Contribution du terme de second ordre de la pression capillaire sur le séchage rapide des matériaux cimentaires

Yuliang ZOU^{1,2}

¹ Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique (GeM), UMR 6183, Centrale de Nantes - Université de Nantes - CNRS, 1 rue de la Noë, 44321 Nantes, France

² Laboratoire de Mathématiques Jean Leray (LMJL), CNRS UMR 6629, Centrale Nantes, 1 rue de la Noë 44321Nantes, France

Résumé

Les modèles standards utilisés pour prédire le transport de l'humidité des matériaux à base de ciment sont basés sur des lois de comportement quasi-statiques. Cependant, ils ne sont pas appropriés pour des conditions de séchage rapide. En effet, lorsque les fluides sont en mouvement rapide, leur vitesse n'est plus négligeable et les modèles statiques n'en tiennent pas compte. Ces derniers nécessitent de modifier le coefficient de perméabilité qui doit pourtant être intrinsèque. Dans ce travail, un modèle prenant en compte les effets dynamiques sur la pression capillaire est présenté pour l'analyse du transport de l'humidité dans les matériaux à base de ciment. Le modèle proposé est discrétisé dans l'espace par la méthode des éléments finis et dans le temps par une méthode implicite Back-Euler. Sur la base d'une expérience de séchage de pâte de ciment, le modèle dynamique est comparé au modèle standard. En comparant les résultats aux mesures expérimentales on note que le modèle dynamique est plus précis que le modèle statique tout en conservant les paramètres du matériau intrinsèques.

Mots-clefs Pâte de ciment; Séchage rapide; Modélisation par éléments finis; Pression dynamique

I. INTRODUCTION

Cette étude vise à explorer les raisons pour lesquelles le séchage du béton a une cinétique différente dans différentes conditions d'humidité relative (HR). On s'attend à ce que la variation du climat entraîne des cycles de mouillage-séchage plus intenses dans les structures en béton. Ces cycles sont la principale cause de grands phénomènes de gonflement et de retrait. De nombreuses études expérimentales ont montré que lorsque les déformations induites par ces phénomènes dépassent un seuil de résistance, des fissures se forment dans la matrice de ciment et diminuent la durabilité du béton (Holt and Leivo, 2004) comme présentée dans la figure 1. Essentiellement, l'état d'humidité détermine la distribution de la pression capillaire qui est la force motrice du retrait et du gonflement du béton. L'interaction détaillée entre le transport de l'humidité et la déformation solide est présentée dans la figure 2. Par conséquent, le transport de l'humidité doit

être maîtrisé. Cette étude est très significative pour les structures en matériaux à base de ciment qui subissent des cycles de mouillage et de séchage rapides, tels que routes et bâtiment en béton, barrages, etc.



FIGURE 1. Fissuration du béton par le séchage



FIGURE 2. Diagramme schématique du principe d'interaction

Des modèles prédictifs ont été développés pour calculer l'influence des cycles de mouillageséchage sur la déformation du béton. La plupart d'entre eux sont basés sur un simple écoulement de fluide quasi-statique. Occasionnellement, la variation de déformation est prise en compte pour modifier la porosité et le coefficient de perméabilité lors de l'évolution du séchage. Cependant, ces modèles ne peuvent simuler des phénomènes de séchage que pour des humidités relatives externes élevées pour lesquelles la cinétique de séchage est lente et peut être simulée par un modèle quasi-statique. En cas d'humidité relative externe faible, certains auteurs calibrent le coefficient d'échange entre le matériau et l'environnement en fonction de la cinétique d'humidité (Carette et al., 2016). D'autres considèrent des coefficients de perméabilité plus élevés afin d'augmenter la perte de masse telle que mesurée dans l'expérience de (Zhang et al., 2015). Les auteurs ont expliqué cette observation en supposant que davantage de fissures apparaissent lors du retrait. Auparavant, Day et al. (Day and Illston, 1983) ont suggéré cette hypothèse, mais ont également indiqué qu'elle pourrait être due à des forces de tension capillaire. En première approximation, il semble plus pertinent de développer un modèle descriptif pour comprendre le rôle de chaque phénomène dans le comportement global. Alors, comment prendre en compte les effets physiques dans la modélisation pour analyser le séchage rapide dans des conditions de faible humidité relative externe?

La différence de pression entre le mélange gazeux et l'eau liquide pourrait s'écarter de la pression capillaire statique d'origine dans une situation dynamique dans laquelle les forces visqueuses sont non négligeables et nécessitent un gradient de pression inattendu (Hassanizadeh, 2015). Le

terme «dynamique» utilisé dans ce travail est au sens de la mécanique des fluides. Cela signifie que l'influence potentielle causée par la vitesse du fluide est prise en compte dans la porosité. La relation pression-saturation capillaire ($P_c - S_w$) est cruciale pour prédire l'écoulement multiphase dans les milieux poreux (Huyakorn, 2012). On peut montrer que cette relation, déterminée dans des conditions dynamiques où l'équilibre de pression n'a pas été établi, s'écarte de la relation d'équilibre statique. Elle peut s'expliquer par une théorie des effets dynamiques sur la pression capillaire (Hassanizadeh et al., 2002). Les effets dynamiques dépendent du taux de changement de la saturation et d'un coefficient dynamique τ (Espinosa and Franke, 2006). La dynamique n'est pas prise en compte pour la matière solide qui a un comportement statique. Des relations quantitatives considérables ont été introduites pour caractériser l'influence de la variation de saturation dynamique sur la pression capillaire. Parmi elles, le travail proposé par (Hassanizadeh and Gray, 1993) est bien connu et largement utilisé :

$$P_c^{dyn} = P_c - \tau \frac{\partial S_w}{\partial t} \tag{1}$$

Au cours des dernières décennies, une attention considérable a été accordée à l'écoulement non saturé dans des matériaux assez perméables avec des effets dynamiques (Cao and Pop, 2016). Cependant, ces théories n'ont pas été appliquées à des matériaux faiblement perméables (matériaux à base de ciment). Comparé aux matériaux assez perméables, le transport de l'humidité dans les matériaux faiblement perméables consiste en un écoulement d'eau darcéen et une diffusion de vapeur Fickienne. De plus, le transport d'humidité détermine l'évolution de la pression capillaire, qui est la cause principale des déformations internes et de l'apparition de micro-fissures dans les matériaux cimentaires. Ainsi, la prise en compte des effets dynamiques sur le transport de l'humidité est une tâche difficile et urgente.

Nous visons à présenter un modèle avancé en tenant compte de l'effet de capillarité dynamique pour un séchage rapide des matériaux airesciment. Dans cetravail, ce modèle sera appelé «modèle dynamique» tandis que « modèle standard » sera utilisé lorsque l'effet de capillarité dynamique n'est pas pris en compte. Tout d'abord, la dérivation de ce modèle dynamique est présentée en détail. Ensuite, des expériences de séchage d'une pâte de ciment ont été utilisées pour la vérification de ce modèle avancé.

II. FORMULATION DU MODÈLE

Le modèle directeur du flux eau-air non saturé pour les milieux poreux est dérivé du principe de conservation de la masse. Dans ce travail, un modèle de séchage efficace basé sur l'hypothèse que la pression du mélange gazeux est constante et que l'eau liquide reste incompressible a été choisi. Comme pour les matériaux à base de ciment, le transport de l'humidité ne dépend pas seulement de l'advection de l'eau, mais aussi de la diffusion de la vapeur. Les équations de conservation de la masse de l'eau liquide et de la vapeur d'eau se réduisent à une équation simplifiée concernant l'humidité, c'est-à-dire incluant l'eau liquide et la vapeur d'eau. La substitution de l'équation de Darcy étendue qui régit l'advection de l'eau liquide et de l'équation de Fick qui régit la diffusion de la vapeur dans cette équation simplifiée de conservation de la masse donne le modèle de séchage typique (Mainguy et al., 2001):

$$\frac{\partial S_{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(-\frac{kk_{rw}(S_{w})}{\phi \eta_{w}} \nabla P_{w} - \frac{D_{0}f}{\phi \rho_{w}} \nabla \rho_{v} \right) = 0,$$
(2)

où S_w , k, k_{rw} , ϕ , η_w , P_w , ρ_w , ρ_v , D_0 et f représentent la saturation en eau, la perméabilité, la perméabilité relative, la porosité, la viscosité de l'eau, la pression de l'eau, la densité de l'eau, la densité de vapeur, le coefficient de diffusion de vapeur dans l'air et le facteur de résistance de réseau de pores pour la diffusion gazeuse respectivement. Le facteur de résistance a une dépendance fonctionnelle sur S_w et ϕ .

Considérant que la vapeur d'eau peut être considérée comme un gaz parfait et que la pression du mélange gazeux est négligeable par rapport à la pression capillaire, le modèle de transport d'humidité passe à la forme suivante lorsque l'équation de Kelvin (4) est utilisée:

$$\phi \frac{\partial S_{w}}{\partial P_{c}} \frac{\partial P_{c}}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \left[-\frac{kk_{rw}}{\eta_{w}} - \frac{M_{v}M_{w}D_{0}fP_{vs}RH}{\left(\rho_{w}RT\right)^{2}} \right] \nabla P_{c} \right\}.$$
(3)

Comme le modèle de van Genuchten (5) donne la relation entre S_w et P_c , la solution du problème de transport d'humidité peut être obtenue dans un certain état initial et des conditions aux limites.

$$P_c = -\frac{\rho_w RT}{M_w} \ln \frac{P_v}{P_{vs}},\tag{4}$$

$$P_{c}(S_{w}) = \alpha \left(S_{w}^{-1/m} - 1\right)^{1-m}$$
(5)

où *R* , *T* , *P*_v , *P*_{vs} et *M*_w représentent respectivement la constante de gaz universelle, la température absolue, la pression de vapeur, la pression de vapeur saturée et la masse molaire de l'eau. α ,*m* représentent des paramètres sans dimension liés à la distribution de la taille des pores. En soumettant la pression capillaire dynamique à l'équation dominante standard (3), cela conduit au modèle dynamique de transport de l'humidité vapeur-eau:

$$\phi \frac{\partial S_w}{\partial P_c} \cdot \frac{\partial P_c}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{kk_{rw}}{\eta_w} + \frac{M_w M_v D_0 f P_v^{dyn}}{\left(RT \rho_w \right)^2} \right) \nabla \left(P_c - \tau \frac{\partial S_w}{\partial t} \right) \right] = 0.$$
(6)

Le terme $\tau \frac{\partial S_w}{\partial t}$ dans l'équation (6) représente la contribution supplémentaire de l'effet de capillarité dynamique sur le transport de l'humidité.

III. PRÉSENTATION DU TEST NUMÉRIQUE

Afin d'obtenir des solutions quantitatives pour le modèle proposé, un algorithme numérique approprié a été choisi. L'équation gouvernante est discrétisée dans l'espace par la méthode des éléments finis et dans le temps par une méthode back-Euler implicite de pas de temps. La méthode Galerkin est utilisée pour accéder à une forme faible de l'équation gouvernante. Une hypothèse de déformation simple bidimensionnelle a été utilisée. Une approximation implicite (méthode d'Euler rétrograde) en pas de temps est utilisée pour garantir la stabilité du schéma. De plus, pour résoudre efficacement les équations gouvernantes, le pas de temps est adaptatif en fonction du taux de convergence.

Comme introduit précédemment, aucun travail dans la littérature ne considère un problème de transport d'humidité dans un milieu poreux avec des effets dynamiques pris en compte et très peu d'expériences documentées ont été réalisées. L'une d'elles est une expérience de séchage d'un échantillon de pâte de ciment menée par (Baroghel-Bouny, 2007). Cette expérience de séchage a été utilisée pour la validation du modèle dynamique proposé. Pour souligner l'influence de l'effet de capillarité dynamique sur le transport de l'humidité, deux modèles comprenant le modèle standard et le modèle dynamique sont utilisés pour simuler la même expérience de séchage.

Les échantillons de pâte de ciment ont été conçus avec du ciment Portland ordinaire. Leurs propriétés sont rassemblées et résumées dans le tableau 1.

| Porosité | RH initiale | w/c | V-G Paramètres | |
|----------|-------------|------|----------------|------|
| | | | $\alpha(MPa)$ | т |
| 0.31 | 83% | 0.35 | 44.75 | 0.48 |

TABLEAU 1. Propriétés de la pâte de ciment

Les pâtes de ciment ont été coulées dans un moule cylindrique de diamètre d = 7cm. Avant l'expérience de séchage, l'échantillon de pâte de ciment a été durci pendant plus de deux cents jours dans un état scellé pour atteindre une stabilisation physique (mécanisme) et chimique. Après avoir retiré le moule, la colonne a été découpée en spécimens. Une extrémité et la surface latérale de l'échantillon ont été scellées avec des feuilles de papier d'aluminium auto-adhésives. Seule l'autre extrémité était ouverte pour l'évaporation de l'humidité. Au fur et à mesure que l'évaporation se poursuit, le gradient de pression induit dans le milieu poreux transfère l'humidité interne vers la surface ouverte en continu. Les expériences de séchage ont été réalisées à une température stable $T=296\pm0.1K$. Les échantillons ont été soumis à un séchage à deux humidité relative externe fixe de 53.5% et 63.2%, respectivement. Les deux courbes de perte de masse ont été mesurées en pesant les échantillons à intervalles.

IV. L'ANALYSE DES RÉSULTATS

Tout d'abord, le modèle standard couplé a été utilisé pour simuler l'expérience de séchage mentionnée ci-dessus. La conductivité hydraulique intrinsèque K_w a été déterminée en analysant inversement la cinétique de perte de masse lors du séchage à une humidité relative externe constante $RH^e = 53.5\%$ ou $RH^e = 63.2\%$. L'optimisation des paramètres est basée sur l'algorithme de Levenberg-Marquardt (LM). La perte de masse est calculée en intégrant la masse d'humidité évaporée de la surface ouverte.

Comme présenté sur la figure 3, l'ajustement de la conductivité hydraulique, qui fournit une cinétique de perte de masse, propose des valeurs proches aux données expérimentales selon certaines conditions. En effet, il faut remarquer que les valeurs de K_w calibrées montrent une dépendance vis-à-vis des conditions aux limites :

- pour $RH^e = 63.2\%$, $K_w = 2 \times 10^{-15} m \cdot s^{-1}$ (coefficient de corrélation $R^2 = 0.980$) (figure 3a) ; mais cette valeur n'est pas pertinente pour $RH^e = 53.5\%$.

- pour $RH^e = 53.5\%$, $K_w = 3 \times 10^{-15} m.s^{-1}$ (coefficient de corrélation $R^2 = 0.988$) (Figure 3b); mais cette valeur n'est pas pertinente pour $RH^e = 63.2\%$.

L'écart relatif de ces deux résultats calibrés atteint 33%. La même expérience de séchage a également été simulée par (Zhang et al., 2015) et les conclusions sont identiques.

Théoriquement, K_w devrait être indépendant des conditions aux limites. Certains chercheurs attribuent cette divergence à la variabilité de la préparation des échantillons ou à l'apparition de micro-fissures modifiant la perméabilité. La différence de perte de masse entre les deux niveaux d'humidité relative extérieure apparaît principalement dans les premiers instants du séchage. Or, à ce stade il est difficile d'imaginer une micro-fissuration brutale et suffisamment rapide capable de modifier de façon instantanée la cinétique de séchage. Faisons alors l'hypothèse que l'écart observé pourrait être dû à un phénomène supplémentaire, tel que l'effet de capillarité dynamique.



FIGURE 3. Comparaisons des courbes de perte de masse simulées par des modélisations couplées dynamiques et standard couplées avec des résultats expérimentaux

Evidemment, l'humidité relative externe de 53.5% étant faible, elle provoquet un séchage plus rapide et conduit à des effets dynamiques plus forts. L'effet de capillarité dynamique étant jusqu'à présent ignoré, la partie supplémentaire de la perte de masse supposée être causée par des effets dynamiques peut être complétée par une amélioration du coefficient de transport, tel que K_w . Dans le modèle dynamique, non seulement K_w , mais également le coefficient d'effets dynamiques τ jouent un rôle important pour le calcul du processus de séchage. Comme pour le modèle standard, les paramètres inconnus sont également déterminés en ajustant la cinétique de perte de masse de l'expérience de séchage.

Comme les valeurs de τ sont difficiles à déterminer, il n'existe jusqu'à présent aucune formule bien acceptée pour les calculer. Récemment, pour les expériences de drainage (Zhuang et al., 2017) ont observé que $\tau - S_w$ suit presque la fonction log-linéaire dans une certaine plage de saturation.

Ils ont proposé une fonction donnée comme $\log_{10} \tau = A(S_0 - S_w) + \log_{10} \tau_0$, dans laquelle S_0 et τ_0 sont des valeurs de seuil et A la pente des droites pour ajuster les données $\tau - S_w$. Nous notons que nous n'avons fait ici que des optimisations préliminaires. Les paramètres du modèle dynamique sont rassemblés dans le tableau 2.

| TABLEAU 2. Talametres du modele dynamique | | | | | | |
|---|----------------------|------|----------------|-------------------------------|-------------------------------|--|
| $K_w(m/s)$ | $\tau_0(kg / m / s)$ | Α | S ₀ | $R^2\left(RH^e=53.5\%\right)$ | $R^2\left(RH^e=63.2\%\right)$ | |
| 2.4×10^{-15} | 8.9×10^{14} | 3.74 | 0.83 | 0.992 | 0.988 | |

TABLEAU 2. Paramètres du modèle dynamique

Sur la figure 4 (a), les courbes de perte de masse obtenues à partir de la modélisation dynamique avec une valeur ajustée de $2.4 \times 10^{-15} m.s^{-1}$ sont tracées et comparées aux mesures expérimentales. Une seule valeur de K_w est utilisée ici pour les deux conditions aux limites. Pour la condition aux limites $RH^e = 53.5\%$, respectivement $RH^e = 63.2\%$, le coefficient de corrélation vaut $R^2 = 0.992$, respectivement $R^2 = 0.988$.. La modification du coefficient de perméabilité, sur l'hypothèse de modification de la microstructure, ne semble pas être pas le phénomène moteur. Ces résultats montrent que la perte de masse d'un matériau cimentaire suite au séchage rapide obéit à une loi d'écoulement dynamique du fluide.



FIGURE 4. Comparaisons de la modélisation de la perte de masse avec les résultats expérimentaux

V. CONCLUSIONS

Dans cette étude, un modèle dynamique a été proposé et utilisé pour simuler une expérience de séchage. Comparé au modèle standard traditionnel, le modèle dynamique est plus avancé et complet puisque l'effet de capillarité dynamique pour l'advection darcienne et la diffusion fickienne a été considéré. Les comparaisons avec les courbes de perte de masse mesurées pour les expériences de séchage de pâte de ciment montrent que la modélisation prenant en compte les effets dynamiques donne de meilleurs résultats que la modélisation non dynamique. D'autres simulations ont été réalisées sur du sable et du béton et ont montré la pertinence de tenir compte

des effets dynamiques des fluides (Zou, 2020). Les travaux se poursuivent en couplant le modèle à la température et pour modéliser le drainage des chaussées routières.

RÉFÉRENCES

- BAROGHEL-BOUNY, V. 2007. Water vapour sorption experiments on hardened cementitious materials: Part I: Essential tool for analysis of hygral behaviour and its relation to pore structure. Cement and Concrete Research, 37, 414-437.
- CAO, X. & POP, I. 2016. Degenerate two-phase porous media flow model with dynamic capillarity. Journal of Differential Equations, 260, 2418-2456.
- CARETTE, J., BENBOUDJEMA, F., NAHAS, G., ABAHRI, K., DARQUENNES, A. & BENNACER, R. 2016. Concrete drying: effects of boundary conditions and specimen shape. Service Life of Cement-Based Materials Structures, 385.
- DAY, R. & ILLSTON, J. 1983. The effect of rate of drying on the drying/wetting behaviour of hardened cement paste. Cement and Concrete Research, 13, 7-17.
- ESPINOSA, R. M. & FRANKE, L. 2006. Inkbottle pore-method: prediction of hygroscopic water content in hardened cement paste at variable climatic conditions. Cement and Concrete Research, 36, 1954-1968.
- HASSANIZADEH, S. M. 2015. Advanced theories of two-phase flow in porous media. Handbook of porous media, 47-62.
- HASSANIZADEH, S. M., CELIA, M. A. & DAHLE, H. K. 2002. Dynamic effect in the capillary pressure– saturation relationship and its impacts on unsaturated flow. Vadose Zone Journal, 1, 38-57.
- HASSANIZADEH, S. M. & GRAY, W. G. 1993. Thermodynamic basis of capillary pressure in porous media. Water Resources Research, 29, 3389-3405.
- HOLT, E. & LEIVO, M. 2004. Cracking risks associated with early age shrinkage. Cement Concrete Composites, 26, 521-530.
- HUYAKORN, P. S. 2012. Computational methods in subsurface flow, academic press.
- MAINGUY, M., COUSSY, O. & BAROGHEL-BOUNY, V. 2001. Role of air pressure in drying of weakly permeable materials. Journal of Engineering Mechanics, 127, 582-592.
- ZHANG, Z., THIERY, M. & BAROGHEL-BOUNY, V. 2015. Numerical modelling of moisture transfers with hysteresis within cementitious materials: Verification and investigation of the effects of repeated wetting–drying boundary conditions. Cement and Concrete Research, 68, 10-23.
- ZHUANG, L., HASSANIZADEH, S. M., QIN, C. Z. & DE WAAL, A. 2017. Experimental Investigation of Hysteretic Dynamic Capillarity Effect in Unsaturated Flow. Water Resources Research, 53, 9078-9088.
- ZOU, Y. 2020. Modelling of the dynamic effects in capillary pressure in coupling with deformation on the desiccation of porous materials. École centrale de Nantes.