu par :

$$\frac{1}{N^{\text{hom}}} = \frac{(2b_1 + b_3)}{3\kappa^0} \quad (3.138)$$

Les **Figure 3.46** et **Figure 3.47** présentent les évolutions de b_1 et b_3 en fonction de la densité de microfissuration pour les schémas dilué, MT, IDD et FIDD. L'évolution de l'inverse du module de Biot solide correspondant est quand à elle montrée sur la **Figure 3.48**. On remarque que $b_3 > b_1$. L'effet de la fissuration sur le coefficient de Biot est beaucoup plus significatif dans la

direction perpendiculaire aux fissures que dans la direction parallèle aux microfissures pour tous les schémas étudiés, ce qui est normal. Pour le schéma IDD, la valeur limite physiquement admissible 1 est atteinte pour une densité de microfissuration $\rho = 0.35$. En revanche pour les schémas MT et FIDD on remarque que le coefficient de Biot transversal b_3 tend vers 1 lorsque la densité de microfissuration $\rho \rightarrow \infty$ tandis que le coefficient de Biot longitudinal tend vers $\nu^0 / 1 - \nu^0$ lorsque $\rho \rightarrow \infty$ (confère équation (3.137)).

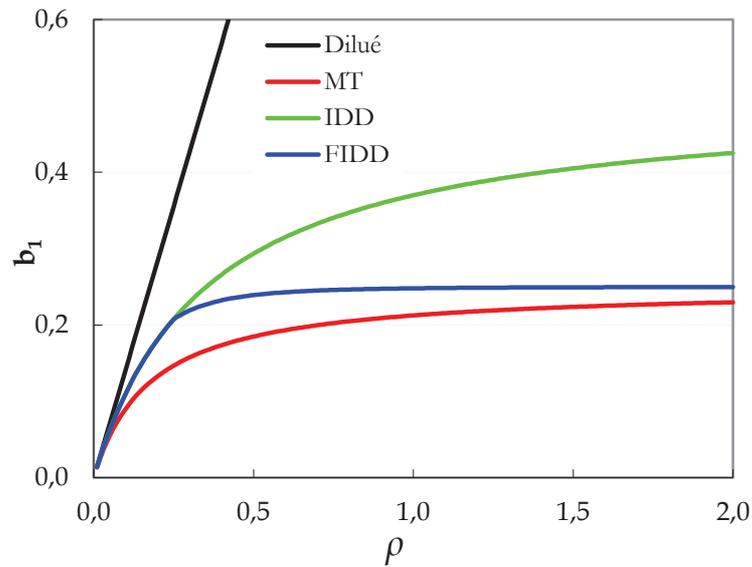


Figure 3.46 : Evolution du coefficient de Biot longitudinal b_1^{hom} en fonction de la densité de fissuration : comparaison des schémas dilué, MT, IDD et FIDD (Tognevi et al 2010).

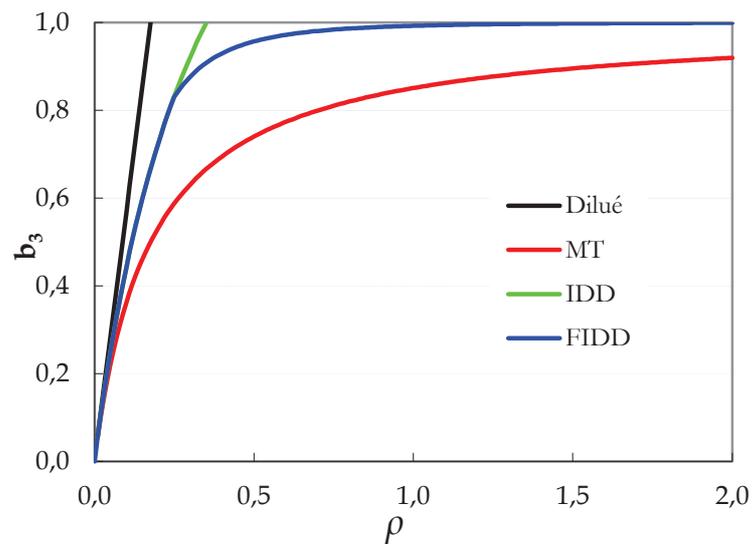


Figure 3.47 : Evolution du coefficient de Biot transversal b_3^{hom} en fonction de la densité de fissuration : comparaison des schémas Dilué, MT, IDD et FIDD (Tognevi et al 2010).

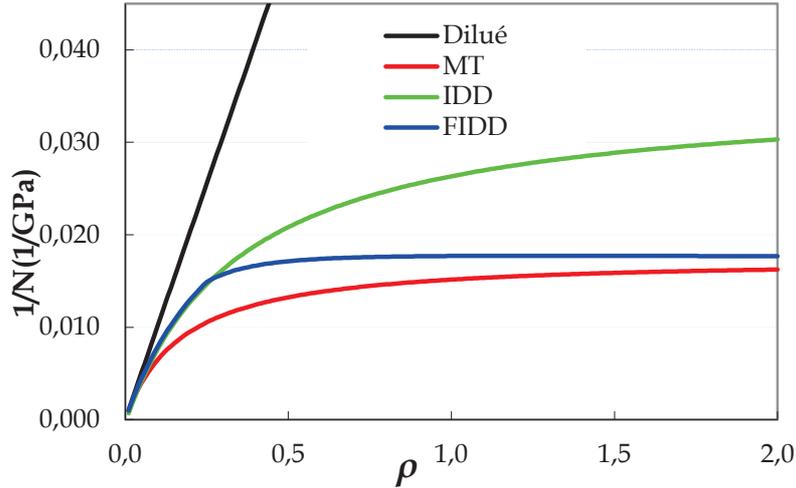


Figure 3.48 : Evolution de l'inverse du module de Biot solide en fonction de la densité de fissuration : comparaison des schémas dilué, MT, IDD et FIDD.

Remarquons au passage que cette limite ne dépend que du coefficient de Poisson de la matrice solide. Mais il y a lieu de douter de la validité physique de cette limite. En effet lorsque $\rho \rightarrow \infty$, le matériau est totalement endommagé et on peut s'attendre à ce que même le coefficient de Biot dans le sens parallèle aux fissures b_1 atteigne 1. Pour vérifier cette constatation nous allons considérer pour les fissures, une valeur du rapport d'aspect finie, mais suffisamment faible pour que les fissures restent des ellipsoïdes aplatis. L'intérêt dans cette approche réside dans le fait qu'on peut ainsi calculer la porosité réellement induite par la densité de microfissures, tandis que lorsque $\alpha \rightarrow 0$, on a aussi $\phi_c \rightarrow 0$. On considère donc trois rapports d'aspects $\alpha = 1.10^{-2}$, $\alpha = 1.10^{-3}$ et $\alpha = 5.10^{-4}$. Le tenseur $\alpha(\mathbb{I} - \mathbb{S}^E)^{-1}$ est reconsidéré à nouveau au lieu du tenseur \mathbb{T} introduit précédemment. La **Figure 3.49** présente l'évolution des coefficients de Biot b_1^{FIDD} et b_3^{FIDD} correspondant aux trois rapports d'aspect en fonction de la porosité induite ϕ_c et calculés avec le schéma FIDD. Ces deux paramètres tendent vers 1, lorsque la porosité induite atteint 1. On remarque également que plus le rapport d'aspect est petit, plus l'évolution des coefficients de Biot est rapide lorsque la porosité ϕ_c est faible. Ces résultats montrent qu'en pratique, bien que l'hypothèse du rapport d'aspect tendant vers 0 permette d'obtenir des estimations analytiques en fonction de la densité de microfissures faciles à manipuler, elle peut s'avérer être insuffisante. Lorsque la densité de microfissures est suffisamment élevée pour que la porosité induite soit non négligeable, la limite $\nu^0 / 1 - \nu^0$ n'est plus valable et l'approximation $\alpha \rightarrow 0$ n'est plus pertinente. Le domaine de validité de l'approche est dépassé. Il serait donc dans ce cas plus judicieux de considérer une valeur finie du rapport d'aspect et d'exprimer les variables directement en fonction de la porosité induite, permettant d'obtenir des évolutions plus réalistes.

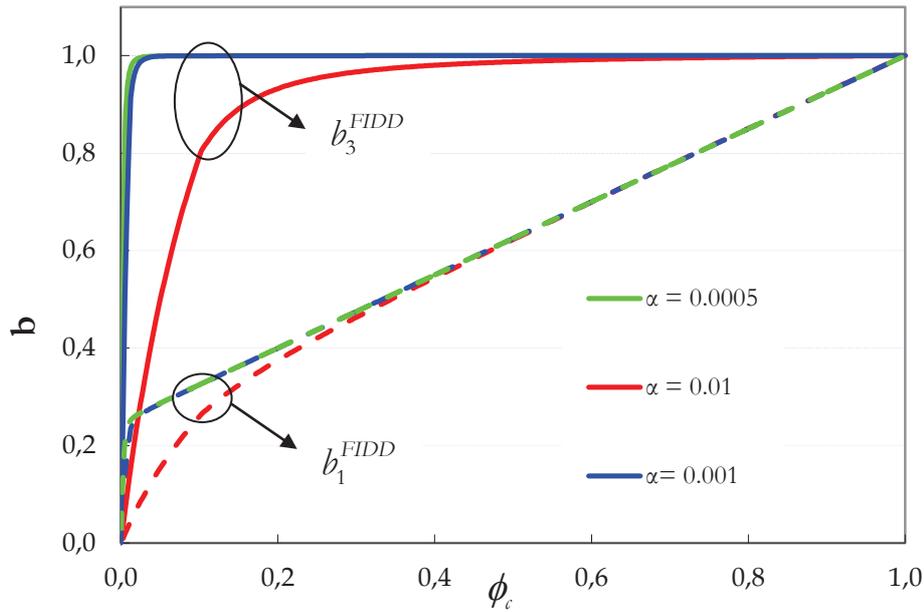


Figure 3.49 : Evolution des coefficients de Biot b_1^{FIDD} et b_3^{FIDD} en fonction de la porosité induite pour plusieurs valeurs du rapport d'aspect α (schéma F IDD).

De plus dans la plupart des cas en pratique, l'ouverture des fissures évolue en fonction du chargement et les propriétés de transfert comme la perméabilité y sont directement liées, d'où la nécessité de considérer des ouvertures de fissures.

La **Figure 3.50** présente l'évolution de l'inverse du module de Biot solide (schéma FIDD) en fonction de la porosité induite pour deux valeurs du rapport d'aspect $\alpha = 0.01$ et $\alpha = 0.001$. L'équation (3.138) donnant le module de Biot solide n'est plus valable dans ce cas puisque la porosité induite n'est plus négligeable. Le module de Biot solide prend la nouvelle forme :

$$\frac{1}{N^{FIDD}} = \frac{(2b_1 + b_3) - 3\phi_c}{3k^0} \quad (3.139)$$

et le module de Biot du milieu poreux devient :

$$\frac{1}{M^{FIDD}} = \frac{(2b_1 + b_3) - 3\phi_c}{3k^0} + \frac{\phi_c}{k_f} \quad (3.140)$$

D'une part on note que $1/N^{FIDD}$ augmente jusqu'à une valeur maximale pour une valeur de la porosité induite (plus faible dans le cas du rapport d'aspect $\alpha = 0.001$ que dans le cas de $\alpha = 0.01$), puis décroît jusqu'à 0 pour une porosité induite $\phi_c = 1$. Cette évolution est semblable à l'évolution du module de Biot solide d'un matériau poreux en fonction de la porosité (Huynh 2006). D'autre part la valeur maximale atteinte par $1/N^{FIDD}$ est plus élevée lorsque le rapport d'aspect considéré des microfissures est plus faible. En conséquence dans l'approche

micromécanique mise en œuvre, le choix d'un rapport d'aspect dans la modélisation des microfissures est crucial. Shao (2005) propose par exemple dans le cas des roches microfissurées le choix de $\alpha = 0.001$. Cette valeur sera retenue dans la suite dans le cas des microfissures non saturées.

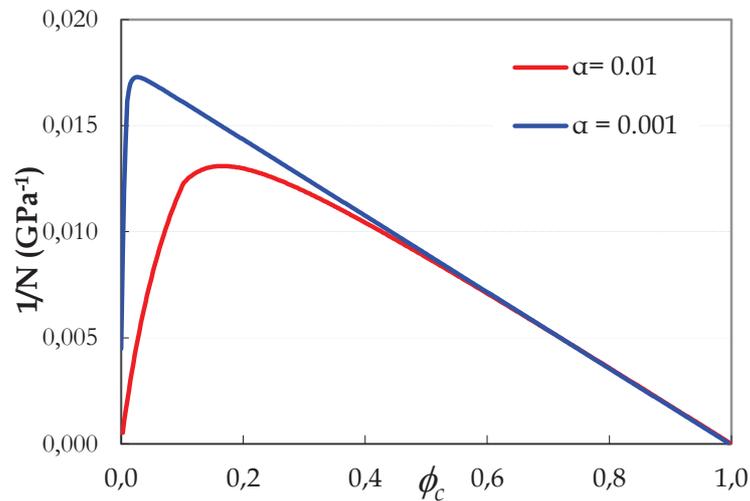


Figure 3.50 : Evolution du module de Biot solide pour deux valeurs du rapport d'aspect (Schéma FIDD).

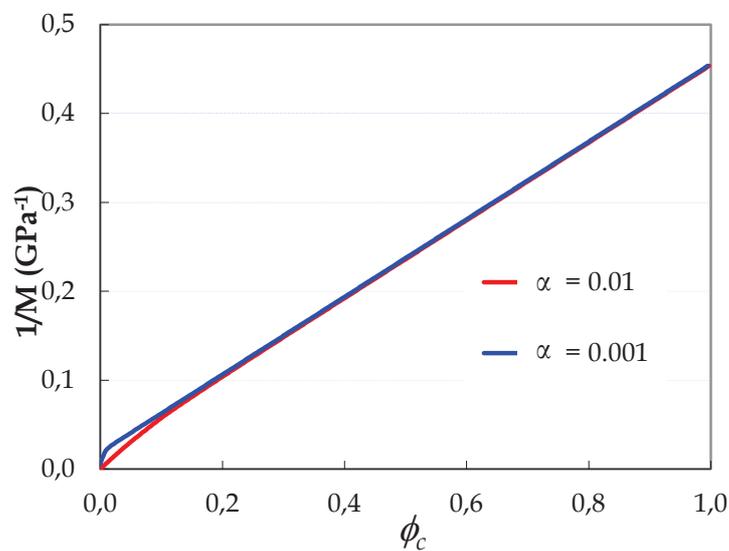


Figure 3.51 : Evolution du module de Biot poreux pour deux valeurs du rapport d'aspect (Schéma FIDD).

La **Figure 3.51** montre l'évolution du module de Biot du milieu poreux en fonction de la porosité induite. Le coefficient de compressibilité de l'eau est choisie égal à $k_f = 2.2 \text{ GPa}$. La fraction ϕ_c / k_f est prépondérante dans l'expression de $1/M^{\text{FIDD}}$, ce qui entraîne une évolution

quasi-linéaire pour les deux rapports d'aspect étudiés. Lorsque ϕ_c tend vers 1, comme on peut s'y attendre conformément à l'équation 3.140, on obtient $1/M^{FDD} = 1/\kappa_f = 0.45 \text{ GPa}^{-1}$.

III.8.2.3 Deux familles de fissures perpendiculaires

La configuration considérée ici est celle de deux familles de fissures dont les normales sont perpendiculaires. Il s'agit par exemple d'un double chargement en traction (**Figure 3.52**).

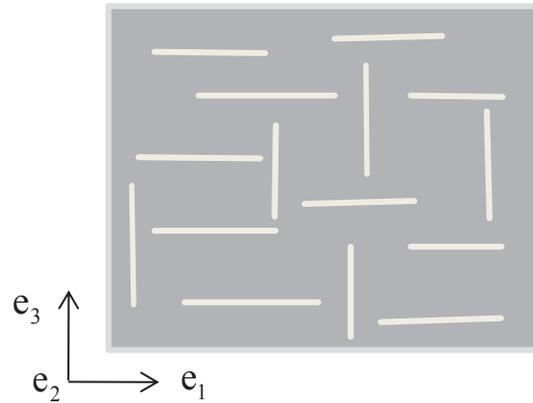


Figure 3.52 : Configuration orthotrope d'un matériau fissuré : deux familles de microfissures à normales perpendiculaires.

Dans cette configuration, le comportement à l'échelle macroscopique est orthotrope. Il s'agit dans ce cas de prendre en compte non plus une famille de microfissures comme dans les configurations précédentes mais deux familles dans l'écriture du tenseur d'élasticité homogénéisé. Les tenseurs \mathbb{T} et \mathbb{Z} correspondant aux deux familles de microfissures sont notés \mathbb{T}_1 , \mathbb{T}_3 et \mathbb{Z}_1 , \mathbb{Z}_3 . Le tenseur d'élasticité homogénéisé s'écrit alors :

$$\mathbb{C}^{FDD} = \mathbb{C}^0 : \left(\mathbb{I} + \frac{4\pi}{3} (\rho_1 \mathbb{T}_1 + \rho_3 \mathbb{T}_3) \left(\mathbb{I} - \frac{4\pi}{3} (\rho_1 \mathbb{Z}_1 + \rho_3 \mathbb{Z}_3) \right)^{-1} \right)^{-1} \quad (3.141)$$

D'une manière générale le comportement élastique du matériau orthotrope peut être décrit par les 9 modules indépendants à savoir :

- 3 modules d'Young E_1 , E_2 et E_3
- 3 coefficients de Poisson ν_{12} , ν_{13} et ν_{23}
- 3 modules de cisaillement μ_{12} , μ_{13} et μ_{23} .

La symétrie de la loi de comportement permet d'avoir :

$$\frac{\nu_{12}}{E_1} = \frac{\nu_{21}}{E_2} ; \frac{\nu_{13}}{E_1} = \frac{\nu_{31}}{E_3} ; \frac{\nu_{23}}{E_2} = \frac{\nu_{32}}{E_3}$$

On note ρ_1 la densité de microfissures dans la direction e_1 (fissures de normale perpendiculaire à e_1) et ρ_3 celle dans la direction e_3 . La **Figure 3.53** présente l'évolution des différents paramètres qui décrivent le comportement mécanique du matériau microfissuré en fonction de la somme des densités de microfissures dans les deux directions $\rho = \rho_1 + \rho_3$, dans le cas particulier où $\rho_3 = 2\rho_1$.

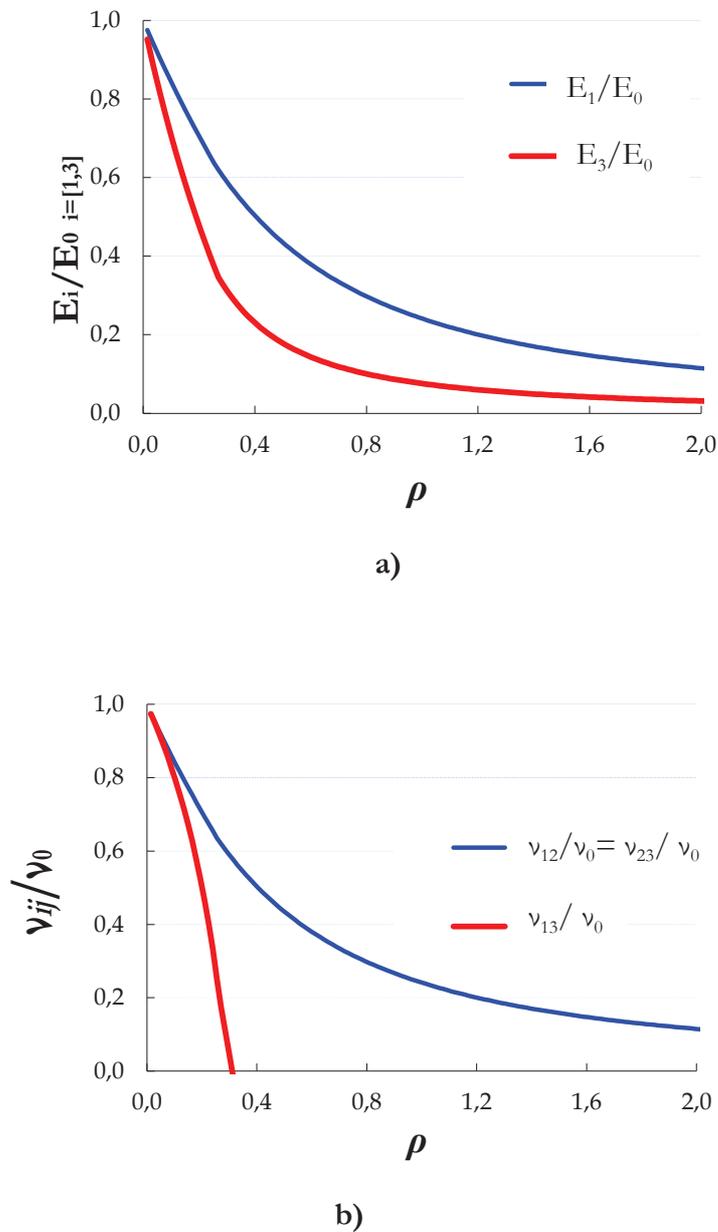


Figure 3.53 : Evolution des modules d'Young a), des coefficients de Poisson b) en fonction de la densité de microfissuration : cas du matériau orthotrope ($\rho_3 = 2\rho_1$)

Le module d'Young transversal E_2 n'est pas impacté par la fissuration. En effet comme nous l'avons déjà vu dans le cas d'une seule famille de microfissures parallèles, seul le module d'Young dans la direction normale est affecté par cette famille de microfissure. De fait ici ni la première famille de normale parallèle à la direction e_1 , ni celle de normale parallèle à la direction e_3 n'impacte le module d'Young dans la direction e_2 . Par contre E_1 et E_3 diminuent en fonction de la densité de microfissuration, E_3 plus rapidement que E_1 puisque $\rho_3 > \rho_1$. Les évolutions des coefficients de Poisson ν_{12} , ν_{13} et ν_{23} sont également présentées.

Le tenseur de Biot s'obtient à partir du tenseur d'élasticité comme dans les cas précédents. La **Figure 3.54** présente les évolutions des coefficients de Biot dans les directions e_1 , e_2 et e_3 en fonction de la somme des densités de microfissures dans les deux directions $\rho = \rho_1 + \rho_3$, dans le cas particulier où la densité de microfissures est la même dans les deux directions. On vérifie que le comportement redevient isotrope transverse ($b_1^{FIDD} = b_3^{FIDD}$) dans ce cas particulier. En revanche lorsqu'on considère la configuration initiale où le matériau est beaucoup plus fissuré dans le sens de la direction 3 que dans la direction 1, le comportement devient réellement orthotrope et les évolutions des coefficients de Biot dans les différentes directions sont présentées sur la **Figure 3.55**.

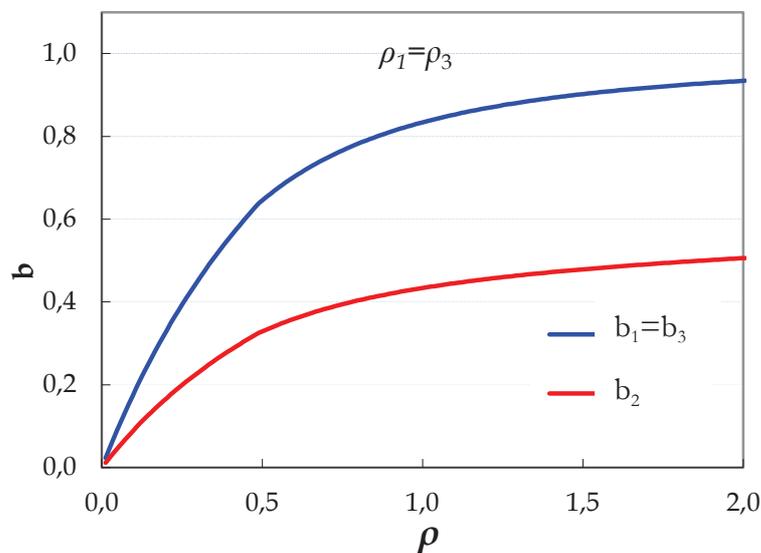


Figure 3.54 : Evolution des coefficients de Biot dans les directions 1, 2 et 3 dans la configuration orthotrope ($\rho_1 = \rho_3$)

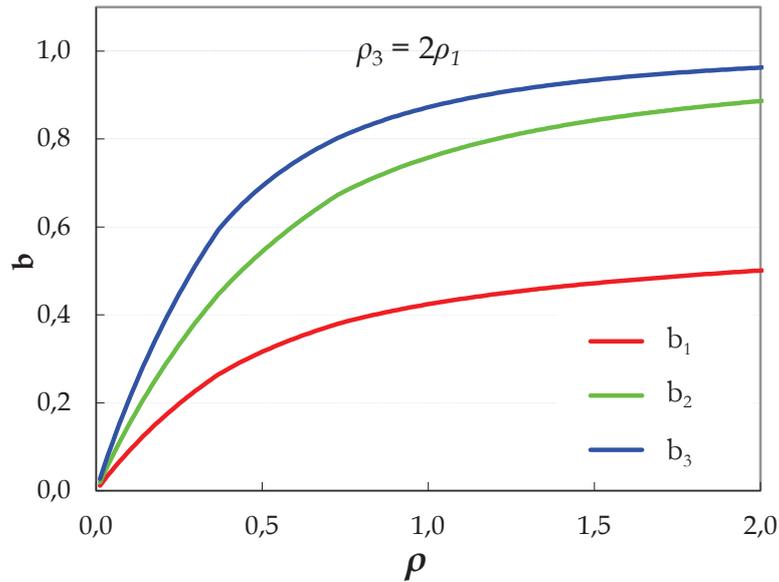


Figure 3.55 : Evolution des coefficients de Biot dans les directions 1, 2 et 3 dans la configuration orthotrope ($\rho_3 = 2\rho_1$).

A priori, on peut penser que les coefficients de Biot sont moins élevés dans ce cas-ci des deux familles de fissure que dans le cas précédent d'une famille de fissures, mais il faut remarquer qu'en abscisse des courbes c'est la somme des deux densités de microfissures. Les modules de Biot solide et de Biot poreux correspondant au comportement du matériau orthotrope sont montrés sur la **Figure 3.56**.

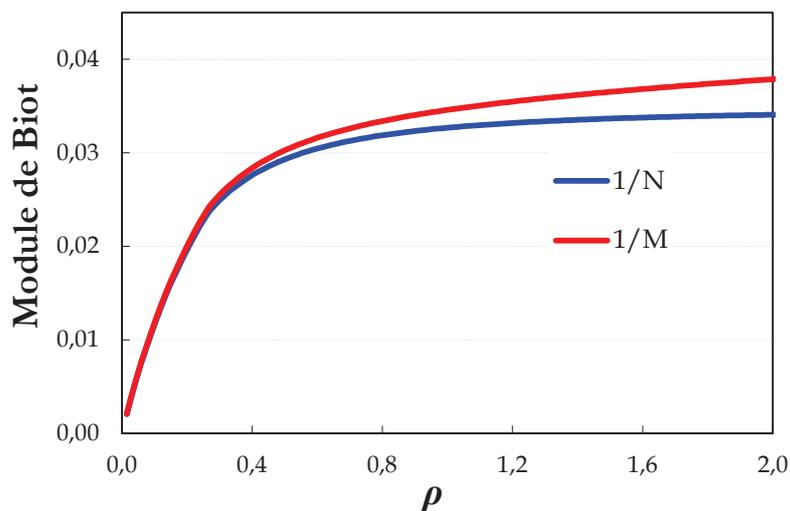


Figure 3.56 : Evolution des inverses du module de Biot solide et du module de Biot poreux en fonction de la densité de microfissuration (deux familles de microfissures perpendiculaires).

III.9 Couplage fissuration / paramètres hydromécaniques en conditions partiellement saturées : application au béton BO

On étudie dans cette partie les paramètres hydromécaniques du matériau microfissuré en conditions partiellement saturées. Comme dans le cas du matériau microfissuré en conditions saturées on considère que la taille caractéristique des microfissures permet de supposer qu'elles sont immergées dans la matrice homogène du matériau obtenu à l'échelle III de la représentation multi-échelle (**Figure 3.57**).

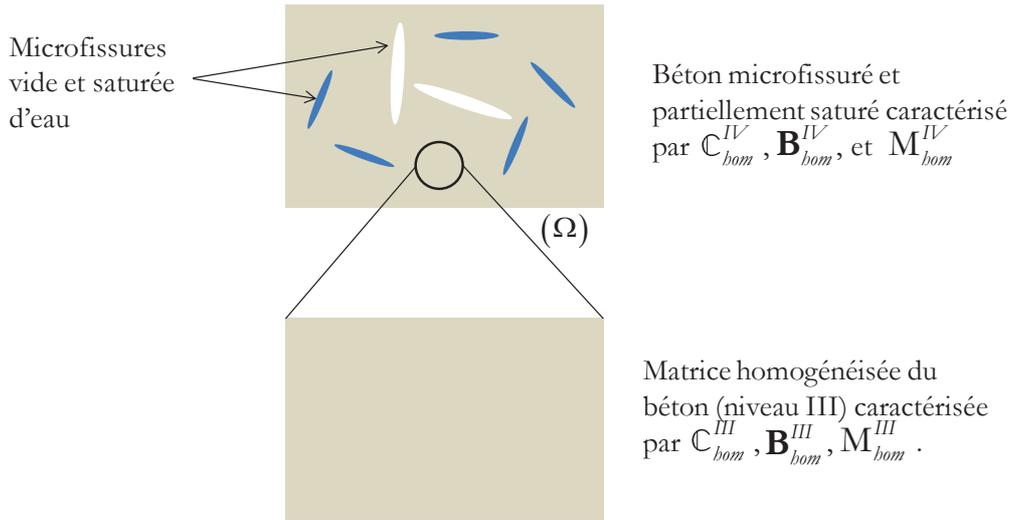


Figure 3.57 : Représentation schématique du béton microfissuré (Niveaux III et IV).

Dans la section précédente on a considéré pour simplifier que la matrice homogène du niveau III est non poreuse. Dans cette section on étend cette approche au cas du matériau Béton BO. Celui-ci est isotrope et caractérisé par le tenseur d'élasticité \mathbb{C}_{hom}^{III} , le tenseur de Biot \mathbf{B}_{hom}^{III} et le module de Biot poreux M_{hom}^{III} . On rappelle que ces paramètres ont été déterminés dans la section III.6 dans le cas saturé et dans la section III.7 dans le cas partiellement saturé. On commence dans un premier temps par déterminer le coefficient et le module de Biot du niveau IV en supposant que le matériau est saturé (les pores et les fissures sont remplis d'eau). La loi de comportement macroscopique au niveau IV s'écrit :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma} &= \mathbb{C}_{hom}^{IV} : \mathbf{E} - \mathbf{B}_{hom}^{IV} P \\ \phi - \phi_0 &= \mathbf{B}_{hom}^{IV} : \mathbf{E} + \frac{P}{N_{hom}^{IV}} \end{aligned} \quad (3.142)$$

Le problème posé est le problème classique du volume élémentaire représentatif Ω soumis à la déformation macroscopique \mathbf{E} et à la précontrainte P (confère chapitre II). On fait appel au théorème de Levin permettant de décomposer le problème en deux sous problèmes élémentaires.

Le premier problème élémentaire P' correspond à celui posé sur le VER en l'absence de précontrainte, lorsqu'il est soumis à la déformation macroscopique $\mathbf{E} : P'(\mathbf{E}, P=0)$. La solution de ce problème permet de déterminer le tenseur d'élasticité \mathbb{C}_{hom}^{IV} et le tenseur de Biot \mathbf{B}_{hom}^{IV} . La contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}$ est la moyenne volumique des contraintes microscopiques $\boldsymbol{\sigma}(\underline{x})$ sur l'ensemble du VER. Soit Ω_m le domaine occupé par la matrice homogène et Ω_c celui occupé par les microfissures. La contrainte macroscopique s'écrit (Dormieux 2006) :

$$\boldsymbol{\Sigma}' = \langle \boldsymbol{\sigma}'(\underline{x}) \rangle_{\Omega} = \langle \boldsymbol{\sigma}'(\underline{x}) \rangle_{\Omega_m} = (1-\phi_c) \mathbb{C}_{hom}^{III} : \mathbb{A}_m : \mathbf{E} = \mathbb{C}_{hom}^{IV} : \mathbf{E} \quad (3.143)$$

avec \mathbb{A}_m le tenseur de localisation de la déformation de la matrice homogène. On sait de plus que $(1-\phi_c)\mathbb{A}_m + \phi_c\mathbb{A}_c = \mathbb{I}$, ce qui permet d'écrire :

$$\mathbb{C}_{hom}^{IV} = \mathbb{C}_{hom}^{III} : (\mathbb{I} - \phi_c\mathbb{A}_c) \quad (3.144)$$

avec \mathbb{A}^c le tenseur de localisation des microfissures.

La variation de porosité totale à l'échelle IV est la somme des variations de porosité dans les domaines Ω_m et Ω_c . On a (Bary 2011) :

$$\begin{aligned} [(\phi - \phi_0)^m]' &= (1-\phi_c) \mathbf{B}_{hom}^{III} : \boldsymbol{\varepsilon}'_m & \text{dans } \Omega_m \\ [(\phi - \phi_0)^c]' &= \phi_c \mathbf{1} : \boldsymbol{\varepsilon}'_c & \text{dans } \Omega_c \end{aligned} \quad (3.145)$$

avec $\boldsymbol{\varepsilon}'_m$ et $\boldsymbol{\varepsilon}'_c$ respectivement les déformation moyennes dans Ω_m et Ω_c . En se servant des relations $\boldsymbol{\varepsilon}'_m = \mathbb{A}_m : \mathbf{E}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}'_c = \mathbb{A}_c : \mathbf{E}$ on peut écrire la variation totale de porosité sous la forme :

$$[(\phi - \phi_0)]' = (1-\phi_c) \mathbf{B}_{hom}^{III} : \mathbb{A}_m : \mathbf{E} + \phi_c \mathbf{1} : \mathbb{A}_c : \mathbf{E} \quad (3.146)$$

Par identification à l'équation (3.142) le tenseur de Biot s'en déduit (Dormieux et al, 2006) :

$$\mathbf{B}_{hom}^{IV} = \mathbf{B}_{hom}^{III} : (\mathbb{I} - \phi_c\mathbb{A}_c) + \phi_c \mathbf{1} : \mathbb{A}_c \quad (3.147)$$

Le tenseur \mathbf{B}_{hom}^{III} étant isotrope, lorsque les microfissures sont orientées aléatoirement, le tenseur \mathbf{B}_{hom}^{IV} se réduit au coefficient b_{hom}^{IV} qui s'écrit :

$$b_{hom}^{IV} = b_{hom}^{III} (1 - \phi_c A_c^b) + \phi_c A_c^b \quad (3.148)$$

avec A_c^b le coefficient hydrostatique du tenseur \mathbb{A}_c .

Le second problème correspond à la configuration du VER soumis à la précontrainte P en l'absence de déformation macroscopique $P''(\mathbf{E}=\mathbf{0}, P)$. Sa solution permet de déterminer le module de Biot solide.

La variation de la porosité dans ce cas s'écrit (Bary 2011) :

$$[(\phi - \phi_0)]'' = (1 - \phi_c) \left(\mathbf{B}_{\text{bom}}^{\text{III}} : \boldsymbol{\varepsilon}_m'' + \frac{P}{N_{\text{bom}}^{\text{III}}} \right) + \phi_c \mathbf{1} : \boldsymbol{\varepsilon}_m'' \quad (3.149)$$

Comme $(1 - \phi_c) \boldsymbol{\varepsilon}_m'' + \phi_c \boldsymbol{\varepsilon}_c'' = \mathbf{0}$, on peut alors réécrire la variation de porosité sous la forme :

$$[(\phi - \phi_0)]'' = (\mathbf{B}_{\text{bom}}^{\text{III}} - \mathbf{1}) : (1 - \phi_c) \boldsymbol{\varepsilon}_m'' + (1 - \phi_c) \frac{P}{N_{\text{bom}}^{\text{III}}} \quad (3.150)$$

Il s'agit maintenant d'éliminer de cette dernière équation le terme $\boldsymbol{\varepsilon}_m''$. On utilise pour cela la contrainte macroscopique qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma}'' &= \langle \boldsymbol{\sigma}''(\underline{x}) \rangle_{\Omega_m} + \langle \boldsymbol{\sigma}''(\underline{x}) \rangle_{\Omega_p} \\ &= (1 - \phi_c) (\mathbb{C}_{\text{bom}}^{\text{III}} : \boldsymbol{\varepsilon}_m'' - \mathbf{B}_{\text{bom}}^{\text{III}} P) - \phi_c P \mathbf{1} = -\mathbf{B}_{\text{bom}}^{\text{IV}} P \end{aligned} \quad (3.151)$$

d'où l'on tire :

$$(1 - \phi_c) \boldsymbol{\varepsilon}_m'' = (\mathbb{C}_{\text{bom}}^{\text{III}})^{-1} : ((1 - \phi_c) \mathbf{B}_{\text{bom}}^{\text{III}} + \phi_c \mathbf{1} - \mathbf{B}_{\text{bom}}^{\text{IV}}) P \quad (3.152)$$

En l'introduisant dans l'équation de la porosité on a :

$$[(\phi - \phi_0)]'' = (\mathbf{B}_{\text{bom}}^{\text{III}} - \mathbf{1}) : (\mathbb{C}_{\text{bom}}^{\text{III}})^{-1} : ((1 - \phi_c) \mathbf{B}_{\text{bom}}^{\text{III}} + \phi_c \mathbf{1} - \mathbf{B}_{\text{bom}}^{\text{IV}}) P + (1 - \phi_c) \frac{P}{N_{\text{bom}}^{\text{III}}} \quad (3.153)$$

Par identification le module de Biot solide s'en déduit par :

$$\frac{1}{N_{\text{bom}}^{\text{IV}}} = \frac{1 - \phi_c}{N_{\text{bom}}^{\text{III}}} + (\mathbf{B}_{\text{bom}}^{\text{III}} - \mathbf{1}) : (\mathbb{C}_{\text{bom}}^{\text{III}})^{-1} : ((1 - \phi_c) \mathbf{B}_{\text{bom}}^{\text{III}} + \phi_c \mathbf{1} - \mathbf{B}_{\text{bom}}^{\text{IV}}) \quad (3.154)$$

Dans le cas des microfissures orientées aléatoirement l'expression devient (Bary, 2011) :

$$\frac{1}{N_{\text{bom}}^{\text{IV}}} = \frac{1 - \phi_c}{N_{\text{bom}}^{\text{III}}} + \frac{b_{\text{bom}}^{\text{III}} - 1}{k_{\text{bom}}^{\text{III}}} ((1 - \phi_c) b_{\text{bom}}^{\text{III}} + \phi_c - b_{\text{bom}}^{\text{IV}}) \quad (3.155)$$

Le module de Biot poreux s'écrit donc :

$$\frac{1}{M_{\text{bom}}^{\text{IV}}} = \frac{1 - \phi_c}{N_{\text{bom}}^{\text{III}}} + \frac{b_{\text{bom}}^{\text{III}} - 1}{k_{\text{bom}}^{\text{III}}} ((1 - \phi_c) b_{\text{bom}}^{\text{III}} + \phi_c - b_{\text{bom}}^{\text{IV}}) + \frac{\phi_c + \phi_p}{k_{\text{f}}} \quad (3.156)$$

Afin d'obtenir les évolutions du coefficient et du module de Biot en conditions non saturées, il convient de déterminer les saturations partielles des deux domaines poreux et microfissuré. On fait l'hypothèse que les microfissures du fait de leur taille, seront les premières à se désaturer au cours d'un processus de drainage. Inversement les pores seront remplis en premier au cours d'un processus d'imbibition. Cette hypothèse permet d'écrire les degrés de saturation du domaine poreux ξ_p et du domaine microfissuré ξ_c sous les formes (Bary 2011) :

$$\begin{aligned}\xi_p &= \left(1 + \frac{\phi_p}{\phi_c}\right) S_l (1 - H(S_l - S_p)) + H(S_l - S_p) \\ \xi_c &= \left[\left(1 + \frac{\phi_p}{\phi_c}\right) S_l - \frac{\phi_p}{\phi_c}\right] H(S_l - S_p)\end{aligned}\quad (3.157)$$

avec H la fonction de Heaviside. Le degré de saturation S_p correspond à la configuration du matériau où toutes les microfissures sont vides et les pores remplis d'eau (Bary 2011) :

$$S_p = \frac{\phi_p}{\phi_p + \phi_c} \quad (3.158)$$

Les paramètres en conditions partiellement saturées sont donc obtenus en pondérant les contributions des deux domaines poreux et microfissurés respectivement par ξ_p et ξ_c . Par exemple dans le cas des microfissures orientés aléatoirement le coefficient de Biot en conditions partiellement saturées $b_{hom}^{IV,us}$ s'écrit :

$$b_{hom}^{IV,us} = b_{hom}^{III}(\xi_p) (1 - \xi_c \phi_c A_c^b) + \xi_c \phi_c A_c^b \quad (3.159)$$

où $b_{hom}^{III}(\xi_p)$ est le coefficient de Biot à l'échelle III en conditions partiellement saturées. On retrouve évidemment l'équation (3.148) dans le cas du matériau saturé ($\xi_p = \xi_c = 1$). De la même manière le module de Biot non saturé $M_{hom}^{IV,us}$ vaut :

$$\frac{1}{M_{hom}^{IV,us}} = \frac{1 - \phi_c}{N_{nom}^{III,us}} + \frac{b_{hom}^{III,us} - 1}{k_{hom}^{III}} \left((1 - \phi_c) b_{hom}^{III,us} + \xi_c \phi_c - b_{hom}^{IV,us} \right) + \frac{\xi_c \phi_c + \xi_p \phi_p}{k_f} \quad (3.160)$$

L'indice us indique la valeur en conditions non saturées du paramètre sur lequel il est placé. La **Figure 3.58** présente l'évolution du coefficient de Biot en fonction de la saturation pour différentes valeurs de la densité de microfissuration lorsque les microfissures sont orientées aléatoirement. On rappelle que la porosité du béton BO est de 0.12 et que le rapport d'aspect des microfissures est fixé à $\alpha = 1.10^{-3}$. La courbe noire est celle du matériau non fissuré. On peut remarquer deux évolutions distinctes sur chacune des courbes présentées. L'évolution du coefficient de Biot fissuré en fonction de la saturation est semblable à l'évolution du même coefficient du matériau sain jusqu'à la valeur S_p du degré de saturation. Notons que pour les densités de microfissuration étudiées S_p est proche de 1. Ensuite dès que les fissures

commencent à être remplies d'eau, le coefficient de Biot augmente rapidement, de façon linéaire pour atteindre sa valeur dans le cas du matériau fissuré et saturé. Ces évolutions montrent l'influence du couplage saturation/fissuration sur un paramètre comme le coefficient de Biot. Notons que si l'on négligeait la quantité d'eau adsorbée dans le matériau, on observerait une courbe bilinéaire puisque dans ce cas le coefficient de Biot du matériau sain évoluerait linéairement avec le degré de saturation (Bary 2011).

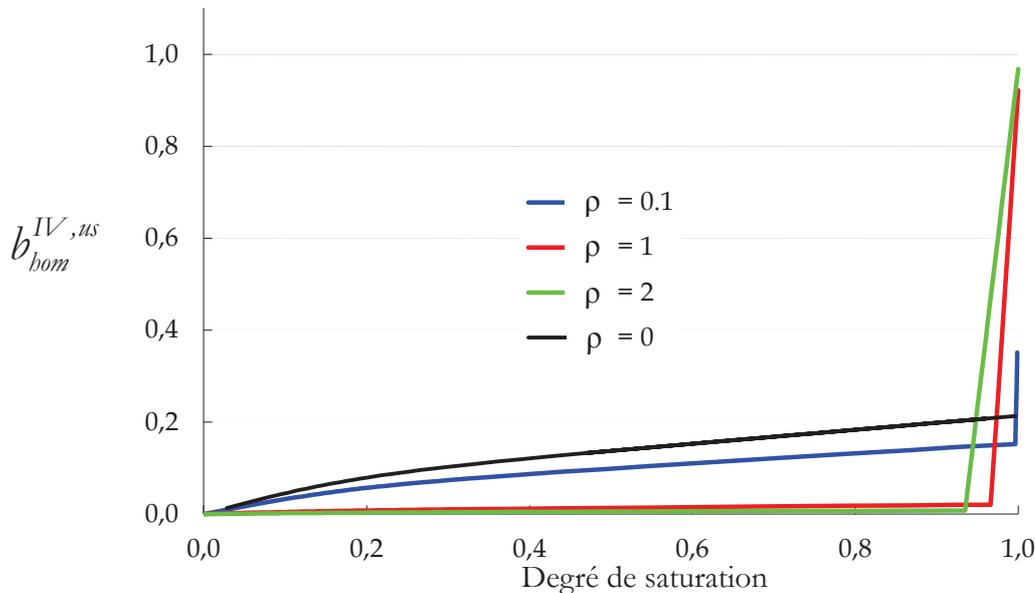


Figure 3.58 : Evolution du coefficient de Biot en fonction du degré de saturation pour différentes valeurs de densité de microfissuration (cas de microfissures orientées aléatoirement).

On montre sur la **Figure 3.59** pour les mêmes valeurs de densité de fissuration l'évolution du module de Biot en fonction du degré de saturation. Tout comme pour le coefficient de Biot les courbes ont la même allure que dans le cas du matériau sain jusqu'à la valeur S_p du degré de saturation puis décroissent linéairement pour atteindre les valeurs du matériau fissuré en conditions saturées. L'allure linéaire qu'on observe près de $S_l = 1$ sur la figure du bas correspond aux phases de désaturation ou de resaturation des microfissures, comme on a pu l'observer pour le coefficient de Biot. Sur la **Figure 3.60** on présente les coefficients de Biot dans les directions e_1 et e_3 dans le cas de microfissures parallèles et orientées dans la direction e_1 . Ces évolutions sont similaires à celles obtenues dans le cas de microfissures orientées aléatoirement, les valeurs à saturation étant inférieures aux valeurs obtenues dans ce cas. Comme on peut s'y attendre les valeurs à saturation du coefficient de biot b_3 sont supérieures à celles de b_1 .

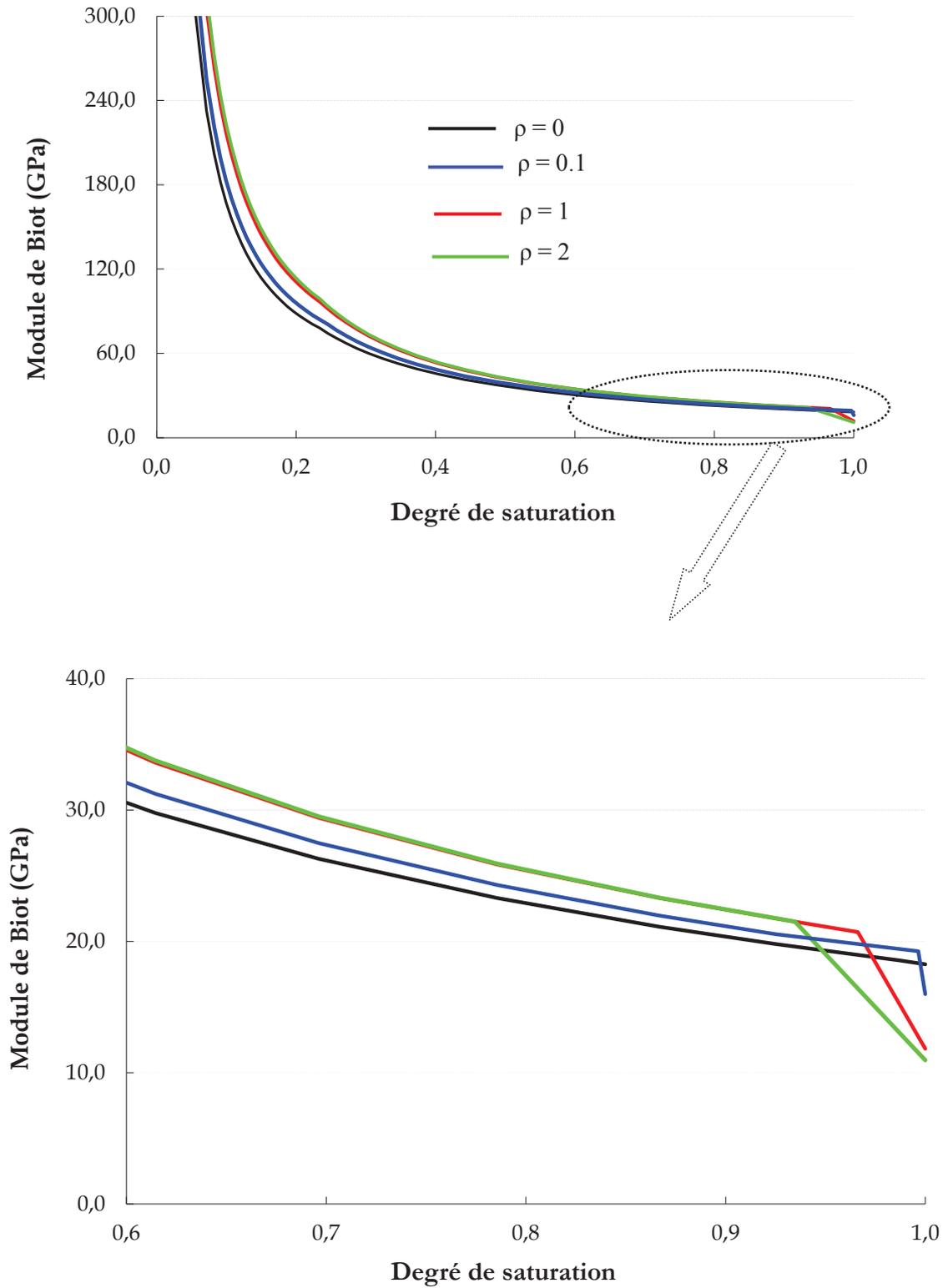
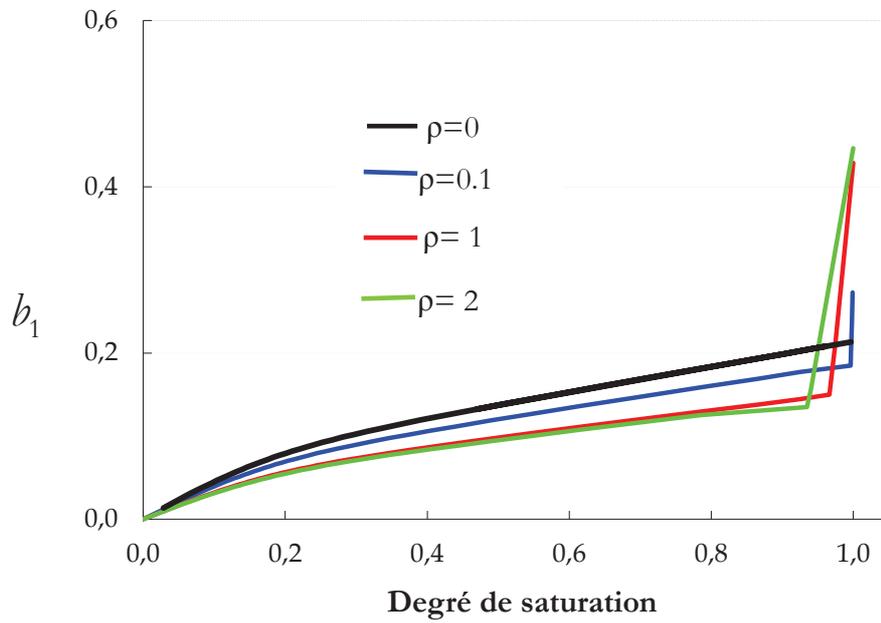
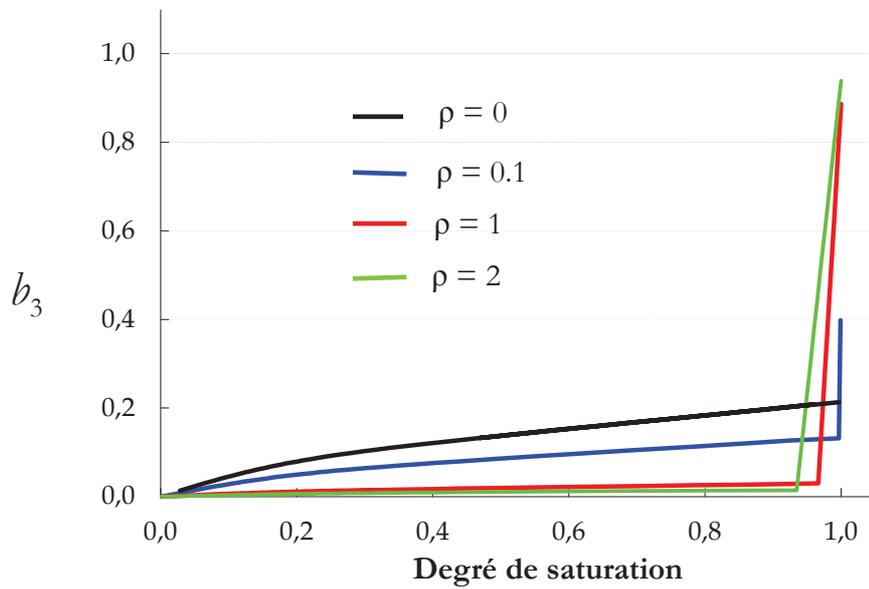


Figure 3.59 : Evolution du module de Biot en fonction du degré de saturation pour différentes valeurs de densité de microfissuration (cas de microfissures orientées aléatoirement).



a)



b)

Figure 3.60 : Evolution du coefficient de Biot en fonction du degré de saturation pour différentes valeurs de densité de microfissuration (cas de microfissures parallèles).

III.10 Conclusion

Nous avons développé un modèle d'estimation des paramètres mécaniques et hydromécaniques des matériaux cimentaires qui s'appuie sur le modèle d'hydratation de Jennings. Les paramètres d'entrée en termes de propriétés mécaniques des différents constituants sont obtenus par des techniques de nano-indentation et sont tirés de la littérature. L'approche multi-échelle choisie a permis de confronter le modèle à une large gamme de matériaux. La morphologie des matériaux cimentaires n'étant pas clairement élucidée dans la littérature, nous avons été amenés à faire un certain nombre d'hypothèses notamment sur la forme des hydrates et de la porosité. La comparaison de nos estimations et des valeurs expérimentales permet de conclure sur la qualité de la modélisation. La prise en compte de la couche d'eau adsorbée a montré notamment dans le cas du béton BO que l'hypothèse souvent admise selon laquelle le coefficient de Biot varie linéairement avec le degré de saturation n'est pas tout à fait pertinente surtout à de faibles humidités relatives. Nous avons également étudié les évolutions des propriétés macroscopiques du matériau en présence de fissuration notamment l'impact des microfissures sur le coefficient et le module de Biot, et ceci toujours à l'aide des techniques de changement d'échelle. L'anisotropie induite par l'orientation des microfissures est susceptible d'avoir des impacts non négligeables sur l'ensemble des propriétés impliquées dans les problèmes THM. La prise en compte des orientations préférentielles permet de décrire plus précisément les effets des microfissures sur les paramètres mécaniques, hydromécaniques et de transport. La méthode de changement d'échelle que nous avons utilisée permet, une fois qu'une représentation de la microstructure a été effectuée et qu'un schéma a été adopté, d'estimer rigoureusement les évolutions des différents paramètres physiques. De l'étude comparative que nous avons effectuée sur les schémas d'homogénéisation dilué, IDD, MT et FIDD il ressort que les deux schémas qui se rapprochent le plus des valeurs réalistes sont le schéma MT et FIDD. De plus, le schéma FIDD permet de prendre en compte des densités de fissuration élevées et des distributions non sphériques des fissures, ce que le modèle MT ne fait que d'une certaine manière. Des valeurs expérimentales ou numériques peuvent permettre de vérifier la précision de ces schémas dans le cas des paramètres hydro-mécaniques impactés par la fissuration. Enfin le couplage saturation/fissuration a été mis en évidence sur la base d'une hypothèse de désaturation-resaturation des microfissures (les microfissures sont les premières à se désaturer dans le cas d'un drainage et les dernières à se resaturer dans le cas d'une imbibition). Les résultats ont montré une influence significative de la fissuration sur le coefficient de Biot dans les conditions du matériau non saturé. Ce paramètre intervient directement dans la loi de comportement macroscopique. La contrainte macroscopique peut donc être reliée à l'état d'endommagement et de la saturation à l'aide d'expressions analytiques. On voit ainsi l'intérêt de la technique de changement d'échelle. Le prochain objectif sera d'implanter les paramètres impactés par la fissuration et la saturation dans le modèle THMs. Dans le chapitre suivant nous proposons une analyse de la fissuration à l'échelle de la structure grâce à une méthode de réanalyse éléments finis/éléments discrets. Une première simulation éléments finis permet d'estimer globalement une zone endommagée. On procède ensuite à un raffinement de la fissuration par un calcul éléments discrets.

Chapitre IV

Couplage éléments finis/éléments discrets

IV.1 Introduction

Dans ce chapitre on s'intéresse à décrire numériquement de façon plus fine que les modèles macroscopiques existants, la fissuration du béton soumis à des chargements couplés thermo-hydro-mécaniques. En l'état actuel des recherches la fissuration reste assez bien maîtrisée en termes d'espacement de fissures sur des structures élémentaires type tirant, poutres en flexion, mais les outils dont on dispose ne permettent pas toujours de déterminer un état représentatif de la fissuration lorsqu'il s'agit d'ouvrages spéciaux et où les chargements sont plus complexes (solllicitations thermiques et hydriques sévères). A ce titre le projet ANR MEFISTO lancé en 2008, visant à étudier la fissuration et le retrait des ouvrages spéciaux en béton et dont l'objectif est de fournir des outils fiables et robustes capables d'estimer et de prédire l'état de fissuration liée à l'endommagement des éléments de structure en béton et béton précontraint en est une excellente illustration.

Les modèles existants basés sur les Eléments Finis (EF) pour la plupart, simulent le comportement du béton à l'échelle macroscopique, simulations à l'issue desquelles on obtient globalement une zone endommagée sans avoir une description fine de la fissure c'est-à-dire avoir accès à des ouvertures de fissures ou des chemins de fissuration. Il existe plusieurs stratégies concernant les éléments finis pour introduire une fissure, dont les plus notables sont la méthode des éléments cohésifs (Molinari et al. 2007) ou encore la méthode XFEM (Moës et al. 1999). Il faut un développement numérique conséquent pour introduire des discontinuités cinématiques (fissures) dans ces modèles continus. Il n'est donc pas évident avec ces modèles d'établir une relation directe entre l'état d'endommagement de la structure et son état de fissuration. Une étude bibliographique sur les modèles de couplage endommagement/perméabilité a été faite permettant d'illustrer les limites dans le cas de l'estimation de la perméabilité des matériaux fissurés. Nous avons donc fait le choix d'un code d'Eléments Discrets (ED) développé au laboratoire depuis plusieurs années pour l'étude de la fissuration dans ce présent travail. La méthode des éléments discrets représente une alternative aux modèles continus. Cette méthode se base sur une représentation du matériau non pas à l'échelle macroscopique mais à une échelle proche de la microstructure du matériau (Delaplace et Desmorat 2007). Les modèles basés sur les éléments discrets consistent en des assemblages de particules déformables ou non, reliées entre elles par des lois simples permettant de représenter le comportement macroscopique du matériau. Cette méthode est adaptée à un matériau hétérogène comme le béton puisque la variabilité spatiale du matériau peut être naturellement intégrée aux modèles. De plus cette approche paraît attractive dans le cas de notre étude car la fissuration est représentée explicitement, permettant une analyse directe de la rugosité « mésoscopique » et de l'ouverture de fissure. En revanche le coût de calcul prohibitif dû le plus souvent à une discrétisation fine, rend quasi impossible la simulation des structures de grande taille, ce qui constitue une limitation à ce genre d'approches. On se propose donc dans ce chapitre de tirer profit des modèles basés sur les ED et EF tout en s'affranchissant de leurs inconvénients respectifs. Tout d'abord la structure globale considérée homogène sera simulée par un modèle thermo-hydro-mécanique (modèle "macro") s'appuyant sur un critère d'endommagement classique et basé sur les EF afin d'obtenir une réponse globale de l'ensemble de la structure sur un pas de calcul. Par la suite la zone endommagée, une fois identifiée, sera ré-analysée par le modèle ED (modèle "micro") permettant d'avoir accès aux ouvertures de fissures.

Le tenseur de perméabilité et les autres paramètres directement impactés par la fissuration (Module d'Young, coefficient de Biot, Module de Biot etc...) seront réinjectés dans le modèle macro pour le pas de calcul suivant. Seule la perméabilité est réinjectée pour l'instant et les perspectives à court terme seraient de faire de même pour les autres paramètres. Les couplages entre les EF et ED sont assez fréquents dans la littérature (Delaplace et al. 2003; Delaplace et Desmorat 2007; Cusatis et al. 2010) mais l'originalité de ce travail réside dans le fait qu'il soit appliqué à des cas de chargements THM.

Dans ce chapitre, on commence tout d'abord par faire une analyse critique des méthodes de couplage entre l'endommagement basé sur les éléments finis et la perméabilité. La méthode des éléments discrets qui représente une alternative à ces méthodes et que nous avons utilisée sera présentée brièvement. Ensuite une analyse bibliographique des procédures de couplage entre les éléments discrets et les éléments finis dans la littérature sera faite nous permettant de conclure sur celle qui a été choisie dans le cadre de cette étude. Enfin, les simulations qui ont été faites dans les cas de chargements purement mécanique, hydromécanique et THM seront présentées et analysées.

IV.2 Retour sur le comportement mécanique du béton

Les propriétés de transfert du béton, la perméabilité notamment sont fonctions de son état mécanique. Dans ce qui suit on rappelle brièvement les caractéristiques principales du comportement mécanique du béton.

IV.2.1 Comportement en traction uniaxiale

Lorsqu'une sollicitation en traction est appliquée à un volume de béton, on assiste à une évolution complexe de sa microstructure. La **Figure 4.1** représente la réponse d'un essai de traction : au début du chargement, jusqu'à environ 50-60% de la résistance en traction f_t , le comportement est quasi-linéaire. Ensuite le module d'Young commence à diminuer lentement jusqu'au pic de contrainte. Cette phase correspond à l'apparition de microfissuration diffuse dans le matériau. Lorsque le pic de contrainte est atteint, les microfissures progressent et se coalescent sous la forme d'une macrofissure. La capacité de résistance du matériau diminue brutalement (phase d'adoucissement) et évolue vers une contrainte résiduelle. Lors de cycles charge/décharge il apparaît des phénomènes hystérétiques caractérisés par des boucles. Ces phénomènes sont interprétés par les frottements entre les lèvres des fissures créées. En fait la propagation des fissures dans la pâte de ciment se fait en général en contournant les granulats. La fissure peut donc ne pas être perpendiculaire à la direction de chargement, ce qui provoque les frottements internes qui se traduisent par des déformations permanentes. Notons pour finir que la réalisation d'essais de traction directe sur des éprouvettes en béton n'est pas aisée, du fait de sa faible résistance en traction. Les essais de traction par fendage, les essais de flexion 4 points se substituent couramment aux essais de traction directe si par exemple on ne s'intéresse qu'à la résistance en traction.

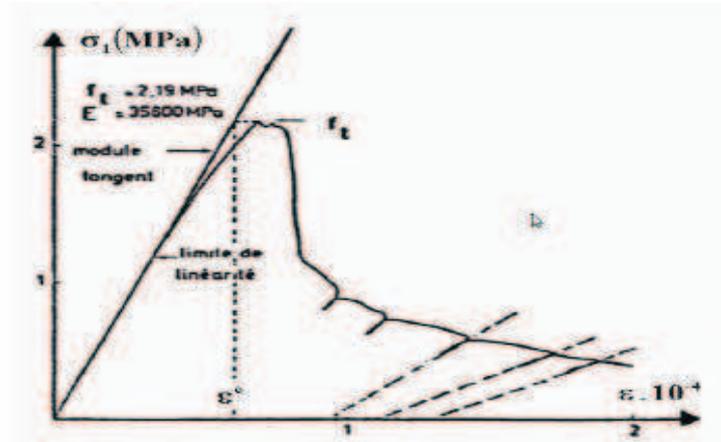


Figure 4.1 : Réponse en traction d'un béton ordinaire (Terrien 1980)

IV.2.2 Comportement en compression uniaxiale

Les essais de compression sont bien plus faciles à réaliser que ceux de traction. Ils sont plus répandus pour estimer les caractéristiques générales de résistance du béton. D'une manière générale le comportement en compression n'est pas très différent de celui en traction : la réponse est quasi linéaire jusqu'à 30-50% de la charge ultime en compression f_c . Dans la deuxième phase il y a apparition de la non linéarité et de l'irréversibilité entre 75 et 90% de f_c . Ensuite jusqu'à f_c on assiste à une propagation instable et la non linéarité augmente. Les fissures s'orientent parallèlement à la direction de chargement. Enfin au-delà de f_c , la contrainte diminue (phase d'adoucissement). La diminution est d'autant plus brusque que la charge ultime en compression f_c est importante. Il faut noter que la réponse révèle une ductilité plus importante en compression qu'en traction. De plus on assiste à une augmentation du volume du béton en compression (dilatance). Par ailleurs l'intensité des phénomènes hystériques est bien plus élevée en compression qu'en traction. Ces différents aspects sont représentés sur la **Figure 4.2**.

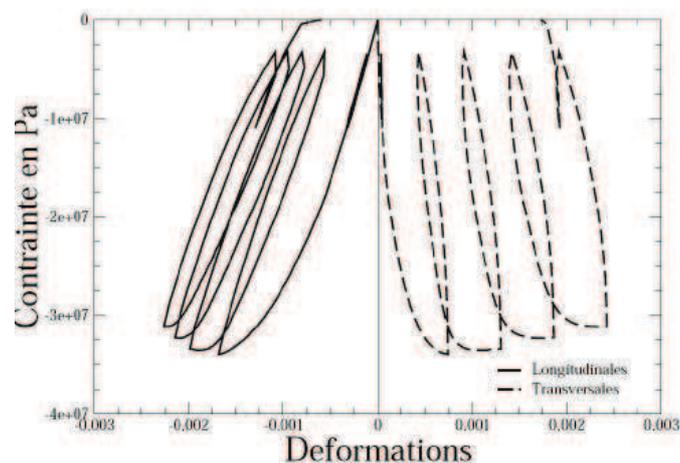


Figure 4.2 : Réponse en compression d'un béton ordinaire (Torrenti et Boulay 1993) tirée de (Chambart 2009).

IV.2.3 Le caractère unilatéral du béton

Il s'agit de la restauration d'une partie de la raideur du béton lorsqu'on passe d'une sollicitation en traction à une sollicitation en compression. Ce phénomène s'explique quantitativement par la refermeture des microfissures et microcavités créées lors d'un endommagement en traction (Ramtani 1990). Ainsi, bien que le matériau soit endommagé en traction, il se comporte en compression de manière quasi-indépendante de son histoire en traction. Notons aussi entre autres la dissymétrie du comportement du béton en traction et en compression.

Différents types de modèles continus sont aujourd'hui dédiés à reproduire les phénomènes complexes que nous venons de décrire. On peut distinguer entre autre les modèles basés sur la mécanique de la rupture (Kachanov 1958), les modèles basés sur la théorie de la plasticité (Ulm 1996), les modèles d'élastoplasticité (Reynouard 1974) et les modèles d'endommagement (Lemaître et Chaboche 2004) qui nous intéressent plus particulièrement dans la suite.

IV.3 La théorie de l'endommagement

La théorie de l'endommagement constitue un cadre de développement de lois constitutives encore très utilisées aujourd'hui. Les premiers travaux relatifs à l'endommagement sont ceux de (Kachanov 1958). En ce qui concerne le béton, le modèle de Mazars (Mazars 1984) fût un des modèles précurseurs. L'objectif de la théorie d'endommagement est de représenter via les variations des caractéristiques élastiques du matériau, la dégradation progressive du matériau en fonction de la sollicitation.

IV.3.1 Variable d'endommagement

La variable d'endommagement est la variable interne représentative de la dégradation progressive du matériau via les caractéristiques élastiques. On considère un élément de volume endommagé dans lequel on a isolé un VER. Soit S l'aire d'une section de l'élément de volume repérée par sa normale \vec{n} (**Figure 4.3**). Sur cette section on note S_D l'aire totale de l'ensemble des traces des microfissures et des microcavités. La mesure mécanique de l'endommagement local relativement à la direction \vec{n} est notée (Lemaître et Chaboche 2004) :

$$D_n = \frac{S_D}{S} \quad (4.1)$$

- $D_n = 0$ correspond à l'état non endommagé ou vierge. Le plus souvent c'est l'état à partir duquel l'histoire des sollicitations est connue.
- $D_n = 1$ correspond à l'élément de volume rompu en deux parties selon un plan normal à \vec{n} .
- $0 < D_n < 1$ caractérise l'état d'endommagement.

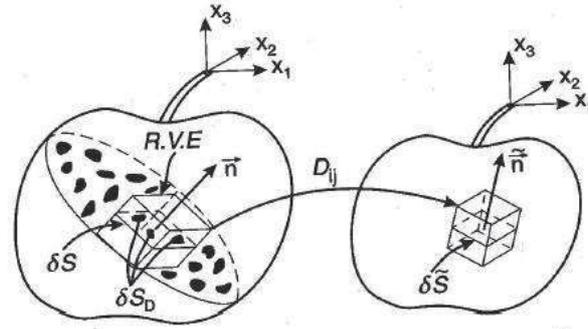


Figure 4.3 : Élément endommagé (Lemaître et Desmorat 2005).

IV.3.2 Endommagement isotrope

L'hypothèse d'endommagement isotrope consiste à supposer que l'orientation des microfissures et des microcavités est distribuée uniformément dans toutes les directions. Dans ce cas la variable D_n ne dépend pas de l'orientation et le scalaire D caractérise complètement l'endommagement. On a :

$$D_n = D \quad \forall \vec{n} \quad (4.2)$$

C'est le cas dans le modèle d'endommagement de Mazars qu'on verra par la suite.

IV.3.3 Notion de contrainte effective

La notion de matériau sain et endommagé conduit à la notion de contrainte effective, ie la contrainte rapportée à la section qui résiste effectivement aux efforts appliqués. Dans le cas unidimensionnel, si on note F la force appliquée sur une section S du VER, $\sigma = F/S$ est la contrainte usuelle qui satisfait les conditions d'équilibre. Lorsqu'il y a un endommagement isotrope D , par définition la contrainte effective est :

$$\tilde{\sigma} = \sigma \frac{S}{\tilde{S}} \quad \text{soit} \quad \tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{1-D} \quad (4.3)$$

avec \tilde{S} la surface effective qui représente la surface saine sur laquelle la force s'exerce effectivement. De la même manière on peut définir le module d'Young du matériau endommagé ou module effectif par le principe d'équivalence en déformations (Lemaître 1971). Il s'agit d'un principe qui stipule que tout comportement en déformation d'un matériau endommagé est traduit par les lois de comportement du matériau sain dans lesquelles on remplace la contrainte usuelle par la contrainte effective soit :

$$\tilde{\sigma} = E\varepsilon \Leftrightarrow \sigma = \tilde{E}\varepsilon \quad \text{et donc} \quad \tilde{E} = E(1-D) \quad (4.4)$$

IV.4 Modèle d'endommagement du béton: le modèle de Mazars (Mazars 1984)

IV.4.1 Formulation locale

Le modèle de Mazars (1984) est l'un des premiers modèles permettant de décrire le comportement élastique endommageable du béton. Ce modèle fait référence depuis et de nombreux auteurs s'en sont inspirés. Le modèle s'appuie sur un critère d'endommagement isotrope écrit en déformation et qui permet de décrire la diminution de rigidité du matériau sous l'effet de la création de microfissures. En revanche il ne modélise pas la restauration de rigidité en cas de refermeture de fissures et ne prend pas en compte les éventuelles déformations plastiques ou effets visqueux qui peuvent être observés au cours des déformations d'un béton. La contrainte dans le modèle de Mazars est donnée par :

$$\boldsymbol{\sigma} = (1 - D)\mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^e \quad (4.5)$$

avec D la variable d'endommagement et \mathbb{C} la matrice de rigidité. La déformation élastique $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ tient compte de la dilatation thermique, du retrait endogène, ou encore du retrait de dessiccation lorsque ces phénomènes sont considérés dans la modélisation. La prise en compte de la dissymétrie traction /compression se fait dans la définition du seuil d'endommagement et de l'évolution de l'endommagement. Le modèle associe l'endommagement à l'état d'extension locale, au travers de la variable ε_{eq} , la déformation équivalente de Mazars. Elle est définie à partir des valeurs propres du tenseur des déformations, telle que :

$$\varepsilon_{eq} = \sqrt{\langle \varepsilon_1 \rangle_+ + \langle \varepsilon_2 \rangle_+ + \langle \varepsilon_3 \rangle_+} \quad (4.6)$$

sachant que la partie positive $\langle \rangle_+$ est définie telle que si ε_i est la déformation principale dans la direction i , on ait :

$$\begin{cases} \langle \varepsilon_i \rangle_+ = \varepsilon_i & \text{si } \varepsilon_i > 0 \\ \langle \varepsilon_i \rangle_+ = 0 & \text{si } \varepsilon_i \leq 0 \end{cases} \quad (4.7)$$

L'évolution de D est telle que $\dot{D} > 0$, autrement dit l'endommagement ne peut que croître. Il résulte d'une combinaison d'un endommagement de traction D_t et d'un endommagement de compression D_c :

$$D = \zeta_t^\beta D_t + \zeta_c^\beta D_c \quad (4.8)$$

β est un paramètre matériau qui permet lorsqu'il est supérieur à 1 d'améliorer la réponse en cisaillement du modèle. β est souvent pris égal à 1.06. Les coefficients ζ_t et ζ_c traduisent l'importance relative de la traction ou de la compression et sont tels que $\zeta_t + \zeta_c = 1$. Ils sont obtenus en partitionnant les contraintes en une partie positive et une partie négative :

$$\boldsymbol{\sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_+ + \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_- \quad (4.9)$$

où $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_+$ (resp $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_-$) est la partie positive (resp négative) du tenseur des contraintes au sens des valeurs propres. On peut alors écrire :

$$tr \boldsymbol{\sigma} = tr \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_+ + tr \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_- \quad (4.10)$$

De même la partition du tenseur des déformations donne $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_t + \boldsymbol{\varepsilon}_c$ avec :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_t = \frac{1+\nu}{E} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_+ - \frac{\nu}{E} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_+ \mathbf{1} \quad (4.11)$$

et

$$\boldsymbol{\varepsilon}_c = \frac{1+\nu}{E} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_- - \frac{\nu}{E} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_- \mathbf{1} \quad (4.12)$$

Les coefficients ζ_t et ζ_c sont définis par :

$$\zeta_t = \sum_{i=1}^3 \frac{\langle \boldsymbol{\varepsilon}_i \rangle_+ \langle \boldsymbol{\varepsilon}_i^t \rangle}{\boldsymbol{\varepsilon}_{eq}} \quad ; \quad \zeta_c = \sum_{i=1}^3 \frac{\langle \boldsymbol{\varepsilon}_i \rangle_+ \langle \boldsymbol{\varepsilon}_i^c \rangle}{\boldsymbol{\varepsilon}_{eq}} \quad (4.13)$$

On retrouve bien en traction pure $\zeta_t = 1$; $\zeta_c = 0$ et en compression pure $\zeta_c = 1$; $\zeta_t = 0$. Les endommagements de traction et de compression sont définis par les équations suivantes dès lors que $\boldsymbol{\varepsilon}_{eq} > \boldsymbol{\varepsilon}_{d_0}$:

$$d_t = 1 - \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{d_0} (1 - A_t)}{\boldsymbol{\varepsilon}_{eq}} - \frac{A_t}{\exp(B_t (\boldsymbol{\varepsilon}_{eq} - \boldsymbol{\varepsilon}_{d_0}))} \quad (4.14)$$

$$d_c = 1 - \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_{d_0} (1 - A_c)}{\boldsymbol{\varepsilon}_{eq}} - \frac{A_c}{\exp(B_c (\boldsymbol{\varepsilon}_{eq} - \boldsymbol{\varepsilon}_{d_0}))}$$

où A_t , B_t , A_c , B_c et $\boldsymbol{\varepsilon}_{d_0}$ sont des paramètres matériaux calibrés en traction et en compression.

La **Figure 4.4** présente l'évolution typique de la contrainte axiale en fonction de la déformation axiale. Les paramètres matériaux correspondant sont :

$$E = 32GPa \quad , \quad \nu = 0.2 \quad ; \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{d_0} = 1.10^{-4} \quad ; \quad A_c = 1.15 \quad ; \quad A_t = 0.8 \quad ; \quad B_c = 1391.3 \quad ; \quad B_t = 10000 \quad \text{et} \quad \beta = 1.$$

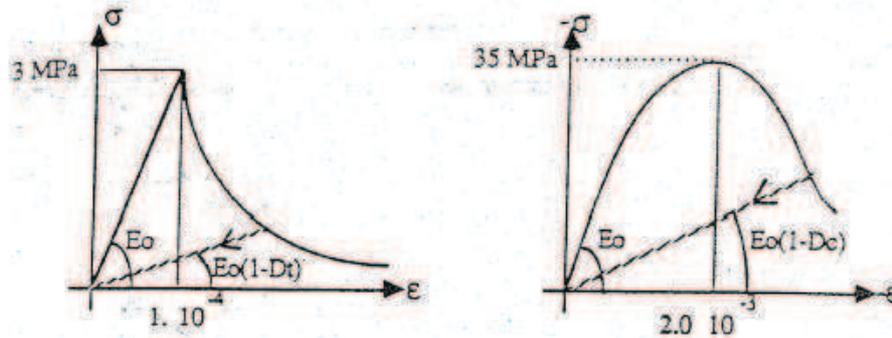


Figure 4.4 : Réponse contrainte-déformation du modèle de Mazars pour une sollicitation en traction et en compression (Mazars 1984).

Rappelons pour finir que ce modèle est très efficace pour la modélisation du comportement du béton et est très utilisé dans la communauté scientifique du béton du fait de sa simplicité et de sa robustesse. Dans la suite dans les cas de chargement purement mécanique permettant d'illustrer le couplage éléments finis/éléments discrets, c'est ce modèle qui a été choisi.

IV.4.2 Formulation non locale

Comme la plupart des lois adoucissantes, le modèle de Mazars est caractérisé par des difficultés d'ordres numériques liées à la localisation des déformations. Les déformations se localisent dans une bande mince, appelée bande de localisation. L'état des contraintes en un point matériel ne peut plus être décrit par les caractéristiques au point mais doit aussi prendre en considération son environnement (Bottoni 2009). La localisation des déformations rend le problème mathématique à résoudre mal posé, l'adoucissement causant une perte d'ellipticité des équations différentielles qui décrivent les processus de déformations (Benallal et al. 1993; Peerlings et al. 1996). Les conditions aux limites qui étaient correctement définies dans le cas elliptique ne sont plus adaptées pour le cas hyperbolique. Les solutions numériques ne convergent plus vers des solutions physiquement admissibles, elles donnent des réponses dépendantes de la discrétisation spatiale (Crisfield 1982). Par exemple on obtient une bande d'endommagement de dimension nulle lorsque la taille des éléments finis tend vers 0, ce qui conduit à la rupture sans dissipation d'énergie (Bazant 1976). Les méthodes de régularisation deviennent nécessaires. Deux d'entre elles sont souvent utilisées : le modèle non-local intégral et le modèle non-local à gradient implicite.

Modèle non-local intégral

Dans cette approche la régularisation est obtenue en moyennant la variable qui pilote l'endommagement dans le voisinage du point considéré. Pour le modèle de Mazars, il s'agit de la déformation équivalente (Pijaudier-Cabot et Bazant 1987) :

$$\bar{\varepsilon}_{eq}(x) = \frac{1}{V_r(x)} \int_{\Omega} \psi(x-s) \varepsilon_{eq}(s) d\Omega \quad (4.15)$$

où Ω est le volume de la structure, $V_r(x)$ est le volume représentatif au point x :

$$V_r(x) = \int_{\Omega} \psi(x-s) d\Omega \quad (4.16)$$

avec $\psi(x-s)$ une fonction de pondération non-locale (Pijaudier-Cabot et Bazant 1987) :

$$\psi(x-s) = \exp\left(-\frac{4\|x-s\|^2}{l_c^2}\right) \quad (4.17)$$

l_c est la longueur caractéristique du matériau ou encore longueur interne et est reliée à la taille caractéristique des hétérogénéités. Il est souvent pris égal à 3 à 5 fois la taille du plus gros granulats dans le béton. Cette approche semble justifiée d'un point de vue micromécanique par les interactions dues aux hétérogénéités qui tendent à redistribuer les contraintes lors de la fissuration (Dufour 2007).

Modèle non-local à gradient implicite

Dans cette approche, la déformation équivalente qui rentre dans la formulation vérifie l'équation :

$$\varepsilon_{eq} = \bar{\varepsilon}_{eq} - c \nabla^2 \bar{\varepsilon}_{eq} \quad (4.18)$$

dont les conditions aux limites sur $\partial\Omega$ sont exprimées par $\partial\varepsilon_{eq} / \partial n = 0$ avec n le vecteur normal extérieur. Le paramètre matériau c a la dimension du carré d'une longueur (m^2) et est relatif à la longueur caractéristique du matériau.

Une autre forme sous laquelle on peut écrire ces équations est la forme tensorielle. On obtient alors le tenseur de déformation non-locale $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ au lieu d'avoir la déformation non locale scalaire $\bar{\varepsilon}_{eq}$. On a :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - c \nabla^2 \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (\Omega) \quad (4.19)$$

avec comme conditions aux limites sur $\partial\Omega$, $\nabla \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \boldsymbol{n} = 0$. Enfin la déformation non-locale équivalente est déterminée par :

$$\bar{\varepsilon}_{eq} = \sqrt{\sum_{i=1}^3 \langle \bar{\varepsilon}_i \rangle_+^2} \quad (4.20)$$

Il est notable que les deux approches intégrale et à gradient sont strictement équivalentes dans le cas d'un milieu infini et pour une fonction de pondération spécifique (Peerlings 1999).

L'approche intégrale peut être considérée comme un cas particulier de l'approche à gradient. Pour finir les travaux de (Jason 2004) ont permis de relier les paramètres matériau l_c et ϵ dans les deux approches, à savoir $\epsilon = l_c^2 / 16$.

IV.5 Couplage endommagement/perméabilité

Nous avons vu que les sollicitations auxquelles peuvent être soumis les bétons ont des répercussions notables sur leurs propriétés macroscopiques. Nous nous intéressons ici en particulier à la perméabilité. Deux sortes d'approches sont souvent rencontrées dans la littérature pour traiter le problème d'un béton fissuré (endommagé) : les modèles continus (Bourdarot 1991; Bary 1996; Gawin et al. 2002) et les modèles discrets (Delaplace 1996; Carmeliet et al. 2004; Tognevi et al. 2009).

IV.5.1 Les modèles continus du couplage endommagement/perméabilité

Ces modèles relient de manière phénoménologique les variables qui décrivent le comportement non-linéaire à savoir l'endommagement ou encore la déformation plastique (Fauchet 1991) à la perméabilité. Nous allons préciser quelques uns des modèles les plus connus qui traitent du couplage endommagement/perméabilité.

Le modèle de (Bourdarot 1991)

Il s'agit d'un modèle élastique-endommageable introduit dans une formulation de type Biot. La perméabilité K d'un matériau isotrope endommagé s'écrit :

$$K = K_0 \left(\frac{K_u}{K_0} \right)^D \quad (4.21)$$

avec K_0 la perméabilité du matériau sain (perméabilité initiale) et K_u la perméabilité ultime correspondant à l'état complètement détérioré du matériau, D est l'endommagement isotrope. Un inconvénient avéré de ce modèle est que la détermination de K_u est assez peu précise.

Le modèle de (Bary 1996)

Sur la base des travaux de Bourdarot, (Bary 1996) a proposé une relation de type exponentielle de l'évolution de la perméabilité anisotrope à l'eau dans la direction j en fonction de l'endommagement positif dans la direction i noté D_{+i} :

$$K = K_0 \exp \left(\beta \sum_{i \neq j} D_{+i}^\gamma \right) \quad (4.22)$$

K_0 est la perméabilité initiale, β et γ sont deux paramètres à ajuster sur des valeurs expérimentales. Par exemple pour les résultats de l'essai BIPEDE de (Gérard 1996), Bary a proposé $K_0 = 8.10^{-8}$, $\beta = 9.43$ et $\gamma = 0.859$.

Le modèle de (Gawin et al. 2003)

Dans ce modèle, l'expression de la perméabilité est :

$$K = K_0 10^{A_D D} \quad (4.23)$$

Le paramètre A_D ajusté sur la même base des données expérimentales que (Bary 1996), vaut 4 dans ce cas particulier.

Le modèle de (Picandet 2001)

Le modèle proposé par Picandet s'appuie notamment sur la relation proposée par (Bary 1996) : la perméabilité résiduelle au gaz, mesurée après déchargement évolue de façon exponentielle avec l'endommagement induit par la compression uniaxiale dans la phase pré-pic :

$$K = K_0 \exp\left[(\alpha D)^\beta\right] \quad (4.24)$$

K_0 est la perméabilité initiale du matériau. Selon (Picandet 2001) $\alpha = 11.3$ et $\beta = 1.64$ pour les bétons dont la résistance à la compression est supérieure à 60 MPa. Selon (Choinska 2006), $\alpha = 6.2$ et $\beta = 1.7$ pour $f_c \approx 30$ MPa.

La plupart des modèles continus ne sont applicables que pour de faibles endommagements $D \leq (0.15 - 0.25)$ correspondant à peu près à de l'endommagement diffus. La relation de Picandet a par exemple été corrélée avec des résultats expérimentaux pour des faibles endommagements, environ 15% de la perte de raideur d'une éprouvette en béton (Choinska 2006). Ce niveau d'endommagement correspond à une microfissuration diffuse homogène dans le béton. Pour pouvoir calculer la perméabilité lorsque l'endommagement est proche de 1, une possibilité est de faire appel aux approches discrètes.

IV.5.2 Les modèles discrets du couplage endommagement/perméabilité

Ces modèles sont appropriés pour déterminer la perméabilité à l'échelle microscopique dans le cas d'un matériau fissuré. L'écoulement est localisé dans les chemins préférentiels que sont les fissures. Dans ce type d'approches le milieu fissuré est représenté par un réseau de canaux dans lequel l'écoulement est décrit par la loi d'écoulement de Poiseuille ou de Darcy (Carmeliet et al. 2004; Dormieux et Kondo 2004; Tognevi et al. 2009). Les fissures sont représentées par des plaques parallèles, des ellipsoïdes aplatis ou encore des tubes circulaires. Dans le cas des plaques parallèles, la perméabilité est obtenue par la loi d'écoulement de Poiseuille. Considérons l'écoulement entre deux plaques parallèles comme sur la **Figure 4.5**. Le gradient de pression est

orienté selon l'axe z avec les plaques situées en $z = \pm \frac{[H]}{2}$.

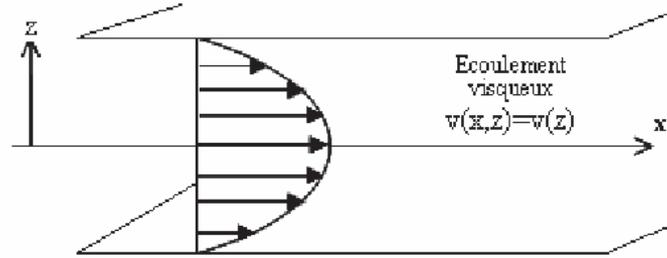


Figure 4.5 : Profil de vitesse d'un fluide entre deux plaques planes et parallèles.

La vitesse de l'écoulement visqueux entre deux plaques planes et parallèles distantes de $[u]$ (m) s'écrit :

$$v(x, z) = v(z) = v_{max} \left(1 - \frac{4z^2}{[u]^2} \right) \quad (4.25)$$

avec $v_{max} = -\frac{[u]^2}{8\eta} \frac{dP}{dx}$, P la pression du fluide à l'abscisse x et η la viscosité dynamique du fluide.

La vitesse moyenne de l'écoulement du fluide peut s'écrire alors :

$$v_{moy} = -\frac{[u]^2}{12\eta} \frac{dP}{dx} \quad (4.26)$$

Le débit volumique du fluide entre les plaques s'écrit :

$$Q = \frac{-K_f S}{\eta} \frac{dP}{dx} \quad (4.27)$$

S (m^2) est la surface entre les plaques normale à la direction du flux.

On peut en déduire la perméabilité K_f de la fissure par :

$$K_f = \frac{[u]^2}{12} \quad (4.28)$$

Le modèle de (Dormieux et Kondo 2004)

(Dormieux et Kondo 2004) proposent un modèle d'homogénéisation auto-cohérent mettant en évidence un seuil d'endommagement au-delà duquel on observe un changement dans l'ordre de grandeur de la perméabilité. Les fissures sont modélisées comme des ellipsoïdes aplatis assimilés à deux plans parallèles distants de $2c$. L'écoulement réel parallèle à la fissure est approché par un écoulement de Poiseuille. En notant \underline{n} la normale unitaire au plan de la fissure, la perméabilité

K_f du milieu poreux « fictif » équivalent à la fissure réelle du point de vue de la loi entre débit et gradient de pression n'est donc que la généralisation de l'équation (4.28) :

$$K_f = \frac{c^2}{3} \mathbf{1} + \left(K_f^n - \frac{c^2}{3} \right) \underline{n} \otimes \underline{n} \quad (4.29)$$

K_f^n est la perméabilité dans la direction de la normale à la fissure. Les auteurs montrent que le choix de cette perméabilité est sans importance pourvu qu'elle soit non nulle. Dans la pratique, elle pourrait être prise égale à K_p , la perméabilité isotrope de la matrice poreuse non fissurée.

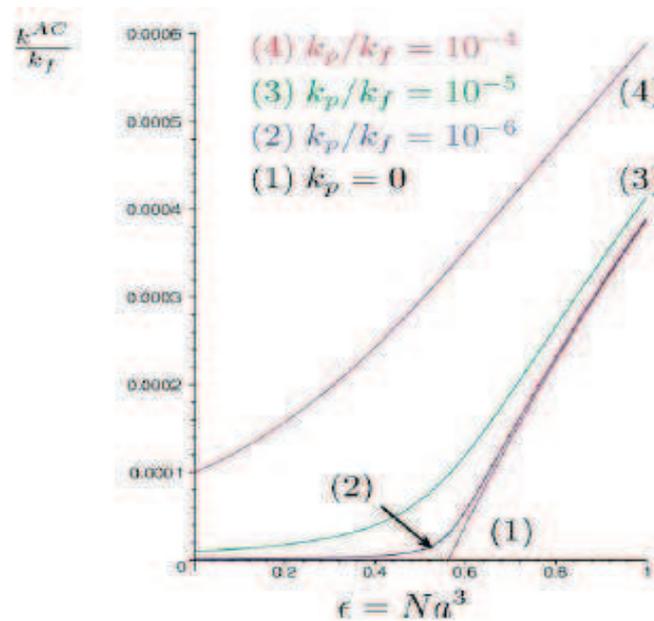


Figure 4.6 : Estimation de la perméabilité macroscopique (Dormieux et Kondo 2004).

Le schéma auto-cohérent a été mis en œuvre, en supposant que l'ouverture des fissures est uniforme. Les résultats obtenus sont présentés sur la **Figure 4.6**. La perméabilité macroscopique normalisée K^{AC} / K_f évolue de façon croissante en fonction du degré de fissuration mesuré par $\varepsilon = \mathcal{N}a^3$. On rappelle que c est la demi-ouverture de la fissure et a son rayon. Pour la valeur critique de $K_p = 0$, le schéma auto-cohérent permet de mettre en évidence un seuil $\varepsilon = 16/9$. En dessous de ce seuil la perméabilité est nulle et au-delà du seuil, la perméabilité macroscopique s'interprète comme le résultat de l'apparition d'un réseau de fissures connectées.

Le modèle de (Choinska 2006; Dufour 2007)

Le modèle proposé est un modèle de raccordement entre un modèle continu et un modèle « discret ». Les auteurs proposent d'une part une loi empirique pour les faibles endommagements lorsque le matériau est toujours homogène. D'autre part dans le cas des macrofissures

d'endommagement proche de 1, ils proposent d'utiliser la perméabilité de Poiseuille de la fissure formée dont « l'ouverture de fissure » est extraite de la variable pilotant l'endommagement. Pour les faibles endommagements c'est la relation de (Picandet 2001) de l'équation (4.24) qui est utilisée. L'expression mathématique de cette loi la rend prépondérante par rapport à la seconde loi à mélanger (Dufour 2007). Comme son impact sur la loi des mélanges est censé diminuer lorsque l'endommagement augmente, les auteurs préfèrent utiliser son développement limité au voisinage de $D = 0$. Il s'écrit :

$$K_D^F = K_0 \left[1 + (\alpha D)^\beta + \frac{(\alpha D)^{2\beta}}{2} + \frac{(\alpha D)^{3\beta}}{6} \right] \quad (4.30)$$

Les deux relations (4.24) et (4.30) sont équivalentes pour de faibles endommagements.

Pour les forts endommagements, la perméabilité de la « fissure » est donnée par la loi de Poiseuille :

$$K_f = \xi \frac{[u]^2}{12} \quad (4.31)$$

avec ξ le coefficient qui tient compte de la rugosité et de la tortuosité de la fissure. Il peut être ajusté expérimentalement (Fauchet 1991). Afin de pouvoir raccorder les deux lois pour les faibles et forts endommagements, les auteurs proposent d'exprimer la perméabilité K_f en fonction de l'endommagement. Pour illustrer la procédure nous allons comparer comme dans (Choinska 2006) deux situations, le cas continu et le cas discret d'un domaine fissuré par une seule fissure d'ouverture $[u]$. Dans une représentation continue de la mécanique de l'endommagement, la bande endommagée avec $D=1$ est de largeur νl_c avec ν une constante et l_c la longueur caractéristique du milieu définie plus haut. En revanche dans une représentation discrète de la rupture, on a une ouverture de fissure $[u]$. Dans le cas continu cette ouverture est calculée à partir de la variable d'état cinématique \bar{Y} qui pilote l'endommagement (Choinska 2006) :

$$[u] = \int_0^{l_c} (\bar{Y} - Y_{D_0}) dx \quad (4.32)$$

où Y_{D_0} représente la déformation seuil d'endommagement. Dans le cas du modèle de Mazars par exemple on a $Y_{D_0} = \max(Y_{D_0}, \mathcal{E}_{eq})$. En faisant l'hypothèse que l'endommagement est supposé homogène dans la bande de largeur νl_c , on a (Choinska 2006) :

$$[u] = (\bar{Y} - Y_{D_0}) \nu l_c \quad (4.33)$$

Notons que l'amélioration et la généralisation de cette approche d'extraction d'ouverture de fissure qui dépasse le cadre du calcul de la perméabilité est effectuée dans (Dufour et al. 2011) avec plus de détails.

Comme on connaît la relation qui lie l'endommagement D et la variable qui la pilote \bar{Y} sous la forme $D = F(\bar{Y})$ on obtient finalement la perméabilité de la fissure par (Choinska 2006) :

$$K_f = \frac{(\nu l_c)^2}{12} (F^{-1}(D) - Y_{D0})^2 \quad (4.34)$$

Dans le cas du modèle de Mazars par exemple, en négligeant l'endommagement en compression ($A_c = 1$, $B_c = 0$) la perméabilité K_f prend la forme (Choinska 2006) :

$$K_f = \frac{(\nu l_c)^2}{12} \left(\frac{\ln(1-D)}{B_t} \right)^2 \quad (4.35)$$

Une fois que la perméabilité de la fissure est obtenue la loi de raccordement proposée est basée sur les logarithmes des perméabilités (Choinska 2006) :

$$\log(K) = (1-D)\log(K_D^F) + D\log(k_f) \quad (4.36)$$

IV.5.3 Conclusion sur les modèles endommagement/perméabilité

Les modèles continus phénoménologiques que nous avons passés en revue ne sont applicables que pour de l'endommagement diffus. De plus seul le modèle de (Bary 1996) permet de prendre en compte l'éventuelle anisotropie qui survient lorsqu'il y a une orientation préférentielle des fissures. Le modèle de raccordement proposé par (Choinska 2006) a pour objectif de décrire l'évolution de la perméabilité depuis l'amorçage de la microfissuration jusqu'à l'ouverture de la macrofissuration, mais n'a pas à notre connaissance, été validé sur des structures ((Choinska 2006), page 135). Il repose sur un endommagement isotrope. De plus l'approche de l'extraction de l'ouverture de fissure proposée ne trouverait pas forcément son sens à être mise en œuvre si l'on s'intéresse par exemple, non pas à la perméabilité, mais à d'autres paramètres comme le module d'Young ou le coefficient de Biot. L'approche que nous proposons de mettre en œuvre est celle de la méthode des éléments discrets. L'avantage dans cette approche est que lorsqu'il y a une fissuration les ouvertures de fissures sont obtenues explicitement de par la nature de la méthode. Il est alors plus facile d'estimer globalement tous les paramètres impactés par la fissuration par des méthodes d'homogénéisation abordées dans le chapitre 3. L'inconvénient de cette approche est qu'elle ne peut pas être mise en œuvre sur des structures de grande taille, d'où l'intérêt de la coupler avec des modèles continus basés sur les éléments finis. Dans ce qui suit nous allons présenter brièvement la méthode des éléments discrets, les différentes sortes de couplages qui existent dans la littérature et conclure sur l'approche couplée que nous avons adoptée.

IV.6 Modélisation discrète

IV.6.1 La méthode des éléments discrets

La méthode des éléments discrets peut être envisagée comme une alternative aux modèles continus. La principale différence par rapport aux modèles continus habituels est que le matériau est représenté par un assemblage de particules et non comme un milieu continu. L'avantage considérable est que la représentation du mode de rupture d'un matériau par nature discrète est prise en compte, contrairement à une approche continue. Les premiers travaux relatifs à l'utilisation des modèles discrets pour l'étude du comportement mécanique des géomatériaux sont généralement attribués à (Cundall et Strack 1979), travaux dans lesquels le matériau est représenté par un assemblage de disques, la cohésion du matériau étant assurée par des ressorts au point de contact entre les particules. De nombreux développements ont suivi ces travaux. On peut séparer les modèles d'éléments discrets en trois grandes catégories (Delaplace 2008) :

Les modèles particuliers à base de sphères (Donzé et Magnier 1995; Potyondy et Cundall 2004)

Ces modèles sont les plus proches des travaux de (Cundall et Strack 1979). La gestion du contact est facilitée par la discrétisation en particules rigides de formes géométriques simples (**Figure 4.7**), ce qui permet une grande efficacité d'un point de vue calcul numérique. Par contre pour ce type de modèles la génération du maillage est délicate, particulièrement pour un milieu hétérogène. La répartition de la masse (vides entre particules), notamment dans les problèmes de dynamique constitue également une limite à ce genre de modèles.

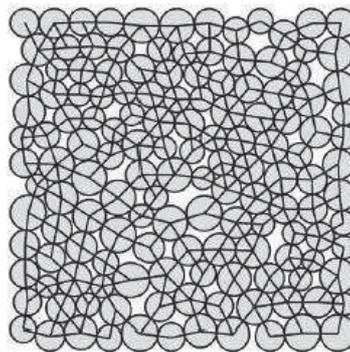


Figure 4.7 : Assemblage de particules sphériques et forces de contact (Potyondy et Cundall 2004).

Les « lattice models » (Schlangen et Garboczi 1997; Van Mier et al. 2002; Cusatis et al. 2006)

Ces modèles représentent le matériau comme un assemblage de liens, généralement des poutres, des barres ou des éléments 1D pouvant se rompre. L'efficacité en termes de calcul numérique représente ici aussi un avantage important, les limites étant la gestion de la masse et la prise en

compte de la refermeture de fissures en cas de sollicitations alternées. Un exemple de « lattice model » est développé pour observer l'apparition et la propagation de microfissures dans le béton. Il s'agit des travaux de (Prado et Van Mier 2003). Le béton est divisé en trois phases (les granulats, la matrice et l'interface). Les liens sont des poutres de type Euler Bernoulli associées à des lois élastiques fragiles. La **Figure 4.8** montre les poutrelles dans chaque phase, en gris clair et en noir gras lorsque celles-ci joignent des points de phases différentes. Cette échelle de modélisation est assez fine et demande un coût de calcul non négligeable. (Cusatis et Cedolin 2007) ont développé un modèle de la même gamme nommé Confinement-Shear-Lattice model (CLS). Le comportement associé à chaque élément prend en compte à la fois l'effet de la matrice, des granulats et de l'interface. Le modèle permet des applications sur des structures de grande taille, mais demande un effort important pour l'identification des paramètres du modèle de comportement.

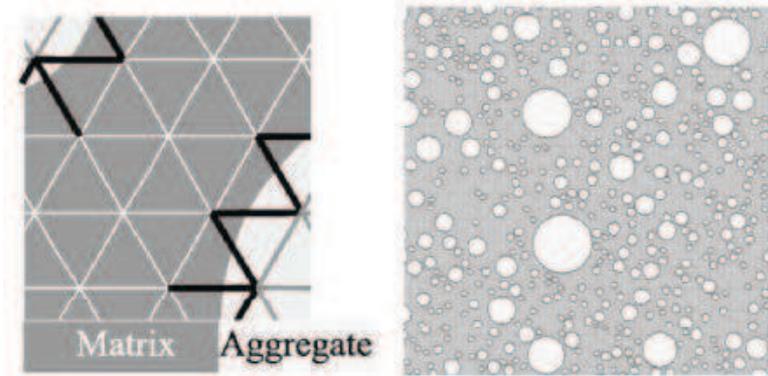


Figure 4.8 : Exemple du modèle de (Prado et Van Mier 2003) tiré de (Rousseau 2009).

Les modèles particuliers à base de polyèdres (Kun et Hermann 1996; Bolander et Hong 2002; D'Adetta et al. 2002; Delaplace et Ibrahimbegovic 2006; Delaplace 2008)

Ce type de modèle se base sur une discrétisation du milieu par un pavage, généralement de Voronoï. La génération du maillage avec une gestion aisée de l'hétérogénéité constitue un avantage pour ces modèles. Par contre la recherche du contact est coûteuse et la description des particules est lourde. Le modèle que nous avons utilisé dans la suite se situe dans cette troisième catégorie.

IV.6.2 Le modèle DEAP

On présente ici le modèle discret qui a été utilisé dans la suite. Il résulte des développements d'Arnaud Delaplace ces dernières années (Delaplace et Ibrahimbegovic 2006; Delaplace et Desmorat 2007; Delaplace 2008). Le modèle a été confronté à la simulation de structures en béton et en béton armé, pour l'estimation de l'ouverture de fissure, notamment dans le cadre du projet CEOS.FR. On passe en revue les principes de base du modèle, l'algorithme de résolution et les processus d'identification des paramètres.

Le maillage

Le matériau est représenté comme un assemblage de particules indéformables obtenu par un pavage de Voronoï. La génération du maillage se fait en 4 étapes illustrées sur la **Figure 4.9** :

1. génération d'une grille à mailles carrées sur la surface à mailler,
2. génération aléatoire des points (centre des particules) à l'intérieur de chaque maille,
3. calcul de la triangulation de Delaunay de l'ensemble des points,
4. calcul des polygones de Voronoï, dual de la triangulation de Delaunay.

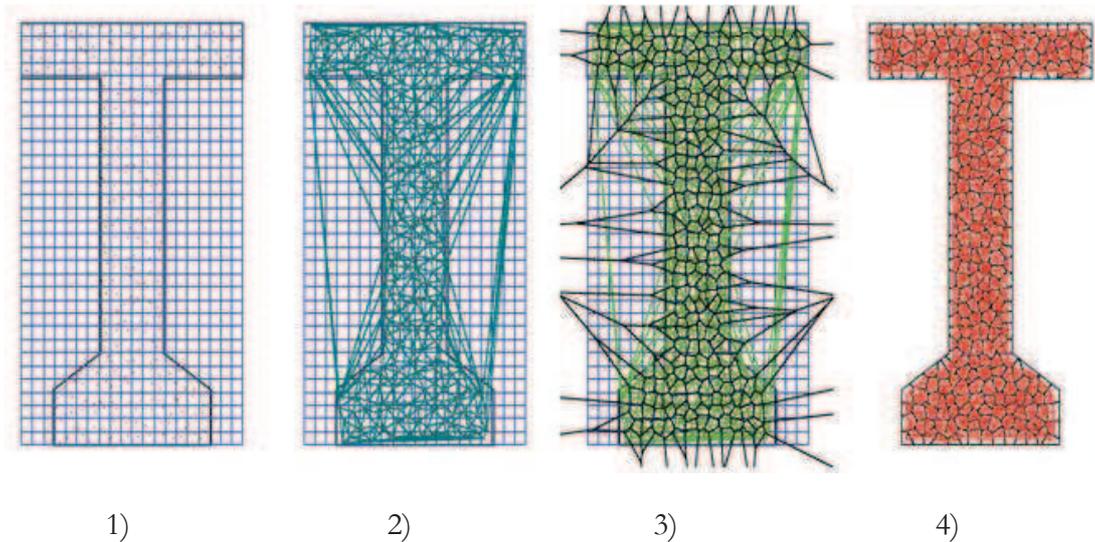


Figure 4.9 : Génération du maillage dans le modèle.

L'hétérogénéité de la microstructure est contrôlée par l'aléa spatial des centres des polygones. Il faut noter que la construction des polygones n'impose aucune restriction sur cet aléa. Cependant un support géométrique, en l'occurrence les grilles, permet de simplifier la génération des points. Cette limitation a été proposée par (Moukarzel et Hermann 1992), permettant une gestion largement simplifiée des conditions aux limites, du chargement, des interactions initiales entre particules, tout en garantissant une bonne isotropie du milieu pour l'aléa maximal. La densité et la forme du maillage sont déterminées respectivement aux étapes 1 et 2. La densité des mailles de la grille détermine le nombre de particules servant au maillage. L'aléa du maillage est contrôlé par la génération aléatoire des points de chaque maille. Pour une maille de surface S (**Figure 4.10**) le point est généré dans un carré centré dans la maille de surface $a^2 S$, a étant un facteur compris entre 0 et 1. ($a = 0$ correspond à un maillage régulier). La **Figure 4.11** montre deux exemples de maillage 2D et 3D pour $a = 0.7$.

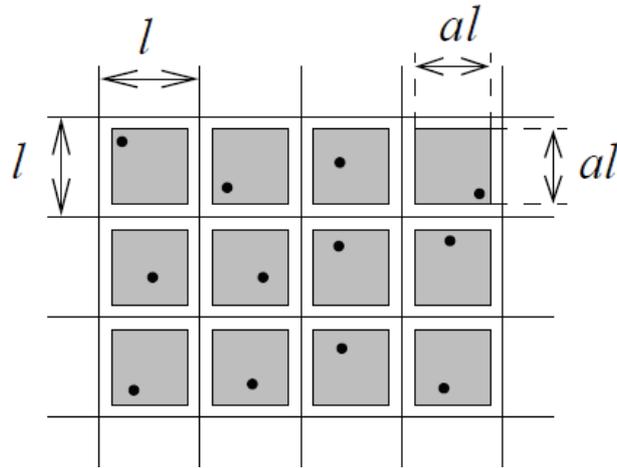


Figure 4.10 : Génération des centres de particules à l'intérieur des grilles (Delaplace 2008).

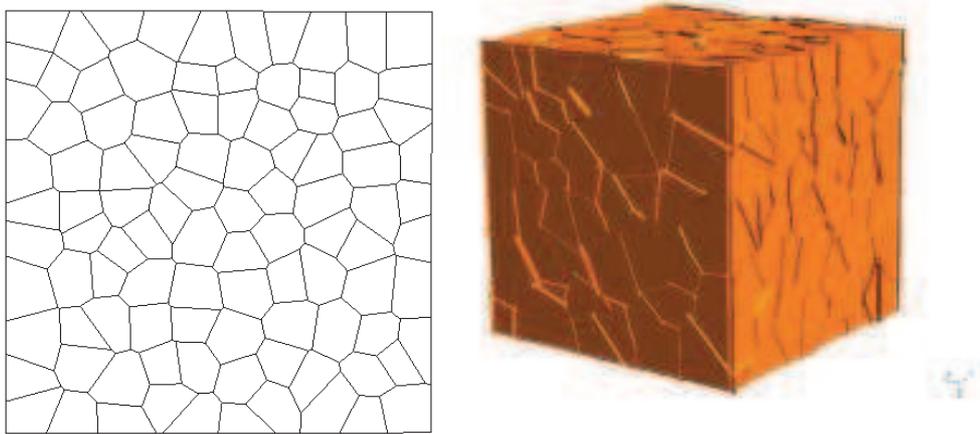


Figure 4.11 : Exemple de deux maillages ($a = 0.7$). Maillage 2D de 10×10 particules (à gauche) et maillage 3D de $10 \times 10 \times 10$ particules (à droite) (Delaplace 2008).

Interactions entre particules

Rappelons que le modèle est destiné à représenter le comportement jusqu'à rupture d'un matériau hétérogène fragile cohésif. Des deux types d'interactions pris en compte dans le modèle à savoir les efforts de cohésion et les efforts de contact, l'attention est beaucoup plus portée sur le premier, le second n'étant géré que pour des cas de chargement particulier (choc entre blocs de particules, chargement alterné avec refermeture de fissures).

Les efforts de cohésion

Comme les particules sont indéformables, ce sont les interactions élastiques entre les particules qui assurent la réponse mécanique du milieu, en autorisant un chevauchement des particules. Ces interactions sont modélisées pour deux particules par un torseur d'efforts appliqué à leur frontière commune ou par des poutres reliant le centre des polygones de Voronoï, comme

indiqué sur la **Figure 4.12**. Dans le cadre de cette étude c'est le comportement géométriquement linéaire des poutres qui a été utilisé, mais des poutres non linéaires géométriquement pouvant gérer les transformations finies sont développées dans le modèle afin de représenter certains phénomènes comme l'écaillage. Pour des problèmes de statique la version du modèle est strictement identique à un « lattice model » (Schlangen et Garboczi 1997). La gestion de la géométrie des particules permet de traiter les problèmes de dynamique, pour lesquels les effets d'inertie ne peuvent plus être négligés et permet de prendre en compte les phénomènes de contact dans le matériau (que l'on rencontre par exemple lors de refermeture de fissures, ou lors d'impact entre deux solides).

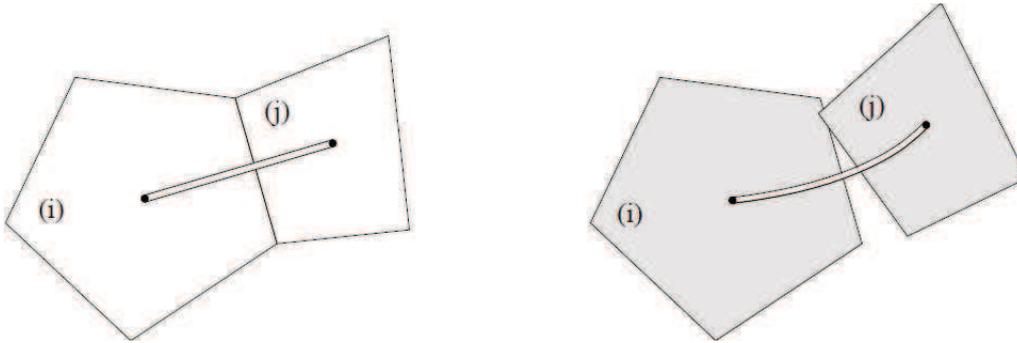


Figure 4.12 : Effort de cohésion entre deux particules déformées (Delaplace 2008).

Les efforts de contact

Un assemblage de poutres ne permet pas de représenter les efforts de contact. C'est la géométrie des particules qui permet de prendre en compte ce type d'interaction : si deux particules non liées entre elles par des poutres se superposent, alors un effort de contact est généré. Dans la version du modèle utilisée ici, une représentation simple des efforts de contact a été privilégiée (Delaplace 2008). Un effort de contact est représenté par un vecteur. La norme de ce vecteur est proportionnelle à la surface de recouvrement, sa direction est perpendiculaire au plus grand segment de droite joignant les points d'intersection (voir **Figure 4.13**). Son point d'application est le centre de gravité de la surface de recouvrement. Le calcul des efforts se fait suivant la procédure suivante :

- classification des particules dans une grille,
- pour chaque paire de particules situées dans des cases voisines, test du contact,
- si deux particules sont en contact, calcul de la surface de recouvrement.

Rappelons qu'aucun effort de contact n'est calculé si le milieu est élastique. Ce choix est justifié par le comportement du matériau considéré, mais rien n'interdit de calculer ces efforts de contacts entre des particules reliées par des poutres.

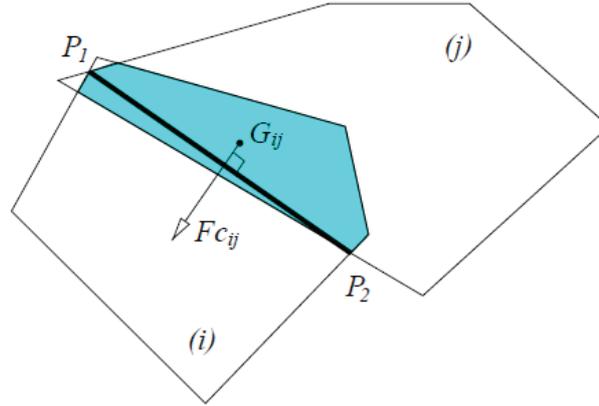


Figure 4.13 : Effort de contact entre deux particules (Delaplace 2008).

Comportement non-linéaire

Le comportement non linéaire du matériau est obtenu en introduisant un seuil de rupture pour les poutres. Ce seuil est fonction des déformations de chaque poutre, et limite :

- les déformations axiales de la poutre,
- les rotations des extrémités des poutres.

Le critère de rupture de la poutre ij est atteint pour la condition (Delaplace et Desmorat 2007) :

$$P_{ij}(\varepsilon_{ij}, |\theta_i - \theta_j|) \geq 1 \quad (4.37)$$

ε_{ij} est la déformation axiale de la poutre, θ_i et θ_j sont les rotations respectivement des particules i et j . $P_{ij}(\cdot)$ est une fonction de couplage des déformations et des rotations. Le comportement des poutres est choisi comme étant élastique-fragile. Si le critère (4.38) est vérifié, la poutre se casse de façon irréversible. D'autres comportements peuvent être considérés, le plus classique étant le comportement adoucissant linéairement mais le comportement de type rupture fragile est suffisant pour représenter la réponse non linéaire du matériau fragile (Delaplace et Desmorat 2007). De plus la résolution numérique du modèle est accélérée par la simplicité de ce comportement. Nous avons vu que l'hétérogénéité du matériau était prise en compte dans l'aléa du maillage. Cette hétérogénéité induit aussi une différence de comportement au niveau de la microstructure du matériau. Cette différence est prise en compte en introduisant deux variables aléatoires dans l'expression du critère de rupture. Suivant les travaux de (Hermann et Roux 1990; D'Adetta et al. 2002), le critère utilisé est de la forme (Delaplace et Desmorat 2007) :

$$P_{ij} = \left(\frac{\varepsilon_{ij}}{\varepsilon_{ij}^{\sigma}} \right)^2 + \left(\frac{|\theta_i - \theta_j|}{l_{ij} \theta_{ij}^{\sigma}} \right) \geq 1 \quad (4.39)$$

où ε_{ij}^σ et θ_{ij}^σ sont des variables aléatoires gaussiennes. Les surfaces seuil obtenues avec ce critère dans le repère $(\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22})$ et dans le repère $(\sigma_{11}, \sigma_{22})$ sont tracées sur la **Figure 4.14**.

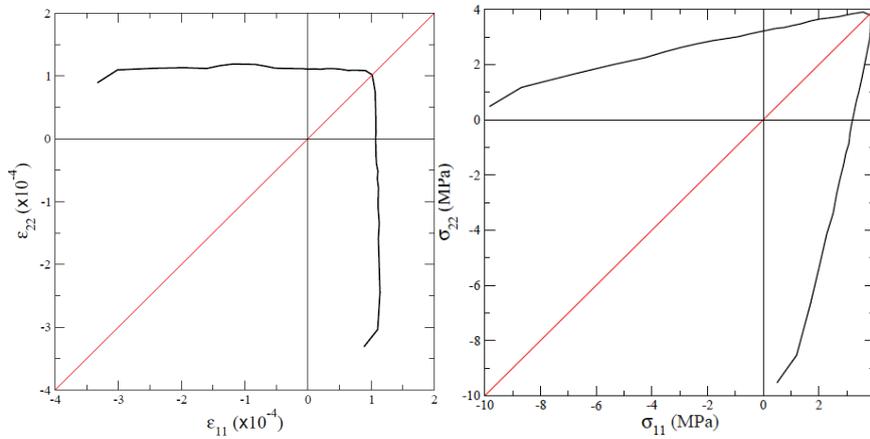


Figure 4.14 Surface seuil obtenue par le modèle (Delaplace 2008).

La surface n'est pas fermée pour les sollicitations de bi-compression car la fissuration ne peut se développer. Seule la version 3D permet d'obtenir l'enveloppe complète, en autorisant une extension (et donc un endommagement) dans la direction perpendiculaire au plan de charge.

Les effets d'échelle sont représentés directement en incluant naturellement l'hétérogénéité. Plus la taille de l'éprouvette est importante, plus le nombre de défauts est important et plus la résistance moyenne de l'éprouvette diminue.

Algorithme de résolution

Deux algorithmes sont implantés dans le modèle, l'une pour l'analyse statique, l'autre pour l'analyse dynamique. Nous présentons ici celui relatif à l'analyse statique.

Pour un chargement donné, un système du type

$$\mathbb{K}(u)u = f \quad (4.40)$$

est résolu. $\mathbb{K}(u)$ représente la matrice de rigidité globale, évoluant au cours du chargement. u est le vecteur déplacement comprenant les degrés de liberté des particules et f est le vecteur effort appliqué aux particules. Deux algorithmes sont utilisés pour résoudre le problème :

- chargement monotone : c'est l'algorithme le plus courant, aussi utilisé pour les codes éléments finis.

Itération k

- 1- application du chargement f^k ,
- 2- calcul de u^k par une méthode de résolution itérative,
- 3- stockage du couple (u^k, f^k) ,
- 4- identification des m liens tels que :

$$P_{i_p j_p} \geq 1 \quad p \in \{1, \dots, m\} \quad (4.41)$$

- 5- modification de la matrice de raideur par :

$$\mathbb{K}^{k+1} = \mathbb{K}^k - \sum_{p=1}^m L_{i_p j_p}^T \mathbb{K}_{i_p j_p} L_{i_p j_p} \quad (4.42)$$

où $L_{i_p j_p}$ est la matrice de connectivité de l'élément $i_p j_p$.

Fin Itération k

Le défaut de cet algorithme est que la réponse obtenue dépend du chargement $\Delta f = f^{k+1} - f^k$. De plus, si le pas de chargement est trop grand, l'algorithme peut ne pas converger. C'est l'algorithme suivant qui a été proposé (Delaplace et Desmorat 2007) :

- prédiction élastique : ici le chargement n'est pas contrôlé par des incréments d'effort ou de déplacement mais par une décroissance de la raideur apparente. Cet algorithme peut être utilisé dans un code éléments finis classique (Rots et al. 2006) :

Itération k

- 1- application d'un chargement élastique f^{el}
- 2- calcul de u^{el} par une méthode de résolution itérative
- 3- calcul de α_{min} tel que

$$\alpha_{min} = \min_{\substack{i, j \in \{1, \dots, n\} \\ i \neq j}} \left(\frac{1}{P_{ij}} \right) \quad (4.43)$$

- 4- Stockage du couple $(\alpha_{min} u^{el}, \alpha_{min} f^{el})$ correspondant au lien $i_k j_k$
- 5- Modification de la matrice de raideur par l'équation (4.42)

Fin itération k .

Identification des paramètres élastiques

Les paramètres E et ν du matériau isotrope dépendent des caractéristiques des poutres. Pour les poutres d'Euler-Bernoulli utilisées dans le modèle, ces caractéristiques sont :

- le module d'élasticité E_p (identique pour toutes les poutres)

- l'aire A_p de la section,
- la longueur l_p
- le moment d'inertie I_p

A_p et l_p sont imposées par la géométrie du maillage. Ainsi, les paramètres E et ν du matériau sont obtenus à partir du module d'élasticité E_p des poutres et de leur moment d'inertie, ou plutôt du paramètre adimensionné $\alpha = 64I_p / (\pi\varpi^4)$, ϖ étant le diamètre de la section équivalente de la poutre. L'identification se fait en considérant d'une part que le module d'Young du matériau E est proportionnel au module d'Young des poutres, et d'autre part que le coefficient de Poisson ν du matériau ne dépend pas du module d'Young des poutres. En conséquence, le calage des paramètres élastiques est fait à partir d'un essai de traction simple. L'exemple suivant décrit la procédure pour obtenir le jeu de paramètres élastiques ($E = 30\text{GPa}$, $\nu = 0.2$). Les deux étapes d'identification sont (**Figure 4.15**) :

- 1- calage du coefficient de Poisson ν en fonction du paramètre α ,
- 2- calage du module d'Young E en fonction du module E_p des poutres.

Les paramètres correspondant au jeu de paramètres ci-dessus sont $E_p = 37.5\text{ GPa}$ et $\alpha = 0.81$.

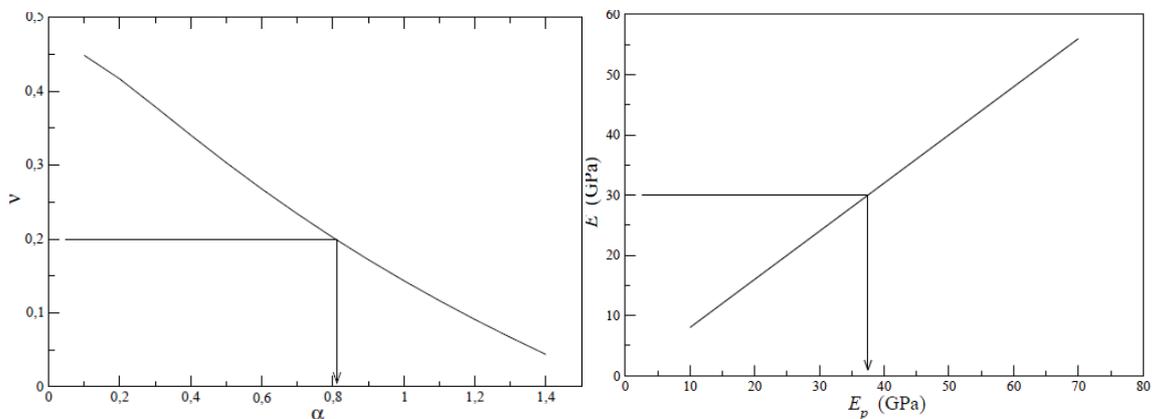


Figure 4.15 Identification des paramètres élastiques (Delaplace 2008).

Identification des paramètres de rupture des poutres

Identification des valeurs moyennes

Dans les matériaux hétérogènes quasi-fragiles comme le béton, le mode de rupture privilégié est l'apparition de microfissures dues à des sollicitations locales en traction. Pour un essai de compression c'est le développement de fissures de traction orientées perpendiculairement à la direction de chargement qui est à l'origine de la rupture de l'échantillon. Dans le modèle DEAP,

la rupture est contrôlée par les deux variables aléatoires ε_{cr} et θ_{cr} caractérisées par leur distribution gaussienne. Les moyennes de ε_{cr} et θ_{cr} sont notées $\bar{\varepsilon}_{cr}$ et $\bar{\theta}_{cr}$, $\tau_{\varepsilon_{cr}}$ et $\tau_{\theta_{cr}}$ sont leur écart types. L'identification des paramètres de rupture se fait en deux étapes. La distribution de la variable ε_{cr} est déterminée à partir d'essais de traction. Ensuite la distribution de θ_{cr} est déterminée. Les paramètres sont calés sur l'effort maximal à rupture en traction. Ce sont ces paramètres qui permettent de déterminer les moyennes des distributions. Cette démarche est justifiée par le fait que l'effort maximal en traction n'est contrôlé que par ε_{cr} . Cette propriété est montrée sur un essai de traction simple. L'éprouvette testée est constituée de 64×64 particules. La **Figure 4.16** montre l'évolution de la contrainte maximale en fonction de $\bar{\varepsilon}_{cr}$, pour $\sigma_{\varepsilon_{cr}} = 0.05$ fixé. Cette évolution est linéaire. Chaque point de la courbe représente une moyenne sur 10 éprouvettes. La distribution de θ_{cr} est fixée par $\bar{\theta}_{cr} = 10^{-2}$ et $\sigma_{\theta_{cr}} = 0.05$. La **Figure 4.17** montre la valeur de la contrainte maximale en traction en fonction de θ_{cr} (écart-type constant $\sigma_{\theta_{cr}}$) à distribution fixée de ε_{cr} ($\bar{\varepsilon}_{cr} = 3.10^{-4}$ et $\sigma_{\varepsilon_{cr}} = 0.05$). La valeur maximale de la contrainte en traction est indépendante de $\bar{\theta}_{cr}$, sauf pour les petites valeurs qui n'ont pas de signification physique pour le matériau étudié. L'exemple suivant est choisi pour décrire la procédure pour obtenir les caractéristiques de rupture ($\sigma_t = 3MPa$, $\sigma_c = -30MPa$). Les deux étapes d'identification sont :

- 1- calage de $\bar{\varepsilon}_{cr}$ pour obtenir $\sigma_t = 3MPa$,
- 2- calage de $\bar{\theta}_{cr}$ pour obtenir $\sigma_c = -30MPa$.

Les paramètres identifiés sont $\bar{\varepsilon}_{cr} = 1.8 \times 10^{-4}$ et $\bar{\theta}_{cr} = 5.6 \times 10^{-3}$. Finalement, la réponse globale de la contrainte en fonction de la déformation pour ces paramètres est tracée sur la **Figure 4.18** pour un chargement en traction-compression.

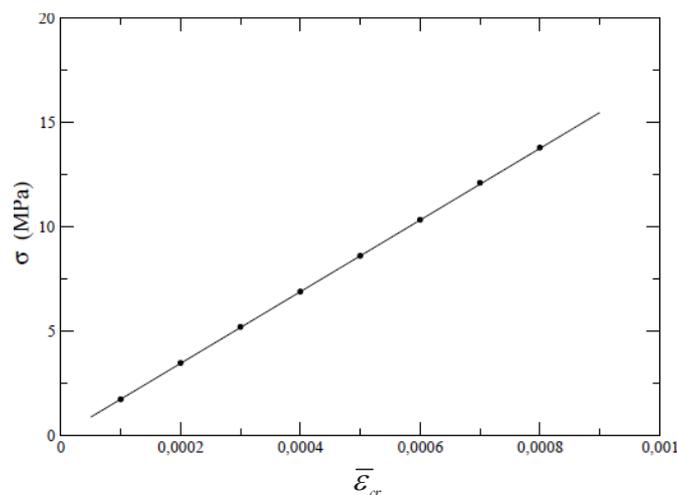


Figure 4.16 Evolution de la contrainte maximale en fonction de ε_{cr} (Delaplace 2008).

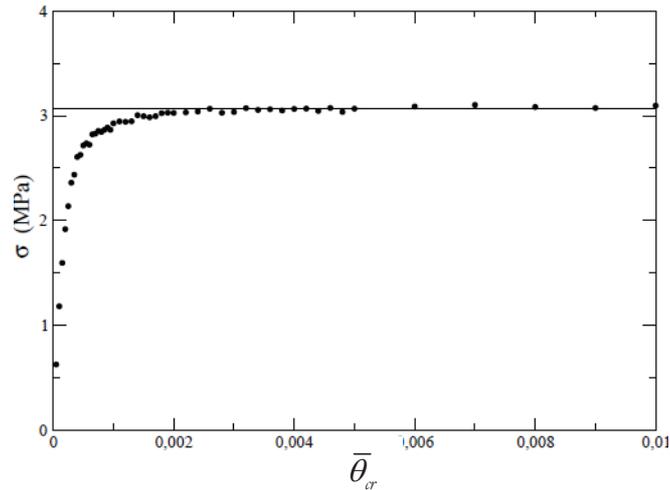


Figure 4.17 Evolution de la contrainte maximale en fonction de $\bar{\theta}_{cr}$ (Delaplace 2008).

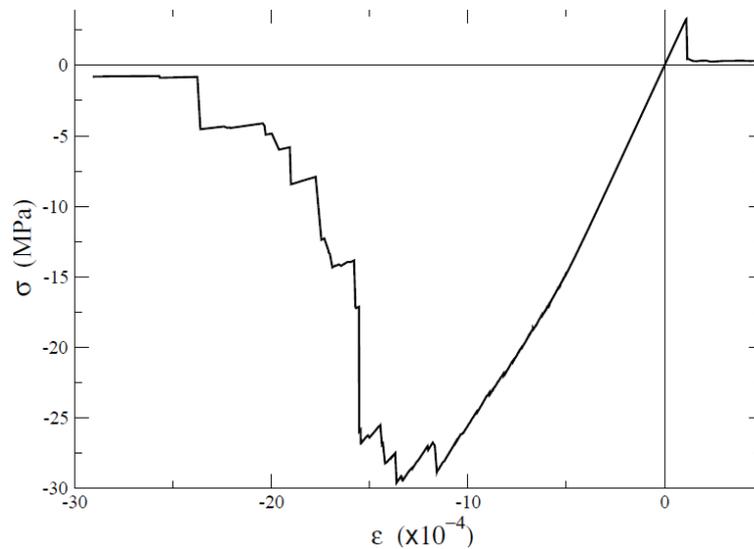


Figure 4.18 Réponse contrainte-déformation en traction et compression du modèle (Delaplace 2008).

Identification des écarts types

Pour identifier les écarts types, des données expérimentales sur plusieurs essais permettant de calculer une valeur représentative de la moyenne et l'écart type de la résistance doivent être fournies. La diminution ou l'augmentation de $\sigma_{\varepsilon_{cr}}$ et $\sigma_{\theta_{cr}}$ permettent respectivement de déterminer la diminution ou l'augmentation de l'écart type de la résistance à rupture. Les paramètres suivants ont été choisis par l'auteur : $\sigma_{\varepsilon_{cr}} = \sigma_{\theta_{cr}} = 0.05$. Ces valeurs permettent d'avoir des résistances à rupture typique d'un matériau cimentaire. Par exemple pour un assemblage de 128×128 particules sollicitées en traction, la valeur moyenne de résistance à rupture est $\sigma_{rupture} = 3MPa$ pour un écart type de 0.2 MPa.

Soulignons que nous avons présenté les aspects du modèle tel qu'il a été utilisé dans cette étude. Des développements sont en cours, notamment la prise en compte de grands déplacements, les problèmes dynamiques avec le développement d'un schéma implicite adapté à la dissipation des fréquences dues à la rupture fragile des liaisons entre particules, le post-traitement des résultats basé sur la corrélation d'images (Delaplace et Hild 2007), etc... Pour plus de détails le lecteur est invité à se référer à (Delaplace 2008).

Indépendance du maillage

Les propriétés élastiques du matériau ainsi modélisées doivent être indépendantes de la densité de particules choisies dans le modèle. Une étude de l'évolution des propriétés élastiques en fonction de la densité de particules montrent une convergence rapide vers des valeurs asymptotiques (**Figure 4.19**). Des densités minimales de 100 particules en 2D et de 30 particules en 3D par longueur caractéristique de la géométrie de l'éprouvette doivent être considérées pour avoir une bonne indépendance en fonction du nombre de particules.

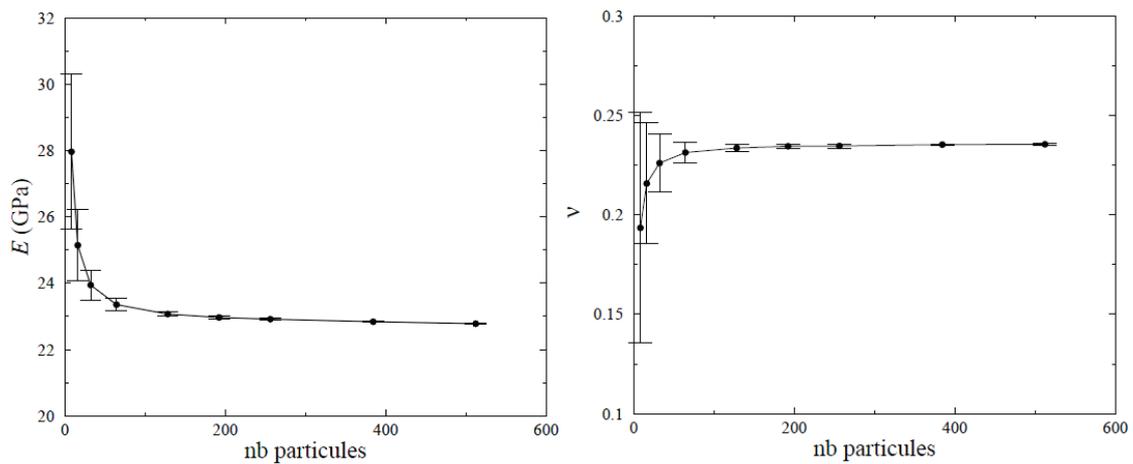


Figure 4.19 Etude de l'indépendance au maillage pour le module d'Young et le coefficient de Poisson (Delaplace 2008)

Ouverture de fissures

De part la nature du modèle, l'ouverture des fissures est obtenue simplement. Lorsqu'une poutre reliant deux particules i et j se rompt, une fissure se crée et est orientée perpendiculairement au segment commun aux deux particules. L'ouverture de fissure (saut de déplacement) s'obtient par la différence entre les déplacements u_i et u_j des centres des deux particules projetés sur la normale à la fissure \vec{n}_{ij} :

$$e_{ij} = \langle (u_i - u_j) \cdot \vec{n}_{ij} \rangle \quad (4.44)$$

avec e_{ij} l'ouverture de fissure et $\langle x \rangle = \max(x, 0)$.

IV.7 Couplage ED/EF

La méthode des éléments discrets est coûteuse à mettre en œuvre sur des structures de grande taille, son utilisation à cette échelle nécessite un grand nombre de degrés de liberté. L'approche du couplage Eléments Finis /Eléments Discrets (ED/EF) consiste à mettre à profit les avantages des éléments discrets, (ici la description fine de la fissuration) en s'affranchissant de ses inconvénients, le temps de calcul long pour les structures de grande taille. La fissuration se localise le plus souvent et nous estimons qu'il est intéressant d'enrichir la description de la zone endommagée par la méthode des éléments discrets et de simuler le reste de la structure avec la méthode des éléments finis classique en considérant que loin de la zone endommagée, la structure ne présente pas d'importantes discontinuités et donc qu'une information globale peut y être privilégiée. Il nous faut disposer d'une plate forme de couplage entre les deux méthodes qui soit robuste, adaptée à toutes formes de géométries et de sollicitations. On présente ici une brève revue des procédures de couplage nous permettant de conclure sur celle qui a été adoptée.

IV.7.1 Les différentes stratégies de couplage

Le couplage ED/EF est le plus souvent utilisé dans la littérature pour simuler des problèmes de dynamique ou d'impact sur structures. Mais les premiers travaux relatifs au couplage entre méthode continue et méthode discontinue (dynamique moléculaire) sont attribués aux physiciens pour l'étude des relations inter-atomiques à l'échelle nanométrique ou encore dans l'étude des dislocations. La différence principale entre ces couplages concerne le type de frontière utilisé entre les sous-domaines et le nombre de degrés de libertés communs. On distinguera le couplage bord à bord, permettant de limiter le nombre de degrés de liberté communs et donc la quantité de données à échanger entre les différents domaines, et le couplage avec recouvrement permettant l'utilisation de maillage non compatibles entre les différents sous-domaines.

Couplage bord à bord

Il s'agit d'une méthode de couplage entre deux domaines distincts (**Figure 4.20**). Le couplage est réalisé bord à bord c'est à dire sans recouvrement et est le plus simple à réaliser (Cundall et al. 2003). De plus l'avantage dans ce genre d'approche est clairement le gain de temps. Cependant l'apparition d'ondes fantômes qui sont délicates à traiter constitue une limitation à ce type de couplage. Ces ondes sont dites fantômes car elles n'ont aucun sens mécanique et qu'elles apparaissent pour des raisons purement numériques. Il est alors impossible d'imposer un état d'équilibre sous l'influence des forces fantômes. On peut expliquer leur apparition par le fait que les hautes fréquences du modèle discret ne peuvent pas être représentées dans le modèle continu et sont par conséquent réfléchies à l'interface. Il existe dans la littérature plusieurs solutions pour remédier à ce problème. La Bridging Domain Method de (Xiao et Belytschko 2004) ou encore la Bridging Scale Method de (Wagner et Liu 2003) permettent de limiter ce phénomène. Une autre

problématique est que les frontières du modèle discret, en l'occurrence les centres des particules ne sont pas positionnés de manière ordonnée, ce qui pose problème pour les relier aux éléments finis. On introduit alors des éléments finis de même taille que les éléments discrets, mais cela réduit significativement le gain de temps et limite fortement l'intérêt de la méthode.

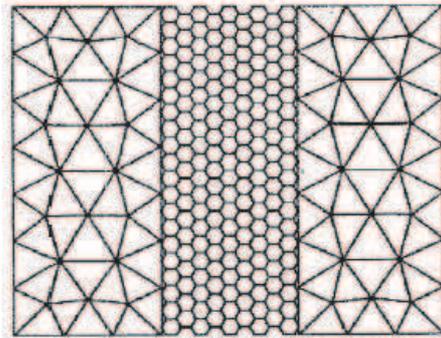


Figure 4.20 Couplage bord à bord (modèle éléments finis de part et d'autre du modèle discret)(Belytschko et Xiao 2003).

Couplage par recouvrement

L'intérêt de ce genre de couplage réside dans la jonction de deux maillages incompatibles. Le couplage bord à bord est restrictif et comme on l'a vu, peut induire des raideurs parasites au niveau de l'interface. Différentes méthodes ont été développées dans ce cadre. Les travaux précurseurs sont ceux de (Dhia 1990) avec la méthode Arlequin et plus récemment de (Xiao et Belytschko 2004). Les possibilités de zones de recouvrement entre deux domaines EF /ED sont très diverses (Figure 4.21). Pour assurer la continuité cinématique dans la zone de recouvrement l'énergie totale du système est généralement obtenue en pondérant l'énergie de chaque sous-domaine par un paramètre de recouvrement.

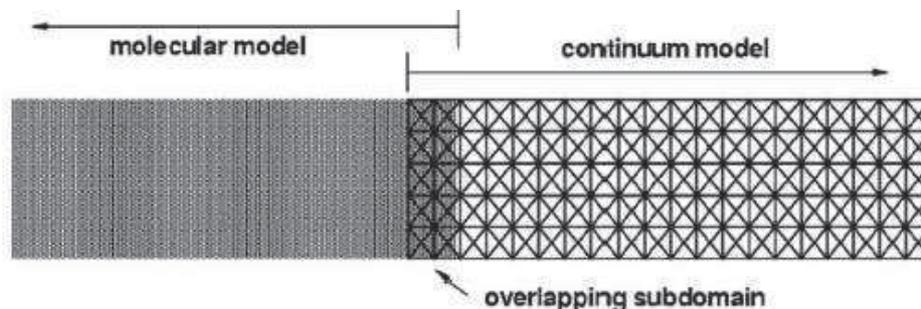


Figure 4.21 Couplage avec recouvrement (Belytschko et Xiao 2003).

Cette approche est délicate à mettre en œuvre. Les nombreuses thèses lancées récemment sur ce sujet en témoignent. Pour des soucis de coût de calcul, nous avons choisi de ne mettre en œuvre aucun des modèles présentés. Une méthode de réanalyse des résultats EF par les ED nous semble plus appropriée. Dans la section suivante nous allons présenter comment cette réanalyse est mise en œuvre.

IV.8 La méthode de réanalyse proposée

IV.8.1 Etude raffinée de la fissuration

La méthode proposée n'est pas tout à fait un couplage des deux modèles mais plutôt une réanalyse des résultats EF de la zone d'intérêt par les ED. Ce choix s'explique par le fait que tout d'abord on ne veut utiliser les ED que dans les zones où la fissuration se localise (voir **Figure 4.22**). On a donc besoin d'identifier ces zones par un premier calcul EF. Ensuite le modèle EF, réputé robuste est supposé suffisamment fiable pour que l'on utilise la réponse de la structure localement (en l'occurrence le champ de déplacement) comme conditions aux limites du modèle ED. Les ouvertures de fissures (sauts de déplacement) seront obtenues naturellement. L'objectif est évidemment un gain de temps par rapport aux méthodes de couplage existant et de disposer d'un outil numérique moins lourd, ce qui paraît opportun quand on sait que la finalité du travail est de l'intégrer à un modèle THM existant.

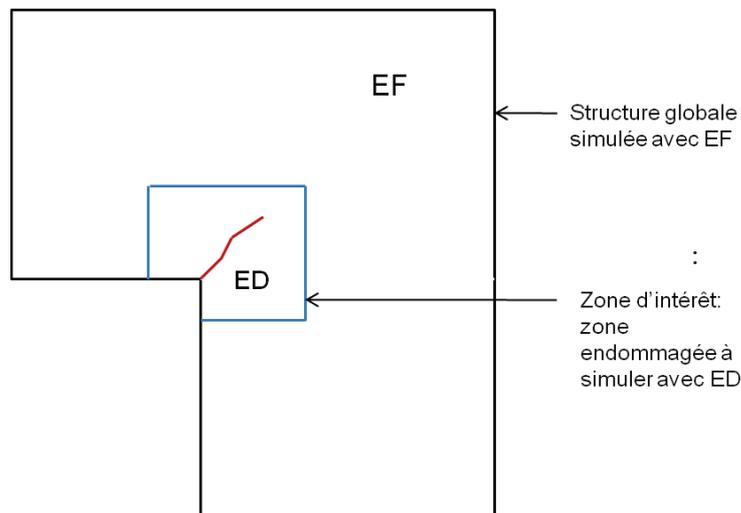


Figure 4.22 Zone d'intérêt à raffiner par les ED.

IV.8.2 La procédure de réanalyse appliquée au cas THM

Une fois l'ouverture de fissure obtenue au pas de calcul n on estime localement tous les paramètres impactés par la fissuration à savoir les propriétés mécaniques et hydromécaniques notamment la perméabilité. Ces paramètres obtenus seront des données d'entrée du modèle EF au pas de calcul $n+1$ (**Figure 4.23**). Ce processus itératif permet de suivre l'histoire du

chargement dans le cas de sollicitations thermo-hydro-mécaniques. Actuellement seule la perméabilité est recalculée de cette manière et l'objectif à court terme est d'étendre le principe sur le module d'Young, le coefficient de Poisson, le coefficient de Biot. Pour le calcul de la perméabilité un écoulement de type Poiseuille est considéré entre les plans de la fissure

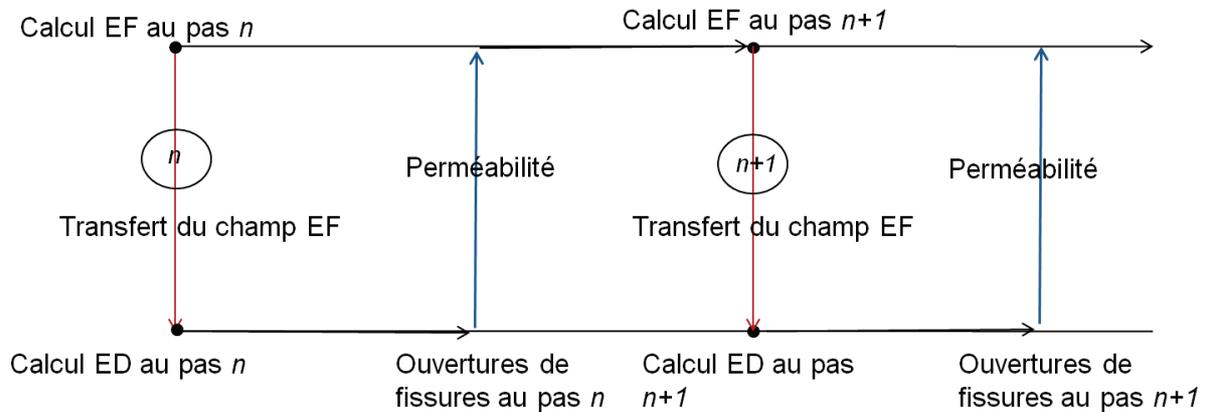


Figure 4.23 : Processus d'itération dans le cas d'un chargement THM.

IV.9 Illustration de la méthode de réanalyse

La procédure de réanalyse présentée est illustrée à travers des exemples dans le cas d'un chargement purement mécanique. Deux simulations sont d'abord effectuées : les poutres expérimentales entaillée et bi-entaillée de (Schlangen 1993) sont étudiées. Ces premiers tests permettent d'étudier la validité de l'approche en termes d'initiation et de propagation de la fissuration. Ensuite la simulation de l'essai brésilien permet de valider l'approche par rapport à l'ouverture de fissures par comparaison de la perméabilité aux valeurs expérimentales disponibles dans la littérature.

IV.9.1 La poutre entaillée

Ce premier cas a été testé lors de la campagne expérimentale d'essais de (Schlangen 1993) dans le cadre de sa thèse visant à étudier les mécanismes de fissuration du béton sous chargements complexes. Il a ensuite été abordé numériquement notamment par (Peerlings 1999; Geers et al. 2000) et récemment par (Richard et al. 2010). Il s'agit d'une poutre entaillée et soumise à un chargement antisymétrique 4 points. La **Figure 4.24** montre les dimensions de la poutre ainsi qu'une représentation schématique du protocole d'essai. Expérimentalement, le chargement est contrôlé en effort de telle sorte que l'on ait un rapport de 1/10 entre les efforts appliqués. Ce type de chargement appliqué est intéressant pour l'analyse de la rupture du béton en mode mixte avec cisaillement. La difficulté réside dans la reproduction numérique du profil de fissuration.

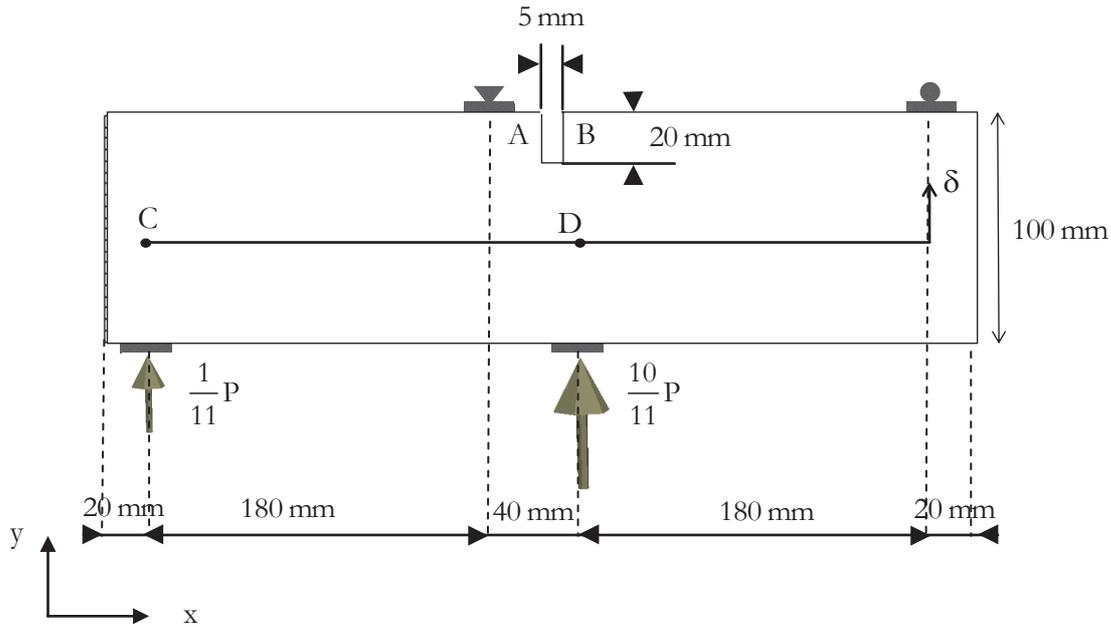


Figure 4.24 : Dimensions, conditions aux limites et chargement de la poutre entaillée

Ce cas-test met en évidence la capacité d'un modèle de béton à décrire le comportement d'éléments de structure lorsque le repère principale tourne au cours du chargement (Richard et al. 2010). Le béton utilisé a été caractérisé expérimentalement avec un module d'Young de 35MPa et un coefficient de Poisson de 0.2. On dispose pour ce test du faciès de fissuration et des résultats expérimentaux de l'évolution de l'effort total appliqué P en fonction de δ et en fonction des déplacements horizontaux et verticaux des coins A et B de l'entaille : le CMOD (Crack Mouth Opening Displacement) et CMSD (Crack Mouth Sliding Displacement) tels que :

$$\begin{aligned} \text{CMOD} &= u_x(A) - u_x(B) \\ \text{CMSD} &= u_y(A) - u_y(A) \\ \delta &= u_y(C) - u_y(D) \end{aligned} \quad (4.45)$$

C'est le modèle d'endommagement de Mazars qui a été utilisé pour les simulations pour sa simplicité et sa robustesse. Les simulations sont effectuées en 2D, avec des éléments finis de type triangle à 3 noeuds (TRI3) sous l'hypothèse de contraintes planes. Au total 25781 éléments sont utilisés. Le maillage est montré sur la **Figure 4.25**. Pour reproduire les conditions aux limites expérimentales, des patins en acier de 20 mm de largeur et de 5mm de hauteur sont considérés. Leur module d'Young et coefficient de Poisson sont pris égaux à $E_{patin} = 210 \text{ GPa}$ et $\nu_{patin} = 0.3$. Pour éviter d'une part le poinçonnement de la poutre au niveau des zones d'application des efforts et d'autre part pour maintenir constant le rapport r entre les deux efforts imposés, un chevêtre modélisé en éléments barre (Seg2) a été imaginé en dessous de la poutre et le chargement initial en effort a été transformé en déplacement imposé u_d . Le glissement/frottement entre les patins et la poutre devrait être rigoureusement pris en compte (Geers et al. 2000), mais ne l'est pas ici par soucis de simplicité.

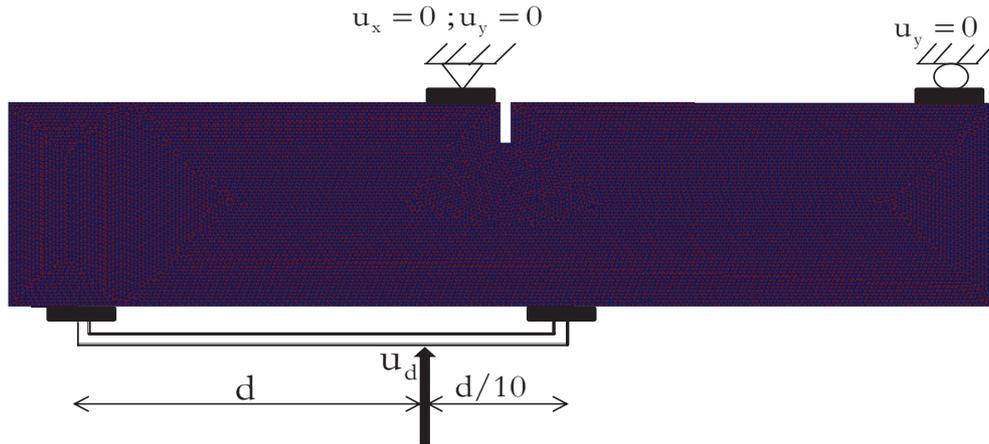


Figure 4.25 : Maillage de la poutre (25781 éléments TRI3) et le chevêtre servant à appliquer le chargement.

Le **Tableau 4.1** regroupe les paramètres du modèle de Mazars qui ont été choisis.

Tableau 4.1 : Paramètres du modèle de Mazars

$E(GPa)$	ν	A_t	A_c	B_t	B_c	ε_{d0}	$l_c (mm)$
35	0.2	0.89	1	18000	1391.3	1.e-04	8

La courbe contraintes-déformations correspondant à ces paramètres en traction est montrée sur la **Figure 4.26**.

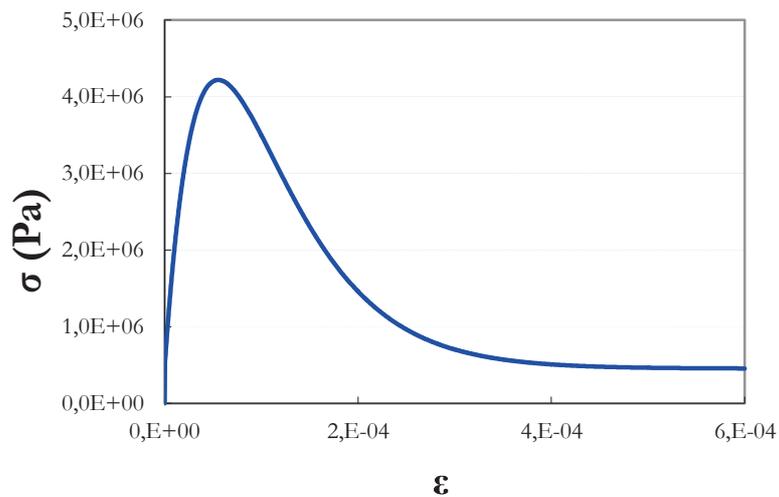


Figure 4.26 : Courbe contraintes-déformations en traction du modèle de Mazars avec les paramètres indiqués dans le Tableau 4.1

Trois cartes d'endommagement obtenues au cours du chargement sont montrées sur la **Figure 4.27** permettant de suivre l'évolution de l'endommagement. Ce dernier s'initie dans le coin droit de l'entaille et se propage vers l'appui droit en dessous de la poutre, ce qui est en accord avec le faciès de fissuration obtenu expérimentalement (Schlangen 1993).

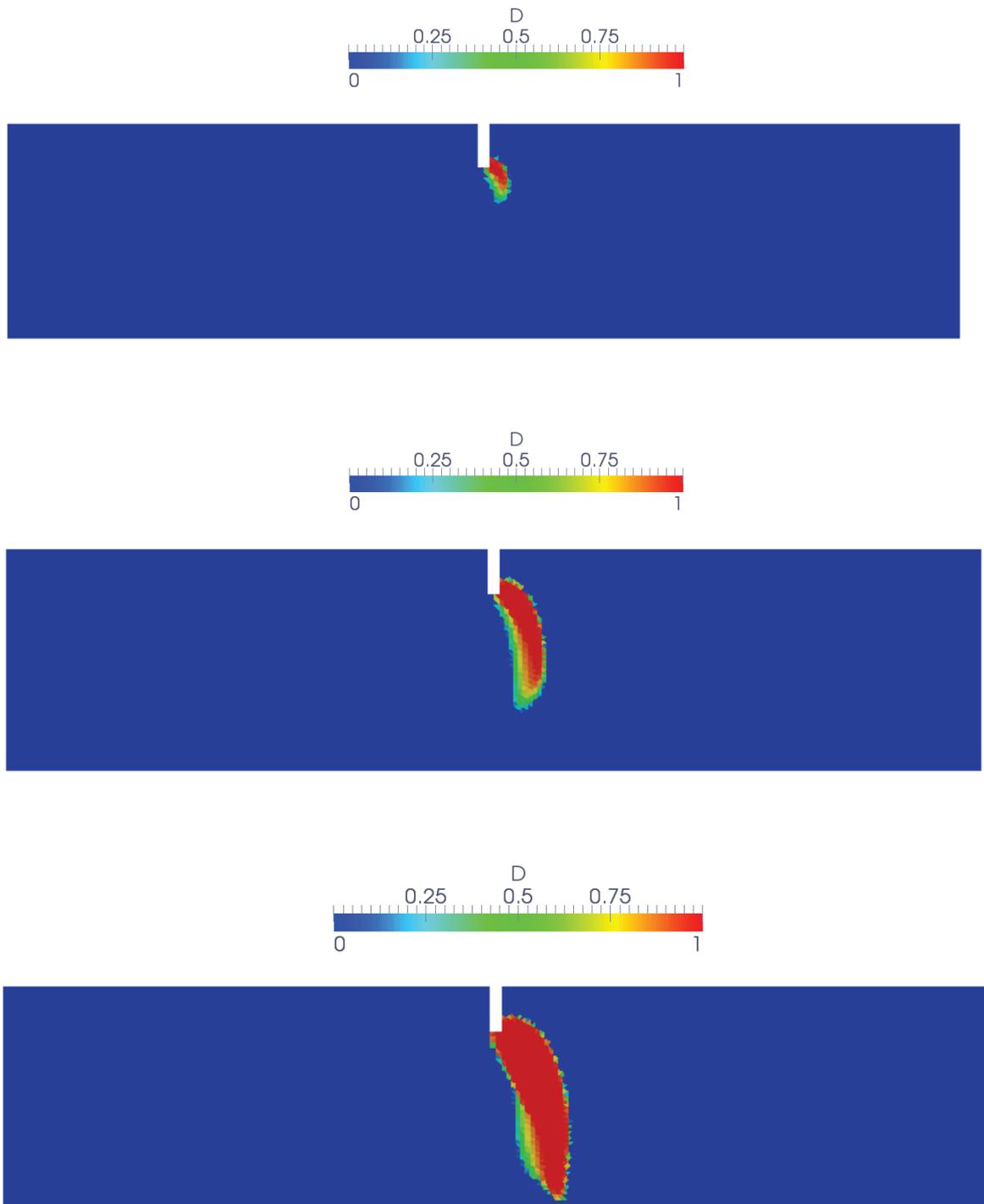


Figure 4.27 : Cartographies d'endommagement de la poutre à différents instants de chargement.

Les valeurs numériques de l'effort total appliqué en fonction de δ , du CMOD et du CMSD sont également en relativement bon accord avec les valeurs expérimentales comme on peut le constater sur la **Figure 4.28**. En résumé on peut estimer que la cinématique globale de la poutre testée est bien décrite avec le modèle non-local de Mazars. Les résultats obtenus sont en adéquation avec les résultats expérimentaux aussi bien sur le plan qualitatif que sur le plan quantitatif. Dans la suite nous allons procéder à une description plus fine de la zone endommagée avec la méthode des éléments discrets.

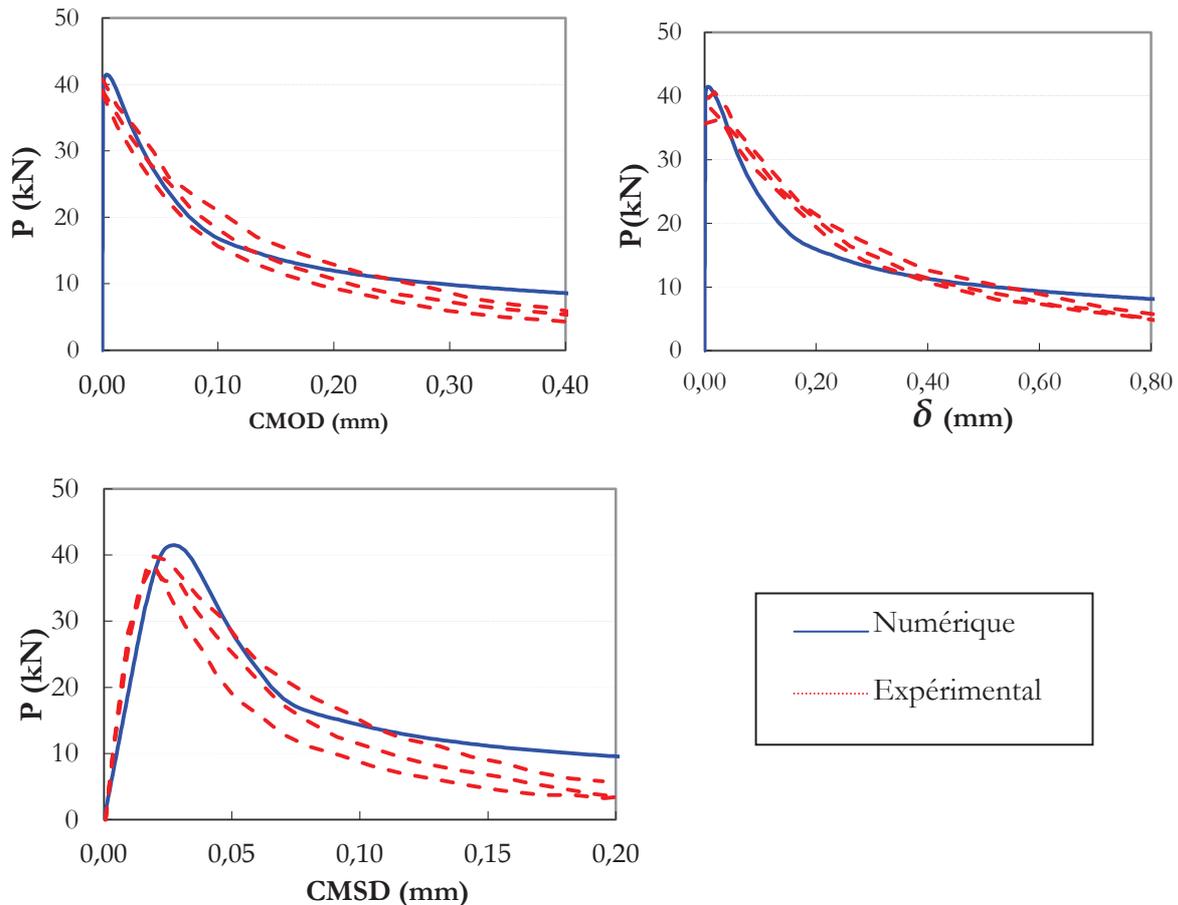


Figure 4.28 : Evolutions de l'effort appliqué en fonction a) du CMOD b) de δ et de c) du CMSD.

Ré-analyse avec les Eléments Discrets On va découper autour de la zone endommagée une zone d'intérêt telle que ses bords restent dans la « zone élastique ». La taille de cette zone n'est pas évidente à définir. A priori, les informations récupérées de la simulation EF peuvent être « diluées » si on s'éloigne trop de la discontinuité. On perd aussi dans ce cas un des intérêts de la méthode qui est le gain de temps. En revanche on ne peut se rapprocher suffisamment de la discontinuité qu'en restant dans une zone élastique. On considère ici une zone qui s'étend de 50 mm de part et d'autre de l'entaille. Le maillage de cette zone (200 x 150 particules) ainsi que les conditions aux limites sont présentés sur la **Figure 4.29**.

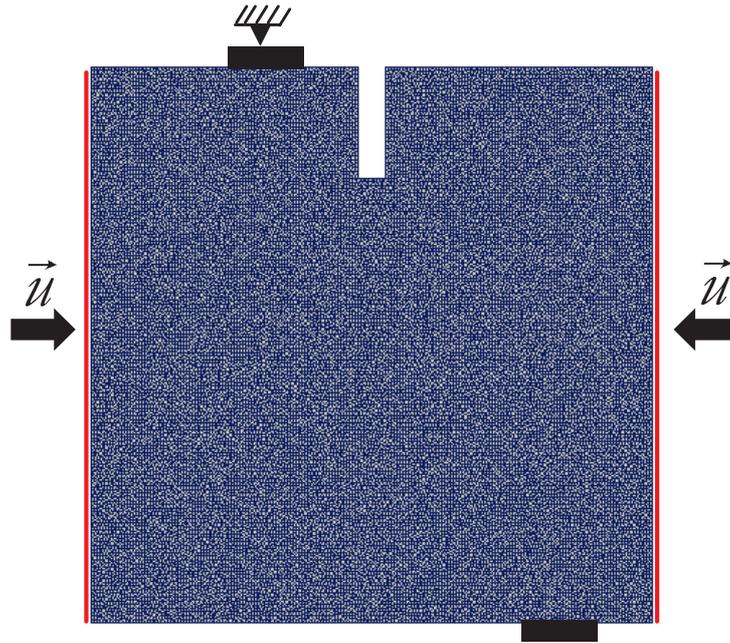


Figure 4.29 : Zone d'intérêt pour la ré-analyse avec les éléments discrets. Le champ de déplacement sur le bord non libre est noté \vec{u} .

Sur les bords non libres de cette zone les chargements correspondent au champ de déplacement récupéré du calcul EF. Les nœuds EF et ED ne coïncident pas toujours donc on procède à une interpolation linéaire du champ EF sur les centres des particules ED se trouvant sur le bord. Les paramètres du modèle identifiés pour le modèle discret sont regroupés dans le **Tableau 4.2**. Le calcul ED est effectué après chaque itération du calcul EF. Cette simulation a nécessité au total 256 itérations ED. La propagation de la fissure au cours du calcul ED est montrée sur la **Figure 4.30**

Tableau 4.2 : Paramètres du modèle Eléments Discrets

E_b (GPa)	ν	$\bar{\varepsilon}_{cr}$	$\bar{\theta}_{cr}$	$\sigma_{\varepsilon_{cr}}$	$\sigma_{\theta_{cr}}$	ρ
37.5	0.75	1.5e-04	5e-03	0.05	0.05	2300

La fissure de forme curviligne s'initie au coin droit inférieur de l'entaille et se propage vers le côté droit de l'appui où est appliqué l'effort. Ce faciès de fissuration correspond à celui obtenu expérimentalement par (Schlangen 1993). Cette correspondance est mise en évidence sur la **Figure 4.31** où l'on a superposé les deux faciès de fissuration obtenus numériquement et expérimentalement.

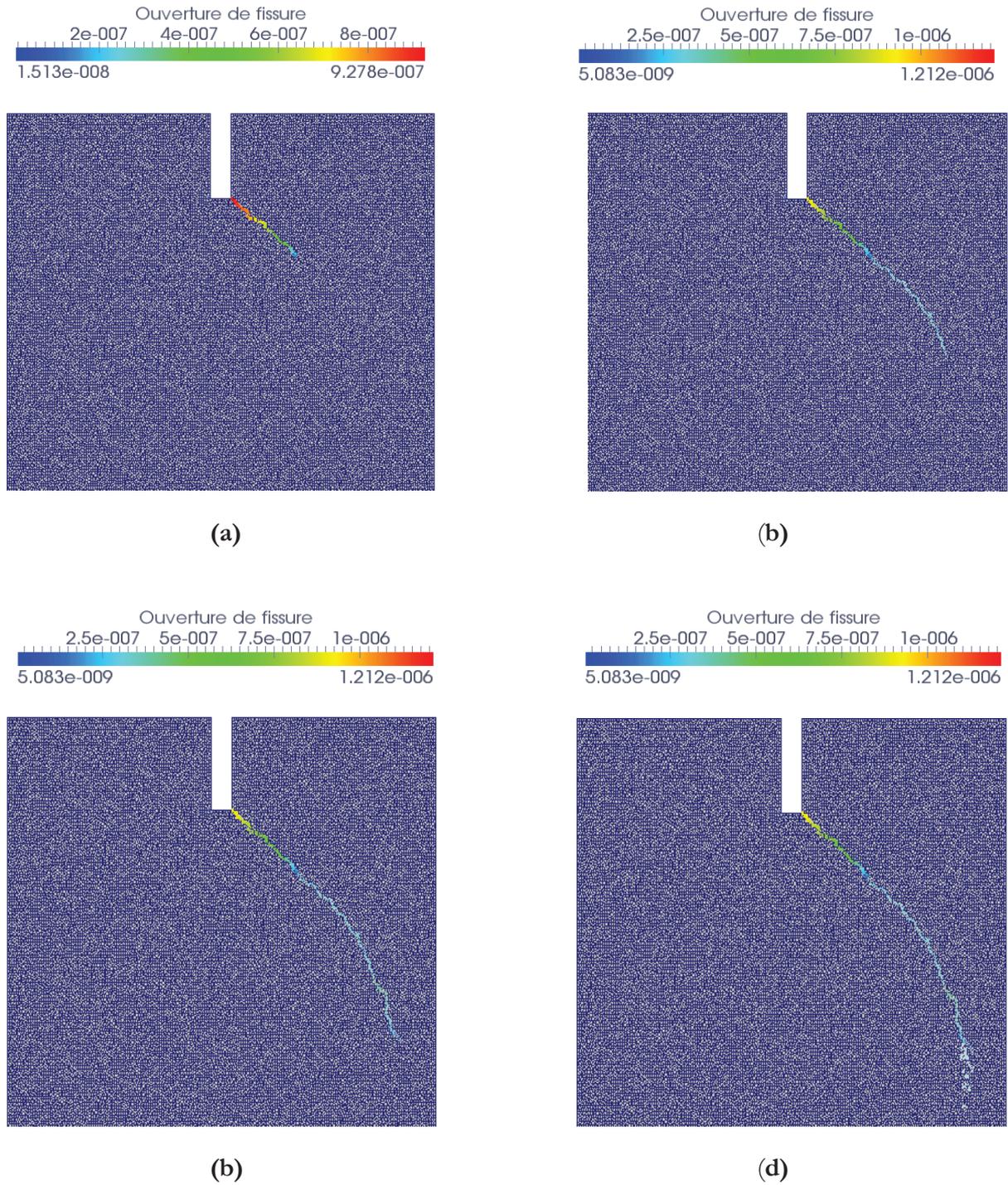


Figure 4.30 : 4 faciès de fissuration obtenus au cours du calcul discret à différents niveaux de chargement $P = 40\text{kN}$ (a) ; $P = 30\text{kN}$ (b) ; $P = 12\text{kN}$ (c) ; $P = 8\text{kN}$ (d)

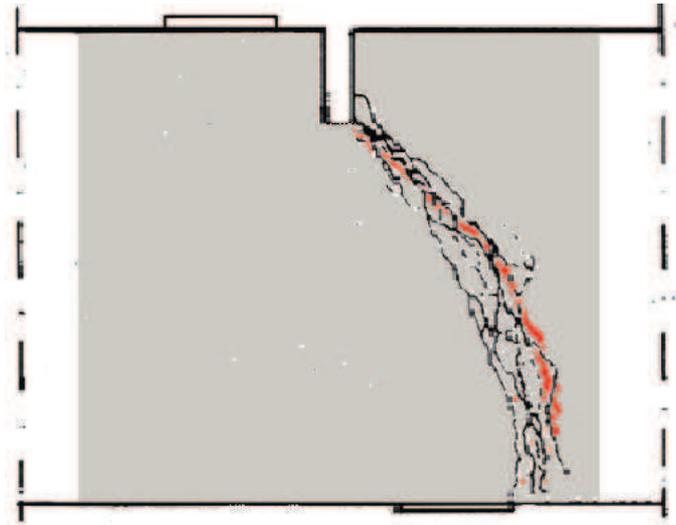


Figure 4.31 : Superposition des faciès de fissuration numérique (en rouge) et expérimental (noir).

Le champ de déplacement correspondant au faciès de fissuration ED est montré sur la **Figure 4.32**. On voit clairement l'intérêt de la méthode de réanalyse par les éléments discrets. Alors que le calcul EF nous donne une zone globalement endommagée, le calcul ED nous permet d'extraire de ce calcul des fissures associées à des sauts de déplacement qui représentent l'ouverture de fissure. Rappelons que ce premier calcul n'est pas destiné à une éventuelle analyse de l'ouverture de fissure que nous avons obtenue. Cet aspect sera abordé dans le cas-test consacré au calcul de la perméabilité. On s'est focalisé ici plutôt sur l'amorçage et la propagation de la fissure, et en ce sens le faciès de fissuration obtenu est encourageant pour la suite de l'étude.

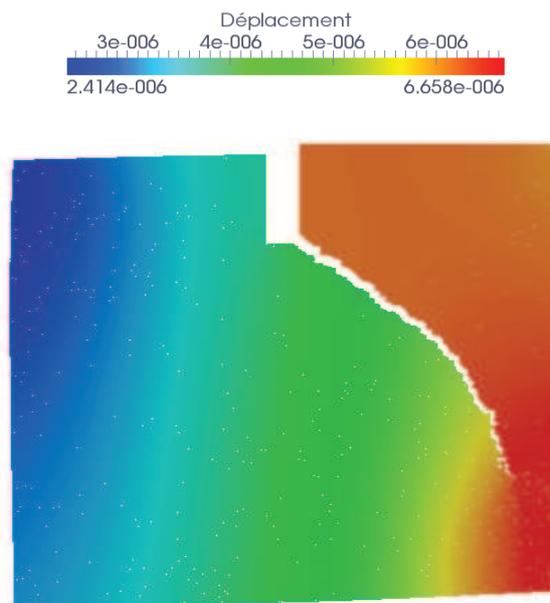


Figure 4.32 : Champ de déplacement ED de la zone d'intérêt (amplitude $\times 1000$).

Rappelons tout de même avant de conclure sur l'étude de cette poutre entaillée qu'en ce qui concerne la taille de la zone d'intérêt à considérer, des questions restent en suspens et feront l'objet d'investigations futures. En effet on s'attend par exemple à ce que celle-ci ait une influence sur le faciès de fissuration final. De plus on considère que cette zone varie au cours du temps et dans la version de la ré-analyse telle qu'implémentée, il faut attendre la fin d'un premier calcul global EF pour délimiter une zone fixe d'intérêt. C'est l'un des inconvénients de la méthode. Cet aspect fera l'objet d'investigations futures. On peut imaginer par exemple pour optimiser le calcul avoir recours à la méthode des level-set appliquée à la variable d'endommagement pour délimiter au fur à mesure du calcul EF cette zone.

Toujours par rapport à la taille de la zone d'intérêt dans la version de la réanalyse telle qu'implémentée ici, elle dépend fortement des caractéristiques géométriques et des conditions aux limites de la zone de localisation de l'endommagement et nous estimons donc qu'il ne semble pas pertinent d'établir une méthode générale permettant de l'estimer puisque les structures que nous aurons à traiter sont différentes les unes des autres. Enfin étant donné que l'énergie de fissuration est le paramètre prépondérant pour l'étude de fissuration on peut a priori estimer que pour une étude de couplage, les deux modèles EF et ED doivent être proches au sens d'une mesure de ce paramètre. (Gavoille 2009) lors de sa thèse, a par exemple introduit une fonctionnelle permettant de mesurer l'écart entre les deux modèles. La méthode des éléments discrets fournit un champ solution discrétisée, le champ de déplacement n'étant défini qu'en chaque centre des particules. A partir de la solution EF $u(\underline{x})_{EF}$ définie comme solution référence, on définit un écart de modèle local noté \aleph_i de la particule i (Gavoille 2009) :

$$\aleph = \frac{\|u_i^{ED}\| - \|u_i^{EF}\|}{\|u_i^{EF}\|} \quad (4.46)$$

A partir de cela, on définit l'écart global Λ sur l'ensemble du problème modélisé par des éléments discrets par rapport au modèle continu (Gavoille 2009) :

$$\Lambda = \frac{\sum_{i=1}^N \aleph_i}{N} \quad (4.47)$$

où N est le nombre de particules. Enfin, pour que le modèle ED soit corrélé avec le modèle continu, les paramètres E_p et ν seront identifiés à partir de la minimisation de la fonctionnelle d'écart Λ :

$$(E_p, \nu) = \underset{E_p, \nu}{Arg \min} \Lambda \quad (4.48)$$

Non seulement la résolution de ce problème est coûteux, mais il suppose aussi que l'on identifie ces paramètres à chaque pas de calcul. Les paramètres E_p et ν sont donc supposés varier au cours du calcul ce qui n'est pas physiquement acceptable. Nous estimons que dans le cadre de la réanalyse présentée ici, les deux modèles sont fondamentalement différents et il n'y a pas de raison

qu'ils donnent en termes de champ de déplacement des solutions systématiquement proches. Cela aurait été le cas pour un couplage mécanique fort où la solution ED sur un pas de calcul influence la solution du modèle EF le pas de temps suivant. Dans la suite comme pour ce cas-test, on s'attache uniquement à identifier aussi bien les paramètres du modèle ED que ceux du modèle EF pour qu'ils correspondent aux paramètres matériau expérimentaux dont nous disposons.

IV.9.2 La poutre bi-entaillée

La poutre bi-entaillée a été initialement proposée par Bazant et Pfeiffer (Bazant et Pfeiffer 1985) pour l'analyse de la rupture par cisaillement du béton et a été aussi étudiée à plusieurs reprises dans la littérature (Ingraffea et Panthaki 1985; Schlangen 1993; Geers et al. 2000; Richard et al. 2010). Les chargements appliqués mettent en évidence la complexité du mode de rupture du béton par cisaillement et permet d'étudier l'influence des conditions aux limites sur la rupture. Les dimensions de la poutre ainsi que le chargement appliqué sont illustrés sur la **Figure 4.33**. Ce cas-test permet de tester la procédure de réanalyse EF/ED dans le cas où dans la zone d'intérêt, se situent deux fissures distinctes. On peut à priori imaginer que les informations issues du contour de la zone ne puissent pas être correctement captées par les deux zones endommagées simultanément. Mais comme on va le voir dans la suite, la cinématique de fissuration semble être en accord avec les résultats expérimentaux. Comme pour la poutre entaillée deux chevêtres modélisés en éléments barres l'un en dessous et l'autre au dessus de la poutre ont servi à imposer le chargement. Les paramètres du modèle de Mazars utilisés sont les mêmes que dans le cas de la poutre entaillée. Par contre la longueur caractéristique est prise égale à $l_c = 15 \text{ mm}$. La poutre est maillée avec des éléments TRI3 et les simulations ont été effectuées en contraintes planes.

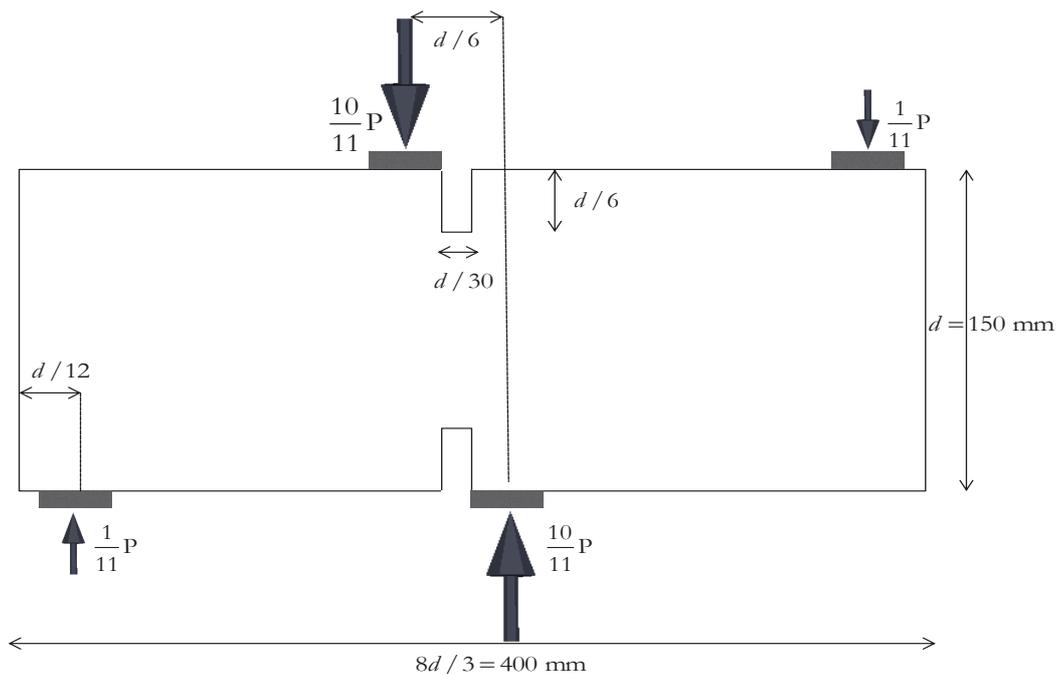


Figure 4.33 : Dimensions et chargement de la poutre bi-entaillée

La **Figure 4.34** montre deux cartes d'endommagement de la poutre obtenues au cours de la simulation. L'endommagement s'initie des coins gauche et droite des deux entailles et se propage de façon curviligne dans la poutre. On observe également de l'endommagement au niveau des appuis près des entailles. Cette carte d'endommagement est en adéquation avec l'expérience.

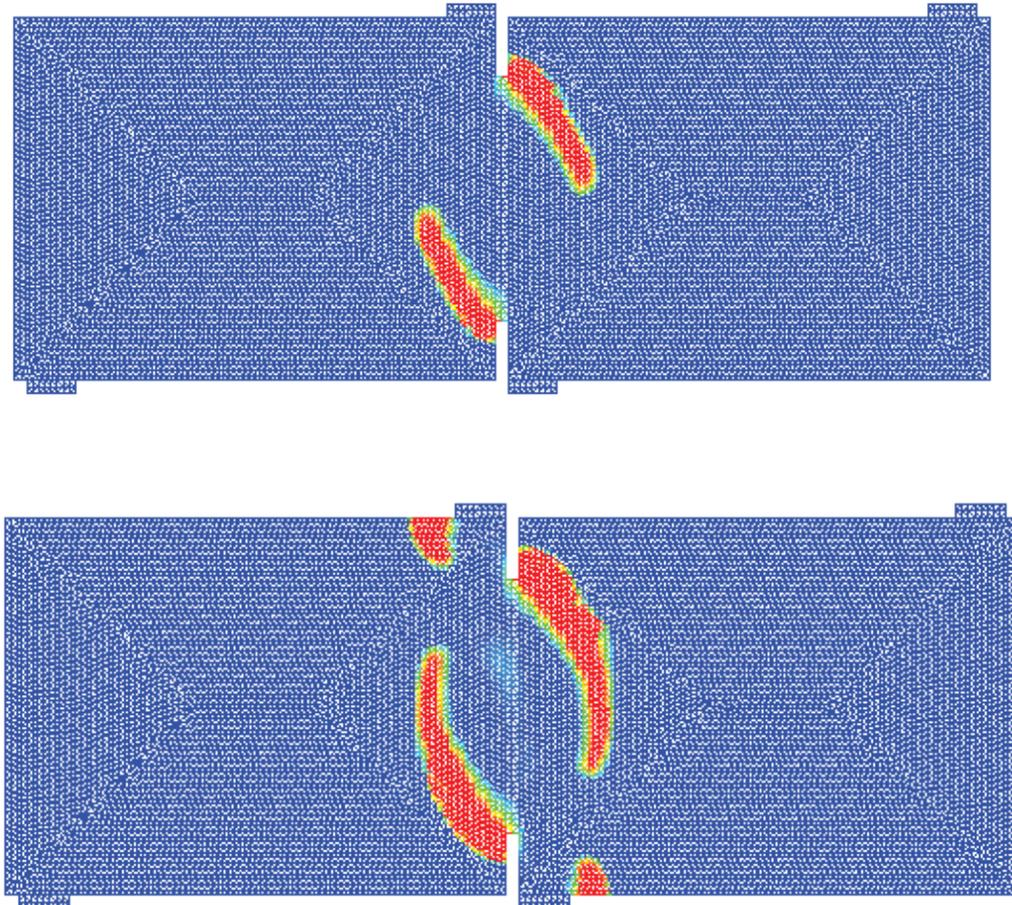


Figure 4.34 : Carte d'endommagement de la poutre bi-entailée.

Ré-analyse avec les Eléments Discrets (ED)

Une fois cette carte d'endommagement obtenue on découpe autour de la zone endommagée une zone d'intérêt telle que les bords restent dans la zone élastique et que l'on va calculer ensuite avec les éléments discrets. Ici la zone d'intérêt s'étend de 75 mm de part et d'autre des entailles. Le maillage de cette zone ainsi que le chargement pour le calcul ED sont montrés sur la **Figure 4.35**. Les paramètres de calcul du modèle ED restent inchangés par rapport au cas de la poutre entaillée.

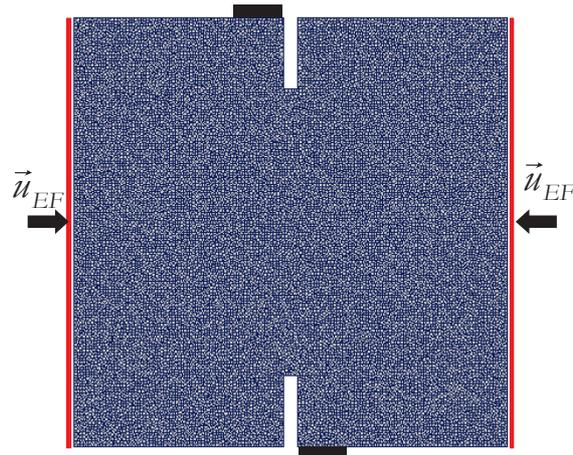


Figure 4.35 : Zone de calcul ED de la poutre bi-entailée

La propagation de la fissuration est montrée sur la **Figure 4.36**.

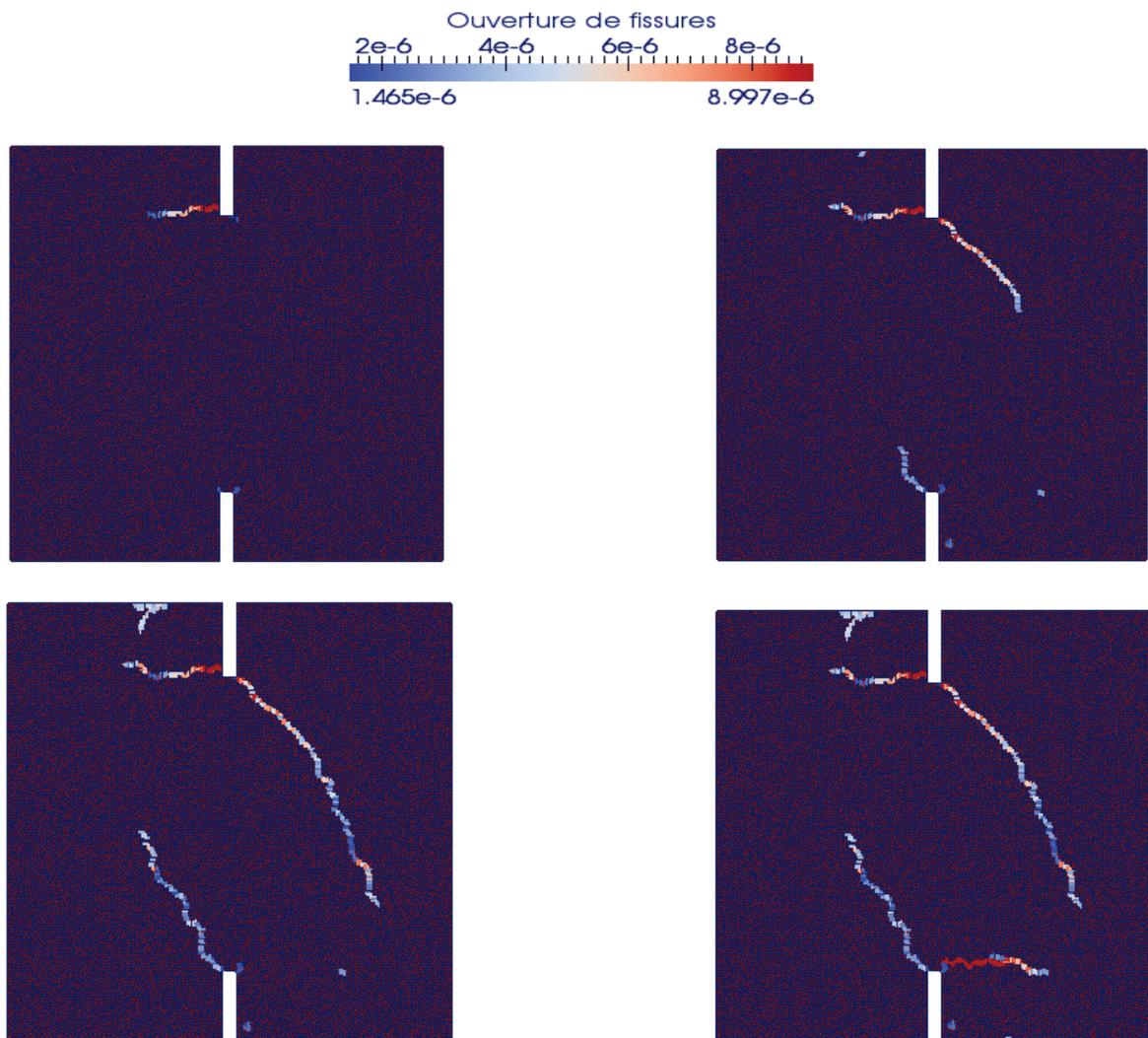


Figure 4.36 : Calcul ED : propagation de la fissuration pour la poutre bi-entailée.

Le calcul ED a permis de reproduire les deux principales fissures qui s'initient des coins des deux entailles comme on peut le voir sur la carte d'endommagement du calcul EF. On observe également de la fissuration au niveau des deux appuis de chargement. Enfin deux fissures qui partent près des entailles et qui se propagent horizontalement dans la poutre ont également été détectées. Ces deux fissures n'ont pas été révélées sur le faciès d'endommagement EF mais ont été constatées sur le faciès expérimental. Ce résultat confirme le caractère « plus précis » de la réanalyse par le calcul ED. A la **Figure 4.37**, sur le faciès expérimental obtenu par (Schlangen, 1993), nous avons superposé le faciès numérique obtenu à la fin du calcul ED. On peut remarquer que les deux faciès sont assez proches et que la cinématique de fissuration obtenue à partir du calcul ED est en accord avec les observations expérimentales. Ce résultat contribue à valider l'approche de la réanalyse de la zone d'endommagement EF par le modèle ED.

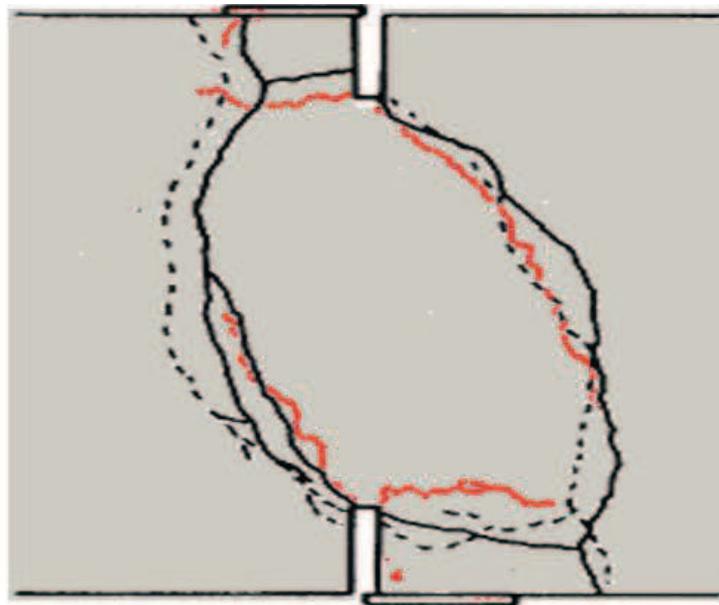


Figure 4.37 : Superposition des deux faciès de fissuration numérique (trait rouge) et expérimental (trait noir).

IV.9.3 L'essai brésilien

Généralités sur l'essai brésilien

L'essai brésilien peut être combiné avec la mesure de la perméabilité pour déterminer la perméabilité d'un béton fissuré (Wang 1996, Picandet 2001). L'essai consiste à appliquer une compression sur le plan médian d'un cylindre, ce qui génère perpendiculairement des contraintes de traction. Cette traction du matériau engendre des déformations localisées principalement dans le plan diamétral situé entre les deux génératrices sur lesquelles s'applique l'effort. Dans un premier temps les déformations sont diffuses, puis sont localisées lorsqu'on augmente l'effort de compression. Cela entraîne l'apparition le plus souvent d'une seule fissure traversante dans la zone du plan médian sollicité (Picandet 2001). L'objectif du présent essai numérique est dans un

premier temps de reproduire la fissuration obtenue expérimentalement avec la méthode de réanalyse, et dans un second temps de calculer la perméabilité macro du cylindre fissuré et de comparer les résultats aux valeurs mesurées disponibles dans la littérature.

Résultats des simulations numériques

Les simulations ont été effectuées en 2D. Les dimensions ainsi que les conditions aux limites du disque considéré sont montrées sur la **Figure 4.38** (a). Afin de pouvoir comparer nos résultats numériques avec les résultats expérimentaux de (Picandet 2001), le diamètre du disque a été pris égal à $d = 11$ cm. Expérimentalement les efforts sont appliqués à l'aide d'une pièce d'appui le plus souvent d'épaisseur fine. En effet l'essai brésilien est particulièrement sensible aux conditions aux limites et à la largeur du plateau d'appui. Nous avons arbitrairement choisi dans nos simulations, comme le montre la **Figure 4.38** (a) de modéliser ce plateau d'appui par une pièce rectangulaire avec un module d'Young environ dix fois supérieur à celui du béton et un coefficient de Poisson égal à celui du béton afin d'éviter le confinement de ce dernier. Le module d'Young et le coefficient de Poisson du béton choisis pour cette simulation sont $E = 35$ GPa et $\nu = 0.2$. Les simulations ont été effectuées à l'aide du modèle non local de Mazars dont les paramètres retenus sont donnés dans le **Tableau 4.3**.

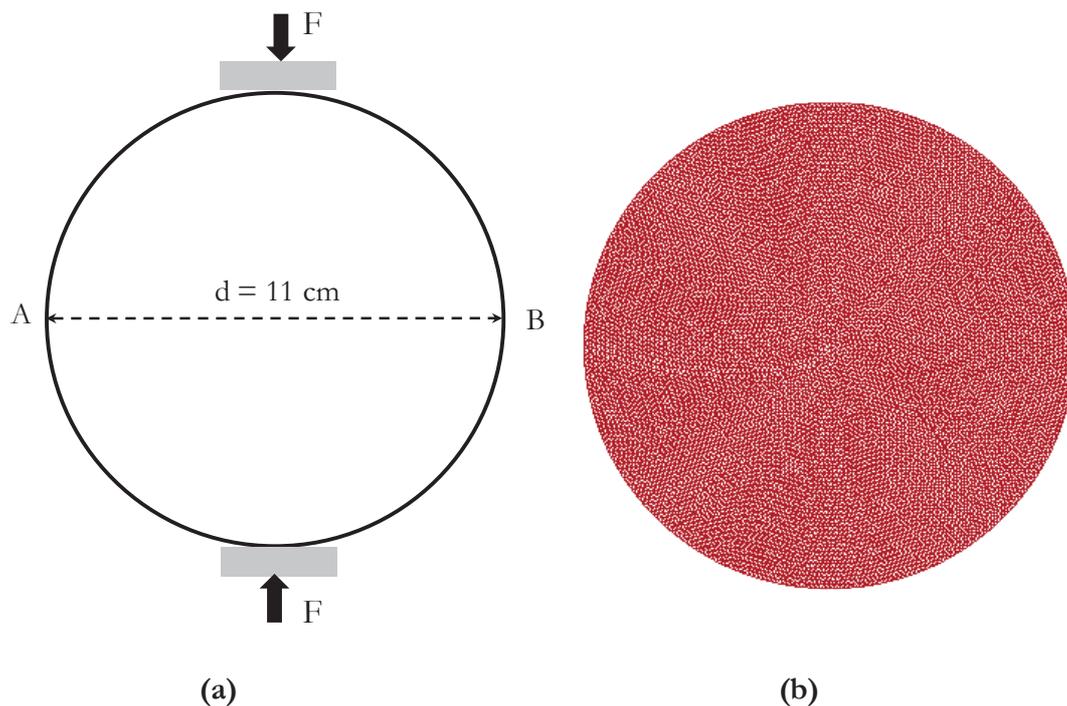


Figure 4.38 : Géométrie et conditions aux limites du disque (gauche) et maillage EF (droite)

Pour éviter l'endommagement en compression du disque au niveau des appuis, ce qui entrainerait des problèmes de convergence, le jeu de paramètres choisis n'autorise que l'endommagement en traction ce qui peut être justifié puisque dans l'essai brésilien l'endommagement en traction reste

largement prépondérant sur l'endommagement en compression (Choinska 2006). Les paramètres mécaniques du plateau d'appui sont : $E_p = 300$ GPa et $\nu_p = 0.2$. Le maillage EF est constitué de 18926 éléments triangulaires TRI3 (**Figure 4.38** (b)). Pour éviter une propagation « brutale » de la fissuration, nous avons choisi de simuler le problème non-linéaire par pilotage indirect du COD, qui est considéré abusivement ici comme la différence entre les déplacements horizontaux des points A et B. Les calculs ont été effectués en déformations planes.

Tableau 4.3 : Paramètres du modèle de Mazars (essai brésilien)

E (GPa)	ν	A_t	A_c	B_t	B_c	ε_{d0}	l_c (mm)
35	0.2	0.9	1.2	18000	0	1.e-04	2

La réponse globale du disque est représentée sur la **Figure 4.39**. Le pic d'effort est obtenu aux environs de COD = 60 μ m. Les calculs étant effectués en 2D l'effort en ordonnée sur le graphe correspond à une longueur d'1m du cylindre.

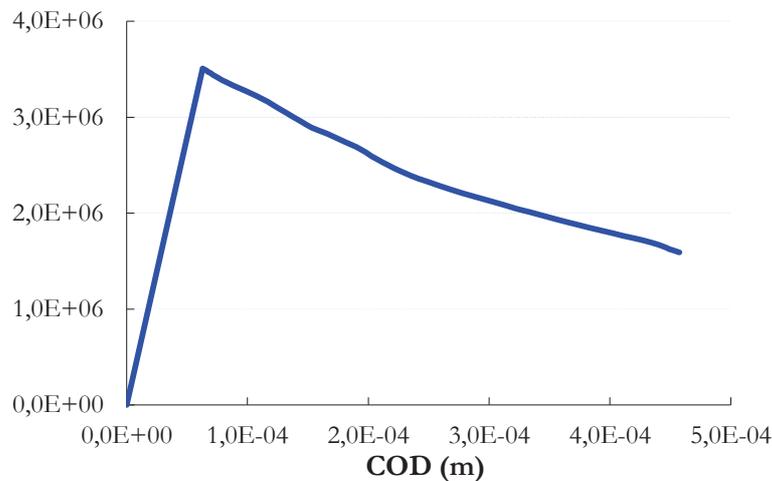


Figure 4.39 : Courbe effort vertical F-COD : réponse globale du disque.

Sur la **Figure 4.40** (a)-(f), on présente les cartes d'endommagement numériques obtenues au cours du calcul EF. L'endommagement est d'abord diffus sur les figures (a) et (b) où il atteint les valeurs de 0.42 et 0.47. Par la suite il commence à se localiser sur les figures (c) et (d) au centre du disque. Enfin sur les figures (e) et (f) il atteint des valeurs proches de 1 et se propage du centre vers les bords où sont appliqués les efforts. Notons que la bande de largeur limitée dans laquelle se développe l'endommagement est liée à la longueur caractéristique du matériau. Cette évolution de l'endommagement est conforme à des observations expérimentales et à des simulations relevées dans la littérature (Picandet 2001).

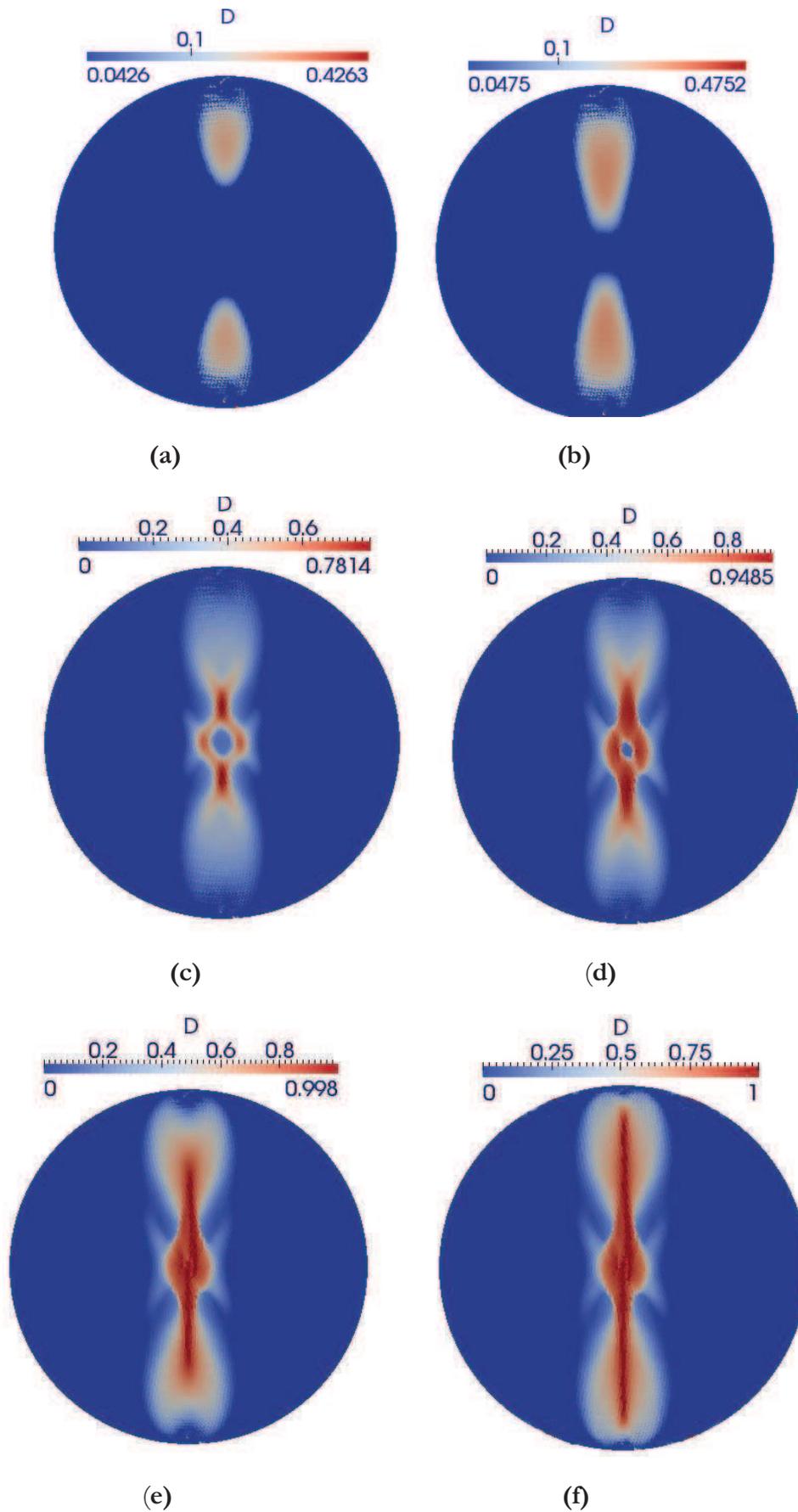


Figure 4.40 : Cartes d'endommagement du disque au cours du chargement : endommagement diffus et localisé.

La **Figure 4.41** montre la zone délimitée autour de la bande d'endommagement qui va servir au calcul ED. Les bords non libres de cette zone (en blanc sur la figure de gauche) sur lesquels va s'appliquer le champ de déplacement EF sont situés dans la zone élastique de la carte d'endommagement.

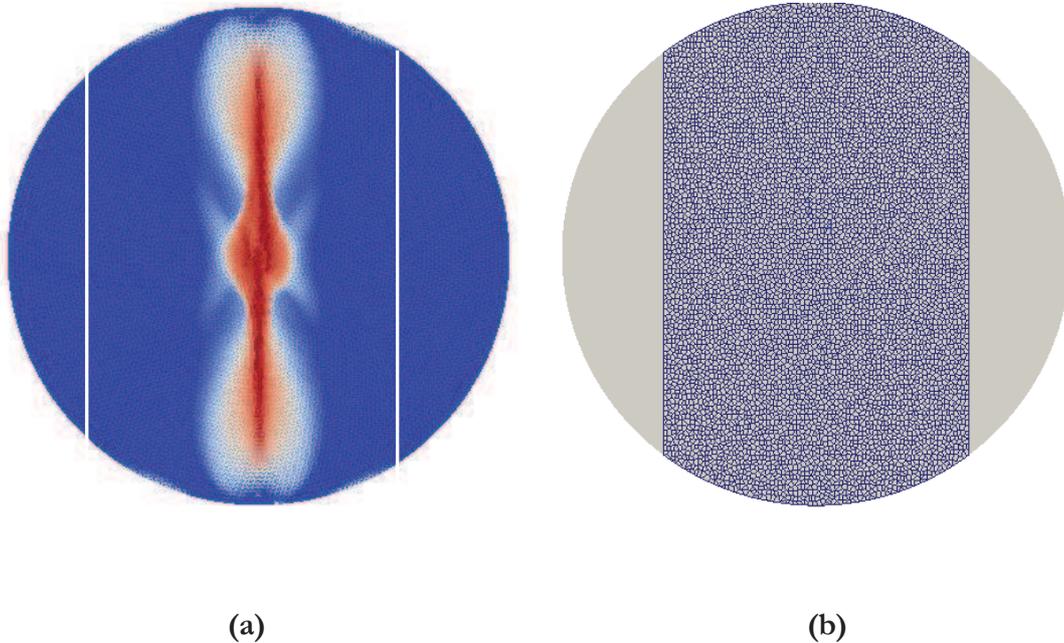


Figure 4.41 : Délimitation de la zone de calcul discret (a) ; maillage de la zone par éléments discrets

Cette zone a été maillée avec 7491 éléments discrets. Les résultats issus du calcul ED sont montrés à la **Figure 4.42** sur laquelle on présente la propagation de la fissure. Une fissure unique s'initie au centre du disque et se propage progressivement vers les bords où s'applique l'effort. Ce faciès de fissuration est tout à fait semblable à ce que l'on obtient expérimentalement sur l'essai brésilien. La propagation de la fissure sur la Figure ci-dessus est à comparer avec celle obtenue sur une face d'un disque BHP par (Picandet 2001) et montrée sur la **Figure 4.43**. La fissure expérimentale obtenue est également unique avec une légère bifurcation à deux endroits différents. Globalement la fissuration numérique obtenue par DEAP est satisfaisante et l'objectif à présent est d'estimer la perméabilité au gaz du disque fissuré dans le but de valider l'approche en ce qui concerne sa capacité à prédire correctement le transfert de flux dans les structures.

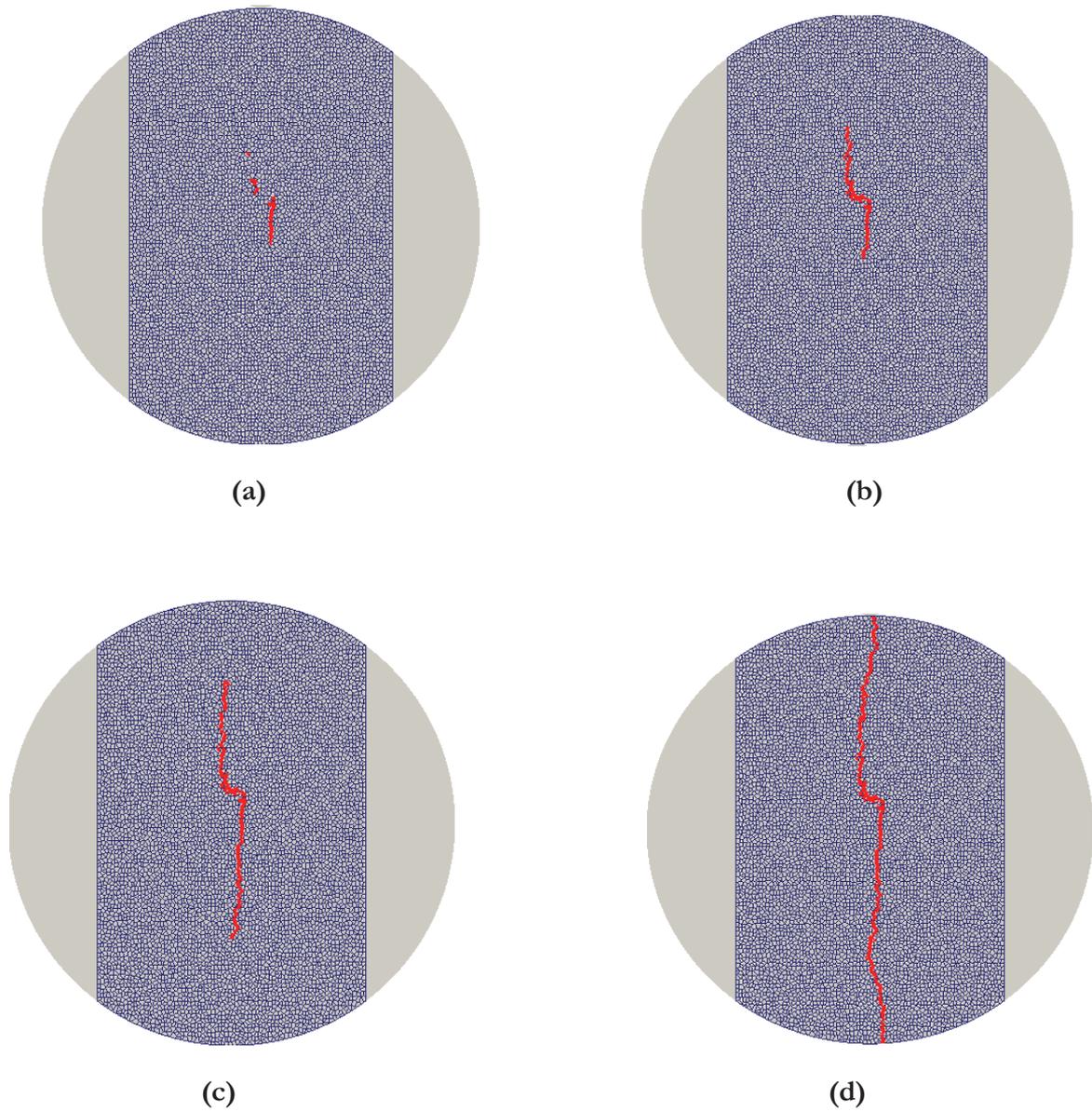


Figure 4.42 : Cartes de fissuration obtenues à différents instants du calcul DEAP

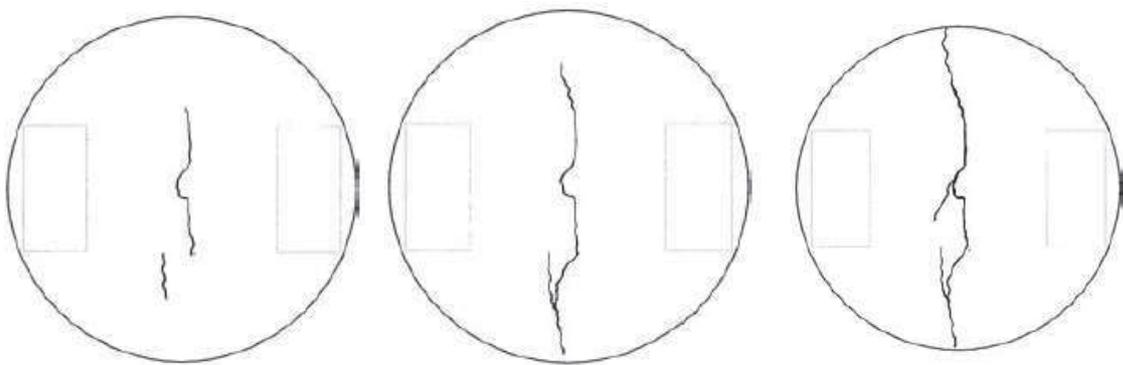


Figure 4.43 : Faciès de fissuration obtenus expérimentalement lors d'un essai brésilien sur un Béton Hautes Performances (Picandet 2001).

Calcul de la perméabilité au gaz du disque

La méthode pour calculer la perméabilité est basée sur le calcul du flux qui traverse le disque fissuré. On suppose que chaque élément de microfissure traverse de le disque (de face en face). Ce flux, noté q_{moy} est la somme du flux q_f empruntant uniquement les fissures créées et celui s'écoulant dans la partie saine du disque q_0 . L'égalité du flux s'écrit :

$$q_{moy} = q_0 + q_f \quad (4.49)$$

En posant $\nabla p = 1$ le gradient de pression à l'origine de l'écoulement cette égalité se réécrit :

$$k_{moy} S_{tot} = \left(S_{tot} - \sum_{i=1}^{n_{fis}} l_i e_i \right) k_0 + \sum_{i=1}^{n_{fis}} k_i l_i e_i \quad (4.50)$$

avec S_{tot} la surface totale du disque perpendiculaire au flux, l_i et e_i respectivement la longueur et l'ouverture de la fissure i . k_0 et k_i sont respectivement la perméabilité intrinsèque du disque et la perméabilité de la fissure i . En supposant un écoulement de type poiseuille dans les fissures, il vaut $k_i = \frac{\lambda e_i^2}{12}$. n_{fis} est le nombre totale de microfissures. Finalement la perméabilité moyenne s'écrit :

$$k_{moy} = \frac{\left(S_{tot} - \sum_{i=1}^{n_{fis}} l_i e_i \right) k_0 + \sum_{i=1}^{n_{fis}} \frac{\lambda l_i e_i^3}{12}}{S_{tot}} \quad (4.51)$$

La **Figure 4.44** montre l'évolution du rapport d'accroissement de la perméabilité ainsi calculée à chaque pas de calcul ED k_{moy} / k_0 en fonction du déplacement latéral. Cette évolution a été ajustée à l'aide du coefficient de débit λ représentant la tortuosité de la fissure sur des valeurs de perméabilité obtenues sur des BHP par (Picandet 2001). Cet ajustement aboutit à $\lambda = 0.3$. Les deux bétons hautes performances sont de composition similaire et de module d'élasticité 45 GPa. La comparaison des perméabilités au gaz implique de savoir quelle est leur teneur en eau au cours de l'essai. Ces bétons ont subi avant les essais un préconditionnement de séchage à l'issue duquel leur teneur en eau n'excédait pas 0.03% (Picandet 2001). La perméabilité au gaz initiale du disque est $k_0 = 1.10^{-17} \text{ m}^2$ (Picandet 2001). Compte tenu de l'expression de la perméabilité moyenne, la valeur de ce paramètre n'a aucun impact sur son évolution. Soulignons également que les valeurs de la perméabilité ont été calculées sous charge alors que la perméabilité du disque est mesurée expérimentalement après décharge. Ceci introduit évidemment un biais dans les résultats montrés sur la **Figure 4.44** puisque la valeur du COD après décharge est inférieure à sa valeur sous charge. Les simulations permettant de calculer la valeur de la perméabilité moyenne après décharge sont en cours.

Nous observons que la perméabilité croît rapidement dès que les premières fissures se créent. Entre 0 et 100 μm , la perméabilité est sensible au déplacement latéral, ce qui est moins le cas au-delà de 100 μm . Dans le cas de notre simulation la perméabilité du disque fissuré atteint des ordres de grandeur trois fois supérieures à la perméabilité intrinsèque du matériau. Nous observons également que les résultats des simulations numériques sous-estiment les perméabilités obtenues expérimentalement notamment pour des valeurs élevées du déplacement latéral ($\text{COD} > 100 \mu\text{m}$).

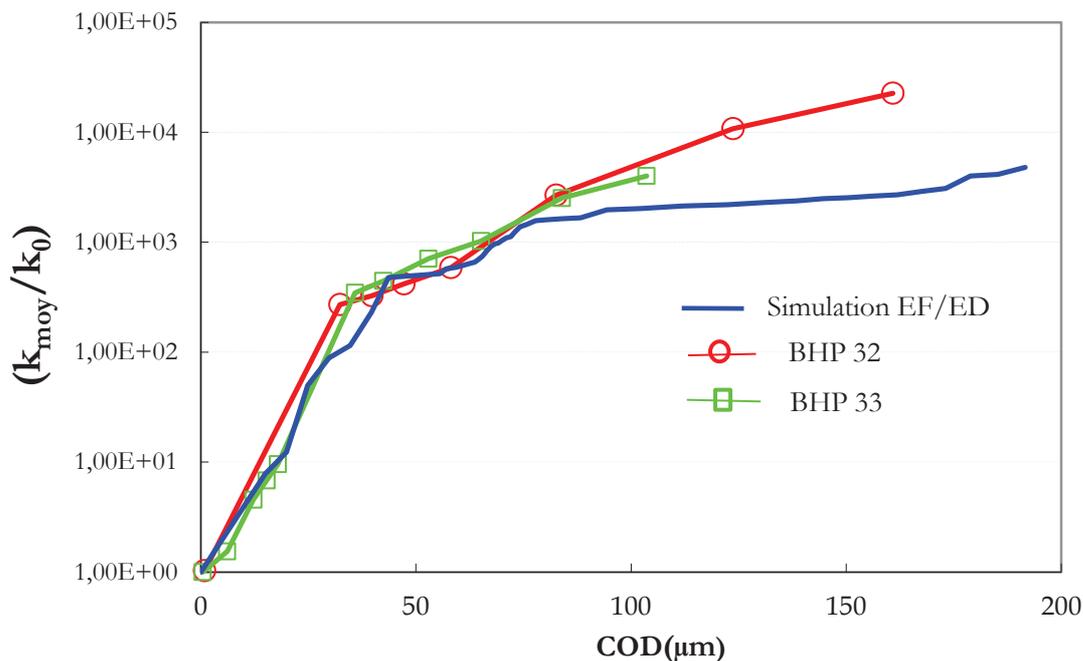


Figure 4.44 : Evolution du rapport d'accroissement de la perméabilité en fonction du déplacement latéral du disque : comparaison avec des résultats expérimentaux issus de (Picandet 2001).

IV.10 Couplage EF-ED en THM avec recalcul de la perméabilité

On applique dans cette partie le couplage EF/ED présenté précédemment à un cas de calcul THM, en exploitant les résultats ED pour recalculer le tenseur de perméabilité au liquide et au gaz. Ces derniers seront ensuite réintégré dans l'équation de conservation de la masse d'eau (voir équation 2.56). A noter que cette équation est résolue par EF avec un schéma semi-implicite en temps ; les tenseurs de perméabilité calculés au pas de temps n sont réintroduits pour simplifier au pas de temps suivant, soit $n+1$. L'objectif principal est d'obtenir un calcul précis de ces tenseurs à partir des ouvertures de fissures issues de DEAP, et ainsi de prendre en compte l'anisotropie induite par la fissuration.

IV.10.1 Cas de calcul envisagé

Le cas de calcul retenu est celui d'un mur en béton non armé soumis à un chargement thermique sur une face. L'objectif étant à la fois d'étudier la faisabilité de la méthode et d'illustrer et analyser la réponse du modèle, nous avons opté pour ce cas simple qui peut être considéré comme académique. En particulier, l'absence d'armatures (qui en pratique ne se rencontre que tout à fait exceptionnellement) permet d'obtenir des fissures localisées avec des ouvertures significatives, et ainsi de calculer des valeurs de perméabilité de plusieurs ordres de grandeur supérieures aux perméabilités intrinsèques du matériau sain. Les valeurs des paramètres et données d'entrée du modèle THM correspondant au béton retenu pour l'étude sont listés dans les **Tableau 4.4** et **4.5**.

Tableau 4.4 : Paramètres matériau utilisés pour la simulation (Bary et al. 2012)

Paramètres	Valeurs
Porosité initiale ϕ_0	0.1
Humidité relative h_r^0	0.96
Perméabilité intrinsèque au gaz k_{mg}^0	$1.0 \times 10^{-17} \text{ m}^2$
Perméabilité intrinsèque au liquide k_{ml}^0	$k_{ml}^0 = 3 \times 10^{-5} k_{mg}^0$
Conductivité thermique du béton saturé λ_{20}	$2.3 \text{ W/m}\cdot\text{°C}$
Conductivité thermique du béton non saturé λ_{60}	$1.9 \text{ W/m}\cdot\text{°C}$
Capacité thermique du grain de ciment anhydre C_c	$750 \text{ J/kg}\cdot\text{°C}$
Capacité thermique des granulats C_a	$800 \text{ J/kg}\cdot\text{°C}$
Capacité thermique de l'eau C_w	$4184 \text{ J/kg}\cdot\text{°C}$
Capacité thermique de l'eau adsorbée C_{bw}	$3760 \text{ J/kg}\cdot\text{°C}$
Enthalpie de déshydratation $L_{w \rightarrow 2w}$	2500 kJ
Module d'Young du béton $E_c(T)$ (fonction linéaire de la température T)	$38.9 \text{ GPa (20°\text{C}) à } 20.4 \text{ GPa (250°\text{C})}$
Coefficient de Poisson du béton ν_c	0.22
Coefficient de dilatation thermique du béton α	$11.0 \times 10^{-6} \text{ C}^{-1}$
Coefficient de convection équivalent h	$10 \text{ W/m}\cdot\text{°C}$

Tableau 4.5 : Paramètres utilisés pour la simulation

Données	Valeurs	Réf.
Masse volumique de l'eau (kg/m ³)	$\frac{\rho_l}{\rho_{lo}} = 1 - \alpha_w(T)(T - T_o) + \frac{1}{k_l}(\rho_l - \rho_{lo})$, avec $k_l = 2800$ MPa, et $\alpha_l(T) = \frac{685,6}{\rho_{lo} \times 374,14} \left[1 - \left(\frac{T}{374,14} \right)^{0,55} \right]^{-0,45} \left(\frac{T}{374,14} \right)^{0,45}$.	(Ranznjevic 1970)
Viscosités dynamiques (kg/m/s)	- eau liquide : $\eta_l(T) = 2,414 \times 10^{-5} \exp\left(\frac{570,58058}{T + 133,15}\right)$ - vapeur : $\eta_{gl}(T) = 3,85 \times 10^{-8} T + 10^{-5}$	(ASHRAE 1993) (Pezzani 1988)
Pression de vapeur saturante (Pa)	$p_{vs}(T) = p_{vs} \exp\left[4871,3 \frac{T - 100}{373,15 T}\right]$	(Ranznjevic 1970)
Eau déshydratée (kg/m ³)	$d = k_d(T - 60)$ si $T \geq 60^\circ\text{C}$, $d = 0$ sinon, avec $k_d = 0,136$	(Sercombe et al. 2001)
Porosité	$\phi = \phi(60^\circ\text{C}) + d/\rho_{hyd}$, avec $\rho_{hyd} = 2280$ kg/m ³	(Sercombe et al. 2001)
Conductivité thermique (W/m/K)	$\lambda(S_l, d) = \lambda_{60} + [S_l/S_{l0}(\lambda_{20} - \lambda_{60})] - k_d d$	(Sercombe et al. 2001)
Perméabilité au gaz	$k_{mg}(S_l = 0) = k_{mg}^0 \exp(0.2d)$	(Sercombe et al. 2001)
Perméabilité relative	- au liquide : $k_{rl}(S_l) = \sqrt{S_l} \left[1 - (1 - S_l^{1/m})^m \right]^2$, - à la vapeur : $k_g = K k_{rg} \left[1 + (a/p_g) \right]$ avec $k_{rg}(S_l) = (1 - S_l)^p \left[1 - S_l^{1/m} \right]^{2m}$ où $a = 11,1$, $p = 5,5$ et $m = 0,56$	(van Genuchten 1980; Monlouis-Bonnaire et al. 2004)
Isotherme de désorption	$S_l = \left[1 + (-\alpha_{VG} \ln(h_r))^{1/(1-\beta_{VG})} \right]^{-\beta_{VG}}$ avec $\beta_{VG} = 0,45$ et $\alpha_{VG} = 3$	(van Genuchten 1980)

Description du maillage, conditions aux limites et géométrie du mur

Le maillage retenu pour la simulation ainsi que les conditions aux limites en température et en pression sont présentés sur la **Figure 4.46**. Il s'agit d'un mur de 50 cm d'épaisseur et d'1 m de hauteur encadrée à sa base. Le chargement thermique est imposé sur la surface AD du mur par une augmentation de température de 20°C à 100°C, suivi par une phase à température constante de 100°C (**Figure 4.45**). La vitesse de montée en température considérée dans la première phase est de 0.5°C/min. Une condition de convection thermique est imposée sur la face BC du mur avec un coefficient de convection $h = 10$ W/m²/K. La pression de vapeur de part et d'autre du mur est fixée à $P_v = 2000$ Pa. Les conditions initiales imposées sont pour la température $T = 20^\circ\text{C}$ et pour l'humidité relative $h_r = 0.96$. Enfin les flux d'échange sur les faces AB et CD sont nuls. Le maillage est constitué d'éléments quadrangulaires à 4 nœuds.

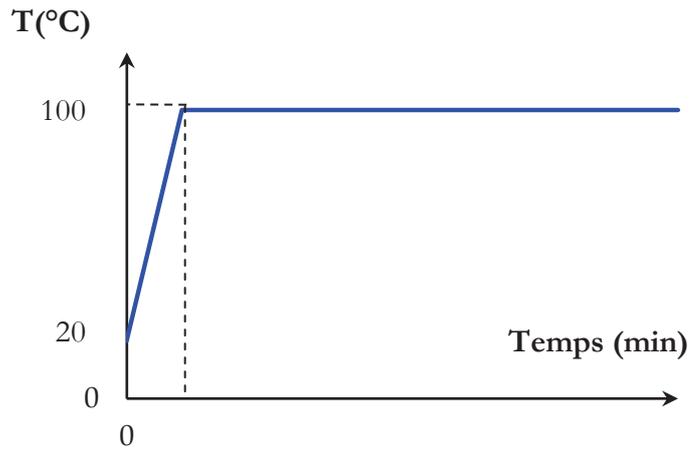


Figure 4.45 Chargement thermique sur la surface AD du mur

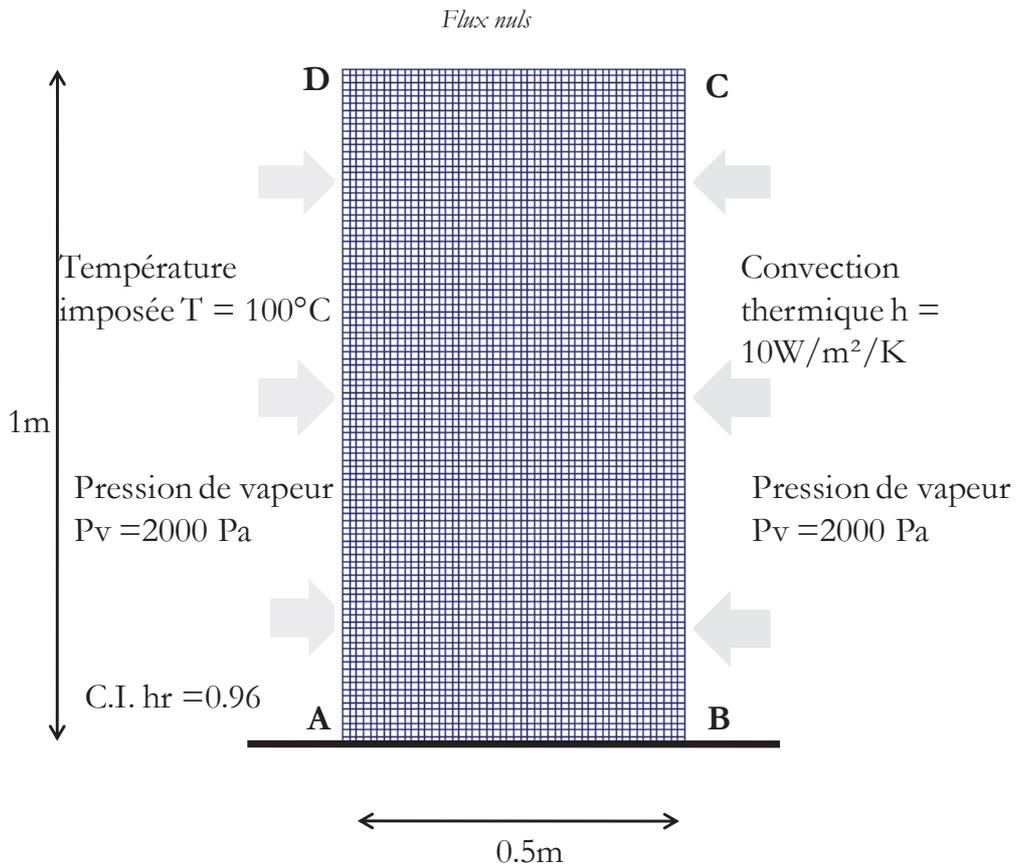


Figure 4.46 Géométrie et conditions aux limites du problème étudié.

Description du maillage et paramètres de calcul ED

La zone d'intérêt de la structure faisant l'objet d'une réanalyse par ED est représentée sur la **Figure 4.47** avec le faciès de fissuration obtenu par EF à 200 jours. Un maillage ED est également montré à titre d'illustration. Il est constitué de 1275 (150 x 85) particules. Les paramètres de calcul ED sont regroupés dans le **Tableau 4.6**. Ces paramètres ont été identifiés dans de précédents travaux (Delaplace 2008).

Tableau 4.6 : Paramètres du modèle Eléments Discrets

E_b (GPa)	ν	$\bar{\varepsilon}_{cr}$	$\bar{\theta}_{cr}$	$\sigma_{\varepsilon_{cr}}$	$\sigma_{\theta_{cr}}$	ρ
38.9	0.75	1.5e-04	5e-03	0.075	0.075	2300

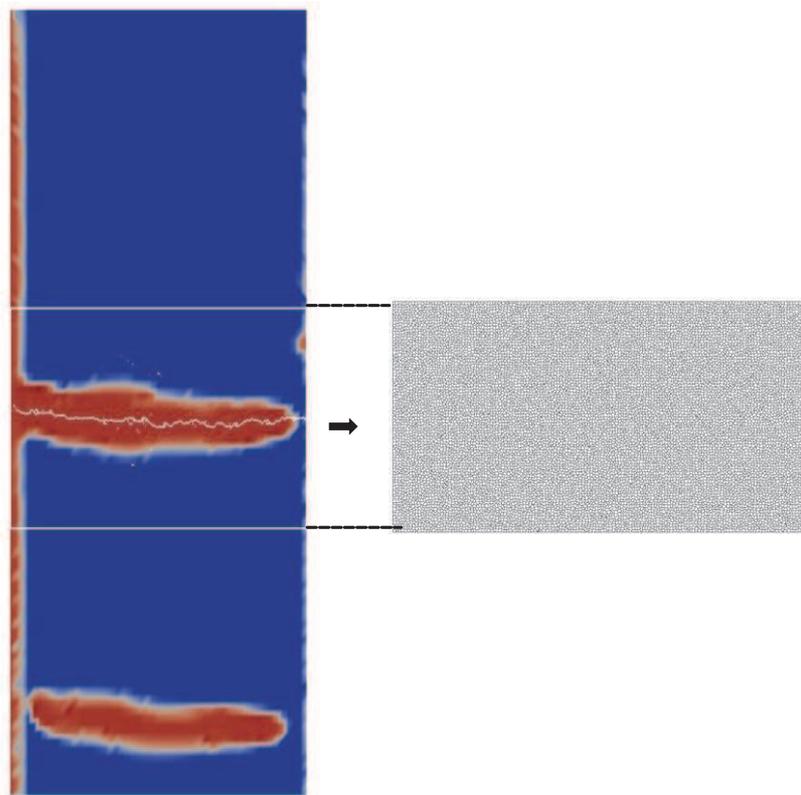


Figure 4.47 Délimitation de la zone réanalysée par ED sur le faciès d'endommagement.

IV.10.2 Recalcul des tenseurs de perméabilité

On propose ici une méthode pour calculer le tenseur de perméabilité de la structure fissurée. Le tenseur de perméabilité intrinsèque du matériau est supposé isotrope. L'orientation des fissures créées va induire une anisotropie qu'il convient de prendre en compte. Le tenseur de perméabilité

anisotrope est déterminé à chaque pas de temps du calcul ED. Il est construit pour chaque macroélément du maillage EF situé dans la zone d'intérêt identifiée. Hors de cette zone il reste égal au tenseur de perméabilité intrinsèque. Le tenseur de perméabilité de la structure entière est alors obtenu par assemblage des tenseurs de perméabilité de tous les macroéléments. Pour des raisons de simplifications nous n'avons considéré que le cas où le seuil de percolation est atteint dans le macroélément dû à la connectivité des fissures. Le seuil de percolation est défini comme le seuil de fissuration à partir duquel on peut trouver un réseau de fissures permettant la circulation des fluides, indépendamment de la porosité initiale. Les fissures isolées ne seront donc pas prises en compte. Pour illustrer la méthode proposée nous considérons le macroélément de la **Figure 4.48** avec des fissures isolées et un réseau de fissures connectées le traversant du point A au point D.

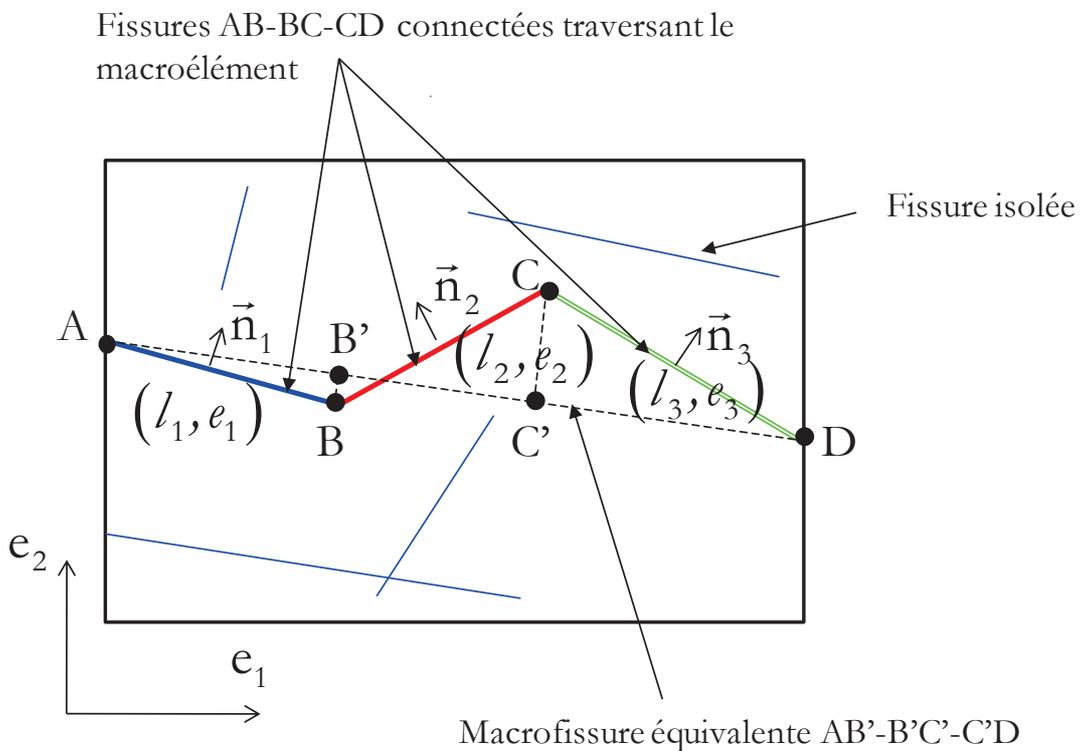


Figure 4.48 Macroélément fissuré : fissures isolées et macrofissure traversante

Supposons que le macroélément soit le siège d'un écoulement de fluide sous l'effet d'un gradient de pression ∇P imposé sur son contour. Dans le cas d'un gradient de pression constant sur le contour, le flux moyen Q peut être relié linéairement au gradient de pression par (Pouya et Courtois 2002) :

$$Q = -\mathbf{K}_{eff} \cdot \nabla P \quad (4.52)$$

\mathbf{K}_{eff} est le tenseur de perméabilité équivalent du macroélément qu'on cherche à déterminer.

Le réseau de fissures connectées traversant le macroélément est composé des fissures AB, BC et CD : chaque fissure est identifiée par sa longueur l_i , son ouverture e_i et sa normale n_i ($i=1, 3$). La première partie du raisonnement consiste à considérer que ce réseau de fissures est équivalent à la macrofissure AB'-B'C'-C'D du point de vue du flux moyen le traversant, AB', B'C' et C'D étant les projections des fissures AB, BC et CD sur l'axe formé par les extrémités des fissures débouchantes sur le macroélément (**Figure 4.48**). Ensuite on projette les perméabilités des éléments de fissure sur la macrofissure équivalente et on néglige la perméabilité perpendiculaire à la macrofissure. Notons qu'il s'agit d'une manière très simplifiée de calculer cette perméabilité (fissures en série). Dans le repère global elle s'écrit donc :

$$\mathbf{K}_f = \frac{1}{\sum_{i=1}^3 \frac{12}{\lambda e_i^2} \phi_i} (1 - \vec{n} \otimes \vec{n}) \quad (4.53)$$

avec \vec{n} la normale à la macrofissure. ϕ_i est la porosité induite par la fissure i . Il s'agit d'une manière très simplifiée de calculer cette perméabilité. Le tenseur de perméabilité intrinsèque vaut :

$$\mathbf{K}_0 = k_0 \mathbf{1} = \begin{pmatrix} k_0 & 0 \\ 0 & k_0 \end{pmatrix} \quad (4.54)$$

On fait l'hypothèse que les fissures sont totalement désaturées, les perméabilités relatives au gaz et au liquide de la fissure valent respectivement 0 et 1. Finalement les tenseurs de perméabilité homogénéisée au liquide et au gaz du macroélément fissuré sont donc donnés par :

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{l,eff} &= (1 - \phi_c) k_{l,0} \mathbf{K}_0 \\ \mathbf{K}_{g,eff} &= (1 - \phi_c) k_{g,0} \mathbf{K}_0 + \mathbf{K}_f \end{aligned} \quad (4.55)$$

avec ϕ_c la porosité induite par le réseau des n fissures connectées soit :

$$\phi_c = \sum_{i=1}^n \phi_i = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^n l_i e_i \quad (4.56)$$

S étant la surface du macroélément. $k_{l,0}$ et $k_{g,0}$ sont respectivement les perméabilités relatives au liquide et au gaz du macroélément non fissuré.

IV.10.3 Simulations numériques

On présente ici les résultats issus de la simulation du mur en béton. Les simulations sont effectuées en 2D et en contraintes planes. La **Figure 4.49** gauche présente le faciès d'endommagement de la structure obtenu numériquement par le modèle THMs à 200 jours. Les zones rouges correspondent à des macrofissures dont l'indice d'endommagement est proche de 1. Le calcul a été effectué avec une formulation non locale de l'endommagement (Pijaudier-Cabot et Bazant 1987). Le seuil d'endommagement a été fixé à 1.10^{-4} et la longueur interne à $l_c = 3.5$ cm. Le coefficient de débit est fixé à $\lambda = 1$. On constate que deux fissures principales orientées

horizontalement se développent dans la structure, la première étant située au milieu de la structure et la seconde plus proche de la face inférieure. Ces deux fissures principales sont essentiellement dues aux effets des gradients thermiques qui apparaissent dans la structure sous l'effet du chauffage d'une face du mur. On assiste aussi à une fissuration localisée près de la face chauffée.

La **Figure 4.49** droite présente les profils de température dans l'épaisseur du mur obtenus numériquement à différents instants. L'abscisse $x=0$ correspond à la face AD du mur sur laquelle on a imposé une température $T=100^{\circ}\text{C}$. La température atteinte sur la face opposée du mur augmente progressivement pour atteindre environ $T=45^{\circ}\text{C}$ après 200 jours de chauffage.

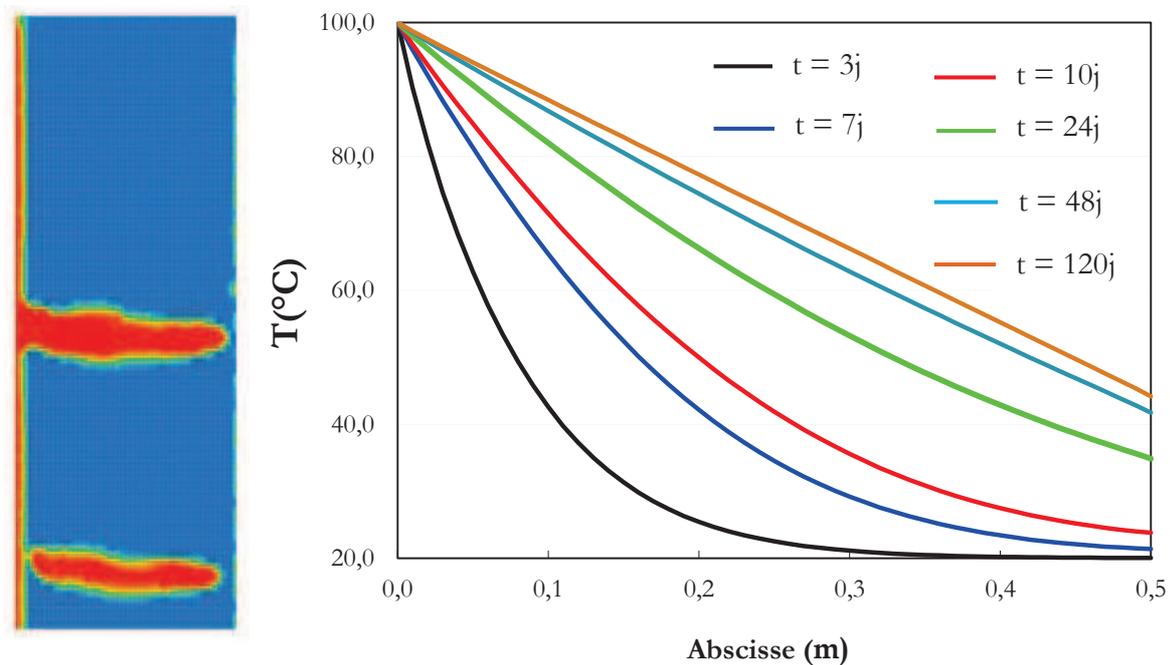


Figure 4.49 Faciès d'endommagement à 200 jours (gauche) ; profils de température (droite).

Résultats de fissuration DEAP obtenus avec 3 différents tirages

Sauf mention contraire, on présente essentiellement dans la suite les résultats numériques de coefficients de perméabilité correspondants aux perméabilités à la vapeur. En effet la fissure étant supposée systématiquement non saturée, l'illustration de ses effets sera donc plus probante sur les propriétés de transport du gaz.

On présente sur la **Figure 4.50** les résultats issus d'une réanalyse de la fissuration à l'aide de DEAP pour 3 maillages ED différents. Ces fissures sont superposées aux valeurs du coefficient de perméabilité horizontale k_{11} correspondant sur la partie du maillage réanalysée. On note que le faciès des fissures est relativement proche, avec une orientation préférentielle nettement marquée. Ceci est dû aux contraintes de traction verticales se développant dans les zones les plus froides du

fait des gradients de température. D'autre part, elles traversent totalement la structure. Une zone légèrement plus endommagée peut être observée dans la région centrale de la structure (quelques éléments microfissurés), notamment dans le cas (b). On constate également que les EF non traversés totalement par une fissure ne voient pas leur perméabilité affectée, ce qui valide l'algorithme retenu pour homogénéiser les perméabilités dans les EF.

Les coefficients de perméabilité maximums sont compris entre $9.63 \cdot 10^{-13}$ et $1.19 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$. La structure étant initialement proche de la saturation (degré de saturation égal à 0.95), le tenseur de perméabilité au gaz initial (structure non fissurée) est isotrope et la valeur du coefficient est de $4.0 \cdot 10^{-30} \text{ m}^2$. Les fissures provoquent donc une augmentation extrêmement importante des coefficients de perméabilité au gaz.

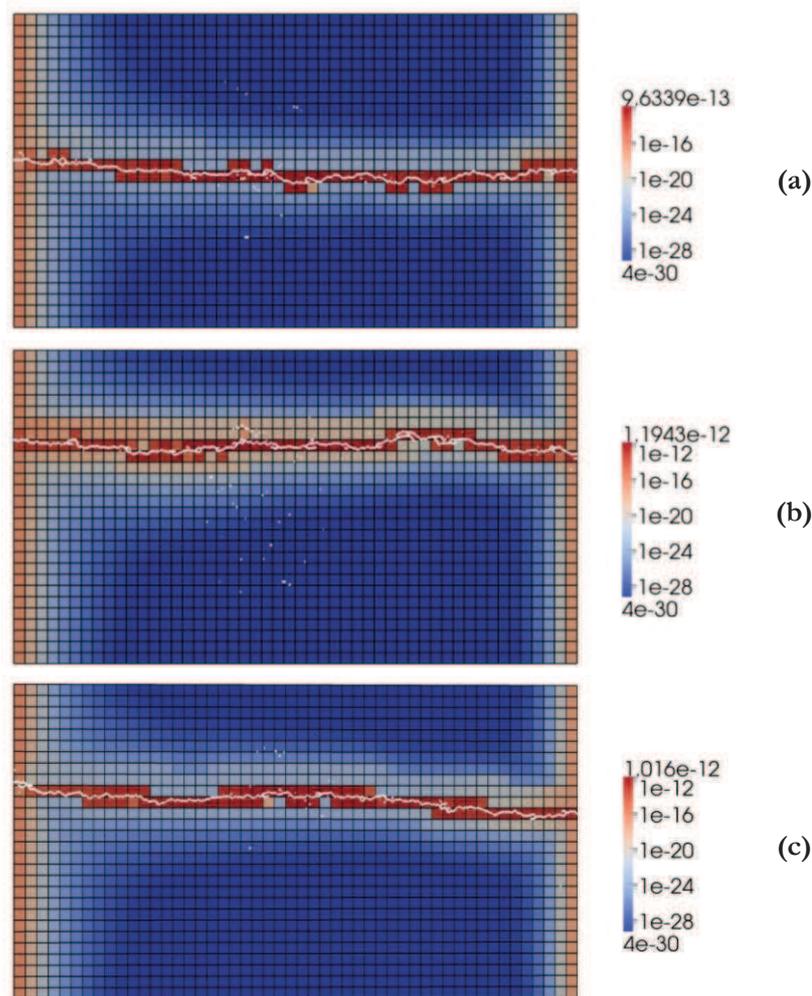


Figure 4.50 Faciès de fissuration obtenus avec DEAP pour 3 maillages ED et coefficients de perméabilité k_{11} correspondant à 200 jours.

Résultats obtenus avec le premier tirage, tenseur de perméabilité orthotrope

On présente ici les résultats obtenus en termes de distribution de coefficients de perméabilité au gaz horizontale k_{11} (**Figure 4.51**), verticale k_{22} (**Figure 4.52**) et de degré de saturation (**Figure 4.53**) pour différents instants de simulation (10, 50, 100 et 200 jours). On constate que les perméabilités sont affectées significativement par la présence des fissures. Les éléments traversés par une fissure ont un coefficient de perméabilité k_{11} variant assez peu et de l'ordre de $1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$ (voir **Figure 4.50**). En revanche le coefficient k_{22} dans les éléments fissurés est d'environ 5 à 10 fois inférieur à k_{11} et varie de façon importante entre 2 éléments consécutifs, en fonction de la géométrie de la fissure dans les éléments. On note d'autre part une désaturation progressive de la zone située au voisinage de la fissure, due au séchage. Cette désaturation provoque une augmentation des coefficients de perméabilité au gaz selon la loi de perméabilité relative retenue dans le modèle (voir **Tableau 4.5**).

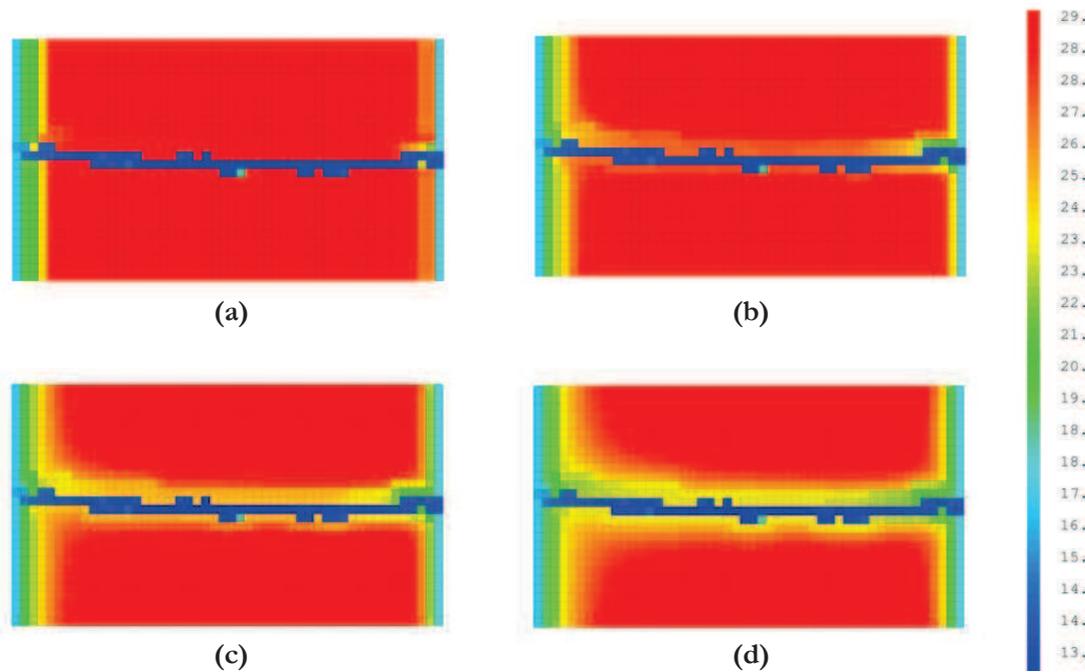


Figure 4.51 Coefficient de perméabilité k_{11} (échelle logarithmique en valeur absolue) aux temps 10 (a), 50 (b), 100 (c) et 200 (d) jours.

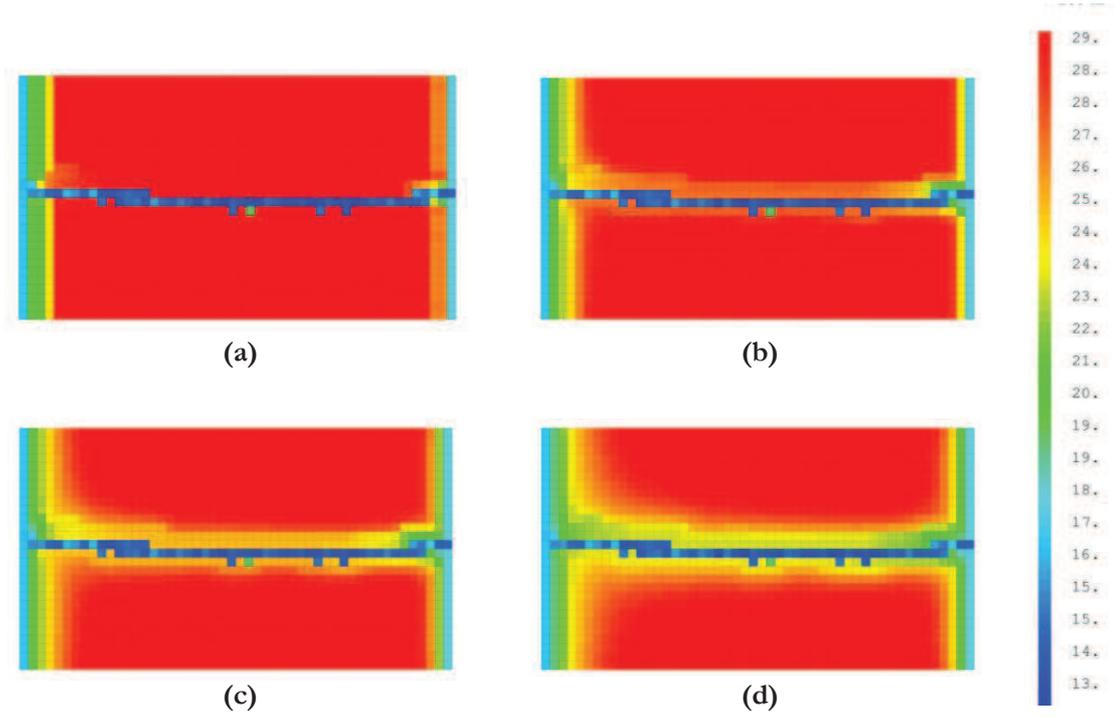


Figure 4.52 Coefficient de perméabilité k_{22} (échelle logarithmique en valeur absolue) aux temps 10 (a), 50 (b), 100 (c) et 200 (d) jours.

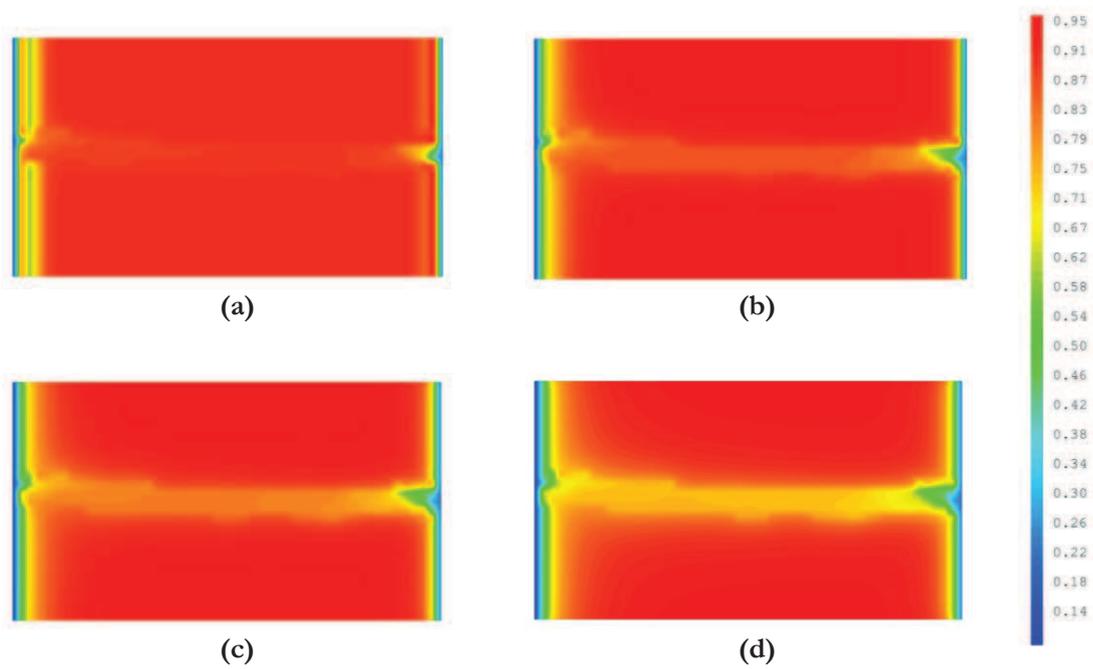


Figure 4.53 Degré de saturation aux temps 10 (a), 50 (b), 100 (c) et 200 (d) jours.

La **Figure 4.54** présente les distributions de coefficients de perméabilité horizontale au liquide k_{111} , pour les mêmes instants de simulation 10, 50, 100 et 200 jours.

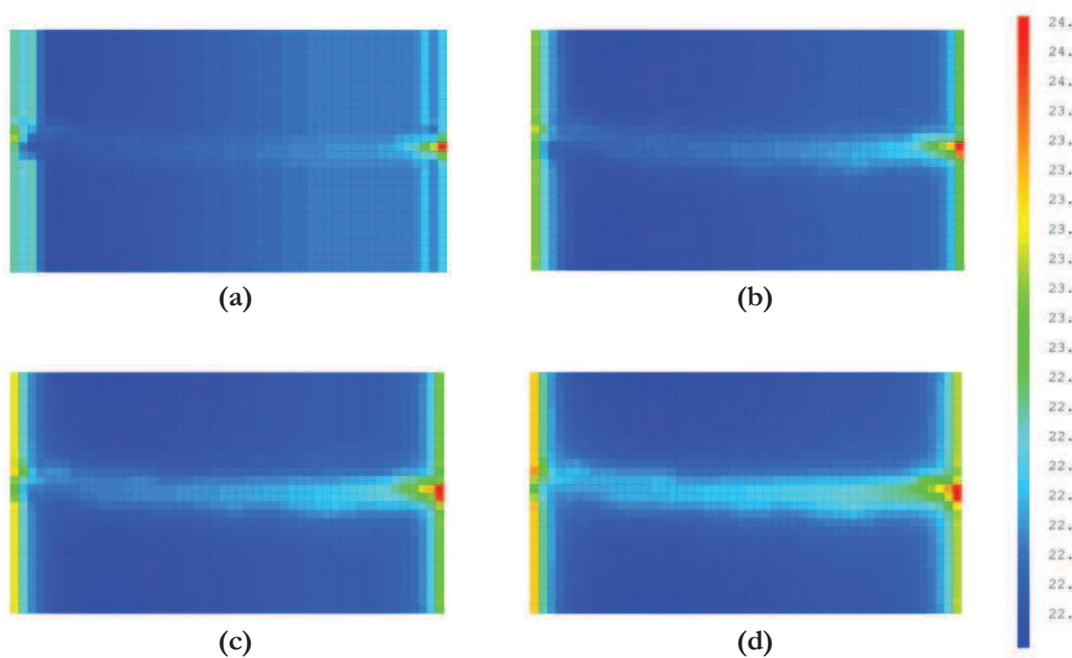


Figure 4.54 Coefficient de perméabilité au liquide k_{111} (échelle logarithmique en valeur absolue) aux temps 10 (a), 50 (b), 100 (c) et 200 (d) jours.

Contrairement au cas de la perméabilité au gaz, les variations de k_{111} entre zone saine et zone fissurée restent limitées à moins de 2 ordres de grandeur (de $2 \cdot 10^{-22}$ à $3.0 \cdot 10^{-24} \text{ m}^2$). En fait ces variations sont dues uniquement à la désaturation des zones considérées suite au phénomène de séchage (on rappelle que par hypothèse les fissures sont totalement désaturées et n'affectent donc pas la perméabilité au liquide). C'est pourquoi on observe également une diminution de k_{111} près des surfaces exposées.

Résultats obtenus avec le premier tirage, tenseur de perméabilité isotrope

Pour ces simulations, la valeur de perméabilité calculée dans la fissure homogénéisée sur chaque EF est utilisée pour construire un tenseur de perméabilité isotrope. L'idée est de comparer avec les résultats précédents obtenus avec un tenseur orthotrope afin d'évaluer l'impact de cette simplification sur la distribution des perméabilités et du degré de saturation dans la structure au cours du temps. La **Figure 4.55** présente les résultats obtenus à 100 et 200 jours pour le coefficient de perméabilité (gauche) et le degré de saturation (droite). Ces figures sont donc à comparer avec les **Figure 4.51** et **Figure 4.53**. On constate alors une différence significative entre les résultats obtenus avec tenseur isotrope et anisotrope : le séchage apparaît logiquement plus prononcé dans le premier cas. La **Figure 4.56** montre les évolutions de la perte de masse sur la structure entière dans les 2 cas et confirme que le séchage est plus intense lorsque le tenseur de perméabilité est isotrope. Ainsi l'emploi d'un tenseur anisotrope apparaît tout à fait justifié et

même nécessaire lorsque l'on s'intéresse à l'étude précise du transfert de masse dans une structure en béton microfissurée.

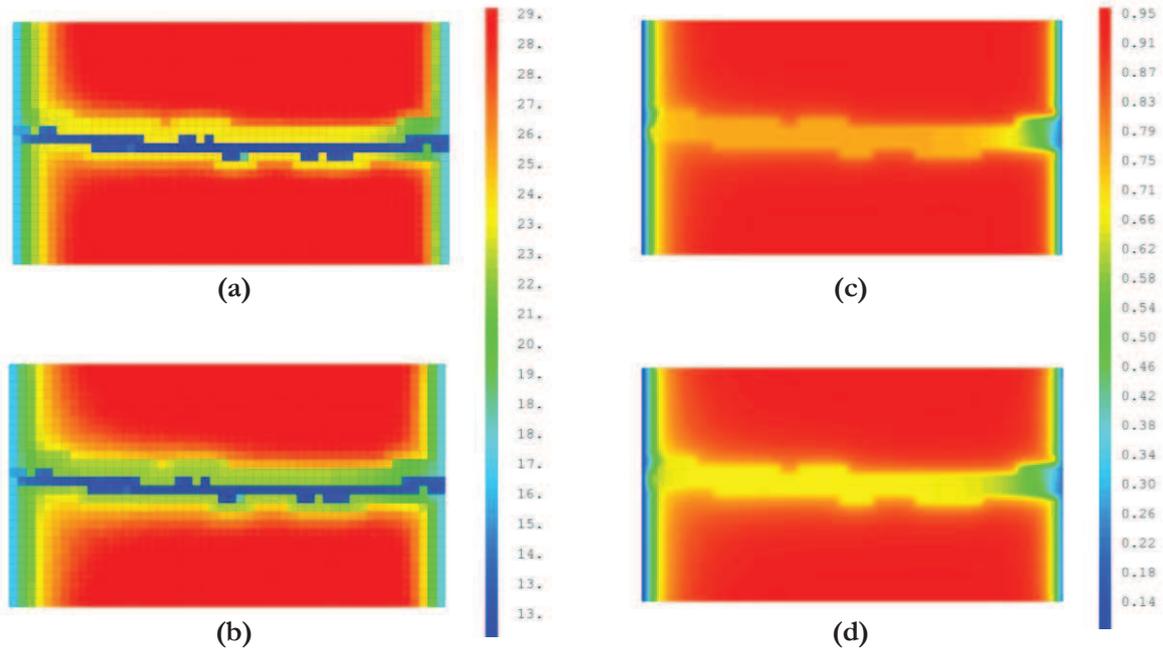


Figure 4.55 Coefficient de perméabilité (gauche) et degré de saturation (droite) aux temps 100 (haut) et 200 (bas) jours dans le cas d'un tenseur de perméabilité isotrope.

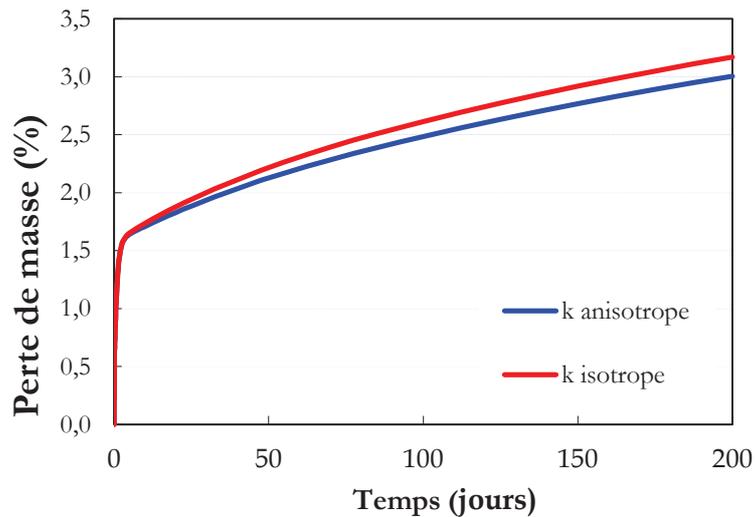


Figure 4.56 Evolutions de la perte de masse de la structure dans le cas d'un tenseur de perméabilité anisotrope et isotrope.

La **Figure 4.57** compare les pertes de masse obtenues pour les simulations THM réalisées avec les 3 fissures issues de la réanalyse ED telles que présentées ci-dessus. On constate un écart important entre le cas 2 et les autres. Cet écart est cohérent avec les valeurs de coefficient de perméabilité horizontal k_{11} maximales relevées sur la **Figure 4.50**. Toutefois la connectivité des éléments fissurés joue également un rôle significatif. En particulier l'ouverture de la fissure dans les zones situées près des surfaces exposées au séchage (notamment la surface chauffée sujette au séchage le plus intense) est primordiale. De ce point de vue, on constate effectivement sur la **Figure 4.50** que k_{11} est plus grand près des surfaces dans le cas 2 que dans les autres cas, signifiant que l'ouverture des fissures débouchantes est plus élevée.

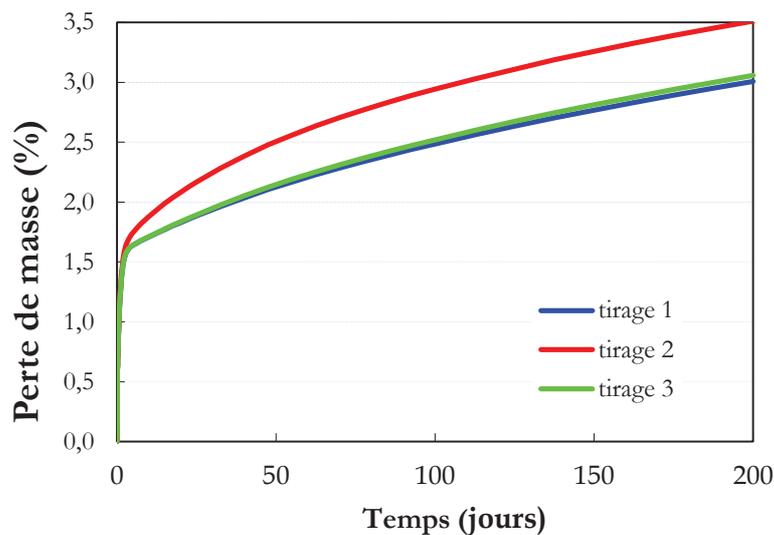


Figure 4.57 Evolutions de la perte de masse de la structure dans le cas des 3 maillages ED et d'un tenseur de perméabilité anisotrope.

IV.11 Conclusion

Nous avons présenté et illustré la méthode de réanalyse EF/ED à travers des cas-test de simulations. Les deux premiers, les poutres entaillées et bi-entaillées ont permis de montrer d'une manière générale la faisabilité de la méthode. Les faciès de fissuration obtenus et comparés aux faciès de fissuration expérimentaux ont permis de valider l'approche en termes d'initiation et de propagation de la fissuration. Nous avons vu qu'une fois que la cinématique de rupture de la structure est bien décrite par les EF, le modèle ED est capable de raffiner la description de la fissuration dans la zone d'intérêt et d'obtenir des ouvertures de fissures. La pertinence des résultats est directement liée à l'efficacité du modèle ED. Les résultats de la perméabilité à partir des ouvertures de fissures dans le cas-test de l'essai brésilien, résultats qui ont été confrontés à des résultats expérimentaux issus de la littérature, sont également encourageants en ce qui concerne l'estimation des flux de transfert à travers les fissures. En effet un écoulement de type poiseuille a été considéré dans les fissures et la perméabilité calculée est assez proche des résultats expérimentaux. Enfin la procédure de réanalyse a été appliquée à un cas de chargement complet

THM. Les perméabilités au liquide et au gaz sont recalculées dans le modèle THMs en exploitant les résultats issus du calcul DEAP. L'anisotropie induite par les orientations préférentielles des fissures a été prise en compte, ce qui a permis d'évaluer l'impact de la simplification souvent faite de considérer une perméabilité isotrope sur les résultats. Le séchage par exemple apparaît plus prononcé dans le cas d'un tenseur de perméabilité isotrope que dans le cas d'un tenseur de perméabilité orthotrope. Actuellement seule la perméabilité estimée à partir de la fissuration obtenue par la réanalyse ED/EF est réintroduite dans le modèle THMs. Une des perspectives de ce travail est de faire de même pour les paramètres mécaniques et le coefficient de Biot permettant ainsi de faire le lien avec le chapitre précédent.

Conclusion générale et perspectives

Ce travail de thèse s'inscrit dans le contexte de l'étude du comportement thermo-hydro-mécanique du béton développée au CEA Saclay et visant à une meilleure description des phénomènes physiques consécutifs aux chargements thermo-hydriques modérés auxquels peuvent être soumises des structures comme les ouvrages de stockage et d'entreposage des déchets radioactifs et les parois des enceintes de confinement. L'objectif est d'améliorer les modèles de comportement à long terme et les résultats des simulations numériques prédictives.

Le premier objectif de la thèse a été de proposer une amélioration dans le modèle THMs (Bary et al 2008) concernant l'estimation des paramètres mécaniques et hydromécaniques des matériaux cimentaires dans les conditions du matériau saturé et partiellement saturé, sain et fissuré. L'idée est de réduire le nombre de paramètres à identifier dans le modèle en intégrant des informations issues de la microstructure et de fournir des estimations fiables et réalistes. Pour répondre à ce premier objectif nous avons utilisé une représentation multi-échelle de la microstructure de la pâte de ciment, du mortier et du béton en partant de la plus petite échelle accessible par nanoindentation, l'échelle des différents produits issus de l'hydratation du ciment (portlandite, ettringite, C-S-H) jusqu'à l'échelle macroscopique du matériau fissuré. Les propriétés du matériau à chaque échelle de la représentation de la microstructure sont obtenues par des techniques de changement d'échelle tout en privilégiant des estimations explicites et facilement intégrables dans le code de calcul THMs. La représentation de la microstructure qui a été utilisée a été initialement proposée par (Bary et Béjaoui 2006). Notre apport dans ce travail a été essentiellement l'application de cette représentation schématique de la microstructure à l'estimation des paramètres hydromécaniques (coefficient de Biot et module de Biot) complétant les estimations des paramètres mécaniques et les propriétés de diffusion étudiés par (Bary et Béjaoui 2006) puis par (Stora 2007).

Globalement les paramètres estimés en conditions saturées sont en accord avec les résultats de modèles dans la littérature et les résultats expérimentaux. A partir de la connaissance des propriétés mécaniques des hydrates (obtenues par nanoindentation) et de leurs fractions volumiques calculées avec le modèle d'hydratation de Jennings, nous avons montré qu'il est possible de fournir des estimations réalistes notamment du coefficient et du module de Biot d'une large gamme de matériaux (rapport e/c, rapport s/c, granulométrie etc...) via des schémas d'homogénéisation notamment les schémas auto-cohérent généralisé et IDD (Zheng et Du, 2001). La forme des hydrates n'a qu'une très faible influence sur les paramètres macroscopiques estimés, autorisant ainsi l'hypothèse de forme sphérique sans précautions particulières. En revanche, en ce qui concerne la forme des pores, les conclusions sont plus contrastées. La forme des pores influence significativement les paramètres macroscopiques surtout lorsque ceux-ci sont approximés par des formes oblates. A partir de l'étude sur la pâte de ciment CO en conditions saturées, les résultats relatifs au module d'Young indiquent par exemple que la forme la plus réaliste pour les pores correspond à un paramètre morphologique $\zeta = 0.74$ s'ils sont approximés par des formes oblates, ou $\zeta = 0.6$ lorsqu'ils le sont par des formes prolates. Dans le cas du mortier et du béton, à partir de la représentation de la microstructure, nous avons pu reproduire

le caractère de zone de faiblesse qui caractérise l'auréole de transition, avec un module d'Young variant entre 40 et 80% de celui de la pâte de ciment constituant le matériau. Toujours en ce qui concerne cette zone de transition nous avons remarqué dans le modèle que sa taille n'influçait que très légèrement le coefficient et le module de Biot, ces derniers étant beaucoup plus liés à la porosité globale du matériau.

Dans les conditions du matériau partiellement saturé, il s'est avéré que la couche d'eau adsorbée et soumise à une pression de disjonction dans les pores a effectivement des répercussions non négligeables sur le comportement macroscopique du matériau. La prise en compte de cette eau structurée a montré notamment dans le cas du béton BO que l'hypothèse souvent admise selon laquelle le coefficient de Biot varie linéairement avec le degré de saturation n'est pas tout à fait pertinente surtout à de faibles humidités relatives. Les résultats que nous avons obtenus en termes d'évolution du coefficient et du module de Biot en fonction de la saturation ont été comparés à des valeurs identifiées à l'aide des déformations de séchage et issues de la littérature. On obtient un accord globalement satisfaisant permettant de valider la modélisation en conditions partiellement saturées et notamment le calcul des isothermes de sorption. Ces isothermes ont été estimées sur la base d'une distribution de taille de pores avec deux classes de pores : les pores du gel de C-S-H et les pores capillaires. Les valeurs de rayons de pores permettant de fitter les isothermes de sorption expérimentales sont cohérentes avec la classification des tailles de pores proposée par Jennings et Tennis (1994).

Dans le cas du matériau fissuré, les microfissures ont été représentées par des ellipsoïdes aplatis de rapport d'aspect tendant vers 0. Compte tenu de leur taille caractéristique, nous avons estimé qu'elles sont immergées dans la matrice homogène du matériau sain homogénéisée à une échelle inférieure. L'anisotropie dans le comportement mécanique et hydromécanique qu'induit une orientation préférentielle des microfissures a été examinée. Notamment les tenseurs de Biot du matériau isotrope transverse (cas d'une famille de microfissures parallèles) et du matériau orthotrope (deux familles de microfissures de normales perpendiculaires) ont été évalués. Nous avons également procédé à une comparaison entre les schémas d'homogénéisation dilué d'Eshelby, de Mori-Tanaka, IDD et Full Range IDD pour choisir le schéma le plus approprié dans cette étude. Les schémas qui donnent dans les cas traités ici les résultats les plus réalistes sont les schémas de Mori-Tanaka et Full Range IDD, avec une préférence au modèle Full Range IDD qui paraît plus robuste que le schéma Mori-Tanaka selon son auteur. Un accent a été également porté sur le couplage saturation/fissuration à travers le coefficient de Biot. Nous avons confirmé à travers cette étude de modélisation qu'on peut déterminer complètement le comportement macroscopique d'un matériau fissuré non saturé à partir d'informations microstructurales. Dans ce présent travail ces informations sont : le rapport e/c , la granulométrie des granulats (qui intervient dans le calcul de l'épaisseur de l'ITZ), les rayons de taille des pores du gel C-S-H et des pores capillaires, le rapport d'aspect des microfissures.

Le second objectif de la thèse a été de reproduire numériquement de façon plus fine que les modèles macroscopiques existants, la fissuration du béton soumis à des chargements THM. Nous avons choisi pour cela une méthode de réanalyse éléments finis/éléments discrets. La procédure de réanalyse a été illustrée sur des cas-test de simulations permettant de montrer sa faisabilité. Les résultats que nous avons obtenus en termes d'initiation et de propagation de la fissuration sont

satisfaisants et montrent que la pertinence de la réanalyse ne dépend que de l'efficacité du modèle ED, une fois que le modèle EF a pu reproduire correctement la l'endommagement de la structure. Afin de valider l'approche en termes d'ouvertures de fissures, nous avons simulé numériquement le test de l'essai brésilien et calculé la perméabilité du disque fissuré (calculé grâce aux ouvertures et longueurs de fissures) en fonction de son déplacement latéral. Pour une valeur identifiée du coefficient d'écoulement qui incorpore l'effet de la rugosité des fissures, nous avons trouvé des résultats assez proches des valeurs expérimentales. Ces résultats sont encourageants pour l'estimation des flux traversant les fissures dans les conditions d'un chargement THM. La procédure de réanalyse que nous avons proposée a également été testée sur un cas de chargement complet THM. Le cas de calcul retenu est un mur en béton chauffé sur une face. Etant donné que nous avons voulu étudier la faisabilité de la procédure de réanalyse dans le cas THM, il nous est paru intéressant de partir d'un cas simple. L'absence par exemple d'armatures dans le mur a permis d'obtenir des fissures localisées avec des ouvertures de fissures significatives et des perméabilités de plusieurs ordres de grandeur supérieurs à la perméabilité intrinsèque du matériau sain permettant d'illustrer plus facilement la procédure. Nous avons proposé pour ce cas-test une méthode de recalcul de la perméabilité du matériau fissuré. En particulier l'anisotropie induite par les orientations des fissures a été prise en compte dans ce calcul. Nous avons justifié et montré la nécessité de prendre en compte un tenseur de perméabilité anisotrope lorsqu'on s'intéresse à l'étude précise de transferts de masse dans une structure en béton macrofissurée.

En ce qui concerne les perspectives ouvertes par ce travail, il nous semble intéressant d'explorer dans le futur plusieurs points. A court terme le premier concerne le couplage du modèle développé pour l'estimation des paramètres mécaniques et hydro-mécaniques au modèle THMs implanté dans Cast3m. Ensuite vis-à-vis du comportement à long terme du béton, il serait intéressant de réfléchir sur les problématiques de comportement différé comme le fluage. Une approche micro-macro du fluage en considérant les mécanismes de fluage des différents produits de l'hydratation notamment les C-S-H dont le fluage est le plus significatif (glissement relatif des feuillettes au sein des particules de C-S-H) semble être pertinente puisqu'il est établi que l'évolution dans le temps des propriétés macroscopiques du béton découle de phénomènes physiques mis en jeu à l'échelle microscopique voire nanoscopique. Une extension de l'approche multi-échelle développée dans ce travail à un comportement viscoélastique non linéaire de la phase C-S-H peut être envisagée.

Toujours concernant l'amélioration du modèle qui a été proposé il serait pertinent d'intégrer les interactions entre la température et les paramètres mécaniques et hydromécaniques. Les changements de microstructure qu'entraînent un traitement thermique comme l'augmentation de la porosité, la modification du réseau poreux et la fissuration pourront être prises en compte dans l'approche micromécanique.

Enfin on peut envisager une modélisation plus précise des courbes isothermes d'adsorption-désorption à partir des informations sur la microstructure pour décrire correctement l'état hydrique du matériau. En particulier, les phénomènes d'hystérésis devront être pris en compte. En effet l'histoire hygrométrique du matériau peut évoluer durant le chargement et il serait utile de prendre en compte les différences qui interviennent dans les cycles de séchage-imbibition. Beaucoup d'approches dans la littérature s'appuyant sur un modèle de réseau poreux basé sur une

distribution de taille de pores tentent de reproduire le phénomène d'hystérésis mais n'incorporent pas généralement d'informations physiques dans les modèles.

En ce qui concerne la réanalyse EF/ED, une des perspectives à court terme serait d'abord d'impacter la fissuration sur les paramètres mécaniques et hydromécaniques comme c'est le cas pour la perméabilité. L'estimation micromécanique de ces paramètres présentée dans le chapitre 3 sera effectuée avec la fissuration ED obtenue au cours de la réanalyse. Ensuite l'application de la méthode de réanalyse à des structures renforcées en armatures est également primordial pour étudier l'influence des armatures sur la fissuration et donc sur la perméabilité de la structure fissurée. Dans le but de valider nos résultats on pourra envisager la simulation du comportement d'éléments de structures en béton soumis à des chargements thermo-hydriques et mécaniques avec le modèle et comparer sa réponse aux résultats expérimentaux disponibles. On pourra pour ce faire se baser par exemple sur l'étude expérimentale de la maquette MAQBETH. Cette structure en béton armé est représentative d'une structure de déchets radioactifs. Elle a été instrumentée en sondes thermiques, capteurs d'humidité et de pression de gaz, et jauges de déformations et a été testée au LECBA.

A plus longue échéance, plusieurs autres points doivent être approfondis pour permettre une analyse plus rigoureuse de la fissuration. En particulier l'identification de la relation entre les paramètres matériaux EF et ED. De plus une étude doit être faite sur la nature du modèle EF utilisé afin de corréliser la fissuration obtenue à la nature de ce modèle. Pour optimiser le calcul de la réanalyse une méthode de levels-set pourrait permettre de délimiter de façon progressive la taille de la zone d'intérêt au cours du calcul. La validation exclusivement des ouvertures de fissures sur des structures est également un point important à élucider, notamment par des comparaisons avec des résultats de post-traitements d'essais par corrélations d'images (Oliver et al 2011). L'algorithme de calcul de la perméabilité peut également être amélioré. Une méthode d'homogénéisation de la perméabilité d'un milieu microfissuré serait le bienvenu (Barthelemy 2007). Le calcul de la rugosité permettra d'estimer plus précisément les écoulements dans les fissures.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Acker, P., Ed. (2001). *Micromechanical analysis of creep and shrinkage mechanisms. Creep, Shrinkage and Durability Mechanics of Concrete and other quasi-brittle materials.* Cambridge, MA.
- ASHRAE (1993). *Handbook of fundamentals*, ASHRAE.
- Bachmat, Y. et J. Bear (1983). "The dispersive flux in transport phenomena in porous media." *Advances in Water Resources* 6(3): 169-174.
- Badmann, R., N. Stockhausen et M. Setzer (1981). "The statistical thickness and the chemical potential of adsorbed water films. ." *Journal of Colloid and Interface Science* 82(2): 534-601.
- Baroghel-Bouny, V. (1994). *Caractérisation des pâtes de ciment et des bétons. Méthodes, analyses et interprétations*, Thèse de doctorat. Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, LCPC. Ph-D.
- Baroghel-Bouny, V. (2007). "Water vapour sorption experiments on hardened cementitious materials. Part II: Essential tool for assessment of transport properties and for durability prediction." *Cement and Concrete Research* 37(3): 438-454.
- Baroghel-Bouny, V., M. Mainguy, T. Lassabatere et O. Coussy (1999). "Characterization and identification of equilibrium and transfer moisture properties for ordinary and high-performance cementitious materials." *Cement and Concrete Research* 29(8): 1225.
- Baroghel-Bouny, V., T. Q. Nguyen et P. Dangla (2009). "Assessment and prediction of RC structure service life by means of durability indicators and physical/chemical models." *Cement and Concrete Composites* 31(8): 522-534.
- Bary, B. (1996). *Etude du couplage hydraulique-mécanique dans le béton endommagé*, Ph-D thesis (in french), Ecole Normale Supérieure de Cachan. Ph-D.
- Bary, B. (2004). *Etude bibliographique sur la modélisation couplée THM appliquée au béton.* Note technique CEA Réf. NT SCCME 03-252-A.
- Bary, B. (2011). "Estimation of poromechanical and thermal conductivity properties of unsaturated isotropically microcracked cement pastes." *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 35(14): 1560-1586.
- Bary, B. et S. Béjaoui (2006). "Assessment of diffusive and mechanical properties of hardened cement pastes using a multi-coated sphere assemblage model." *Cement and Concrete Research* 36(2): 245.
- Bary, B., M. V. G. de Morais, S. Poyet et S. Durand (2012). "Simulations of the thermo-hydro-mechanical behaviour of an annular reinforced concrete structure heated up to 200°C." *Engineering Structures* 36(0): 302-315.
- Bary, B., G. Ranc, S. Durand et O. Carpentier (2008). "A coupled thermo-hydro-mechanical-damage model for concrete subjected to moderate temperatures." *International Journal of Heat and Mass Transfer* 51(11-12): 2847-2862.
- Bazant, Z. (1976). "Instability, Ductility and size effect in strain-softening concrete." *Journal of Engineering mechanics* 102: 331-344.
- Bazant, Z. P. (1972). "Thermodynamics of hindered adsorption and its implications for hardened cement paste and concrete." *Cement and Concrete Research* 2(1): 1-16.
- Bazant, Z. P. et P. A. Pfeiffer (1985). *Test of shear fracture and strain-softening in concrete. Proceedings of the 2nd Symposium of the Interaction of Non-nuclear Munitions with Structures Panama City Beach, FL.* .
- Bazant, Z. P. et W. Thongutai (1978). "Pore pressure and drying of concrete at high temperature." *Journal of Eng. Mech. Div.* 104: 1059-1079.
- Bear, J. et Y. Bachmat (1983). "On the equivalence of areal and volumetric averages in transport phenomena in porous media." *Advances in Water Resources* 6(1): 59-62.

- Bejaoui, S. et B. Bary (2007). "Modeling of the link between microstructure and effective diffusivity of cement pastes using a simplified composite model." *Cement and Concrete Research* 37(3): 469.
- Béjaoui, S., B. Bary, S. Nistche, D. Chaudanson et C. Blanc (2006). "Experimental and modeling studies of the link between microstructure and effective diffusivity of cement pastes." *Revue Européenne de Génie Civil* 10(9): 1073-1106.
- Belytschko, T. et S. Xiao (2003). "Coupling methods for continuum models with molecular dynamics." *International Journal for Multiscale Computational Engineering* 1: 115-126.
- Benallal, A., R. Billardon et G. Geymonat (1993). "Bifurcation and rate-independant materials " *Bifurcation and stability of dissipative systems, CISM Lecture Notes 327, Springer*. 1-44.
- Benboudjema, F. (2002). Modélisation du comportement différé du béton sous sollicitations biaxiales. Applications aux enceintes de confinement de bâtiments réacteurs de centrales nucléaires. Thèse de Doctorat, Université de Marne -La-Vallée.
- Bentz, D. P. (1997). "Three-Dimensional Computer simulation of Portland Cement Hydration and Microstructure Development." *Journal of the American Ceramic Society* 80(1): 3-21.
- Bentz, D. P., E. Garboczi et D. Quenard (1998). "Modelling drying shrinkage in reconstructed porous materials: application to porous Vycor glass." *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 1998(6): 211-236.
- Bentz, D. P. et E. J. Garboczi (1991). "Percolation of phases in a three-dimensional cement paste microstructural model." *Cement and Concrete Research* 21(2-3): 325-344.
- Bentz, D. P., C.-J. Haecker, M. A. Peltz et K. A. Snyder (2008). "X-ray absorption studies of drying of cementitious tile adhesive mortars." *Cement and Concrete Composites* 30(5): 361-373.
- Bernard, F. et S. Kamali-Bernard (2010). "Performance simulation and quantitative analysis of cement-based materials subjected to leaching." *Computational Materials Science* 50(1): 218-226.
- Bernard, O., F.-J. Ulm et E. Lemarchand (2003). "A multiscale micromechanics-hydration model for the early-age elastic properties of cement-based materials." *Cement and Concrete Research* 33(9): 1293-1309.
- Biot, M. A. (1941). "General theory of three-dimensional consolidation." *Journal of Applied Physics* 12: 155-164.
- Biot, M. A. et D. G. Willis (1957). "The elastic coefficient of theory of consolidation." *Journal of Applied Mechanics* 24: 594-601.
- Bishnoi, S. et K. Scrivener (2009). "µic: A new platform for modelling the hydration of cements." *Cement and Concrete Research* 39(4): 266-274.
- Bishop, A. W. (1959). "The principle of effective stress." *Teknisk Ukeblad* 39(859-863).
- Bishop, A. W. et G. E. Blish (1963). "Some aspects of effective stress in saturated and partially saturated soils." *Géotechnique* 13: 177-197.
- Bolander, J. et G. Hong (2002). "Rigid-Body-spring-network modeling of prestressed concrete members." *ACI Structures Journal* 99(1): 569-591.
- Bomberg, M. et C. J. Shirliffe (1979). Influence of moisture gradients on heat transfer through porous media building materials, Thermal Transmission Measurements of Insulation (ASTM STP 60), R. P. Tye (ed), ASTM, Materials Park, OH.
- Bornert, M. (1996). Morphologie microstructurale et comportement mécanique; caractérisations expérimentales, approches par bornes et estimations autocohérentes généralisées. Thèse de l'ENPC.
- Bornert, M., T. Breutheu et P. Gilormini (2001). Homogénéisation en mécanique des matériaux Vol1 : matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques. Paris.
- Bottoni, M. (2009). Modèle d'endommagement de Mazars. Code Aster.

- Boumiz, A., C. Vernet et F. C. Tenoudji (1996). "Mechanical properties of cement pastes and mortars at early ages : Evolution with time and degree of hydration." *Advanced Cement Based Materials* 3(3-4): 94-106.
- Bourdarot, E. (1991). Application of porodamage model to analysis of concrete dams. Note EDF/CNEH.
- Bourdette, B., E. Ringot et J. P. Ollivier (1995). "Modelling of the transition zone porosity." *Cement and Concrete Research* 25(4): 741-751.
- Bourgeois, E. (1997). Mécanique des milieux poreux en transformation finie: Formulation des problèmes et méthodes de résolution. Thèse de doctorat. Ecole Nationale des Ponts et Chaussées. Paris. PhD.
- Briffaut, M. (2010). Etude de la fissuration au jeune âge des structures massives en béton: influence de la vitesse de refroidissement, des reprises de bétonnage et des armatures, Thèse de doctorat de l'ENS-Cachan.
- Brooks, R. H. et A. J. Corey (1964). "Hydraulic properties of porous media." *Hydrol. Paper 3, Col. State Univ., Fort Collins, CO.*
- Brouwers, H. J. H. (2004). "The work of Powers and Brownard revisited: Part 1." *Cement and Concrete Research* 34(9): 1697-1716.
- Brouwers, H. J. H. (2005). "The work of Powers and Brownard revisited: Part 2." *Cement and Concrete Research* 35(10): 1922-1936.
- Brunauer, S., P. H. Emmet et E. Teller (1938). "Adsorption of gas in multimolecular layers." *Journal of American of Chemistry Society* 60(1): 309-319.
- Budiansky, B. et R. J. O'Connell (1976). "Elastic moduli of a cracked solid." *International Journal of Solids and Structures* 12(2): 81-97.
- Bullard, J. W., H. M. Jennings, R. A. Livingston, A. Nonat, G. W. Scherer, J. S. Schweitzer, K. L. Scrivener et J. J. Thomas (2010). "Mechanisms of cement hydration." *Cement and Concrete Research* In Press, Corrected Proof.
- Burlion, N. (2004). Quelques résultats sur le couplage séchage-comportement mécanique des matériaux cimentaires. Habilitation à Diriger des Recherches.
- Burlion, N., D. Bernard et D. Chen (2006). "X-ray microtomography: Application to microstructure analysis of a cementitious material during leaching process." *Cement and Concrete Research* 36(2): 346-357.
- Carlier, J. P. et N. Burlion (2011). "Experimental and numerical assessment of the hydro-dynamical properties of cementitious materials." *Transport of porous media* 86(1): 87-102.
- Carlier, J. P., T. Rougelot et N. Burlion (2012). Evaluation comparative de modèles analytiques d'isothermes de sorption dans les matériaux cimentaires. Transferts 2012. Lille.
- Carmeliet, J., D. J. F., K. Vandersteen et S. Roels (2004). "Three-dimensional liquid transport in concrete cracks." *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 28(671-687).
- Chambart, M. (2009). Endommagement anisotrope et comportement dynamique des structures en béton jusqu'à la ruine, Thèse de doctorat de l'ENS Cachan.
- Chateau, X. et L. Dormieux (1998). "Approche micromécanique du comportement d'un milieu poreux non saturé." *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics-Physics-Astronomy* 326(9): 533.
- Cheng, X. T. (2009). Effet du chauffage sur le comportement mécanique et poro-mécanique de matériaux cimentaires - propriétés hydrauliques et changements morphologiques. Thèse de doctorat, Ecole centrale de Lille.
- Choinska, M. (2006). Effets de la température, du chargement mécanique et de leurs interactions sur la perméabilité du béton de structure, Thèse de doctorat de l'Ecole Centrale de Nantes.
- Christensen, R. M. (1990). "A critical evaluation for a class of micro-mechanics models." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 38(3): 379-404.

- Christensen, R. M. et K. H. Lo (1979). "Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 27(4): 315.
- Constantinides, G. et F.-J. Ulm (2004). "The effect of two types of C-S-H on the elasticity of cement-based materials: Results from nanoindentation and micromechanical modeling." *Cement and Concrete Research* 34(1): 67.
- Constantinides, G., F. J. Ulm et K. Van Vliet (2003). "On the use of nanoindentation for cementitious materials." *Materials and Structures* 36: 191-196.
- Coussy, O. (1995). *Mechanics of Porous Continua*. New-York, Wiley.
- Coussy, O. (2004). *Poromechanics*. Chichester, England.
- Coussy, O., V. Baroghel-Bouny, P. Dangla et M. Mainguy (2001). "Evaluation de la perméabilité à l'eau liquide des bétons à partir de leur perte de masse durant le séchage." *Revue française de Génie civil, Numéro spécial "Transferts 2000"* 5(1-2).
- Coussy, O., P. Dangla, T. Lassabatere et V. Baroghel-Bouny (2004). "The equivalent pore pressure and the swelling and shrinkage of cement-based materials." *Materials and Structures* 37(1): 15-20.
- Crisfield, M. A. (1982). Local instabilities in the non linear analysis of reinforced concrete beams and slabs. *Proceedings of the Institution of Civil Engineers*.
- Cundall, P., M. Ruest, A. Guest et G. Chitombo (2003). Evaluation of schemes to improve the efficiency of a complete model of blasting and rock fracture. Germany, Balkema.
- Cundall, P. et O. Strack (1979). "A discrete numerical model for granular assemblies." *Géotechnique* 29(1): 47-65.
- Cusatis, G., Z. P. Bazant et L. Cedolin (2006). "Confinement-shear lattice CSL model for fracture propagation in concrete." *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 195(52): 7154.
- Cusatis, G. et L. Cedolin (2007). "Two-scale study of concrete fracturing behavior." *Engineering Fracture Mechanics* 74(1-2): 3.
- Cusatis, G., A. Mencarelli, D. Pelessone et J. T. Baylot (2010). The Lattice Discrete Particle Model (LDPM) for the simulation of Uniaxial and Multiaxial Behavior of Concrete: Recent Results. *FraMCoS 7*, 23-28 May, Jeju, South Korea.
- D'Adetta, G., F. Kun et E. Ramm (2002). "On the application of a discrete model to the fracture process of a cohesive granular materials." *Granular Matter* 7(1): 77-90.
- Dal Pont, S. (2004). Lien entre la perméabilité et l'endommagement dans les bétons à haute température. Thèse de doctorat, ENPC. Thèse de doctorat, ENPC.
- Dangla, P. (2000). "Approche énergétique du comportement mécanique des matériaux non saturés."
- De Buhan, P. et L. Dormieux (1999). "A micromechanics-based approach to the failure of saturated porous media." *Transport in porous media* 34(1-3): 47-62.
- de Groot, S. R. et P. Mazur (1984). *Non-equilibrium thermodynamics*. New York.
- Delaplace, A. (1996). Thèse de l'ENS Cachan.
- Delaplace, A. (2008). Modélisation discrète appliquée au comportement des matériaux et des structures. Mémoire d'Habilitation à diriger des recherches, ENS Cachan.
- Delaplace, A. et R. Desmorat (2007). "Discrete 3D model as complimentary numerical testing for anisotropic damage." *International Journal of Fracture* 148(2): 115-128.
- Delaplace, A. et F. Hild (2007). Digital image correlation techniques applied to post-process discrete modelling. . *6th International Conference on Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures*.
- Delaplace, A. et A. Ibrahimbegovic (2006). "Performance of time-stepping schemes for discrete models in fracture dynamic analysis." *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 65(1): 1527-1544.

- Delaplace, A., A. Ibrahimbegovic et K. J. Bathe (2003). Discrete analysis of the dynamic behavior of heterogeneous material. *Computational Fluid and Solid Mechanics 2003*. Oxford, Elsevier Science Ltd: 225.
- Derjaguin, B. V., L. F. Leonov et V. I. Roldughin (1985). "Disjoining pressure in liquid metallic films." *Journal of Colloid and Interface Science* 108(1): 207-214.
- Deudé, V., L. Dormieux, D. Kondo et V. Pensée (2002). "Propriétés élastiques non linéaires d'un milieu mésolfissuré (Nonlinear elastic properties of a mesocracked medium)." *Comptes Rendus Mécanique* 330(8): 587.
- Dhia, B. (1990). "Multi-scale mechanical problems : the arlequin method." *Computational solid mechanics* 36(36): 899-904.
- Diamond, S. (1999). "Aspects of concrete porosity revisited." *Cement and Concrete Research* 29(8): 1181-1188.
- Diamond, S. (2000). "Mercury porosimetry: An inappropriate method for the measurement of pore size distributions in cement-based materials." *Cement and Concrete Research* 30(10): 1517-1525.
- Diamond, S. et W. L. Dolch (1972). "Generalized log-normal distribution of pore sizes in hydrated cement paste." *Journal of Colloid and Interface Science* 38(1): 234.
- Diamond, S. et J. Huang (2001). "The ITZ in concrete - a different view based on image analysis and SEM observations." *Cement and Concrete Composites* 23(2-3): 179-188.
- Diederichs, U., U. M. Jumppanen et V. Pentaala (1989). Behavior of high strength concrete at high temperature, Espoo, Helsinki University of technology, Report 92.
- Donzé, F. et S. Magnier (1995). "Formulation of a 3D numerical model of brittle behavior." *Geophysics International Journal* 122(1): 790-802.
- Dormieux, L. et E. Bourgeois (2002). Introduction à la micromécanique des milieux poreux. Paris, Presses des Ponts et Chaussées.
- Dormieux, L. et D. Kondo (2004). "Approche micromécanique du couplage perméabilité-endommagement." *Comptes Rendus Mécanique* 332(2): 135-140.
- Dormieux, L., D. Kondo et F. J. Ulm (2006). Microporomechanics. Chichester.
- Dormieux, L., A. Molinari et D. Kondo (2002). "Micromechanical approach to the behavior of poroelastic materials." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 50(10): 2203-2231.
- Drouet, E. (2010). Impact de la température sur la carbonatation des matériaux cimentaires: Prise en compte des transferts hydriques. Thèse de doctorat. Cachan, Ecole Normale Supérieure de Cachan.
- Dufour, F. (2007). Contribution à la modélisation numérique de la fissuration des structures en béton avec prise en compte du fluage pour estimation de la perméabilité., Mémoire d'habilitation à diriger des recherches de l'Université de Nantes.
- Dufour, F., G. Legrain, G. Pijaudier-Cabot et A. Huerta (2011). "Estimation of crack opening from a two dimensional continuum-based finite element computation." *Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*.
- Elsharief, A., M. D. Cohen et J. Olek (2003). "Influence of aggregate size, water cement ratio and age on the microstructure of the interfacial transition zone." *Cement and Concrete Research* 33(11): 1837-1849.
- Eshelby, J. D. (1957). "The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems." *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and physical sciences* 241(1126): 376-396.
- Farran, J. (1956). "Contribution minéralogique à l'étude de l'adhérence entre les constituants hydratés et des matériaux enrobés." *Revue des Matériaux de Construction et de Génie Civil*: 155-172.
- Fauchet, B. (1991). Analyse poroplastique des barrages en béton et leurs fondations. Rôle de la pression interstitielle, Thèse de doctorat de l'ENPC.

- Feldman, R. F. et P. J. Sereda (1968). "A model of portland hydrated cement as deduced from sorption length change and mechanical properties." *Materials and Structures* 1: 509-519.
- Fen-Chong, T. (2008). Durabilité sous percolation et/ou cristallisation confinée en milieu poreux. Habilitation à diriger des recherches. Habilitation à diriger des recherches, LCPC.
- Feraille-Frenet, A. (2000). Le rôle de l'eau dans le comportement à haute température des bétons, Thèse de l'ENPC.
- Ferraris, C. F. (1986). Mécanismes de retrait de la pâte de ciment. Thèse de doctorat de l'EPFL.
- Fredlund, D. G. et H. Rahardo (1993). *Soil Mechanics for Unsaturated Soils*, J. Wiley & Sons.
- Fu, Y.-F., Y.-L. Wong, C.-S. Poon, C.-A. Tang et P. Lin (2004). "Experimental study of micro/macro crack development and stress-strain relations of cement-based composite materials at elevated temperatures." *Cement and Concrete Research* 34(5): 789-797.
- Gallé, C. (2001). "Effect of drying on cement-based materials pore structure as identified by mercury intrusion porosimetry: A comparative study between oven-, vacuum-, and freeze-drying." *Cement and Concrete Research* 31(10): 1467-1477.
- Garboczi, E. J. et D. P. Bentz (1996). "Modelling of the microstructure and transport properties of concrete." *Construction and Building Materials* 10(5): 293-300.
- Garboczi, E. J. et D. P. Bentz (1997). "Analytical formulas for interfacial transition zone properties." *Advanced Cement Based Materials* 6(3-4): 99-108.
- Garboczi, E. J. et D. P. Bentz (1998). "Multiscale Analytical/Numerical Theory of the Diffusivity of Concrete." *Advanced Cement Based Materials* 8(2): 77-88.
- Garboczi, E. J. et J. W. Bullard (2004). "Shape analysis of a reference cement." *Cement and Concrete Research* 34(10): 1933-1937.
- Gavoille, S. (2009). Stratégies de couplage de modèles discret-continu en dynamique explicite. Ens-Cachan, Thèse de doctorat de l'Ens-Cachan. PhD.
- Gawin, D., C. E. Majorana, F. Pesavento et B. A. Schrefler (1996). "A fully coupled multiphase model of hygro-thermo-mechanical behaviour of concrete at high temperature." *Computational Mechanics*.
- Gawin, D., F. Pesavento et B. A. Schrefler (2002). "Simulation of damage permeability coupling in hygro-thermo-mechanical analysis of concrete at high temperature." *Comm. in Num. Meth. Engrg* 18(113-119).
- Gawin, D., F. Pesavento et B. A. Schrefler (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.
- Geers, M. G. D., R. de Borst et R. H. J. Peerlings (2000). "Damage and crack modeling in single-edge and double-edge notched concrete beams." *Engineering Fracture Mechanics* 65(2-3): 247-261.
- Gérard, B. (1996). Contribution des couplages mécanique-chimie-transfert dans la tenue à long terme des ouvrages de stockage de déchets radioactifs., Thèse de doctorat de l'ENS Cachan.
- Ghabezloo, S. (2008). Comportement thermo-poro-mécanique d'un ciment pétrolier. Thèse de doctorat. Paris, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées. PhD.
- Ghabezloo, S. (2010). "Association of macroscopic laboratory testing and micromechanics modelling for the evaluation of the poroelastic parameters of a hardened cement paste." *Cement and Concrete Research* 40(8): 1197-1210.
- Giraud, A., C. Gruescu, D. P. Do, F. Homand et D. Kondo (2007). "Effective thermal conductivity of transversely isotropic media with arbitrary oriented ellipsoidal inhomogeneities." *International Journal of Solids and Structures* 44(9): 2627-2647.
- Granger, L. (1996). Comportement différé du béton dans les enceintes de centrales nucléaires. Analyses et modélisation, ENPC.
- Gray, W. G. et B. A. Schrefler (2001). "Thermodynamic approach to effective stress in partially saturated porous media." *European Journal of Mechanics - A/Solids* 20(4): 521-538.

- Gruszkiewicz, M. S., J. Horita, J. M. Simonson, R. E. Mesmer et J. B. Hulen (2001). "Water adsorption at high temperature on core samples from The Geysers geothermal field, California, USA." *Geothermics* 30(2-3): 269-302.
- Haecker, C. J., E. J. Garboczi, J. W. Bullard, R. B. Bohn, Z. Sun, S. P. Shah et T. Voigt (2005). "Modeling the linear elastic properties of Portland cement paste." *Cement and Concrete Research* 35(10): 1948.
- Hagymassy, J., S. Brunauer et R. S. Mikhail (1969). "Pore structure analysis by water vapor adsorption I. t-Curves for water vapor." *Journal of Colloid and Interface Science* 29(3): 485-491.
- Hagymassy, J., I. Odler, M. Yudenfreund, J. Skalny et S. Brunauer (1972). "Pore structure analysis by water vapor adsorption. III. Analysis of hydrated calcium silicates and portland cements." *Journal of Colloid and Interface Science* 38(1): 20-34.
- Hansen, T. C. (1986). "Physical structure of hardened cement paste, a classical approach." *Materials Structure* 19: 423-436.
- Hashin, Z. (1962). "The elastic moduli of heterogeneous materials." *Journal of Applied Mechanics* 29(143).
- Hashin, Z. et P. J. M. Monteiro (2002). "An inverse method to determine the elastic properties of the interphase between the aggregate and the cement paste." *Cement and Concrete Research* 32(8): 1291-1300.
- Hassanizadeh, S. et W. G. Gray (1980). "General conservation equations for multiphase systems: 3 Constitutive theory for porous media flow." *Advances in Water Resources* 3(1): 25-40.
- Hermann, H. et S. Roux (1990). "Statistical models for the fracture of disordered media." *Elsevier science Publishers, Amsterdam*.
- Herve, E. et A. Zaoui (1993). "n-Layered inclusion-based micromechanical modelling." *International Journal of Engineering Science* 31(1): 1-10.
- Heukamp, F. H. (2002). Chemomechanics of calcium leaching of cement-based materials at different scales: the role of CH dissolution and C-S-H degradation on strength and durability performance of materials and structures. Cambridge, MIT. PhD dissertation.
- Hill, R. (1965). "A self-consistent mechanics of composite materials." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 13(4): 213-222.
- Houpeurt, A. (1974). Mécanique des fluides dans les milieux poreux, critiques et recherches, Editions technip.
- Houst, Y. F. et F. H. Wittmann (1989). Le retrait de carbonatation du béton. *LABSE Symposium Lisbon : Durability of structures* AIPC Zurich 57(1):255-260.
- Igarashi, S., A. Bentur et S. Mindess (1996). "Microhardness testing of cementitious materials." *Advanced Cement Based Materials* 4(2): 48-57.
- Igarashi, S., M. Kawamura et A. Watanabe (2004). "Analysis of cement pastes and mortars by a combination of backscatter-based SEM image analysis and calculations based on the Powers model." *Cement and Concrete Composites* 26(8): 977-985.
- Ingraffea, A. R. et M. J. Panthaki (1985). Analysis of shear fracture tests of concrete beams. *Finite Element Analysis of reinforced concrete structures*. Tokyo: ASCE.
- Ishida, T., K. Maekawa et T. Kishi (2007). "Enhanced modeling of moisture equilibrium and transport in cementitious materials under arbitrary temperature and relative humidity history." *Cement and Concrete Research* 37(4): 565-578.
- Jason, L. (2004). Relation entre endommagement et perméabilité pour les bétons. Applications aux calculs de structure, Thèse de doctorat, Université de Nantes.
- Jennings, H. M. (2000). "A model for the microstructure of calcium silicate hydrate in cement paste." *Cement and Concrete Research* 30(1): 101.
- Jennings, H. M. et P. Tennis (1994). "Model for the developing microstructure in portland cement pastes." *Journal of the American Ceramic Society* 77(12): 3161-3171.

- Jensen, O. M. et P. F. Hansen (2001). "Water-entrained cement-based materials: I. Principles and theoretical background." *Cement and Concrete Research* 31(4): 647-654.
- Kachanov, M. (1958). "Time of rupture process under creep conditions." *Izvestiya Akademii Nauk SSR Otd Tekh* 8: 26-31.
- Kamali, S. (2003). Comportement et simulation des matériaux cimentaires en environnements agressifs : lixiviation et température. Thèse de doctorat. Cachan, Ecole Normale Supérieure de Cachan. PhD.
- Ke, Y., S. Ortola, A. L. Beaucour et H. Dumontet (2010). "Identification of microstructural characteristics in lightweight aggregate concretes by micromechanical modelling including the interfacial transition zone (ITZ)." *Cement and Concrete Research* 40(11): 1590-1600.
- Kosugi, K. (1999). "General model for unsaturated hydraulic conductivity for soils with log normal pore size distribution." *Soil Science Society American Journal* 63(1): 270-277.
- Kosugi, K., J. W. Hopmans et J. H. Dane (2002). Parametric models. Methods of soils analysis. SSSA Book series n°5.
- Kovler, K. et S. Zhutovsky (2006). "Overview and Future Trends of Shrinkage Research." *Materials and Structures* 39(9): 827-847.
- Krajcinovic, D. (1996). Damage mechanics. North Holland, Amsterdam.
- Kun, F. et H. Hermann (1996). "A study of fragmentation processes using a discrete element method." *Computational Meth. Appl. Mech. Eng.* 7: 3-18.
- Lade, P. V. et R. De Boer (1997). "The concept of effective stress for soils, concrete and rock." *Géotechnique* 47(1): 61-78.
- Lassabatere, T. (1994). Couplages hydromécaniques en milieu poreux non saturé avec changement de phase. Application au retrait de dessiccation. Thèse de l'ENPC.
- Le Chatelier, H. (1887). Constitution des mortiers hydrauliques Thèse de doctorat, Paris, France. (Cité par E. Englade publié dans la revue de métallurgie, 1937. Disponible sur <http://www.annales.org/archives/x/lechat1.html>).
- Le Neindre, B. (1993). Tensions superficielles des composés inorganiques et des mélanges. Constantes mécaniques. Technique de l'ingénieur K476.
- Lemaître, J. (1971). Evaluation of dissipation and damage in metals. *ICM*, Kyoto.
- Lemaître, J. et J. L. Chaboche (2004). Mécanique des matériaux solides, 2ème édition. Paris.
- Lemaître, J. et R. Desmorat (2005). "Engineering damage mechanics: Ductile, Fatigue and Brittle Failures." *Springer*.
- Lewis, R. et B. A. Schrefler (1987). The finite element method in the deformation and consolidation of porous media. Wiley, Chichester.
- Lewis, R. et B. A. Schrefler (1998). The Finite Element Method in the Static and Dynamic Deformation and Consolidation of Porous Media. New York.
- Li, C.-Q. et J.-J. Zheng (2007). "Closed-form solution for predicting elastic modulus of concrete." *ACI Materials Journal* 104(5): 539-546.
- Li, G., Y. Zhao et Y. Li (1999). "Effective Young's modulus estimation of concrete." *Cement and Concrete Research* 29(1): 1455-1462.
- Lion, M. (2004). Influence de la température sur le comportement poromécanique ou hydraulique d'une roche carbonatée et d'un mortier. Thèse de doctorat, Ecole centrale de Lille.
- Locher, F. W. (1976). "Die festgeit des zements." *Béton* 7: 247-249.
- Lu, B. et S. Torquato (1992). "Lineal-path function for random heterogeneous materials." *Physical Review A* 45(2): 922.
- Lu, B. et S. Torquato (1992). "Nearest-surface distribution functions for polydispersed particle systems." *Physical Review A* 45(8): 5530.
- Lura, P., O. M. Jensen et K. van Breugel (2003). "Autogenous shrinkage in high-performance cement paste: An evaluation of basic mechanisms." *Cement and Concrete Research* 33(2): 223-232.

- Lutz, M. P. et R. W. Zimmerman (2005). "Effect of an inhomogeneous interphase zone on the bulk modulus and conductivity of a particulate composite." *International Journal of Solids and Structures* 42(2): 429-437.
- Mainguy, M. (1999). Modèles de diffusion non-linéaires en milieux poreux. Applications à la dissolution et au séchage des matériaux cimentaires. Thèse de l'ENPC.
- Mazars, J. (1984). Application de la mécanique de l'endommagement au comportement non linéaire et à la rupture du béton de structure. Thèse de doctorat, Université Paris 6, ENS Cachan, France.
- Mehta, P. K. et P. J. M. Monteiro (2005). *Concrete: Microstructure, Properties and Materials* New York.
- Mindess, S. et J. F. Young, Eds. (1981). *Concrete*.
- Moës, N., J. Dolbow et T. Belytschko (1999). "A finite element method for crack growth without remeshing." *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 46(1): 131-150.
- Molinari, J. F., G. Gazonas, R. Raghupathy, A. Rusinek et F. Zhou (2007). "The cohesive element approach to dynamic fragmentation: the question of energy convergence." *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 69(3): 484-503.
- Monlouis-Bonnaire, J. P., J. Verdier et B. Perrin (2004). "Prediction of the relative permeability to gas flow of cement-based materials." *Cement and Concrete Research* 34(5): 737-744.
- Monteiro, P. J. M. et C. T. Chang (1995). "The elastic moduli of calcium hydroxide." *Cement and Concrete Research* 25(8): 1605-1609.
- Monteiro, P. J. M., J. C. Maso et J. P. Ollivier (1985). "The aggregate-mortar interface." *Cement and Concrete Research* 15(6): 953-958.
- Mori, T. et K. Tanaka (1973). "Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions." *Acta Metallurgica* 21(5): 571-574.
- Moukarzel, C. et H. Hermann (1992). "A vectorizable random lattice." *Journal of Statistics Physics* 68(1): 911-923.
- Nadeau, J. C. (2002). "Water-cement ratio gradients in mortars and corresponding effective elastic properties." *Cement and Concrete Research* 32(3): 481-490.
- Navi, P. et C. Pignat (1996). "Simulation of cement hydration and the connectivity of the capillary pore space." *Advanced Cement Based Materials* 4(2): 58-67.
- Navi, P. et C. Pignat (1999). "Three-dimensional characterization of the pore structure of a simulated cement paste." *Cement and Concrete Research* 29(4): 507-514.
- Neubauer, C. M., H. M. Jennings et E. J. Garboczi (1996). "A three-phase model of the elastic and shrinkage properties of mortar." *Advanced Cement Based Materials* 4(1): 6-20.
- NGuyen, N. B. (2010). Modélisation micromécanique des roches poreuses. Application aux calcaires oolithiques. Thèse de l'INPL. Institut National Polytechnique de Lorraine, Thèse de doctorat, Nancy. Ph.D.
- Nonat, A. (2004). "The structure and stoichiometry of C-S-H." *Cement and Concrete Research* 34(9): 1521-1528.
- Nonat, A., J. C. Mutin, X. Lecoq et S. P. Jiang (1997). "Physico-chemical parameters determining hydration and particle interactions during the setting of silicate cements." *Solid State Ionics* 101-103(Part 2): 923-930.
- Noumowe, A. (1995). Effet des hautes températures (20-600°C) sur les bétons, cas particulier du béton à hautes performances. Thèse de doctorat, Thèse de doctorat. Thèse de doctorat.
- Obeid, W., G. Mounajed et A. Alliche (2001). "Mathematical formulation of thermo-hygro-mechanical coupling problem in non-saturated porous media." *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 190(39): 5105.
- Peerlings, R. H. J. (1999). Enhanced damage modelling for fracture and fatigue, PhD Thesis of Technische Universiteit Eindhoven.

- Peerlings, R. H. J., R. De Borst, W. M. A. Brekelmans et J. de Vree (1996). "Gradient enhanced damage model for quasi-brittle materials." *International Journal of Numerical Engineering* 39: 3391-3403.
- Pezzani, P. (1988). Propriétés thermodynamiques de l'eau. Techniques de l'Ingénieur. K7, n° K585.
- Pharr, G. M. et W. C. Oliver (1992). "On the generality of the relationship among contact stiffness, contact area and elastic modulus during indentation." *Journal of Materials Research* 7(3): 613-617.
- Picandet, V. (2001). Influence d'un endommagement mécanique sur la perméabilité et sur la diffusivité hydrique du béton, Thèse de doctorat de l'Université de Nantes.
- Pichler, C., R. Lackner et H. A. Mang (2007). "A multiscale micromechanics model for the autogenous-shrinkage deformation of early-age cement-based materials." *Engineering Fracture Mechanics* 74(1-2): 34-58.
- Pietruszczak, S. et G. N. Pande (1995). "On the mechanical response of saturated cemented materials-Part II: experimental investigation and numerical simulation." *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 19(8): 563-571.
- Pijaudier-Cabot, G. et Z. Bazant (1987). "Nonlocal damage theory." *Journal of Engineering mechanics* 113: 1512-1533.
- Ponte Castañeda, P. et J. R. Willis (1995). "The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 43(12): 1919-1951.
- Potyondy, D. et P. Cundall (2004). "A bonded-particle model for rock." *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 8(41): 1329-1364.
- Powers, T. C. (1968). "The thermodynamics of volume change and creep." *Materials and Constructions* 1 (6)(1): 487-507.
- Powers, T. C. et T. L. Brownyard (1947). "Studies of the physical properties of hardened cement paste
" *Bull. 22, Res. Laboratory of Portland Cement Association, Skokie, IL, U.S.A., reprinted from J. Am. Concr.* 43.
- Prado, E. et J. G. M. Van Mier (2003). "Effect of particle structure on mode I fracture process in concrete." *Engineering Fracture Mechanics* 70(1): 1793-1807.
- Ramesh, G., E. D. Sotelino et W. F. Chen (1996). "Effect of transition zone on elastic moduli of concrete materials." *Cement and Concrete Research* 26(4): 611-622.
- Ramtani, S. (1990). Contribution à la modélisation du comportement multi-axial du béton avec description du caractère unilatéral, Thèse de doctorat de l'Université Paris 6.
- Ranznjevic, K. (1970). Tables et diagrammes thermodynamiques, Eyrolles.
- Ranznjevic, K. (1970). Tables et diagrammes thermodynamiques, Eyrolles.
- Reviron, N. (2009). Etude du fluage des bétons en traction. Application aux enceintes de confinement des centrales nucléaires à eau sous pression. Cachan, ENS Cachan. PhD.
- Reynouard, J. M. (1974). Structures planes en béton armé. Elaboration d'un modèle de comportement jusqu'à la ruine et résolution numérique., Thèse de doctorat de l'Université Claude Bernard, Lyon.
- Riccardi, A. et F. Montheillet (1999). "A generalized self-consistent method for solids containing randomly oriented spheroidal inclusions." *Acta Mechanica* 133(1): 39-56.
- Richard, B., F. Ragueneau, C. Cremona et L. Adelaide (2010). "Isotropic continuum damage mechanics for concrete under cyclic loading: Stiffness recovery, inelastic strains and frictional sliding." *Engineering Fracture Mechanics* 77(8): 1203-1223.
- Richardson, I. G. (1999). "The nature of C-S-H in hardened cements." *Cement and Concrete Research* 29(8): 1131.
- Richardson, I. G. (2000). "The nature of the hydration products in hardened cement pastes." *Cement and Concrete Composites* 22(2): 97.

- Richardson, I. G. (2008). "The calcium silicate hydrates." *Cement and Concrete Research* 38(2): 137-158.
- Rigby, S. P. (2000). "A hierarchical structural model for the interpretation of mercury porosimetry and nitrogen sorption." *Journal of Colloid and Interface Science* 224(1): 382-396.
- Rostasy, F. S., R. Weib et G. Wiedemann (1980). "Changes of pore structure of cement mortars due to temperature." *Cement and Concrete Research* 10(1).
- Rots, J. G., S. Invernizzi et B. Belletti (2006). "Saw-tooth softening/stiffening - a stable computational procedure for rc structures." *Computers & Concrete* 3: 213-233.
- Rougelot, T., F. Skoczylas et N. Burlion (2009). "Water desorption and shrinkage in mortars and cement pastes: Experimental study and poromechanical model." *Cement and Concrete Research* 39(1): 36-44.
- Rousseau, J. (2009). Modélisation numérique du comportement dynamique des structures sous impact sévère avec un couplage éléments finis-éléments discrets. Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier-Grenoble I. Thèse de doctorat.
- Roy, D. M., P. W. Brown, D. Shi, B. E. Scheetz et W. May (1993). "Concrete microstructure porosity and permeability." *Strategic Highway Research Program*.
- Rusanov, A. I. (1975). "On the thermodynamics of phase equilibria in thin films." *Journal of Colloid and Interface Science* 53(1): 20.
- Rusanov, A. I. (2005). "Surface thermodynamics revisited." *Surface Science Reports* 58(5-8): 111-239.
- Rusanov, A. I. (2007). "Equilibrium thin liquid films." *Colloid Journal* 69(1): 39-49.
- Rutqvist, J., L. Börgesson, M. Chijimatsu, A. Kobayashi, L. Jing, T. Nguyen, J. Noorishad et C. Tsang (2001). "Thermohydromechanics of partially saturated geological media: governing equations and formulation of four finite element models." *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 38: 105-127.
- Sanahuja, J., L. Dormieux et G. Chanvillard (2007). "Modelling elasticity of a hydrating cement paste." *Cement and Concrete Research* 37(10): 1427-1439.
- Savage, B. M. et D. J. Janssen (1997). "Soil physics principles validated for use in predicting unsaturated moisture movement in portland cement concrete." *ACI Materials Journal* 94(1): 36-44.
- Schlangen, E. (1993). Experimental and numerical analysis of fracture processes in concrete. Ph. D. Thesis, Delft University of Technology.
- Schlangen, E. et E. J. Garboczi (1997). "Fracture simulations of concrete using lattice models: Computational aspects." *Engineering Fracture Mechanics* 57(2-3): 319-332.
- Schlangen, E., E. A. B. Koenders et K. van Breugel (2007). "Influence of internal dilation on the fracture behaviour of multi-phase materials." *Engineering Fracture Mechanics* 74(1-2): 18-33.
- Schneider, U. et H. J. Herbst (1989). "Permeabilität und Porosität von Beton bei hohen Temperaturen." *Deutscher Ausschuss fuer Stahlbeton* 403: 23-52.
- Schulz, G. V. (1939). "Über die Kinetik der Kettenpolymerisation." *Z. Physik Chem* B43: 25-26.
- Scrivener, K. L., A. K. Crumble et P. L. Pratt (1988). Bonding in Cementitious Materials. *MRS 114 S. Mindess and S. P. Shah*, USA.
- Scrivener, K. L. et K. M. Nematı (1996). "The percolation of pore space in the cement paste/aggregate interfacial zone of concrete." *Cement and Concrete Research* 26(1): 35-40.
- Sercombe, J., C. Gallé et G. Ranc (2001). Modélisation du comportement du béton à haute température : transferts de fluides et de chaleur et déformations pendant des transitoires thermiques.
- Setzer, M. et F. Wittmann (1974). "Surface energy and mechanical behaviour of hardened cement paste." *Applied Physics A: Materials Science & Processing* 3(5): 403-409.
- Shao, J. F., H. Zhou et K. T. Chau (2005). "Coupling between anisotropic damage and permeability variation in brittle rocks." *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 29(12): 1231-1247.
- Skempton, A. W. et A. W. Bishop (1954). Soils. Amsterdam: North Holland.

- Stora, E. (2007). Modélisation multi-échelle du comportement chimie-mécanique des matériaux cimentaires dégradés. Thèse de doctorat. Paris, Université Paris-Est. PhD.
- Stora, E., Q. C. He et B. Bary (2006). "Influence of inclusion shapes on the effective linear elastic properties of hardened cement pastes." *Cement and Concrete Research* 36(7): 1330-1344.
- Stutzman, P. E. (2004). "Scanning electron microscopy imaging of hydraulic cement microstructure." *Cement and Concrete Research* 26(8): 957-966.
- Suklje, L. (1969). "Consolidation of viscous soils subjected to continuously increasing uniform load." *New advances in soil mechanics* 1(1): 199-235.
- Sun, Z., E. J. Garboczi et S. P. Shah (2007). "Modeling the elastic properties of concrete composites: Experiment, differential effective medium theory, and numerical simulation." *Cement and Concrete Composites* 29(1): 22.
- Tasong, W. A., J. C. Cripps et C. J. Lynsdale (1998). "Aggregate-cement chemical interactions." *Cement and Concrete Research* 28(7): 1037-1048.
- Tasong, W. A., C. J. Lynsdale et J. C. Cripps (1998). "Aggregate-cement paste interface. ii: influence of aggregate physical properties." *Cement and Concrete Research* 28(10): 1453-1465.
- Taylor, H. F. W. (1997). *Cement chemistry* (2nd ed.). T. Telford. London, U.K.
- Tennis, P. D. et H. M. Jennings (2000). "A model for two types of calcium silicate hydrate in the microstructure of Portland cement pastes." *Cement and Concrete Research* 30(6): 855-863.
- Terrien, M. (1980). "Emission acoustique et comportement mécanique post-critique d'un béton sollicité en traction." *BLPC* 105: 65-72.
- Terzaghi, K. (1936). The shearing resistance of saturated soils and the angle between the planes of shear. *First International Conference on Soil mechanics and Found Engineering, Vol 1*, Harvard University.
- Thierry, M., V. Baroghel-Bouny, N. Bourneton, G. Villain et C. Stefani (2007). "Modélisation du séchage des bétons: Analyse des différents modes de transfert hydrique." *Revue Européenne de Génie civil* 11(5): 541-578.
- Tognevi, A., B. Bary et A. Delaplace (2010). Micromechanical estimation of hydro-mechanical parameters in unsaturated microcracked concrete. *Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures*, Jeju -South Korea.
- Tognevi, A., A. Delaplace et B. Bary (2009). Estimation de la perméabilité d'un béton soumis à un chargement THM. *Congrès Français de Mécanique*, Marseille.
- Torquato, S. (2001). *Random Heterogeneous Materials*. New York.
- Torrenti, J. M. et C. Boulay (1993). Résultats récents concernant l'essai de compression du béton. *Annales de l'institut technique du bâtiment et des travaux publics*, 513.
- Ulm, F. J. (1996). Un modèle d'endommagement plastique : application aux bétons de structure. Série d'ouvrages d'art OA19, Laboratoire Central des Ponts et Chaussées.
- Ulm, F. J., G. Constantinides et F. H. Heukamp (2004). "Is concrete a poromechanics material? - A multiscale investigation of poroelastic properties." *Materials and Structures* 37: 43-48.
- Van Breugel, K. (1991). Simulation of hydration and formation of structure in hardening cement-based materials, PhD thesis, Technical University Delft.
- Van Breugel, K. (1995). "Numerical simulation of hydration and microstructural development in hardening cement-based materials : (II) applications." *Cement and Concrete Research* 25(3): 522-530.
- Van Breugel, K. (2004). "Modelling of cement-based systems--the alchemy of cement chemistry." *Cement and Concrete Research* 34(9): 1661-1668.
- Van Breugel, K. et E. A. B. Koenders (2000). "Numerical simulation of hydration-driven moisture transport in bulk and interface paste in hardening concrete." *Cement and Concrete Research* 30(12): 1911-1914.
- van Genuchten, M. T. (1980). "A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils." *Soil Science Society of America Journal* 44(1): 892-898.

- van Genuchten, M. T. (1980). "Closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils." *Soil Science Society of America Journal* 44(5): 892-898.
- Van Mier, J. G. M., J. Mazars, G. Pijaudier-Cabot et R. de Borst (2002). "Fracture mechanics of concrete and concrete structures 4th International FraMCoS Conference, held in Cachan, France, from May 28 to June 1, 2001." *Engineering Fracture Mechanics* 70(7-8): 837-837.
- Vandamme, M. (2008). The nanogranular origin of concrete creep: A nanoindentation investigation of microstructure and fundamental properties of Calcium-Silicate Hydrates. Massachusetts Institute of technology. PhD.
- Velez, K., S. Maximilien, D. Damidot, G. Fantozzi et F. Sorrentino (2001). "Determination by nanoindentation of elastic modulus and hardness of pure constituents of Portland cement clinker." *Cement and Concrete Research* 31(4): 555-561.
- Wagner, G. J. et W. K. Liu (2003). "Coupling of atomistic and continuum simulations using a bridging scale decomposition." *Journal of Computational Physics* 190: 249-274.
- Whitaker, S. (1986). "Flow in porous media II : The governing equations for immiscible." *Transport in porous media* 1: 105-125.
- Wittmann, F. H. (1968). "Surface tension, shrinkage and strength of hardened cement paste." *Materials and Structures* 1(6): 547-552.
- Xi, Y. et H. M. Jennings (1997). "Shrinkage of cement paste and concrete modelled by a multiscale effective homogeneous theory." *Materials and Constructions* 30: 329-339.
- Xiao, S. et T. Belytschko (2004). "A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics." *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 193: 1645-1669.
- Yang, C. C. (1998). "Effect of the Transition Zone on the Elastic Moduli of Mortar." *Cement and Concrete Research* 28(5): 727-736.
- Zaoui, A. (2002). "Continuum Micromechanics: Survey." *Journal of Engineering mechanics* 128(1): 808-816.
- Zheng, Q. S. et D. X. Du (2001). "An explicit and universally applicable estimate for the effective properties of multiphase composites which accounts for inclusion distribution." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 49(11): 2765.
- Zhu, W. et P. J. M. Bartos (2000). "Application of depth sensing microindentation testing to study interfacial transition zone in reinforced concrete." *Cement and Concrete Research* 30(8).
- Zimmerman, R. W., M. S. King et P. J. M. Monteiro (1986). "The elastic moduli of mortar as a porous-granular material." *Cement and Concrete Research* 16(2): 239-245.

