

Modélisation en transport réactif de la dégradation des granulats lors d'une réaction alcali-silice.

Gomez Lucie

LMDC, Université de Toulouse / IRSN

RESUME Dans le contexte du vieillissement des structures massives en béton, comme les enceintes de confinement des centrales nucléaires ou les barrages hydro-électrique, l'étude de la durabilité des matériaux cimentaires est d'un grand intérêt. En particulier, la Réaction Alcali-Silice (RAS) peut réduire la durabilité des structures. Le mécanisme de réaction se décrit en 4 étapes : transport des ions, dissolution de la silice réactive, précipitation des produits de réaction et gonflement causant la fissuration du système. Un modèle de transport réactif à l'échelle mésoscopique est proposé afin de simuler la dissolution progressive des granulats et la précipitation des gels en fonction des caractéristiques du granulat. Les résultats retrouvent les observations de la littérature où le gel d'alcali-silice se forme à cœur de granulat alors qu'un C-S-H au ratio Ca/Si faible se forme à l'interface entre la pâte et le granulat. Deux études paramétriques montrent la capacité du modèle à simuler les effets de taille du granulat ainsi que l'influence des paramètres diffusifs sur le type de produits formés.

Mots-clefs Réaction Alcali-Silice, Transport Réactif, Granulat réactif

I. INTRODUCTION

De nos jours, le vieillissement des ouvrages en béton est une problématique majeure, le béton étant un matériau multiphasique composé d'une matrice cimentaire et d'inclusions granulaires, avec un comportement dépendant du milieu dans lequel il se trouve (température, humidité extérieure). Ainsi, le vieillissement peut avoir un impact sur la sûreté des installations ainsi que sur leur exploitation. Dans le but de caractériser la durabilité du béton en vue de l'extension de la durée d'exploitation des centrales, une attention particulière est portée aux enceintes de confinement en béton des Réacteurs à Eau Pressurisée (REP). De nombreuses études ont été initiées par l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire), afin d'étudier les différentes pathologies pouvant atteindre le béton, notamment celles concernant les réactions de gonflement interne (RGI) (Socié, 2019). Dans cette étude, nous nous intéressons à la Réaction Alcali-Granulat (RAG), et plus particulièrement à la Réaction Alcali-Silice (RAS) (mécanisme de réaction mettant en jeu les composants siliceux réactifs des granulats). Cette réaction est étudiée depuis de nombreuses années (Urhan, 1987; Hou et al., 2004; Ichikawa et Miura, 2007) mais la

compréhension fine des mécanismes impliqués, ainsi que leurs conséquences, nécessite encore des approfondissements.

La RAS met en jeu un couplage de plusieurs physiques à différentes échelles et se développe quand trois composants principaux interagissent pour former un gel d'alcali-silice : les composants siliceux réactifs des granulats, les alcalins provenant du ciment, des granulats ou de l'extérieur, ainsi qu'une humidité relative élevée. Le mécanisme peut être décrit en quatre étapes (Urhan, 1987; Hou et al., 2004; Leemann et al., 2011) :

- Le transport des ions, par gradient de concentration, dans le milieu poreux hétérogène (pâte de ciment, granulat, porosité).
- La dissolution de la silice réactive au contact des ions OH^- présents en solution, par rupture des liaisons Si-OH. La consommation des OH^- engendre la baisse du pH, causant la dissolution de la portlandite CH, libérant des ions OH^- et Ca^{2+} en solution.
- La précipitation des produits de réactions à partir de la silice aqueuse, des ions alcalins et/ou des ions calcium.
- Expansion puis fissuration. Les produits de réaction secondaires se formant dans les vides disponibles (pores ou fissures existantes), une contrainte locale apparaît lors que le volume de produit formé devient supérieur au volume de vides disponibles. Si cette contrainte dépasse la résistance locale du matériau, des fissures peuvent être initiées ou propagées.

La RAS est une réaction lente dont la cinétique de dégradation est de l'ordre de quelques dizaines d'années pour un ouvrage exposé à un climat tempéré (Fernandes et Broekmans, 2013). Elle est souvent diagnostiquée tardivement car interne à la structure et la prédiction de son avancement pour un ouvrage en cours d'exploitation est un enjeu majeur. La mise en place d'outils numériques prédictifs devient nécessaire dans des ouvrages comme les enceintes de confinement ne pouvant être étudiés par des prélèvements destructifs. La modélisation numérique peut apporter une compréhension des mécanismes locaux et leurs rôles dans les conséquences macroscopiques de la réaction. L'objectif de l'étude est de mettre en place un modèle numérique pouvant prendre en compte l'influence des caractéristiques des granulats sur le développement de la réaction. Un modèle numérique de Transport Réactif (TR), combinant transport et réactions chimiques, en milieu saturé a donc été développé afin de prédire l'évolution de la microstructure au cours de l'avancement de la réaction à partir de paramètres physiques et chimiques locaux mesurables. Dans une première partie, les mécanismes physico-chimiques associés à la réaction sont décrits puis, les équations du modèle sont détaillées, et enfin, une application montrant les potentialités du modèle est présentée. L'effet de la taille du granulat et l'influence des paramètres de diffusion sur la réaction ont été étudiés.

II. MODÉLISATION

Les méthodes numériques pour la prédiction d'avancement de la RAS à différentes échelles sont couramment utilisées dans la littérature. Néanmoins, les modèles à l'échelle macroscopique utilisent des paramètres fittés sur des courbes d'expansion expérimentales et négligent la partie chimie de la réaction (Sellier et al., 2009; Morenon et al., 2022). Or la description des mécanismes à

l'échelle de la microstructure paraît primordiale pour la compréhension de la réaction. Des modèles de transport réactif à l'échelle mésoscopique ont été proposés (Guthrie et Carey, 2015; Qiu et al., 2022). Ces modèles prennent en compte le transport des ions et les réactions chimiques pilotées par l'équilibre thermodynamique entre 2 phases : la pâte de ciment hydratée et le granulats. Ils ont montré la possibilité de simuler les étapes de la RAS et la formation des différents types de produits en fonction des conditions chimiques dans la solution poreuse.

Ici le modèle de transport réactif décrit les trois premières étapes de la réaction : transport, dissolution de la silice et précipitation des produits.

A. Modèle de Transport Réactif

Le transport est supposé être piloté par gradient de concentration ionique et est modélisé par la seconde loi de Fick. Les 2 paramètres importants sont la porosité et le coefficient de diffusion associés à chaque phase prise en compte.

L'équation de dissolution de la silice ne validant pas l'hypothèse de l'équilibre local, une loi cinétique est utilisée (Kim et Olek, 2014; Qiu et al., 2022). Cette loi prend en compte l'influence du pH sur la dissolution à partir de l'activité de l' OH^- et la réactivité de la silice est prise en compte par la surface spécifique, le constante cinétique de dissolution et la constante thermodynamique associée à la réaction.

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = -A_m \cdot k_m \cdot a_{\text{OH}^-}^\beta \cdot \left(\frac{Q}{K_m} - 1 \right) \quad (1)$$

Avec C_m la concentration du minéral [mol/L], A_m la surface spécifique réactive du minéral m [m^2/L], k_m la constante cinétique de dissolution [$\text{mol}/\text{m}^2.\text{s}$], a_{OH^-} l'activité de l'ion OH^- , β un paramètre représentant l'ordre partiel de la réaction (ici $\beta = 0,44$), Q le quotient réactionnel, K_m la constante de solubilité du minéral m.

Seul les hydrates impliqués dans la RAS seront pris en compte, ici la pâte de ciment est initialement composée de portlandite CH et de C-S-H (ratio Ca/Si=1,65). Le granulats est supposé uniformément réactif. Les produits de réaction considérés sont généralement observés lors d'une RAS : un C-S-H ayant un faible ratio Ca/Si(0,8), semblable à de la tobermorite (Hou et al., 2004; Leemann et al., 2011) et un gel d'alcali-silice (Na-S-H) expansif semblable à de la kanémite (Leemann et al., 2011; Kim et Olek, 2014). La composition stœchiométrique de la kanémite est connue, cependant sa constante d'équilibre n'est pas définie dans les bases de données. Après une étude paramétrique, la solubilité du gel est égale à 2,5. Afin de stabiliser le système, des espèces aqueuses secondaires, composées d'ions alcalins, calcium et silice, sont prises en compte. Le Tableau 1 donne les réactions chimiques des produits considérés et leurs constantes d'équilibre. La base de données utilisée est Thermoddem (Blanc et al., 2012). Les modèles proposés par (Guthrie et Carey, 2015; Qiu et al., 2022) gèrent, et bloquent, la dissolution de la portlandite et du C-S-H de la pâte par une loi cinétique. Cette hypothèse est assez forte et peut mener à des non-linéarités au niveau de la résolution numérique, ici toutes les réactions sont supposées être à l'équilibre thermodynamique, à l'exception de la dissolution de la silice.

TABLEAU 1. Réactions et constantes d'équilibre des produits modélisés à 25°C (Blanc et al., 2012)

Produits	Equations	Log K
Si(s)	$\text{H}_4\text{SiO}_4 \leftrightarrow \text{SiO}_2(\text{s}) + 2 \text{H}_2\text{O}$	3,74
Kanémite	$2 \text{H}_4\text{SiO}_4 + 4 \text{H}_2\text{O} + \text{Na}^+ \leftrightarrow \text{Na-S-H} + \text{H}^+$	2,5
Tobermorite	$6 \text{H}_4\text{SiO}_4 + 3,5 \text{H}_2\text{O} + 5 \text{Ca}^{2+} \leftrightarrow \text{C-S-H}_{0,8} + 10 \text{H}^+$	-62,944
C-S-H(1,6)	$\text{H}_4\text{SiO}_4 + 2,18 \text{H}_2\text{O} + 1,6 \text{Ca}^{2+} \leftrightarrow \text{C-S-H}_{1,6} + 3,2 \text{H}^+$	-28,002
Portlandite	$2 \text{H}_2\text{O} + \text{Ca}^{2+} \leftrightarrow \text{Ca}(\text{OH})_2 + 2 \text{H}^+$	-22,812

B. Application

L'objectif de l'application est de comprendre les effets chimiques locaux de la RAS ainsi que l'effet des gradients ioniques dans le granulat. Dans le travail ci-dessous, le code de transport réactif HYTEC (Van der Lee et al., 2003) est utilisé. Les équations du système chimique (thermodynamique + cinétique) sont résolues simultanément (modèle monolithique).

1. Cas d'étude

Le système unitaire de référence est un rectangle de dimension 0,1 mm x 0,75 mm, composé de pâte de ciment et d'un granulat avec un ratio pâte/granulat de 30/70, représentatif d'un béton ordinaire, illustré en Figure 1. Une condition de symétrie est appliquée sur le bord droit du granulat. Le calcul est en 1D.

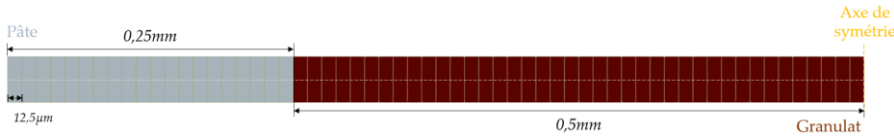


FIGURE 1. Domaine étudié : 30% de pâte et 70% de granulat

La taille de maille est de 12,5 µm. Le matériau est mature, déjà hydraté (eau/ciment = 0,45). A l'initialisation, la pâte est composée de portlandite et de C-S-H(1,6) avec des concentrations obtenues à partir du modèle d'hydratation utilisé dans (Socié et al., 2022). La concentration initiale en ions alcalins, définie en sodium équivalent, est égale à 1 mol/l. Le pH dans les granulats est initialisé à 10. La concentration de silice solide est calculée à partir des données de (Gao et al., 2013). Les valeurs initiales sont données dans le Tableau 2.

Les essais pour la détermination des paramètres diffusifs portent essentiellement sur des éprouvettes de béton. Néanmoins, Goto et Roy (1981) ont proposé une étude focalisée sur les granulats (quartzite). De plus, dans leur modèle, Qiu et al. (2022) calculent les coefficient de diffusion à partir de données expérimentale de la littérature. Concernant la dissolution, les essais de dissolution de la silice en milieu basique sont courants, et englobent de nombreux paramètres (température, pH, nature du granulat) (Brady et Walther, 1990; Kim et Olek, 2014). Les paramètres utilisés dans le modèle sont donnés dans le Tableau 3. Le coefficient k_m est défini par $k_m * A_m$.

TABLEAU 2. Valeurs initiales du modèle après calcul d'hydratation (modèle de Socié et al., 2022)

Pâte	Granulat
$\text{Ca}(\text{OH})_2 = 6,13 \text{ mol/l}$	$\text{Si}(\text{s}) = 30 \text{ mol/l}$
$\text{C-S-H}_{1,6} = 4,41 \text{ mol/l}$	pH = 10

TABLEAU 3. Paramètres de diffusion (Goto et Roy, 1981; Qiu et al., 2022) et de dissolution (Brady et Walther, 1990; Kim et Olek, 2014)

	Pâte	Granulat
Coefficient de diffusion (m^2/s)	$D_p = 10^{-11}$	$D_g = 10^{-13}$
Porosité	0,25	0,01
Coefficient cinétique de dissolution ($\text{mol}/\text{l.s}$)	-	$k_{eq} = 1.10^{-10}$

2. Simulation de l’attaque du granulat par la solution interstitielle de la pâte

Dans cette partie, nous présentons l’attaque d’un granulat de 1 mm par la solution porale du béton. Les résultats de la simulation obtenus à 1 an sont affichés dans la Figure 2, en utilisant la symétrie dans le maillage du granulat, seulement 0,5 mm de longueur est représentée. La figure montre la dissolution de la silice solide : la concentration de silice dans le granulat évolue de 30 mol/l à 25 mol/l. Notons que la dissolution est homogène, cela est dû, d’une part, à l’homogénéité de la silice réactive dans la particule de granulat et, d’autre part, à la cinétique d’attaque pilotée majoritairement par la dissolution de la silice dans le cas des petites particules. Dans ce cas, la diffusion des espèces agressives dans le granulat est rapide alors que la dissolution est lente.

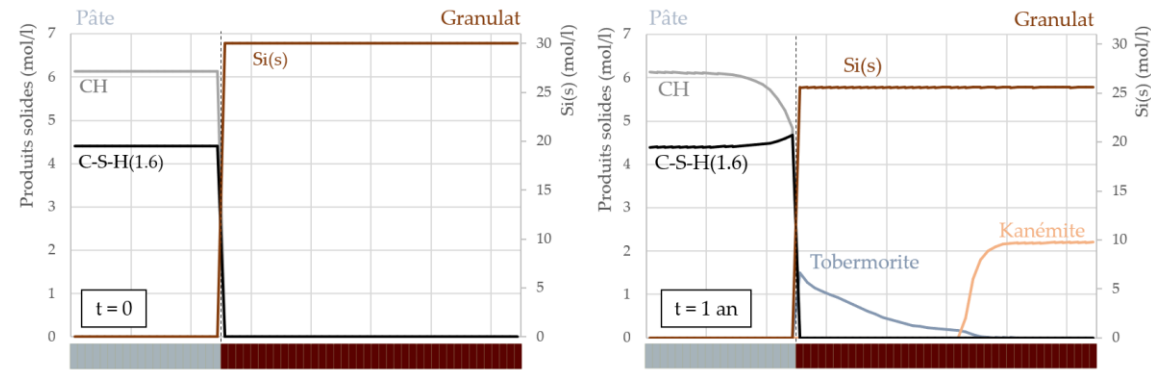


FIGURE 2. Profils de concentration des phases solides à l’initialisation et à 1 an

Le modèle, à partir de l’équilibre thermodynamique, permet de reproduire la séquence complète de la réaction : dissolution de la portlandite libérant des ions calcium disponibles pour former des C-S-H proches de l’interface. Les produits de réaction se formant dans le granulat sont conformes à ceux décrits dans la littérature : tobermorite proche de l’interface (produit contenant du calcium, semblables à des C-S-H) et de la kanémite au cœur du granulat (Urhan, 1987; Ichikawa et Miura, 2007).

Les quantités de produits formés sont présentées dans la Figure 3. Pour les hydrates initiaux de la pâte, il est observé des variations légères : la portlandite se dissout et le C-S-H1.6 augmente. La précipitation de C-S-H1.6 est due à la présence simultanée de calcium et de silice aqueuse, rendant possible sa formation côté pâte. Pour la Si(s), la quantité diminue, validant la dissolution quasi-linéaire provoquée par la loi cinétique. Concernant les produits de réaction, il est observé que la kanémite se forme en plus grande quantité que la tobermorite. Néanmoins, la cinétique de formation semble ralentir pour la kanémite alors qu’elle semble rester linéaire pour la tobermorite.

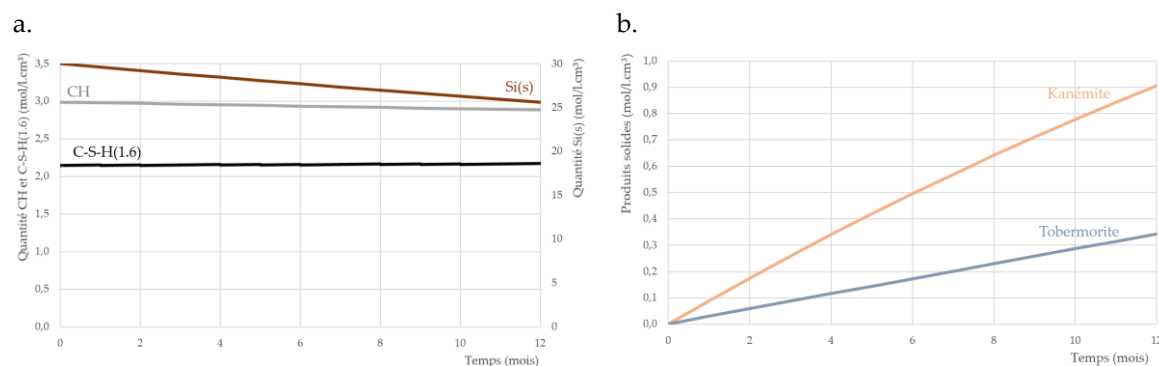


FIGURE 3. Quantité des phases solides en mol/l.cm³ à 1 an : a. portlandite, C-S-H1.6 et Si(s) et b. Kanémite et Tobermorite

3. Influence de la taille de granulat

L'effet de la taille du granulat sur l'expansion macroscopique est souvent discuté dans la littérature (Urhan, 1987; Ichikawa et Miura, 2007; Gao et al., 2013). Les gonflements dus à la RAS varient avec le diamètre. Une réduction du diamètre peut accélérer le transport (les petites particules seront saturées plus vite que les grosses), et donc la cinétique de dissolution. Cela peut mener à une réaction pouzzolanique : la dissolution rend, rapidement, la silice aqueuse disponible en solution (Cyr et al., 2009). De plus, la dissolution de la silice consommant les ions OH^- , il y a une accélération de la dissolution de la portlandite (CH) pour équilibrer la solution, rendant les ions calcium aussi disponibles. Il en résulte que l'équilibre thermodynamique en solution est favorable à la formation de produits de type C-S-H (de différents ratios), consommant la silice aqueuse issue de la dissolution et bloquant la formation de gel d'alcali-silice.

Dans le but de comprendre ces observations et mettre en évidence les capacités du modèle à reproduire ces phénomènes, 4 tailles de granulat sont considérées : 0,1 mm, 0,5 mm, 1 mm et 5 mm.

Dans la Figure 4, nous pouvons voir que pour les petits diamètres (0,1 et 0,5 mm), la formation de tobermorite domine celle de la kanémite, menant en un effet non-délétère de la réaction. La cinétique étant plus rapide pour de petits diamètres, la silice est dissoute rapidement et captée directement par les ions calcium à l'interface, laissant les ions alcalins diffuser dans le granulat sans réagir. Pour les particules plus larges, plus le diamètre est grand, plus la quantité de kanémite formée est grande. Ce résultat confirme que les granulats les plus gros mènent à la plus grande production de kanémite et présente donc un potentiel d'expansion supérieur, pour l'intervalle de taille étudiée.

La Figure 5 montre les quantités de produits de réaction formés au cours du temps pour différents diamètres. Nous pouvons observer que, pour les diamètres les plus faibles, quand la kanémite ne se forme pas la quantité de tobermorite est élevée. A l'inverse, pour les diamètres élevés, la kanémite se forme en grande quantité et la tobermorite est faible. Néanmoins, les courbes semblent linéaires mais les quantités ne sont pas proportionnelles aux diamètres. Cela peut être expliqué par l'influence des cinétiques de dissolution et diffusion sur la cinétique de formation des produits. En effet, pour un grand diamètre, les ions n'ont pas encore eu le temps d'atteindre le cœur du granulat : la dissolution de la silice est donc plus lente que pour un petit granulat. La

formation de produit de réaction est donc aussi retardée car les espèces aqueuses ne sont pas encore disponibles dans le granulat.

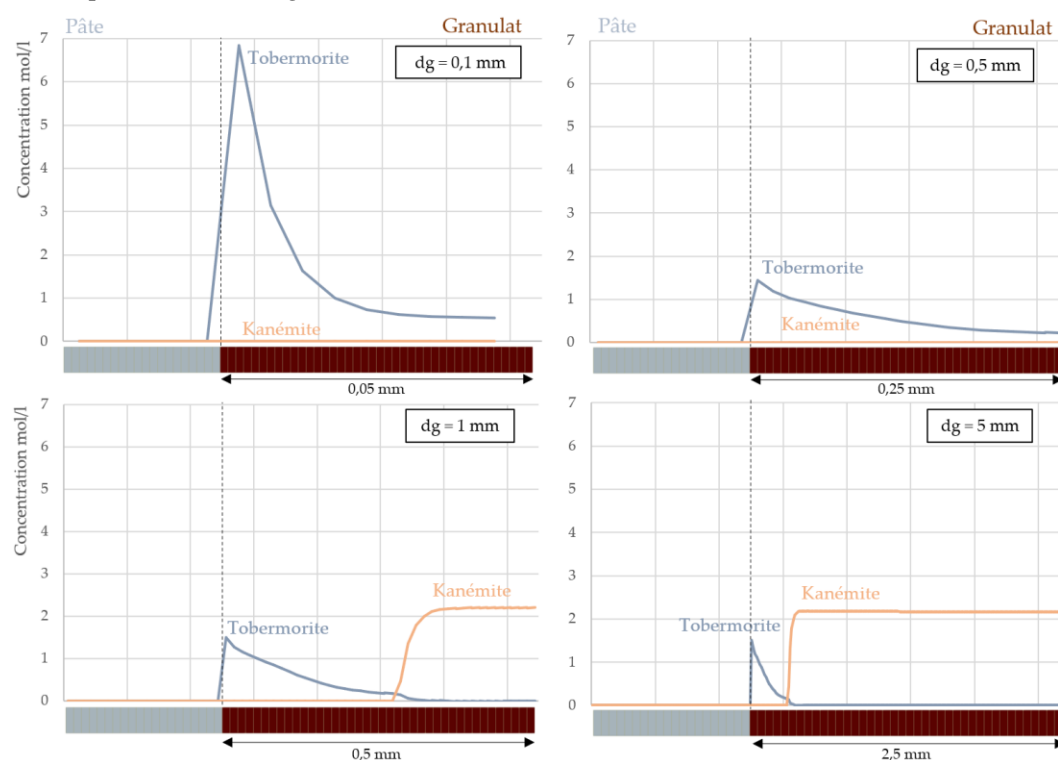


FIGURE 4. Profils de concentration des produits de réaction à 1 an pour les diamètres : 0,1 mm, 0,5 mm, 1 mm et 5 mm

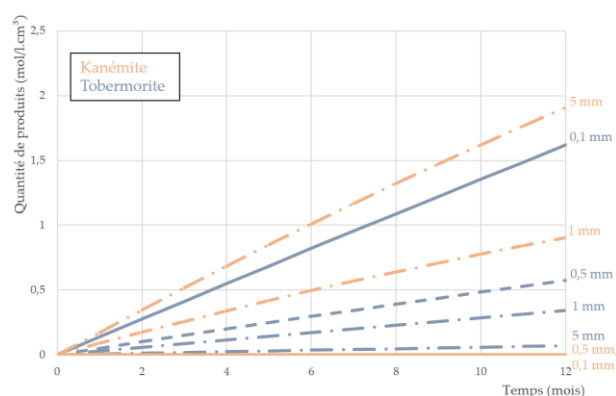


FIGURE 5. Quantités de kanémité et tobermorite formées en fonction du temps pour les diamètres : 0,1 mm, 0,5 mm, 1 mm et 5 mm

Ces résultats montrent que, avec l'hypothèse de l'homogénéité de la réactivité dans le granulat, le modèle est capable de reproduire l'effet pouzzolanique observé dans la littérature pour des petites particules de granulats siliceux réactifs. Cependant il est souvent noté, dans la littérature, qu'un diamètre de 0,5 mm devrait entraîner un gonflement (Gao et al., 2013). Ces observations suggèrent la formation de gel d'alcali-silice (kanémité ici), ce qui n'est pas notre cas.

4. Effet du coefficient de diffusion

Dans le but d'étudier l'effet du coefficient de diffusion dans le granulat, plusieurs coefficients ont été testés, $D_g = D_p/100$ (référence), $D_g = D_p/200$ et $D_g = D_p/1000$, pour le cas de la particule de 0,5mm de diamètre. Les valeurs ont été choisies pour représenter un intervalle de valeurs cohérentes avec la littérature (Goto et Roy, 1981 ; Qui et al., 2022). Les résultats sont présentés dans la Figure 6.

Des valeurs de coefficient de diffusion faibles pour D_g entraînent une formation de kanémite (Figure 6b et 6c).

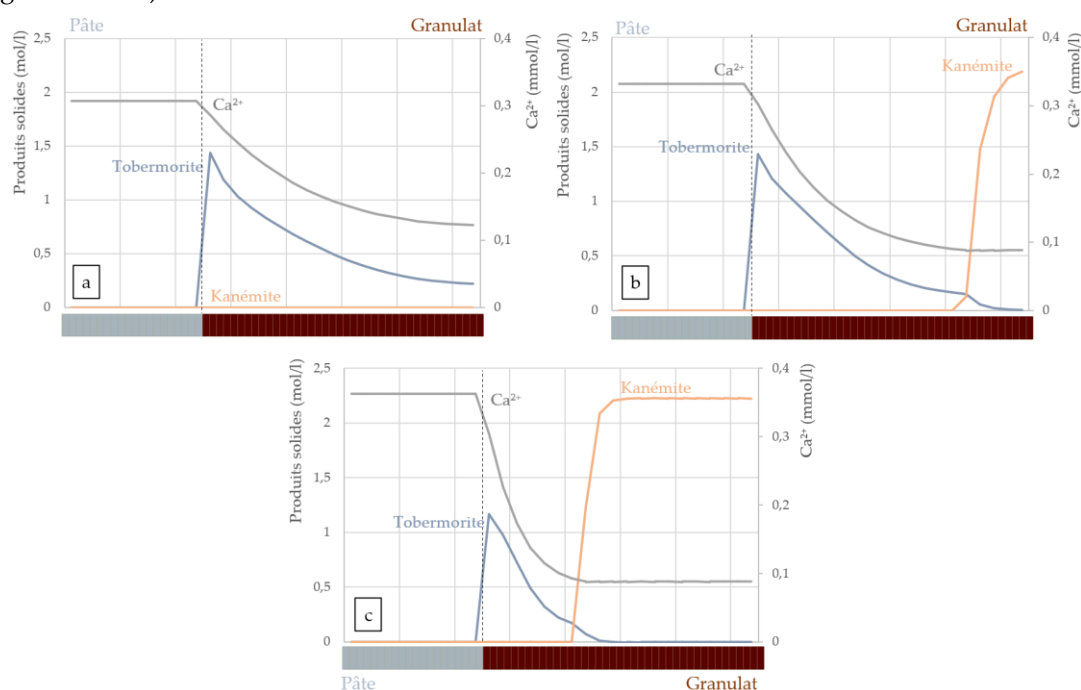


FIGURE 6. Profils de concentration des produits de réaction et du Ca^{2+} à 1 an pour un granulat de 0,5 mm de diamètre : a) $D_g = D_p/100$ (référence), b) $D_g = D_p/200$, c) $D_g = D_p/1000$

Pour une particule de petit diamètre, cela peut être expliqué de la manière suivante.

- Lorsque D_g est élevé, les espèces pénètrent rapidement vers le cœur du granulat et les concentrations en ions calcium et alcalins sont élevées dans l'ensemble du volume. Dans cette situation, une compétition entre les constantes de solubilité est engagée. Au final, la tobermorite prend le dessus et se forme, engendrant la consommation des ions ce qui bloque la formation de kanémite. Comme la cinétique de dissolution est plus lente que la cinétique de diffusion, les ions calcium diffusent très vite et la silice aqueuse issue de la dissolution sera consommée directement. Il en résulte que la formation de la tobermorite est pilotée par le front de diffusion du calcium, les courbes représentant leurs concentrations ayant des tendances identiques (Figure 6a).
- Lorsque D_g est faible, la différence entre les cinétiques de diffusion de dissolution est moins marquée, ce qui implique que la dissolution commence rapidement. Les concentrations des espèces aqueuses (ions calcium et silice) sont alors élevées à l'interface, permettant la formation de tobermorite. Les ions calcium sont consommés par cette

réaction et ne sont plus disponibles pour diffuser jusqu'au cœur du granulat. Les ions alcalins, non impliqués dans cette réaction, peuvent diffuser vers le cœur. La kanémite se formera dans le granulat tant que la concentration locale des ions calcium est faible.

CONCLUSION

La modélisation proposée prend en compte les étapes principales de la séquence de la RAS : diffusion des espèces aqueuses, dissolution de la silice réactive et précipitation de produits à partir des équilibres thermodynamiques. Les résultats du modèle montrent une bonne capacité à retrouver les observations de la littérature. L'analyse montre que l'interface pâte/granulat est le lieu préférentiel des interactions chimiques : les gradients de concentration provoquent la dissolution locale de la portlandite (les ions calcium se retrouvent disponibles en solution). De plus, la dissolution de la silice au contact des ions OH^- rend la silice aqueuse disponible en solution. Il en résulte une formation de C-S-H à l'interface côté pâte et côté granulat (tobermorite). Les deux produits sont similaires dans leurs compositions (calcium + silice) mais le produit précipitant à l'interface présente un ratio Ca/Si plus élevé que celui se formant du côté du granulat. La formation d'un produit de type gel d'alcali-silice (kanémite), qualifié d'expansif, au cœur du granulat est également observée. Une étude portant sur l'effet de la taille du granulat sur la réaction a été présentée. Il a été observé que la formation de kanémite est bloquée quand le diamètre est réduit, alors que la quantité de produit formé dans le granulat augmente proportionnellement avec le diamètre. Une seconde étude, portant sur le coefficient de diffusion dans les granulats, a montré que ralentir la diffusion dans la particule faisait augmenter la formation de kanémite. Ce phénomène est dû à la compétition entre les cinétiques de diffusion et de dissolution, influençant l'équilibre thermodynamique du système. Dans cette situation, la formation de tobermorite domine celle de la kanémite quand la concentration de calcium est élevée dans le granulat.

Ces résultats ont montré l'importance de la prise en compte, dans un modèle numérique, de la diffusion et de la dissolution sur l'avancement de la réaction. D'autre part, la prise en compte globale des granulats (paramètres physiques et minéralogiques) dans le béton semble primordiale pour la compréhension de la réaction (les gonflements et la fissuration s'initiant dans les granulats). Enfin, le modèle pourra servir de base pour l'évaluation de l'avancement d'une réaction (en fonction de ses différentes formes), pouvant être observée sur une structure réelle.

REFERENCES

Blanc, Ph., Lassin, A., Piantone, P., Azaroual, M., Jacquemet, N., Fabbri, A., & Gaucher, E.C. (2012). Thermoddem: A geochemical database focused on low temperature water/rock interactions and waste materials. *Applied Geochemistry*, 27(10), 2107-2116.

Brady, P.V., & Walther, J.V. (1990). Kinetics of quartz dissolution at low temperatures. *Chemical Geology*, 82, 253-264.

Cyr, M., Rivard, P., & Labrecque, F. (2009). Reduction of ASR-expansion using powders ground from various sources of reactive aggregates. *Cement and Concrete Composites*, 31, 438-446.

Fernandes, I., & Broekmans, M.A.T.M. (2013). Alkali-Silica Reactions : An Overview. Part I. *Metallogr. Microstruct. Anal.*, 2, 257-267.

- Gao, X.X., Multon, S., Cyr, M., & Sellier, A. (2013). Alkali-silica reaction (ASR) expansion: Pessimism effect versus scale effect. *Cement and Concrete Research*, 44, 25–33.
- Goto, S., & Roy, D.M. (1981). Diffusion of ions through hardened cement pastes. *Cement and Concrete Research*, 11, 751-757.
- Guthrie, G.D., Carey, W. (2015). A thermodynamic and kinetic model for paste-aggregate interactions and the alkali-silica reaction. *Cement and Concrete Research*, 76, 107–120.
- Hou, X., Struble, L.J., & Kirkpatrick, R.J. (2004). Formation of ASR gel and the roles of C-S-H and portlandite. *Cement and Concrete Research*, 34(9), 1683–1696.
- Ichikawa, T., & Miura, M. (2007). Modified model of alkali-silica reaction. *Cement and Concrete Research*, 37(9), 1291–1297.
- Kim, T., & Olek, J. (2014). Chemical Sequence and Kinetics of Alkali-Silica Reaction Part II. A Thermodynamic Model. *Journal of the American Ceramic Society*, 97(7), 2204–2212.
- Leemann, A., Le Saout, G., Winnefeld, F., Rentsch, D., & Lothenbach, B. (2011). Alkali-Silica Reaction: the influence of Calcium on Silica Dissolution and the Formation of Reaction Products. *Journal of the American Ceramic Society*, 94(4), 1243–1249.
- Morenon, P., Multon, S., Sellier, A. (2022). Modelling the mechanical behaviour of concrete subjected to Alkali-Silica Reaction (ASR) under multi-axial stress. *Cement and Concrete Research*, 158, 106823.
- Qiu, X., Chen, J., Ye, G., & De Schutter, G. (2022). A 3D reactive transport model for simulation of the chemical reaction process of ASR at microscale. *Cement and Concrete Research*, 151, 106640.
- Sellier, A., Bourdarot, E., Multon, S., Cyr, M., Grimal, E. (2009). Combination of structural monitoring and laboratory tests for assessment of Alkali-Aggregate Reaction swelling: application to gate structure dam. *Materials Journal*, 106 (3), 281-290.
- Socié, A. (2019). Modélisation chimio-mécanique de la fissuration de matériaux cimentaires : vieillissement et tenue des enceintes de confinement des centrales nucléaires. *Phd thesis*, Université de Montpellier.
- Socié, A., Dubois, F., Monerie, Y., Neji, M., & Perales, F. (2022). Simulation of internal and external sulfate attacks of concrete with a generic reactive transport-poromechanical model. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 1-28.
- Van Der Lee, J., De Windt, L., Lagneau, V., & Goblet, P. (2003). Module-Oriented Modeling of Reactive Transport with HYTEC. *Computers and Geosciences*, 29, 265–275.
- Urhan, S. (1987). Alkali silica and pozzolanic reactions in concrete. Part 1: Interpretation of published results and a hypothesis concerning the mechanism. *Cement and Concrete Research*, 17(1), 141–152.