

Vers une modélisation physique de l'endommagement du béton

Abderrahmane Rhardane, Syed-Yasir Alam, Frédéric Grondin

Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique (GeM) UMR-CNRS 6183, École Centrale de Nantes - 1 rue de la Noë, 44321 Nantes, {abderrahmane.rhardane ; syed-yasir.alam ; frederic.grondin}@ec-nantes.fr

RÉSUMÉ. Une approche micro-macro est proposée pour prévoir l'évolution de l'endommagement et des paramètres de fissuration dans les matériaux cimentaires à travers les échelles. Le programme VCCTL (NIST) est utilisé pour simuler le processus d'hydratation du ciment, puis la microstructure obtenue est convertie en un maillage éléments finis dans le logiciel Cast3M. Afin de déterminer les paramètres de fissuration de la pâte de ciment, des propriétés mécaniques intrinsèques sont affectées à chaque constituant. Ces propriétés proviennent d'études expérimentales ou de modèles moléculaires présentés dans la littérature. Le modèle d'endommagement développé par Fichant et al. a été retenu pour les simulations et les propriétés effectives de rupture du matériau sont exploitées à l'échelle supérieure pour calculer l'endommagement du mortier. Et de la même façon on calcule ensuite les propriétés de rupture du béton. Les simulations numériques sont comparées à des essais de rupture du béton à différents âges pour tester la robustesse de l'approche multi-échelles.

ABSTRACT. In order to predict the evolution of damage and fracture parameters of cementitious materials through the scales, a micro-macro approach is proposed. The hydration process of cement paste is simulated through the hydration program VCCTL (NIST) taking into account cement data and hydration parameters. The generated microstructure is translated into a finite element mesh using the software Cast3M, and the damage model developed by Fichant et al. is adopted to simulate damage and determine effective fracture parameters of cement paste. For this purpose, all cement phases are assumed to have intrinsic mechanical properties that contribute to damage evolution. These properties are acquired from experimental investigations and molecular models present in the literature. The modelling of mortar and concrete follows in a similar fashion, and the effective parameters are transferred from one scale to another consecutively. Finally, simulations are tested against failure tests on concrete at different ages.

MOTS-CLÉS : endommagement, modélisation, multi-échelles, béton, fissuration, hydratation

KEY WORDS : damage, modelling, concrete, multiscale, fracture, hydration

1. Introduction

L'étude du comportement à la fissuration est très importante pour la durabilité des matériaux cimentaires. Cette étude demeure laborieuse car les essais expérimentaux à mener sont lourds et les échantillons, atteignant parfois quelques mètres, sont difficiles à fabriquer. De plus, la simulation n'est pas facile car les paramètres des modèles choisis doivent être calibrés pour toute nouvelle formulation du béton. Il est donc intéressant de déterminer des moyens de modélisation sans avoir recours à chaque fois aux essais pour la calibration des modèles.

Plusieurs modèles ont été développés pour simuler les matériaux cimentaires ; une attention particulière est accordée à la modélisation de la pâte de ciment. Certaines études [SMI 06, HAE 05, BER 03] ont démontré la possibilité de modéliser le comportement linéaire élastique de la pâte en combinant des modèles d'hydratation et d'éléments finis (EF). D'autres études [LUK 15] ont exploré la possibilité de modéliser le comportement à la fissuration de la pâte à différents âges. Cependant, ces modèles ne tiennent pas compte de l'énergie de fissuration qui est un paramètre caractéristique essentiel de la rupture [MAT 13]. Par ailleurs, les résistances intrinsèques des phases de la pâte de ciment sont généralement calibrées sur des essais réalisés sur des échantillons pâte et cela masque les interactions possibles entre elles. L'objectif principal de ce travail est donc d'éliminer la dépendance aux tests expérimentaux qui sont lourds et modéliser le comportement de la pâte en tenant en compte des propriétés d'endommagement des phases de ciment.

2. Simulation de l'hydratation

Afin de modéliser l'hydratation du ciment, le programme VCCTL développé par Bullard [BUL 14], basé sur le code CEMHYD3D [BEN 97], a été utilisé. Brièvement, le modèle prend en compte la composition du ciment (clinkers, gypse, ajouts et autres), la distribution granulométrique du ciment, les paramètres d'hydratation (énergies de réaction, degré de floculation, etc.) ainsi que d'autres paramètres de mélange (rapports E/C et E/L). Les calculs reflètent les processus de l'ensemble des réactions chimiques qui se produisent dans la pâte. Finalement, la microstructure tridimensionnelle est restituée avec d'autres informations sur le suivi de l'hydratation (Figure 1).

Plusieurs âges d'hydratation entre 12h et 28j ont été choisis pour la simulation de l'endommagement. La Figure 1 illustre l'avancement de l'hydratation par la dissolution des particules de clinker et la diminution de l'eau dans la porosité pour former les produits d'hydratation.

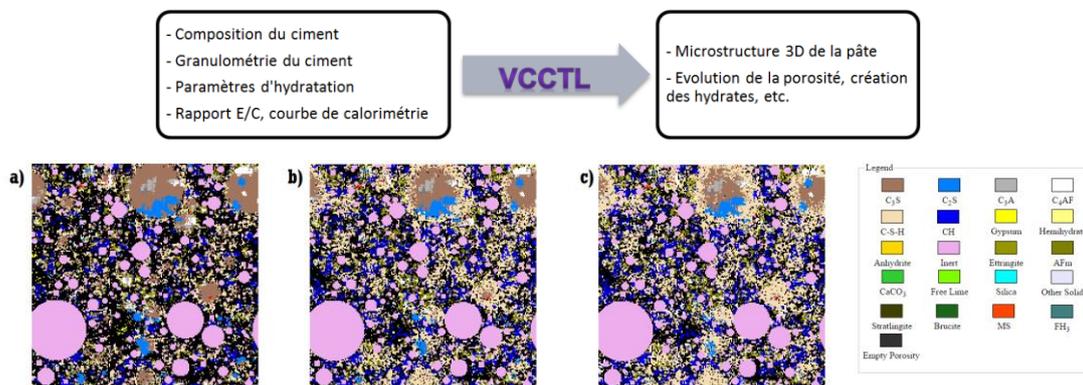


Figure 1. Haut : Schéma descriptif du programme VCCTL. Bas : Evolution de la microstructure de la pâte cimentaire à l'âge de : a) 24h, hydratation à 33%, b) 72h, hydratation à 55% et c) 28j, hydratation à 78%.

3. Modèle d'endommagement

Pour un matériau assez fragile comme la pâte de ciment, le choix s'est porté sur le modèle d'endommagement développé par Fichant et al. [FIC 97] dans lequel la plasticité et l'endommagement sont découplés.

Dans ce modèle, les contraintes effectives sont déterminées à partir du tenseur des déformations :

$$\tilde{\sigma}_{ij} = \frac{E}{1+\nu} \varepsilon_{ij} + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \varepsilon_{kk} \delta_{ij} \quad [1]$$

Les contraintes totales sont assimilées à la limite de traction f_t (0,2 mro) d'endommagement scalaire D (l'endommagement dû à la compression est négligé) :

$$\sigma_{ij} = (1-D)\langle \tilde{\sigma}_{ij} \rangle^+ + \langle \tilde{\sigma}_{ij} \rangle^- \quad [2]$$

L'expression de la variable D est la suivante :

$$D = 1 - \frac{\kappa_0}{\tilde{\varepsilon}} e^{B(\kappa_0 - \tilde{\varepsilon})} \quad [3]$$

Où : $\kappa_0 = \frac{f_t}{E}$ et $B = \frac{hf_t}{G_f}$.

Avec κ_0 le seuil d'endommagement, f_t la résistance à la traction et G_f l'énergie de fissuration. Le coefficient h représente la taille du maillage EF. Le comportement en post-pic est contrôlé par le paramètre B qui dépend de l'énergie de fissuration. Ainsi, quand G_f diminue, le paramètre B croît et la pente post-pic devient plus raide (Figure 2).

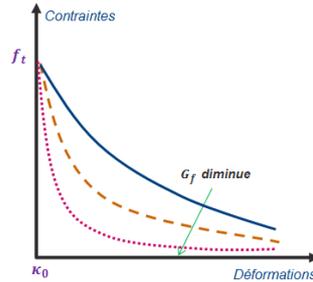


Figure 2. Représentation schématique de la loi de comportement et effet de G_f sur le comportement post-pic.

Plus que cinquante phases distinctes sont répertoriées dans la liste complète du programme VCCTL (environ 10 phases pour un ciment de type CEM I). Le choix des propriétés mécaniques doit être très judicieux. Dans la littérature, plusieurs travaux ont été comparés pour sélectionner les propriétés correspondantes à chaque phase, notamment les propriétés élastiques. Certaines propriétés de rupture ont été estimées, tandis que la similitude structurelle s'est avérée utile pour affecter les paramètres des phases dont il manque toujours des données expérimentales ou numériques. Le Tableau 1 récapitule certaines propriétés des phases les plus importantes.

	E	ν	f_t	G_f	Densité
C_3S (alite)	141 GPa	0,3	14,5 MPa	34,9 N/m	3,21 g/cm ³
C_2S (β - bélite)	135 GPa	0,3	13,3 MPa	30,8 N/m	3,28 g/cm ³
Gypse (dihydraté)	45,7 GPa	0,33	0,9 MPa	0,4 N/m	2,32 g/cm ³
Portlandite (CH)	41,5 GPa	0,312	2,8 MPa	4,4 N/m	2,24 g/cm ³
Matrice C-S-H	23,8 GPa	0,24	1,9 MPa	3,2 N/m	2,12 g/cm ³
Ettringite (AFt)	22,4 GPa	0,25	1,3 MPa	1,7 N/m	1,70 g/cm ³
Monosulfates (AFm)	42,3 GPa	0,324	1,5 MPa	1,3 N/m	1,99 g/cm ³
Porosité (saturée)	1,00 MPa	0,499	-	-	1,00 g/cm ³

Tableau 1. Propriétés mécaniques de quelques phases cimentaires.

4. Modélisation de l'endommagement et analyse inverse

A l'aide du logiciel Cast3M, un maillage EF correspondant à la microstructure de la pâte obtenue par VCCTL a été construit. Des maillages aux échelles du béton et du mortier ont été réalisés par l'approche Béton Numérique par la génération aléatoire des grains de sable et des granulats dans le volume [GRO 07]. En se basant sur des résultats expérimentaux, une approche par analyse inverse a été proposée pour calculer les propriétés élastiques et les paramètres de fissuration du mortier et de la pâte (Figure 3). L'analyse inverse consiste à calculer de façon optimale les propriétés du matériau en comparant sa courbe de comportement à une courbe de référence (expérimentale). La Figure 4 présente les résultats du calcul par analyse inverse fait sur le

béton et le mortier. Agil et al. [17] ont, à l'échelle microscopique, les propriétés en 2017 que 16.50 / 16.50 (0.0000) ont été ajustées définitivement sur les paramètres déterminés à l'échelle supérieure. Une fois déterminées, ces propriétés seront considérées intrinsèques et serviront à réaliser des simulations de calcul direct pour des bétons à différents âges (i.e. à différents degrés d'hydratation) afin de valider l'approche multi-échelles [MAT 13].

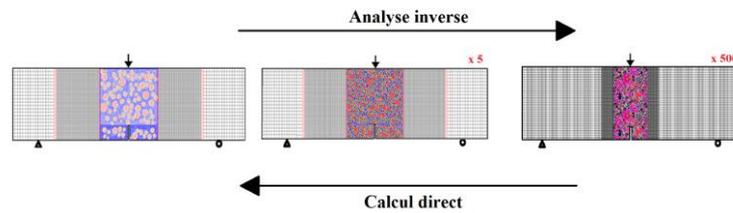


Figure 3. Schéma de calcul par analyse inverse et de calcul direct (sans calibration).

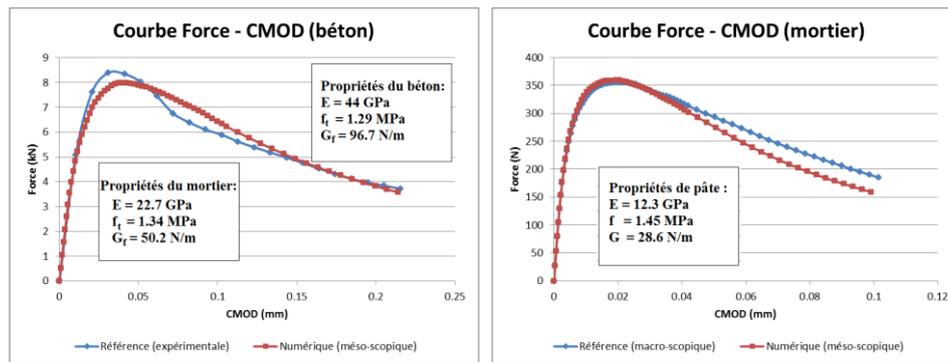


Figure 4. Comparaison entre courbes Force-CMOD expérimentales et numériques (béton et mortier).

5. Bibliographie

- [BEN 97] BENTZ D.P., « Three-dimensional computer simulation of cement hydration and microstructure development », *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 80, n° 1, 1997, p. 3-21.
- [BER 03] BERNARD O., ULM F.-J., LEMARCHAND E., « A multiscale micromechanics-hydration model for early-age elastic properties of cement-based materials », *Cement and Concrete Research*, vol. 33, issue 9, 2003, p. 1293-1309
- [BUL 14] BULLARD J.W., Virtual Cement and Concrete Testing Laboratory, NIST special publication n° 1173, May 2014, Materials and Structural Systems Division, Engineering Laboratory.
- [FIC 97] FICHANT S., PIAUDIER-CABOT G., LA BORDERIE C., « Continuum damage modelling: approximation of crack induced anisotropy », *Mechanics Research Communications*, vol. 24, n° 2, 1997, p. 109-114.
- [GRO 07] GRONDIN F., DUMONTET H., BEN HAMIDA A., MOUNAJED G., BOUSSA H., « Multi-scales modeling for the behaviour of damage concrete », *Cement and Concrete Research*, vol. 37, 2007, p. 1453-1462
- [HAE 05] HAECKER C.-J., GARBOCZI E., BULLARD J., BOHN Z., SUN Z., SHAH S., VOIGT T., « Modelling the linear elastic properties of Portland cement paste », *Cement and Concrete Research*, vol. 35, issue 10, 2005, p. 1948-1960
- [LUK 15] LUKOVIĆ M., SCHLANGEN E., YE G., « Combined experimental and numerical study of fracture behavior of cement paste at the micro-level », *Cement and Concrete Research*, vol. 73, July 2015, p. 123-135
- [MAT 13] MATALLAH M., FARAH M., GRONDIN F., LOUKILI A., ROZIÈRE E., « Size-independent fracture energy of concrete at very early ages by inverse analysis », *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 109, 2013, p. 1-16

[SMI 06] SMILAUER V., BITTNER Z., « Microstructure-based micromechanical prediction of elastic properties in hydrating cement paste », *Cement and Concrete Research*, vol. 36, issue 9, 2006, p. 1708-1718