
Modélisation de la teneur en eau dans les pâtes de ciment par les réseaux de neurones artificiels.

Mahdi KHADRA^{1,*}, Thomas ROUGELOT¹, Jean-Philippe CARLIER¹, Nicolas BURLION¹

¹ LML - Laboratoire de Mécanique de Lille - UMR 8107 CNRS, Ecole Polytechnique de l'Université de Lille, Avenue Paul Langevin 59655 Villeneuve d'Ascq - France.

* Auteur correspondant : mahdi.khadra@gmail.com

RÉSUMÉ. L'objectif de ce papier est de présenter un modèle basé sur les réseaux de neurones pour la modélisation des isothermes de désorption des pâtes de ciment en utilisant le rapport E/C comme seule variable du modèle. Étant donné que les réseaux de neurones utilisent le processus d'entraînement basé sur des résultats expérimentaux dans la construction du modèle, les données d'entrées utilisées dans cette modélisation sont donc les teneurs en eau des pâtes de ciment en fonction des humidités relatives pour quatre rapports E/C différents issues de résultats expérimentaux de la littérature pour un même matériau. La validation du modèle obtenu a été effectuée sur les mêmes rapports E/C expérimentaux et sur deux autres nouveaux rapports E/C. Les résultats obtenus montrent une concordance entre les données expérimentales et les courbes issues de la modélisation, montrant ainsi la capacité de cette méthode à être utilisée comme moyen de modélisation lorsque la description physique du modèle est complexe ou nécessite des hypothèses fortes.

MOTS-CLÉS: Réseaux de Neurones Artificiels, modélisation, isothermes de sorption, matériaux cimentaires, pâtes de ciment.

ABSTRACT. The aim of this paper is to present a model based on neural networks for the modeling of cement paste desorption isotherms using the W/C ratio as the sole variable of the model. Since neural networks use the training process based on experimental results in model construction, the input data used in this modeling are therefore the water content of cement paste as a function of relative humidity of four W/C ratio issued from experimental results on cement paste. The validation of the model obtained was carried out on the same experimental W/C ratios and on two others new W/C ratios. The results obtained show a concordance between the experimental data and the curves resulting from the modeling, thus demonstrating the ability of this method to be used as a modeling tool when the physical description of the model is complicated or requires strong assumptions.

KEY WORDS: Artificial Neural Network, modeling, Sorption isotherms, cementitious materials, cement paste.

La durabilité des matériaux cimentaires est dans tous ses aspects fortement conditionnée par le rôle joué par l'eau. Sa présence en tant que constituant chimique des hydrates des liants cimentaires, mais également au sein du réseau poreux lui confère une grande influence sur les propriétés des bétons. Outre les variations dimensionnelles induites par les retraits de dessiccation et les modifications du comportement mécanique (Burlion et al. 2005), les propriétés de transport sont également hautement dépendantes de la saturation en eau de ce réseau. Les isothermes de sorption relient l'état de saturation en eau ou la teneur en eau d'un matériau poreux à l'humidité relative de l'environnement. Ces isothermes peuvent être déterminées expérimentalement à partir de la variation relative de masse des échantillons à des humidités relatives données (Khadra et al. 2016).

Plusieurs auteurs ont proposés des modèles liés à la description des isothermes de sorption. Parmi les modèles les plus adaptés aux matériaux cimentaires, on peut à titre d'exemple citer le modèle B.E.T (Brunauer et al. 1938) et le modèle de van Genuchten (van Genuchten 1980), le premier propose une description de l'adsorption en couches multimoléculaires sur des solides non poreux, tandis que le deuxième offre un jeu de fonctions mathématiques pour la description de la rétention et du transport d'eau. Cependant la plupart de ces modèles utilisent des hypothèses simplificatrices fortes. Dans le cas des deux modèles cités, par exemple, le modèle de B.E.T n'est valable qu'aux

faibles humidités relative ($HR < 35\%$) sans tenir compte des interactions latérales entre les molécules adsorbées et les hétérogénéités de surface, alors que dans modèle de van Genuchten, la description des isothermes de sorption est basée sur des fondements mathématiques et non physiques.

Ce papier propose une nouvelle approche de la modélisation des isothermes de sorption basée sur les réseaux de neurones artificiels, à partir de résultats expérimentaux (Houst 1996). Cette approche a déjà été adoptée pour la modélisation du comportement hydriques de sols (Pachepsky et al. 1996, Schaap et al. 1996, Schaap et al. 1998) ou de produits agro-alimentaires (Janjay et al. 2009, Argyropoulos et al. 2016), mais cependant été peu explorée dans le domaine des matériaux cimentaires (Gawin et al. 2001)

Un réseau de neurones artificielles est un groupe d'unités de calcul interconnectées, qui transmettent leurs informations en parallèle et par des canaux unidirectionnels. Chaque unité de calcul représente un neurone artificiel, où l'entrée est la somme des informations pondérées reçues des neurones de la couche précédente et une polarisation, et la sortie est le résultat d'une fonction activée appliquée sur l'entrée.

Le Multi-Layer Preceptor (MLP), composé de trois pièces interconnectées, est un type largement utilisé de modèles de réseaux de neurones. La première et la dernière partie du MLP se composent respectivement de la couche d'entrée et de sortie, tandis que la partie centrale est composée d'une ou de plusieurs couches masquées. Le nombre de neurones dans les couches d'entrée et de sortie est spécifié par la géométrie du réseau, tandis que le nombre de neurones intégrés dans les couches masquées est un paramètre à définir par le travail itératif et l'évaluation de la performance. Le réseau neuronal "feed-forward" est l'approche la plus populaire dans le réseau de neurones, représentée par une connectivité complète entre les couches adjacentes et une propagation unidirectionnelle des informations de l'entrée vers la couche de sortie. Lorsqu'un réseau présente des boucles dans sa structure, il est considéré comme un réseau neuronal récurrent.

Dans cette étude, la boîte à outils de réseau neuronal dans Matlab R2015a a été utilisée. Un des défis majeurs dans la construction d'un réseau de neurones efficace, est de choisir l'architecture et les caractéristiques appropriées pour le réseau. Basé sur le théorème de Stone-Weierstrass indiquant qu'un nombre suffisant de neurones dans un réseau à deux couches peut s'approcher de n'importe quelle fonction continue (Haykin 1998 et Hornik et al., 1989), un réseau avec une couche masquée et une couche de sortie qui représente dans notre cas la teneur en eau dans les matériaux est construit. Les fonctions sigmoïde tangente hyperbolique et linéaire ont été choisies pour être respectivement les fonctions de transfert des couches masquées et de sortie du réseau construit. Le reste des paramètres du réseau ont été définis en fonction des résultats obtenus après plusieurs itérations d'entraînement. Le nombre requis de valeurs de sortie du réseau neuronal précédent contribuant au calcul de la valeur de sortie réelle a été trouvé égal à 10 neurones dans la couche masquée, suffisants pour offrir de bons résultats (figure 1).

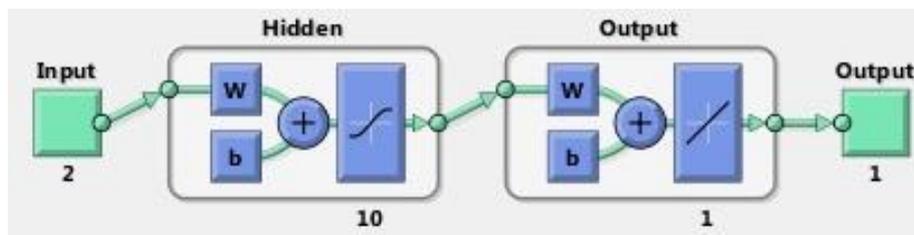


Figure 1. Schématisation du réseau de neurones utilisé, présentant le nombre des données d'entrée et de sortie du modèle.

Etant donné que les réseaux de neurones sont des systèmes capables d'apprendre, ils mettent en oeuvre le principe de l'induction, c'est à dire d'apprentissage par l'expérience. Ce processus d'apprentissage est composé de 3 phases : l'entraînement, le test et la validation. Les données d'entrées sont utilisées dans le processus d'apprentissage, et elles sont également divisées en trois parties différentes. La première, de 70% des données, a été utilisée comme données d'entraînement, où le résultat de la fonction de performance a été calculé par la comparaison de la cible et

de la sortie réseau de cette partie. La deuxième partie définie par 15% de l'ensemble de données a été utilisé comme des données de validation, ayant le pouvoir d'arrêter le processus de formation afin de protéger le système contre le comportement dit "over fitting". La partie finale, soit 15% des mesures, a été consacrée au test du processus de formation et ne participe pas à la phase de formation, ni dans le calcul des résultats ni dans les critères d'arrêt.

Le processus d'entraînement a été appliqué sur les données expérimentales des isothermes de sorption issues de (Houst 1996) pour quatre rapports E/C différents pour des pâtes de ciment non carbonatées. La figure 2-a montre l'évaluation et les changements de performance à travers les étapes de la phase d'entraînement. Les résultats de régression des valeurs de sortie du réseau et des cibles pour les trois parties du processus d'entraînement avec une valeur de régression globale sont présentés dans la figure 2-b.

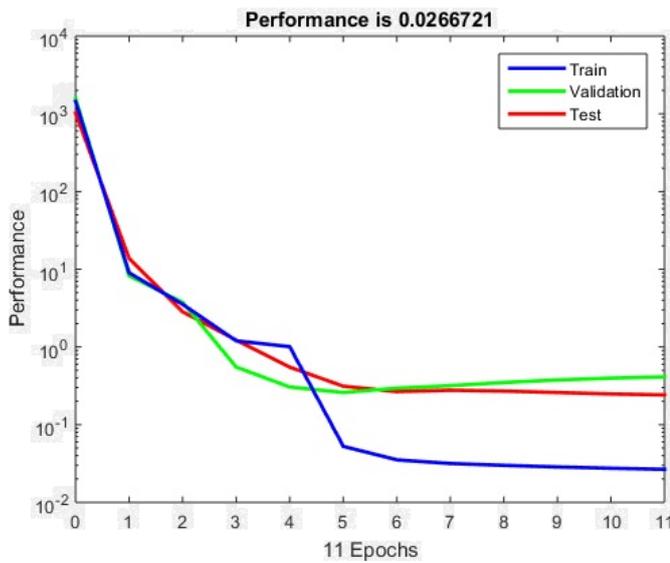


Figure 2-a. Evaluation du rendement par le biais du processus d'apprentissage.

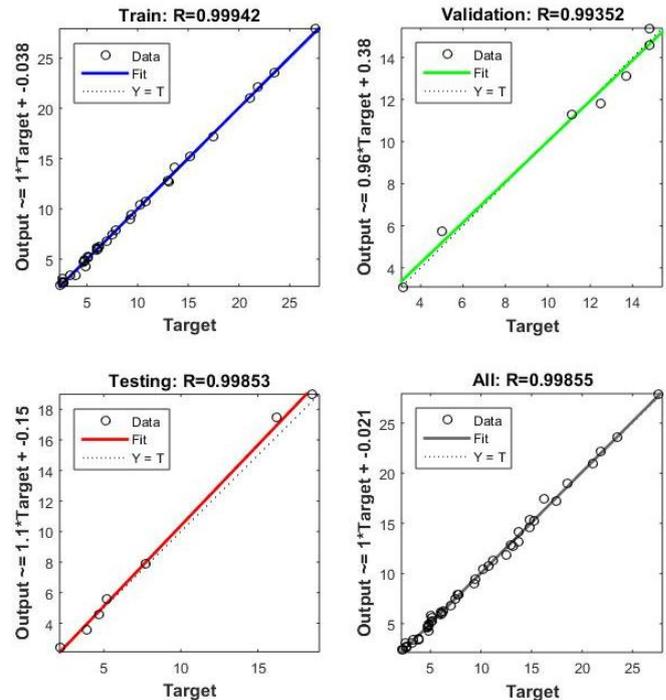


Figure 2-b. Résultats de la régression du réseau de neurones formé.

La figure 2-b montre l'efficacité du réseau construit où une bonne valeur de la régression ($R=0,998$) est obtenue pour l'ensemble des trois parties du processus d'apprentissage, indiquant la capacité du réseau de neurones construit à modéliser ce type de données.

Afin de tester et de vérifier le modèle construit, les valeurs de la teneur en eau ont été calculées par ce modèle pour les rapports E/C (0,3 - 0,4 - 0,5 et 0,8) des données d'entrées et pour 2 autres rapports E/C (0,6 et 0,7) pour lesquels on ne dispose pas de valeurs expérimentales. Les valeurs calculées par le modèle ont été comparés avec les valeurs expérimentales dans la figure 3.

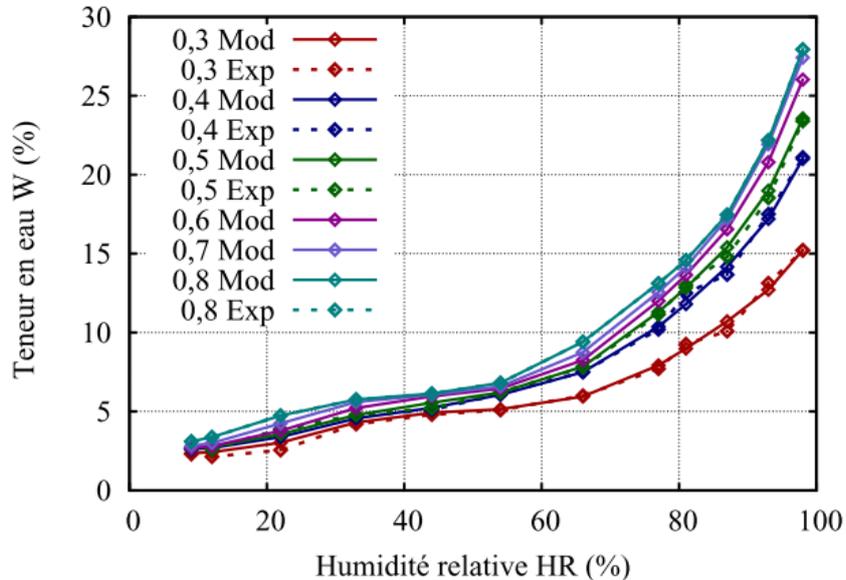


Figure 3. Comparaison des teneurs en eau expérimentales et modélisées par le réseau de neurones pour les différents rapports E/C des pâtes de ciment à base de CEM I.

Les résultats obtenus par le modèle montre une bonne concordance avec les résultats expérimentaux, et confirment ainsi la capacité et l'efficacité de cette méthode à modéliser ce type de donnée. Ces premiers résultats permettent d'envisager la perspective de l'utilisation d'une plus grande base de donnée des isothermes de sorption pour des bétons afin de créer un modèle reposant sur plusieurs paramètres facilement mesurables (composition, caractéristiques mécaniques...) afin d'obtenir les isothermes de sorption à l'aide des réseaux de neurones en s'affranchissant des contraintes des méthodes expérimentales classiques.

Références

- [ARG 16] ARGYROPOULOS D., PARAFOROS D., ALEX R., GRIEPENTROG H., MÜLLER J., NARX Neural Network Modelling of Mushroom Dynamic Vapour Sorption Kinetics, IFAC-PapersOnLine, Volume 49, Issue 16, 2016, Pages 305-310, ISSN 2405-8963.
- [BRU 38] Brunauer S., EMMETT P.H., TELLER E., Adsorption of gases in multimolecular layers, Journal of the American Chemical Society. 60 (1938) 309-319
- [BUR 05] BURLION N., BOURGEOIS F. et SHAO J.F., « Effects of desiccation on mechanical behaviour of concrete », *Cement and Concrete Composites*, vol. 27, n° 3, 2005, p. 367-379.
- [GAW 96] GAWIN D., LEFIK M., SCHREFLER B. A., ANN approach to sorption hysteresis within a coupled hygro-thermo-mechanical FE analysis. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 50: 299–323 (2001).
- [HAY 98] HAYKIN S., *Neural Networks: A Comprehensive Foundation*. Prentice Hall PTR (1998).
- [HOR 89] HOUST Y. F., The role of moisture in the carbonation of cementitious materials, *Internationale Zeitschrift für Bauinstandsetzen*, 2. Jahrgang, Heft 1, (1996), pp. 49-66.
- [HOU 96] HORNİK K., STINCHCOMBE M. and WHITE H., Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks* 2(5), 359-66 (1989).
- [JAN 09] JANJAI S., INTAWEE P., TOHSING K., MAHAYOTHEE B., BALA B. K., ASHRAF M. A., MÜLLER J., Neural network modeling of sorption isotherms of longan (*Dimocarpus longan* Lour.), *Computers and Electronics in Agriculture*, Volume 66, Issue 2, May 2009, Pages 209-214, ISSN 0168-1699.

- [KHA 16] KHADRA M., ROUGELOT T., CARLIER J. P., BURLION N., Etude de l'influence de la carbonatation sur les isothermes de sorption des matériaux cimentaires obtenues par méthode accélérée, Proceeding of RUGC'34, Liège, 24-27 Mai (2016).
- [PAC 96] PACHEPSKY Ya. A., TIMLIN D., VARALLYAY G., Artificial Neural Networks to Estimate Soil Water Retention from Easily Measurable Data. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 60:727-733 (1996).
- [SCH 96] SCHAAP M. G., BOUTEN W., Modeling water retention curves of sandy soils using neural networks *Water Resour. Res.*, 32 (1996), pp. 3033–3040.
- [SCH 98] SCHAAP M. G., LEIJ F. L., VAN GENUCHTEN M. Th., Genuchten Neural network analysis for hierarchical prediction of soil hydraulic properties *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 62 (1998), pp. 847–855.
- [VAN 80] Van Genuchten M. T., A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, *Soil, Science Society of America Journal.* 44 (1980) 892–898.