

**THÈSE DE DOCTORAT  
DE L'UNIVERSITÉ DE LILLE**

Présentée par

**Hugo DENOYELLE**

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE LILLE**

Domaine

**GÉNIE CIVIL**

Sujet de la thèse

**Modélisation du séchage des matériaux poreux  
cimentaires et de ses effets mécaniques aux échelles fines**

Soutenue à Lille le 12 juillet 2022 devant le jury composé de :

<b>Pr. Aveline Darquennes</b>	INSA Rennes	<i>Présidente du jury</i>
<b>Pr. Abdelkarim Aït-Mokhtar</b>	Université de La Rochelle	<i>Rapporteur</i>
<b>Pr. Jean-Michel Torrenti</b>	Université Gustave Eiffel	<i>Rapporteur</i>
<b>Pr. Jean-Baptiste Colliat</b>	Université de Lille	<i>Directeur de thèse</i>
<b>Pr. Nicolas Burlion</b>	Université de Lille	<i>Directeur de thèse</i>

**LaMcube Lille**  
Université Lille  
Villeneuve d'Ascq cedex, France



# Avant-propos

Ce document constitue la synthèse de mes travaux de recherches effectués au sein du LaMcube durant les trois années de mon doctorat de 2018 à 2021.

## RÉSUMÉ :

La durabilité des structures de Génie Civil, et en particulier des structures en béton, est un enjeu majeur tant sur le plan de la sécurité et de leur durée de vie, qu'au travers de considérations énergétiques et environnementales. La présente thèse se concentre sur l'étude du séchage des matériaux cimentaires. Le séchage est la cause du phénomène appelé retrait de dessiccation. Le retrait est une contraction volumique de la pâte de ciment. Cette déformation est indépendante de l'historique de chargement. Le retrait de dessiccation peut être la source de fissurations au sein du matériau. C'est pourquoi la maîtrise et la compréhension de ce phénomène est nécessaire pour assurer la durabilité des ouvrages en béton.

Pour étudier ce phénomène, nous allons simuler le comportement du matériau vis-à-vis du séchage de l'échelle matériau la plus grande à la plus fine. Dans un premier chapitre, nous avons effectué un calcul éléments finis du séchage du béton couplé au retrait. Pour ce calcul numérique, nous nous situons à l'échelle mésoscopique du béton, à cette échelle le matériau est composé d'une matrice cimentaire continue et d'hétérogénéités représentant les granulats. Cette échelle est efficace pour observer des phénomènes comme la fissuration du matériau lié au retrait. Dans le second chapitre, nous avons créé un outil numérique permettant de simuler une image tridimensionnelle idéalisée d'un matériau poreux en se basant sur la courbe de distribution de tailles de pores (PSD) du matériau en question. Les pores représentés, les pores capillaires, sont de calibre sub-micrométrique. Nous nous situons à une échelle matériau nanométrique. Cette image permet ensuite d'observer les phénomènes hydriques liés au séchage et à l'imbibition du béton. À partir de cette image du réseau poreux, nous simulons les isothermes de sorption et désorption du matériau cimentaire considéré. Dans le dernier chapitre, nous proposons la démarche inverse. Nous cherchons cette fois la porosimétrie à partir du comportement hydrique du matériau. Nous avons utilisé le modèle du second chapitre pour fabriquer des données et l'inverser avec un algorithme d'apprentissage automatique. Le machine learning est une science jeune et son application dans le domaine du génie civil reste encore marginale. C'est pourquoi, ce dernier chapitre est construit afin de permettre au lecteur de s'approprier certaines notions et possibilités qu'offre l'apprentissage automatique. Une fois inversé, le modèle est donc un moyen supplémentaire permettant de caractériser le réseau capillaire d'un matériau cimentaire.

## ABSTRACT :

The durability of civil engineering structures, and in particular concrete structures, is a major issue both in terms of safety and service life, and through energy and environmental considerations. This thesis focuses on the study of the drying of cementitious materials. Drying is the cause of the phenomenon called desiccation shrinkage. Shrinkage is a volume contraction of the cement paste. This deformation is independent of the

loading history. Desiccation shrinkage can be the source of cracking within the material. This is why the control and understanding of this phenomenon is necessary to ensure the durability of concrete structures.

To study this phenomenon, we will simulate the behavior of the material with respect to drying from the largest to the finest material scale. In a first chapter, we have performed a finite element simulation of the drying of concrete coupled with shrinkage. For this numerical calculation, we are located at the mesoscopic scale of concrete, at this scale the material is composed of a continuous cementitious matrix and of heterogeneities representing the aggregates. This scale is effective to observe phenomena such as cracking of the material related to shrinkage. In the second chapter, we have created a numerical tool to simulate an idealized three-dimensional image of a porous material based on the pore size distribution (PSD) curve of the material in question. The pores represented, the capillary pores, are of sub-micrometer size. We are at a nanometric material scale. This image then allows to observe the hydric phenomena related to the drying and the imbibition of the concrete. From this image of the pore network, we simulate the sorption and desorption isotherms of the considered cementitious material. In the last chapter, we propose the opposite approach. This time, we look for the porosimetry from the hydric behavior of the material. We used the model from the second chapter to make data and inverse it with a machine learning algorithm. Machine learning is a young science and its application in civil engineering is still marginal. That is why this last chapter is built to allow the reader to appropriate some notions and possibilities that machine learning offers. Once inverted, the model is thus an additional means to characterize the capillary network of a cementitious material.

## Remerciements

Je tiens à remercier mes directeurs de thèse, le Professeur Jean-Baptiste Colliat et le Professeur Nicolas Burlion, pour m'avoir guidé et formé, et ce, depuis mon stage de recherche de master.

Je remercie les Professeurs Jean-Michel Torrenti et Abdelkarim Aït-Mokhtar pour avoir accepté d'être rapporteurs de cette thèse. Je remercie également la Professeur Aveline Darquennes pour avoir présidé mon jury de soutenance.

J'exprime ma gratitude à tous les membres de l'équipe du laMcube et au personnel de Polytech'Lille et de l'Université de Lille pour l'aide scientifique et matérielle qu'ils ont pu m'apporter.

Enfin, je souhaite remercier très chaleureusement mes parents pour leur soutien sans faille et mon frère pour m'avoir toujours montré le chemin. Merci à ma compagne et à mes amis. Merci à tous.



# Table des matières

<b>Table des matières</b>	<b>i</b>
<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>Préambule bibliographique</b>	<b>5</b>
1 Introduction . . . . .	6
2 Matériaux cimentaires . . . . .	6
2.1 Formulation d'un béton et microstructure . . . . .	6
2.2 Un matériau poreux . . . . .	8
2.3 Investigation de la morphologie aux échelles fines . . . . .	9
3 Transfert hydrique en milieu poreux . . . . .	14
3.1 L'eau dans un milieu poreux . . . . .	14
3.2 Les modes de transport de l'eau . . . . .	15
3.3 Description complète et simplifiée des transferts hydriques . . . . .	16
3.4 Comportement hydrique d'un matériau cimentaire . . . . .	19
4 Conclusion . . . . .	21
<b>1 Simulation du comportement mécanique d'un béton vis à vis du séchage</b>	<b>23</b>
1 Introduction . . . . .	24
1.1 Contexte . . . . .	24
1.2 Contributions . . . . .	24
2 Le séchage . . . . .	25
2.1 La physique de transfert . . . . .	25
2.2 Méthode numérique EFEM . . . . .	27
2.3 Résolution numérique du séchage d'un anneau béton . . . . .	30
2.4 Synthèse . . . . .	34
3 Simulation du couplage mécanique lié au comportement hydrique du béton	34
3.1 Lien entre le séchage et le retrait du béton . . . . .	34
3.2 Simulation et résultats . . . . .	35
3.3 Synthèse . . . . .	42
4 Conclusion . . . . .	42
<b>2 Modélisation d'un réseau poreux aux échelles fines</b>	<b>45</b>
1 Introduction . . . . .	46
1.1 Contexte . . . . .	46
1.2 Contribution . . . . .	46
2 Construction d'un modèle numérique d'un milieu poreux . . . . .	47
2.1 État de l'art . . . . .	47
2.2 Champs aléatoires corrélés . . . . .	52

2.3	Passage d'un champ aléatoire continu à un réseau poreux discret . . . . .	54
3	Simulation d'isothermes de sorption-désorption . . . . .	56
3.1	La physique de transfert à l'échelle du pore capillaire . . . . .	56
3.2	Visualisation de la désorption et de la sorption . . . . .	63
3.3	Isotherme de sorption-désorption . . . . .	66
4	Exploitation du modèle . . . . .	70
4.1	Variabilité des isothermes . . . . .	70
4.2	Amélioration du modèle pour la sorption . . . . .	75
4.3	Estimation du retrait de dessiccation . . . . .	77
5	Conclusion . . . . .	79
<b>3</b>	<b>Prédiction de la morphologie d'un réseau poreux par apprentissage automatique</b>	<b>81</b>
1	Introduction . . . . .	82
1.1	Contexte . . . . .	82
1.2	Contributions . . . . .	82
2	Apprentissage automatique . . . . .	83
2.1	Le perceptron . . . . .	83
2.2	L'entraînement . . . . .	84
3	Inversion par apprentissage du modèle d'homogénéisation Mori-Tanaka . . . . .	85
3.1	Inversion d'un modèle par apprentissage . . . . .	85
3.2	Modèle Mori-Tanaka à trois échelles pour les géomatériaux . . . . .	86
3.3	Solution par apprentissage . . . . .	87
3.4	Synthèse . . . . .	93
4	Inversion par apprentissage du modèle de simulation d'isothermes de sorption-désorption . . . . .	94
4.1	Modèle de simulation d'isothermes de sorption-désorption . . . . .	94
4.2	Inversion du modèle . . . . .	95
4.3	Synthèse . . . . .	99
5	Conclusion . . . . .	100
	<b>Conclusion</b>	<b>101</b>
	<b>A Coupe de l'anneau béton : Isoligne de degré de saturation</b>	<b>105</b>
	<b>B Code de l'apprentissage Mori Tanaka</b>	<b>109</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>111</b>



# Introduction

## Contexte

La durabilité des structures de Génie Civil, et en particulier des structures en béton, est un enjeu majeur tant sur le plan de la sécurité et de leur durée de vie, qu’au travers de considérations énergétiques et environnementales. La prévision et l’estimation de cette durabilité ont fait l’objet de nombreux progrès au cours des deux dernières décennies, grâce notamment à une meilleure compréhension des processus qui gouvernent la micro-structure des matériaux cimentaires et ses mécanismes physico-chimiques [J-M. Torrenti, 1999]. Cette compréhension s’étend de la phase de réalisation de la structure à très court terme jusqu’aux phases de service les plus avancées. Elle s’accompagne de nouveaux schémas de dimensionnement et de vérification des structures de Génie Civil, notamment en lien avec les approches performantielles [ J–M. Torrenti, 2010].

Sur le plan de la simulation numérique, l’estimation de la durabilité des structures en béton conduit à la nécessité de mettre en œuvre des modèles numériques capables de prédire le comportement des matériaux (en particulier les matériaux à base cimentaire) à long terme [E. Roubin, 2013], [M. Hosseini, 2015]. Ces modèles numériques ont été et sont, la plupart du temps, basés sur un point de vue macroscopique du matériau et s’appuient donc sur la définition d’un Volume Élémentaire Représentatif. Cet élément de volume permet la définition de variables macroscopiques effectives (contraintes, déformations, etc.) et conduit ainsi à s’affranchir du caractère hétérogène des matériaux cimentaires au travers de modèles de comportements phénoménologiques. Néanmoins, aux échelles de temps considérées (à long et à très long termes), les phénomènes de dégradation observés macroscopiquement pour ces matériaux (fissuration, gonflements, déformations différées, etc.) prennent naissance à des échelles très fines, le plus souvent au travers de mécanismes physico-chimiques complexes [T. Rougelot, 2008], [Q. Wu, 2014]. Ce constat a naturellement conduit, dans la dernière décennie, au développement d’approches basées sur des échelles d’espace plus fines et, en conséquence, vers des stratégies de calcul multi-échelles pour lesquelles plusieurs niveaux de résolution sont envisagés simultanément. C’est dans ce contexte que l’information morphologique est essentielle. Le couplage entre ces techniques expérimentales et la simulation numérique du comportement des matériaux hétérogènes n’est pas trivial. De nombreux travaux ont cherché à simuler explicitement et exactement les morphologies observées.

Les matériaux cimentaires sont sujet à un phénomène appelé retrait qui se traduit par une contraction volumique de la pâte de ciment [C. de Sa, 2007]. Cette déformation est indépendante de l’historique de chargement. Le retrait du béton est composé du retrait endogène (ou chimique) et du retrait de séchage (ou dessiccation). Le retrait de dessiccation peut être la source de fissurations [A. Khelidj, A. Loukili, G. Bastian, 1998], [L. Lacarriere, 2016]. C’est pourquoi la maîtrise et la compréhension de ce phénomène est

un enjeu majeur pour la durabilité des ouvrages en béton. Pour cela, il est nécessaire de mieux comprendre la source de ce phénomène, le séchage. Il est commode d'utiliser l'isotherme de sorption-désorption pour caractériser le comportement hydrique d'un matériau cimentaire. Ces courbes donnent la quantité d'eau dans l'échantillon en fonction de l'humidité relative. Elles sont obtenues expérimentalement en diminuant le niveau d'H.R (humidité relative) par palier sur un échantillon maintenu à température constante. Des années sont nécessaires pour sécher et se resaturer complètement un matériau et donc tracer ces courbes. Une autre possibilité est la simulation numérique. Cette solution ne remplace pas la voie expérimentale mais donne un point de vue complémentaire.

Afin de mieux comprendre les liens entre la microstructure des bétons et leur comportement hydrique à l'échelle macroscopique, il est essentiel de comprendre le phénomène de séchage aux échelles fines [J-F. Daïan, 2010],[V. Baroghel-Bouny, 2007]. Un milieu poreux est constitué d'une matrice solide et d'un réseau de pores contenant un ou des fluides. La matrice solide peut être cohésive ou non, correspondant respectivement à une roche ou un empilement de granulats par exemple. Les tailles de pores constituant le réseau sont très variées pouvant aller de l'Angström au centimètre pour les matériaux cimentaires. Les pores dont la taille est inférieure au nanomètre contiennent au plus une dizaine de molécules de fluide. Ces pores sont des sites d'adsorption où les forces d'interactions moléculaires sont dominantes. On est dans le domaine de la dynamique moléculaire. Entre 1 et 100 nanomètres, les notions de phase dans le fluide ont de nouveau du sens. L'état de pression de la phase liquide est directement lié à la tension superficielle. On parle de pores capillaires. Au delà des 100 nanomètres, les pores sont insensibles aux variations d'humidité relative du milieu. Une fois vide de phase liquide, ils n'absorbent pas d'eau, ils se remplissent par infiltration uniquement. Obtenir une description réaliste du réseau poreux aux échelles fines est aujourd'hui impossible. Les méthodes récentes de modélisation et visualisation d'un matériau poreux au microtomographe synchrotron aux rayons X permettent au mieux d'obtenir une image avec une résolution de l'ordre du micron [C. Varloteaux, 2013]; soit encore 3 ordres de grandeur au-dessus de la taille nanométrique du réseau capillaire qui nous intéresse. Nous pouvons néanmoins avoir des informations sur la morphologie du milieu en prenant connaissance sa porosité. En effet, via des méthodes expérimentales (porosimétrie au mercure ou étude des courbes de désorption), il est possible d'avoir une estimation de la porosité du réseau aux différentes tailles de pores.

## Contributions

La présente thèse se concentre sur l'étude du séchage des matériaux cimentaires sur plusieurs échelles. Pour cela, nous simulons le comportement du matériau vis-à-vis du séchage de l'échelle matériau la plus grande à la plus fine [V. Baroghel-Bouny, 1999]. Dans un premier chapitre, nous effectuons un calcul éléments finis du séchage du béton couplé au retrait. Pour ce calcul, nous nous plaçons à l'échelle mésoscopique du béton. À cette échelle le matériau est composé d'une matrice cimentaire continue et d'hétérogénéités représentant les granulats. Cette échelle est efficace pour observer des phénomènes comme la fissuration du matériau lié au retrait. Cependant, considérer la matrice cimentaire comme continue ne permet pas de traduire les phénomènes hydriques complexes. En revanche, l'hystérésis entre le séchage et l'imbibition constatée sur les isothermes de désorption et de sorption ne peut être expliquée qu'en introduisant la notion de milieu poreux.

C'est pourquoi dans le second chapitre, nous avons créé un outil numérique permettant de simuler une image tridimensionnelle idéalisée d'un matériau poreux en se basant sur la courbe de distribution de tailles de pores (PSD) du matériau en question [J-F. Daïan, 2010], [M. Hosseini, 2015], [C. Varloteaux, 2013]. Cette image permet ensuite d'observer les phénomènes hydriques liés au séchage et à l'imbibition. Concrètement, à partir de l'image du réseau poreux, nous simulons les isothermes de sorption et désorption du matériau cimentaire considéré.

Dans le troisième chapitre, nous proposons la démarche inverse. Nous cherchons cette fois la porosité à partir du comportement hydrique du matériau. Dans sa thèse, [T. Rougelot, 2008] a proposé d'estimer la distribution de tailles de pores d'un matériau en utilisant l'isotherme de désorption et de comparer au résultat par porosité au mercure. Notre approche est différente, nous utilisons le modèle du second chapitre et l'inverser avec un algorithme d'apprentissage automatique ([A. Cornuéjols, 2010]). Le machine learning est une science jeune et son application dans le domaine du génie civil reste encore marginale. C'est pourquoi, ce dernier chapitre est construit afin de permettre au lecteur de s'approprier certaines notions et possibilités qu'offre l'apprentissage automatique. Une fois inversé, le modèle est donc un moyen supplémentaire permettant de caractériser le réseau capillaire d'un matériau cimentaire. Nous obtenons un outil numérique permettant d'estimer la porosité d'un matériau à partir de son comportement vis-à-vis du séchage (désorption) et ou de l'imbibition (sorption). La connaissance de cette géométrie spatiale du réseau capillaire (PSD et image 3D du réseau) est une des clefs de la maîtrise de la durabilité du matériau.



# Préambule bibliographique

## Contents

---

<b>1</b>	<b>Introduction</b> . . . . .	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>Matériaux cimentaires</b> . . . . .	<b>6</b>
2.1	Formulation d'un béton et microstructure . . . . .	6
2.2	Un matériau poreux . . . . .	8
2.3	Investigation de la morphologie aux échelles fines . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Transfert hydrique en milieu poreux</b> . . . . .	<b>14</b>
3.1	L'eau dans un milieu poreux . . . . .	14
3.2	Les modes de transport de l'eau . . . . .	15
3.3	Description complète et simplifiée des transferts hydriques . . . . .	16
3.4	Comportement hydrique d'un matériau cimentaire . . . . .	19
<b>4</b>	<b>Conclusion</b> . . . . .	<b>21</b>

---

# 1 Introduction

L'objectif de ce préambule est de dresser un état de l'art sur les matériaux cimentaires et plus spécifiquement sur leurs comportements vis à vis du phénomène de séchage. Nous parlons ici de séchage et pas de la phase de prise du matériau. Nous consacrons une première partie sur le matériau béton dans laquelle nous rappelons les constituants d'un matériau cimentaire ainsi que les méthodes de formulation d'un béton. Nous abordons aussi, dans cette partie, le processus d'hydratation du ciment afin de mieux comprendre la microstructure du matériau. Enfin, nous présentons les différentes techniques d'investigation de la morphologie aux échelles fines.

La seconde partie de ce préambule traite des modèles de transfert hydriques en milieu poreux et du comportement des matériaux cimentaires vis à vis du séchage et de l'imbibition.

## 2 Matériaux cimentaires

### 2.1 Formulation d'un béton et microstructure

#### 2.1.1 Constituants d'un béton

Un matériau cimentaire est un matériau constitué de ciment hydraté. Le matériau cimentaire le plus simple possible est un mélange d'eau et de ciment appelé pâte de ciment. Avec l'ajout de sable à ce mélange, on obtient un mortier et avec l'apport de gravillons, le mélange obtenu est un béton. Il est possible de compléter la formulation avec des adjuvants et des additions minérales pour modifier les propriétés du matériau cimentaire.

Le ciment possède le même rôle dans tous ces types de matériaux cimentaires, il forme, au contact de l'eau, un liant qui permet de passer d'une suspension granulaire sans cohésion à un solide [A. Menou (2004)]. Les ciments Portland sont constitués de silicates de calcium et d'aluminates de calcium. Ces constituants sont anhydres, ils confèrent au ciment sa propriété de liant hydraulique [L. Bertolini (2004)].

Les granulats utilisés pour formuler un béton peuvent être issus de roches extraites (calcaires ou siliceuses) ou des sous-produits de l'industrie (laitier, bétons recyclés par exemple) [J. Baron(1996)].

Les additions minérales peuvent être classées en deux catégories de propriétés, les fillers et les additions ayant une action chimique. Les fillers sont des additions minérales inertes mais permettent un meilleur empilement granulaire [K. Khayat (1996)], [A. M. Rosenberg (1989)]. Améliorer l'empilement granulaire permet d'optimiser les caractéristiques du béton. Certaines additions possèdent une action chimique sur l'hydratation du

béton. On peut citer en exemple : les fillers calcaires, les fumées de silice et les cendres volantes.

Enfin, il est possible d'ajouter à la formulation des adjuvants qui modifient les propriétés du béton frais ou durci [F. de Larrard (2002)]. On peut citer notamment :

- les plastifiants qui augmentent l'ouvrabilité des bétons et diminuent la quantité d'eau et en conséquence la porosité,
- les retardateurs ou accélérateurs de prises.

### 2.1.2 Méthode de formulation d'un béton

Une formulation d'un béton vise à déterminer les quantités des différents constituants. Les objectifs principaux sont de satisfaire une ouvrabilité et une résistance mécanique du béton fixées par le cahier des charges. Aujourd'hui, en plus de ces critères, les formulations permettent aussi d'optimiser les propriétés du béton pour répondre par exemple à des besoins variés tels que des temps de prises plus rapides ou plus longs ou même d'augmenter la résistance au gel [F. de Larrard (2000)].

Pour les méthodes classiques de formulation, on peut citer les méthodes de Dreux-Gorisse, Faury et Caquot [G. Bernier (2004)], [G. Dreux (1986)]. Ces méthodes fixent d'abord un rapport E/C en fonction des exigences de résistance en compression du béton à 28 jours. Ensuite, la quantité de granulats est fixée pour respecter un empilement granulaire optimal.

Pour répondre à un cahier des charges de plus en plus complexe, d'autres méthodes ont été développées sur des modèles empiriques ou semi-empiriques. Ces types de formulation permettent d'obtenir des bétons haute performance avec des résistances spécifiques de plus de 80 MPa [F. de Larrard (2002)] ou des bétons possédant une grande ouvrabilité appelés bétons autoplaçants [P. Turcry (2004)].

Les exigences pour la formulation du béton et sur ses constituants sont spécifiées dans la norme NF-EN 206-1. Elle permet d'assurer les propriétés du béton frais et durci et leurs vérifications.

### 2.1.3 Hydratation du ciment

L'hydratation du ciment et donc des silicates de calcium et des aluminates de calcium va créer des hydrates. Ces hydrates sont majoritairement des « CSH » silicates de calcium hydratés et de la portlandite ( $Ca(OH)_2$ ). Les aluminates de calcium réagissent également et forment divers hydrates tels que les ettringites (trisulfatoaluminates de calcium hydratés) et des monosulfoaluminates de calcium hydratés [J. Bensted (1983)].

Ces hydrates vont permettre au mélange frais de faire prise. Après une période d'induction, les grains de ciment anhydres s'entourent d'hydrates. Une microstructure d'hydrates se forme et le matériau cimentaire durcit jusqu'à obtention de ses propriétés mécaniques finales [M. Bogdan (2009)]. Cette microstructure dépend de la forme des hydrates qui ont précipité. Elle contient des micro et nano-porosités qui constituent le réseau poreux du matériau cimentaire. Ces pores contiennent lors de la phase de durcissement du béton de l'eau liquide qui permet au processus d'hydratation du béton de se poursuivre. Lorsque la cinétique d'hydratation du béton s'arrête, le processus d'hydratation est fini. L'eau excédentaire subsiste dans les pores les plus petits sous forme d'eau adsorbée et sous forme d'eau libre dans les plus volumineux.

Les CSH sont souvent qualifiés de « gel » car il s'agit de précipités faiblement cristallisés et liés chimiquement à des molécules d'eau. Les CSH possèdent des morphologies diverses. On observe principalement, en début de prise, des formes de feuillets minces d'environ 10nm disposées autour des grains de ciment, mais aussi des formes alvéolaires. Pour les pâtes plus matures, on observe des formes de disque de dimension inférieure à 200nm voire des sphères. La portlandite cristallise en forme de plaque hexagonale assez volumineuse de l'ordre du micromètre [V. Baroghel-Bouny (1994)].

Des modèles de représentation de la microstructure et de ses hydrates ont été créés. On peut citer les travaux de Feldman et Sereda en 1974 qui considèrent la pâte de ciment comme un gel avec une structure désordonnée lamellaire (les CSH) possédant des molécules d'eau interlamellaires, schéma 1 [A. M. Neville (1995)].

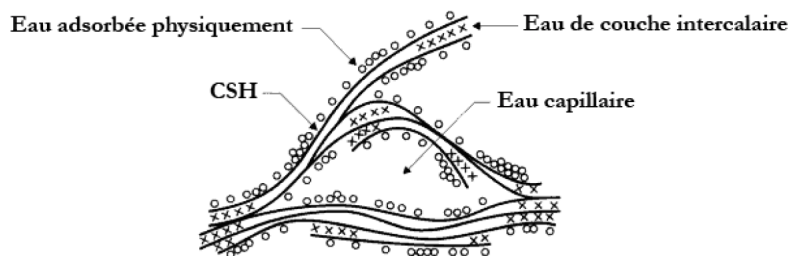


FIGURE 1: Modèle de Feldman et Sereda

## 2.2 Un matériau poreux

Le matériau cimentaire à l'échelle de la microstructure est constitué d'une matrice solide et de pores. Cette matrice solide est composée d'hydrates issus de la réaction de l'eau avec le ciment, principalement des CSH (à hauteur de 50 % d'une pâte de ciment) et de portlandites (environ 25 % d'une pâte de ciment). Comprendre et caractériser la morphologie du réseau poreux des matériaux cimentaires est extrêmement complexe. Cette problématique est un réel enjeu pour la maîtrise de la durabilité des matériaux cimentaires. Pour cela, il est nécessaire de définir des indicateurs fiables et accessibles à la mesure : la porosité avec notamment la distribution de taille de pore et la surface spécifique.



### 2.2.1 La porosité

La porosité est définie par le rapport entre le volume des vides et le volume total de l'échantillon de matériau. La porosité est de l'ordre de 5 à 20 % pour un béton [A. El Amine Hamami (2009)].

La porosité est un paramètre qui est lié directement toutes propriétés importantes du matériau cimentaire (résistance mécanique, durabilité). En plus de cette porosité, il est intéressant de connaître la distribution du volume des vides en fonction de la taille des pores du réseau. Le réseau poreux d'un matériau cimentaire est très complexe et tortueux. Il est le résultat de l'enchevêtrement de tous les hydrates. Ceux-ci ont comblé les espaces entre les grains de ciment et entre les granulats et les grains de ciment lorsque le matériau cimentaire était frais.

Dans une pâte de ciment durcie, on retrouve plusieurs types de pores [S. Diamond (1986)] :

- les pores sub-nanométriques qui sont des pores situés entre les feuillets de CSH,
- les pores capillaires qui sont le résultat des vides laissés entre les complexes d'hydrates, ils possèdent une taille entre 1 et 100 nanomètres,
- les mésopores plus volumineux supérieurs à 100 nm qui sont des vestiges soit de bulles d'air entraînées lorsque la pâte était à l'état frais soit de possibles fissures soit de vides entre les complexes des plus gros hydrates comme la portlandite.

### 2.2.2 La surface spécifique

La surface spécifique représente la surface totale de l'interface physique entre la matrice solide et le réseau poreux. Cette surface dans le cas des matériaux cimentaires est considérable. Elle est principalement due aux CSH. Les pores inter-feuillets sub-nanométriques sont à l'origine de cette surface car il sont extrêmement nombreux. Ces pores capillaires sont particulièrement sensibles au phénomène d'adsorption [D.N. Winslow (1974)].

## 2.3 Investigation de la morphologie aux échelles fines

Il existe de nombreuses techniques pour caractériser un milieu poreux et notamment les deux propriétés évoquées précédemment, la porosité et la surface spécifique. Voici une liste non exhaustive des principales techniques ainsi classées par résolution et objectif [V. Baroghel-Bouny (1994)], [J-F. Daïan, 2010] :

#### Analyse d'image

- microscopie optique (jusqu'à 10 micromètres)
- microtomographie au rayon x [N. Burlion (2006)] (jusqu'au micromètre)

- microscopie à balayage MEB [Y. Sébaïbi (2006)] (jusqu'à 100 nanomètres)
- microscopie à transmission MET (jusqu'au nanomètre)

#### Porosimétrie

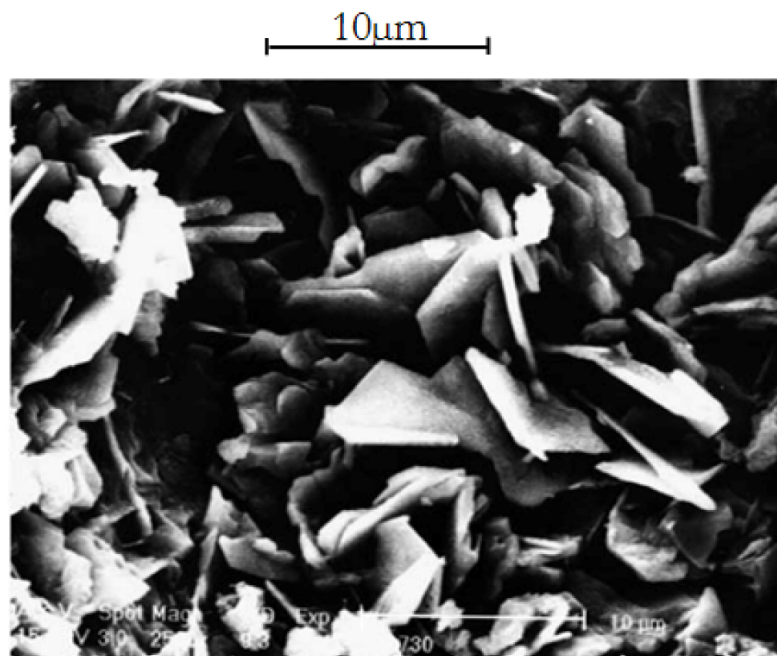
- intrusion au mercure [O. Amiri (2005)] (jusqu'au nanomètre)
- sorption et désorption d'eau [J-P. Ollivier (2008)], [T. Rougelot, 2008] (jusqu'au nanomètre)
- adsorption d'azote [V. Baroghel-Bouny (1994)] (jusqu'au nanomètre)

#### Surface spécifique

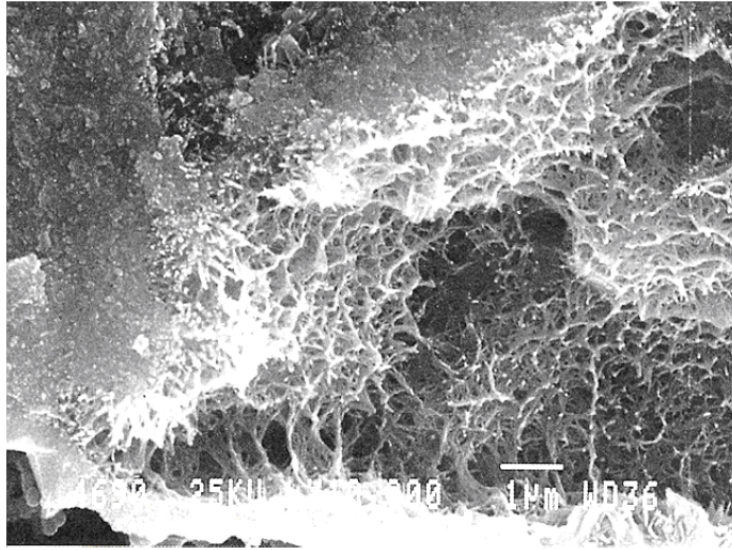
- adsorption d'azote méthode BET [T.C. Powers (1997)]
- adsorption d'eau méthode BET

L'analyse d'image ne permet pas de déterminer avec précision la porosité aux échelles fines. Ces méthodes sont efficaces pour observer la morphologie des hydrates les plus gros et de leurs porosités associées.

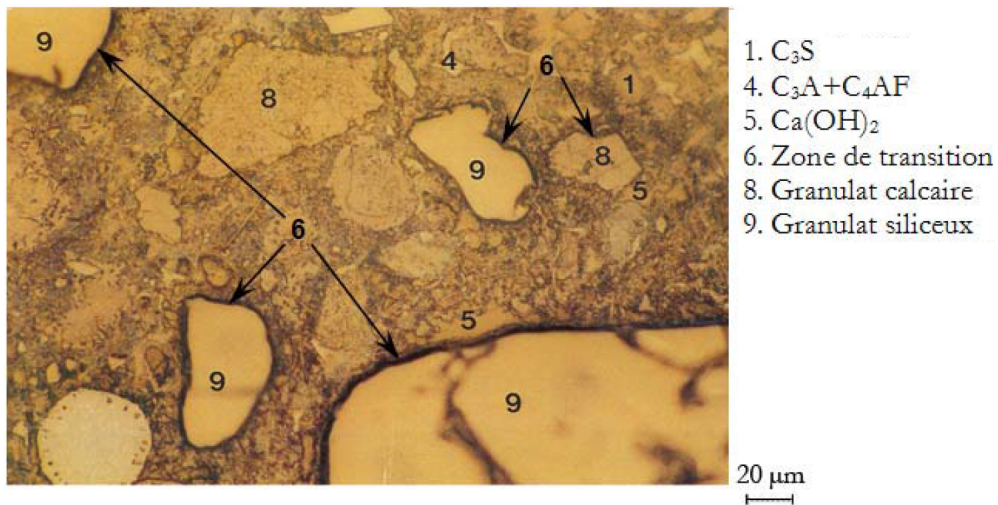
### 2.3.1 Visualisation des mésopores et plus gros complexes d'hydrates au MEB



**FIGURE 2:** Image des mono-sulfo-aluminate de calcium hydratés au MEB [Y. Sébaïbi (2006)]



**FIGURE 3:** Image d'avéoles de CSH au MEB [Y. Sébaïbi (2006)]



**FIGURE 4:** Image d'un béton au MEB [V. Baroghel-Bouny (1994)]

Ces différentes images sont obtenues avec la technique du MEB. Ces rendus sont plus qualitatifs que quantitatifs mais ils permettent néanmoins d'observer la structure à l'échelle du micron. Ici nous pouvons voir sur l'image 3 la structure alvéolaire des complexes de gel de CSH. Sur l'image 2, les formes hexagonales proviennent de complexes cristallins de mono-sulfo-aluminat de calcium hydratés qui ont précipité autour d'un mésopore. L'image 4 d'un béton met en évidence les hydrates entre la pâte de ciment et les granulats.

### 2.3.2 La porosimétrie

Comme évoqué précédemment, la porosité ainsi que la distribution des tailles de pore sont des caractéristiques essentielles d'un réseau poreux. Nous décrivons deux des méthodes les plus employées pour évaluer la porosimétrie d'un matériau cimentaire. Des résultats de ces techniques seront utilisés dans la présente thèse.

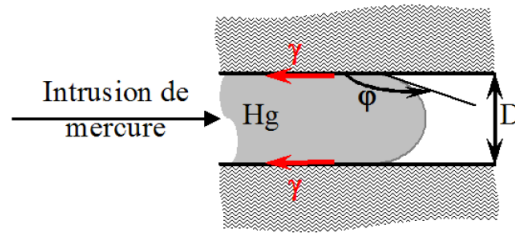
Porosimétrie à l'eau :

La porosimétrie à l'eau permet d'obtenir la porosité totale du matériau poreux. L'échantillon est saturé en eau et pesé pour obtenir la masse totale. Puis il est séché afin d'obtenir la masse sèche. La masse d'eau totale dans le milieu poreux est déduite de ces deux quantités. On connaît ainsi le volume du réseau poreux. Avec le volume totale de l'échantillon, on obtient la porosité totale. Pour déterminer la courbe de distribution des tailles de pores, on peut utiliser l'isotherme de désorption [V. Baroghel-Bouny, 1999]. L'objectif de cette courbe est de traduire le comportement du matériau vis à vis du séchage. Un échantillon de matériau cimentaire saturé en eau est placé dans un milieu où l'humidité relative est maîtrisée. L'humidité relative (HR) ambiante est diminuée par palier ce qui cause la dessiccation du matériau poreux. Pour chaque palier, on mesure la masse de l'échantillon une fois que celle-ci est stabilisée. Ainsi, on est capable de suivre l'évolution de la quantité d'eau dans le matériau en fonction de la condition imposée d'humidité relative (HR).

À partir de cette courbe, il est possible d'appliquer la loi de Kelvin Laplace afin d'associer le volume d'eau perdu dans le réseau poreux pour un palier de HR au volume contenu dans une taille de pore [B. Johannesson (2001)], [T. Rougelot, 2008]. On parle de pores capillaires. Concrètement, chaque palier de HR correspond à une taille de pore donné. On obtient ainsi une courbe du volume poral associé à chaque taille de pore, c'est à dire la distribution des tailles de pores. Cette technique est efficace mais possède plusieurs défauts. Tout d'abord, les hypothèses pour appliquer la loi de Kelvin Laplace sont fortes. On doit notamment faire l'hypothèse de pores de géométrie cylindrique. De plus, la plage d'application de cette équation est réduite aux humidités relatives hautes et moyennes. Pour les pores de taille de l'ordre du nanomètre et inférieur au nanomètre, les forces d'interaction chimique et physique dominant. Dans ce cas précis, nous ne sommes plus à l'échelle des pores capillaires. Les équations et les hypothèses pour aboutir à la loi de Kelvin Laplace sont plus amplement décrites dans le chapitre II partie 3.

Porosimétrie par intrusion au mercure :

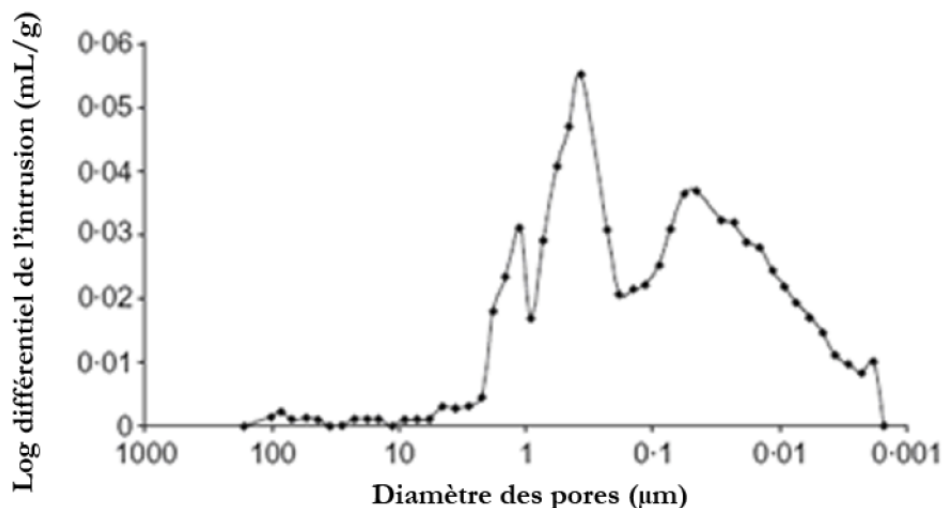
La porosimétrie au mercure se base aussi sur le phénomène de capillarité. Le mercure est un fluide non mouillant. C'est à dire que l'angle de contact entre une interface solide et le mercure est supérieur à 90 degrés. Cet angle est de 130 degrés dans le cas du mercure comme on peut le voir sur le schéma 5.



**FIGURE 5:** Schéma d'une intrusion de mercure dans un pore [A. El Amine Hamami (2009)]

On parle d'intrusion au mercure car celui-ci est poussé dans les pores de l'échantillon préalablement désaturé et mis sous vide. Il y a un équilibre direct entre la pression du fluide non mouillant (le mercure) et la taille des pores investis, cet équilibre est donné par la loi de Laplace (cf chapitre II partie 3 de la présente thèse). Plus la pression d'injection augmente plus la taille des pores investis par le mercure est petite.

Lors de l'intrusion au mercure, on connaît à tout moment la pression d'injection et le volume de mercure injecté. Il est possible de tracer, en utilisant la loi de Laplace, le volume injecté de mercure par rapport à la taille de pores investis par le mercure. La courbe obtenue est une courbe de distribution de taille de pores. Figure 6, nous pouvons voir une distribution obtenue par intrusion au mercure sur un mortier. Avec cette technique, l'intrusion concerne des pores du demi millimètre pour les pressions les plus faibles à 2nm pour les pressions les plus élevées (centaines de MPa) [F. de Larrard (2002)]. Cette technique est donc polyvalente puisqu'elle permet de couvrir presque l'ensemble des tailles de pores d'un réseau poreux de matériaux cimentaires.



**FIGURE 6:** Courbe de distribution de taille de pores obtenue par intrusion au mercure [O. Amiri (2005)]

Nous avons présenté les techniques principales pour obtenir la porosité. Nous connaissons ainsi partiellement la morphologie du réseau poreux. Nous nous intéressons maintenant au transfert hydrique dans ce réseau.

## **3 Transfert hydrique en milieu poreux**

### **3.1 L'eau dans un milieu poreux**

Dans cette partie, nous présentons une classification de l'eau dans le réseau poreux utilisée par ces 2 auteurs [R. Sierra (1974)], [V. Baroghel-Bouny (1994)] :

- l'eau libre dans les mésopores de plus de 100nm
- l'eau capillaire dans les pores capillaires entre 1 et 100nm
- l'eau adsorbée et chimiquement liée dans les pores en dessous de 1nm

#### **3.1.1 L'eau capillaire**

Il s'agit d'eau en phase liquide contenue dans les pores entre 1 et 100nm. L'interface liquide gaz est un ménisque dont la courbure est en équilibre avec la pression de la phase gaz et la phase liquide (loi de Kelvin Laplace). C'est cette interface en ménisque dont la courbure varie en fonction des pressions des phases qui permet la condensation capillaire et donc le remplissage des pores capillaires lors de l'imbibition du matériau (cf chapitre II partie 3).

#### **3.1.2 L'eau libre**

Il s'agit de l'eau en phase liquide contenue dans les pores supérieurs à 100nm. La pression capillaire dans ces pores est nulle, la courbure de l'interface liquide gaz est nulle, c'est un plan.

#### **3.1.3 L'eau adsorbée et chimiquement liée**

Les molécules d'eau adsorbées sont liées par des forces d'interaction type Van der Waals (théorie B.E.T) et de liaisons hydrogènes. Ces forces sont dominantes lorsque les molécules sont proches de l'interface du solide. L'eau est qualifiée de chimiquement liée lorsque les molécules font partie du gel de CSH. Si l'énergie de liaisons est trop grande, l'eau est défini comme non-évaporable. Le schéma 7 classe les niveaux d'énergie de liaisons.

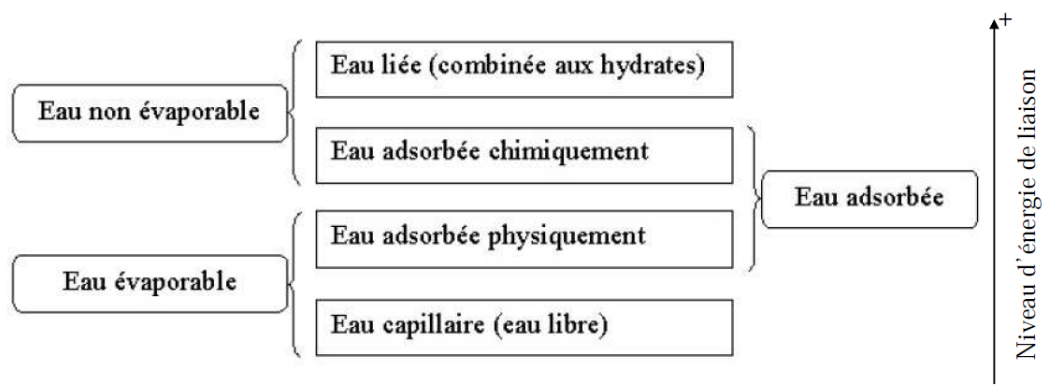


FIGURE 7: Classement des niveaux d'énergie de liaisons [M.M.Y Delmi (2004)]

## 3.2 Les modes de transport de l'eau

### 3.2.1 Milieu saturé

Le transport hydrique dans un milieu poreux est dominé par des modes de transport propre à l'état hydrique du réseau poreux. Lorsque le réseau est complètement saturé, la phase liquide est continue et le transfert hydrique est un écoulement darcéen d'eau liquide (filtration). La loi de Darcy exprime la proportionnalité entre le vecteur vitesse d'écoulement et le gradient de pression (chapitre I partie 2).

### 3.2.2 Milieu partiellement saturé

Lorsque le réseau est partiellement saturé, la phase liquide est discontinue et le transfert hydrique est un écoulement darcéen sous forme de vapeur d'eau (perméation) et d'eau liquide (filtration) et en partie sous forme de diffusion de vapeur d'eau (loi de Fick) lorsqu'il y a un gradient de concentration d'eau.

Pour un pore insaturé, son imbibition suit les différentes étapes du schéma 8 [E. Drouet(2010)]. Au faible humidité relative (HR), une monocouche de molécules d'eau est liée sur la surface du pore par adsorption. Pour une HR plus importante, les couches de molécules d'eau s'empilent (théorie de Brunauer, Emmett et Teller). Pour une HR suffisante, la condensation capillaire a lieu et une interface liquide vapeur se crée. Cette interface prend la forme d'un ménisque sous l'effet de la dépression capillaire. Cette dépression abaisse la pression de vapeur saturante ce qui permet à l'eau de passer en phase liquide. Le pore s'imbibe d'eau liquide, c'est la condensation capillaire.

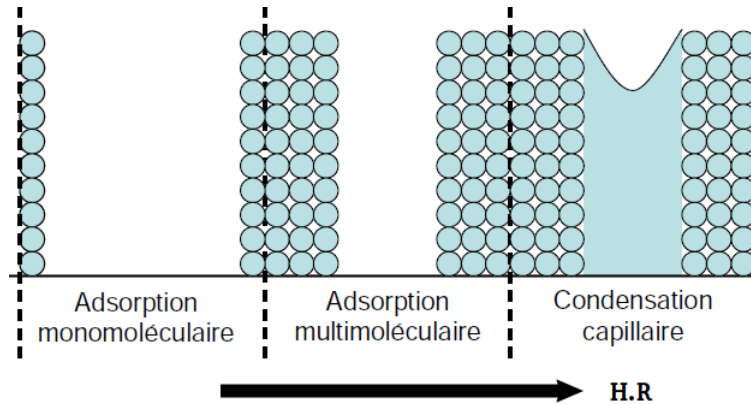


FIGURE 8: Schéma de l'évolution la phase liquide dans un pore en fonction de HR [E. Drouet(2010)]

### 3.3 Description complète et simplifiée des transferts hydriques

#### 3.3.1 Description complète

Dans sa thèse [M. Mainguy (1999)], M. Mainguy construit un modèle prenant compte les trois modes de transport de l'eau dans le réseau poreux identifiés dans le paragraphe précédent ; c'est à dire la diffusion et le transport darcéen en phase liquide et gazeuse. Ce modèle est repris dans la thèse de Caroline De Sa [C. de Sa, 2007] et la thèse de [E. Drouet(2010)]. Nous allons présenter les équations principales de ce modèle puis exposer les hypothèses simplificatrices qui nous ont permis d'obtenir le modèle de transfert simplifié utilisé dans le chapitre I de la présente thèse. Les hypothèses de ce modèle sont les suivantes :

- la matrice solide est indéformable,
- la phase liquide est constituée d'eau pure,
- la phase gazeuse est un mélange d'air sec et d'eau considéré comme un gaz parfait,
- la température est constante et uniforme partout dans le milieu.

#### Conservation de la masse

$$\dot{m}_l + \text{div}(m_l.v_l) = -\mu_{l \rightarrow v} \quad (1)$$

$$\dot{m}_v + \text{div}(m_v.v_v) = +\mu_{l \rightarrow v} \quad (2)$$

$$\dot{m}_a + \text{div}(m_a.v_a) = 0 \quad (3)$$

Ces équations sont valables pour un volume élémentaire.  $m_i$  sont les masses par unité de volume élémentaire des constituants, c'est à dire  $l$  pour l'eau liquide,  $v$  pour la vapeur et  $a$  pour l'air sec. Les  $v_i$  sont les vitesses des constituants et  $\mu_{l \rightarrow v}$  est le terme d'évaporation de l'eau liquide en vapeur.



Expression de la masse des constituants en fonction du degré de saturation en eau liquide

$$m_l = \rho_l \cdot \phi \cdot S_l \quad (4)$$

$$m_v = \rho_v \cdot \phi \cdot (1 - S_l) \quad (5)$$

$$m_a = \rho_a \cdot \phi \cdot (1 - S_l) \quad (6)$$

$S_l$  est le degré de saturation en eau liquide.

Transport diffusif

$$m_v \cdot v_v = - \frac{f(\phi, S_l) \cdot M_v}{RT} \cdot d_{va} \cdot grad(C_v) \quad (7)$$

$$m_a \cdot v_a = - \frac{f(\phi, S_l) \cdot M_a}{RT} \cdot d_{va} \cdot grad(C_a) \quad (8)$$

Avec  $C_i$  les fractions molaires,  $d_{va}$  qui est relié au coefficient de diffusion. La fonction  $f$  qui dépend de la porosité et du degré de saturation est une fonction de résistance à la diffusion [M. Mainguy (1999)].

Transport darcéen gazeux et liquide

$$\phi_l \cdot v_l = - \frac{K \cdot k_{rl}(S_l)}{\mu_l} \cdot grad(P_l) \quad (9)$$

$$\phi_v \cdot v_v = - \frac{K \cdot k_{rv}(S_l)}{\mu_v} \cdot grad(P_v) \quad (10)$$

$K$  est la perméabilité absolue ou intrinsèque,  $\mu_i$  représente la viscosité dynamique des constituants et  $k_{ri}$  est la perméabilité relative qui est une fonction du degré de saturation.

Ce modèle donne une modélisation complète du transfert hydrique. Cependant, les équations sont non linéaires ce qui rend une résolution analytique impossible. La résolution numérique de ces équations est également très complexe.

### 3.3.2 Simplification du modèle

Deux hypothèses communément admises permettent de simplifier les équations du modèle complet [M. Mainguy (1999)], [C. de Sa, 2007]. La pression de gaz est supposée constante dans le milieu. Elle est aussi égale à la pression atmosphérique. Il n'y a donc plus de transport darcéen de la vapeur. Ensuite, on néglige le transport de vapeur d'eau par diffusion devant le transport darcéen d'eau liquide (filtration).

On peut questionner la validité de ces hypothèses. M. Mainguy a comparé des résultats provenant du modèle de séchage complet avec le modèle simplifié pour le séchage de 3 matériaux cimentaires. Nous trouvons, figure 9, la comparaison en question avec CO une pâte de ciment ordinaire, BO un béton ordinaire, et CH une pâte de ciment hautes performances.

On constate très peu de différence entre les données expérimentales et les deux modèles. D'autres auteurs ont vérifié ces conclusions en rajoutant une plage d'applicabilité en fonction de HR au modèle simplifié [M. Thiery (2007)]. Pour des HR supérieures à 45 %, le modèle simplifié est très performant. Pour des HR plus faibles, sur des bétons faiblement poreux comme les BHP, le modèle reste valide et sur les bétons ordinaires l'erreur relative reste dans un écart acceptable de 10 %. Les équations du modèle simplifié sont présentées dans la partie 2 du chapitre 1 de cette présente thèse.

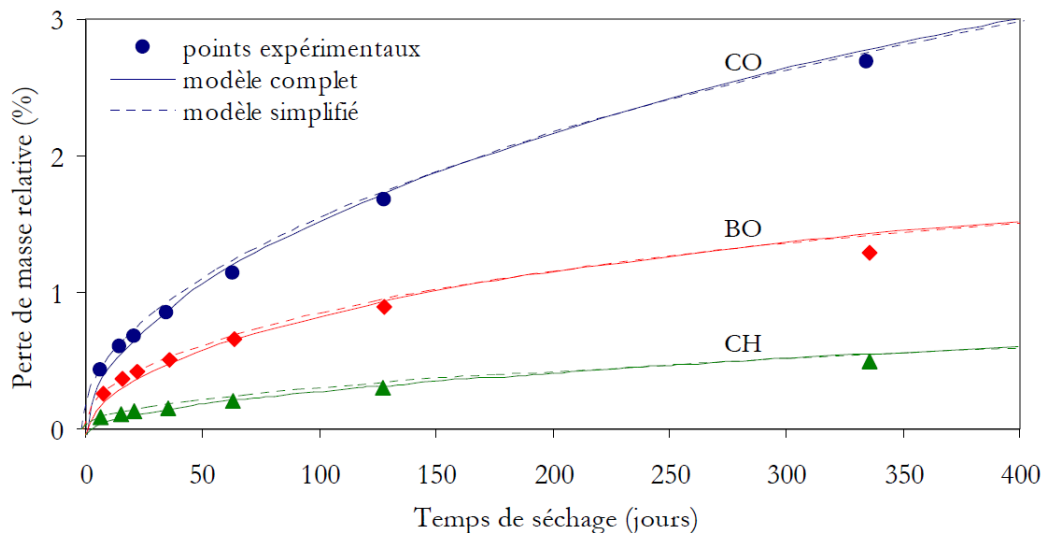


FIGURE 9: Comparatif des cinétiques de pertes de masses pour le modèle simplifié et complet [M. Mainguy (1999)]

Cette description du transfert hydrique est utilisée dans la présente thèse avec des caractéristiques matériau homogénéisées. Le matériau en question peut posséder des hétérogénéités mais la matrice cimentaire est continue, il n'y a pas de réseau poreux. Dans

la suite, nous présentons des modèles qui lient directement le réseau poreux au comportement hydrique des matériaux cimentaires.

### 3.4 Comportement hydrique d'un matériau cimentaire

#### 3.4.1 Isothermes de sorption et de désorption

Le comportement hydrique d'un matériau cimentaire peut être traduit à l'aide de deux courbes : les isothermes de sorption et de désorption. Ces courbes représentent la quantité d'eau liquide dans le réseau poreux pour une humidité relative fixée, avec l'échantillon en équilibre hydrique et à température constante. L'isotherme de sorption représente le comportement hydrique lorsque le matériau cimentaire précédemment séché se resature. L'isotherme de désorption représente le comportement du matériau durant son séchage. Ces deux courbes possèdent deux allures différentes traduisant deux comportements bien distincts vis à vis de l'imbibition et du séchage. L'hystérésis entre ces deux courbes est due au comportement du réseau capillaire complexe du matériaux poreux [V. Baroghel Bouny (1997)]. L'effet bouteille d'encre est l'une des causes de l'hystérésis [R. M. Espinosa (2006)].

En 1940, Brunauer a construit une classification des différents types d'isothermes [S. Brunauer (1940)]. Les matériaux cimentaires appartiennent à la catégorie de type 4, c'est à dire avec une majorité de pores capillaires entre 2 et 50 nanomètres, figure 10.

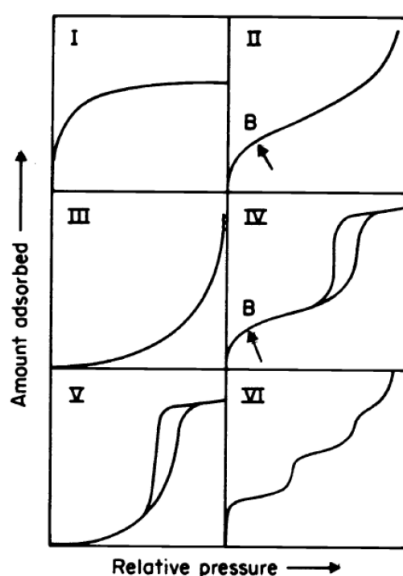


FIGURE 10: Type d'isotherme de sorption désorption

En plus de l'information directe sur le comportement hydrique du matériau, l'exploitation des isothermes permet de déterminer de nombreux paramètres utilisés pour des

modèles de transfert hydrique. On peut citer le modèle de van Genuchten [M.T. van Genuchten, 1980] qui sert à déterminer la perméabilité relative à l'eau en la reliant au degré de saturation.

### 3.4.2 Modèles d'imbibition et de dessiccation capillaire

L'hystérésis observée sur les isothermes est due à la complexité de la morphologie du réseau poreux. C'est l'une des hypothèses fondamentales de la présente thèse, l'ensemble du raisonnement du second chapitre est pensé autour de celle-ci. En se basant également sur cette hypothèse, plusieurs auteurs ont construit des modèles de réseau poreux numériques afin de simuler le comportement hydrique du matériau poreux à partir des lois de la capillarité.

Le modèle XDQ [K. Xu, J. Daian, D. Quenard (1997)] permet d'estimer à partir du comportement hydrique d'un réseau poreux numérique des caractéristiques comme la tortuosité ou la perméabilité au gaz et à l'eau. Le réseau poreux numérique est basé sur une courbe de distribution de pores provenant d'une intrusion au mercure.

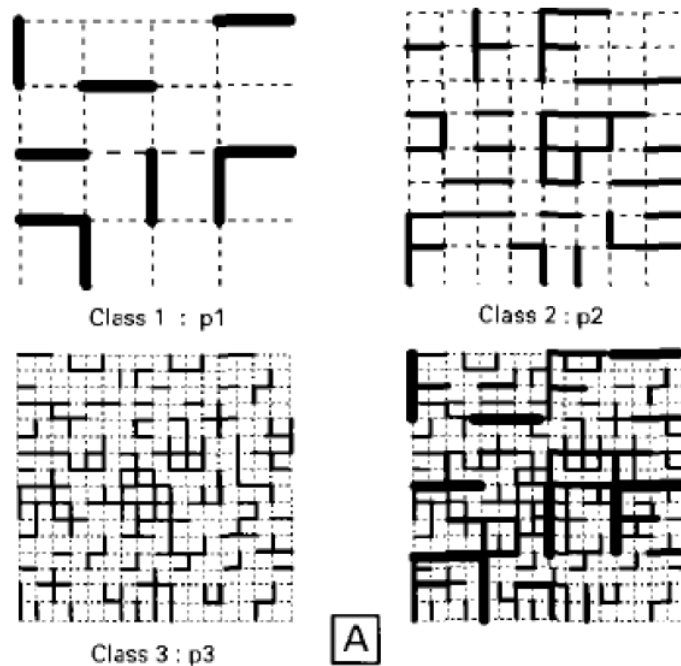
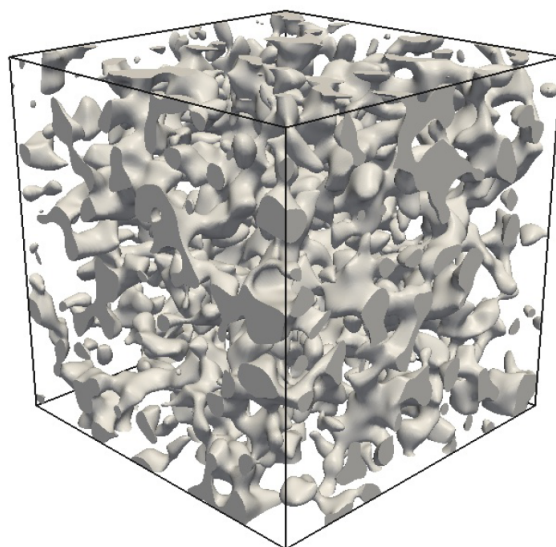


FIGURE 11: Modèle de réseau poreux [K. Xu, J. Daian, D. Quenard (1997)]

Le réseau poreux numérique est construit en superposant plusieurs grilles élémentaires. Dans chaque grille, des pores cylindriques sont disposés en maille régulière. Les tailles des diamètres des cylindres sont basées sur la porosimétrie au mercure.

Plus récemment, on peut citer les travaux de [M. Hosseini, 2015]. Elle a proposé dans sa thèse un modèle qui permet de représenter le réseau capillaire tridimensionnel. Son modèle se base sur des applications directes des mathématiques morphologiques, ce qui permet de représenter des géométries de pores quelconques tout en respectant la distribution poreuse du matériau. C'est une évolution conséquente par rapport au réseau bidimensionnel du modèle XDQ.



**FIGURE 12:** Modèle de réseau poreux [M. Hosseini, 2015]

Elle applique sur ce réseau la loi de Kelvin Laplace afin d'obtenir les isothermes de sorption désorption. Le défaut de la méthode est le coût calculatoire important lié au réseau poreux de morphologie quelconque.

Il existe d'autres modèles qui permettent de simuler les isothermes à partir de la morphologie du réseau poreux. On peut citer les travaux de H. Ranaivomanana [H. Ranaivomanana, 2010] ou de C. Varloteaux [C. Varloteaux, 2013].

## 4 Conclusion

Ce préambule présente les éléments scientifiques sur lesquels reposent la présente thèse. Dans une première partie, une description des matériaux cimentaires et de ses constituants a permis d'illustrer la complexité de sa morphologie aux échelles les plus fines. Dans une seconde partie, nous décrivons les hypothèses et la physique de transfert de l'eau au sein du réseau poreux. Ces notions sont réemployées dans le chapitre un et deux de la thèse.



# Chapitre 1

## Simulation du comportement mécanique d'un béton vis à vis du séchage

### Contents

---

<b>1</b>	<b>Introduction</b> . . . . .	<b>24</b>
1.1	Contexte . . . . .	24
1.2	Contributions . . . . .	24
<b>2</b>	<b>Le séchage</b> . . . . .	<b>25</b>
2.1	La physique de transfert . . . . .	25
2.2	Méthode numérique EFEM . . . . .	27
2.3	Résolution numérique du séchage d'un anneau béton . . . . .	30
2.4	Synthèse . . . . .	34
<b>3</b>	<b>Simulation du couplage mécanique lié au comportement hydrique du béton</b> . . . . .	<b>34</b>
3.1	Lien entre le séchage et le retrait du béton . . . . .	34
3.2	Simulation et résultats . . . . .	35
3.3	Synthèse . . . . .	42
<b>4</b>	<b>Conclusion</b> . . . . .	<b>42</b>

---

# 1 Introduction

## 1.1 Contexte

L'agence nationale de gestion des déchets radioactifs (ANDRA) est chargée de concevoir un stockage des déchets radioactifs à vie longue et d'évaluer sa faisabilité et sa sûreté. La solution choisie consiste à enfouir ceux-ci dans un stockage profond constitué d'un réseau de tunnels permettant d'isoler et confiner la radioactivité sur des durées nécessaires à sa décroissance. Ce projet nommé Cigéo (Centre industriel de stockage géologique) sera implanté en Haute-Marne. Le site sera exploité pendant plus de 100 ans et le stockage sera construit de manière progressive suivant l'affluence des déchets. Le béton est l'un des matériaux retenus pour assurer le confinement de la radioactivité sur le très long terme. Afin de garantir la sûreté et faisabilité du projet, il est fondamental de se préoccuper de la durabilité de la structure et de ses matériaux. Il est connu que divers processus physico-chimiques impactent la durabilité du béton [T. Rougelot, 2008],[Q. Wu, 2014].

Dans ce premier chapitre, nous nous intéressons aux phénomènes de retrait du béton impactant les tunnels du site. Le retrait est une contraction du volume de la pâte de ciment. Lorsqu'il est empêché, le retrait peut être la source de fissuration. C'est pourquoi la maîtrise et la compréhension de ce phénomène sont un enjeu majeur pour la durabilité des ouvrages en béton.

Nous nous plaçons à une échelle intermédiaire du matériau béton, l'échelle mésoscopique. Nous considérons le matériau béton comme étant composé d'une matrice cimentaire continue et d'hétérogénéités (les granulats). Cette échelle est particulièrement adaptée pour étudier la fissuration pour de petites structures car elle permet de prendre en compte l'effet des hétérogénéités présentes dans la pâte de ciment. L'interface entre les granulats et la matrice sont des zones privilégiées pour l'ouverture de fissures. En effet, l'incompatibilité de déformations entre les granulats et le reste de la matrice cimentaire génère des contraintes. L'effet du gradient hydrique aussi est une source de fissuration puisqu'il cause un gradient de déformation provoquant aussi des contraintes.

## 1.2 Contributions

Nous effectuons plusieurs calculs éléments finis couplant le séchage et le retrait d'anneaux bétons. Leur géométrie est idéalisée et les conditions de séchage sont non représentatives de ce que peuvent subir ces tunnels du laboratoire souterrain de l'ANDRA. Ces calculs permettent néanmoins d'étudier qualitativement le séchage et ses effets dans deux cas distincts :

- l'anneau béton est encastré sur sa face extérieure, imitant un encastrement du béton dans la roche du tunnel,
- l'anneau est complètement libre de déplacement sur sa face extérieure, pour le cas d'une adhérence nulle avec la roche du tunnel.



Ce chapitre se décompose en deux grandes parties. Nous consacrons la première partie à l'étude du séchage du matériau béton possédant la géométrie idéalisée des anneaux des tunnels du projet Cigéo. Pour cela, nous effectuons un calcul élément fini basé sur des équations non linéaires de transfert hydrique [C. de Sa, 2007]. Le résultat du séchage non linéaire, nous permet d'alimenter la simulation de la seconde partie de ce chapitre. En effet, nous en déduisons un champ de déformation de retrait. En utilisant ce champ, nous sommes capable de simuler le comportement mécanique de la structure béton en forme d'anneau vis à vis de son séchage. Pour le calcul de séchage et le couplage mécanique, nous employons une méthode numérique de résolution appelée EFEM (Enhanced Finite Element Method) [E. Roubin, 2013]. Cette méthode élément fini utilise un maillage non-adapté à la morphologie du matériau. Le résultat des simulations nous permettent d'analyser la fissuration liée au séchage de l'anneau béton.

## 2 Le séchage

Le séchage d'un matériau provient d'un déséquilibre des conditions hydriques. Ce déséquilibre provoque un transfert hydrique [J-F. Daïan, 2010]. Ce transfert d'eau au sein du matériau est composé des phases liquide et gaz. Dans le cas du séchage, le transfert d'eau est dirigé vers l'extérieur du matériau. Lors de son imbibition, le transfert est dirigé vers l'intérieur du matériau, le matériau se sature.

### 2.1 La physique de transfert

#### 2.1.1 Hypothèses

[O. Coussy, 2001] et [M. Mainguy, 2001] ont construit des modèles de séchage prenant en compte un certain nombre de mode de transport :

- Le transport darcéen de l'air et de l'eau liquide (filtration liée à un gradient de pression),
- Le transport diffusif de vapeur d'eau (gradient de concentration molaire),
- Le transport convectif,

**Pour la physique de notre modèle de séchage, nous faisons le choix d'un unique mode de transfert, le transport darcéen de l'eau liquide.** Nous avons choisi ce mode de transfert car il s'agit du mode prédominant tant que la phase liquide est continue, c'est à dire pour une grande plage d'humidité relative. Les paramètres de cette équation non linéaire sont accessibles dans la littérature [C. de Sa, 2007].

$K_{matrice} [m^2]$	$K_{granulat} [m^2]$	$a [MPa]$	$b [-]$	$\mu_l [Pa.s]$	$\phi_{matrice}$	$\phi_{granulat}$
$1.1 \times 10^{-21}$	$3.3 \times 10^{-24}$	25	2.08	$0.89 \times 10^{-3}$	0.13	0.03

Ci dessous, nous présentons les différentes hypothèses nécessaires à l'obtention des équations du modèle :

- La matrice solide est indéformable.
- La température est constante. Cette hypothèse implique de ne pas prendre en compte la variation de température liée à l'évaporation de l'eau liquide.
- Les effets de la gravitation sont négligés devant les forces capillaires. Cette hypothèse s'avère juste pour les phases gaz et liquide sauf pour une saturation du milieu qui tend vers 1, dans ce cas les forces capillaires sont très faibles.
- La phase gaz est constitué d'air sec et de vapeur d'eau.

**Hypothèses fortes :**

- Le transport darcéen de l'air humide, la diffusion et la convection sont négligées. La vitesse de l'air humide est nulle.
- La pression de l'air humide est égale à la pression atmosphérique.
- Il n'y a pas d'évaporation dans le matériau.

### 2.1.2 Loi de filtration

La loi de Darcy est une loi qui décrit les phénomènes de filtrations. Elle permet de relier la vitesse du fluide s'écoulant à travers un matériau en fonction du gradient de pression.

**Loi de Darcy :**

$$S_l \cdot \phi \cdot v_l = - \frac{K \cdot k_{rl}(S_l)}{\mu_l} \cdot grad(P_l) \quad (1.1)$$

Avec  $S_l$  le degré de saturation en eau liquide (rapport entre le volume d'eau et le volumes des vides),  $\phi$  la porosité,  $K$  la perméabilité intrinsèque à l'eau liquide,  $k_{rl}(S_l)$  la perméabilité relative qui est fonction du degré de saturation,  $\mu_l$  la viscosité dynamique et  $P_l$  la pression de liquide.

Il est possible de réécrire cette loi en remplaçant la pression de liquide par la pression capillaire. Nous avons supposé que la pression de gaz est égale à la pression atmosphérique. Ainsi, lors du séchage, la pression de liquide est aisément cent fois plus grande que la pression de gaz qui devient négligeable.

$$S_l \cdot \phi \cdot v_l = - \frac{K \cdot k_{rl}(S_l)}{\mu_l} \cdot grad(P_c) \quad (1.2)$$

$k_{rl}$  et  $P_c$  sont reliés au degré de saturation par le modèle de [M.T. van Genuchten, 1980]. Il s'agit d'un modèle issu du domaine de l'étude des sols. Ce modèle est appliqué au matériau cimentaire [V. Baroghel-Bouny, 1999] pour obtenir :

$$k_{rl}(S_l) = \sqrt{S_l} \cdot (1 - (1 - S_l^b)^{\frac{1}{b}})^2 \quad (1.3)$$

$$P_c = a.(S_l^{-b} - 1)^{1-\frac{1}{b}} \quad (1.4)$$

Il est possible d'exprimer la vitesse du liquide en écrivant l'équation de conservation de la masse :

$$\dot{m}_l + \text{div}(m_l.v_l) = 0 \quad (1.5)$$

$$m_l = \rho_l.\phi.S_l \quad (1.6)$$

En combinant ses différentes équations, nous obtenons une équation différentielle en  $S_l$  non linéaire :

$$\phi.\dot{S}_l + \text{div}\left(\frac{dP_c}{dS_l} \cdot \frac{k_{rl}(S_l).K}{\mu_l} \cdot \text{grad}(S_l)\right) = 0 \quad (1.7)$$

## 2.2 Méthode numérique EFEM

La méthode numérique utilisée dans ce présent chapitre est appelée EFEM (Embedded Finite Element Method) [S. Melnyk (2006)], [N. Benkemoun (2010)], [E. Roubin, 2013]. EFEM est une méthode numérique particulièrement adaptée pour la modélisation des matériaux cimentaires à une échelle où les hétérogénéités sont présentes. La méthode EFEM repose sur un enrichissement cinématique local [J. C. Simo (1993)], [M. Hautefeuille (2009)].

Pour représenter les hétérogénéités du matériau, EFEM utilise un maillage spatial dit non-adapté. Ce maillage est indépendant de la géométrie du matériau. Ainsi, ce type de maillage possède des éléments biphasiques dont les propriétés de phases sont différentes [S. Melnyk (2006)]. Pour représenter le contraste de propriétés dans ces éléments, ils sont enrichis cinématiquement par une discontinuité locale dans le champ de déformation. Cette discontinuité est appelée discontinuité faible.

La représentation de la fissuration pour les matériaux cimentaires est fondamentale. Dans un élément du maillage, le comportement fragile de ce type de matériau est traité par une discontinuité locale du champ de déplacement appelée discontinuité forte [G. N. Wells (2000)], [D. Brancherie (2009)], [N. Benkemoun (2010)]. La fissure au sein d'un élément est caractérisée par une interface (1D, 2D ou 3D) et une valeur d'ouverture.

### 2.2.1 Maillage adapté

Les maillages adaptés sont dépendant de la géométrie du matériau. Pour un matériau composé d'une matrice solide et d'hétérogénéités, le maillage est composé de deux types d'éléments :

- les éléments qui sont présents dans la matrice et possèdent les caractéristiques physiques de la matrice,

- les éléments qui sont présents dans les hétérogénéités et possèdent les caractéristiques physiques des hétérogénéités.

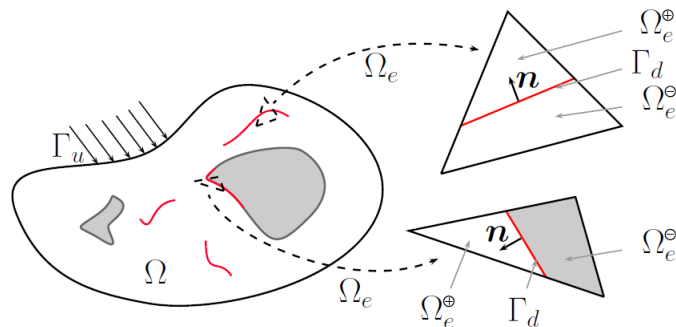
Par conséquent, le maillage doit s'adapter la complexité de la géométrie du matériau. Le temps de calcul pour la construction d'un maillage adapté est inacceptable pour représenter les matériaux cimentaires à l'échelle mésoscopique.

### 2.2.2 Maillage non adapté

Un maillage non adapté [S. Melnyk (2006)], [N. Benkemoun (2010)], [E. Roubin, 2013] est un maillage homogène qui est projeté sur la géométrie spatiale du matériau. Ce maillage n'est pas défini par la géométrie du problème. Pour un matériau composé d'une matrice solide et d'hétérogénéités, le maillage est composé de trois types d'éléments :

- les éléments qui sont présents dans la matrice et possèdent les caractéristiques physiques de la matrice,
- les éléments qui sont présents dans les hétérogénéités et possèdent les caractéristiques physiques des hétérogénéités,
- les éléments qui sont à l'interface entre la matrice et les hétérogénéités. Tous ces éléments sont divisés en deux sous-domaines par une interface (1D, 2D et 3D) qui représente la discontinuité entre la matrice et l'hétérogénéité. Les sous-domaines possèdent les caractéristiques physiques de leur phase respective.

La simulation d'un maillage homogène et sa projection sur la géométrie du matériau est rapide, même pour des maillages avec plusieurs centaines de milliers de nœuds.



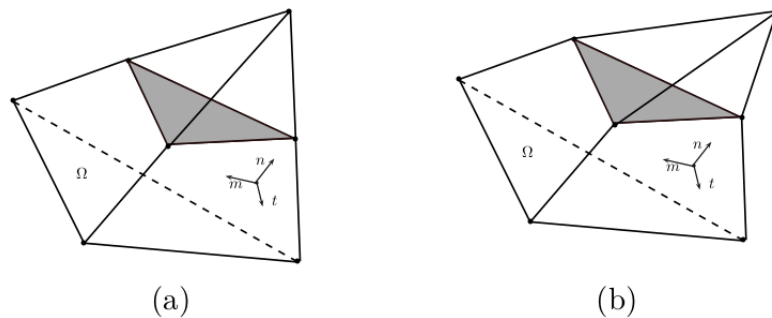
**FIGURE 1.1:** Schéma de deux éléments d'un maillage non-adapté, un élément avec discontinuité faible (élément coupé par la présence d'une hétérogénéité) et élément avec discontinuité forte (élément coupé par la présence d'une fissure) [E. Roubin, 2013]

Pour représenter le contraste de propriétés entre les sous-domaines de ce type d'élément, EFEM enrichit leur cinématique [S. Melnyk (2006)]. Le champ de déformation de ces éléments possède une discontinuité appelée discontinuité faible. La méthode EFEM introduit une discontinuité au sein du champ de déplacement pour gérer la fissuration. Cette discontinuité du champ de déplacement est appelée discontinuité forte.

### 2.2.3 Discontinuités faibles

L'emploi d'un maillage non adapté pour modéliser un matériau possédant des hétérogénéités engendre des éléments partagés en sous-domaine avec des propriétés différentes. Ces propriétés peuvent être, par exemple, des rigidités différentes pour un calcul de mécanique ou dans le cas d'un calcul de séchage, des perméabilités différentes entre la matrice cimentaire et les hétérogénéités. EFEM permet de gérer cette problématique en enrichissant la cinématique de ses éléments localement [S. Melnyk (2006)]. La méthode introduit une discontinuité dans le champ de déformation des éléments en question. On parle de discontinuités faibles.

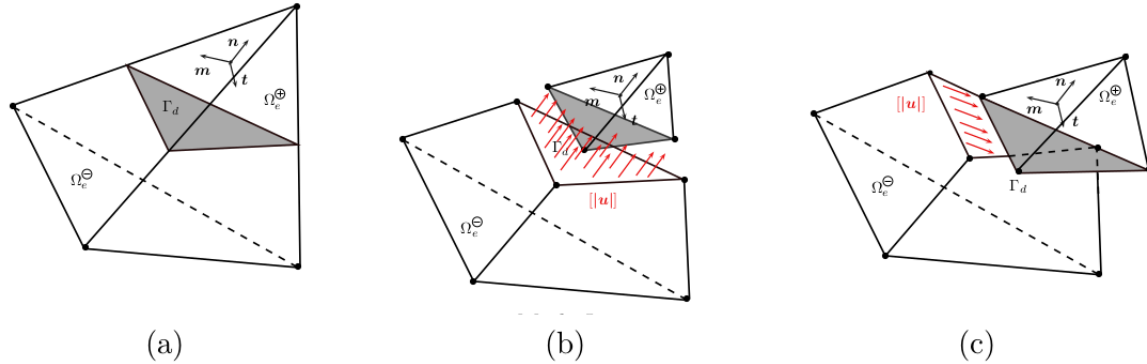
Pour un élément de maillage tétraédrique séparé en 2 sous-domaines possédant des modules d'élasticité différents, la discontinuité faible va permettre aux sous-domaines de l'élément de se déformer différemment selon son module. On peut constater ce phénomène figure 1.2.



**FIGURE 1.2:** Élément tétraédrique séparé en 2 sous-domaines avec 2 module d'élasticité [A. Vallade (2016)]

### 2.2.4 Discontinuités fortes

Être capable de simuler la fissuration pour les matériaux cimentaires est fondamentale. Pour cela, la méthode EFEM introduit une discontinuité au sein du champ de déplacement. Cette discontinuité du champ de déplacement, appelée discontinuité forte est localisée sur une interface (un point en 1D, une droite en 2D et une plan en 3D) dans l'élément du maillage [N. Benkemoun (2010)]. Pour ouvrir la ou les fissures en question, il est nécessaire de définir des critères. Il faut un critère de localisation pour obtenir l'orientation de l'ouverture de la fissure et un critère d'ouverture pour déterminer la taille de cette fissure. Figure 1.3, nous avons l'ouverture de fissure en mode I (b) et en mode II (c) sur un élément tétraédrique. Le mode I d'ouverture de fissure est un critère de type Rankine. L'élément de matériau cimentaire ne peut pas dépasser une valeur défini de contrainte de traction. Le mode II correspond à un critère de type Mohr-Coulomb [A. Vallade (2016)].



**FIGURE 1.3:** Élément tétraédrique séparé en 2 sous-domaines avec 2 module d'élasticité [A. Vallade (2016)]

Il faut souligner le caractère local de la méthode EFEM. Ces sont les éléments du maillages qui sont enrichis cinématiquement et permettent l'obtention de discontinuités faibles ou fortes. La méthode peut être implémentée dans n'importe quel solveur éléments finis si il est possible de modifier les équations locales à résoudre. Le caractère local d'EFEM permet une gestion locale de la fissuration, c'est à dire à l'échelle de l'élément, ce qui rend possible la multifissuration à l'échelle du maillage entier.

## 2.3 Résolution numérique du séchage d'un anneau béton

### 2.3.1 Paramètres du problème

Pour la simulation du séchage, nous avons besoin des valeurs paramètres suivant :

- $K$  la perméabilité intrinsèque à l'eau liquide,
- $a$  et  $b$  les paramètres du modèle de van Genuchten qui sont identifiés à partir d'isothermes de désorption,
- $\mu_l$  la viscosité dynamique de l'eau
- $\phi$  la porosité du béton

Les valeurs utilisées pour notre résolution numériques sont issues de la thèse de [C. de Sa, 2007]. **Notre matériau est composé d'une matrice cimentaire et de granulats.** Il faut donc distinguer les caractéristiques des hétérogénéités et de la matrice.

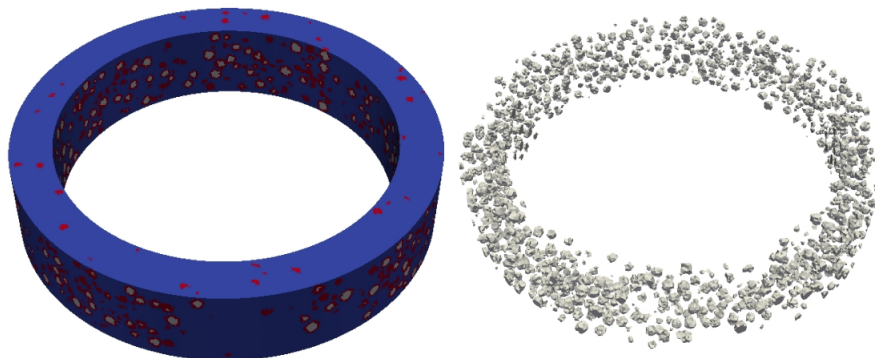
$K_{matrice}[m^2]$	$K_{granulat}[m^2]$	$a[MPa]$	$b[-]$	$\mu_l[Pa.s]$	$\phi_{matrice}$	$\phi_{granulat}$
$1.1 \times 10^{-21}$	$3.3 \times 10^{-24}$	25	2.08	$0.89 \times 10^{-3}$	0.13	0.03

### 2.3.2 Géométrie, maillage et conditions limites

Nous souhaitons **simuler le séchage d'un anneau de béton.** Ce choix géométrie spécifique provient de l'étude du séchage des tunnels du projet Cigéo. La géométrie des

anneaux béton simulés est réduite par rapport à la réalité des dimensions des tunnels. Le diamètre extérieur est de 50 cm et le diamètre intérieur est de 45 cm. La hauteur d'un anneau est de 10 cm. Ces dimensions ont été choisies car des essais expérimentaux antérieurs à cette thèse ont été menés avec des anneaux béton coulés dans des moules à ces dimensions.

Pour la modélisation du béton, nous considérons le matériau comme composé d'une matrice cimentaire et d'hétérogénéités (les granulats). **Il n'est pas envisageable de représenter l'ensemble de la granulométrie du mélange granulaire utilisé pour une formulation de béton. Ici, nous utilisons une distribution granulaire homogène et les granulats sont sphériques. Le diamètre du plus petit granulat est égal à 0.4 cm. Tous les granulats plus petits sont confondus à la matrice cimentaire. Le diamètre du plus gros granulat est de 1.6 cm.** La distance entre deux noeuds du maillage est le paramètre limitant pour représenter les granulats plus fins. En effet, il faut que cette distance soit plus faible que le diamètre du plus petit granulat. La fraction volumique des granulats présents dans l'anneau béton simulé est de quinze pourcents. Cette valeur est faible comparée à une formulation de béton. En fixant la distance entre deux noeuds du maillage à 0.3 cm, nous obtenons déjà 282 831 noeuds et 1 481 455 éléments tétraédriques.



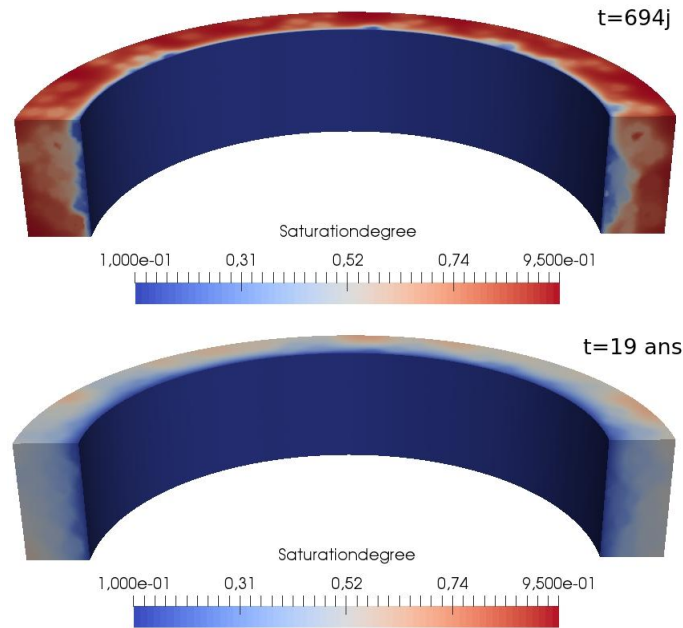
**FIGURE 1.4:** Modélisation de l'anneau à gauche et des hétérogénéités présentes dans l'anneau à droite (en bleu la matrice, en blanc les granulats, en rouge les éléments interfaces)

Pour les conditions de séchage, l'ensemble de l'anneau possède initialement un degré de saturation de 0.95. L'anneau est séché sur son intrados uniquement. On applique à tous les noeuds du maillage situés sur l'intrados un degré de saturation de 0.1.

### 2.3.3 Résultats de la modélisation

Nous avons, figure 1.5, deux images du champ de degré de saturation dans l'anneau à deux pas de temps différents. Les temps de séchage sont longs, le matériau béton est peu perméable. La première image est issue d'un pas de temps de presque 2 ans. Sur ces

coupes 1.5, nous pouvons constater les effets des granulats qui sont moins perméables que la matrice cimentaire. Les granulats perturbent le front de séchage. Sur la seconde image, le matériau est presque sec. Le pas de temps est d'environ 19 ans (en annexe A différentes coupes avec plusieurs pas de temps sont disponibles).



**FIGURE 1.5:** Champs de degré de saturation à  $t = 694j$  et  $t = 19$  ans

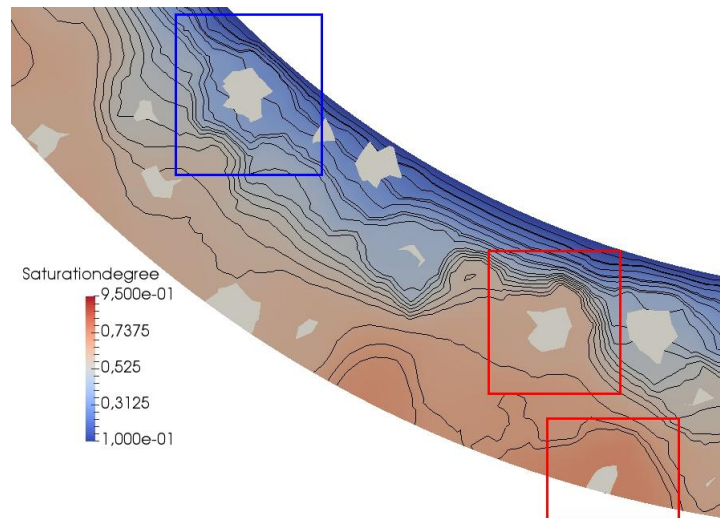
#### Effet des hétérogénéités :

La figure 1.6 met en évidence les lignes d'isovaleur de degré de saturation dans une coupe de l'anneau. Les granulats sont représentés en gris clair.

**Les granulats, moins perméables que la matrice, doivent empêcher l'avancée du front de séchage.** Nous pouvons constater ce phénomène dans les deux encadrés rouges présents sur la figure. Nous pouvons voir le nombre important de lignes d'isovaleur devant le granulat. Le front de séchage est ralenti par la présence d'un granulat moins perméable.

Il faut néanmoins être prudent durant l'interprétation de ses isovaleurs. Sur une coupe 2D, on ne voit pas l'influence d'hétérogénéités présentes hors plan de coupe. Plusieurs exemples montrent un effet inverse des granulats comme dans l'encadré bleu sur la figure 1.6. Ici, le granulat semble aider à la propagation du front de séchage. Pour tenter d'expliquer cette observation, autrement que par la présence d'un éventuel granulat hors plan, il faut comprendre l'effet de la non linéarité des équations de séchage.





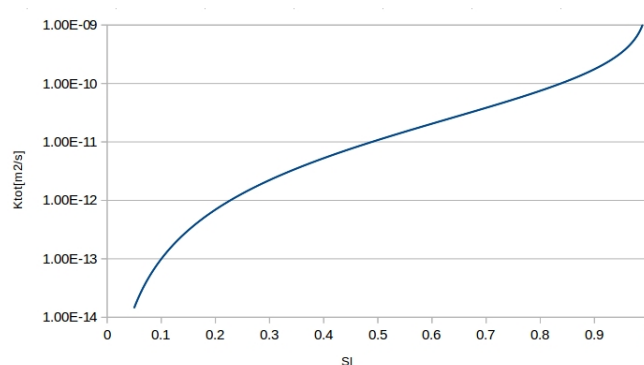
**FIGURE 1.6:** Lignes d'isovaleur de degré de saturation sur une coupe de l'anneau

Sur la figure 1.6, dans l'encadré bleu, nous observons l'avancée plus rapide du front de séchage. Cette avancée signifie que le granulat aide au séchage du matériau. Ce phénomène peut être lié à la non linéarité du coefficient de perméabilité totale. Les granulats restent saturés plus longtemps car leur perméabilité intrinsèque est plus petite que la pâte de ciment. Il est possible que le granulat de l'encadré bleu figure 1.6 possède un coefficient de perméabilité totale plus élevé que la matrice cimentaire qui l'entoure et donc se comporte comme un matériau plus perméable pour ce pas de temps.

Effet de la non-linéarité :

La non linéarité de l'équation de séchage est due à la dépendance du coefficient au degré de saturation. Nous avons tracé, figure 1.7, l'évolution de  $K_{tot}(S_l)$ . Ce coefficient est équivalent à une perméabilité totale. En traçant cette fonction, nous obtenons la figure 1.7.

$$K_{tot}(S_l) = \frac{1}{\phi} \cdot \frac{dP_c}{dS_l} \cdot \frac{k_{rl}(S_l) \cdot K}{\mu_l} \quad (1.8)$$



**FIGURE 1.7:** Fonction  $K_{tot}(S_l)$

**Plus le coefficient est petit moins le matériau est perméable. Lorsque le degré de saturation est faible, le matériau devient 100 000 fois moins perméable que lorsqu'il est complètement saturé. Cette écart est considérable et bien supérieur au rapport entre les coefficients de perméabilité intrinsèque de la matrice cimentaire et des granulats.**

En conséquence, plus notre matériau est sec, plus il va mettre du temps à sécher. Ce phénomène est logique. Notre modèle se base sur un mode de transfert de l'eau dans sa phase liquide. Or, à mesure que le matériau sèche, la phase liquide disparaît dans le matériau. Elle devient discontinue et laisse place à l'air humide. Le moteur du transfert d'eau passe de la filtration de l'eau liquide à une filtration de gaz (diffusion et convection). Ces modes de transfert ne sont pas implémentés. Notre modèle de séchage ne devrait pas être utilisé lorsque le degré de saturation est trop petit ( $S_l < 0.3$ ).

## 2.4 Synthèse

Le modèle de séchage semble simuler convenablement l'évolution du degré de saturation au sein du matériau béton. Il permet de visualiser le front de séchage et de constater l'effet des hétérogénéités et de la non linéarité. Il s'agit d'un modèle basé sur le transfert de l'eau dans sa phase liquide. On peut donc critiquer l'emploi de celui-ci pour des degrés de saturation inférieurs à 0,3. C'est à dire lorsque les deux tiers du volume de la phase liquide est passée en phase gaz. Nous avons connaissance de l'état hydrique du matériau cimentaire dans le temps. Nous pouvons maintenant compléter le modèle avec l'état mécanique correspondant au champ de degré de saturation.

# 3 Simulation du couplage mécanique lié au comportement hydrique du béton

## 3.1 Lien entre le séchage et le retrait du béton

Le retrait est une contraction du volume de la pâte de ciment. Lorsqu'il est empêché, le retrait peut être la source de fissuration. C'est pourquoi la maîtrise et la compréhension de ce phénomène sont un enjeu majeur pour la durabilité des ouvrages en béton. Ici, nous nous intéressons au **retrait de dessiccation**.

### 3.1.1 Physique du retrait de dessiccation

**Lorsque le matériau sèche, la pâte de ciment va se contracter sous l'effet de la dépression capillaire.** Si un pore de la pâte de ciment possède une interface eau liquide/air humide et que sa taille est inférieure à  $2 \mu m$  [J-F. Daïan, 2010], alors la pression de l'eau

liquide dans ce pore est négative. C'est à dire que l'eau liquide tire sur la matrice cimentaire. L'eau liquide du pore subit de la traction. Il y a donc un lien direct entre la pression de l'eau liquide dans le matériau et le retrait. Dans ce pore, une partie est vide d'eau. Cette fraction du volume du pore engendre une pression sur la pâte de ciment environ égale à la pression atmosphérique. Si on néglige la pression atmosphérique devant la pression du liquide, la fraction du volume d'eau qui engendre une pression sur la pâte de ciment est égale au degré de saturation du pore. Ainsi, la pression dans la matrice cimentaire peut être estimée par ([C. de Sa, 2007]) :

$$P_{matrice} = S_l \cdot P_{liquide} \quad (1.9)$$

Nous savons estimer la contrainte dans la pâte de ciment autour d'un pore possédant une interface eau liquide/air humide. Pour qu'il y ait une variation de volume de la pâte, il faut donc que la pression de liquide varie. On peut écrire de façon incrémentale :

$$d\epsilon_{matrice} = \frac{1 - 2\nu}{E} \cdot S_l \cdot dP_{liquide} \quad (1.10)$$

Avec  $\epsilon_{matrice}$  la déformation de la matrice cimentaire,  $E$  le module d'élasticité,  $\nu$  le coefficient de Poisson.

### 3.1.2 Le couplage entre la simulation du séchage et le retrait

L'objectif de cette partie est de simuler l'effet mécanique du retrait de dessiccation de l'anneau béton. Pour cela, nous récupérerons le champ de degré de saturation du calcul numérique élément fini de séchage pour chaque pas de temps. Nous transformons ceux-ci en utilisant la formule 1.10 en champs de déformation cumulés. Chaque champ de déformation est appliqué itérativement aux éléments du maillage afin d'obtenir le comportement mécanique de l'anneau béton vis à vis de son séchage. En procédant de cette manière, il faut noter qu'il n'y a **pas de rétroaction de la fissuration sur le séchage** dans notre modèle.

## 3.2 Simulation et résultats

### 3.2.1 Méthode numérique de résolution EFEM

Pour ce calcul numérique, nous utilisons toujours EFEM. Cette méthode a été développée pour les matériaux au comportement fragile tel que le béton ou les roches. Cette méthode est capable de simuler la fissuration au sein des éléments qui dépassent la contrainte maximale élastique. Pour cela, la méthode EFEM introduit la notion de discontinuités fortes [E. Roubin, 2013]. Nous sommes donc en mesure de suivre l'ouverture des fissures au sein de l'anneau béton à chaque pas de temps.

### 3.2.2 Caractéristiques mécaniques de la pâte de ciment et des granulats

Le matériau béton simulé est constitué d'hétérogénéités et d'une pâte de ciment. Les caractéristiques mécaniques sont mises en évidence dans le tableau ci-dessous. **Pour notre simulation, nous supposons que les granulats ne subissent aucun retrait. Ils ne fissurent pas non plus, ils ont un comportement élastique.**

$E_{matrice} [GPa]$	$E_{granulat} [GPa]$	$\sigma_{max} [MPa]$	$\nu$
20	80	1	0.2

### 3.2.3 Conditions limites

Nous effectuons des calculs correspondant **au cas d'un anneau béton encastré sur son extradoss et au cas d'un anneau libre**. Dans le premier cas, tous les déplacements sont bloqués sur les noeuds appartenant à la face externe de l'anneau. Cette condition d'encastrement représente l'effet d'une parfaite adhérence entre la roche et le béton du tunnel du projet Cigéo. Le cas d'un anneau libre représente le cas limite opposé. Aucun déplacement est bloqué.

### 3.2.4 Sources de fissuration dans l'anneau béton

Avec cette simulation, **nous cherchons surtout à observer et étudier la fissuration de l'anneau béton**. En effet, la fissuration non maîtrisée est le principal problème pour la durabilité d'un ouvrage. Il est nécessaire de comprendre ce qui peut causer l'ouverture de fissures ici.

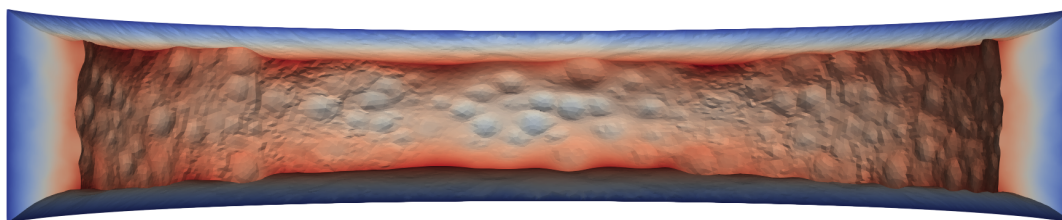
Un anneau libre constitué d'un matériau homogène, en apesanteur et sans chargement extérieur qui subit un retrait homogène n'est soumis à aucune contrainte. Il ne fissure pas. Or, nous avons un matériau qui est constitué d'une matrice cimentaire et d'hétérogénéités. Ces hétérogénéités ne subissent pas de retrait de dessiccation (dans notre modèle) et ils possèdent un module d'élasticité différent de la matrice. Ces deux hypothèses sont la source de contraintes dans les éléments à l'interface entre les granulats et la pâte de ciment. Nous avons également un champ de déformation imposé qui n'est pas homogène puisque celui-ci est basé sur le calcul de séchage. Ce champ applique un retrait plus important sur les éléments de l'intrados de l'anneau, là où la condition de séchage est imposée. Ce retrait différentiel est aussi une source possible de fissuration. La condition d'encastrement sur l'extrados est la dernière source de fissuration. La déformation due au retrait est empêchée. Cette déformation empêchée crée des contraintes sur l'extrados pouvant donner naissance à des fissures.

Pour rappel, nous avons trois sources de fissurations possibles dans l'anneau :

- La condition d'encastrement.
- La présence d'hétérogénéités.
- Les gradients hydriques de retrait.

Nous avons effectué trois simulations dans le but de visualiser indépendamment les effets des trois sources de fissuration identifiés. Le premier calcul est en condition encastrement avec le champ de déformation. Le second est en condition libre avec le champ de déformation. Le dernier calcul est en condition libre avec un retrait homogène.

### 3.2.5 Image de la déformée

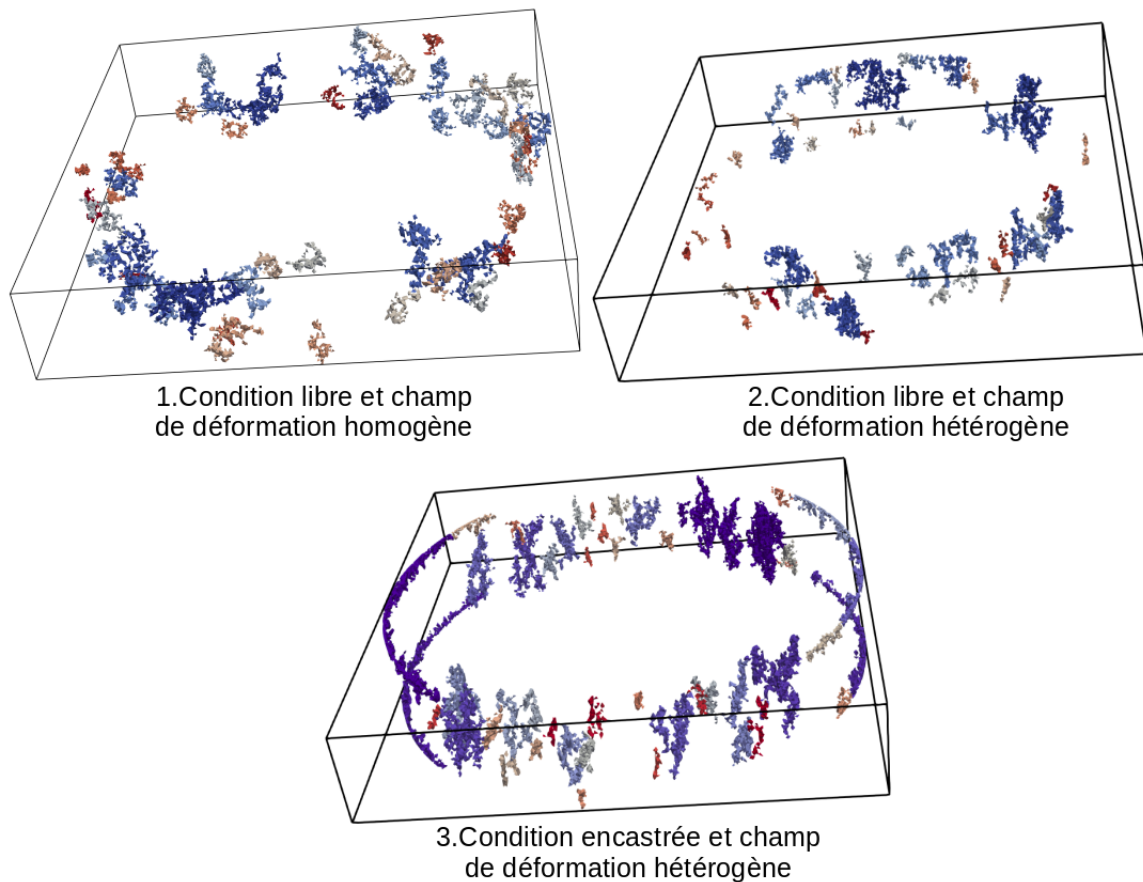


**FIGURE 1.8:** Déformée de l'anneau avec un coefficient multiplicateur de 500 pour  $t = 8$  ans

Figure 1.8, nous avons la déformée multipliée par un facteur 500 pour le cas encastrement et champ de déformation imposé hétérogène, c'est à dire provenant du champ de degré de saturation en eau. Le gradient de couleur correspond à une valeur moyenne des déformations des trois directions. Nous pouvons constater que l'extrados est encastrement et que le maximum des déformations a lieu sur l'intrados de l'anneau. On remarque également l'effet de la présence des granules qui ne subissent pas de retrait. Ils possèdent un module d'élasticité quatre fois supérieur à la pâte de ciment.

### 3.2.6 Étude de la fissuration

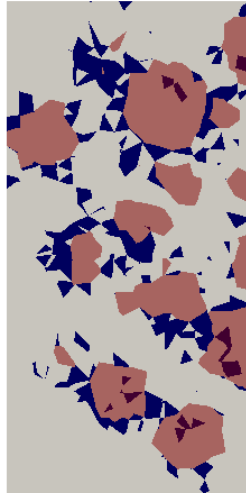
Nous présentons figure 1.9, le rendu visuel des trois cas de simulations et plus spécifiquement des fissures ouvertes et connectées en fin de séchage ( $t=19$ ans). Dans la suite de cette partie, nous analysons la fissuration pour ces trois cas. Les échelles de tailles d'ouvertures de fissures représentées figure 1.9 ne sont pas identiques pour les trois cas. Pour une comparaison quantitative, le lecteur peut consulter la courbe 1.14 qui permet de comparer le nombre d'ouverture ainsi que leurs tailles dans les trois configurations.



**FIGURE 1.9:** Fissures pour les 3 cas d'anneau béton

Analyse de la fissuration du cas 1 condition libre et champ de retrait homogène :

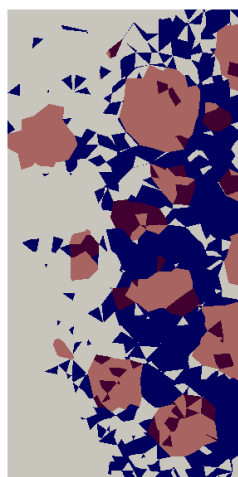
Un anneau composé d'un matériau homogène qui subit un retrait homogène (retrait identique partout dans l'anneau) se déforme sans contrainte. Ici, le matériau est hétérogène, il y a des granulats et la pâte de ciment. Les granulats ne subissent pas de retrait et possède un module d'élasticité supérieur à la matrice cimentaire. La pâte de ciment ne peut pas se déformer librement à cause des hétérogénéités. Il en résulte des concentrations de contraintes à l'interface granulat / pâte de ciment. Ainsi, dans ce cas, l'ouverture des fissures se fait principalement autour des granulats. Nous pouvons observer ce phénomène dans la coupe 1.10. La couleur bleu représentent les éléments qui ont fissuré et en rouge les granulats. La figure met en évidence les fissures connectées 1.10. Ces fissures sont réparties un peu partout dans l'anneau ce qui est cohérent vis à vis du mode de fissuration lié à la présence des granulats.



**FIGURE 1.10:** Coupe de l'anneau dans le cas 1 (éléments fissurés en bleu, les granulats en rouge et la matrice en gris)

Analyse de la fissuration du cas 2 condition libre et champ de retrait hétérogène :

Dans ce cas, le mode de fissure est similaire au cas 1, l'anneau est libre, les contraintes dans le matériau sont dues à la déformation empêchée de la pâte de ciment par les granulats. En plus de ce phénomène, l'effet du gradient de séchage est notable et accentue la fissuration, figure 1.11. La coupe provient d'une simulation à un pas de temps d'environ 8 ans. Le béton est encore saturé sur son extrados à gauche de la coupe. Ainsi, la majorité des fissures sont situées à droite de la coupe là où le matériau a séché le plus et où le retrait est important. Figure 1.9, sur la vue en perspective, on observe aussi que la répartition des fissures est principalement autour de l'intrados.

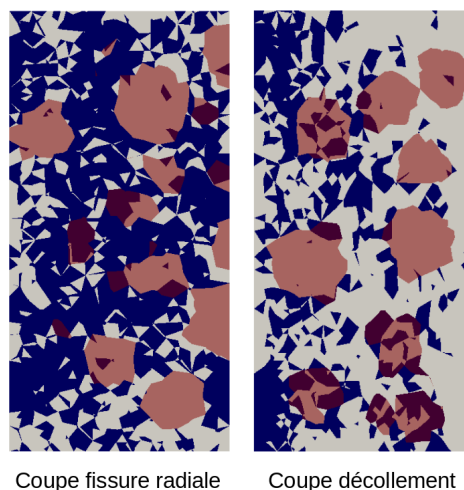


**FIGURE 1.11:** Coupe de l'anneau dans le cas 2 (intrados à droite, éléments fissurés en bleu, les granulats en rouge et la matrice en gris)

Analyse de la fissuration du cas 3 condition encastré et champ de retrait homogène :

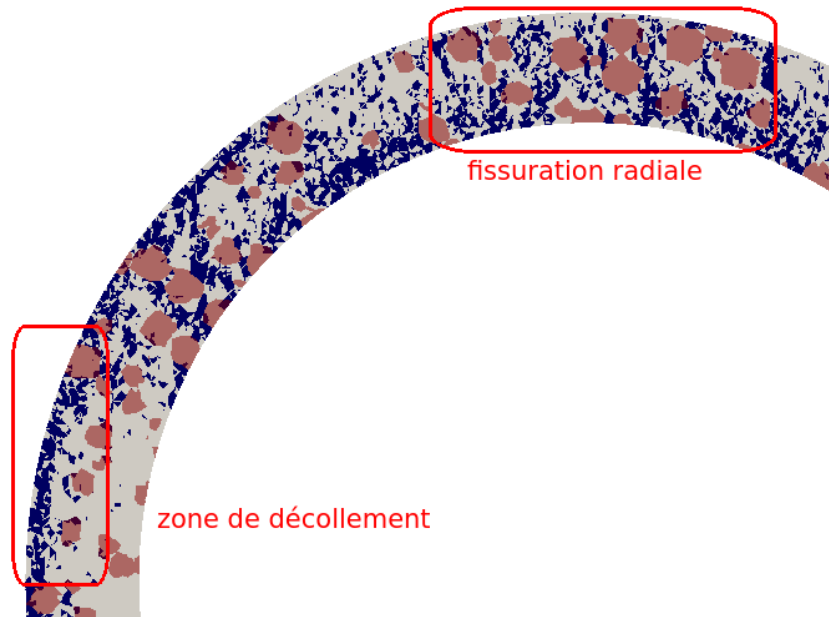
Pour le cas 3, l'anneau est encastré, les contraintes dans le matériau sont dues à la déformation empêchée de la pâte de ciment par les granulats et au déplacement bloqué des noeuds sur l'extrados. Sur la figure 1.12, l'effet du gradient de séchage est moins visible à cause de la condition en déplacement bloqué sur l'extrados. Ces deux coupes mettent en évidence 2 modes de fissuration distincts. Ils sont aussi visibles sur la vue en perspective figure 1.9. Sur la coupe de droite 1.12, nous constatons la fissuration des éléments en haut et en bas l'extrados (à gauche de la coupe). Dans le cadre de projet Cigéo, si l'adhérence entre le béton et la roche est de résistance inférieure à la résistance du béton en traction, ce mode de fissuration sur l'extrados se manifesterait comme un décollement de l'anneau béton de la roche. Pour le second mode de fissuration, sur la coupe de gauche 1.12, on remarque que l'anneau est fissuré de l'intrados à l'extrados. Il s'agit du mode de fissuration radiale. Ces fissures radiales sont dues à la condition d'encastrement sur l'extrados. Figure 1.9, sur la vue en perspective, on observe que ces fissures radiales traversent l'anneau d'un bout à l'autre l'anneau. Ce mode de fissuration est un vrai problème pour la durabilité de la structure.

Nous pouvons remarquer figures 1.9 et 1.13 que la fissuration de décollement sur l'extrados et la fissuration radiale n'ont pas lieu au même endroit. Il y a deux zones fissurées radialement et deux zones de décollements à l'extrados. Ces zones sont bien distinctes et se font face de part et d'autre de l'anneau. Cette répartition n'est pas liée au positionnement des granulats car nous obtenons un résultat similaire avec une géométrie de matériau différente. Ce phénomène semble provenir du champ de retrait. En effet, pour une simulation avec un cas encastré et retrait homogène, ces zones se superposent. Ce résultat est cohérent et attendu. Nous ne savons pas expliquer pourquoi nous n'observons pas le même phénomène en utilisant un champ de déformation imposé hétérogène.



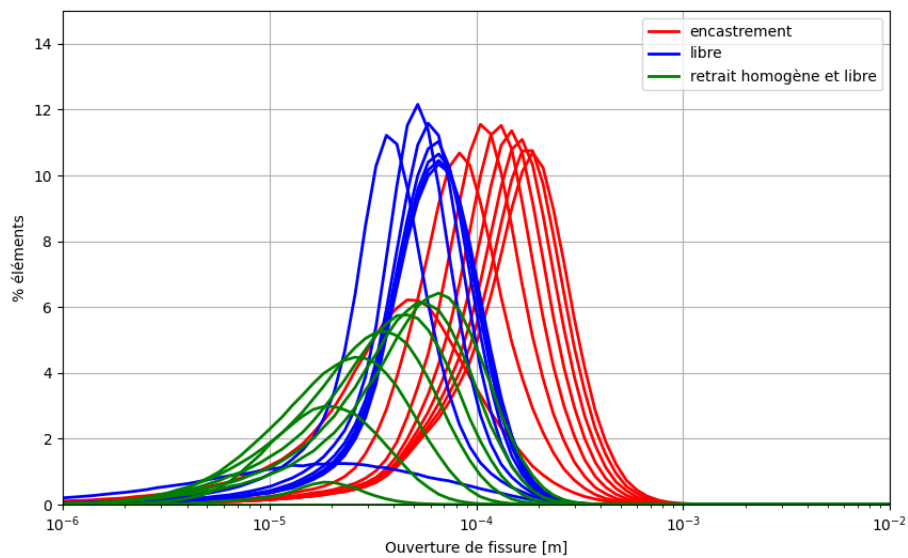
**FIGURE 1.12:** Coupes de l'anneau dans le cas 3 de deux plans différents (éléments fissurés en bleu, les granulats en rouge et la matrice en gris)





**FIGURE 1.13:** Coupe de l'anneau dans le cas 3 (éléments fissurés en bleu, les granulats en rouge et la matrice en gris)

Analyse quantitative de la fissuration :



**FIGURE 1.14:** Répartition du pourcentage d'éléments fissurés en fonction de la taille d'ouverture des fissures

Sur la courbe 1.14, nous avons la répartition du pourcentage d'éléments fissurés en fonction de la taille d'ouverture des fissures. Chaque courbe de la même couleur repré-

sente un pas de temps, et les trois couleurs différentes donnent les différents cas de conditions limites. Tout d'abord, nous constatons que le cas 3 (encastrement et champ de déformation imposé hétérogène) cause les ouvertures de fissures les plus grandes. La courbe de répartition ressemble à une loi normale centrée autour de 0,2mm en fin de séchage. Le cas 1 (libre et champ imposé homogène) et le cas 2 (libre et champ imposé hétérogène) donnent des tailles ouvertures de fissures centrées autour de 0,07mm. Le nombre d'éléments fissurés est aussi nettement supérieur pour le cas 2 et 3. Le champ de déformation hétérogène imposé impacte le nombre d'ouverture de fissures et l'effet de l'encastrement impacte la taille des fissures.

### 3.3 Synthèse

Dans cette partie, nous avons simulé l'effet mécanique du séchage sur un anneau béton. Pour cela, nous avons utilisé une méthode de calcul élément fini appelé EFEM [E. Roubin, 2013]. Cette méthode permet de gérer la fissuration du matériau béton. Nous avons effectué plusieurs simulations avec des conditions différentes. Nous avons simulé le cas d'un anneau encasté et d'un anneau libre. Nous avons également étudié l'effet du gradient de séchage.

Suite à l'analyse des simulations, nous avons constaté plusieurs modes de fissuration. Nous avons identifié trois sources de fissurations ; la présence des hétérogénéités, le gradient de séchage et l'encastrement. Pour la fissuration causée par les granulats, elle est localisée autour de ces derniers. Le séchage progressif du matériau accentue ce mode de fissuration. La condition d'encastrement provoque le plus d'ouverture de fissures en nombre mais augmente également la taille d'ouverture de ces fissures. Nous observons deux modes de fissuration dus à cette condition d'encastrement sur l'extrados. Il y a des fissures radiales qui traversent le matériau de l'intrados vers l'extrados et des fissures de décollement au niveau de l'extrados.

## 4 Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous nous sommes intéressés aux phénomènes de retrait d'un anneau en béton. Nous avons effectué plusieurs calculs élément fini couplant le séchage et le retrait d'anneaux bétons. Nous avons étudié deux cas :

- l'anneau béton est encasté sur sa face extérieure,
- l'anneau est complètement libre de déplacement.

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons simulé le séchage d'un anneau saturé avec une condition de degré de saturation imposé sur l'intrados. Ce calcul, nous a permis d'analyser l'effet des hétérogénéités peu perméables et de la non linéarité des équations de transfert hydrique sur le séchage de l'anneau. Nous obtenons le degré de

saturation au sein du matériau béton au cours du temps. La non linéarité provient de la dépendance du coefficient de perméabilité au degré de saturation du matériau. Lorsque le matériau devient très sec, la perméabilité à l'eau liquide devient très faible. Cela montre que ce modèle de séchage ne doit pas être utilisé pour un séchage à des degrés de saturation en eau liquide trop faible. Afin d'améliorer le modèle de séchage, nous pourrions envisager l'ajout de la physique de filtration de l'air humide dont le coefficient de perméabilité augmente lorsque le degré de saturation en eau liquide diminue.

Dans la seconde partie de ce chapitre, nous avons utilisé le résultat du séchage non linéaire pour alimenter la simulation du calcul mécanique du retrait de dessiccation. La connaissance de l'évolution du degré de saturation nous permet de déduire un champ de déformation de retrait. En utilisant ce champ, nous sommes capable de simuler le comportement mécanique de la structure béton en forme d'anneau vis à vis de son séchage. L'objectif principal des calculs mécaniques est d'analyser la fissuration du matériau béton dans le cas d'un anneau encasté et dans le cas d'un anneau libre de déplacement. Nous avons constaté trois types de fissures ; les fissures radiales, les fissures de décollement sur l'extrados et les fissures autour des granulats.

Dans ce chapitre, nous nous plaçons à une échelle intermédiaire du matériau béton, l'échelle mésoscopique. Nous avons considéré le matériau béton comme étant composé d'une matrice cimentaire continue et d'hétérogénéités (les granulats). La physique appliquée et notamment les paramètres de perméabilité à cette échelle sont issus d'une homogénéisation des caractéristiques d'échelles plus fines. Cette approche est nécessaire pour étudier l'effet des hétérogénéités sur la fissuration du matériau et ainsi de sa durabilité. Cependant, notre modèle ne permet pas de reproduire des phénomènes complexes tels que l'hystérésis observée entre le comportement du matériau durant son séchage et son imbibition. Pour cela, nous choisissons de nous placer à l'échelle du réseau poreux. À cette échelle, la connaissance de la morphologie du réseau de pores est nécessaire pour comprendre le transfert hydrique. C'est dans ce cadre que s'inscrit le chapitre suivant.



# Chapitre 2

## Modélisation d'un réseau poreux aux échelles fines

### Contents

---

<b>1</b>	<b>Introduction</b> . . . . .	<b>46</b>
1.1	Contexte . . . . .	46
1.2	Contribution . . . . .	46
<b>2</b>	<b>Construction d'un modèle numérique d'un milieu poreux</b> . . . . .	<b>47</b>
2.1	État de l'art . . . . .	47
2.2	Champs aléatoires corrélés . . . . .	52
2.3	Passage d'un champ aléatoire continu à un réseau poreux discret . .	54
<b>3</b>	<b>Simulation d'isothermes de sorption-désorption</b> . . . . .	<b>56</b>
3.1	La physique de transfert à l'échelle du pore capillaire . . . . .	56
3.2	Visualisation de la désorption et de la sorption . . . . .	63
3.3	Isotherme de sorption-désorption . . . . .	66
<b>4</b>	<b>Exploitation du modèle</b> . . . . .	<b>70</b>
4.1	Variabilité des isothermes . . . . .	70
4.2	Amélioration du modèle pour la sorption . . . . .	75
4.3	Estimation du retrait de dessiccation . . . . .	77
<b>5</b>	<b>Conclusion</b> . . . . .	<b>79</b>

---

# 1 Introduction

## 1.1 Contexte

Dans le chapitre précédent, nous avons étudié le transfert hydrique et ses effets mécaniques sur le matériau béton à une échelle intermédiaire. Nous avons considéré le matériau comme étant composé d'une matrice cimentaire et d'hétérogénéités. Dans ce second chapitre, nous allons nous intéresser à une échelle plus fine. À cette échelle, la matrice cimentaire n'est plus continue, c'est un réseau de pores microscopiques et nanoscopiques. Nous souhaitons étudier le transfert de l'eau lors du séchage et de l'imbibition dans le réseau poreux afin d'expliquer les comportements complexes observés à l'échelle macroscopique. L'objectif de ce chapitre est de construire un modèle numérique qui est capable de traduire le comportement hydrique d'un matériau poreux.

L'information morphologique du réseau est une donnée capitale pour tâcher de reproduire le comportement de transfert de l'eau liquide au sein du matériau cimentaire. Ainsi, il est nécessaire de représenter la géométrie du réseau poreux. De nombreuses études ont proposé des solutions pour modéliser des milieux poreux. Certaines sont d'une grande simplicité ; une dimension avec une succession de pores cylindriques de diamètres différents (Josef Kozeny dans les années 50) ; deux dimensions avec des pores cylindriques interconnectés sous forme d'une grille. Plus récemment avec l'avancée de l'imagerie, des modèles ambitieux cherchent à représenter le réseau poreux tridimensionnel du matériau ([C. Varloteaux, 2013]). Néanmoins, ces modèles souffrent d'une résolution insuffisante de l'imagerie qui lisse et supprime les pores de petites tailles. [M. Hosseini, 2015] a proposé dans sa thèse un modèle qui permet de représenter le réseau tridimensionnel. Son modèle permet de représenter des géométries de pores quelconques tout en respectant la distribution poreuse du matériau.

La physique employée est simple et permet de déterminer si un pore est saturé ou vide. Une seule loi est utilisée, il s'agit d'une loi d'occupation de la phase liquide dans le réseau ; la loi de Kelvin Laplace ([J-F. Daïan, 2010]).

## 1.2 Contribution

Nous avons choisi de fabriquer un modèle numérique qui reprend les forces de chacun des travaux précédents ([M. Hosseini, 2015], Josef Kozeny). Nous faisons l'hypothèse de pores cylindriques disposés sur une grille sur 3 dimensions. L'ensemble des pores respecte la porosité du matériau et leur répartition n'est pas complètement aléatoire grâce à l'utilisation des champs aléatoires corrélés [E. Roubin, 2013]. La simulation du réseau poreux numérique se base sur la porosimétrie du matériau mesurée expérimentalement. Le comportement hydrique du réseau numérique vis-à-vis du séchage et de l'imbibition est obtenu sous forme d'une isotherme de sorption et de désorption. Ces modélisations

permettent de mettre en évidence l'importance de la morphologie et de l'arrangement spatiale sur les isothermes. En effet, pour une même distribution de pores et en modifiant l'arrangement spatial, nous allons montrer que les comportements hydriques obtenus varient.

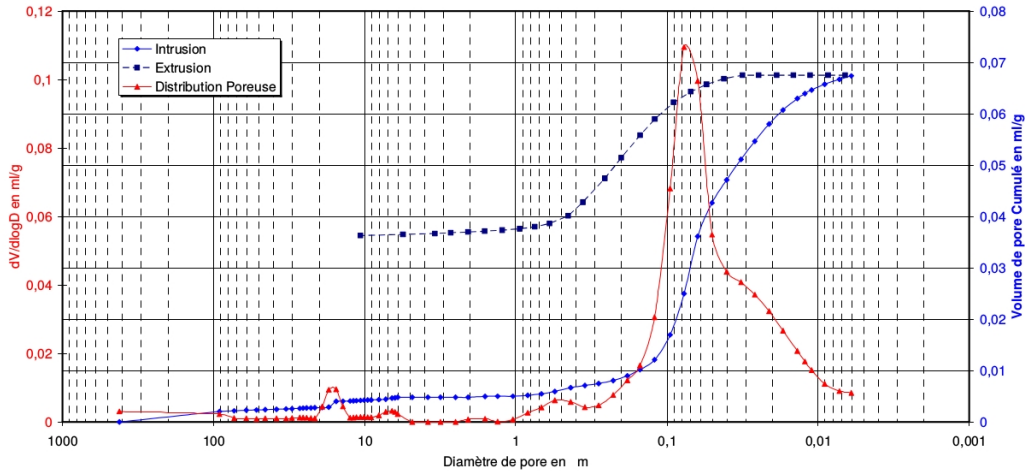
## 2 Construction d'un modèle numérique d'un milieu poreux

### 2.1 État de l'art

#### 2.1.1 La porométrie

**La distribution de tailles de pores (PSD) est une propriété nécessaire pour caractériser le réseau poreux** ([Q. Wu, 2014],[T. Rougelot, 2008]). Ces courbes donnent les fractions volumiques pour toutes les tailles de pores. Il est courant de voir ces courbes définies de manières cumulatives, la porosité étant alors égale à 1 pour la taille de pore la plus grande. Pour quantifier la taille des pores qui constituent le réseau, il est pratique d'introduire l'hypothèse de pores cylindriques. Pour tracer ces courbes, il est nécessaire d'utiliser des méthodes d'investigations du matériau. Il existe de nombreuses méthodes expérimentales pour caractériser la structure d'un matériau cimentaire. Ces techniques sont complémentaires puisqu'elles ne décrivent pas la même gamme de tailles de pores.

La porosimétrie au mercure est une méthode courante pour déterminer la distribution des pores des matériaux cimentaires ([T. Rougelot, 2008]). Elle consiste à injecter du mercure sous pression dans le matériau poreux préalablement séché. L'utilisation du mercure est avantageux car il est non mouillant pour la grande majorité des solides. L'échantillon de taille centimétrique est placé dans un pénétromètre. Puis le mercure est poussé dans le réseau poreux en augmentant progressivement la pression à l'intérieur de la cellule. La pression d'injection varie de quelques kPa jusque plusieurs centaines de MPa pour les dispositifs les plus performants, ce qui permet au mercure de combler des pores dont le diamètre va du demi-millimètre à seulement quelques nanomètres [J-F. Daïan, 2010]. Le volume de mercure injecté ainsi que le poids du matériau est connu précisément à chaque palier de pression. Le résultat obtenu est une courbe du volume de mercure injecté par unité de masse du matériau en fonction de la pression de mercure en échelle logarithmique. À cette échelle de pression logarithmique correspond une échelle de diamètres de pores déterminée en utilisant la loi de Kelvin Laplace associée aux caractéristiques physiques du mercure et en supposant la forme cylindrique des pores. Connaissant la densité du matériau, par une règle de trois, on peut aisément transformer la courbe pour obtenir la fraction volumique de chacun des diamètres.



**FIGURE 2.1:** Courbe résultant d'une intrusion au mercure sur un mortier [T. Rougelot, 2008]

Bien que cette méthode soit largement utilisée, elle n'est pas sans défaut. Tout d'abord, cette technique a un impact sur la structure morphologique du réseau poreux. En effet, le matériau nécessite d'être séché au préalable ce qui peut provoquer de la fissuration. Aussi, pour investiguer les pores capillaires, les pressions d'injection sont très grandes (plusieurs centaines de MPa). Les contraintes engendrées par la pression d'injection pour des tailles de pores nanométriques causent forcément des déformations de la matrice solide. De plus, la surface des pores de la matrice solide étant rugueuse, il est impossible de quantifier le volume de vide non rempli par le mercure. Ce volume peut être non négligeable lorsque le mercure investit des pores de tailles nanométriques. Enfin, cette méthode a tendance à surestimer le volume de pores de petites dimensions. Le mercure étant un fluide non mouillant, son injection consiste à faire un drainage du vide qui joue le rôle de fluide mouillant. Ainsi, le vide est "chassé" des pores les plus gros vers les plus petits et on associe, comme expliqué précédemment, le volume injecté au volume des pores qui ne contiennent plus de vide. Cette méthode ne permet pas de distinguer le volume d'un pore occlus par un autre pore plus petit.

L'imagerie est également une technique d'investigation courante. La microscopie optique est trop limitée en termes de résolution. Il est difficile d'obtenir des images submicrométriques. Outre la problématique de la résolution, le rendu est une visualisation 2D de l'espace poreux. Sans hypothèse forte, il est donc impossible de proposer une représentation de l'espace poreux tridimensionnelle. La tomographie tridimensionnelle permet de donner une image spatiale du réseau poreux et comble les lacunes des méthodes de visualisation 2D. Mais, encore une fois, la résolution actuelle ne permet pas d'investiguer le réseau de pore capillaire.



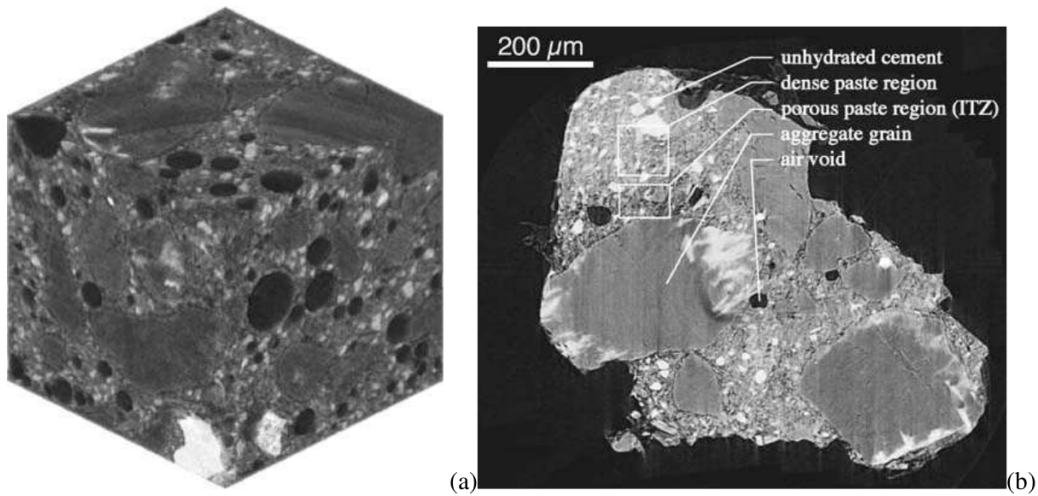


FIGURE 2.2: Reconstruction d'une image 3D d'un béton et de sa coupe issues d'un microtomographe [S. Lu, 2006]

Il est également possible d'étudier la distribution poreuse d'un matériau cimentaire en utilisant les isothermes de sorption-désorption de vapeur d'eau ([T. Rougelot, 2008]). Ces courbes caractérisent le comportement hydrique du matériau poreux en fonction de HR pour une température fixée. Le résultat de ce suivi est une courbe de teneur en eau liquide ou degré de saturation du matériau en fonction de l'humidité relative (HR).

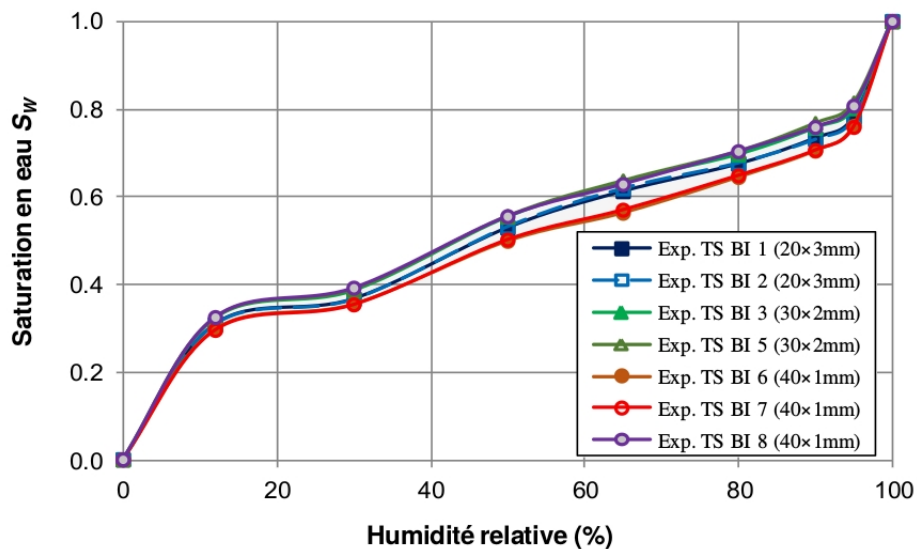
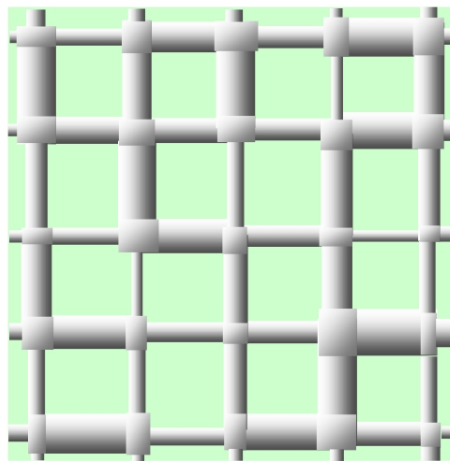


FIGURE 2.3: Isothermes expérimentales de désorption sur 7 échantillons de béton CEM I [Q. Wu, 2014]

L'humidité relative est un indicateur pratique car il est lié directement à la pression de vapeur. Pour estimer le volume de pores en partant des isothermes, le principe est similaire à la porosimétrie au mercure. Cette fois au lieu de maîtriser la pression de mercure, c'est la pression de vapeur d'eau qui est contrôlée. L'humidité relative est diminuée par paliers suffisamment longs pour atteindre un équilibre hydrique entre le matériau et la condition limite imposée. Puis, l'échantillon est pesé pour déterminer la masse d'eau perdue. Encore une fois via la loi de Kelvin Laplace, et sous certaines hypothèses, il existe un lien explicite entre l'humidité relative et le diamètre des pores saturés en eau liquide. Ainsi, le volume d'eau perdu est associé au volume des pores de diamètres correspondant à l'humidité relative du dernier palier. Cette méthode possède, tout comme la porosimétrie au mercure, l'inconvénient de surestimer les pores de petites tailles ([J-F. Daïan, 2010]). Cet effet est encore accentué car cette technique s'appuie sur des courbes avec relativement peu de points. En effet, effectuer un séchage d'un échantillon de matériau cimentaire prend beaucoup de temps, l'expérimentateur réalise généralement moins de dix paliers de H.R.

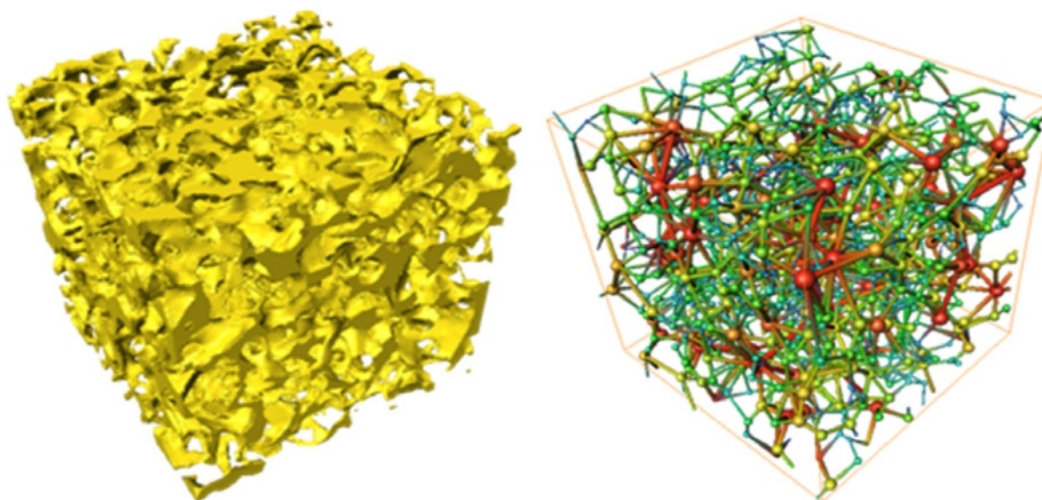
### 2.1.2 Les modèles numériques de réseaux poreux existants

De nombreuses études ont proposé des solutions pour modéliser des milieux poreux. Certaines sont d'une grande simplicité ; une dimension avec une succession de pores cylindriques de diamètres différents (Josef Kozeny dans les années 50) ; deux dimensions avec des pores cylindriques interconnectés sous forme d'une grille. Ces modèles, très éloignés de la réalité du réseau, permettent cependant d'observer certains phénomènes capillaires et d'effectuer un séchage du milieu et une resaturation de celui-ci.



**FIGURE 2.4:** Représentation de réseau poreux bidimensionnel de pores cylindriques [J-F. Daïan, 2010]

Plus récemment avec l'avancée de l'imagerie, des modèles ambitieux cherchent à représenter le réseau poreux tridimensionnel du matériau, figure 2.5. Ces modèles récupèrent une image 3D issu du microtomographe et la convertissent en un réseau poreux représentatif de l'échantillon de matériau ([C. Varloteaux, 2013]).



**FIGURE 2.5:** À gauche une vue de l'imagerie 3D et à droite une modélisation du réseau poreux correspondante [C. Varloteaux, 2013]

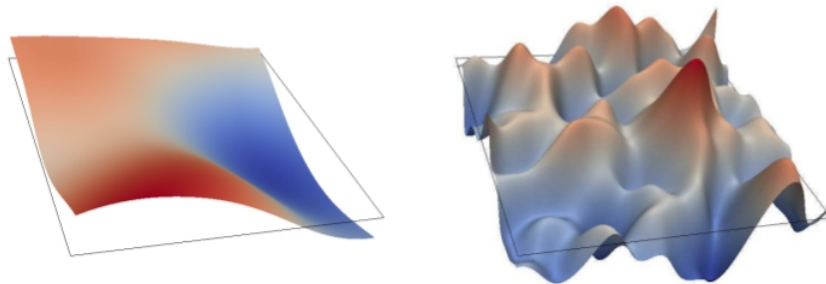
Néanmoins, la résolution de l'imagerie reste limitée. **Ces modélisations de réseau poreux ne sont que des représentations partielles. La résolution insuffisante de l'imagerie lisse et supprime les pores capillaires qui nous intéresse.** On perd ainsi toute une tranche de la porosité du matériau. Pire, il s'agit de celle qui nous intéresse pour les phénomènes de transferts hydriques.

[M. Hosseini, 2015] a proposé dans sa thèse un modèle qui permet de représenter le réseau capillaire tridimensionnel. Son modèle se base sur des applications directes des mathématiques morphologiques, ce qui permet de représenter des géométries de pores quelconques tout en respectant la distribution poreuse du matériau. Cependant un réseau aussi complexe a un coût calculatoire important. Dans cette thèse, nous avons choisi de fabriquer un modèle qui reprend les forces de chacun des travaux précédents. Pour l'efficacité calculatoire, nous faisons l'hypothèse de pores uniquement cylindriques sur une grille en 3 dimensions. L'ensemble des pores respecte la porosité du matériau et leur répartition n'est pas complètement aléatoire grâce à l'utilisation des champs aléatoires corrélés ce qui permet de modéliser des amas de pores de taille similaire.

## 2.2 Champs aléatoires corrélés

Un champ aléatoire est une fonction aléatoire définie sur un domaine de l'espace [E. Roubin, 2013]. Elle donne des valeurs qui suivent une courbe de densité de probabilité (loi marginale). Pour la loi normale, ou distribution gaussienne, seuls deux paramètres (la moyenne et la variance) suffisent pour fabriquer un champ aléatoire. On parle de champs corrélés car ce domaine possède une structure spatiale. **C'est à dire que deux valeurs prises dans le domaine ne sont pas indépendantes. Elles sont liées par une fonction de corrélation.** Il en existe plusieurs couramment utilisés qui ont différents effets sur la répartition spatiale des valeurs dans le champ aléatoire.

La fonction de covariance gaussienne introduit un paramètre appelé longueur de corrélation LC qui donne une distance sur laquelle les pores seront sensiblement de taille identique. Plus le L.C est petit par rapport à la taille du domaine, plus le milieu sera non corrélé ; c'est à dire une distribution des pores entre eux complètement aléatoire.



**FIGURE 2.6:** À gauche un champ aléatoire 2D avec un L.C très grand ; à droite un L.C petit [E. Roubin, 2013]

Dans le rendu ci-dessus 2.6, les couleurs représentent des tailles de pores. Ainsi, nous remarquons pour l'image de droite de petits amas de pores de taille identique, le champ est peu corrélé. Au contraire à gauche, on voit de gros ensembles de couleurs identiques et donc de pores de mêmes tailles, le champ est très corrélé.

**Ainsi, utiliser la fonction de covariance gaussienne pour fabriquer un réseau poreux revient à faire l'hypothèse que les pores de même dimension ont tendance à être spatialement aggloméré.** Néanmoins, le défaut de cette fonction réside dans l'absence de rugosité. La répartition spatiale des diamètres de pores est lisse. Les tailles de pores sont soit corrélées avec un L.C suffisamment grand ce qui signifie qu'en aucun cas localement on peut trouver un pore de taille différente des autres, soit les diamètres de pores ne sont pas du tout corrélés avec une répartition spatiale de type bruit blanc. Dans les deux cas, les conséquences sur la morphologie du réseau ne semblent pas très physiques.

Nous employons, dans le cadre de cette thèse, la fonction de covariance appelée Matern. Cette fonction conserve le L.C de la covariance gaussienne mais rajoute un paramètre  $\nu$  dit de rugosité. **La fonction Matern ajoute au champ de corrélation un effet**

bruit par rapport au rendu la fonction gaussienne. Il y a toujours des amas locaux de pores de tailles similaires mais également la possibilité de la présence ponctuelle de pores de dimensions différentes au sein de l'amas de pores. Le paramètre  $\nu$  est positif compris entre 0.5 (très fort bruit présent sur le champ aléatoire) et l'infini (tend vers la fonction de covariance gaussienne).

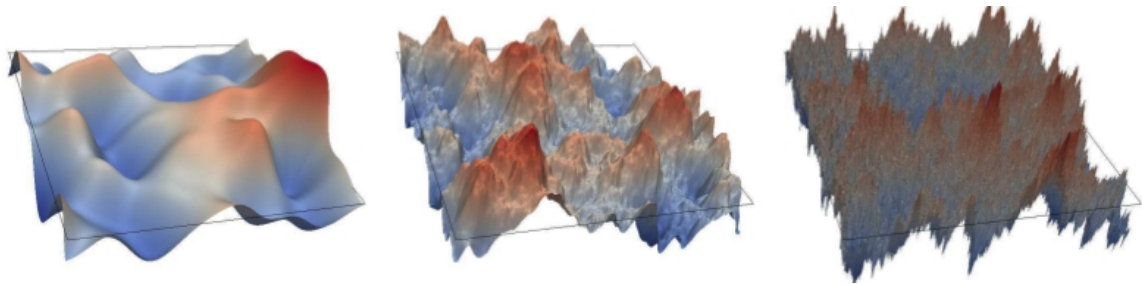


FIGURE 2.7: À gauche  $\nu$  tend vers l'infini ; au milieu  $\nu = 3/2$  ; à droite  $\nu = 1/2$ . [E. Roubin, 2013]

En utilisant la fonction de covariance Matern et la loi normale adaptées à la distribution poreuse du matériau cimentaire, nous sommes capable de réaliser un champ aléatoire corrélé qui reflète une image possible du réseau poreux.

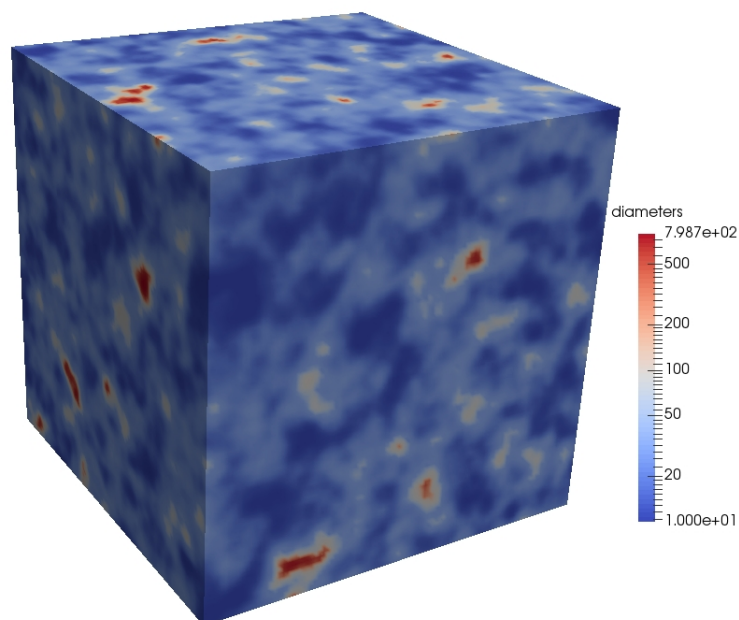


FIGURE 2.8: Représentation 3D de la distribution poreuse du réseau capillaire (diamètres de pores de 10 à 800 Angström)

### 2.3 Passage d'un champ aléatoire continu à un réseau poreux discret

En utilisant les outils de champs aléatoires, nous simulons un champ de distribution de pores corrélés respectant la porosité du matériau cimentaire. Le champ créé est continu, or nous souhaitons avoir un réseau discret. Pour cela, nous diminuons la résolution du champ en  $100 \times 100 \times 100$  voxels, **chaque voxel est la moyenne local du champ sur le volume du voxel.**

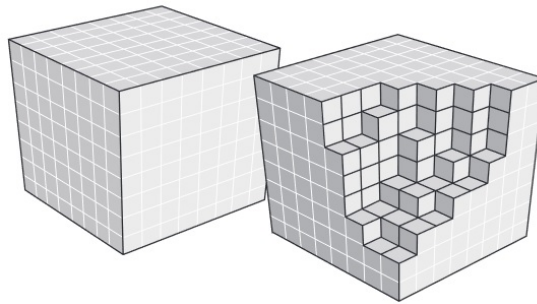


FIGURE 2.9: Cube constitué de  $8 \times 8 \times 8$  voxels

Conceptuellement, **chaque voxel contient un pore de rayon fixé ayant pour valeur celle de la moyenne locale du champ aléatoire de distribution poreuse.** En pratique, on récupère une matrice  $100 \times 100 \times 100$  avec une taille de pore par élément de la matrice. Ce pore communique avec les 6 pores, des 6 voxels voisins directs, c'est à dire possédant une face du voxel en commun. La dimension d'un voxel est fixée à 100 nanomètres.

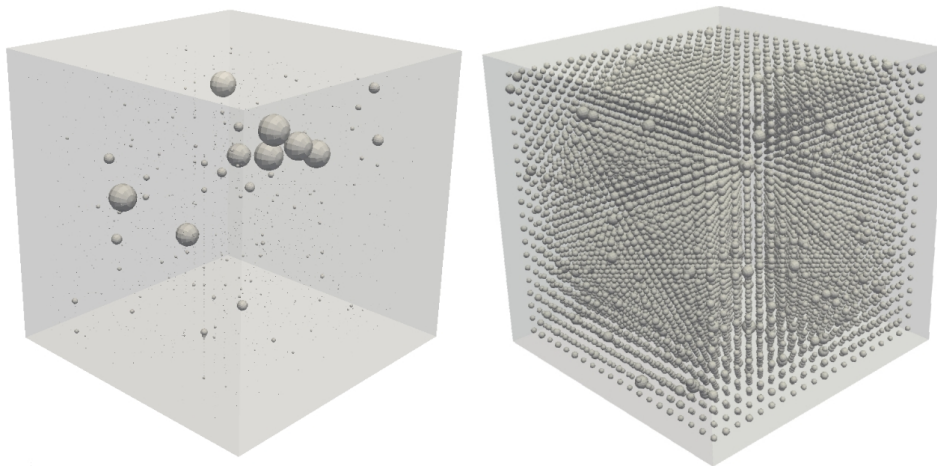
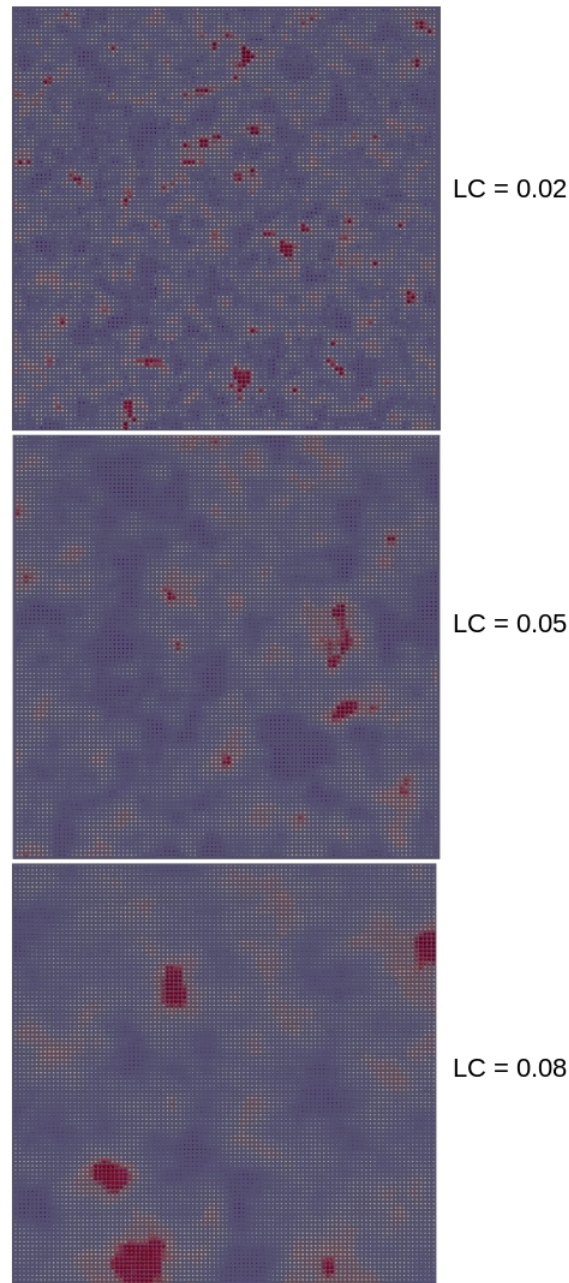


FIGURE 2.10: Réseau de  $20 \times 20 \times 20$  de pores sphériques (en échelle log à droite)

Ci-dessus 2.10, nous présentons une visualisation des pores (placés au centre de chaque voxel) constituant un réseau de  $20 \times 20 \times 20$  pores. **Nous avons choisi pour faciliter la vi-**

**sualisation des réseaux de pores de prendre des pores de forme sphérique pour l'ensemble des images de ce chapitre.** Chaque sphère possède le rayon qui correspond à la moyenne locale du champ aléatoire de distribution poreuse.



**FIGURE 2.11:** Coupe de 3 réseaux de 100x100x100 de pores à différents niveaux de corrélation

Nous pouvons constater l'effet de la longueur de corrélation sur la constitution même du réseau sur la coupe 2D figure 2.11 d'un réseau poreux tridimensionnel 100x100x100

pores. Les diamètres des sphères sont en échelles logarithmiques et leurs couleurs sont échelonnées du rouge pour les plus gros pores au bleu pour les plus petits. Plus la longueur de corrélation est grande, plus les pores de mêmes tailles sont agglomérés.

### 2.3.1 Choix d'une géométrie cylindrique d'un pore à l'intérieur d'un voxel

Précédemment, nous avons précisé que pour toutes les images des réseaux poreux du présent chapitre, nous avons choisi une forme sphérique pour représenter les pores. Cette forme sphérique permet de constater visuellement l'étendue des tailles de pore qui couvre plusieurs ordres de grandeur.

Pour la simulation des isothermes, nous avons employé une géométrie de pore différente de celle utilisée pour la visualisation du réseau poreux. Dans chaque voxel, **nous calculons le volume d'un pore comme étant le résultat de l'enchevêtrement de trois cylindres de rayon identique égal à la moyenne locale du champ aléatoire de distribution poreuse**. La longueur des cylindres en question correspond à la longueur d'une arête du voxel. Tous les voxels du réseau possèdent des arêtes de longueur égale à cent nanomètres. Nous pouvons voir figure 2.12 un schéma d'un voxel avec son pore constitués de trois cylindres enchevêtrés.

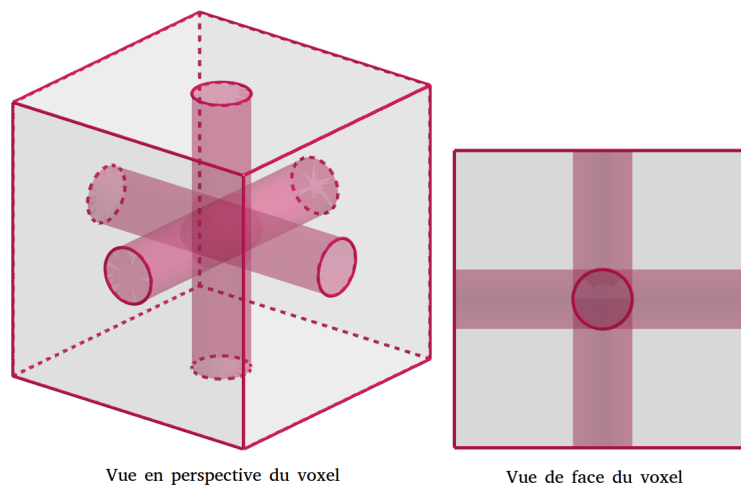


FIGURE 2.12: Schéma d'un pore cylindrique au sein d'un voxel

## 3 Simulation d'isothermes de sorption-désorption

### 3.1 La physique de transfert à l'échelle du pore capillaire

Pour un matériau poreux multi-échelles comme le béton, les lois de transferts usuelles sont issues de procédés d'homogénéisation. Macroscopiquement, le matériau poreux est



considéré comme une matrice continue et les modèles de transfert se complexifient pour prendre en compte à la fois l'ensemble des phénomènes physiques mais également une part de l'information poreuse aux différentes échelles.

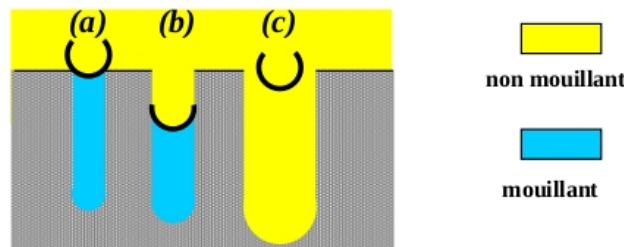
**Dans cette thèse, nous modélisons numériquement un réseau de pores capillaires ce qui fixe notre échelle à l'ordre du nanomètre. L'objectif est donc de ne surtout pas lisser l'information géométrique spatiale mais au contraire de la prendre en compte.**

### 3.1.1 Description d'un réseau poreux capillaire en équilibre

Il existe une loi très simple permettant de déterminer si un pore est saturé ou vide. À l'interface, la différence de pression entre le liquide mouillant (l'eau liquide) et non mouillant (l'air humide) est une grandeur appelée pression capillaire. La pression capillaire ou pression de Laplace est proportionnelle au rayon de courbure de cette interface. Dans le cas d'un pore cylindrique, le rayon de courbure est égal à l'inverse du rayon de la sphère d'interface.

**La loi de Laplace :**

$P_c = P_g - P_l = 2\gamma.R_c$ ,  $\gamma$  est la tension de surface ( $N.m^{-1}$ ) 0.072 à 20,  $R_c$  rayon de courbure ( $2/D$  pour un pore cylindrique)



**FIGURE 2.13:** Schéma d'occupation des pores capillaires pour une H.R fixe [J-F. Daïan, 2010]

- Pour une pression capillaire donnée, il existe trois états possibles vus ci-dessus 2.13 :
- La sphère d'interface s'appuie tangentielle sur la paroi du pore (b).
  - La sphère d'interface s'appuie sur l'extrémité du pore avec un pore de diamètre supérieur (a), le pore est complètement saturé en fluide mouillant.
  - Le diamètre de la sphère d'interface est trop petit comparé au diamètre du pore (c), le pore est rempli du fluide non mouillant.

Grâce à cette loi et connaissant  $P_c$ , on sait facilement catégoriser les pores d'un réseau dans l'un de ces 3 cas. La règle est simple, tous les pores étant accessibles au fluide non

mouillant de diamètre supérieur au diamètre de la sphère d'interface sont remplis par celui-ci. Le reste des pores est saturé en fluide mouillant.

Ici, le fluide mouillant correspond à l'eau liquide et le fluide non mouillant à l'air humide. Pour un pore possédant une interface, à pression capillaire fixe, il y a un équilibre entre la pression de l'eau liquide  $P_l$  et la pression de l'air humide  $P_g$  (somme de la pression de vapeur et d'air sec  $P_{vap} + P_{air}$ ). Il faut introduire la notion d'humidité relative qui est le rapport entre la pression de vapeur et la pression de vapeur saturante car il existe un lien direct entre taille de pore saturé et l'humidité relative. C'est la loi de Kelvin-Laplace :

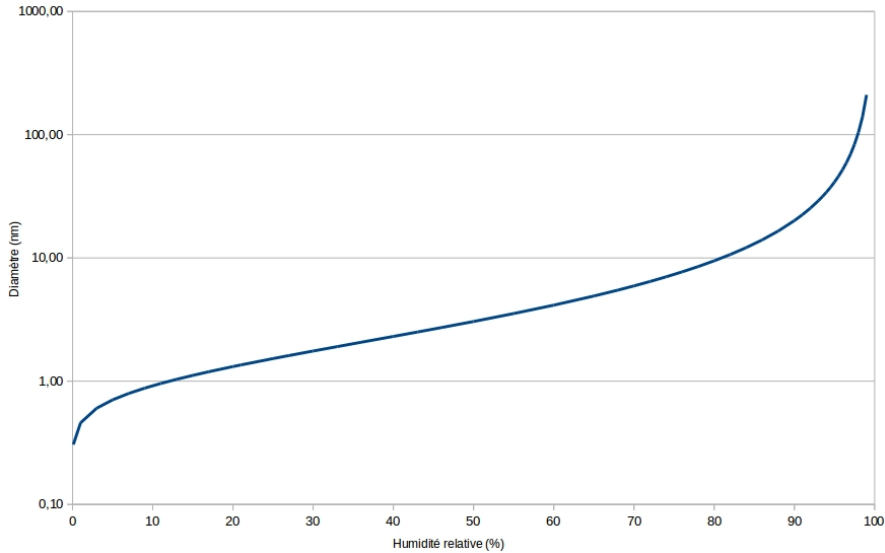
**Loi de Kelvin :**

$$P_c = -\frac{\rho \cdot R \cdot T}{M} \cdot \ln\left(\frac{P_v}{P_{vsat}}\right) = -\left(\frac{\rho \cdot R \cdot T}{M}\right) \cdot \ln(HR)$$

**Loi de Kelvin-Laplace :**

$$D = -\frac{4 \cdot \gamma \cdot M}{\rho \cdot R \cdot T \cdot \ln(HR)}$$

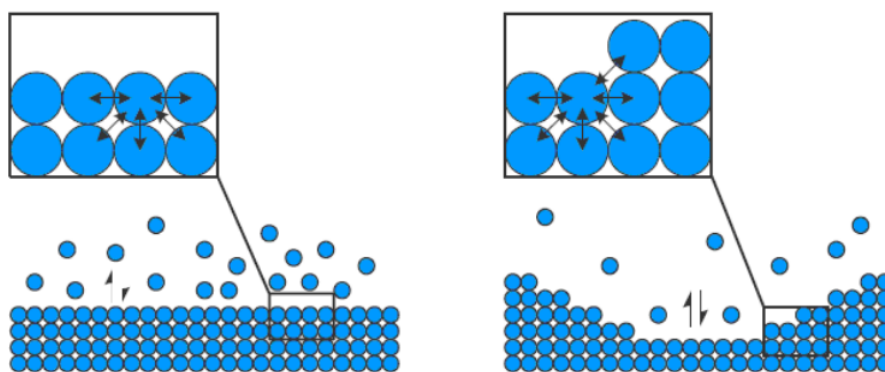
**Pour une humidité relative fixée, tous les pores dont le rayon est inférieur au rayon de la sphère d'interface causée par la dépression capillaire sont saturés en eau liquide.**



**FIGURE 2.14:** Diamètre de pore [nm] saturé en fonction de HR

### 3.1.2 Description d'un réseau poreux en transfert

Dans le paragraphe précédent, nous avons vu que **pour une humidité relative donnée l'état hydrique des pores est fixé. En conséquence, en modifiant l'humidité relative environnant notre matériau poreux, on va modifier son état hydrique global.** Lorsque l'humidité relative diminue, on va sécher le matériau. Lorsqu'un matériau sèche (HR diminue), la pression de vapeur dans l'air humide diminue. Ainsi, la pression de gaz chute et cause l'augmentation la dépression capillaire  $P_c$ . En appliquant la loi de Laplace à ce raisonnement, **sécher le matériau diminue la taille des sphères d'interface eau liquide/air humide dans le réseau poreux.** À l'opposé, **saturer un réseau poreux revient à augmenter la taille de la sphère d'interface.**



**FIGURE 2.15:** Schéma des interactions des molécules d'eau à l'interface plane et courbe. [S.A. Mokdad, 2012]

On peut tenter de donner une explication physique à ce phénomène d'imbibition. Toutes les surfaces solides dans l'air humide sont recouvertes d'une fine pellicule d'eau liquide épaisse de quelques molécules d' $H_2O$ . C'est ce qu'on appelle l'eau adsorbée. Même pour une humidité relative très faible, la pression de vapeur est suffisante et permet d'obtenir une monocouche de molécules d'eau liée au solide par interaction intramoléculaire. Un modèle appelé BET ([S. Brunauer, 1938]) estime l'épaisseur de la monocouche à environ 0.3nm. Au dessus de cette couche d'eau liée à la matrice solide, on a un mélange de molécules de gaz inertes et de molécules d'eau. Ces molécules d'eau s'ajoutent et s'arrachent continuellement à la couche adsorbée.

Dans le schéma 2.15, à gauche, l'interface est plane ce qui se rapproche du cas où le rayon de courbure est nul (la sphère d'interface de diamètre infini). À droite, il s'agit du cas où la courbure est grande, le ménisque d'interface est très visible. De ce schéma, nous pouvons constater le nombre nettement plus faible d'interaction entre les molécules d'eau à gauche comparé au cas de droite. Cela est dû à la courbure du ménisque. Ce nombre supérieur d'interactions à l'interface permet à la fois de capter plus de molécules d'eau

dans la phase gazeuse mais aussi de mieux conserver les molécules dans la phase liquide. La pression de vapeur saturante correspond à la pression de vapeur pour laquelle la vapeur va condenser. Cette pression est définie pour une température donnée et pour une interface phase liquide/gazeuse infiniment plane. Ici l'interface est courbe. Cette courbure provoque un abaissement de la pression de vapeur saturante réelle. En augmentant progressivement l'humidité relative, une interface eau liquide/air humide se forme à l'extrémité du pore vide aidé par la couche d'eau adsorbée. La courbure de l'interface abaisse localement la pression de vapeur saturante et si cette pression devient égale à la pression de vapeur dans le pore, les molécules d'eau condensent jusqu'à saturation en liquide du pore. Plus la courbure est grande plus l'abaissement locale de la pression de vapeur saturante est important, ce qui permet de condenser l'air humide même lorsque HR est très faible.

Au contraire, lors du séchage, la pression de vapeur diminue progressivement avec la condition d'humidité relative, la pression de vapeur saturante locale devient plus grande que la pression de vapeur, les molécules d'eau de la phase liquide passent plus facilement dans l'air humide. L'évaporation locale des pores est facilitée.

Nous l'avons compris faire varier l'humidité relative impacte le partage des phases liquide et gazeuse au sein du réseau poreux soit en séchant soit en se saturant. Ces changements sont le résultat d'un transfert d'eau sous forme de liquide ou de vapeur dont le moteur est un déséquilibre hygrométrique du milieu environnant le réseau.

### 3.1.3 Description des lois fondamentales de transport

La diffusion :

Modifier l'humidité relative ambiante fait varier la concentration en vapeur d'eau dans l'air humide autour du matériau poreux. La diffusion est un phénomène de transport qui tend à homogénéiser les concentrations des espèces chimiques présentes dans le milieu. Concrètement, si le matériau est sec, et donc que le réseau est majoritairement rempli d'air humide, la concentration plus élevée de vapeur à l'extérieur du réseau va diffuser vers l'intérieur. La loi de Fick est la plus utilisée pour décrire la cinétique de transport pour les phénomènes diffusifs mais on peut douter de son applicabilité dans le cadre de réseau capillaire. En effet, la loi de Fick suppose que le libre parcours moyen d'une molécule qui diffuse est au moins 10 fois plus petit que le milieu. Or cette condition n'est pas vérifiée vis à vis de la taille des pores capillaires les plus petits.

Le transport darcéen :

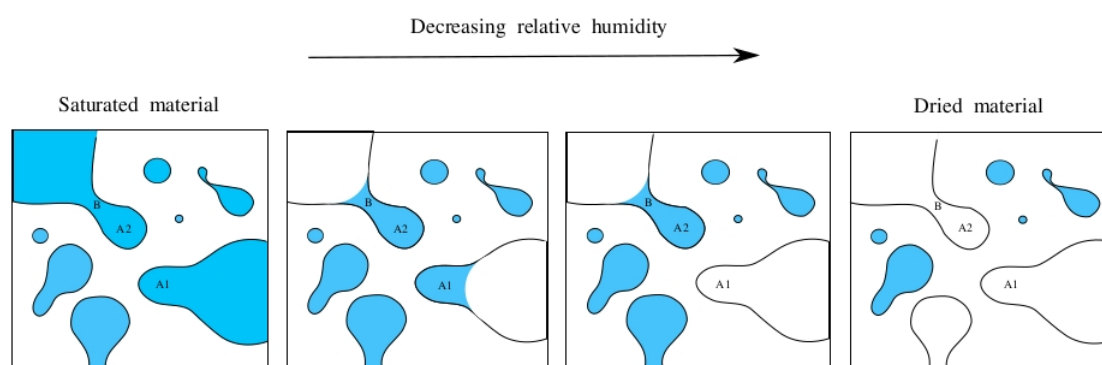
Le transport darcéen traite des problèmes de filtration. C'est à dire de l'écoulement d'un fluide à travers un milieu poreux causé par un gradient de pression. En effet, pour un réseau saturé, si l'on diminue l'humidité relative ambiante, la dépression capillaire augmente. Cette dépression capillaire peut atteindre des centaines de bars. En supposant que la pression de gaz est égale à la pression atmosphérique, la dépression dans le liquide est

donc considérable. Une pression de liquide faible sur la partie externe du matériau donne naissance un phénomène de succion de l'eau de l'intérieur vers l'extérieur. Bien sûr l'eau liquide ne s'écoule pas en dehors du réseau, elle s'évapore à l'interface liquide/vapeur. Ce gradient de pression est le moteur de l'écoulement. On qualifie souvent ce transport de darcéen à cause de la loi de Darcy, qui pour un fluide incompressible, relie le débit de l'écoulement au gradient de pression via un coefficient de perméabilité issu de l'homogénéisation du réseau poreux. Le transport darcéen ne s'applique pas qu'au liquide. Le phénomène est identique si il existe un gradient de pression dans la phase gazeuse.

### 3.1.4 Mise en application de la loi de Kelvin Laplace

Ces lois, des formes les plus simples aux plus complexes, servent à décrire le régime transitoire des problématiques de transport en milieu poreux. Il est d'ailleurs possible de fabriquer un modèle physique de transport assez complexe pour combiner toutes ces lois fondamentales de transport. Ce modèle idéalement applicable aux réseaux poreux permettrait de déterminer son état hydrique à tout instant. Or dans **les isothermes, il n'y a aucune notion de cinétique. Tout ce qui compte c'est l'état d'équilibre, lorsque suffisamment de temps s'est écoulé pour que le matériau soit en équilibre hygroscopique avec son environnement. C'est pour cette raison que la loi de Kelvin-Laplace est si pratique. Elle décrit entièrement via une règle d'occupation, la physique du réseau sans avoir besoin d'utiliser des modèles physiques** qui tente de transcrire les lois de transfert élémentaires (diffusion et filtration).

Dans ce paragraphe, nous allons voir qu'une **règle simple d'occupation peut traduire des phénomènes d'hystérésis complexes si la géométrie le permet**. La morphologie du réseau est une donnée cruciale vis à vis de cette physique puisqu'elle modifie grandement la façon dont va sécher le matériau. On l'a vu pour la désorption, tous les pores finissent par se vider lorsque l'humidité relative tend vers 0. On a également dit que les pores de plus grand diamètre se vident en premier.



**FIGURE 2.16:** Séchage d'un réseau poreux 2D. [M. Hosseini, 2015]

Ci-dessus 2.16, le schéma montre l'évolution de l'occupation de la phase liquide dans un réseau poreux qui sèche. On remarque que les pores de gros calibre se vident puis les petits. En revanche à cause de son arrangement spatial, on peut constater que le pore A2 ne se vide pas alors qu'il le devrait. Il en est empêché par la présence de B qui forme un goulot de taille inférieure à A2. Ainsi tout le volume d'eau liquide compris dans A2 va se vider lorsque l'humidité relative permettra de vider des pores correspondant à la taille de B. Cette complexité géométrique va avoir tendance à surestimer la proportion volumique des pores de taille B puisque l'application directe de la loi de Kelvin Laplace nous dit pour une H.R fixée, une taille de pore est concernée.

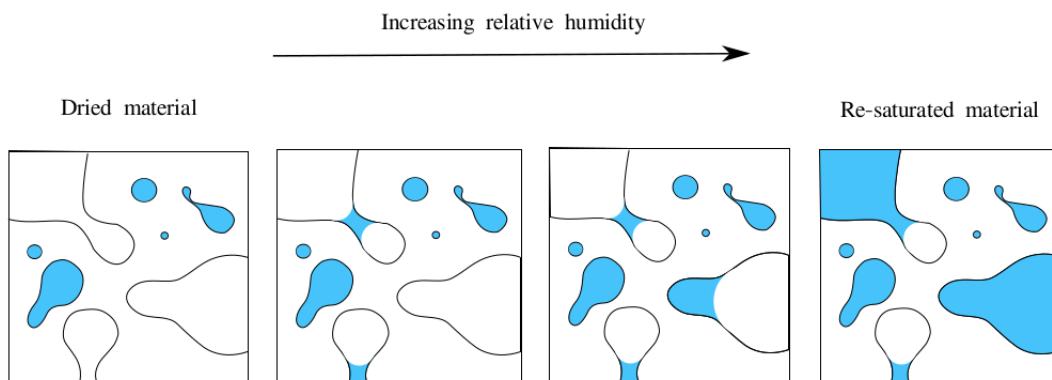


FIGURE 2.17: Imbibition d'un réseau poreux 2D. [M. Hosseini, 2015]

Comme on peut le constater ci-dessus 2.17, l'impact de la géométrie est encore plus importante pour la sorption. Dans ce cas, les pores de petites tailles se saturent en premier, par adsorption puis par condensation capillaire dû à l'abaissement local de la pression de vapeur saturante. Si des pores vides de plus grandes tailles sont entourés de pores saturés de plus petits rayons, l'air humide qu'ils contiennent est piégé. Il ne peuvent donc plus se saturer si l'on fait l'hypothèse d'un gaz incompressible. Ce phénomène est appelé l'effet bouteille d'encre.

Pour rappel, **notre image de réseau poreux est composée d'une multitude de voxels possédant chacun un pore. L'ensemble de ces voxels accolés forme une grille qui représente l'image de notre réseau poreux. À cette grille correspond une grille d'état saturé ou vide, de dimension identique à la dimension de la matrice poreuse. La matrice d'état est composée de 1 ou de 0 si le pore est saturé ou vide. Elle permet de suivre l'évolution du front de séchage au sein du matériau. Si on effectue une désorption, toutes les valeurs partent de 1 car tous les pores sont remplis d'eau. On impose ensuite des humidités relatives qui diminuent en condition limite. Pour la sorption, c'est l'inverse, on part de pores vides et on sature en augmentant H.R sur les faces du cube. Les conditions nécessaires pour qu'un pore se vide pour la désorption sont simples. Comme expliqué précédemment, pour une humidité relative**

imposée, seul les pores plus grands qu'un certain rayon peuvent se vider. Ensuite, il faut qu'au moins l'un des 6 pores voisins soit vide. Concernant la sorption, c'est un peu plus complexe, car il faut prendre en compte le phénomène de bouteille d'encre. Il faut vérifier la condition de taille de pore cette fois inférieure au rayon critique fixé par l'humidité relative pour qu'un pore puisse se saturer. Il est nécessaire également qu'au moins un des 6 pores voisins soit saturé et de taille supérieure au pore qu'on souhaite saturer.

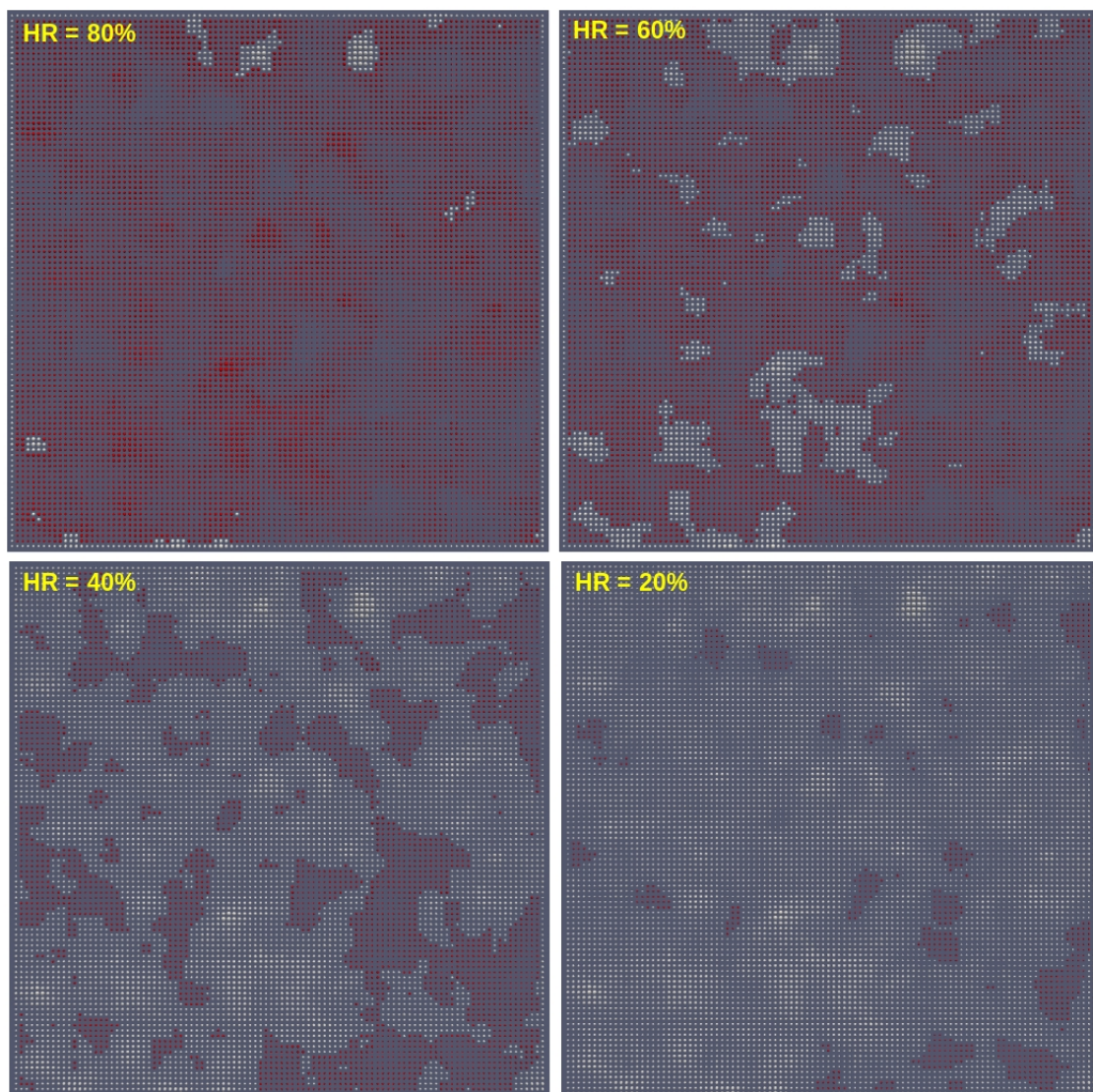
## 3.2 Visualisation de la désorption et de la sorption

Précédemment, nous avons vu comment nous construisons l'image 3D d'un réseau poreux ainsi que la physique simple utilisée pour effectuer le séchage ou la saturation du réseau. Avant même de tracer les isothermes de sorption désorption, nous pouvons d'abord visualiser l'effet d'une désorption et d'une sorption sur notre image 3D. Nous avons ci-dessous une coupe de l'image de réseau. Chaque sphère représente un pore connecté à chacun de ses 6 voisins. Sur la représentation, la taille des sphères est en échelle logarithmique. Pour rappel, les pores de plus petites tailles ont un diamètre de l'ordre du nanomètre tandis que les plus gros ont un diamètre de 100 nm.

### 3.2.1 Désorption

La coupe 2.18, est une grille de 100x100 pores issue d'un réseau tridimensionnel de 100x100x100 pores. Les sphères rouges représentent les pores remplis et les blanches les pores vides. Nous pouvons observer l'avancée du front de séchage lorsque l'on diminue la condition limite d'humidité relative. **Il s'agit bien d'une désorption. Le réseau poreux se vide, le matériau sèche. Les premiers pores qui se vident sont les pores de plus grandes dimensions, ils sont peu nombreux mais contiennent un volume important d'eau. De cette simple visualisation de la désorption, nous pouvons constater plusieurs choses. Des amas de gros pores ne peuvent pas se vider immédiatement car ils sont entourés par des pores de petites tailles qui sont encore remplis. Lorsque la condition d'humidité relative de l'air le permet, ces petits pores se vident ce qui cause également l'évaporation de l'eau prisonnière dans l'amas de gros pores.**

Il est également possible de constater figure 2.18 que certains pores se désaturent au milieu de la coupe, sans voisin vide apparent. La cause de ce phénomène est simple, il ne faut pas oublier qu'il s'agit de la coupe d'un réseau à 3D. Il y a donc présence de pores voisins vides de la couche n-1 ou n+1. Cette remarque est nécessaire pour comprendre l'importance d'une modélisation tridimensionnelle du réseau poreux. Cela augmente de façon considérable le nombre possible de chemin de désaturation.



**FIGURE 2.18:** Coupe d'un réseau 100x100x100 pores sphériques à différentes H.R durant une désorption



### 3.2.2 Sorption

Cette fois, nous pouvons observer l'avancé du front d'imbibition. **Les pores de petites tailles se remplissent en premier aux humidités relatives faibles. Un grand nombre de pores se saturent rapidement mais ceux-ci ne représente qu'une faible partie du volume. Lorsque l'humidité relative est élevée, nous pouvons voir que beaucoup d'amas de pores de grandes tailles ne se saturent pas. Ils sont entourés de voisins remplis.** Cependant ces voisins possèdent des diamètres inférieures puisque les pores de petites tailles se saturent en premier lors de l'imbibition. Sous l'hypothèse d'air humide incompressible et indissoluble, ces pores piégés restent vide d'eau liquide et ce même avec une humidité relative proche de 1. Il s'agit de l'effet bouteille d'encre. C'est ce que nous pouvons constater dans la coupe 2.20.

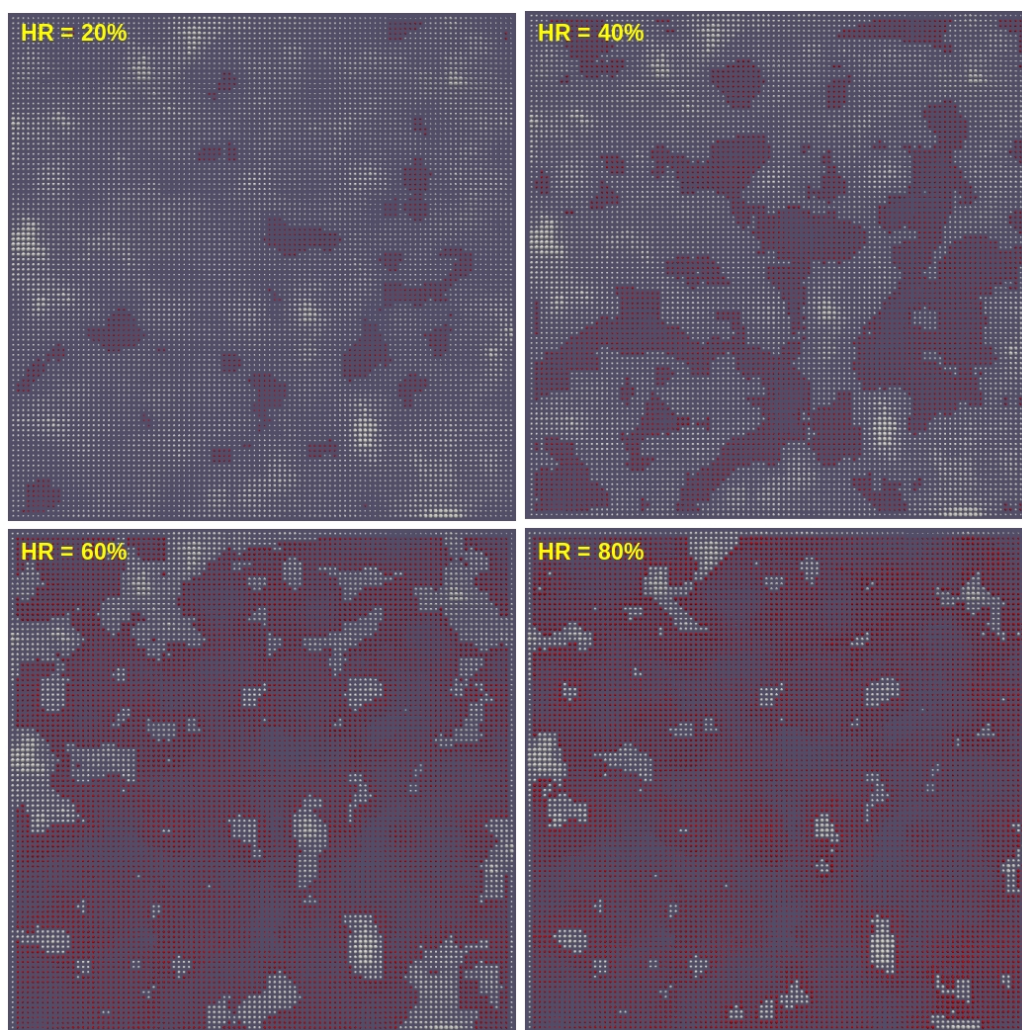


FIGURE 2.19: Coupe de 100x100 pores sphériques à différentes H.R durant une sorption

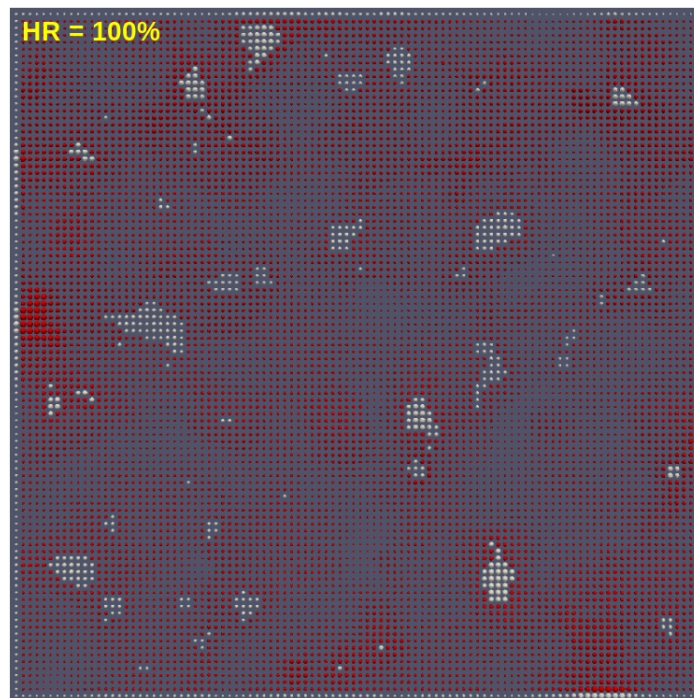


FIGURE 2.20: Coupe de 100x100 pores sphériques en fin de sorption

### 3.3 Isotherme de sorption-désorption

Pour tracer les isothermes, il suffit d'avoir le volume d'eau total contenu dans les pores de notre réseau à chaque humidité relative. Mais avant cela, il est nécessaire de fabriquer une distribution poreuse pour le réseau. Pour celle-ci, nous nous basons dans cet exemple sur une distribution d'une pâte de ciment Portland avec un rapport E/C de 0,5. Cette pâte suit une formulation Andra appelé B1.

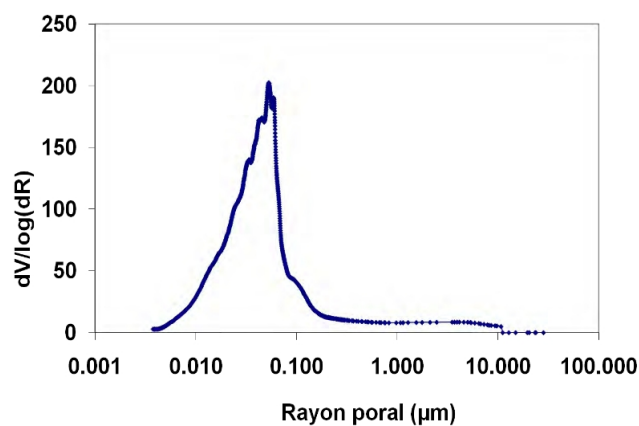
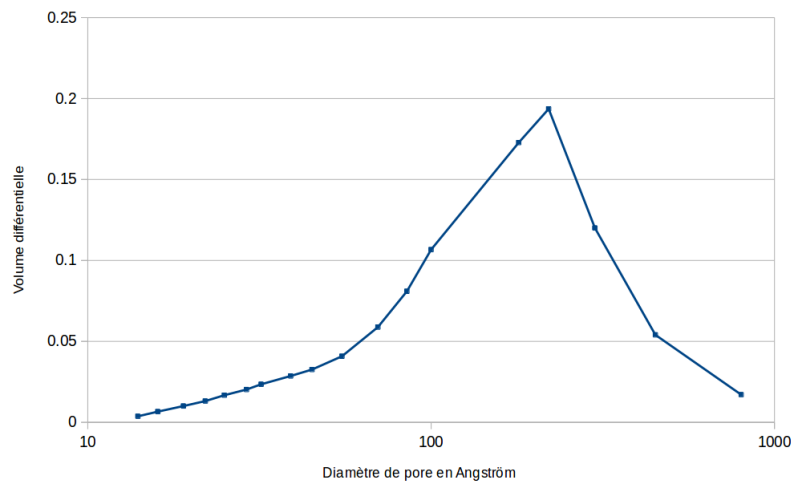


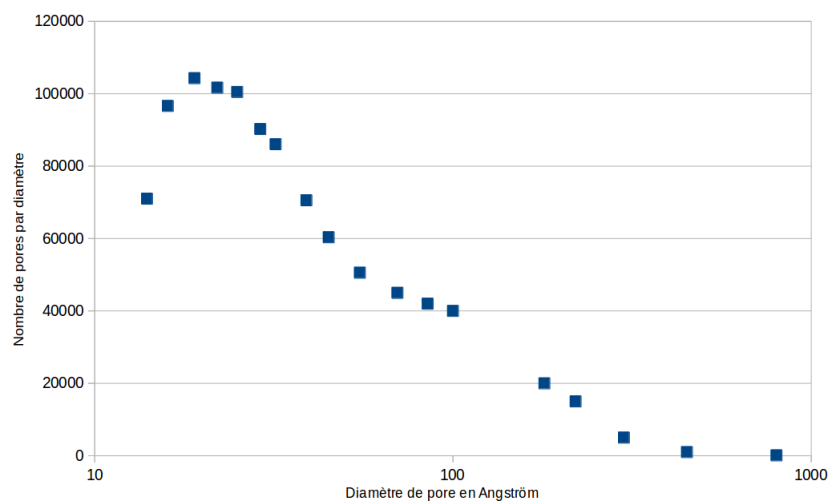
FIGURE 2.21: Distribution poreuse expérimentale d'un béton B1 [Q. Wu, 2014]

Il est question ci-dessous 2.23, de reproduire la distribution expérimentale pour la version numérique du réseau. Il s'agit d'une courbe différentielle, elle nous permet ensuite de fabriquer un champ aléatoire continu puis de le discrétiser en voxel pour obtenir le modèle du réseau poreux. Pour rappel, nous limitons la modélisation des diamètres de pore compris entre 1 et 100 nanomètres. La borne inférieure est fixée par la taille d'une molécule d'eau qui est de l'ordre de l'Angström. La borne supérieure correspond au plus gros diamètre de pore subissant encore les effets capillaires (HR=1 à 20C).



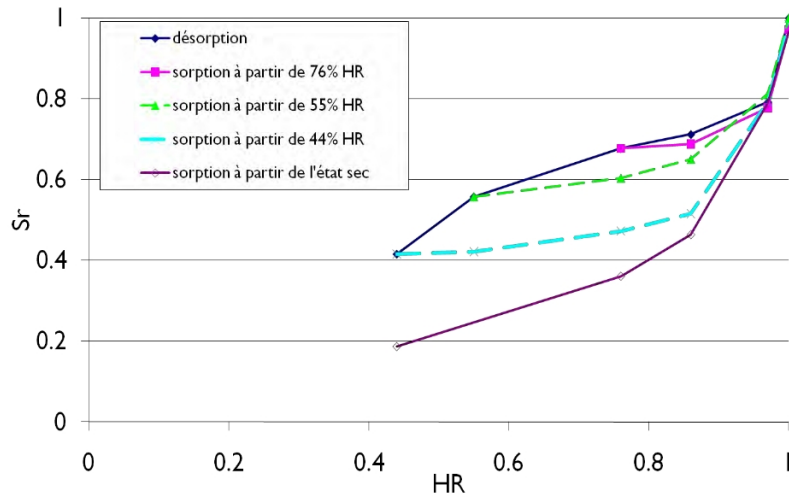
**FIGURE 2.22:** Modélisation numérique de la distribution poreuse d'un béton B1

Il est possible de mettre en évidence l'importance des pores de faible taille via la figure 2.23. En effet, ces pores participent peu au volume hydrique du matériau poreux mais ils occupent en très grande majorité l'espace du milieu tant ils sont nombreux.

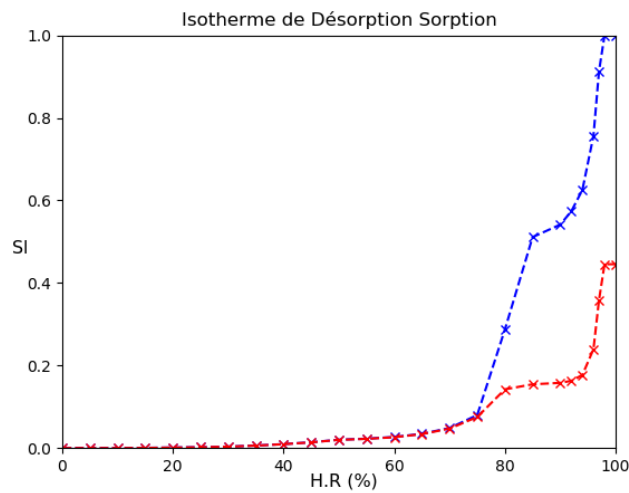


**FIGURE 2.23:** Distribution du nombre de pores classés par diamètre

Nous avons figure 2.24 la courbe expérimentale d'isotherme de sorption et de désorption [H. Ranaivomanana, 2010] et figure 2.25 la courbe produite à partir du modèle numérique. Nous observons la présence de l'hystérésis caractéristique des courbes de sorption-désorption. Les courbes expérimentales et numériques sont différentes. La physique de sorption du modèle numérique ne permet pas d'atteindre une saturation complète.



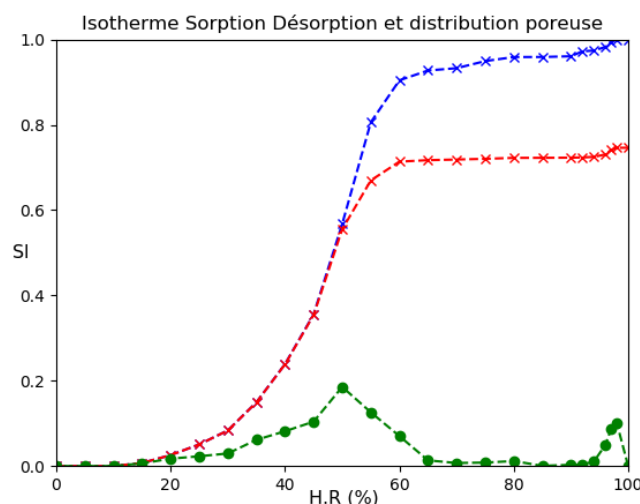
**FIGURE 2.24:** Isotherme de sorption désorption expérimentale sur une pâte de ciment B1 [H. Ranaivomanana, 2010]



**FIGURE 2.25:** Modélisation numérique de l'isotherme de sorption désorption

Nous pouvons constater que **les isothermes numériques produites ne correspondent pas aux isothermes expérimentales. Le degré de saturation en eau du réseau numérique chute trop vite. Cela démontre une absence de volume poreux important pour les tailles de pores plus petits. En effet, les courbes expérimentales montrent en se référant à la loi de Kelvin Laplace que le matériau lors de la désorption possède encore 40% de son volume d'eau pour une H.R de 44%. Ce constat indique forcément la présence dans le matériau d'un volume important détenu par des pores de tailles inférieures à 10 nanomètres. Or la courbe de distribution expérimentale va à l'encontre de cette conclusion. La fabrication de l'image du réseau poreux se base sur une courbe de distribution poreuse expérimentale. Ces distributions poreuses surtout à l'échelle du réseau capillaire sont issues d'investigations expérimentales avec des hypothèses fortes nécessaires à leurs obtentions. Il est donc tout à fait envisageable que nous construisions un réseau avec une distribution de pores ne correspondant pas à la réalité du matériau considéré.**

Nous proposons figure 2.26 de montrer qu'avec une distribution poreuse adéquate, on peut se rapprocher du résultat de l'isotherme expérimentale avec le modèle numérique. Nous avons choisi une distribution poreuse avec 2 pics de volume de pores autour des diamètres de 5 et 50 nanomètres ([T. Rougelot, 2008]). Une majorité du volume du réseau est ainsi détenue par des pores inférieurs à 10 nanomètres comme le suggère la courbe de désorption expérimentale. Nous constatons ainsi sur la courbe ci-dessous 2.26, une chute du degré de saturation pour un H.R de 50%, ce résultat est beaucoup plus cohérent avec ce qu'on remarque expérimentalement. Le résultat final de la saturation pour la sorption a également nettement augmenté, il faut cependant envisager d'améliorer le modèle numérique pour resaturer entièrement le réseau poreux en fin d'imbibition.

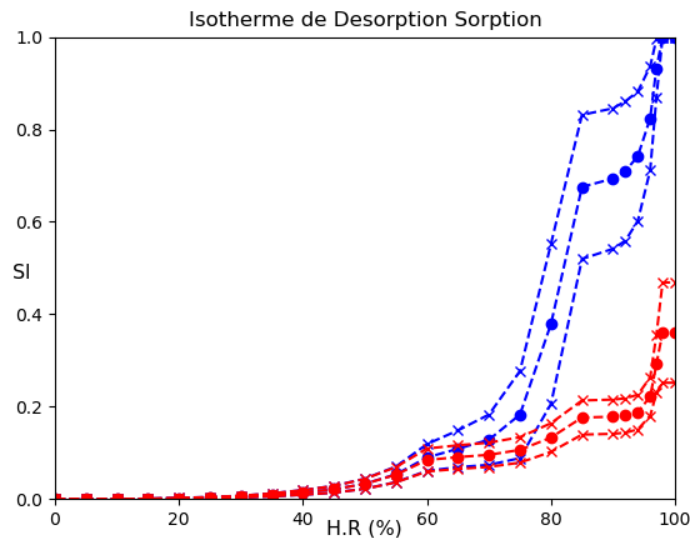


**FIGURE 2.26:** Isotherme numérique de sorption désorption et distribution poreuse volumique

## 4 Exploitation du modèle

### 4.1 Variabilité des isothermes

La production d'une isotherme de sorption-désorption expérimentale prend beaucoup de temps. Avec le modèle numérique, il est très rapide de créer un grand nombre de courbes tout en maîtrisant parfaitement la distribution poreuse et la morphologie du réseau pour chaque courbe produite. Grâce à cette maîtrise, il est facile d'isoler et de comprendre l'effet de la morphologie. Ci-dessous figure 2.27, nous avons un exemple sur 1000 isothermes sorption-désorption, avec la même distribution poreuse et une longueur de corrélation fixée à 0.05. Il est donc possible d'obtenir la sorption et la désorption sur 1000 nano-échantillons d'un béton tout en s'assurant que chacune de ces éprouvettes numériques possède le même nombre de pores et cela pour toutes les tailles de diamètre de pore. Concernant le traitement des données, en bleu, nous avons la désorption avec la moyenne plus ou moins 2 écarts types et en rouge la sorption.



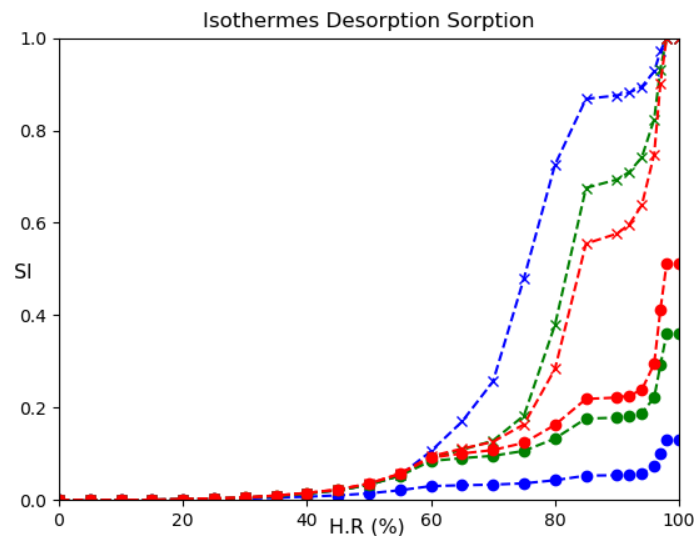
**FIGURE 2.27:** Modélisation numérique de 1000 isothermes de sorption désorption (même distribution, même LC)

Cet exemple valide un point important du chapitre. **La variabilité observée est due au réarrangement spatial des pores entre eux.** Cette variabilité est causée pour la sorption par la présence ou non de chemins d'imbibition facilement accessibles ; c'est à dire d'une succession de pores de tailles croissantes. Plus il y a de chemins accessibles, plus le degré de saturation est élevé en fin de sorption. Pour la désorption, nous savons que tous les pores finissent par se vider. Mais l'allure de la courbe peut être modifiée si le séchage d'un amas de pores de gros calibre est empêché par de plus petits. Dans ce cas, le degré

de saturation diminue à une humidité relative plus faible. Modifier la géométrie du réseau modifie son comportement hydrique.

#### 4.1.1 Effet de la longueur de corrélation

Nous avons un paramètre qui gère l'arrangement spatiale, la longueur de corrélation. Pour rappel, plus les pores sont corrélés entre eux (LC grand), plus il y aura localement des pores voisins de tailles similaires. En conséquence, une longueur de corrélation judicieusement choisie va créer la présence d'amas de pores de tailles similaires dans le réseau. Au contraire, une longueur de corrélation trop petite donne un réseau complètement aléatoire en terme d'agencement spatial des pores. Si l'on fabrique un réseau poreux corrélé, certains amas vont se saturer (sorption) ou se vider (désorption) facilement et d'autres pas du tout. Prenant plusieurs modélisations de réseaux poreux tous construits à partir de la même PSD, leurs réponses au séchage ou à l'imbibition seront différentes. Il est probable que certains aient beaucoup d'amas spatiaux de pores accessibles à la sorption-désorption et d'autres réseaux pas du tout d'où la variabilité observée dans les courbes. Plus L.C est grand plus les amas vont être étendus spatialement et donc l'impact sur les courbes important. **Il y a ainsi un lien direct entre la variabilité et LC**, c'est ce que nous pouvons constater ci-dessous 2.28.



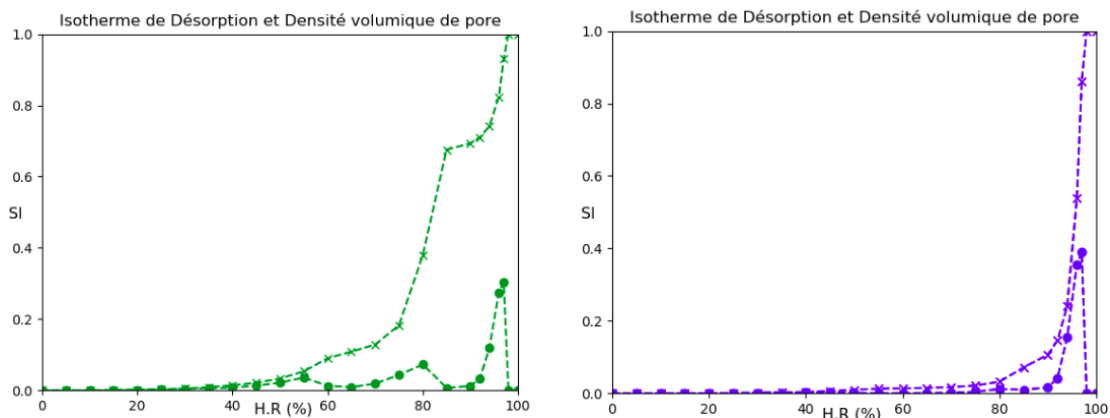
**FIGURE 2.28:** Modélisation numérique de 3 fois 1000 isothermes désorption (même distribution, 3 L.C différents)

En bleu, L.C = 0.02 en vert L.C = 0.05 et en rouge L.C = 0.08.

On remarque plusieurs phénomènes liés à l'augmentation de la longueur de corrélation :

- Une augmentation importante de la variabilité dans les isothermes à distribution poreuse fixée.
- Une chute plus rapide du degré de saturation des isothermes de désorption ce qui s'explique géométriquement par de gros pores plus facilement accessibles à une désaturation instantanée.
- Une augmentation significative du degré de saturation final lors de la sorption, il y a donc forcément plus de chemins d'imbibition ce qui permet au pores de gros diamètres de se saturer.

#### 4.1.2 Effet de la distribution poreuse



**FIGURE 2.29:** Isothermes de désorption "x" et densité de pores volumiques "o" (2 distributions différentes vert/bleu)

Figure 2.29, nous avons deux isothermes de désorption correspondant à deux distributions poreuses différentes. Ces courbes sont issues du modèle numérique. Concernant leur représentation, il existe un lien direct entre le diamètre des pores saturés et l'humidité relative. Ainsi, il est possible de superposer la courbe de distribution de tailles de pores sur un axe des abscisses en humidité relative avec sa courbe d'isothermes de sorption désorption. C'est ce que nous avons fait ici courbes 2.29. Les courbes dont les points sont matérialisés par des ronds, correspondent à la proportion de volume des pores d'un certain diamètre. Ce diamètre est ensuite rapporté à une humidité relative fixe. Concrètement, il est possible de constater sur la courbe verte, qu'environ 8% du volume de l'espace poreux est détenu par des pores qui doivent se vider dès que l'humidité relative passe sous les 80%. Bien sûr, on n'observe pas cette chute de 8% sur l'isotherme de désorption associée. Pour qu'un pore se vide, il est nécessaire qu'au moins un de ses voisins directs soit vide.

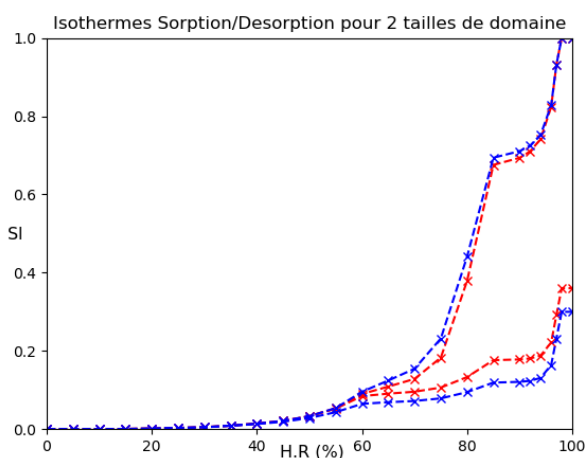
Il y a une différence notable dans les 2 distributions. La distribution verte possède plusieurs pics de volume, à H.R = 95, 80 et 55 soit respectivement environ 52, 9 et 3



nanomètres de diamètre. La distribution bleue n'a qu'un unique pic à une humidité relative de 95%. Par conséquent, il y a beaucoup moins de gros pores dans la distribution verte.

Nous constatons directement l'effet de ce faible nombre de pores volumineux sur la forme de l'isotherme verte. Le réseau poreux contient encore 50% de son volume d'eau liquide à 80% d'humidité relative. Au contraire, la courbe bleue perd la majorité de son volume dès 90% d'HR.

#### 4.1.3 Effet de la taille de la grille



**FIGURE 2.30:** Isothermes de désorption et sorption sur 2 tailles de grilles différentes (bleu 50x50x50, rouge 100x100x100)

100 par 100 par 100 pores est une taille de grille qui s'est imposée pour des raisons de limite calculatoire. Nous proposons ici de comparer le résultat de la moyenne sur 1000 isothermes de désorption sorption pour des grilles de taille 50 et 100. **Il y a ainsi 8 fois moins de pores dans la grille qui modélisent la courbe bleue. Le résultat pour l'isotherme de désorption est presque identique.** Pour la sorption, on constate une légère hausse du degré de saturation en fin d'imbibition lorsque la grille est plus conséquente. Cette différence est probablement liée au nombre plus important de chemins possibles d'imbibition. Cette hypothèse est également appuyée par le fait que la courbe de désorption pour la grille en 100x100x100 est légèrement en dessous de celle de taille 50, ce qui suggère qu'il y a plus de chemins d'imbibition également.

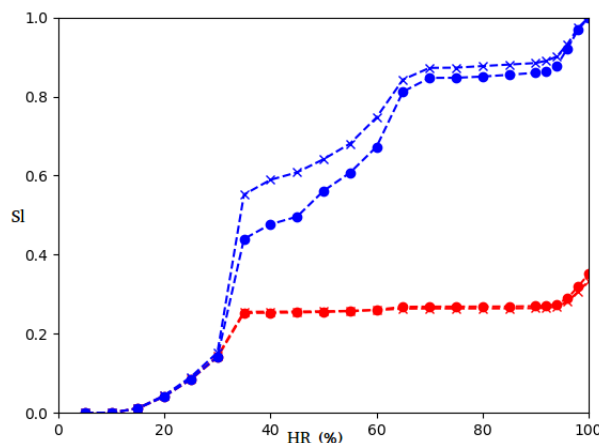
#### 4.1.4 Effet de la connectivité

Nous avons également souhaité voir l'effet d'une plus grande connectivité entre les pores. Le réseau poreux dans le modèle numérique est un assemblage de voxels cubiques

empilés. L'algorithme du modèle vérifie pour chaque H.R l'état des voisins du pore que l'on souhaite vider. Si au moins un des voxels voisins est vide et que la loi de Kelvin Laplace est respectée alors le pore se vide. Dans sa forme la plus basique, la connectivité entre voisins est de 4 pour les 4 pixels entourant le pore choisi, si on considère un réseau 2D. En 3D, un pore possède 6 voisins directs avec lesquels il est connecté. C'est dans cette configuration que toute l'étude a été faite. **La différence des résultats entre le 2D et le 3D est très grande puisque le nombre de combinaison de liaisons entre les pores explose.** Nous avons essayé d'étendre la connectivité d'un pore aux voxels les plus proches, ce qui rajoute 20 connections supplémentaires. **Avec 26 connections, ce nouveau modèle donne cependant des isothermes proches du modèle avec les 6 liaisons directes, figure 2.31.**

Pour la désorption, le réseau se vide légèrement plus vite lorsque le nombre de connectivités est plus important (courbe bleu avec points "o" 2.31). Bien que l'allure des deux isothermes de désorption reste sensiblement les mêmes, ce résultat est cohérent puisque les pores ont accès à plus de voisins pour se vider. Pour la sorption, les isothermes sont presque superposées (courbes en rouge). Il n'est pas surprenant de voir la courbe avec le nombre de connections étendues (points "o") très légèrement au dessus de la courbe de la courbe avec le moins de connections (points "x"). En effet, dans le cas du modèle avec la plus grande connectivité, les pores ont accès à plus de chemin d'imbibition ce qui facilitent l'imbibition du réseau.

Nous pensons que le modèle initial permet déjà d'établir un nombre considérable de combinaisons de liens entre les pores du réseau. Ainsi, il est possible que dans une majorité de cas, la probabilité de trouver un pore vide dans les 6 voisins soit sensiblement la même que dans la version avec 26 voisins connectés.



**FIGURE 2.31:** Isothermes de désorption (bleu) et sorption (rouge) avec connectivités étendues (points "o") et restreintes aux voisins directs (points "x")

## 4.2 Amélioration du modèle pour la sorption

Dans le modèle numérique présenté dans ce chapitre, **nous avons constaté qu'en fin de sorption beaucoup de pores ne se remplissent pas d'eau liquide. Ces pores sont tous entourés de voisins plus petits et remplis d'eau liquide. Ils sont emplis d'air humide piégé durant l'imbibition. L'hypothèse de l'air incompressible en est la cause. Pour améliorer le modèle numérique basé sur la loi d'occupation de l'eau liquide de Kelvin Laplace, il est nécessaire de comprendre le devenir de cet air humide piégé si l'on supprime cette hypothèse.**

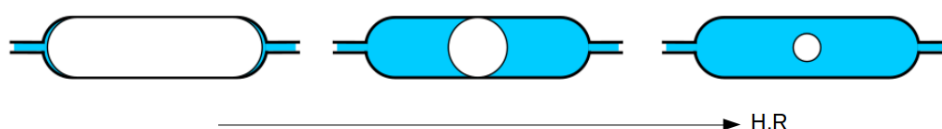
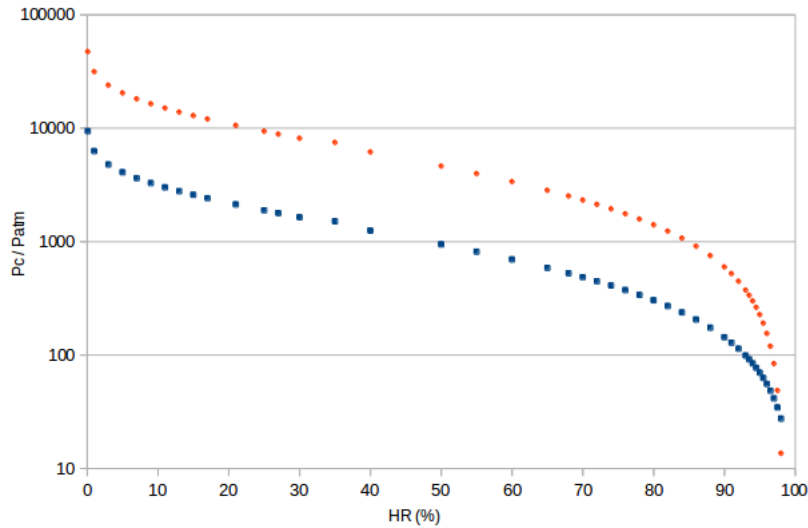


FIGURE 2.32: Évolution de l'air occlus en de H.R [J-F. Daïan, 2010]

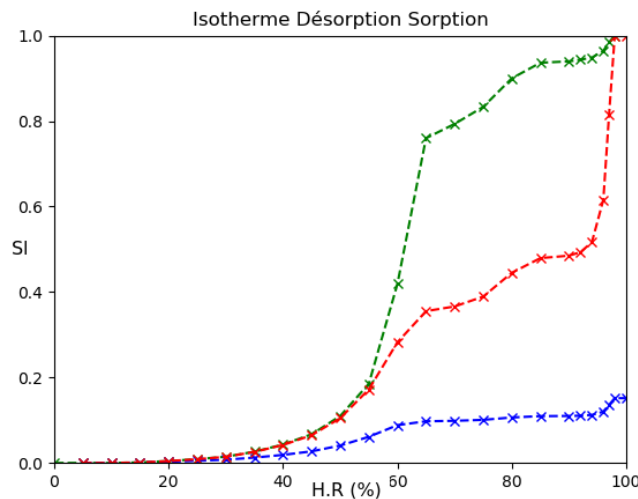
Lors de la sorption, la pression capillaire diminue jusqu'à être nulle lorsque H.R est égale à un. À mesure que la pression capillaire diminue la taille des pores qui peuvent se saturer augmente. Lorsqu'un pore vide d'eau liquide se trouve piégé par des voisins remplis, dans un premier temps la valeur de la pression capillaire locale (ménisque entre les voisins saturés et le pore vide) ne varie pas car la courbure du ménisque est fixée par le diamètre du pore concerné. Cela correspond à l'image de gauche du schéma 2.32. La pression capillaire globale diminue ce qui veut dire que la pression de liquide augmente (loi de Laplace). Pour conserver une pression capillaire locale constante, il est nécessaire que la pression de l'air humide piégé augmente. D'après la loi de compression isotherme, si la pression d'un gaz augmente, son volume diminue. Nous venons de montrer que durant l'imbibition d'un matériau poreux, l'air humide piégé se comprime. La figure 2.32 décrit ce phénomène. Lorsque la bulle d'air piégée est réduite à une sphère de même diamètre que le pore cylindrique, la variation du volume d'air piégé est due désormais à la fois à l'augmentation de la pression du liquide mais aussi à l'évolution du rayon de la bulle. Cette étape correspond à l'image de gauche du schéma 2.32.

Dans son étude intitulée devenir de l'air occlus durant l'imbibition, [J-F. Daïan, 2010] met en évidence un diamètre caractéristique de pore de 2,9 micromètres à 20C. Ce diamètre correspond à la taille maximale des pores possiblement sujets à l'effet de compressibilité de l'air humide piégé. Plus le pore concerné est petit par rapport au diamètre caractéristique plus la bulle d'air piégée sera comprimée pour une humidité relative donnée. Il faut rappeler que les diamètres de pores du modèle numérique varient entre 1 et 100 nanomètres. Il est difficile de donner quantitativement le volume d'air occlus pour chaque îlot de pores à chaque étape de la sorption. Il est cependant possible de donner une valeur de pression capillaire globale pour laquelle la bulle d'air piégée va se comprimer de façon significative (réduction de quinze fois son volume initial). Comme le montre

le graphique ci-dessous figure 2.33, cette pression (en bleu) requise est plus grande que la pression capillaire (en rouge) nécessaire à la saturation d'un pore de même diamètre. En d'autre terme, dès que la condition d'humidité relative permet qu'un pore se sature, si ce pore est piégé par des voisins saturés, l'air occlus se comprime immédiatement.



**FIGURE 2.33:** Évolution de la pression de nécessaire à la compression de l'air occlus (en bleu) en fonction de H.R



**FIGURE 2.34:** Isotherme de Désorption (vert) Sorption (en bleu ancien modèle, en rouge nouveau modèle avec compression de l'air occlus)

**Nous avons conclu au paragraphe précédent que l'air occlus commence à diminuer de volume dès que la condition sur le diamètre minimal de pore est vérifiée.**

**Nous prenons en compte ce phénomène dans le modèle numérique de la manière suivante. Un pore restant vide à cause de voisins remplis est désormais considéré comme rempli d'eau liquide dès le palier suivant d'humidité relative.** Cette nouvelle condition permet de prendre en compte la diminution importante du volume de la bulle d'air piégée suite à sa compression. Pour rappel, le modèle numérique est construit de sorte qu'un pore est soit vide soit saturé, il n'y a pas d'entre deux.

Figure 2.34, nous pouvons constater l'effet de la modification du modèle de sorption. En bleu, il s'agit de la courbe de l'ancien modèle de sorption empêchant l'imbibition de tous les pores piégés (effet bouteille d'encre) et en rouge du nouveau modèle prenant en compte la compression de l'air occlus. Le résultat est beaucoup plus réaliste en comparaison aux résultats expérimentaux.

### 4.3 Estimation du retrait de dessiccation

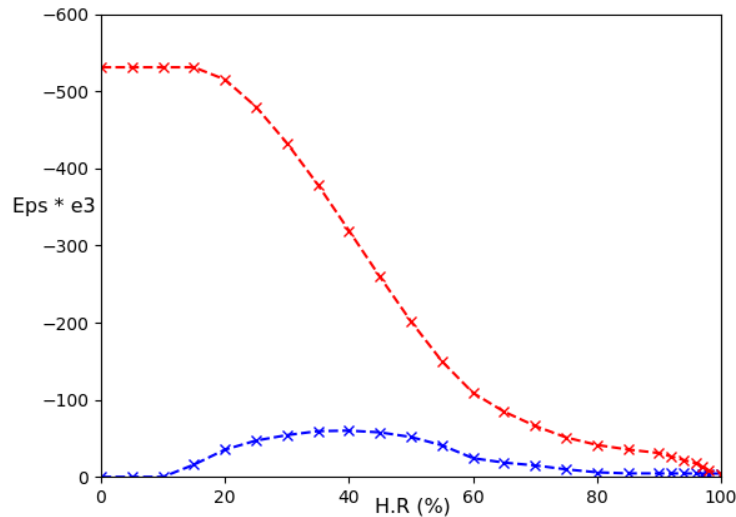
Lorsque le béton sèche un retrait dit de dessiccation a lieu. Il s'agit d'une déformation du squelette du matériau causé par le déséquilibre de l'humidité relative ambiante. Ce phénomène a plusieurs mécanismes à différentes échelles. Nous ne prendrons en compte dans cette partie que retrait de succion capillaire. Ce retrait est dû à la dépression capillaire. Cette dépression apparaît dès qu'il y a présence d'air humide et d'eau liquide dans le réseau poreux du matériau. Ainsi à l'interface des deux phases dans un pore, un ménisque se crée et la pression de l'eau liquide diminue. La dépression de l'eau liquide présente dans les pores de petites tailles au front de séchage est considérable. Cette pression négative engendre un effet de succion. Le front de séchage comprime le squelette du matériau.

En supposant que la pression de l'air humide dans le réseau est environ égale à la pression atmosphérique, il est aisé d'obtenir la pression de la phase liquide via la pression capillaire. Or, nous avons montré dans la partie 2.1.1 du présent chapitre, que la loi de Laplace permet de donner une expression de la pression capillaire en fonction du diamètre du pore possédant une interface air/eau. Ainsi en connaissant l'état remplis ou vide de tous les pores de notre réseau et leurs diamètres correspondants, on sait calculer la pression de la phase liquide partout dans le réseau et notamment au front de séchage. Ainsi, nous sommes capables pour chaque H.R de déterminer l'état de l'ensemble des pores et donc la pression du liquide des pores saturés.

Il reste pour estimer le retrait à savoir passer de la pression du liquide à la déformation de la matrice solide. Le retrait est une contraction de la matrice solide. La matrice solide est donc en compression. Pour obtenir la déformation, il suffit de diviser la contrainte de compression par le module d'élasticité du squelette.

$$P_c = 4.\gamma.D , \epsilon = P_c/E$$

Une déformation est calculée pour chaque pore saturé possédant au minimum un voisin vide. Nous obtenons une déformation dans les 3 directions de l'espace pour tous les pores concernés. Puis nous sommes l'ensemble des déformations d'une même direction spatiale pour obtenir la déformation totale du matériau.



**FIGURE 2.35:** Déformation de retrait de dessiccation en fonction de H.R (en bleu matériau parfaitement élastique et en rouge matériau parfaitement plastique)

Ci-dessus figure 2.35, nous avons une courbe représentant l'évolution de la déformation dans une direction de l'espace en fonction de l'humidité relative. Bien que différent localement à l'échelle du pore, le résultat total est identique dans les 3 directions. La courbe bleue concerne un matériau parfaitement élastique. Au début de la désorption, peu de pores se sont vidés, il y a donc peu d'interface entre les deux phases. De plus la dépression capillaire est d'autant plus grande que le diamètre du pore concerné est petit. Ainsi, le retrait augmente de façon considérable lorsque H.R diminue sous les 60% car le nombre d'interface eau liquide/air humide explose et la pression capillaire devient grande. Enfin, le retrait diminue ce qui correspond à la disparition progressive de pores saturés. Le matériau est supposé parfaitement élastique, toutes les déformations sont réversibles. La courbe rouge correspond à un matériau parfaitement plastique, toutes les déformations sont irréversibles. La réalité est évidemment un compromis entre ces deux courbes.

## 5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mis en évidence les méthodes numériques et la physique utilisées pour fabriquer un modèle numérique prédictif. Le but de ce modèle est de donner des isothermes de sorption désorption à partir d'un réseau poreux dont les paramètres principaux (porosité, arrangement spatial) sont maîtrisés. Pour cela, il faut créer un réseau poreux numérique. La physique est ensuite appliquée à l'image de ce réseau, le résultat est une cartographie tridimensionnelle de l'occupation de l'eau liquide dans les pores. Il est alors aisé d'obtenir le volume d'eau liquide présent dans le réseau poreux et donc d'obtenir les isothermes de sorption et de désorption.

La force de ce modèle numérique prédictif réside dans sa capacité à traduire la complexité géométrique d'un réseau poreux issu d'un matériau cimentaire. Bien entendu, des hypothèses simplificatrices sont nécessaires, les pores sont supposés cylindriques et ils sont disposés spatialement sous forme d'une grille de taille 100x100x100 pores. Dans la littérature, il existe de nombreux modèles numériques visant à reproduire un réseau capillaire, la majorité d'entre eux proposent une géométrie sur 2 dimensions.[M. Hosseini, 2015], dans sa thèse a proposé un modèle plus ambitieux, permettant de générer un réseau 3D sans forme de pore prédéfinie. Son modèle est plus complexe que celui de la présente thèse, mais celui-ci est gourmand en temps de calcul. Le modèle numérique de la présente thèse permet de créer un réseau et de prédire une isotherme correspondante en moins d'une minute. Il s'agit d'un compromis entre efficacité et réalisme. La physique du modèle est très simple, elle se base sur une loi d'occupation de l'eau liquide, la loi de Kelvin Laplace. Le pari de ce modèle prédictif est de supposer que la complexité des isothermes de sorption désorption est issue de la morphologie du réseau poreux.

Nous l'avons vu, les isothermes numériques produites ne correspondent pas aux isothermes expérimentales. Le degré de saturation en eau du réseau numérique diminue trop rapidement, les courbes expérimentales montrent que le matériau possède encore beaucoup d'eau liquide pour des humidités relatives faibles. Ce constat n'indique pas forcément que le modèle numérique n'est pas bon. Cette différence entre les courbes peut provenir de 3 sources d'erreurs distinctes, la physique, les hypothèses de construction de la morphologie du réseau et le choix d'une distribution poreuse. La fabrication de l'image du réseau poreux se base sur une courbe de distribution poreuse expérimentale. Ces distributions poreuses surtout à l'échelle du réseau capillaire sont issues d'investigation expérimentale avec des hypothèses fortes nécessaires à leur obtention. Il est donc tout à fait possible que nous construisions un réseau avec une distribution de pores ne correspondant pas à la réalité du matériau considéré.

Ce modèle est cependant un outil de compréhension efficace des phénomènes de séchage et d'imbibition. Ces modélisations ont permis de mettre en évidence l'importance de la morphologie et de l'arrangement spatiale sur les isothermes. En effet, pour une même distribution de pores, en modifiant l'arrangement spatial, les comportements hydriques obtenus sont différents. Le modèle permet aussi d'observer sur l'image du réseau

capillaire numérique le séchage et l'imbibition et notamment de constater visuellement l'hystérésis entre la courbe de sorption et de désorption.

En partant de l'hypothèse que le modèle numérique de ce présent chapitre traduit convenablement la courbe de distribution poreuse pour simuler le comportement hydrique du matériau poreux en question. Il est possible de se servir de ce modèle pour fabriquer de la donnée. C'est à dire de générer de façon aléatoire un grand nombre de distributions poreuses et de simuler à partir du modèle numérique les isothermes de sorption-désorption. En utilisant la base de données construite avec le modèle numérique, nous sommes en mesure d'inverser ce modèle et de s'en servir pour faire l'inverse de l'objectif du chapitre : prédire la distribution poreuse d'un matériau cimentaire à partir de son isotherme expérimentale. C'est le sujet d'étude du dernier chapitre de cette thèse.



# Chapitre 3

## Prédiction de la morphologie d'un réseau poreux par apprentissage automatique

### Contents

---

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>82</b>
1.1	Contexte	82
1.2	Contributions	82
<b>2</b>	<b>Apprentissage automatique</b>	<b>83</b>
2.1	Le perceptron	83
2.2	L'entraînement	84
<b>3</b>	<b>Inversion par apprentissage du modèle d'homogénéisation Mori-Tanaka</b>	<b>85</b>
3.1	Inversion d'un modèle par apprentissage	85
3.2	Modèle Mori-Tanaka à trois échelles pour les géomatériaux	86
3.3	Solution par apprentissage	87
3.4	Synthèse	93
<b>4</b>	<b>Inversion par apprentissage du modèle de simulation d'isothermes de sorption-désorption</b>	<b>94</b>
4.1	Modèle de simulation d'isothermes de sorption-désorption	94
4.2	Inversion du modèle	95
4.3	Synthèse	99
<b>5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>100</b>

---

# 1 Introduction

## 1.1 Contexte

Dans le chapitre précédent, nous avons fabriqué un modèle numérique qui simule le comportement hydrique du matériau cimentaire à partir de la courbe de distribution poreuse. Aussi, nous avons vu que la porosimétrie au mercure ne permettait pas de déterminer précisément la fraction volumique des pores capillaires. Nous proposons dans ce troisième et dernier chapitre, d'inverser le modèle numérique en question. Cette démarche nous permet de donner la porosimétrie à partir du comportement hydrique du matériau. Dans sa thèse, [T. Rougelot, 2008] a proposé d'estimer la distribution de tailles de pores d'un matériau en utilisant l'isotherme de désorption et de comparer au résultat par porosimétrie au mercure. Sa méthode est également basée sur la loi de Kelvin-Laplace mais elle ne prend pas en compte l'effet de la morphologie du réseau poreux. Notre approche est différente, nous allons utiliser le modèle du second chapitre et l'inverser avec de l'apprentissage automatique. Le modèle inverse est donc un moyen supplémentaire permettant de caractériser le réseau capillaire d'un matériau cimentaire.

Dans ce chapitre, nous utilisons une méthode d'apprentissage connexionniste. La solution proposée se base sur l'usage de perceptrons multi-couches. Il s'agit d'un des types de réseaux de neurones artificiels. Les réseaux de neurones artificiels ont été construits en s'inspirant de la biologie du cerveau humain. Le neurone possède une fonction simple. Lorsqu'il reçoit un stimuli, le neurone réagit si un seuil est dépassé. Dans ce cas, il envoie une réponse à ses neurones voisins. Les algorithmes d'apprentissage connexionniste fonctionnent de la même manière [P. McCulloch, 1943]. Pour entraîner un réseau de neurones, il est nécessaire d'avoir de la donnée en quantité. Ces datas sont les données du problème que nous cherchons à inverser. Ici, il s'agit des isothermes et de courbes de porosimétrie.

## 1.2 Contributions

Dans ce chapitre, nous voulons prédire la distribution poreuse d'un matériau cimentaire à partir de son isotherme expérimentale. Pour cela, nous allons entraîner un réseau de neurones artificiels ou perceptrons multi-couches. L'apprentissage automatique est une science jeune et c'est encore plus vrai pour ses applications dans le domaine du génie civil. C'est pourquoi, les deux premières parties sont pensées comme une introduction au machine learning.

Ce chapitre se compose de trois parties. Après une présentation des grands principes de l'apprentissage automatique, nous appliquons ceux-ci à un cas pratique d'inversion d'un modèle. Il s'agit d'un modèle d'homogénéisation des caractéristiques mécaniques des matériaux de type roches et cimentaires basés sur des équations explicites [Y.J. Cao, 2021]. Nous cherchons à montrer au lecteur ce qu'il est possible de faire avec un des domaines de l'apprentissage automatique, les résultats obtenus et les limites.

Dans la dernière partie, nous revenons au problème du séchage des bétons. L'objectif est d'inverser le modèle du chapitre deux. Nous avons constaté que les courbes de distributions de tailles de pores (PSD) obtenues expérimentalement manquaient de précision concernant l'investigation des pores capillaires. Pour rappel, le modèle du chapitre deux permet de simuler les isothermes de sorption-désorption à partir des PSD. En inversant ce modèle, nous obtenons un outil numérique capable de donner une PSD pour un matériau cimentaire à partir de son comportement hydrique. C'est à dire à partir des isothermes de désorption et ou de sorption. C'est donc un moyen supplémentaire permettant de caractériser le réseau capillaire d'un matériau cimentaire.

## 2 Apprentissage automatique

### 2.1 Le perceptron

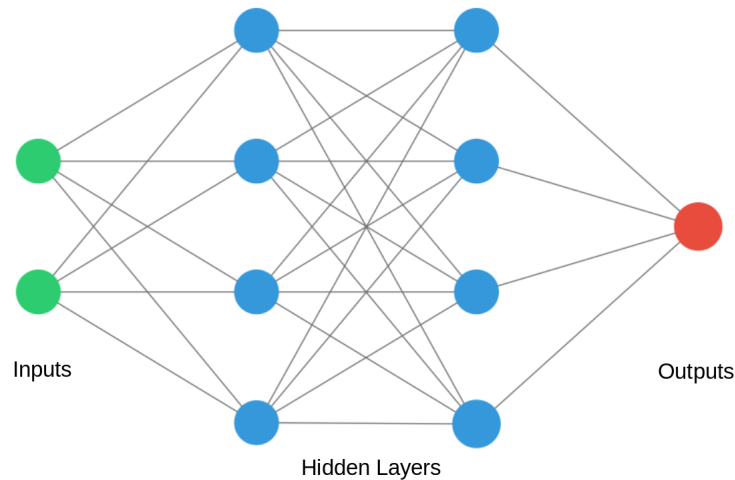
Les réseaux de neurones artificiels ont été construits en s'inspirant de la biologie du cerveau humain. Le neurone possède une fonction simple. Lorsqu'il reçoit un stimuli électrique, le neurone réagit si un seuil est dépassé. Dans ce cas, il envoie une réponse au système nerveux ou à ses neurones voisins. Seul, le comportement de cette cellule est extrêmement basique. Mais grâce au nombre considérable de connections entre les neurones, le cerveau est capable d'apprendre de problèmes complexes. À titre indicatif, le cerveau possède environ cent milliards de neurones et chacun d'entre eux peut former jusqu'à dix mille connections synaptiques.

C'est sur ce principe qu'en 1943, le premier modèle de neurone ou perceptron est proposé [P. McCulloch, 1943]. Pour une valeur d'entrée  $X$  composée de  $n$  scalaires :

$$f(X) = 1 \text{ si } \sum_{i=1}^n w_i \cdot x_i + w_0 \geq 0$$

$$f(X) = 0 \text{ si } \sum_{i=1}^n w_i \cdot x_i + w_0 < 0$$

$w_0$  est le seuil d'activation ou biais et les  $w_i$  sont des poids. Le perceptron ainsi construit permet de prédire une réponse binaire, soit 0, soit 1.



**FIGURE 3.1:** Schéma d'un perceptron multi-couches

Toujours en s'inspirant de l'architecte du cerveau humain, le modèle du perceptron a été amélioré en 1985 [Y. LeCun, 1985]. Ce modèle propose de superposer plusieurs couches composées de neurones. Chaque neurone est connecté à l'ensemble de ses voisins de la couche précédente et suivante. Les neurones d'une même couche ne sont pas connectés.

Toutes les connexions entre neurones du perceptron multi-couches possèdent un poids. La valeur d'entrée est propagée de couche en couche, de neurone en neurone, jusqu'à obtenir une valeur de sortie. Plus le nombre de couches est grand plus l'apprentissage est qualifié de profond. On parle de deep learning. Un perceptron multi-couches possède la propriété statistique d'approximation universelle. Un perceptron multi-couches possédant une seule couche intermédiaire ou couche cachée avec un nombre important de neurones est capable d'approcher n'importe quelle fonction continue. Ce résultat a été démontré par [A. Pinkus, 1999] en 1999. Ces 10 dernières années, il y a eu des avancées considérables dans la performance des réseaux de neurones en augmentant le nombre de couches intermédiaires.

## 2.2 L'entraînement

Un réseau de neurones est un modèle paramétrique, ces paramètres sont l'ensemble des poids des neurones du réseau. La phase d'apprentissage d'un perceptron consiste à minimiser l'erreur des valeurs de sortie, les valeurs prédites, en modifiant les paramètres du réseau, les poids. Pour mesurer l'erreur, on utilise une fonction de perte. Il s'agit d'une norme entre la valeur prédite et la valeur réelle de sortie servant à l'apprentissage. L'algorithme de la descente du gradient est une méthode efficace et facile à mettre en œuvre numériquement pour trouver un minimum à une fonction. Il s'agit d'un algorithme itératif.

Celui-ci effectue un déplacement opposé à la direction du gradient et donc dans la direction du minimum local de la fonction. Cette fonction peut présenter plusieurs minimum locaux, il est donc intéressant d'effectuer l'apprentissage à plusieurs reprises en initialisant avec différents poids. C'est ce que nous verrons dans la suite du chapitre. Puisqu'il s'agit d'un perceptron multi-couches, il est nécessaire de calculer des gradients partiels par rapport aux poids des neurones de chacune des couches en partant de la sortie vers la couche d'entrée. Cette étape est appelée la rétropropagation du gradient.

Concrètement, dans un perceptron multi-couches, les poids de chaque connexion sont initialisés aléatoirement. La valeur de sortie et donc l'erreur du réseau est une fonction des poids des neurones. On vient soustraire le gradient de cette fonction erreur ou fonction de perte aux poids des neurones. Ainsi, à chaque itération de l'algorithme de descente du gradient, c'est à dire à chaque nouvelle prédiction du perceptron, les poids des neurones sont mis à jour à fin de minimiser cette erreur. On introduit ici la notion de vitesse d'apprentissage. Il s'agit d'un coefficient multiplicateur qui vient augmenter ou diminuer l'effet du gradient. Plus la vitesse d'apprentissage est grande, plus on se rapproche vite vers le minimum local.

Concernant la fin de l'apprentissage, ces 3 cas sont envisageables et nécessite l'arrêt de l'entraînement :

- L'erreur est considérée satisfaisante vis à vis des performances recherchées.
- L'erreur ne diminue plus, la fonction de perte a atteint un minimum local. Il faut dans l'ordre ; relancer plusieurs entraînements, trouver une vitesse d'apprentissage optimale, modifier l'architecture du perceptron [R. Marks, 1999].
- L'erreur sur les données d'apprentissage continue de diminuer mais l'erreur sur les données tests croît ; c'est ce qu'on qualifie de sur-apprentissage. Le réseau possède possiblement trop de neurones. Un réseau sur-apprend car celui-ci apprend des données d'entraînement et non pas du problème dans son entièreté. Il faut probablement augmenter le nombre de données d'entraînement [R. Marks, 1999]. Il est possible également d'introduire une technique appelée le "dropout" [N. Srivastava, 2014].

## 3 Inversion par apprentissage du modèle d'homogénéisation Mori-Tanaka

### 3.1 Inversion d'un modèle par apprentissage

Dans ce chapitre, nous proposons une solution pour inverser un modèle "direct" se basant sur des équations explicites. C'est un modèle d'homogénéisation des caractéristiques mécaniques élastiques sur 3 échelles matériaux appelé Mori-Tanaka [Y.J. Cao, 2021]. L'objectif est ici de montrer pas à pas les possibilités de l'apprentissage automatique.

Ci-dessous 3.2, les grandes trois étapes sont schématisées pour inverser un modèle par apprentissage automatique. Une des clés pour proposer une solution à cette problématique réside dans la capacité à produire des données nécessaires à l'entraînement du perceptron multi-couches (MLP). Le modèle direct, représenté par la fonction  $f$ , permet de simuler des couples  $(X,Y)$  tel que  $Y = f(X)$ . Il faut ensuite entraîner le perceptron à prédire  $X$  à partir de  $Y$  sur l'ensemble des couples de datas simulées. Lorsque l'apprentissage est terminé, on utilise le réseau de neurones artificiels sur des données d'entrées qui lui sont inconnues  $Y'$ . Le résultat est une prédiction des valeurs recherchées  $X'$ .

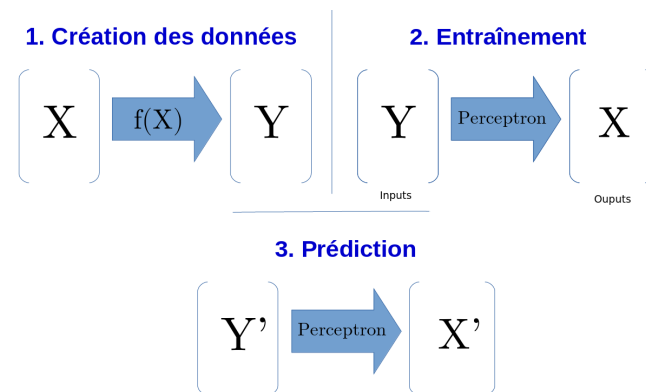


FIGURE 3.2: Schéma représentant les étapes de l'apprentissage automatique

### 3.2 Modèle Mori-Tanaka à trois échelles pour les géomatériaux

Le modèle multi-échelle [Y.J. Cao, 2021] permet l'homogénéisation des caractéristiques mécaniques élastiques sur 3 échelles matériaux avec pores et inclusions. Le matériau est caractérisé par 3 échelles. À l'échelle mésoscopique, il possède des inclusions minérales. À l'échelle microscopique, les inclusions considérées sont des pores vides de taille micrométrique, et enfin, de nouveau des pores vides à l'échelle des pores capillaires. Dans ce modèle, toutes les inclusions sont supposées sphériques, les différentes échelles peuvent être représentées comme sur la figure 3.3.

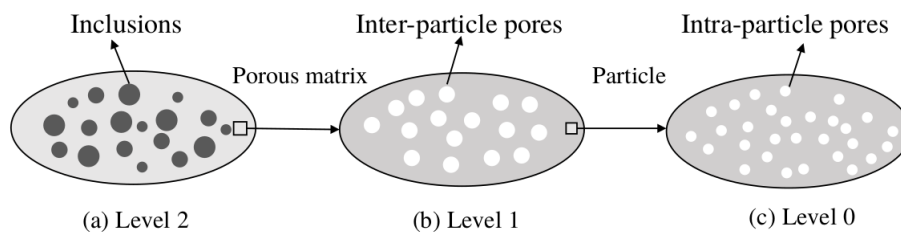


FIGURE 3.3: Schéma représentant les 3 échelles du modèle

Les propriétés élastiques macroscopiques sont déduites des caractéristiques aux 3 échelles grâce à 3 homogénéisations successives.

Niveau 0 :

$$k_{m0} = \frac{4(1-f)k_s\mu_s}{4\mu_s + 3fk_s}; \mu_{m0} = \frac{(1-f)\mu_s}{1 + 6f\frac{k_s+2\mu_s}{9k_s+8\mu_s}} \quad (3.1)$$

Avec  $k_s$  et  $\mu_s$  les paramètres élastiques de la matrice solide à l'échelle nanométrique,  $f$  la porosité des pores concernés et  $k_{m0}$ ,  $\mu_{m0}$  les paramètres élastiques homogénéisés.

Niveau 1 :

$$k_{pm} = \frac{4(1-\phi)k_{m0}\mu_{m0}}{4\mu_{m0} + 3\phi k_{m0}}; \mu_{pm} = \frac{(1-\phi)\mu_{m0}}{1 + 6\phi\frac{k_{m0}+2\mu_{m0}}{9k_{m0}+8\mu_{m0}}} \quad (3.2)$$

Avec  $\phi$  la porosité des pores concernés et  $k_{pm}$ ,  $\mu_{pm}$  les paramètres élastiques homogénéisés.

Niveau 2 :

$$k_{hom} = \frac{\frac{(1-\rho)k_{pm}}{4\mu_{pm}+3k_{pm}} + \frac{\rho k_i}{4\mu_{pm}+3k_i}}{\frac{(1-\rho)}{4\mu_{pm}+3k_{pm}} + \frac{\rho}{4\mu_{pm}+3k_i}} \quad (3.3)$$

$$\mu_{hom} = \frac{\frac{(1-\rho)\mu_{pm}}{\mu_{pm}(8\mu_{pm}+9k_{pm}+6\mu_{pm}(2\mu_{pm}+k_{pm}))} + \frac{\rho\mu_i}{\mu_{pm}(8\mu_{pm}+9k_{pm}+6\mu_i(2\mu_{pm}+k_{pm}))}}{\frac{(1-\rho)}{\mu_{pm}(8\mu_{pm}+9k_{pm}+6\mu_{pm}(2\mu_{pm}+k_{pm}))} + \frac{\rho}{\mu_{pm}(8\mu_{pm}+9k_{pm}+6\mu_i(2\mu_{pm}+k_{pm}))}} \quad (3.4)$$

Avec  $k_i$  et  $\mu_i$  les paramètres élastiques des inclusions,  $\rho$  la porosité des inclusions et  $k_{hom}$ ,  $\mu_{hom}$  les paramètres élastiques homogénéisés.

En connaissant les caractéristiques de chacune des phases aux différentes échelles, il est alors simple en appliquant ces formules d'obtenir les propriétés homogénéisées du matériau à l'échelle macroscopique. Cependant déterminer expérimentalement des valeurs de propriétés élastiques des phases au niveau 0 et 1 n'est pas aisé, d'où l'importance d'une possible résolution du problème inverse. Celle-ci consiste à proposer, en partant des caractéristiques macros, les potentielles caractéristiques nanoscopiques correspondantes. Cette correspondance respecterait bien entendu les formules d'homogénéisations énoncées.

### 3.3 Solution par apprentissage

Au vu de la complexité des équations, il n'est pas envisageable d'opter pour une résolution analytique du problème en inversant celles-ci. C'est pourquoi nous avons choisi une résolution par apprentissage automatique.

#### 3.3.1 Fabrication des données

Nous l'avons dit précédemment, pour pouvoir entraîner un perceptron multi-couches, il est nécessaire de produire énormément de données. De plus, elles doivent être représentatives du problème. Plus le problème est complexe, plus il faut avoir de la donnée

pour effectuer l'apprentissage. Le problème est complexe si les paramètres à prédire sont fortement non-linéaires ou si il y a beaucoup de paramètres indépendants. Chaque couple de données apporte un unique point dans l'espace à  $n$  dimensions correspondant aux  $n$  paramètres d'apprentissage. Afin que le réseau de neurones apprenne le lien entre les différents paramètres, il faut remplir cet espace à  $n$  dimensions de suffisamment de points. On comprend alors la nécessité d'avoir beaucoup de couples de données. Nous avons donc fabriqué une base de données de 10 millions de couples de valeurs d'entrée  $[k_i, \mu_i, k_{hom}, \mu_{hom}, f, \phi, \rho]$  et de sortie  $[k_s, \mu_s]$ . Les propriétés  $k_s, \mu_s, k_i, \mu_i, f, \phi$  et  $\rho$  sont tirées aléatoirement et de manière indépendante dans un intervalle de valeurs physiquement acceptables.  $f$  et  $\phi$  sont compris entre 0 et 20 pourcents et  $\rho$  entre 25 et 75 pourcents.  $k_s$  et  $\mu_s$  sont déterminés à l'aide de valeurs de module d'Young et de coefficients de Poisson. Le module d'Young ne peut pas dépasser 150 GPa et le coefficient de Poisson est compris entre 0.05 et 0.45. L'intervalle de valeurs est identique pour déterminer les propriétés des inclusions. Puis en utilisant les formules d'homogénéisations, nous obtenons les valeurs de  $k_{hom}$  et  $\mu_{hom}$  correspondantes. Ces données doivent être normées avant l'apprentissage. Il s'agit d'une étape importante pour améliorer la qualité des données d'apprentissage et en réduire la dimension. En pratique, on vient écraser les données entre 0 et 1, 0 pour le minimum et 1 pour le maximum.

### 3.3.2 Entraînement du réseau

Nous avons choisi nos données d'entrée et de sortie, en conséquence nous savons déjà la forme de la couche d'entrée et de sortie du perceptron. Il y aura sept neurones en entrée correspondant au sept paramètres  $[k_i, \mu_i, k_{hom}, \mu_{hom}, f, \phi, \rho]$  et deux neurones de sortie correspondant à  $[k_s, \mu_s]$ .

Pour déterminer le reste de l'architecture du réseau, il existe quelques conseils pour guider l'utilisateur. Pour des problèmes simples, une couche cachée suffit souvent à obtenir une précision satisfaisante. Pour éviter le sur-apprentissage, il est conseillé de ne pas dépasser dans une couche intermédiaire, le nombre de neurones de la couche d'entrée. Il s'agit de conseils et non de règles. L'apprentissage automatique est une science jeune dont les applications sont en plein essor. C'est là toute la difficulté du machine learning, il n'y a pas de directives précises à suivre pour fabriquer un réseau artificiel qui apprend. La méthode générale à appliquer est l'essai-erreur. Il faut faire des tests successifs jusqu'à trouver une combinaison satisfaisante.

Pour ce modèle, nous avons abouti à une architecture composée de trois couches cachées. La première et la seconde sont composées de 21 neurones artificiels chacune et la dernière de 7 neurones. Il y a donc dans ce perceptron multi-couches, un total de 58 neurones artificiels et de 749 connections entre les neurones. Concernant l'algorithme d'optimisation, nous utilisons une version améliorée de la descente du gradient appelée ADAM. Cette optimiseur possède une vitesse d'apprentissage évolutive durant l'entraî-



nement du réseau et ce pour chaque poids de neurones. C'est aujourd'hui l'optimiseur le plus couramment utilisé pour le deep learning [K. Xu, 2016].

Pour l'entraînement, nous avons réalisé 200 itérations (epoch) sur les datas d'apprentissage. Les poids des neurones sont mis à jour par l'optimiseur tous les 100 couples de datas (batch size). Puisque nous avons 10 millions de couples de datas et que 10% de ces données sont des données tests, les poids du réseau ont été mis à jour 18 millions de fois durant cet entraînement. Ci-dessous figure 3.4, nous avons la courbe d'apprentissage, qui donne l'évolution de la fonction de perte. La fonction de perte utilisée est l'erreur quadratique moyenne, ce qui correspond à la moyenne de la différence au carré entre la prédiction et la valeur réelle de sortie. Le code python pour l'apprentissage est disponible en annexe B.

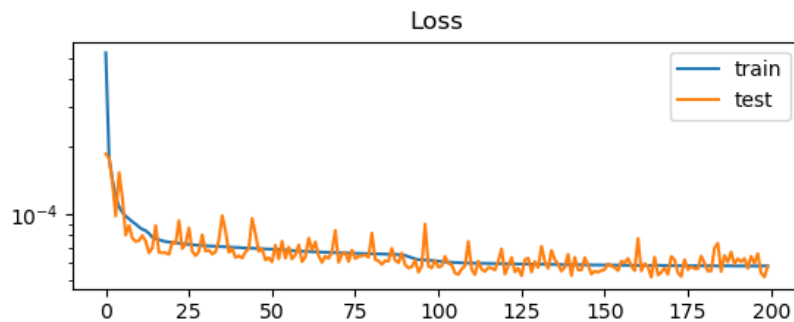


FIGURE 3.4: Courbe d'apprentissage du réseau artificiel

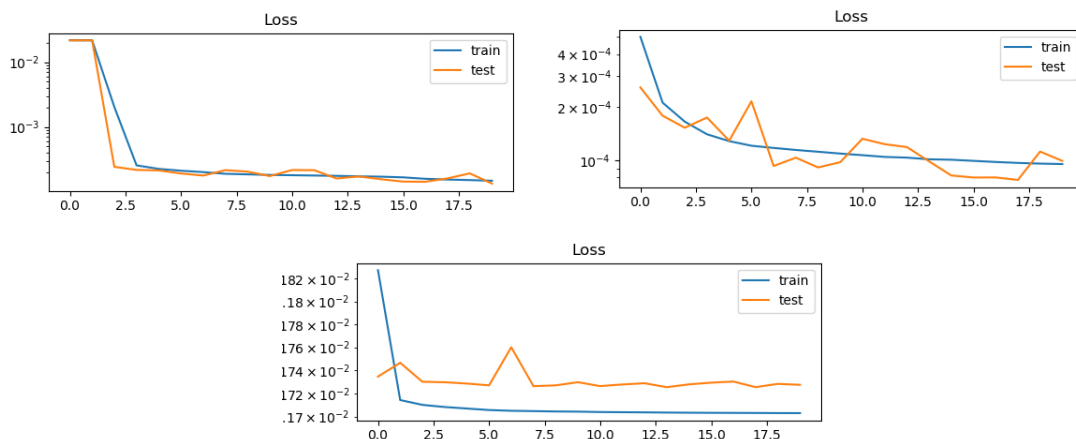


FIGURE 3.5: 3 autres courbes d'apprentissage, avec la même base de donnée et les mêmes paramètres d'apprentissage

En bleu, il s'agit la fonction de perte pour les données d'apprentissage. En orange,

il s'agit de la fonction de perte pour les données tests. Ces données ne sont pas utilisées pour l'entraînement, ce qui permet de vérifier que le perceptron apprend du problème dans sa globalité et non pas juste des données d'entraînement. Nous pouvons constater que l'erreur diminue puis stagne vers  $5e-5$ . Puisqu'il s'agit d'une erreur au carré, l'erreur réelle est d'environ  $7e-3$ . L'erreur donne l'ordre de grandeur de précision du réseau. La précision pour les valeurs prédites par le réseau, inférieures à  $1e-2$ , ne sera donc pas très bonne.

Comme expliqué précédemment dans le paragraphe 1.2, il est nécessaire de relancer plusieurs fois l'apprentissage. En effet, les poids de chaque connexion sont initialisés aléatoirement. La fonction de perte est fonction des poids du réseau. Cette fonction est donc différente à chaque apprentissage, il en va de même pour les minima locaux de cette fonction. Ainsi, selon l'initialisation, les prédictions du réseau en fin d'apprentissage sont plus ou moins performantes. Ci-dessous figure 3.5, nous avons trois courbes d'apprentissage issues du même réseau (même architecture, même vitesse d'apprentissage) et nous pouvons constater la différence de performance.

### 3.3.3 Mesure de l'erreur du réseau

Une fois le réseau artificiel entraîné, nous pouvons le tester avec des valeurs qui lui sont inconnues. Nous avons préparé 100.000 valeurs de  $[k_i, \mu_i, k_{hom}, \mu_{hom}, f, \phi, \rho]$  et également de  $[k_s, \mu_s]$ . Nous avons comparé ensuite la prédiction  $[k_s, \mu_s]$  du perceptron au  $[k_s, \mu_s]$  réels. L'erreur moyenne sur  $k_s$  est de 6,4%, la médiane est à 3,9% et l'écart type de 8,0%. Pour  $\mu_s$  la précision est nettement meilleure, l'erreur moyenne est de 1,6%, la médiane est à 0,9% et l'écart type de 2,2%. Comme prévu, la majorité des grosses erreurs de prédiction provient de  $k_s$  de l'ordre de grandeur de l'erreur. Pour toutes les valeurs prédites nettement supérieures à  $1e-2$ , l'erreur est négligeable (Figure 3.6 pour une distribution complète).

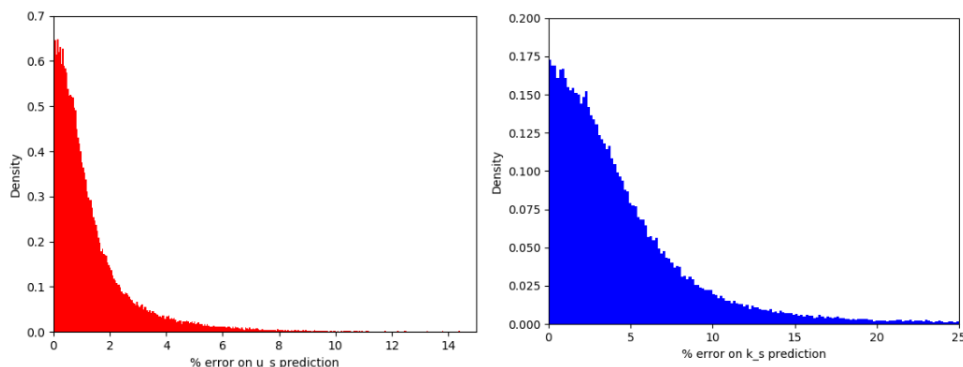


FIGURE 3.6: Histogramme de densité d'erreur  $\mu_s$  (gauche) and  $k_s$  (droite)

### 3.3.4 Prédiction de la fraction volumique $f$

L'un des problèmes de la solution décrite précédemment est qu'elle nécessite de fournir une valeur de fraction volumique  $f$  à l'échelle la plus petite. Cette mesure expérimentale n'est pas aisée. Ainsi, nous avons entraîné un seconde perceptron. Ce nouveau perceptron prédit alors  $[k_s, \mu_s, f]$  (outputs) à partir de  $[k_i, \mu_i, k_{hom}, \mu_{hom}, \phi, \rho]$  (inputs). Au vu des équations du modèle Mori-Tanaka, cette démarche est cohérente puisque  $k_{hom}$ ,  $\mu_{hom}$  sont des variables fonction de  $f$ .

Nous avons construit pour cela un perceptron avec six neurones d'entrée et trois neurones de sortie. Après plusieurs tentatives d'entraînement, la précision sur les trois paramètres de sortie reste médiocre.

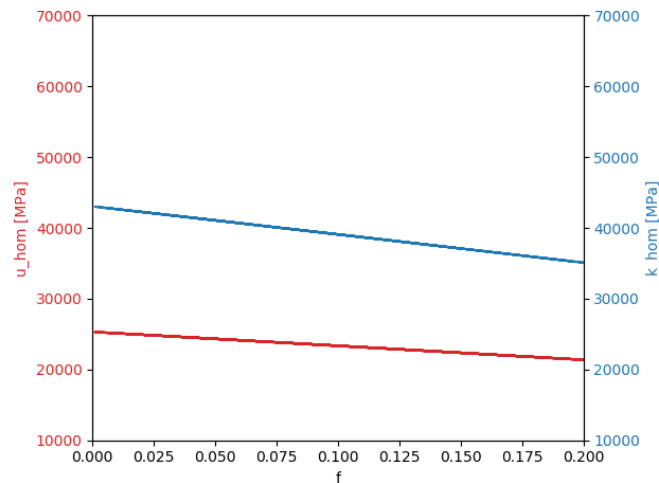


FIGURE 3.7: Evolution de  $k_{hom}$  (en bleu) and  $\mu_{hom}$  (in red) en fonction de  $f$

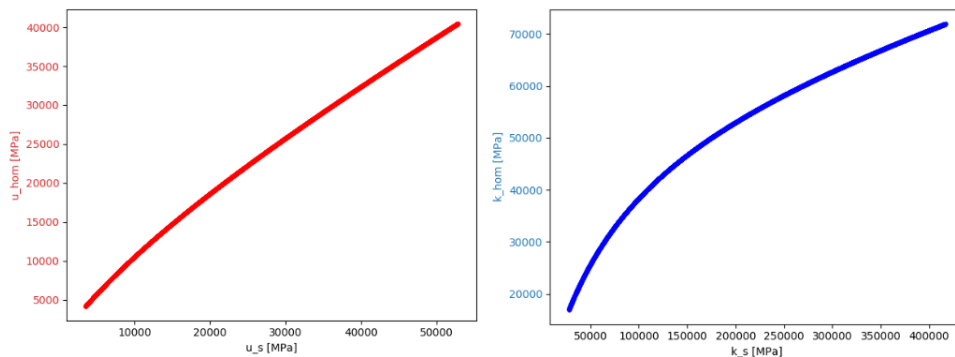


FIGURE 3.8: Evolution de  $k_{hom}$  (en bleu) and  $\mu_{hom}$  (en rouge) en fonction de  $k_s$  à droite et  $\mu_s$  à gauche

Une explication possible de l'échec de l'apprentissage est la faible influence de la fraction volumique des nanopores  $f$  sur les valeurs de  $k_{hom}$  et  $\mu_{hom}$ . Sur la figure 3.7, nous avons deux courbes représentant l'évolution de  $k_{hom}$  (en bleu) et  $\mu_{hom}$  (en rouge) en fonction de  $f$  lorsque l'ensemble des autres paramètres sont fixés ( $\phi, \rho, k_s, \mu_s, k_i, \mu_i$ ). Les courbes 3.8 montrent l'influence de  $k_s$  sur  $k_{hom}$  et  $\mu_s$  sur  $\mu_{hom}$  lorsque tous les autres paramètres sont fixés ( $\phi, \rho, f, k_i, \mu_i$ ). Nous constatons que  $f$  est un paramètre peu sensible sur  $k_{hom}$  et  $\mu_{hom}$  comparé à l'effet de  $k_s$  et  $\mu_s$  sur  $k_{hom}$  et  $\mu_{hom}$ . C'est probablement la raison principale de l'échec du réseau pour prédire la fraction volumique.

### 3.3.5 Prédiction de $k_s$ et $\mu_s$ sans la fraction volumique $f$

Nous avons vu précédemment que nous n'arrivons pas à prédire une valeur de  $f$  en utilisant un perceptron et que ce paramètre est difficile à obtenir expérimentalement. Ainsi, nous avons entraîné un troisième perceptron qui n'utilise pas le paramètre  $f$ . Ce perceptron prédit  $k_s$  et  $\mu_s$  (ouputs) à partir de  $k_i, \mu_i, k_{hom}, \mu_{hom}, \phi$  et  $\rho$  (inputs). Il possède donc 6 neurones d'entrée et 2 de sortie. Chacune des premières et deuxièmes couches cachées possèdent 18 neurones. La troisième et dernière couche cachée en a 6.

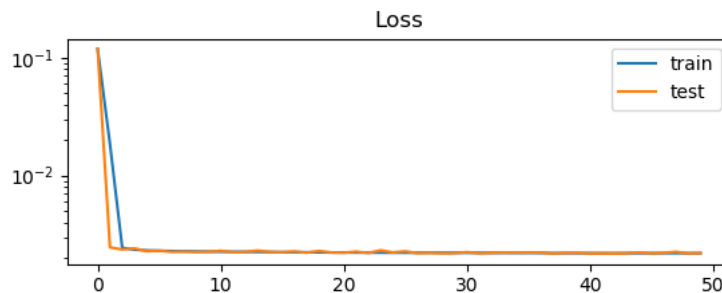
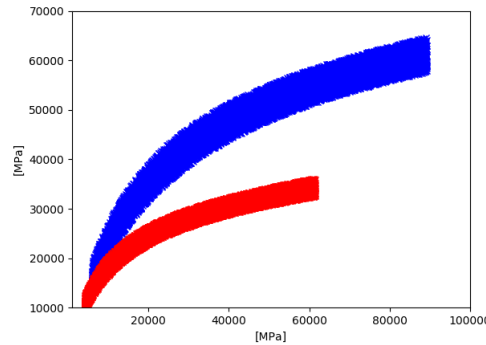


FIGURE 3.9: Courbe d'apprentissage pour le modèle f

Sur la figure 3.9, nous pouvons voir que l'erreur diminue jusque  $2.2e-3$  (comme il s'agit de l'erreur au carré, l'erreur réel est d'environ de  $4.6e-2$ ). Nous avons préparé 100.000 paires de données d'entrée et de sortie. L'erreur moyenne sur  $k_s$  est de 17%, la médiane est de 13% et l'écart type est de 29%. L'erreur moyenne sur  $\mu_s$  est de 10%, la médiane est de 9% et l'écart type est de 29%.

Ainsi, il n'est pas envisageable d'obtenir une prédiction précise de  $k_s$  et  $\mu_s$  sans fournir la valeur de  $f$  dans les données d'entrée. La fraction volumique  $f$ , bien que peu sensible, est nécessaire pour assurer l'unicité d'un couple  $[k_s, \mu_s]$  correspondant à un couple  $[k_{hom}, \mu_{hom}]$ . Nous pouvons constater cela sur la courbe 3.10 qui donne l'évolution de  $k_{hom}$  en bleu et  $\mu_s$  en rouge en fonction de  $k_s$  et  $\mu_s$  respectivement si  $f$  n'est pas fixé. Sans préciser la valeur exacte de  $f$ , il existe ainsi plusieurs valeurs de  $[k_s, \mu_s]$  correspondant à un couple unique  $[k_{hom}, \mu_{hom}]$ .



**FIGURE 3.10:** Évolution de  $k_{hom}$  (en bleu) et  $\mu_{hom}$  (en rouge) en fonction de  $f$  à droite et de  $k_s$  et  $\mu_s$  à gauche

### 3.3.6 Prédiction de $k_s, \mu_s$ pour une formulation de béton standard

Ici, nous utilisons le troisième perceptron pour prédire les valeurs des caractéristiques mécanique à l'échelle nanométrique ( $k_s, \mu_s$ ) pour une formulation de béton standard et avec des caractéristiques mécaniques macroscopiques standards [R. Bucher, 2017]. Ainsi,  $k_{hom}$  et  $\mu_{hom}$  sont obtenus à partir du module d'Young et du coefficient de Poisson de ce béton. Pour les inclusions, nous prenons une fraction volumique  $\phi$  liée à la formulation d'un béton avec des granulats siliceux et  $\rho$  comme étant la mesure de la porosité à l'eau de ce même béton.

Puisque nous ne pouvons pas mesurer expérimentalement de la fraction volumique nanoscopique  $f$  ou la prédire en utilisant un réseau de neurones, nous utilisons le dernier perceptron présenté. Celui-ci donne des valeurs de  $k_s, \mu_s$  acceptable pour estimer de les caractéristiques mécaniques nanoscopiques.

Données d'entrée :

$k_i [MPa]$	$\mu_i [MPa]$	$k_{hom} [MPa]$	$\mu_{hom} [MPa]$	$\phi$	$\rho$
38888	29166	20555	15416	0.72	0.14

Dans le tableau ci-dessous, nous avons les valeurs prédites par le perceptron de  $k_s, \mu_s$ . L'erreur du perceptron est de 13% en moyenne. L'encadrement des valeurs prédites correspond à un intervalle de confiance de 68%.

Données de sortie prédites :

$k_s [MPa]$	$\mu_s [MPa]$
32419 + / - 8428	26994 + / - 7558

Nous pouvons noter que les valeurs de  $k_s, \mu_s$  sont bien supérieures aux caractéristiques mécaniques homogénéisées  $k_{hom}$  et  $\mu_{hom}$ .

## 3.4 Synthèse

Dans cette section, nous avons proposé une solution pour inverser un modèle multi-échelles d'homogénéisation des caractéristiques élastiques. Nous avons utilisé une mé-

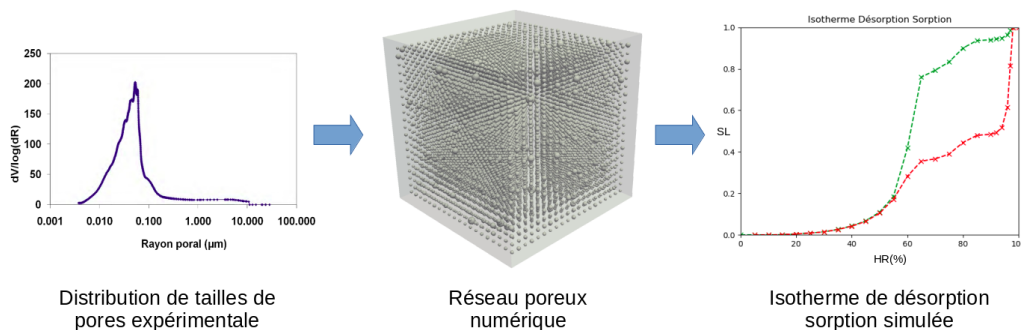
thode d'apprentissage automatique basée sur les perceptrons multi-couches. La solution par apprentissage est satisfaisante bien qu'elle possède des limites. En effet nous avons pu constater qu'un paramètre insensible ne pouvait pas être prédit. Pour tous les modèles basés sur des équations explicites ne pouvant être inversées simplement par des méthodes classiques, la résolution par apprentissage est envisageable et ouvre de belles perspectives. Il faut tout de même être capable de produire des données d'apprentissage. Le machine learning peut être employé pour résoudre d'autres types de problématiques sans équation explicite. C'est ce qui est proposé dans la suite de ce chapitre.

## 4 Inversion par apprentissage du modèle de simulation d'isothermes de sorption-désorption

### 4.1 Modèle de simulation d'isothermes de sorption-désorption

Le modèle numérique présenté dans le second chapitre a pour objectif de simuler des isothermes de sorption et de désorption. Ces courbes permettent de caractériser le comportement hydrique du matériau lors de son imbibition et ou séchage. Les isothermes sont simulées à partir d'un réseau poreux numérique idéalisé (grilles de 100x100x100 pores cylindriques) dont les paramètres principaux (porosité, arrangement spatial) sont maîtrisés. Une physique simple d'occupation de la phase liquide dans le milieu est appliquée en fonction de la taille des pores et de la condition limite d'humidité relative.

L'intérêt de ce modèle est de traduire le comportement hydrique autrement que par un moyen expérimental. Tracer des isothermes expérimentales pour les matériaux cimentaires est un processus long qui peut prendre des années. Cette solution numérique permet d'estimer instantanément ce comportement en se basant sur la distribution de pores du matériau en question.

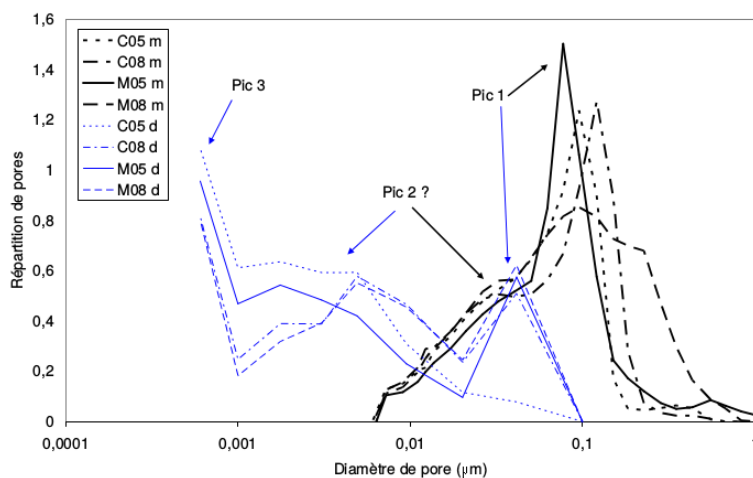


**FIGURE 3.11:** Schéma de principe du modèle de simulation d'isothermes de sorption-désorption

Nous avons pu constater que ce modèle avait des limites importantes. Les isothermes numériques sont différentes des isothermes expérimentales. Nous pensons que les courbes de distribution de tailles de pores expérimentales issues de la porosimétrie au mercure sous-estiment largement le volume poreux des pores de diamètres inférieures à dix nanomètres. Le volume de ces pores est d'ailleurs rarement investigué. De plus, les pores de diamètres compris entre un et dix nanomètres sont les plus concernés par les effets de capillarité. Il est ainsi difficile d'utiliser le modèle numérique pour sa fonction initiale de prédiction du comportement hydrique d'un matériau cimentaire.

## 4.2 Inversion du modèle

Nous l'avons dit précédemment, les techniques usuelles pour déterminer la porosimétrie d'un matériau manquent de précision, notamment dans l'échelle de taille des pores capillaires. La porosimétrie au mercure est efficace pour caractériser les pores de tailles supérieures à 50 nm. Dans sa thèse, [T. Rougelot, 2008] a proposé d'estimer la distribution de tailles de pores d'un matériau en utilisant l'isotherme de désorption et de comparer au résultat par porosimétrie au mercure. Pour cela, il a employé la loi de Kelvin Laplace.



**FIGURE 3.12:** Comparaison entre la distribution de tailles de pores issue de l'isotherme de désorption (en bleu) et celle issue de la porosimétrie au mercure (en noire) [T. Rougelot, 2008]

Cette comparaison entre les distributions montrent l'efficacité du modèle utilisant les isothermes de désorption pour caractériser les pores aux échelles les plus fines. Le modèle utilisé ne prend cependant pas en compte les effets de la géométrie du réseau. En effet, ce modèle applique la loi de Kelvin Laplace directement sur les isothermes de désorption. Pour une humidité relative donnée, il associe toute perte de volume d'eau à une unique taille de pore, il s'agit d'une hypothèse forte.

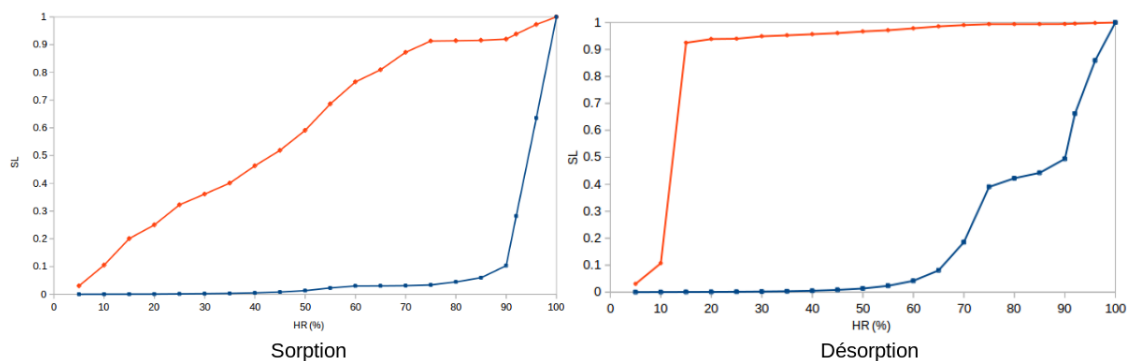
Le modèle numérique présenté dans le second chapitre permet de simuler des isothermes de sorption et de désorption en considérant la géométrie du milieu poreux. Nous obtenons ainsi des couples d'isothermes et de distribution de tailles de pores corrélés à la fois par la même physique que le modèle de [T. Rougelot, 2008] et par l'effet d'une géométrie complexe. Il est possible d'utiliser ses données pour entraîner un réseau de neurones. Le perceptron en question est capable de prédire une distribution de tailles de pores à partir du comportement hydrique vis à vis du séchage et ou de l'imbibition d'un matériau cimentaire.

#### 4.2.1 Fabrication des données

**Nous avons utilisé le modèle du chapitre deux pour produire des données d'entraînement. Ces données sont composées de couples corrélés d'une isotherme de sorption-désorption et de sa distribution de tailles de pores correspondante.** Les distributions de tailles de pores (PSD) sont générées aléatoirement. Ces datas vont permettre d'entraîner un perceptron multi-couches capable de prédire une PSD à partir d'une isotherme de sorption-désorption expérimentale.

Pour entraîner un réseau, il faut énormément de données. Nous avons simulé avec le modèle direct 6.000.000 isothermes. Chacune des isothermes utilisées pour l'apprentissage est une courbe moyenne issue de 10 simulations d'isothermes ayant toutes la même distribution de tailles de pores. En effet, nous avons vu dans le chapitre deux que pour une distribution de tailles de pores fixée, nous obtenions de la variabilité dans les isothermes simulées. Cette variabilité est due à l'arrangement spatial entre les pores qui est renouvelé à chacune des simulations. La distribution des tailles de pores est respectée mais la morphologie du réseau simulé change.

Ci-dessous, courbes 3.13, nous avons des courbes qui représentent l'étendue des données d'entraînement pour les isothermes de sorption et de désorption avec en rouge les valeurs maximales et en bleu minimales.



**FIGURE 3.13:** Courbes max et min des données d'apprentissage pour à droite l'isotherme de désorption et au gauche de sorption



#### 4.2.2 Entraînement du réseau

Pour cette problématique d'apprentissage, **nos données d'entrée sont des points provenant d'une isotherme. Les données de sortie sont des points issus de la courbe de distribution de tailles de pore corrélés à l'isotherme en entrée.** Les abscisses des points sont similaires à tous les couples de données. Nous récupérons uniquement pour l'apprentissage du réseau uniquement les ordonnées. Ainsi, une fois le perceptron entraîné, lors d'une prédiction, nous obtenons les ordonnées des points d'une courbe de distribution de tailles de pores dont nous connaissons les abscisses (tailles de pores). L'ensemble des données est normalisé avant d'entraîner le réseau de neurones artificiels.

Pour ce modèle, nous avons abouti à une architecture composée de trois couches cachées. La première et la troisième possèdent 40 neurones artificiels. La seconde couche cachée a 80 neurones artificiels. La couche d'entrée récupère 20 valeurs d'ordonnées provenant d'une isotherme de désorption et 20 valeurs d'ordonnées d'une isotherme de sorption. Il nous faut donc 40 neurones d'entrée pour récupérer l'information issue des isothermes. Pour la couche de sortie, nous obtenons 21 ordonnées sur les courbes de distribution et également la valeur de la longueur de corrélation correspondant au champ aléatoire qui a permis de construire le réseau poreux. Il est nécessaire d'avoir 22 neurones en sortie. Ce perceptron multi-couches possède un total de 222 neurones artificiels et de 8880 connections entre les neurones. Concernant l'algorithme d'optimisation, nous utilisons encore une fois ADAM [K. Xu, 2016].

Pour l'entraînement, nous avons réalisé 1000 itérations (epoch) sur les datas d'apprentissage. Les poids des neurones sont mis à jour par l'optimiseur tous les 50 couples de datas (batch size). Puisque nous avons 600.000 couples de données et que 10% de ces données sont des données tests, les poids du réseau ont été mis à jour environ 10 millions de fois durant cet entraînement. Ci-dessous courbe 3.14, nous avons la courbe d'apprentissage, qui donne une l'évolution de la fonction de perte. La fonction de perte utilisée est l'erreur moyenne absolue, ce qui correspond à la moyenne de la différence en valeur absolue entre la prédiction et la valeur réelle de sortie.

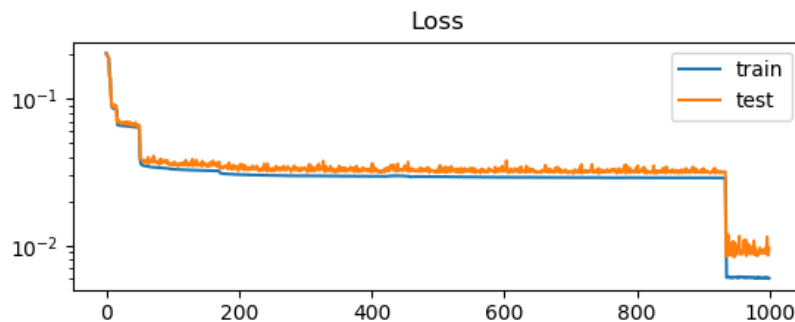


FIGURE 3.14: Courbe d'apprentissage du réseau artificiel

En bleu, il s'agit la fonction de perte pour les données d'apprentissage. En orange, il s'agit la fonction de perte pour les données tests. Ces données ne sont pas utilisées pour l'entraînement, ce qui permet de vérifier que le perceptron apprend du problème dans sa globalité et non pas juste des données d'entraînement. Nous pouvons constater que l'erreur diminue rapidement sur les 50 premières itérations puis stagne. Il s'agit d'un minimum local de la fonction de perte. L'avantage de l'optimiseur ADAM réside dans sa vitesse d'apprentissage évolutive qui change en fonction de l'évolution du gradient de la fonction de perte. De plus, ADAM attribue une vitesse d'apprentissage à chaque poids du réseau ce qui permet d'apprendre de données possédant du bruit. À environ 920 epochs ou itérations, la précision s'améliore nettement. Un arrangement de poids plus avantageux a été trouvé par l'algorithme. Cependant, il est nécessaire de stopper l'apprentissage car nous pouvons voir que la courbe bleue et la courbe orange commencent à diverger. Cette situation correspond à du sur-apprentissage. Le réseau est plus performant sur les datas d'apprentissage que sur les datas de tests.

L'erreur donne l'ordre de grandeur de précision du réseau. La précision pour les valeurs prédites par le réseau inférieures à  $1e-2$  sera mauvaise.

#### 4.2.3 Mesure de l'erreur de réseau

**Nous pouvons tester les performances du réseau de neurones artificiels avec des valeurs qui lui sont inconnues. Nous avons préparé 13.700 couples d'isothermes et de courbes de distribution. Nous avons comparé ensuite les courbes de distribution prédites par le perceptron aux courbes simulées par le modèle direct. L'erreur moyenne sur l'ensemble des courbes de distribution est de 0,9%, la médiane est à 0,3% et l'écart type de 8,7%.**

**Nous avons également entraîné deux réseaux de neurones artificiels supplémentaires donnant une prédiction des courbes de distribution uniquement à partir soit de l'isotherme de sorption soit de l'isotherme de désorption.** Ces deux réseaux possèdent une architecture différente du premier perceptron présenté plus haut. En effet, la couche d'entrée ne récupère l'information que d'une seule des deux isothermes.

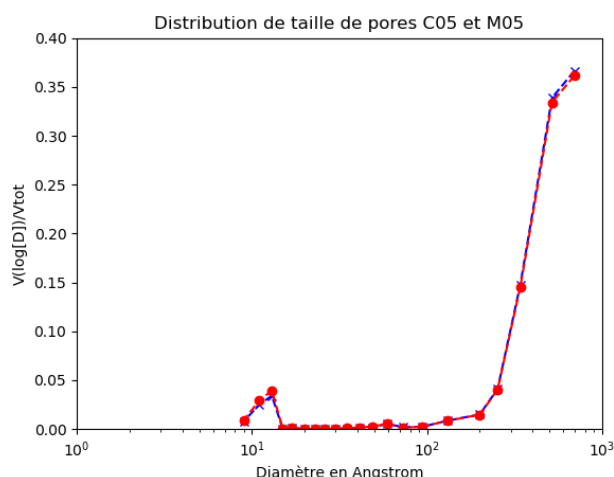
L'erreur moyenne pour le réseau ne prenant en compte que la désorption est de 2,2%. La médiane est à 1,0% et l'écart type de 6,0%. L'erreur moyenne sur l'ensemble des courbes de distribution pour le réseau ne prenant en compte que la sorption est de 2,3%. La médiane est à 0,3% et l'écart type de 9,23%. **Il est intéressant de noter qu'en possédant pour information de base que la sorption, ce perceptron est incapable de prédire précisément la longueur de corrélation.** Nous pensons que cette information (le LC) est perdue lorsque nous appliquons l'hypothèse de la compressibilité de l'air humide occlu dans les pores piégés. Ainsi, si nous calculons l'erreur moyenne sans la longueur de corrélation, celle-ci tombe à 0,58% et seulement 2,0% d'écart type. Cette version du perceptron est par conséquent la plus précise des trois. L'isotherme de sorption contient

possiblement "plus" d'informations sur la morphologie du réseau poreux que l'isotherme de désorption.

Ces 2 réseaux de neurones supplémentaires permettent de s'adapter à la réalité des données expérimentales. Bien souvent, il est difficile de trouver pour un même béton les données des courbes isothermes de sorption et de désorption. De ce fait avec soit l'une ou l'autre, nous sommes capables de faire une prédiction.

### 4.2.4 Prédiction d'une courbe de distribution de tailles de pores

Nous allons comparer les prédictions du perceptron au modèle présenté par [T. Rougelot, 2008] dans sa thèse. Ci-dessous 3.15, nous avons la distribution de tailles de pores prédite par le perceptron pour les matériaux M05 et C05.



**FIGURE 3.15:** Distribution de tailles de pores prédite par apprentissage automatique

Sur cette courbe, nous retrouvons le pic de volume entre 0.8 et 2 nanomètres (pic 3 dans le modèle de T. Rougelot 3.12) et un pic entre 20 et 80 nanomètres (pic 2 dans le modèle de T. Rougelot). Le pic 1 dans la figure 3.12 correspond à la porosité la plus grossière. Cette échelle de pores (pic 2 et 3) se désature lorsque l'humidité relative descend en dessous de 20%. On constate que d'après la prédiction, la majorité du volume poreux est située au pic 2. Le pic 1 de la figure 3.12) n'apparaît pas sur la courbe ci-dessus 3.15 car il ne fait pas parti des tailles pores concernés par les phénomènes de capillarité.

## 4.3 Synthèse

Dans cette section, nous avons inversé le modèle du chapitre deux. Nous avons ainsi un outil prédictif permettant de simuler des courbes de distribution de tailles de pores

(PSD) à partir des isothermes de sorption et ou de désorption. La technique d'apprentissage automatique utilisée ici est le perceptron multi-couches. Cette méthode nous a permis d'inverser un modèle sans équation explicite. Les données d'entrée et de sortie pour l'apprentissage sont des points récupérés sur une courbe respectivement d'isothermes de sorption et ou sorption et sur une PSD. Les précisions obtenues sont très satisfaisantes. La fiabilité des résultats est bien entendu dépendante du modèle du chapitre deux que l'on inverse.

## 5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une méthode numérique encore peu répandue en génie civil, l'apprentissage automatique. Nous avons la volonté de montrer l'applicabilité de ces méthodes pour la résolution de problème d'inversion pour des modèles avec ou sans équations explicites. Nous avons vu que les perceptrons multi-couches donnent de bons résultats. Il y a aussi des limites. La plus contraignante d'entre elles est la suivante : il faut savoir produire de la data en grande quantité.

Pour montrer l'efficacité de ces méthodes, nous avons tout d'abord inversé un modèle multi-échelles d'homogénéisation des caractéristiques élastiques. Il s'agit d'un modèle basé sur des équations explicites ne pouvant être inversées simplement par des méthodes classiques. La précision des prédictions est bonne mais nous avons vu qu'un paramètre ne peut pas être prédit (paramètre peu sensible).

Ensuite, nous avons appliqué la méthode de résolution par apprentissage automatique au modèle du second chapitre. Pour rappel, ce modèle a pour objectif de simuler des isothermes de sorption et de désorption. Ces courbes permettent de caractériser le comportement hydrique du matériau lors de son imbibition et ou séchage. Les isothermes sont simulées à partir d'un réseau poreux numérique dont les paramètres principaux (porosité, arrangement spatial) sont maîtrisés. Cette image 3D est simulée en utilisant les courbes de distributions de tailles de pores (PSD). Nous utilisons ce modèle pour simuler un grand nombre de données et entraîner un réseau de neurones. Il faut souligner qu'ici les données sont des points des courbes isothermes en entrée (inputs) et PSD en sortie (output). Le perceptron en question est capable de prédire une distribution de tailles de pores à partir du comportement hydrique vis à vis du séchage et ou de l'imbibition d'un matériau cimentaire. Nous avons entraîné trois perceptrons différents afin de prédire une PSD à partir soit des deux courbes isothermes de sorption et désorption, soit l'une ou l'autre. Ces trois perceptrons permettent de s'adapter à la réalité des données expérimentales car il est difficile d'obtenir les deux isothermes en même temps pour un béton. La précision est très bonne avec moins d'un pourcent d'erreur en moyenne. Cependant, il faut garder à l'esprit que le résultat est bien entendu dépendant de la fiabilité du modèle du chapitre deux. Ces perceptrons sont un outil numérique supplémentaire pour caractériser la morphologie aux échelles fines des matériaux cimentaires.

# Conclusion

Dans cette thèse, nous avons étudié le séchage des matériaux cimentaires sur plusieurs échelles. Pour cela, nous allons simuler le comportement du matériau vis à vis du séchage et ses effets matériaux de l'échelle matériau la plus grande à la plus fine.

Dans le premier chapitre, nous nous sommes intéressés aux phénomènes de retrait d'un anneau en béton. Nous avons effectué plusieurs calculs élément fini couplant le séchage et le retrait d'anneaux béton. Nous avons d'abord simulé le séchage d'un anneau saturé avec une condition de degré de saturation imposé sur l'intrados. Nous nous sommes placés à une échelle intermédiaire du matériau béton. Nous avons considéré ce dernier comme étant composé d'une pâte de ciment et de granulats. La physique appliquée et notamment les paramètres de perméabilité à cette échelle sont issus d'une homogénéisation des caractéristiques d'échelles plus fines. Cette approche est nécessaire pour étudier l'effet des hétérogénéités sur la fissuration du matériau et ainsi de sa durabilité.

Le calcul de séchage, nous a permis d'analyser l'effet des hétérogénéités peu perméables et de la non linéarité des équations de transfert hydrique sur le séchage de l'anneau. Nous obtenons le degré de saturation au sein du matériau béton au cours du temps. Ce modèle de séchage ne doit pas être utilisé pour un séchage à des degrés de saturation en eau liquide trop faible. Afin d'améliorer le modèle de séchage, nous pourrions envisager l'ajout de la physique de filtration de l'air humide. Ensuite, nous avons utilisé le résultat du séchage non linéaire pour alimenter la simulation du calcul mécanique du retrait de dessiccation. La connaissance de l'évolution du degré de saturation nous permet de déduire un champ de déformation de retrait. En utilisant ce champ, nous sommes capable de simuler le comportement mécanique de la structure béton en forme d'anneau vis-à-vis de son séchage. L'objectif principal des calculs mécaniques est d'analyser la fissuration du matériau béton dans le cas d'un anneau encastré et dans le cas d'un anneau libre de déplacement. Nous avons constaté trois types de fissures ; les fissures radiales, les fissures de décollement sur l'extrados et les fissures autour des granulats.

Dans le second chapitre, nous avons mis en évidence les méthodes numériques et la physique utilisées pour fabriquer un modèle numérique dont le but est de donner des isothermes de sorption désorption à partir d'un réseau poreux. Pour cela, il faut créer un réseau poreux numérique. La physique est ensuite appliquée à l'image de ce réseau, le résultat est une cartographie tridimensionnelle de l'occupation de l'eau liquide dans les pores. La force de ce modèle numérique réside dans sa capacité à traduire une partie l'information morphologique d'un réseau poreux issu d'un matériau cimentaire. Notre modèle permet de créer un réseau et de prédire une isotherme correspondante en moins d'une minute. Il s'agit d'un compromis entre efficacité et réalisme. La physique du modèle est très simple, elle se base sur une loi d'occupation de l'eau liquide, la loi de

Kelvin Laplace. Notre intuition initiale est que la complexité des isothermes de sorption/désorption est issue principalement de la morphologie du réseau poreux.

Bien que les isothermes numériques produites ne correspondent pas aux isothermes expérimentales, ce modèle est un outil de compréhension efficace des phénomènes de séchage et d'imbibition. Ces modélisations ont permis de mettre en évidence l'importance de la morphologie et de l'arrangement spatiale sur les isothermes. En effet, pour une même distribution de pores, en modifiant l'arrangement spatial, les comportements hydriques obtenus sont différents. Le modèle permet de constater visuellement l'hystérésis entre la courbe de sorption et de désorption.

Le troisième chapitre a pour objectif de proposer un outils prédictif qui caractérise la morphologie du réseau poreux à partir du comportement hydrique du matériau. Pour cela, nous avons utilisé un algorithme dont l'emploi est encore marginal en génie civil, l'apprentissage automatique. Ce chapitre a aussi pour vocation de montrer l'applicabilité de ces méthodes pour notre domaine. Pour introduire l'usage de l'apprentissage automatique, nous avons tout d'abord inversé un modèle multi-échelles d'homogénéisation des caractéristiques élastiques. Il s'agit d'un modèle basé sur des équations explicites ne pouvant être inversées simplement par des méthodes classiques.

Ensuite, nous avons inversé le modèle du chapitre deux. Dans ce modèle, les isothermes sont simulées à partir d'un réseau poreux numérique dont les paramètres principaux (porosité, arrangement spatial) sont maîtrisés. Nous utilisons ce modèle pour simuler un grand nombre de données (une isotherme et sa porosimétrie) et entraîner un perceptron multi-couches. Le perceptron en question est capable de prédire une distribution de tailles de pores (P.S.D) à partir du comportement hydrique vis-à-vis du séchage et ou de l'imbibition d'un matériau cimentaire. Nous avons entraîné plusieurs perceptrons afin de prédire la porosimétrie à partir soit des deux courbes isothermes de sorption et désorption, soit l'une ou l'autre. La précision est très bonne avec moins d'un pourcent d'erreur en moyenne. Cependant, il faut garder à l'esprit que le résultat est bien entendu dépendant de la fiabilité du modèle du chapitre deux.

Pour les perspectives à court terme concernant le premier chapitre, nous souhaitons faire un calcul éléments finis avec un maillage plus fin. Cette nouvelle simulation permet d'augmenter la fraction volumique des granulats. Ce calcul peut également fournir des réponses concernant le problème du décollement et de la fissuration radiale que l'on observe uniquement à certain endroit de l'anneau.

Pour le second chapitre, les pistes d'amélioration du modèle sont multiples. Il faut faciliter la modification des données d'entrée du modèle (la courbe de distribution de pores). Nous souhaitons prendre en compte l'adsorption de l'eau dans le modèle. Il faut aussi réfléchir à l'optimisation de l'algorithme afin de modéliser des réseaux poreux avec plus de pores.

Pour les perspectives à moyen terme, il faut essayer d'implémenter, pour le calcul éléments finis, un couplage complet entre le séchage et la mécanique. Pour l'instant, l'état hydrique du matériau détermine le retrait imposé sur le matériau. Un couplage complet permet, à chaque itération, une rétroaction de l'état mécanique du matériau (notamment la fissuration) sur l'état hydrique.

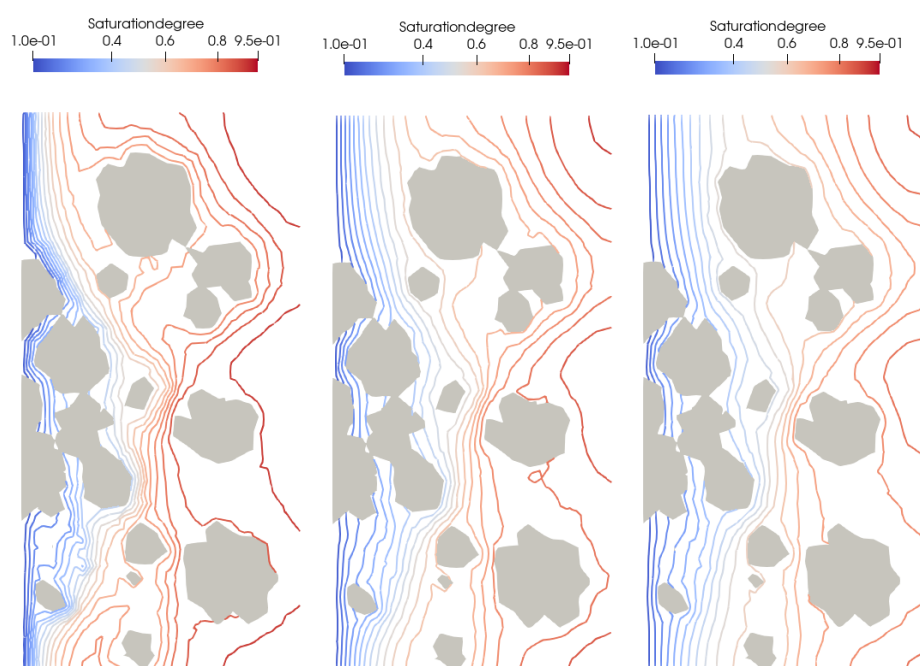
Enfin, à plus long terme, nous comptons continuer de travailler sur de nouveaux sujets en utilisant l'apprentissage supervisé appliqué au génie civil.



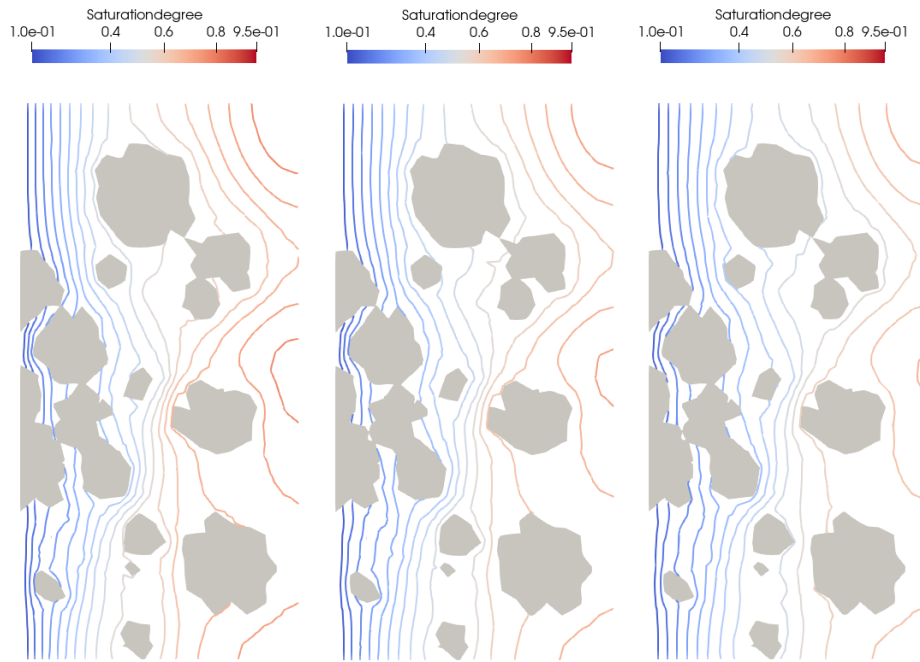
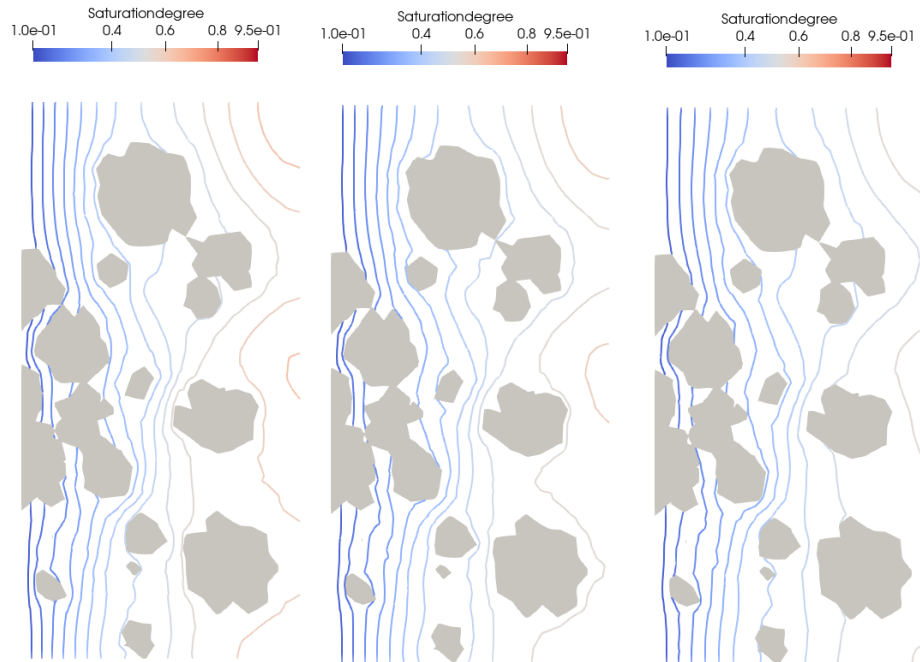


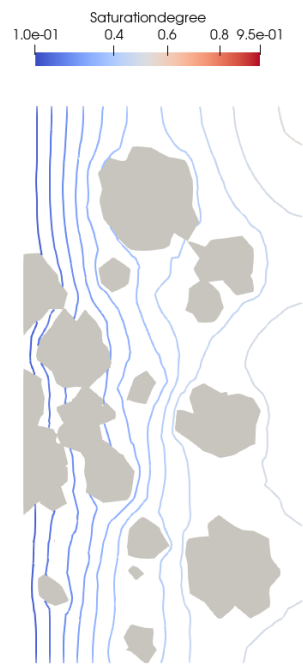
## Annexe A

### Coupe de l'anneau béton : Isoligne de degré de saturation



**FIGURE A.1:**  $t = 1.9$  ans,  $t = 3.8$  ans,  $t = 5.7$  ans

**FIGURE A.2:**  $t = 7.6$  ans,  $t = 9.5$  ans,  $t = 11.4$  ans**FIGURE A.3:**  $t = 13.3$  ans,  $t = 15.2$  ans,  $t = 17.1$  ans



**FIGURE A.4:**  $t = 19$  ans



## Annexe B

# Code de l'apprentissage Mori Tanaka

```
# Importation des librairies

from numpy import array
from matplotlib import pyplot
from keras.models import Sequential
from keras import layers
from keras.layers import Dense
from keras.optimizers import Adam
from keras import initializers
import numpy as np
import pandas as pd
from keras.models import model_from_yaml

# Importation des données d'apprentissage

X = pd.read_csv('inputs.csv', sep=',', header=None)
Y = pd.read_csv('outputs.csv', sep=',', header=None)
print(np.max(Y), np.max(X))

# Construction de l'architecture du réseau de neurones

model = Sequential()
model.add(Dense(21, input_dim=7, activation='relu'))
model.add(Dense(21, activation='relu'))
model.add(Dense(7, activation='relu'))
model.add(Dense(2, activation='relu'))

# Compilation du modèle

opt = Adam(0.005, beta_1=0.9, beta_2=0.999, amsgrad=False)
```

```
model.compile(loss='mse', optimizer=opt)

# Nombre d'itérations de l'algorithme d'apprentissage

history = model.fit(X, Y, validation_split=0.1, epochs=200, //
batch_size=100)

# Sauvegarde du réseau de neurones entraîné

serialize model to YAML
model_yaml = model.to_yaml()
with open("model.yaml", "w") as yaml_file:
    yaml_file.write(model_yaml)
serialize weights to HDF5
model.save_weights("model.h5")
```

# Bibliographie

- [O. Amiri (2005)] O. Amiri, A. Aït-Mokhtar, M. Sarhani (2005) Tri-dimensional modelling of cementitious materials permeability from polymodal pore size distribution obtained by mercury intrusion porosimetry tests. *Advances in Cement Research*, 17 (1), 39-45
- [V. Baroghel-Bouny, 2007] V. Baroghel-Bouny (2007). Water vapour sorption experiments on hardened cementitious materials : Part i : Essential tool for analysis of hygral behaviour and its relation to pore structure. *Cement and Concrete Research*, 37(3) :414–437.
- [V. Baroghel-Bouny, 1999] V. Baroghel-Bouny, M. Mainguy, O. Coussy (1999). Characterization and identification of equilibrium and transfer moisture properties for ordinary and high-performance cementitious materials. *Cement and Concrete Research*, 29 :1225–1238.
- [V. Baroghel-Bouny (1994)] V. Baroghel-Bouny (1994) Caractérisation des pâtes de ciment et des bétons : méthodes, analyse, interprétations. LCPC, Paris
- [V. Baroghel Bouny (1997)] V. Baroghel Bouny, B. C. L. Perrin (1997) Détermination expérimentale des propriétés hydriques de pâtes de ciment durcies. Mise en évidence des phénomènes d'hystérésis. *Materials and Structures* 30 (200) : 340-348.
- [J. Baron(1996)] J. Baron, J-P. Ollivier et. al (1996) Les Bétons : Bases et données pour leur formulation, Association technique de l'industrie des liants hydrauliques. Éditions Eyrolles, Paris
- [N. Benkemoun (2010)] N. Benkemoun (2010) Contribution aux approches multi-échelles séquencées pour la modélisation numérique des matériaux à matrice cimentaire PhD thesis, Ecole Normale Supérieure de Cachan
- [J. Bensted (1983)] J. Bensted (1983) Hydration of Portland Cement. Pergamon Press, S. N. Ghosh Editor, New York
- [G. Bernier (2004)] G. Bernier (2004) Formulation des bétons. *Techniques de l'ingénieur*, base : Structure et gros oeuvre, dossier C2210
- [L. Bertolini (2004)] L. Bertolini, B. Elsener, P. Pedferri, R. Polder (2004) Corrosion of Steel in Concrete : Prevention, Diagnosis, Repair, WILEY-VCH, ISBN : 3527308008, 2004, 3-19
- [M. Bogdan (2009)] M. Bogdan (2015) Modélisation morphologique multi-échelles de matériaux cimentaires
- [D. Brancherie (2009)] D. Brancherie, A. Ibrahimbegovic (2009) Novel isotropic continuum-discrete damage model capable of representing localized failure of massive structures. *Engineering Computation*, 26

- [S. Brunauer, 1938] S. Brunauer, P.H. Emmett, E. T. (1938). Adsorption of gases in multimolecular layers.
- [S. Brunauer (1940)] S. Brunauer, L. S. Deming, W. S. Deming, E. Teller (1940) On a theory of the van der Waals adsorption of gases. *Journal Of The American Chemical Society* 62 (7) : 1723-1732.
- [R. Bucher, 2017] R. Bucher, T. Vidal, A. S. J. V. (2017). Effet du sechage sur les propriétés mecaniques des matériaux cimentaires. 23eme Congres Français de Mecanique.
- [N. Burlion (2006)] N. Burlion, D. Bernard, D. Chen (2006) X-ray microtomography : Application to microstructure analysis of a cementitious material during leaching process. *Cement and Concrete Research*, 36 (2), 346-357.
- [Y.J. Cao, 2021] Y.J. Cao, W.Q. Shen (2021). A multi-scale model of plasticity and damage for rock-like materials with pores and inclusions. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 138.
- [J-B. Colliat (2010)] J-B. Colliat (2010) Modélisation numérique des matériaux hétérogènes : Applications aux matériaux à matrice cimentaire. HDR, Ecole Normale Supérieure de Cachan
- [A. Cornuéjols, 2010] A. Cornuéjols, L.Miclet, V. (2010). Deep learning, concepts et algorithmes.
- [O. Coussy, 2001] O. Coussy, V. Baroghel-Bouny (2001). Evaluation de perméabilité à l'eau liquide des bétons à partir de leur perte de masse durant le séchage. *Revue Française de Génie Civil*, pages 269–284.
- [J-F. Daïan, 2010] J-F. Daïan(2010). Equilibre et transferts en milieux poreux.
- [F. de Larrard (2002)] F. de Larrard (2002) Construire en béton. Presses de l'ENPC
- [F. de Larrard (2000)] F. de Larrard (2000) Structure granulaire et formulation des bétons. OA34 LCPC
- [M.M.Y Delmi (2004)] M.M.Y Delmi (2004) Etude de l'hydratation et du couplage carbonatation échanges hydriques dans les mortiers et bétons Phd Thesis, Université de La Rochelle
- [C. de Sa, 2007] C. de Sa (2007). Etude hydro-mécanique et thermo-mécanique du béton : influence des gradients et des incompatibilités de déformation. PhD thesis, Ecole Normale Supérieure de Cachan.
- [S. Diamond (1986)] S. Diamond (1986) The microstructures of cement paste in concrete 8th International Congress on the Chemistry of Cement, Rio de Janeiro, Brasil 2.2 : Microstructure of hardened cement paste and its effect on behaviour, Finep, Rio de Janeiro, 1986, vol. 1,pp 122-147
- [G. Dreux (1986)] G. Dreux (1986) Nouveau guide du béton Eyrolles, 5ème Edition, Paris
- [E. Drouet(2010)] E. Drouet(2010) Impact de la température sur la carbonatation des matériaux cimentaires : prise en compte des transferts hydriques. Phd Thesis, Cachan, Ecole normale supérieure



- [R. M. Espinosa (2006)] R. M. Espinosa, L. Franke (2006) Inkbottle Pore-Method : Prediction of hygroscopic water content in hardened cement paste at variable climatic conditions. *Cement and Concrete Research* 36 (10) : 1954-1968
- [M.T. van Genuchten, 1980] M.T. van Genuchten, (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America*, 44 :892–898.
- [A. El Amine Hamami (2009)] A. El Amine Hamami (2009) Vers une prédiction de la perméabilité au gaz à partir de la composition des matériaux cimentaires. PhD Thesis, Université de la Rochelle
- [M. Hautefeuille (2009)] M. Hautefeuille, S. Melnyk, J.-B. Colliat, A. Ibrahimbegovic (2009) Failure model of heterogeneous structures using structured meshes and accounting for probability aspects. *Engineering Computation*, 26
- [M. Hosseini, 2015] M. Hosseini(2015). Numerical simulation of hydro-mechanical behaviour of nanoporous materials : Application to cement paste. PhD thesis, Université de Lille 1.
- [B. Johannesson (2001)] B. Johannesson, P. Utgenannt (2001) Microstructural changes caused by carbonation of cement mortar. *Cement and Concrete Research*, 31 (6), 925-931
- [A. Khelidj, A. Loukili, G. Bastian, 1998] A. Khelidj, A. Loukili, G. Bastian, (1998). Etude expérimentale du couplage hydro-chimique dans les bétons en cours de maturation : incidence sur les retraits RILEM, *Materials and Structures*, 31, 588-594
- [K. Khayat (1996)] K. Khayat (1996) Effect of silica fume on fresh and mechanical properties of concrete. *CANMET-ACI Course on Fly Ash, Slag, Silica Fume, Other Pozzolanic Materials and Superplasticizers in Concrete*, Ottawa, 34p
- [L. Lacarriere, 2016] L. Lacarriere, S. Baron, F. Barré, D. Chauvel, A. Darquennes et. al (2016). Restrained shrinkage of massive reinforced concrete structures : results of the project *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, Taylor and Francis 20 (7), pp.785-808
- [Y. LeCun, 1985] Y. LeCun (1985). Une procédure d'apprentissage pour réseau à seuil assymétrique. In *Proceedings of Cognitiva* 85.
- [S. Lu, 2006] S. Lu, Landis (2006). X-ray microtomographic studies of pore structure and permeability in portland cement concrete. *Mater Struct*, 39 :611–620.
- [M. Mainguy (1999)] M. Mainguy (1999) Modèles de diffusion non linéaire en milieux poreux. Applications à la dissolution et au séchage des matériaux cimentaires.
- [M. Mainguy, 2001] M. Mainguy, V Baroghel-Bouny (2001). Role of air pressure in drying of weakly permeable materials. *ASCE Journal of Engineering Mechanics*, 127(6) :582–592.
- [R. Marks, 1999] R. Marks (1999). *Neural Smithing : Supervised Learning in Feedforward Artificial Neural Networks*.

- [S. Melnyk (2006)] S. Melnyk (2006) Modélisation du comportement inélastique non-linéaire des matériaux hétérogènes : Apport des maillages structurés PhD thesis, Ecole Normale Supérieure de Cachan
- [A. Menou (2004)] A. Menou (2004) Étude du comportement thermomécanique des bétons à haute température : Approche multiéchelles de l'endommagement thermique. PhD thesis, Université de Pau et des Pays de l'Adour
- [P. McCulloch, 1943] P. McCulloch (1943). A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *The bulletin of mathematical Biophysics*, 5(4) :115–133.
- [S.A. Mokdad, 2012] S.A. Mokdad. (2012). Contribution à la détermination de la courbe de pression de vapeur saturante de l'eau pure. PhD thesis, Conservatoire National des Arts et Métiers.
- [A. M. Neville (1995)] A. M. Neville (1995) *Properties of Concrete.*, 4th Edition. 4th Edition, Wesley Longman Limited, Harlow
- [J-P. Ollivier (2008)] J-P. Ollivier, J-M. Torrenti (2008) La structure poreuse des bétons et les propriétés de transfert. *La durabilité des bétons*, chapitre 3
- [A. Pinkus, 1999] A. Pinkus (1999). Approximation theory of the mlp model in neural networks. *Acta Numerica*, 8 :143–195.
- [T.C. Powers (1997)] T.C. Powers, T. L. Brownyard (1997) Studies of the physical properties of hardened Portland cement paste. *Proa*, vol.43, parti to 9, 1946-47-48
- [H. Ranaivomanana, 2010] H. Ranaivomanana (2010). Transport in unsaturated porous media : application to the crack healing process induced by carbonation in cement-based materials. PhD thesis, Université de Toulouse.
- [A. M. Rosenberg (1989)] A. M. Rosenberg, J. M. Gaidis (1989) A new mineral admixture of high-strength concrete. *Concrete International*, 11(4), 1989, 31-36
- [E. Roubin, 2013] E. Roubin (2013). Modélisation EF et morphologique de milieux hétérogènes à l'échelle mésoscopique : applications aux matériaux à matrice cimentaire. PhD thesis, Ecole Normale Supérieure de Cachan.
- [T. Rougelot, 2008] T. Rougelot (2008). Etude expérimentale multi-échelles des couplages hydriques, mécaniques et chimiques dans les matériaux cimentaires. PhD thesis, Lille 1.
- [Y. Sébaïbi (2006)] Y. Sébaïbi, R.M. Dheilly, B. Beaudoin, M. Quéneubec (2006) The effect of various slaked limes on the microstructure of lime–cement–sand mortar *Cement and Concrete Research*, 36(5), 971-978
- [J. C. Simo (1993)] J. C. Simo, J. Oliver, and F. Armero (1993) Failure model of heterogeneous structures using structured meshes and accounting for probability aspects. *Computational Mechanics*, 12
- [N. Srivastava, 2014] N. Srivastava, G. Hinton (2014). Dropout : A simple way to prevent neural networks from overfitting. *Journal of Machine Learning Research*, 15 :1929–1958.

- [R. Sierra (1974)] R. Sierra (1974) Contribution à l'étude de l'hydratation des silicates calciques hydrauliques Paris : L.C.P.C.
- [M. Thiery (2007)] M. Thiery, V. Baroghel Bouny, N. Bourneton, G. Villain, C. Stéfabi (2007) Modélisation du séchage des bétons - Analyse des différents modes de transferts hydrique. *Revue Européenne de Génie Civil* 11 (5) : 541-577
- [J-M. Torrenti, 1999] J-M. Torrenti, O. Didry, J-P. Ollivier, F. Plas (1999). La dégradation des bétons : couplage fissuration-dégradation chimique
- [J-M. Torrenti, 2010] J-M. Torrenti, G. Pijaudier-Cabot, J-M. Reynouard (2010). *Mechanical Behavior of Concrete*
- [P. Turcry (2004)] P. Turcry (2004) Retrait et fissuration des bétons autoplaçants. Influence de la formulation. PhD thesis, École Centrale de Nantes
- [A. Vallade (2016)] A. Vallade (2016) Modélisation multi-échelles des shales. Influence de la microstructure sur les propriétés macroscopiques et le processus de fracturation. PhD thesis, Université des Sciences et Technologies de Lille 1
- [C. Varloteaux, 2013] C. Varloteaux, S. Békri, P. Adler. (2013). Pore network modelling to determine the transport properties in presence of a reactive fluid : From pore to reservoir scale. *Advances in Water Resources*, 53 :87-100.
- [G. N. Wells (2000)] G. N. Wells, L. J. Sluys (2000) Application of embedded discontinuities for softening solids. *Engineering Fracture Mechanics*, 65
- [D.N. Winslow (1974)] D.N. Winslow, S. Diamond (1974) Specific surface of hardened Portland cement paste as determined by Small-Angle X-ray Scattering. *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 57, n 5, pp 193-197.
- [Q. Wu, 2014] Q. Wu (2014). Isothermes de désorption de matériaux cimentaires : étude d'un protocole accéléré et estimation du VER. PhD thesis, Lille 1.
- [K. Xu, J. Daian, D. Quenard (1997)] K. Xu, J. Daian, D. Quenard (1997) Multiscale structures to describe porous media part I : theoretical background and invasion by fluids. *Transport in porous media*, 26, 1, p. 51-73
- [K. Xu, 2016] K. Xu, J. Ba (2016). Show, attend and tell : Neural image caption generation with visual attention.