

ETAT DE L'ART DES MODELES PREDICTIFS DE PENETRATION DES CHLORURES

Marie-Pierre YSSORCHE-CUBAYNES ⁽¹⁾

⁽¹⁾ Laboratoire Matériaux et Durabilité des Constructions, INSA-UPS Toulouse

Résumé

Cet article présente une synthèse des principaux modèles de pénétration des chlorures dans le béton. L'objectif est de choisir un ou des modèles les plus pertinents permettant d'accéder aux témoins de durée de vie (cf. guide AFGC&10.1).

Deux familles de modèles sont définies :

- les modèles empiriques c'est-à-dire établis à partir d'une solution analytique ou numérique de la 2nd loi de Fick,
- les modèles physiques qui nécessitent l'écriture d'équations séparées pour le transport des ions et les interactions.

Les conclusions principales sont les suivantes :

- les modèles empiriques sont simples et disponibles. Cependant, ils nécessitent la détermination de deux paramètres d'entrée (D_a et C_{sa}) fonction du temps. Cette dépendance vis-à-vis du temps est souvent pas ou mal considérée ce qui conduit à des prédictions quelquefois erronées.
- les modèles physiques représentent mieux les mécanismes en jeu (notamment ceux qui traitent des milieux non saturés) avec la prise en compte des interactions ions/ions et ions/solide mais sont complexes car nécessitant notamment la détermination de nombreux paramètres d'entrée.

Une idée judicieuse [1] serait d'utiliser les modèles physiques pour déterminer correctement les paramètres de calibration (D_a et C_{sa}) des modèles empiriques et prédire les profils de pénétration des chlorures avec ces derniers.

Mots-clés : modèles, pénétration, chlorures, diffusion, béton.

1. INTRODUCTION

L'objectif de ce papier est de comparer les principaux et nombreux modèles développés depuis les années 1970 permettant de déterminer la profondeur de pénétration des chlorures dans le béton à un temps donné. La démarche, schématisée figure 1, consiste à identifier un ou plusieurs modèles permettant d'accéder aux **témoins de durée de vie** (correspondant aux sorties du modèle) à partir des données d'entrée (données matériau et données de l'environnement) en adoptant la démarche définie dans le guide AFGC &4.3.

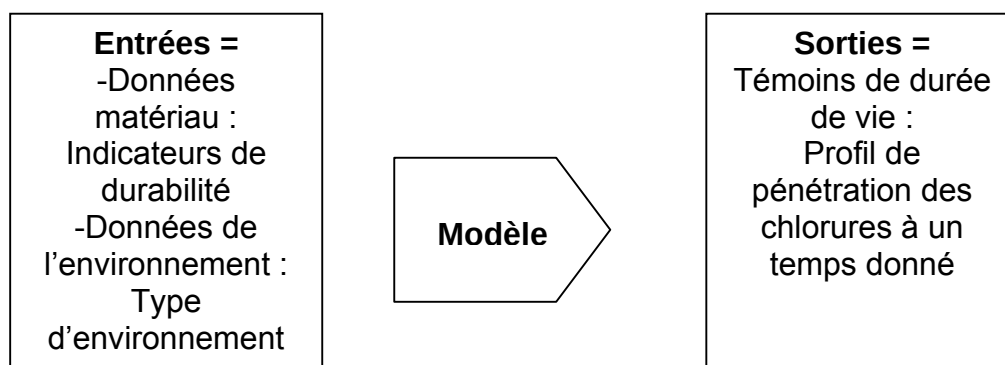


Figure 1. Représentation schématique de la démarche

Il est utile dans un premier temps de s'interroger sur les objectifs d'un « bon » modèle.

- Prédire quoi ? S'agit-il de calculer le temps nécessaire aux chlorures libres pour traverser le béton d'enrobage ou le temps nécessaire à l'amorçage de la corrosion ? Dans ce dernier cas, il est nécessaire de connaître la concentration en ions hydroxyle.
- Avec quelle fiabilité ? Devons-nous élaborer un modèle permettant de reproduire au mieux les mécanismes physiques réels et complexes en jeu (milieu saturé ou non, prise en compte de la fissuration fonctionnelle du béton armé, modèle à une, deux ou trois dimensions, prise en compte de l'hétérogénéité du béton en particulier en peau ...) ou choisir un modèle où la physique est simplifiée ? Avec quel degré de simplification ? Avec quelle précision ?
- Avec quelle facilité ? Devons-nous choisir la simplicité et l'accessibilité du modèle, des entrées peu nombreuses, faciles à identifier et à déterminer ou un modèle complexe mais plus « juste » ?

Les principaux enjeux liés au choix d'un modèle de prédiction de pénétration des chlorures soulignés, nous proposons une classification des modèles de la littérature telle que :

1^{er} : les modèles empiriques ou basés sur une solution analytique ou numérique de la 2nd loi de Fick,

2^{ième} : les modèles physiques ou basés sur les équations des flux.

Pour chacun des modèles, nous présenterons successivement les principes fondamentaux, les entrées, les sorties, les avantages, les inconvénients et les auteurs.

2. LES MODELES EMPIRIQUES OU BASES SUR LA 2nd LOI DE FICK

Dans ce type de modèles, les profils de concentration des chlorures sont établis à partir de solutions analytiques ou numériques de la 2nd loi de Fick.

Les entrées des modèles sont généralement peu nombreuses et se résument pour l'essentiel à :

- une donnée caractéristique du matériau : le coefficient de diffusion apparent D_a ,
- une donnée caractéristique de l'environnement : la concentration en chlorures à la surface de l'ouvrage C_{sa} .

Sur leur **principe**, les différences entre les principaux modèles empiriques sont liées à la prise en compte ou non de la dépendance vis-à-vis du temps des entrées des modèles D_a et C_{sa} . Ainsi, on distingue les modèles où la résolution mathématique de la 2nd loi de Fick est le complément de la fonction erreur, les modèles avec une solution analytique de la 2nd loi de Fick propre au modèle et enfin les modèles où le choix est fait d'une résolution numérique de la seconde loi de Fick.

En outre, une calibration des modèles par des données expérimentales est nécessaire justifiant le qualificatif d'« empirique ». La plupart des modèles

empiriques ont un caractère déterministe. Certains utilisent les outils de la statistique pour déterminer avec plus de pertinence les données d'entrée.

Tous les modèles empiriques recensés permettent de déterminer le profil de pénétration des chlorures à un temps donné (**sortie**). Certains permettent également de déterminer le temps d'initiation de la corrosion.

Le tableau 1 résume les principaux critères des modèles empiriques.

Tableau 1. Caractérisation des principaux modèles de pénétration des chlorures. Cas des modèles empiriques.

	Modèle de Collepardi	Modèles Allied Firth	Modèle DuraCrete	Modèle False-efc	Modèles Meljbro-Poulsen Hetek	Modèles LEO NIST Life-365
Principes	Solution analytique de la 2 nd loi de Fick : fonction erfc				Autre solution analytique de la 2 nd loi de Fick	Solution numérique de la 2 nd loi de Fick
	Calibration des modèles par les données expérimentales D_a et C_{sa}					Méthode des diff. finies
	$D_a = \text{cte}$ $C_{sa} = \text{cte}$	$D_a(t)$ $C_{sa} = \text{cte}$	$D_e(t)$ $C_{sa} = \text{cte}$	$D_a(t)$ $C_{sa}(t)$	$D_a(t)$ $C_{sa}(t)$	$D_a(t, T)$ $C_{sa}(t)$
Entrées	D_a C_{sa}	D_a C_{sa}	6 entrées minimum dont D_e et C_{sa}	D_a C_{sa}	D_a C_{sa}	$D_{F2}(t)$ Isotherme Porosité $C_{sa}(t)$ Condit exp T Compo béton
Sortie	Profil de $[Cl^-]$ à t donné	Profil de $[Cl^-]$ à t donné	Profil de $[Cl^-]$ à t donné	Profil de $[Cl^-]$ à t donné	Profil de $[Cl^-]$ à t donné	Profil de $[Cl^-]$ à t donné
Avantages	Simple Disponible	Simple Disponible	Simple Disponible Prise en compte de zone de convection près surface exposée	Simple Disponible	Disponible Fiabilité du modèle pour des conditions exp. données « Vrai » solution de la 2 nd loi de Fick avec $D_a(t)$ et $C_{sa}(t)$	Disponible Prise en compte de la température Témoin de durée de vie (initiation corrosion)
Inconvénients	Sur estimation de la prof de pénétration des Cl^- avec $D_a = \text{cte}$	Limites de validité de $D_a = f(t)$ → incertitudes prédictions	Utilisation de D_e au lieu de D_a dans la résolution D_e estimé à partir essai de migration	Sous estimation de la prof de pénétration des Cl^-		Incertitudes sur définition et quantification de $D_{F2}(t)$ Isotherme linéaire des Cl^- (LEO)
Références Biblio.	[2]Collepardi [3]Tutti [4]Andrade	[5] Bamforth [6] Maage [7] Mangat [8] Poulsen	[9] Alisa [10] Gehlen [11] Visser	[12] Nilsson	[13] Meljbro [14] Poulsen [15] Frederiksen	[16] Bentz [17] Bentz & Thomas [18] Petre Lazar

En résumé, les points positifs des modèles empiriques sont leur simplicité et leur disponibilité. Leurs points faibles sont principalement :

- la non prise en compte des effets des autres espèces ioniques présentes dans la solution interstitielle (interactions électriques ions/ions et ions/matrice),
- la nécessité de déterminer au moins deux paramètres de calibration ce qui peut conduire à des expériences lourdes et coûteuses,
- des paramètres quelquefois mal ou peu explicités,
- des hypothèses permettant notamment de prendre en compte la dépendance vis-à-vis du temps de D_a et de C_{sa} parfois discutables.

3. LES MODELES PHYSIQUES OU BASES SUR LES EQUATIONS DE FLUX

Les modèles physiques sont des modèles où le transport des ions et les interactions sont décrits par des équations séparées, basées sur des mécanismes physiques. On distingue les modèles basés sur la 1^{er} loi de Fick et ceux basés sur les équations de Nernst-Planck.

Le tableau 2 synthétise les principales caractéristiques des modèles qualifiés de physiques.

Tableau 2. Caractérisation des principaux modèles de pénétration des chlorures. Cas des modèles physiques.

	Modèle ClinConc	Modèles HetekConv Lerm	Modèle MSDiff Li&Page Johannesson	Modèle Stadium
Principes	Résolution numérique de la 1 ^{er} loi de Fick		Détermination des flux des espèces ioniques avec système d'équations de Nernst-Planck	
	Conditions saturées	Prise en compte de la convection (non saturé)	Prise en compte de la convection (non saturé) Li&Page	Prise en compte de dégradations chimiques possibles et de la convection (non saturé)
Entrées	D_{ns} fct(x,t,T) Composition du mélange Isotherme d'interaction Cl- fct(pH, T) $C_{sa}(t)$	Données matériau Données environnement : HR, T en fonction du temps	D_e des Cl Concentration initiale ≠ ions Composition du mélange béton Tortuosité Porosité Isotherme Densité du courant	Concentration initiale ≠ ions Composition du mélange béton Tortuosité Porosité Conditions d'exposition (HR, T)
Sortie	Profil $[Cl^-]_{libres}$ Profil $[Cl^-]_{totaux}$ Profil $[OH^-]$	Profil $[Cl^-]_{libres}$ Profil $[Cl^-]_{totaux}$ Profil (HR)	Profil des ≠ ions Carte de répartition du courant ou du potentiel électrique	Profil des ≠ ions Prédiction dégradations du matériau

	Modèle ClinConc	Modèles HetekConv Lerm	Modèle MSDiff Li&Page Johannesson	Modèle Stadium
Avantages	Peu de paramètres d'entrée Détermination rapide de DF1 (t) avec un essai Prise en compte de T et OH-	Prédiction possible en milieu non saturé Des résultats corrects si on a toutes les entrées	Prise en compte des interactions ions/ions et ions/solide	Prise en compte des interactions ions/ions et ions/solide Modèle très complet (non saturé, dégradations...)
Inconvénients	Pas de prise en compte de l'évolution de l'isotherme en fonction du temps Pas de prise en compte des autres ions (excepté Cl et OH) Non prise en compte de la convection	Beaucoup de données d'entrée, difficiles à déterminer Pas de prise en compte de tous les ions	Beaucoup d'entrées parfois difficiles à mesurer (ex : tortuosité) Difficultés pour modéliser les conditions aux limites en surface Complexe, peu convivial	Beaucoup d'entrées parfois difficiles à mesurer Difficultés pour modéliser les conditions aux limites en surface Complexe
Ref. Biblio	[19] Tang	[20] Nilsson [21] Houdusse [22] Houdusse	[23] Truc [24]Khitab [25] Li&Page [26] Li [27]Johannesson	[28] Samson [29]Marchand

Un avantage incontournable d'un modèle physique est, sans contexte, sa description correcte des mécanismes physiques avec la prise en compte des interactions électriques entre les ions de la solution poreuse et les interactions entre les ions et le solide poreux notamment. En revanche, on peut leur reprocher leur complexité liée essentiellement à la nécessité de déterminer de nombreux paramètres d'entrée, parfois difficilement quantifiables.

4. CONCLUSIONS

Il apparaît clairement qu'aucun modèle n'est, à l'heure actuelle, parfaitement adapté pour prédire la profondeur de pénétration des chlorures ou plus exactement le temps d'initiation de la corrosion. Une sujétion judicieuse émise lors du dernier Workshop Chlorures [1] serait d'associer ces deux familles de modèles (empiriques et physiques). Un modèle physique, véritable outil de laboratoire, serait utilisé pour décrire et comprendre les mécanismes physiques complexes, pour déterminer correctement les paramètres d'entrée D_a et C_{sa} , pour étudier leur dépendance au temps et mieux prendre en compte les variations liées à l'environnement. Ces entrées bien définies, un modèle empirique « corrigé » serait ensuite choisi pour prédire le temps d'initiation de la corrosion, le témoin de durée de vie.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[1] Workshop CHLORTEST "Modelling of chloride ingress", Resistance of chloride ingress – from laboratory to in-field performance, L.O.Nilsson, Alicante, 1-2 décembre 2005

- [2] Collepardi M., *Quick method to determine free and bound chlorides in concrete*, Proceedings of the 1st International Rilem Workshop "Chloride penetration into concrete", oct. 15-18, 1995, Saint-Rémy-lès-Chevreuse, France (Ed. By L.O.Nilsson&J.P.Ollivier, RILEM, Cachan, 1997, pp 10-16.
- [3] Tuuti K., *Corrosion of steel in concrete*, CBI, Report Fo 4.82, Stockholm, 1982.
- [4] Andrade C, *Calculation of initiation and propagation periods of service-life of reinforcements by using the electrical resistivity*, International Symposium on Advances in Concrete through Science and Eng, RILEM Symposium, March 22-24, Evanston (Illinois, USA), 2004.
- [5] Bamforth P.B, *Concrete classifications for R.C structures exposed to marine and other salt-loaded environments*, Proceedings of Structural Faults and Repair, Edimburgh, 1993.
- [6] Maage M, Poulsen E, Vennesland O, Carlsen J.E, *Service life model for concrete structures exposed to marine environment – Initiated period*, SINTEF, Trondheim, 1995.
- [7] Mangat PS, Molloy BT, *Predicting of long term chloride concentration in concrete*, Materials and Structures, Vol.27, pp. 338-346, 1994.
- [8] Poulsen E, *Estimation of chloride ingress into Concrete and Prediction of Service Lifetime with Reference to Marine RC Structures* in "Durability of Concrete in Saline Environment", Cementa, Danderyd, Sweden.
- [9] Alisa M, Andrade C, Gehlen C, Rodriguez J, Vogels R, *Modelling of Degradation*, Brussels, Brite-Euram, 1998, Project N°BE95-1347, R4/5, 174pp.
- [10] Gehlen C, Shiessl P, *Probability-based durability design for the Western Scheldt Tunnel*, Structural concrete, Journal of the FIB, vol. P1, n°2, june 1999, pp 1-7.
- [11] Visser JHM, Gaal GCM, De Rooij MR, *Time dependency of chloride diffusion coefficients in concrete*, 3rd RILEM Workshop Testing and Modelling Chloride Ingress into Concrete, Madrid, September 9-10, 2002.
- [12] Nilsson LO, *On the uncertainty of service-life models for reinforced marine concrete structures*, International RILEM workshop Life Prediction and Age Management of Concrete Structures, Cannes, 16-17 october 2000.
- [13] Meljbro L, *The Complete Solution of Fick's Second Law of Diffusion with Time-dependent Diffusion Coefficient and Surface Concentration*, in "Durability of Concrete in Saline Environment", Cementa, Danderyd, Sweden, 1996.
- [14] Poulsen E., *Estimation of chloride ingress into Concrete and Prediction of Service Lifetime with Reference to Marine RC structures* in "Durability of Concrete in Saline Environment", Cementa, Danderyd, Sweden, 1996.
- [15] Frederiksen JM, Nilsson LO, Sandberg P, Poulsen E, Tang L, Andersen A, *A system for estimation of chloride ingress into concrete. Theoretical background*, HETEK Danish Road Directorate Report n°83, 1997.
- [16] Bentz [99] <http://www.silicafume.org/specifiers-lifecycle.html>.
- [17] Bentz&Thomas <http://www.silicafume.org/specifiers-lifecycle.html>.
- [18] Petre-Lazar I, Heinfling G, Marchand J, Gérard B, *Application of probabilistic methods to analysis of behaviour of reinforced concrete structures affected by steel corrosion*, Proceedings of the 5th CANMET/ACI International Conference on Durability of Concrete, June 4-9, 2000, Barcelona, Spain, SP-192 (Ed. By V.M.Malhotra, ACI, 2000), pp 557-572.
- [19] Tang L, *Chloride Transport in Concrete – Measurement and Prediction*, Gotheborg, Chalmers University of Technology, 1996.
- [20] Nilsson L.O, Sandberg P, Poulsen E, Tang L, Andersen A, Frederiksen J.M, *A system for estimation of chloride ingress into concrete. Theoretical background*, HETEK Report n°83, chapter 6: Comparison of the empirical and the scientific models, (Ed. Frederiksen J.M, Danish Road Directorate, Copenhagen, 1997.
- [21] Houdusse O, Marchand J, Hornain H, *Prédiction de l'évolution de la concentration des ions présents dans les matériaux cimentaires : modélisation numérique de transport d'ions par la méthode des éléments finis*, Proceedings of the 1st International Meeting "Material science and Concrete Properties", march 5-6, 1998, Toulouse, France, (LMDC, 1998), vol. II, SP 192-20.
- [22] Houdusse O, Hornain H, Martinet G, *Prediction of long-term durability of Vasco de Gama Bridge in Lisbon*, Proceedings of the 5th CANMET/ACI International Conference on Durability of Concrete, June 4-9, 2000, Barcelona, Spain, SP-192 (Ed. By V.M. Malhotra, ACI, 2000), vol. II, SP 192-20.
- [23] Truc O, *Prediction of Chloride Penetration into Saturated Concrete. Multi-Species Approach*, Thèse de doctorat de l'Université de technologie de Chalmers et de l'Institut National des Sciences Appliquées, Göteborg et Toulouse, 2000, 173p.

- [24] Khitab A, Lorente S, Ollivier JP, *Chloride diffusion through saturated concrete : numerical and experimental results*, Advances in Concrete through Science and Eng., RILEM Symposium, March 22-24, Evanston (Illinois, USA), 2004.
- [25] Li L, Page CL, *Modelling of electrochemical chloride extraction from concrete : influence of ionic activity coefficients*, Computational Materials Science, 9, 1998, pp.303-308.
- [26] Li L, Page CL, *MFinite element modelling of chloride removal from concrete by an electrochemical method*, Corrosion Science, Vol.42, pp 2145-2165, 2000.
- [27] Johannesson B, *Transport and sorption phenomena in concrete and others porous media*, PhD thesis, report TVBM-1019, div. of Building Materials, Lund Institute of Technology, Lund, Sweden.
- [28] Samson E, Marchand J, Robert L, Bournazel J.P., *Modeling the mechanisms of ion diffusion in porous media*, International journal for numerical methods in engineering, 46, 1999, pp 2043-2060.
- [29] Marchand J, Samson E, Maltais Y, Lee R.J, Sahu S, *Predicting the performance of concrete structures exposed to chemically aggressive environment. Field validation*, Concrete science and engineering, vol.4, n°15, included in Materials and structures, vol.35, n°254, dec.2002, pp 623-631.