Modélisation de la thermo-hydratation, du séchage et du retrait du béton

Résumé

On décrit ici deux types de phénomènes se produisant à des périodes distinctes de la vie d'un béton :

- d'une part une réaction de thermo-hydratation engendrant un retrait dit endogène, se manifestant au jeune âge du béton (les 100 premiers jours),
- d'autre part une évaporation d'une partie de l'eau non utilisée dans le processus d'hydratation, phénomène appelé séchage et entraînant un retrait de dessiccation. Ce phénomène peut durer, suivant les dimensions de la structure de béton mis en œuvre, de quelques mois à plusieurs années.

Ces phénomènes sont modélisés dans *Code_Aster* sous forme d'équations de diffusion dont la solution est représentée par de nouvelles variables permettant de calculer directement les déformations du retrait endogène (du à l'hydratation) et du retrait de dessiccation (du au séchage).

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Table des matières

Table des Matières

1 Introduction....3
1.1 Aspects phénoménologiques du comportement du béton au jeune âge : la thermo-hydratation. .3
1.2 Séchage et retrait de dessiccation....4
2 Formalisation de la thermo-hydratation....5
2.1 Équation de la thermo-hydratation....5
2.2 Exploitation de l'essai adiabatique pour la détermination de la fonction affinité et de la chaleur d'hydratation....5
3 Discrétisation du problème de thermo-hydratation....7
3.1 Choix de la méthode de résolution....7
3.2 Algorithme de résolution....7
4 Formalisation du séchage....8
4.1 Modélisation et équations du séchage....8
4.2 Coefficient de diffusion....9
4.3 Lois de diffusion usuelles....10
4.4 Modélisation des conditions aux limites....10
5 Intégration du séchage dans Code_Aster....11
5.1 Introduction de la notion de comportement dans l'opérateur de thermique non linéaire....11
5.2 Mise en œuvre des conditions aux limites pour le séchage....12
5.2.1 Expression des conditions aux limites....12
5.2.2 Délimitation du calcul du séchage à l'aide des conditions aux limites....12
5.2.3 Mise en œuvre dans Aster....12
5.2.4 Exemple de mise en forme des conditions aux limites....12
5.3 Intégration numérique du séchage....13
6 Formalisation du retrait endogène et de dessiccation....14
6.1 Retrait dans Code_Aster....14
6.2 Intégration du retrait dans les loi de comportement mécaniques....14
6.3 Matrice tangente....15
7 Bibliographie....15
Description des versions du document....16

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

1 Introduction

Le comportement du béton, matériau fragile en extension, hétérogène et poreux est régi par de nombreux et complexes phénomènes physico-chimiques. Les pertes de précontraintes induites par le comportement différé du béton (retrait et fluage) réduisent au cours du temps le domaine de chargement que peut supporter la structure. Ces déformations différées qui apparaissent dans le béton au cours de la vie de celui-ci, sont composées par le retrait au jeune âge (retrait endogène spécifique à l'hydratation et retrait thermique), par le retrait de dessiccation avec la modélisation du séchage, et dès qu'il subit des contraintes, par le fluage propre et le fluage de dessiccation.

Dans les règles de dimensionnement, les déformations différées du béton sont basées généralement sur des règles empiriques calées sur un grand nombre de résultats issus de la littérature, prenant en compte les principaux paramètres, comme la température, l'humidité, la teneur en granulat, la proportion eau/ciment. La cinétique des phénomènes utilise des temps équivalents calculés à l'aide d'une loi d'Arrhenius pour prendre en compte le vieillissement et la température.

Une analyse fine des phénomènes physico-chimiques qui sont à l'origine des différentes déformations différées du béton permet de proposer une modélisation sur la base d'un modèle de type milieu continu équivalent [bib2], qui a été introduite dans *Code_Aster* (le fluage propre et le fluage de dessiccation ne sont pas traités ici).

1.1 Aspects phénoménologiques du comportement du béton au jeune âge : la thermo-hydratation

On définit le jeune âge comme les 100 premiers jours de la vie du béton. Le retrait endogène ou retrait d'hydratation, et le retrait thermique interviennent dès les premiers instants de la prise (au jeune âge), pour une durée allant de quelques heures à quelques jours, pour le retrait thermique, et de quelques mois à un an, pour le retrait d'hydratation, en général terminés lors de la mise en précontrainte. Des phénomènes de retraits empêchés ou de retraits différentiels, sous coffrage, peuvent être à l'origine de contraintes ou de fissures qu'il faut évaluer. En phase liquide, le béton est un fluide visqueux dans lequel les grains solides sont en suspension dans le liant hydraulique contenant des particules solides (ciments...). A la suite de la formation des premiers hydrates, intervient la prise du béton, une dizaine d'heures après sa fabrication, qui correspond à l'établissement de ponts hydrates connexes entre les grains de ciments dans la totalité du matériau. Au tout début, les grains sont relativement dispersés dans l'eau de gâchage. Au cours du temps, l'hydratation des grains de ciment s'accompagne d'une consommation de cette eau de gâchage. Expérimentalement, on constate que le bilan volumique de la réaction est négatif; c'est la contraction de Le Chatelier. Dit simplement, le volume total des hydrates est inférieur de près de 10% au volume total de ces constituants. Mécaniquement, à l'échelle des grains de ciments, le phénomène s'arrête lorsque les ponts d'hydrates formés entre les grains sont suffisamment rigides pour empêcher un éventuel rapprochement relatif des grains. Les conséquences macroscopiques sur les ouvrages sont pratiquement inexistantes puisque dans toute la durée de cette phase, le béton est encore déformable, et que toute contraction est compensée par un réajustement granulaire du matériau contre les parois du coffrage. Bien que d'ampleur relativement faible, et d'effet mécanique insuffisant pour engendrer une réelle fissuration du béton, les contraintes générées à l'interface de deux levées consécutives peuvent entamer de 50% la marge de résistance en traction du matériau.

La prise du béton accompagnée de l'hydratation du ciment entraîne une réaction exothermique. Dans des structures massives la température peut alors s'élever à plus de $50\,°C$. L'hydratation est une réaction thermo-activée, c'est-à-dire que la vitesse d'hydratation augmente avec la température. Quand la vitesse d'hydratation décroît, la température diminue, entraînant un retrait thermique. De plus les propriétés mécaniques du béton varient en fonction de son degré d'hydratation, et enfin la consommation d'eau se produisant lors de l'hydratation entraîne un retrait capillaire. Les différents retraits peuvent provoquer des contraintes très supérieures à la résistance (faible) en traction du béton et amener à une fissuration du matériau.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Le calcul des champs de température et de degré d'hydratation est disponible avec la commande THER_NON_LINE (cf. [U4.30.02]). Le calcul des champs mécaniques prenant en compte le retrait endogène est effectué avec la commande STAT_NON_LINE.

1.2 Séchage et retrait de dessiccation

Modéliser le séchage est important du fait que les propriétés physico-chimiques et mécaniques du matériau sont fortement dépendantes de l'humidité à l'intérieur de ce dernier. L'objectif est de proposer une modélisation macroscopique du séchage du béton à partir d'un nombre restreint de paramètres, facilement mesurables expérimentalement, à partir d'une loi de diffusion transitoire non linéaire de l'humidité, chaînée à la température, en s'affranchissant des complexes couplages mécaniques, physiques et chimiques, à l'échelle du matériau.

Au décoffrage, le béton est plongé dans une ambiance extérieure qui présente en général un degré d'humidité de l'ordre de 60 à 80 % HR (humidité relative = rapport de la pression de vapeur sur la pression de vapeur saturante pour une température donnée). Il subit alors un véritable choc hydrique (par analogie à un choc thermique). Le béton est alors en déséquilibre thermodynamique avec l'atmosphère. Le séchage va lui permettre de retrouver un équilibre hydrique avec le milieu extérieur.
Physiquement, le séchage met en jeu des phénomènes complexes intimement couplés les uns aux autres, dépendant de la structure hétérogène et granulaire du béton. A l'échelle macroscopique, il est possible [bib2] de modéliser le séchage comme un phénomène de diffusion non linéaire, avec diffusion en phase liquide de type **Darcy**, tant qu'il y a continuité de la phase liquide, et avec diffusion en phase gazeuse de type **Fick**, pour la vapeur d'eau.

Le retrait de dessiccation est la conséquence macroscopique première du séchage du béton. Il est la prolongation directe des phénomènes de tension capillaire qui sont à l'origine du retrait endogène. Par son intensité, les déformations étant de l'ordre de 400.10^{-6} à 800.10^{-6} pour 50% d'hygrométrie et pour des bétons courants, il est d'une à trois fois plus important que la déformation élastique pour un chargement voisin de $10\,MPa$.

On présente dans un premier temps la modélisation de la thermo-hydratation dans l'opérateur de thermique non linéaire de *Code_Aster,* puis la modélisation du séchage, et enfin, l'introduction du retrait endogène et du retrait de dessiccation dans l'opérateur de mécanique non linéaire.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2 Formalisation de la thermo-hydratation

2.1 Équation de la thermo-hydratation

Comme mentionné dans l'introduction, l'hydratation du béton est une réaction fortement exothermique. Sa prise en compte dans l'équation de la chaleur en tant que **terme source** est donc nécessaire (voir [R5.02.02]). Le second membre qui contient les sources internes de chaleur peut alors être enrichi de la façon suivante [1] :

$$\left.\begin{aligned}\rho C_p \frac{dT}{dt} + \operatorname{div} \mathbf{q} = Q\frac{d\xi}{dt} + s \\ \mathbf{q} = -\lambda \operatorname{grad} T\end{aligned}\right\} \quad \text{éq 2.1-1}$$

où :

- $\mathbf{q}$ est le flux de chaleur,
- s est une source interne de chaleur (en $J/s\cdot m^3$),
- ρC_p est la chaleur volumique à pression constante (en $J/m^3\cdot K$),
- λ est la conductivité thermique ($W/m^2\cdot K$),

et spécifiquement à l'hydratation :

- ξ est le degré d'hydratation, par définition $\xi\in[0;1]$;
- Q est la chaleur d'hydratation (en J/m^3), soit la chaleur produite par l'hydratation d'une unité volumique de béton.

L'évolution de l'hydratation dépend de la composition du béton et de la température, une température élevée accélère la réaction d'hydratation.

L'équation [2.1-1] peut être résolue si la fonction $\xi(t,T)$, et donc $\frac{d\xi}{dt}(t,T)$, est connue.

Dans *Code_Aster* on préfère paramètre $d\xi/dt$ par rapport à l'hydratation elle-même, et on élimine ainsi le temps t . La fonction correspondante est appelée **affinité** dans *Code_Aster* :

$$\frac{d\xi}{dt} := AFF(\xi, T) \quad \text{éq 2.1-2}$$

Dans *Code_Aster*, la chaleur d'hydratation Q et la fonction $AFF(\xi,T)$ doivent être renseignées par l'utilisateur sous le mot-clé `THER_HYDR` de `DEFI_MATERIAU` (voir [U4.43.01]). Leur détermination expérimentale se fait à l'aide d'un essai adiabatique (voir [§2.2]).

2.2 Exploitation de l'essai adiabatique pour la détermination de la fonction affinité et de la chaleur d'hydratation.

Dans un essai adiabatique, un échantillon de béton frais et thermiquement isolé est plongé dans un calorimètre et on mesure l'évolution de la température $T^{ad}(t)$ au cours du temps jusqu'à durcissement.

1. ***Remarque*** *: dans le cadre de la thermique non linéaire [R5.02.02], la première des équations 2.1-1 est souvent écrite dans la forme équivalente :* $\frac{d\beta(T)}{dt} + \operatorname{div}\mathbf{q} = Q\frac{d\xi(T)}{dt} + s$, β *étant l'enthalpie volumique. En effet, dans le fichier de commande Code_Aster il est nécessaire de renseigner l'enthalpie et non la chaleur volumique, voir [R5.02.02].*

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Cet essai peut être utilisé pour déterminer la chaleur d'hydratation ainsi que la fonction affinité. En effet, en adiabatique [2.1-1] se simplifie car $\mathrm{div}\,\mathbf{q}=0$. De plus, $s=0$ car on considère que la seule source de chaleur est l'hydratation du béton. L' intégration de [2.2-1] du début ($\xi=0$) au degré d'hydratation ξ donne alors l'expression :

$$Q\xi\left(T^{ad}(t)\right)=\rho C_p\left(T^{ad}(t)-T_0\right) \qquad \text{éq 2.2-1}$$

Si dans [2.2-1], on fait l'hypothèse que $\xi=1$ (fin de l'essai), on obtient la chaleur d'hydratation :

$$Q=\rho C_p\left(T_\infty^{ad}-T_0\right) \qquad \text{éq 2.2-2}$$

où $T_{0,}T_\infty^{ad}$ sont les températures mesurées au début et à la fin de l'essai adiabatique .

En remplaçant dans [2.2-1] l'expression de la chaleur d'hydratation [2.2-2], on obtient l'évolution de l'hydratation (et donc de sa dérivée $d\xi/dt$), sous la forme :

$$\xi\left(T^{ad}(t)\right)=\frac{T^{ad}(t)-T_0}{T_\infty^{ad}-T_0} \qquad \text{éq 2.2-3}$$

L'essai adiabatique fournit donc les fonctions $\xi\left(T^{ad}\right)$ et $T^{ad}(t)$. Les paramètres de la fonction affinité $AFF\left(T,\xi\right)$ peuvent être identifiés à partir des points des mesures obtenus lors de l'essai adiabatique, $AFF\left(T^{ad},\xi^{ad}\right)$.

Une expression de $AFF\left(T,\xi\right)$ a été suggéré par [Bib.2] sous forme d'exponentielle de la température :

$$\frac{d\xi}{dt}=AFF(\xi,T)=A(\xi)\exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \qquad \text{éq 2.2-4}$$

où E_a/R est la constante d'Arrhenius (paramètre assez empirique variant entre $4000\,°K$ et $7000\,°K$, et considéré comme étant égale à $4000\,°K$ en l'absence d'information supplémentaire). Pour l'essai adiabatique on a alors :

$$A\left(T^{ad}\left(\xi\right)\right)=\frac{1}{T_\infty^{ad}-T_0}\frac{dT^{ad}}{dt}\left(T^{ad}\left(\xi\right)\right)\cdot\exp\left(\frac{E_a}{RT^{ad}(\xi)}\right) \qquad \text{éq 2.2-5}$$

où les fonctions inverses ξ^{-1} , $\left(T^{ad}\right)^{-1}$ ont été utilisées pour éliminer le paramètre temps t .

Remarque : [*2.2-3] peut aussi être écrite de la façon suivante :*

$$\xi(t)=\frac{T^{ad}(t)-T_0}{T_\infty^{ad}-T_0}=\frac{Q\left(T(t)\right)}{Q\left(T_\infty\right)} \qquad \textit{éq 2.2-6}$$

En fait, on peut définir d'une manière générale le degré d'hydratation à chaque instant t comme étant le rapport de la quantité de chaleur dégagée jusqu'à l'instant t sur la quantité de chaleur totale dégagée à la fin du processus d'hydratation.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

3 Discrétisation du problème de thermo-hydratation

3.1 Choix de la méthode de résolution

La méthode choisie consiste à résoudre globalement l'équation non linéaire [2.1-1] en mettant à profit l'algorithme de thermique non linéaire de *Code_Aster* et résoudre localement l'équation [2.2-4] qui représente la loi d'évolution d'une sorte de variable interne représentant le degré d'hydratation, cette loi s'exprimant par une fonction de l'état thermique du système. En effet, il n'y a pas d'opérateur différentiel en espace pour la variable ξ dans les équations et donc pas besoin d'élément fini. La relation [2.2-4] représente une loi locale comme en plasticité. On conserve alors le même nombre de degrés de liberté que pour la thermique classique. Un tel processus découplé entraîne néanmoins le calcul des mêmes quantités plusieurs fois. En effet, supposons que ξ soit discrétisé aux nœuds des éléments. Considérons l'exemple schématisé par la [Figure 3.1-1].

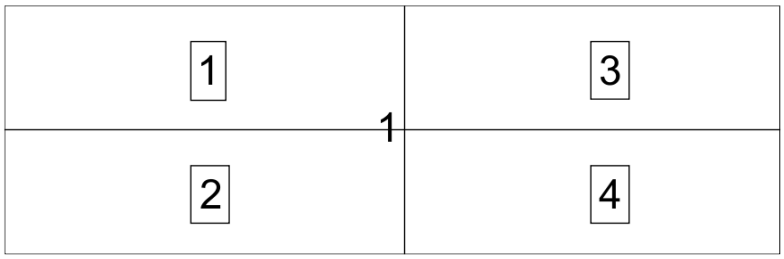


Figure 3.1-1

Sur le nœud **1**, l'équation d'évolution [2.2-4] sera intégrée quatre fois. Une solution possible aurait été que les calculs locaux puissent se faire sur des champs aux nœuds (concept Aster CHAM_NO) et non sur des champs de nœuds par élément (concept Aster CHAM_ELEM, option ELNO), ce qui est actuellement impossible.
La solution qui a finalement été adoptée, consiste à calculer ξ aux points de gauss de l'élément, ce qui est d'autant plus naturel que pour le calcul mécanique le module de Young dépend explicitement de ξ. Ceci engendre néanmoins beaucoup de calculs locaux sauf à sous-intégrer fortement l'élément fini. Par exemple, si l'on considère un maillage comportant N éléments hexaédriques à 20 nœuds, il existe à peu près $4\mathrm{N}$ nœuds et $27\mathrm{N}$ points de Gauss.

3.2 Algorithme de résolution

La formulation faible de l'équation [2.1-1] s'écrit de la façon suivante :

$$\int_\Omega \dot{\beta}(T)\cdot T^* d\Omega + \int_\Omega \lambda(T)\nabla T\cdot\nabla T^* d\Omega = \int_\Omega s\cdot T^* d\Omega + \int_\Omega Q A(\xi) e^{-\frac{E_a}{RT}}\cdot T^* d\Omega + \int_\Gamma \Phi\cdot T^* d\Gamma \qquad \text{éq 3.2-1}$$

$$\forall T^*$$

Le développement de la thermo-hydratation au sein de l'algorithme général de la thermique non linéaire dans *Code_Aster* consiste donc à discrétiser de manière explicite dans le second membre le terme $\int_\Omega Q A(\xi) e^{-\frac{E_a}{RT}}\cdot T^* d\Omega$.
En notant respectivement ξ^-, T^-, ξ^+, T^+ , les variables d'hydratation et de température au début et à la fin du pas de temps, on calcule en chaque point de Gauss la quantité :

$$Q A(\xi^-) e^{-\frac{E_a}{RT^-}}$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

qui est intégrée directement dans le second membre. Après chaque résolution du pas courant, les variables sont réactualisées $(\xi^+=\xi^-, T^+=T^-)$. Le test de convergence n'est actif que sur la température, la variable ξ n'entrant pas dans le processus itératif de Newton utilisé dans la thermique non linéaire. La prise en compte de l'hydratation n'est en fait que la prise en compte d'une source de chaleur connue au début du pas de temps. Cette discrétisation purement explicite nécessite donc d'utiliser des pas de temps suffisamment petits.

4 Formalisation du séchage

Cette partie fait référence au document de spécification du développement du séchage dans *Code_Aster* [Bib.3] , ainsi qu'à la thèse de L. Granger [Bib.2] .

4.1 Modélisation et équations du séchage

Les modélisations de la thermique ou de la thermo-hydratation et du séchage sont découplées lors de la résolution. Le séchage est alors présenté comme une opération chaînée à la thermique. Comme les équations permettant de résoudre le séchage et la thermique non linéaire sont semblables aux coefficients près, ce découplage permet d'intégrer la résolution du calcul du séchage dans *Code_Aster*, en utilisant directement le module de résolution de la thermique non linéaire, sans ajouter de nouveaux phénomènes, de nouveaux types d'éléments ni de nouvelles options de calcul, et en minimisant ainsi le volume de code ajouté et dupliqué.

La concentration ou teneur en eau C, variable de calcul dans la modélisation du séchage, est assimilée, en terme de type de variable, à une température (type `TEMP`). Le champ de température transitoire, intervenant dans l'équation du séchage, est uniquement un paramètre auxiliaire dont dépend éventuellement le coefficient de diffusion.

Les phénomènes de thermique et de séchage, dans le cadre d'une modélisation découplée entre la thermique et le séchage, sont régis par les équations suivantes :

- équation de la thermique "classique":

$$\left.\begin{aligned} \rho C_p \frac{dT}{dt} + \operatorname{div}\mathbf{q} &= Q\frac{d\xi(T)}{dt} + s(T) \\ \mathbf{q} &= -\lambda(T)\operatorname{grad} T \end{aligned}\right\} \qquad \text{éq 4.1-1}$$

  (ρC_p la chaleur volumique à pression constante, λ, la conductivité thermique, Q la chaleur d'hydratation et s la source interne).

- équation caractérisant le séchage :

$$\frac{\partial C}{\partial t} - Div\left[D(C,T)\nabla C\right] = 0 \qquad \text{éq 4.1-2}$$

  où C (m^3/m^3 ou l/m^3) est la variable de calcul (concentration ou teneur en eau volumiques),
  T est la variable d'entrée du calcul (la température), variable auxiliaire de la résolution du séchage,
  D (m^2/s) est un coefficient de diffusion, caractérisant la non linéarité de l'équation, et dépendant à la fois de la variable de calcul, C, et de la variable auxiliaire, T. Cette loi de diffusion est donnée sous diverses formes, selon le modèle retenu, (loi de **Bazant**, loi de **Granger,** loi de **Mensi**, cf. [§4.3] et [bib2]).

Les équations [éq 4.1-1] et [éq 4.1-2] correspondent à un calcul chaîné thermique/séchage. On peut donc calculer T sans connaître la concentration en eau, puis calculer cette dernière, pour laquelle T est alors un paramètre, (en faisant l'hypothèse que la conductivité thermique λ ne dépend pas

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

de la concentration en eau C). Notons aussi que le phénomène de séchage est découplé des évolutions mécaniques du béton.

4.2 Coefficient de diffusion

Le matériau est décrit par le coefficient de diffusion D , caractéristique du matériau, dépendant à la fois de la température T et de la concentration en eau C . L'équation de la migration de l'humidité dans le béton est issue de celles de la mécanique des milieux poreux. On se reportera à [bib2] pour plus de précision. Classiquement, une loi de diffusion exprime un flux comme le produit d'une grandeur caractéristique du matériau par le gradient d'une grandeur intensive. Les différentes grandeurs considérées sont définies par une moyenne sur le volume élémentaire représentatif, pour autant qu'on puisse définir cette moyenne pour le matériau considéré, de telle sorte que les opérateurs de dérivation aient un sens. On fait donc en général l'hypothèse qui consiste à supposer que les phases liquide et gazeuse sont connexes :

- pour la diffusion de la vapeur, on part de la positivité de la dissipation associée au transport de la phase gazeuse, en différentiant deux phénomènes, un phénomène de type perméation (**Darcy**), lié à des gradients de pression, et un phénomène de type diffusion (**Fick**), lié aux gradients de concentration,
- pour la diffusion de l'eau liquide, la positivité de la dissipation associée au transport de l'eau liquide, et à la loi de **Darcy**, permet d'exprimer le flux de liquide en fonction de la pression du liquide. La loi de **Kelvin** décrivant la coexistence des deux phases liquide et gazeuse par l'écriture de l'égalité des enthalpies libres massiques conduit à l'expression du flux en fonction du gradient du degré d'humidité.

Des deux résultats précédents, on obtient l'expression du flux total en fonction du gradient du degré de concentration en eau. Les méthodes expérimentales classiques dans les problèmes de séchage donnent généralement accès à la concentration en eau, et très rarement à l'humidité relative. Il est donc préférable d'exprimer le flux en fonction de la teneur en eau, C , et l'humidité relative, h . L'humidité relative est le rapport entre pression de vapeur et pression de vapeur saturante.
Le postulat de l'état local stipule que l'état actuel d'un système homogène en évolution quelconque peut être caractérisé par les mêmes variables qu'à l'équilibre, et qu'il est indépendant des vitesses d'évolution. En d'autres termes, la teneur en eau C , et l'humidité relative h , sont bien reliées par la même relation qu'à l'équilibre. Ce qui conduit à l'équation classique de la diffusion :

$$\frac{\partial C}{\partial t} - Div\left[D\left(C,T\right)\nabla C\right]=0 \qquad \text{éq 4.2-1}$$

Cette équation met en évidence le caractère non linéaire de la diffusion de l'humidité dans le béton. Dans les cas industriels, la température n'est en général pas uniforme dans la structure. Il est donc nécessaire de prendre en compte un coefficient de diffusion de l'humidité qui dépende de la température. En pratique, dans la littérature, les auteurs les plus connus (**Bazant** cf [bib2]) proposent une expression du coefficient de diffusion du type :

$$D\left(C,T\right)=D\left(C,T_0\right)\left(\frac{T}{T_0}\right)e^{\left(\frac{-Q_s}{R}\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{T_0}\right)\right)} \qquad \text{éq 4.2-2}$$

avec $Q_s/R=4700\,K^{-1}$ et T en $°K$ [2]

Remarque :

De la façon dont les choses sont présentées, il semblerait que l'on n'ait pas utilisé le fait que le séchage est un phénomène couplé avec la mécanique, (c'est-à-dire qu'il est la cause d'un retrait de dessiccation). En réalité, nous avons fait l'hypothèse d'un découplage des phénomènes, lorsque nous avons utilisé la courbe de sorption/désorption. En fait, lors de la mesure de la perte en poids à l'équilibre en fonction de h, le corps d'épreuve réalise un

2 La température est entrée en degré Celsius dans la mise en données. La conversion en degré Kelvin est faite dans les sources.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

retrait. Au niveau microscopique, tout se passe comme si le retrait, modifiant la porosité, allait interagir sur l'hygrométrie relative à l'intérieur de l'échantillon, puisque la pression de la vapeur et h augmentent. Ce retrait de dessiccation étant très faible, il est habituel de le négliger dans les calculs de la teneur en eau. Il n'y a donc qu'un chaînage entre le calcul de la teneur en eau et le calcul mécanique de retrait de dessiccation.

4.3 Lois de diffusion usuelles

La loi de diffusion, fonction des deux paramètres, C et T, peut être définie librement par l'utilisateur sous forme d'une nappe. Cependant, les expressions usuelles de la loi de diffusion, que l'on trouve dans la littérature sont les suivantes :

Loi proposée par Granger :

$$D(C,T)=A.e^{(B.C)}\left(\frac{T}{T_0}\right)e^{\left(\frac{-Q_s}{R}\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{T_0}\right)\right)} \qquad \text{éq 4.3-1}$$

$A(m^2/s)$, B, T_0, Q_s, et R (Qs/R en $°K$) sont des coefficients choisis par l'utilisateur. D est fonction de la température et de la concentration en eau.

Loi de Mensi :

$$D(C)=A.e^{(B.C)} \qquad \text{éq 4.3-2}$$

A et B sont des coefficients choisis par l'utilisateur. D est fonction uniquement de la concentration en eau.

Loi de Bazant :

La loi de Bazant s'exprime à partir du degré d'humidité h, qui est relié à la concentration en eau par la courbe de sorption/désorption. La forme de cette loi est la suivante :

$$D(h)=D_1\left(\alpha+\frac{1-\alpha}{1+\left(\frac{1-h(C)}{1-0.75}\right)^n}\right) \qquad \text{éq 4.3-3}$$

Usuellement, $D_1=3.10^{-10}m^2/s$

α est compris entre 0.025 et 0.1,

n est de l'ordre de 6.

$h(C)$ est le degré d'humidité, qui s'exprime en fonction de la concentration en eau à l'aide de la courbe de sorption/désorption.

La courbe de sorption/désorption peut être introduite sous forme d'une fonction standard tabulée, sachant qu'en réalité, cette courbe présente une hystérésis, mais peut être considérée comme étant inversible, si l'on ne tient compte que d'un seul sens de parcours.

4.4 Modélisation des conditions aux limites

Les conditions aux limites s'expriment en général par une relation non linéaire entre le flux de concentration en eau ($l/m^3\times ms^{-1}$) w^{fl} et la concentration en eau. Ces conditions sont donc analogues aux conditions dites d'échange en thermique. On pourra par exemple utiliser la formule proposée par L. Granger [bib2] page 181 :
Son expression est la suivante :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$w^{fl}=\frac{0.5\beta}{\left(C_0-C_{eq}\right)^2}\left[C-\left(2.C_0-C_{eq}\right)\right]\left(C-C_{eq}\right) \qquad \text{éq 4.4-1}$$

où C_{eq} est la concentration en eau pour une humidité de 50%HR,

C_0 est la concentration en eau pour une humidité de 100%HR,

β ($l/m^3\times m/s$) est un coefficient, qui peut être défini expérimentalement et peut évoluer suivant la fissuration de la surface d'échange ([bib2]),

et C est la concentration courante (inconnue) sur les surfaces d'échange.

5 Intégration du séchage dans *Code_Aster*

Ces développements concernent les éléments 2D et les éléments axisymétriques, ainsi que les éléments 3D isoparamétriques, de nombre de noeuds quelconque, linéaires et quadratiques.

5.1 Introduction de la notion de comportement dans l'opérateur de thermique non linéaire

L'opérateur THER_NON_LINE était réservé exclusivement à la thermique non linéaire, qui demeurera **l'option de calcul par défaut**. Mais on utilise le même module de résolution pour résoudre les problèmes de séchage et d'hydratation, du fait de l'analogie des équations.

La notion de comportement a été ajoutée dans l'opérateur de thermique non linéaire, avec une nomenclature et une syntaxe analogues à celles de l'opérateur de mécanique non linéaire. Elle implique pour le séchage une notion d'entité topologique, sur laquelle est appliqué ce comportement. Ceci peut être utile, lorsqu'il y a plusieurs types de lois de diffusion possibles, ou lorsque l'on veut faire un calcul purement thermique sur une partie du maillage, alors que sur une autre partie on fait un calcul de thermo-hydratation (par contre, l'utilisation simultanée sur un même maillage de comportements de type séchage, et de comportements de type thermique ou hydratation n'aurait pas de sens).

Un comportement 'séchage' est associé à chacune des lois de diffusion, telles qu'on peut les trouver dans la littérature, de même qu'un matériau spécifique est associé à chacune des lois de diffusion, pour en définir les coefficients caractéristiques. La résolution du séchage est identique, aux coefficients près, à celle de la thermique non linéaire, et aucune modification n'a été apportée à l'algorithme de résolution.

Pour le séchage, quatre comportements distincts sont définis sous les mot-clés 'SECH_GRANGER', 'SECH_BAZANT', 'SECH_MENSI', ou 'SECH_NAPPE', pour caractériser chacune des lois de diffusion possible. Ils peuvent être attribués à des parties complémentaires du maillage, au cours d'un même calcul. La définition simultanée de plusieurs comportements 'séchage' associés à des entités topologiques différentes nécessite plusieurs occurrences du mot-clé 'COMPORTEMENT'. Alors, l'entité topologique devra être identifiée en renseignant l'un des mot-clés GROUP_MA ou MAILLE.
En parallèle des quatre comportements 'séchage', dans l'opérateur DEFI_MATERIAU, quatre matériaux permettent dans un premier temps de définir les valeurs des coefficients des lois de diffusion, fonctions non linéaires de la teneur en eau et de la température. L'utilisateur peut choisir la (ou les) loi(s) de son choix, et définit la valeur qu'il souhaite pour chacun de ces coefficients.
Le mot clé SECH_GRANGER permet de définir la loi de diffusion de l'eau liquide et gazeuse sous sa forme la plus classique parmi les expressions de la littérature. Quatre coefficients ainsi qu'une température de référence T_0 caractérisent cette loi.
Les mots clés SECH_MENSI et SECH_BAZANT permettent de définir les lois de **Mensi** et **Bazant**, à l'aide des coefficients qui conviennent. La loi de **Bazant**, s'exprimant à partir du degré d'humidité, nécessite de définir une courbe de désorption permettant de convertir la teneur en eau en degré d'humidité dans le cadre de cette modélisation.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Enfin, le mot clé SECH_NAPPE permet d'utiliser une loi de diffusion, à partir d'une fonction tabulée de deux variables, qui sera interpolée dans les calculs à partir des valeurs de la concentration en eau et de la température. Cette dernière possibilité présente l'inconvénient de ne pas lever l'ambiguïté entre ces deux variables associées à un type identique, 'TEMP'.

Il est nécessaire, pour le séchage, d'introduire en entrée du calcul un concept de type [evol_ther], représentant l'évolution du champ de température de la structure en béton, dans le cadre d'un calcul chaîné thermique/séchage. En effet, le calcul du séchage nécessite le calcul préliminaire de la température et éventuellement de l'hydratation, car le coefficient de diffusion $D(C,T)$ dépend de la température.

5.2 Mise en œuvre des conditions aux limites pour le séchage

5.2.1 Expression des conditions aux limites

Les conditions aux limites s'expriment sous forme de flux d'humidité sur les surfaces en contact avec le milieu extérieur suivant l'expression [éq 4.4-1].

5.2.2 Délimitation du calcul du séchage à l'aide des conditions aux limites

Le calcul du séchage est défini sur la totalité du maillage où sont affectés des éléments finis. Pour ne rendre effectif le calcul du séchage que sur une portion du maillage (ceci dans le but de conserver le même modèle pour les calculs de séchage et pour les calculs mécaniques et de faciliter les "poursuites" de calcul Aster [bib4]), on utilisera les conditions aux limites. En effet, le séchage n'a lieu que s'il y a échange avec l'extérieur. C'est donc l'attribution des conditions aux limites qui permet de "localiser" le calcul. L'absence de séchage sur une portion de la structure s'exprimera par l'absence de conditions aux limites sur les surfaces d'échange concernées.

5.2.3 Mise en œuvre dans Aster

Les conditions aux limites peuvent être définies, comme en thermique, sous forme de flux normal non linéaire formulé à partir d'une fonction tabulée de la variable de calcul, et interpolée lors des calculs. Cela permet d'éviter de créer de nouvelles options de calcul, analogues aux options de thermique non linéaire char_ther_flunl et resi_ther_fluxnl qui calculent le premier et le second membre, et qui peuvent être utilisées directement pour le séchage. Il suffit alors de choisir une fonction tabulée correspondant à l'expression du flux, donnée par l'équation [éq 4.4-1].
A l'aide d'une fonction prédéfinie (FORMULE), l'expression du flux, donnée sous forme polynômiale et fonction de la variable de calcul, est transformée en courbe tabulée, par l'intermédiaire des opérateurs Aster (CALC_FONC_INTERP). On ne crée donc pas de nouvelle option de calcul pour le traitement des conditions aux limites.

Le calcul de nouvelles options aurait l'avantage d'être optimal en terme de résultat (du fait de l'absence d'interpolations et du fait des calculs de dérivées "exacts"), mais nécessiterait de développer deux nouvelles options de calcul, similaires aux options char_ther_flunl et resi_ther_fluxnl.

5.2.4 Exemple de mise en forme des conditions aux limites

L'enchaînement de commandes, décrit dans l'exemple qui suit (issu du test HSNA100 [V7.20.100] met en œuvre la création d'une condition aux limites CHARSE05 sur un groupe de mailles L_INT.

Remarque :

La 'FORMULE' Aster est l'expression numérique du flux normal de concentration en eau qui reprend l'équation [éq 4.4-1].

```
BETA=3.41557E-08
C_0=105.7
C_EQ_I05=69.1
```


Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

```
C_EQ_E05=69.1
C_EQ_I10=51.6
C_EQ_E10=69.1

FL_INT05 = FORMULE(NOM_PARA='TEMP',
           VALE='''(0.5*BETA / ((C_0 - C_EQ_I05 )**2)
           * (TEMP - (2.*C_0 - C_EQ_I05 ))*(TEMP - C_EQ_I05 ))''')

LIST0=DEFI_LIST_REEL(DEBUT=0.,INTERVALLE=(_F(JUSQU_A = 200.,PAS = 10.)))

HU_INT05=CALC_FONC_INTERP(     FONCTION=FL_INT05,
            LIST_PARA=LIST0,NOM_PARA = 'TEMP', NOM_RESU='FL_INT05',
            PROL_GAUCHE='LINEAIRE',  PROL_DROITE='LINEAIRE',
          INTERPOL='LIN', TITRE='FLUX D HUMIDITE'     )

CHARSE05=AFFE_CHAR_THER_F(MODELE=MOTH,
                     FLUX_NL=_F(  GROUP_MA = 'L_INT', FLUN = HU_INT05))
```

Remarque :

Il est important que la fonction interprétée et la fonction tabulée ne portent pas le même nom, pour que les interpolations à droite et à gauche soient convenablement définies, car les exclusions à droite et à gauche ne "surchargent" pas les prolongements d'une fonction interprétée, transformée à l'aide de l'opérateur `CALC_FONC_INTERP`.

5.3 Intégration numérique du séchage

L'équation de la chaleur $\rho C_p \frac{dT}{dt} - Div(\lambda \operatorname{grad} T) = s(T)$ ou bien $\dot{\beta} - Div[\lambda(T)\nabla T] = s(T)$ conduit, dans le cas d'une condition aux limites en flux normal sur la frontière Γ à la formulation variationnelle :

$$\int_\Omega \frac{\partial \beta\ (T)}{\partial t} v.d\Omega + \int_\Omega \lambda(T)\nabla T.\nabla v.d\Omega = \int_\Omega s(T).v.d\Omega + \int_G \lambda(T)\frac{\partial T}{\partial n}.v.dG \qquad \text{éq 5.3-1}$$

De façon analogue, l'équation régissant le séchage $\frac{\partial C}{\partial t} - Div[D(C,T)\nabla C] = 0$ conduit, dans le cas d'une condition aux limites en flux normal sur la frontière Γ à la formulation variationnelle :

$$\int_\Omega \frac{\partial C}{\partial t} v.d\Omega + \int_\Omega D(C,T)\nabla C.\nabla v.d\Omega = 0 + \int_G D(C,T)\frac{\partial C}{\partial n}.v.dG \qquad \text{éq 5.3-2}$$

La résolution du séchage est intégrée à l'opérateur `THER_NON_LINE`, en remplaçant ρC_p par la fonction constante égale à l'identité, et la conductivité par la diffusion $D(C,T)$, la température intervenant comme une constante dans les calculs (variable auxiliaire). Selon la loi de diffusion choisie, il faut calculer la valeur du coefficient de diffusion ainsi que ses dérivées, selon la température et la concentration en eau à l'instant courant, au point courant.

On se reportera à la documentation de l'opérateur de thermique non linéaire [R5.02.02] pour de plus amples détails sur l'intégration numérique de la thermique non linéaire.

Dans le cadre du séchage, les conditions aux limites sont données en terme de flux normal, et conduisent, comme en thermique, à un terme dans le premier membre, associé à l'option de calcul `rigi_ther_fluxnl`, et à un terme dans le second membre, associé à l'option `char_ther_fluxnl`.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

6 Formalisation du retrait endogène et de dessiccation

6.1 Retrait dans *Code_Aster*

Dans le cadre d'une formalisation du retrait en terme de déformation, l'incrément total de déformation peut se décomposer en somme d'une composante thermique, d'une composante représentant le retrait endogène, et d'une composante représentant le retrait de dessiccation, ajoutées à la composante mécanique (élasticité, fluage, ...).

On peut modéliser le retrait de dessiccation sous la forme :

$$\Delta \varepsilon_{dessiccation} = \left[-\kappa\left(C^{+}\right)\left(C_0 - C^{+}\right) + \kappa\left(C^{-}\right)\left(C_0 - C^{-}\right) \right]. I^d \qquad \text{éq 6.1-1}$$

où C est la concentration en eau, C_0 la concentration en eau initiale.
et κ un coefficient caractérisant le retrait, dépendant principalement de la concentration en eau.

On peut modéliser le retrait endogène sous la forme :

$$\Delta \varepsilon_{endogène} = -\beta . \Delta \xi . I^d \qquad \text{éq 6.1-2}$$

où ξ est l'hydratation,et β un coefficient caractéristique du matériau dont les dépendances sont mal connues.

Les retraits de dessiccation et endogène peuvent donc intervenir une loi de comportement en y remplaçant les termes habituels $\Delta \varepsilon - \Delta \varepsilon_{thermique}$ par $\Delta \varepsilon - \Delta \varepsilon_{thermique} - \Delta \varepsilon_{dessiccation} - \Delta \varepsilon_{endogène}$. Dans *Code_Aster*, ces termes sont pris en compte pour les comportements élastoplastiques de type Von Mises et pour les modèles de béton. On a alors par exemple en **élasticité 1D** :

$$\Delta \varepsilon = \frac{1}{E\left(\xi\right)} \Delta \sigma + \left(\Delta \varepsilon_{thermique} + \Delta \varepsilon_{endogène} + . \Delta \varepsilon_{dessiccation} \right) \qquad \text{éq 6.1-3}$$

Le paramètre mécanique E (module d'Young) dépend principalement de la variable d'hydratation ξ .

Cette formulation du retrait de dessiccation et du retrait endogène a l'avantage d'utiliser directement la teneur en eau C , que l'on peut relier à la perte de poids par simple intégration sur le volume. Si l'on utilisait l'humidité relative h , il faudrait la retraduire en terme de teneur en eau par le biais de l'isotherme de désorption de chacun des différents bétons.

Pour le *Code_Aster*, ces paramètres peuvent être définis dans un cadre relativement général, comme des fonctions des différentes variables de calcul et variables auxiliaires (température, hydratation, concentration en eau, ou constantes) pour laisser le choix à l'utilisateur de définir librement les dépendances des paramètres. Il reste à la charge de l'utilisateur d'utiliser les fonctions du *Code_Aster* pour reproduire l'expression du module d'Young donnée dans l'équation [éq 6.1-3].

Pour plus de détail sur ces formulations, et sur les moyens de calculer les coefficients κ et β , on se reportera à la thèse de L. Granger, [bib2], aux pages 99 et suivantes, et aux pages 210 et suivantes.

Pour le calcul mécanique les variables ξ (l'hydratation) et C (concentration en eau) sont des données, comme l'est la température lors d'un calcul thermomécanique.

6.2 Intégration du retrait dans les loi de comportement mécaniques

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

La thermique et le séchage sont découplés de la résolution mécanique, tout comme le séchage est une opération chaînée à la thermique et à l'hydratation. Ce découplage permet d'intégrer le retrait dans l'opérateur de résolution de la mécanique non linéaire, sans ajouter de nouveaux phénomènes, comportements, types d'éléments et options de calcul. De plus, il permet d'introduire le retrait de façon simple dans toutes les lois de comportement non linéaires. La syntaxe des opérateurs de mécanique STAT_NON_LINE et MECA_STATIQUE n'est pas modifiée.

Dans la version actuelle de l'opérateur de mécanique non linéaire, le retrait a été intégré au comportement élastique (ELAS), au comportement élastoplastique de Von Mises (VMIS_ISOT_*) et aux modèles spécifiques aux bétons : MAZARS, ENDO_ISOT_BETON, BETON_DOUBLE_DP, GRANGER*, BETON_UMLV_FP. Il consiste à ôter les termes de retrait à la déformation totale, avant la résolution des équations d'équilibre aux points de Gauss, de la même façon qu'est prise en compte la dilatation thermique.

Les coefficients κ et β caractérisant les retraits endogène et de dessiccation sont définis sous le mot clé 'ELAS_FO' (opérandes K_DESSIC et B_ENDOGE respectivement), comme des constantes. Les autres caractéristiques mécaniques, coefficient de Poisson et module d'Young peuvent aussi être définies comme fonctions des nouvelles variables HYDR et SECH, qui ont été ajoutées aux catalogues des deux opérateurs DEFI_FONCTION et DEFI_NAPPE.

Les résultats, de type [evol_ther], issus d'un calcul de thermique non linéaire, ou de thermo-hydratation, et d'un calcul de séchage, et correspondant respectivement aux champs thermo-hydrique de type 'TEMP/HYDR', ou au champ séchage de type 'TEMP', sont transmis au calcul mécanique par l'intermédiaire de l'opérateur AFFE_MATERIAU (mot clé AFFE_VARC). Les calculs mécaniques associant ces champs permettent :

- de calculer les retraits endogène et de dessiccation, dans le cas où les caractéristiques matériau associées auront été définies auparavant dans DEFI_MATERIAU,
- d'interpoler le module d'Young et le coefficient de Poisson lorsque ceux-ci sont des fonctions des variables hydratation ou séchage.

Remarque 1 :

En présence d'un champ de séchage, il est nécessaire de renseigner le mot clé VALE_REF dans la commande AFFE_MATERIAU . Cette valeur définit la valeur de SECH pour laquelle le retrait de dessiccation est nul.
Il faut donc veiller à être cohérent avec les valeurs SECH utilisés (notamment à l'instant initial !).

Remarque 2 :

Le séchage et l'hydratation ne sont pas pris en compte pour les éléments de structure. Pour ce type d'éléments, il sera nécessaire de définir des coefficients κ et β nuls, sinon le calcul s'arrêtera en erreur fatale.

6.3 Matrice tangente

Le calcul des matrices tangentes des différentes lois de comportement non linéaire n'est pas affecté par l'ajout du retrait endogène et du retrait de dessiccation, car on néglige les dérivées par rapport aux variables d'hydratation et de séchage, des termes des équations d'équilibres, de même que sont négligées usuellement les dérivées par rapport à la température de ces mêmes termes. Ces dérivées interviennent au deuxième ordre.

7 Bibliographie

[Bib.1] C. DURAND : Thermique non linéaire. Manuel de Référence du *Code_Aster*. Document [R5.02.02]
[Bib.2] L. GRANGER : Comportement différée du béton dans les enceintes de centrale nucléaire : analyse et modélisation. Thèse de Doctorat de l'ENPC (février 1995).

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

[Bib.3] B. CIREE : Spécifications du développement du séchage du béton dans le *Code_Aster*. Rapport CS SI DSFN/128EE1/RAP/98.044 Version 1.1
[Bib.4] B. CIREE : Spécifications du développement du retrait endogène et du retrait de dessiccation dans le *Code_Aster*. Rapport CS SI DSFN/128HJ1/RAP/98.088. Version 1.0

Description des versions du document

Version Aster	Auteur(s) Organisme(s)	Description des modifications
5	G.DEBRUYNE EDF-R&D/AMA	Texte initial
09/04/09	G.DEBRUYNE EDF-R&D/AMA	Modification due aux variables de commandes
11	M. BOTTONI EDF-R&D/AMA	Généralisation de la fonction affinité

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)