# Modélisation multiphasique 3D de l'Endommagement et de la Fissuration du Béton : application à la Réaction Alcali-Silice

## **Isabelle Comby**

## CEMEF – Ecole des Mines de Paris – 1 rue Claude Daunesse – BP 207 – 06904 Sophia-Antipolis Cedex & Ecole des Mines de Douai – 941 rue Charles Bourseul – 59508 Douai Cedex

RESUME. La modélisation de l'endommagement et de la fissuration d'une structure en béton tridimensionnelle victime de la Réaction Alcali-Silice (RAS) est de première importance en génie civil. Le béton est un matériau composite qui est constitué à l'échelle mésoscopique de trois phases essentielles : le squelette granulaire, la matrice cimentaire et une auréole de transition entre les granulats et la matrice cimentaire. Ce papier présente le modèle que nous développons pour comprendre le comportement mécanique du béton soumis à cette réaction chimique. Nous considérons le béton comme un matériau biphasé en présence de granulats et mortier. Le modèle non local de Mazars a été implémenté et validé dans notre code Eléments Finis Femcam. Une application à la RAS est présentée. Une fois que l'endommagement atteint une valeur critique, des macro fissures sont initiées dans l'éprouvette. C'est la méthode de fissuration discrète qui a été choisie car elle permet de rendre compte physiquement des propagations de fissure. Nous présentons l'algorithme et un essai de flexion trois points qui valide la méthode.

MOTS-CLÉS : matériau hétérogène, modèle non local, réaction alcali-silice, fissuration discrète

ABSTRACT. Modeling damage and cracks in a 3D concrete structure submitted to Alkali-Silica Reaction (ASR) is of prime importance in civil engineering. Concrete is considered as a composite material. And it has been made, at a mesoscopic scale, of three phases: granular skeleton, cement paste and an interfacial zone between aggregates and paste. This paper presents the model we have developed to understand the mechanical behavior of concrete submitted to this chemical reaction. We consider in this model concrete as a heterogeneous material with two main phases: the mortar and aggregates. The non local Mazars model has been successfully implemented in our finite element code Femcam to take into account the mechanical behavior of concrete. An application to a numerical concrete submitted to ASR is presented. Once damage has reached a critical value, macro cracks are initiated in the sample. The Discrete Crack Approach has been chosen for its good physical representation of crack propagation. An algorithm is presented and a validation on a three point bending test is performed.

KEYWORDS: heterogeneous material, non local model, alkali-silica reaction, discrete crack approach.

## **1. INTRODUCTION**

Le béton est un matériau qui a la particularité d'être hétérogène à plusieurs échelles. Ainsi il est constitué, à l'échelle mésoscopique, de gravillons et de grains de sable noyés dans une pâte de ciment. A l'échelle microscopique, cette pâte de ciment est le résultat d'un durcissement provoqué par la réaction d'hydratation du ciment et de phénomènes de nucléation/croissance d'hydrates. Ces différentes phases sont évolutives lorsque le matériau est au contact de l'environnement. Dès lors, dans le cadre des études de durabilité, la prise en compte de la nature composite du matériau permet d'établir avec précision l'influence de chacune des phases du béton. De plus la connaissance exacte

des chemins de fissuration est une donnée importante puisqu'il s'agit de chemins privilégiés de transport d'eau et de matière pouvant accélérer encore les dégradations chimiques. Or sous chargement, la répartition de l'endommagement et les chemins de fissuration sont spécifiques à la répartition du squelette granulaire et par conséquent à la formulation du béton choisie. Dans ce contexte, nous proposons un outil numérique pour l'analyse 3D des matériaux hétérogènes : c'est le logiciel aux éléments finis 3D Femcam (Finite Element Method for Concrete Analysis Model), basé sur le code éléments finis Forge3® développé au Cemef..

Le modèle tient donc compte de deux phases essentielles : les granulats et le mortier de ciment. Nous expliquerons dans un premier temps les propriétés mécaniques appliquées à ces deux phases.

Le modèle est ensuite utilisé dans le cadre de travaux sur la réaction alcali-silice (RAS). Cette réaction chimique a largement été étudiée dans la littérature. Le mécanisme retenu est décrit suivant le modèle développé à l'Ecole des Mines de Douai (Garcia-Diaz et al., 2006): l'expansion du béton est la conséquence du gonflement du squelette granulaire consécutif à la formation d'un gel dans les granulats siliceux. Nous présentons un modèle 3D d'évolution de l'endommagement dans une éprouvette hétérogène soumise à la réaction chimique. L'intérêt de cet outil numérique, présenté dans cet article, est de modéliser les conséquences de cette réaction chimique et de comprendre comment l'endommagement progresse.

Une fois que l'endommagement atteint une valeur critique, les macro fissures sont initiées dans l'éprouvette. Il est alors nécessaire d'utiliser une méthode de propagation de fissure précise pour ces structures hétérogènes. Notre choix s'est porté sur la **méthode de fissuration discrète**. Nous présenterons cette méthode et l'algorithme mis en place dans le logiciel.

## 2. MODELISATION DU BETON

Deux phases essentielles sont prises en compte pour simuler le comportement mécanique du béton : les *granulats et* le *mortier de ciment*. Le contact entre la matrice cimentaire et le granulat est supposé collant dans un premier temps. Les granulats sont considérés comme purement élastiques. Il y a plusieurs possibilités pour rendre compte du comportement mécanique du mortier. Nous avons choisi, dans le cadre de ce projet, le **modèle élastique-endommageable de Mazars** (Mazars, 1984). Dans cette partie, nous présenterons successivement l'algorithme de la mesostructure hétérogène et l'implémentation du modèle de Mazars. Par ailleurs, la modélisation des matériaux quasi-fragiles est souvent confrontée à des problèmes de localisation numérique. Le modèle est ainsi utilisé dans sa version enrichie, non locale, permettant de limiter ces problèmes.

### 2.1. GENERATION DE LA MESOSTRUCTURE HETEROGENE

L'algorithme de génération aléatoire des granulats tient compte d'une distribution granulométrique donnée et de caractéristiques physiques précises (Epaisseur Maximale de Pâte, c'est-à-dire distance moyenne entre les plus gros grains, et effet de bords).

La puissance de la machine à l'heure actuelle empêche la génération des grains de sable, trop nombreux et trop fins, présents dans l'éprouvette. Pour contourner ce problème, le diamètre minimal  $d_{min}$  du gravillon est considéré. En dessous de  $d_{min}$ , les granulats (=grains de sable) appartiennent à la matrice cimentaire. Au dessus, les granulats sont générés. La Figure 1 montre le squelette granulaire

ainsi obtenu. 935 granulats sont générés dans la pièce avec des diamètres variant entre 7.15 et 22.5 mm. Nous nous retrouvons ainsi avec un modèle multi-phasique : granulats et mortier.



Figure 1. Squelette granulaire de l'éprouvette  $7 \times 7 \times 28$  cm soumise à la RAS; 165669 noeuds; 902826 éléments.

#### 2.2. MODELISATION DU MORTIER

L'endommagement a plusieurs conséquences sur le comportement mécanique du matériau. Mazars retient la modification du comportement élastique qui résulte d'un changement des caractéristiques mécaniques. Dans ce modèle 3D, l'endommagement D est isotrope et affecte la rigidité du matériau. Une déformation équivalente  $\tilde{\varepsilon}$  est introduite et définie comme suit :

$$\widetilde{\varepsilon} = \sqrt{\sum_{i} \langle \varepsilon_i \rangle^+}$$
[Eq.1]

avec :  $\langle \boldsymbol{\varepsilon}_i \rangle^+ = \left(\frac{\boldsymbol{\varepsilon}_i + |\boldsymbol{\varepsilon}_i|}{2}\right)$  et  $\boldsymbol{\varepsilon}_i$  les déformations principales. Cette déformation équivalente contrôle

l'évolution de l'endommagement selon les conditions suivantes :

$$f(\varepsilon, D) = \widetilde{\varepsilon} - K$$
[Eq.2]

*K* est la valeur maximale atteinte par  $\tilde{\varepsilon}$  durant l'histoire du matériau. L'endommagement *D* apparaît lorsque la déformation équivalente  $\tilde{\varepsilon}$  atteint le seuil *K* initialisé à  $\varepsilon_{D0}$ . L'endommagement défini par Mazars est séparé en deux parties :

$$D = \alpha_T^{\beta} D_T + (1 - \alpha_T)^{\beta} D_C$$
 [Eq.3]

Le paramètre  $\beta$  est souvent considéré comme constant ( $\beta = 1.05$ ) et représente les effets de cisaillement.  $D_t$  and  $D_c$  sont les parties de l'endommagement en compression et en traction.

$$D_{T,C} = 1 - \frac{\varepsilon_{D0} (1 - A_{T,C})}{\widetilde{\varepsilon}} - \frac{A_{T,C}}{\exp[B_{T,C} (\widetilde{\varepsilon} - \varepsilon_{D0})]}$$
[Eq.4]

 $A_{T,C}$  et  $B_{T,C}$  sont les paramètres matériaux. Le poids relatif  $\alpha_T$  est défini comme suit :

$$\alpha_T = \sum_i \frac{\varepsilon_{ii} \varepsilon_i}{\tilde{\varepsilon}^2}$$
[Eq.5]

#### 2.3. DEPENDANCE AU MAILLAGE

La localisation numérique des déformations et de l'endommagement est un phénomène couramment observé dans la modélisation des matériaux quasi-fragiles comme les bétons. Ce problème dépend des tailles de maille adoptées et conduit dans le cas de maillages très fins à des dissipations d'énergie nulles, ce qui est physiquement inacceptable. Plusieurs modèles ont été présentés pour rendre le problème indépendant de cette taille de maille. Ces techniques introduisent une « longueur caractéristique ». Celle-ci permet de définir une région de taille minimale pour éviter d'éventuels problèmes numériques de localisation. La « longueur caractéristique »  $l_c$  (de trois à cinq fois le diamètre du plus gros granulat présent dans le béton (Pijaudier-Cabot et al., 1997)) peut être introduite suivant différentes formulations : théories des modèles non locaux, **formulation basée sur le gradient** (Mazars et al., 1996).

Les modèles non locaux à formulation intégrale considère la déformation équivalente comme une moyenne pondérée des déformations équivalentes dans un volume représentatif autour de ce point. Lorsqu'un tel modèle est associé à une méthode de propagation de fissures, les résultats sont discutables. La région (de longueur définie par la « longueur caractéristique ») pour un nœud proche d'une fissure, peut inclure des nœuds situés de l'autre côté de la fissure, ce qui n'est pas réaliste. Il est alors possible de réécrire la formulation intégrale sous la forme d'un développement de Taylor. Une formulation implicite est introduite associée à une condition aux limites de Neumann :

$$\begin{cases} \overline{\varepsilon} - c\nabla^2 \overline{\varepsilon} = \widetilde{\varepsilon} \\ \overline{\nabla} \overline{\varepsilon} . \vec{n} = 0 \end{cases}$$
[Eq.6]

 $\overline{\varepsilon}$  est la déformation équivalente qui contrôle l'évolution de l'endommagement ; le paramètre c est fonction de  $l_c^2$ . Bien que la formulation implicite soit une approximation du modèle non local à formulation intégrale, elle est mieux adaptée aux simulations 3D multi matériaux. En effet nous n'avons pas à évaluer  $\widetilde{\varepsilon}$  comme une fonction des déformations équivalentes voisines. Le temps de calcul est donc très largement diminué. D'autre part la déformation équivalente, évaluée avec la formulation implicite, est moins dépendante du comportement de ces éléments voisins. Elle est donc mieux adaptée aux cas hétérogènes.

Ces deux approches ont été implémentées et validées dans Femcam (Comby et al., 2006).

## 2.4. IDENTIFICATION DES PARAMETRES

Pour identifier le comportement du mortier au sein du béton, des tests de compression simple (éprouvettes cylindriques 16×32 cm) et de flexion 3 points (éprouvettes parallélépipédiques 7×7×28 cm) ont été réalisés sur éprouvette en béton au cours d'une campagne expérimentale. Les paramètres du modèle de Mazars ont ensuite été calibrés grâce au module d'analyse inverse « RheOBeton » développé au Cemef. Le tableau 1 représente les paramètres matériaux utilisés pour les simulations qui suivent.

Paramètres matériaux	$E_{CP}^{C}$ (GPA)	υ	$E_A^C$ (GPA)	β	$c \text{ (mm}^2)$
	18	0.2	70	1.05	15
	$A_T$	$B_T$	${\cal E}_{D0}$	$\widetilde{m{arepsilon}}_{crit}^{T}$	
	1.18	50000	9.1.10 <sup>-5</sup>	$1.9.10^{-4}$	

#### Tableau 1. Paramètres matériau.

Les paramètres  $E_{CP}^{C}$  et  $E_{A}^{C}$  désignent respectivement les caractéristiques élastiques du mortier homogénéisé et des granulats.  $\tilde{\varepsilon}_{crit}^{T}$  est le seuil au-delà duquel les macrofissures se développent dans la pièce.

### 3. APPLICATION A LA MODELISATION DE LA DEGRADATION DU BETON

Le modèle de réaction chimique est basé sur un mécanisme de gonflement du squelette granulaire.

Une expansion incrémentale des granulats réactifs a ainsi été intégrée dans le code Femcam suivant le modèle de gonflement expliqué dans la suite du document. 622 granulats sont générés dans l'éprouvette avec des diamètres variant entre 7.15 et 22.5 mm. En conformité avec l'expérience seule la moitié des granulats sont réactifs.

#### 3.1. LE MODELE DE GONFLEMENT

Nous utilisons un modèle de dilatation des granulats basée sur la courbe d'expansion libre formulée par Larive (1998) :

$$\epsilon(t) = \beta \frac{1 - e^{-t/\tau_{c}}}{1 + e^{-(t - \tau_{L})/\tau_{c}}}$$
[Eq.7]

où  $\tau_L$  et  $\tau_c$  sont les temps caractéristiques associés au comportement expansif des gravillons.  $\beta$  désigne la déformation atteinte à la fin de la réaction chimique. Les paramètres du modèle de gonflement sont identifiés à partir de résultats expérimentaux effectués à haute température pour accélérer la réaction (Riche, 2003). Les paramètres identifiés sont les suivants :

$$\tau_{\rm L} = 2$$
 jours,  
 $\tau_{\rm C} = 0.35$  jour,  
 $\beta = 0.015$  [Eq.8]

#### 3.2. MODELISATION NUMERIQUE DE LA RAS

Nous réalisons un essai de gonflement sur les granulats « réactifs » dans une éprouvette en béton élastique endommageable et dans une éprouvette en béton purement élastique. L'endommagement est d'abord nul puis évolue très rapidement vers une valeur proche de 1.



Figure 2. a) Variation de volume de l'éprouvette en fonction du temps ;b) Carte d'endommagement dans l'éprouvette en béton avec un comportement mécanique élastique endommageable à t = 40 heures.

La *Figure 2* montre l'évolution de la variation de volume de l'éprouvette en fonction du temps. Elle valide ainsi l'implémentation du modèle numérique pour traduire l'évolution du volume du squelette

granulaire. Les figures d'endommagement en surface d'éprouvette, sous forme de faïençage, sont typiques de la pathologie. Les valeurs de gonflement de l'éprouvette sont aussi proches des résultats expérimentaux; on retrouve en particulier la linéarité entre l'expansion du squelette et celle de l'éprouvette. La *Figure 2* montre également que l'éprouvette gonfle différemment selon le comportement mécanique de la matrice cimentaire. Ce résultat traduit l'influence de l'endommagement sur la baisse de rigidité de la pièce et donc une plus forte potentialité à se déformer et à gonfler. Jusqu'à présent les macrofissures ne sont pas prises en compte. La méthode « Kill element » déjà présente dans Femcam est peu satisfaisante. Elle consiste à supprimer des éléments lorsque l'endommagement atteint une valeur critique. Elle supprime donc des volumes induisant donc une erreur dans l'estimation du volume total de l'éprouvette et donc une sous estimation de  $\beta$ . D'autre part la méthode est dépendante du maillage. Ces inconvénients nous ont amenés à développer une méthode de fissuration 3D plus précise. Nous exposons dans la partie suivante cette méthode.

## 4. MODELISATION NUMERIQUE DE LA FISSURATION 3D

Plusieurs méthodes sont proposées dans la littérature pour modéliser la rupture 3D du matériau : par exemple la méthode X-FEM qui décrit la fissure comme un enrichissement de l'approximation éléments finis en ajoutant des degrés de liberté. Il est nécessaire pour nous d'utiliser une méthode de fissuration numérique qui tienne compte de la nature composite du matériau. L'approche ici proposée, basée sur la méthode des Eléments Finis, consiste à modéliser les discontinuités en propageant des fissures réelles à l'intérieur du maillage. Contrairement aux autres méthodes, elle rend compte physiquement de la fissure, car elle modifie la topologie du maillage en intégrant des nouvelles surfaces de contact (lèvres de fissure).

Cette méthode présente de nombreux avantages. Elle permet de modéliser le chemin de propagation d'une ou de plusieurs fissures même en grandes déformations. Elle permet aussi de conserver une grande précision en pointe de fissure et donc sur les champs mécaniques calculés à cet endroit, quel que soit le chemin de propagation grâce au remailleur automatique. Cette grande précision justifie l'intérêt de considérer numériquement le béton comme un composite particulaire numérique. En effet elle permet de rendre compte de l'influence des hétérogénéités du matériau sur le chemin de la fissure (Comby et al., 2005). Enfin elle bénéficie d'une meilleure fiabilité. Actuellement cette technique est déjà implémentée en 2D dans le code Forge2-MultiMatériaux (Bouchard et al., 2002). La difficulté majeure de cette méthode est la nécessité d'un changement continu de la topologie du maillage de la pièce au cours de la fissuration (obligation de remaillage). Dans une première partie, nous présentons d'abord l'algorithme mis en place dans le logiciel. Nous concluons par une application numérique à partir d'un essai de flexion trois points.

#### 4.1. ALGORITHME DE FISSURATION 3D

Ce module de fissuration 3D intervient à la fin d'un incrément de calcul mécanique. Il est déclenché automatiquement suivant la valeur de l'endommagement dans la pièce. Le matériau est en effet supposé élastique endommageable. L'algorithme de fissuration est basé sur différentes étapes :

① le maillage surfacique est extrait du maillage volumique de la pièce. Nous évaluons ensuite la **direction de propagation de chaque nœud du front de fissure**. L'évaluation de cette direction est indépendante du maillage choisi initialement.

② Un critère de propagation, indépendant du maillage en pointe de fissure, a été implémenté dans Femcam pour déterminer la direction de propagation d'une fissure. Le critère de propagation de la fissure est basée sur le **critère de la contrainte circonférentielle maximale**, développé par Erdogan et Sih (Erdogan et al., 1963). Dans ce cadre là, nous supposons la propagation plane (pas de propagation possible suivant les trois axes); il n'y a donc qu'un seul angle de propagation à déterminer. Ce critère est basé sur les champs locaux de contraintes et suppose que la fissure se propage perpendiculairement à la direction de la contrainte circonférentielle maximale.

③ Ensuite des nœuds correspondants au nouveau front de fissure sont ajoutés au maillage surfacique. La topologie est donc modifiée et une nouvelle connectivité est créée. Les nœuds, correspondant au front de fissure initial, sont divisés de façon à générer de nouvelles surfaces libres.

④ Pour finir le mailleur de Femcam génère **un nouveau maillage volumique** à partir de ce maillage surfacique modifié. Il peut alors ajouter des nœuds pour améliorer la qualité du maillage.

#### 4.2. VALIDATION SUR UN ESSAI DE FLEXION 3 POINTS

Nous testons le module de fissuration 3D sur un essai de flexion 3 points (29000 nœuds, 60000 éléments). La poutre est assimilée à un mortier au comportement élastique endommageable. La fissure est initiée une fois que l'endommagement a atteint une valeur critique. Une fois le module déclenché, il intervient automatiquement à chaque incrément de calcul mécanique. La longueur de la fissure est dl = 1.2 mm à chaque incrément de propagation et l'ouverture de la fissure est de da = 0.3 mm. La figure ci-dessous montre l'évolution de l'endommagement et la propagation de la fissure.



Figure 3. Evolution de l'endommagement et de la fissuration dans une poutre soumise à un essai de flexion 3 points

La Figure 3 nous montre que tous les nœuds du front de fissure évoluent de façon régulière, dans la même direction suivant l'axe du chargement. Cela valide donc l'implémentation du critère de bifurcation pour des chargements uniaxiaux. D'autre part on constate que la fissuration évolue plus rapidement que l'endommagement. Nous avons précisé que ce module intervenait systématiquement une fois que l'endommagement atteignait un seuil critique. Il serait plus réaliste d'ajouter une boucle supplémentaire dans ce module de fissuration, pour que l'intervention de ce module soit toujours contrôlée par la valeur de l'endommagement au niveau du front de fissure.

## 5. CONCLUSION

L'implémentation du modèle d'endommagement dans Femcam permet de modéliser les conséquences mécaniques de la RAS. Les résultats obtenus sont très prometteurs mais ils soulignent

également la complexité du matériau. La suite des travaux devra introduire une troisième phase importante du béton : l'auréole de transition située entre la matrice cimentaire et le granulat. L'état de microfissures initial du matériau devra aussi être pris en compte. La modélisation de la dégradation du béton doit s'accompagner d'une bonne description de l'initiation et de la propagation des fissures dans la pièce. La méthode de fissuration discrète a été implémentée pour modéliser de façon très précise le chemin de la fissure. Cette approche est couplée avec le modèle d'endommagement du béton dans la phase d'initiation. Elle devra être couplée dans la phase de propagation. L'amélioration de la méthode passera également par un raffinement du maillage en pointe de fissure et proposera à terme de coupler l'endommagement induit par la RAS dans le matériau et l'amorçage de la fissure.

## 6. **BIBLIOGRAPHIE**

- Bazant ZP. (1994) "Non local damage theory based on micromechanics of crack interactions", ASCE J. Engng Mech., 120(3), 593-617.
- Bouchard PO., Bay F., Chastel Y. (2003) "Numerical modelling of crack propagation: automatic resmeshing and comparison with different criteria", Comput. Methods Appl. Engrg. 192, 3887-3908.
- Comby I., Bouchard P.-O., Bernard F., Bay F., Garcia-Diaz E. (2005) «*Numerical aspects of a problem with damage to simulate mechanical behavior of a quasi-brittle material*», XVII Congrès Français de Mécanique, 29 août 2 septembre 2005, Troyes.
- Comby I., Bouchard P.-O., Bernard F., Bay F., Garcia-Diaz E. (2006) «Numerical aspects of a problem with damage to simulate mechanical behavior of a quasi-brittle material», soumis à Computational Material Science.
- Erdogan F., Sih G.C. (1963) "On the crack extension in plates under plane loading and tranverse shear", J. Basic Engng., Vol. 85, pp. 519-527.
- Garcia-Diaz E., Riche J., Bulteel D., Vernet C. (2006) "Mechanism of damage for the alkali-silica reaction", Cement and Concrete Research, Vol 36, N°2, pp 395-400.
- Larive C. (1998) "Combined Contribution of Experiments and Modelling to the Understanding of Alkali-Aggregate Reaction and its mechanical Consequences", OA28, Laboratoire des Ponts et Chaussées, Paris.
- Mazars J. (1984) Application de la Mécanique de l'endommagement au comportement non linéaire et à la rupture du béton de structure, Thèse de Doctorat d'Etat, Université Paris VI.
- Mazars J., Pijaudier-Cabot G. (1996) "From Damage to fracture mechanics and conversely: a combined approach", International Journal Solid Structure, vol. 33, N0 20-22, pp. 3327-3342.
- Peerlings R. (1999) Enhanced damage modelling for fracture and fatigue, PhD thesis, de Technische Universiteit Eindhoven.
- Pijaudier-Cabot G., Bazant Z.P. (1997) Non local damage theory, ASCE J.Eng. Mech. 113, 1512-1533.
- Riche J. (2003) La réaction alcali-silice : approche cinétique et mécanisme d'expansion Etude du sytème silex/chaux/potasse à 80°C, Thèse de doctorat de l'Université des Sciences et Technique de Lille.