



**HAL**  
open science

# Contribution à l'approche probabiliste de la durabilité des structures en béton soumise à la carbonatation

Viet Duc Ngo

► **To cite this version:**

Viet Duc Ngo. Contribution à l'approche probabiliste de la durabilité des structures en béton soumise à la carbonatation. Génie civil. INSA de Toulouse, 2015. Français. NNT : 2015ISAT0017. tel-01240052

**HAL Id: tel-01240052**

**<https://theses.hal.science/tel-01240052>**

Submitted on 8 Dec 2015

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



# THÈSE

En vue de l'obtention du

## DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse (INSA de Toulouse)

---

**Présentée et soutenue par :**

**Viet Duc NGO**

**le 11 septembre 2015**

**Titre :**

Contribution à l'approche probabiliste de la durabilité des structures en béton  
soumises à la carbonatation

---

**École doctorale et discipline ou spécialité :**

ED MEGEP : Génie mécanique, mécanique des matériaux

**Unité de recherche :**

Laboratoire Matériaux et Durabilité des Constructions (LMDC)

**Directeur/trice(s) de Thèse :**

Frédéric DUPRAT

**Jury :**

Alain SELLIER

Farid BENBOUDJEMA

Sidi Mohammed ELACHACHI

Géraldine VILLAIN

Frédéric DUPRAT

Thomas DE LARRARD

Université Paul Sabatier Toulouse

École Normale Supérieure de Cachan

Université Bordeaux 1

IFSTTAR

INSA Toulouse

INSA Toulouse

Président

Rapporteur

Rapporteur

Examinatrice

Examineur

Examineur



## Résumé

La corrosion de l'acier par carbonatation du béton est un phénomène de dégradation majeur des structures en béton armé, qui débute par la dépassivation de l'acier due à l'abaissement du pH de la solution interstitielle.

Un modèle a été développé pour estimer la profondeur de carbonatation du béton. Le modèle proposé est un approfondissement de modélisations antérieures, notamment afin de prendre en considération dans les simulations l'effet de la température, tant par l'équation de transfert que par des termes de thermo-activation venant modifier les grandeurs de diffusion de dioxyde de carbone et des ions calcium en phase liquide, la solubilité des hydrates, la viscosité de l'eau, ainsi que l'isotherme hydrique.

L'objectif étant d'inscrire la modélisation dans un cadre probabiliste, et donc coûteux en terme de calculs, il a fallu réduire la dimension stochastique du problème. Une méthodologie de choix des paramètres intervenant dans le modèle, basée sur une étude de sensibilité, a été proposée. Un modèle de substitution a été construit, à partir du modèle initial, pour déterminer les grandeurs intervenant dans les expressions des états-limites de dépassivation et d'initiation de la corrosion, s'appuyant sur des développements en chaos polynomiaux.

Avec une définition de la probabilité d'amorçage de la corrosion et des modèles de substitution pour la profondeur carbonatée et pour l'amplitude de la variation annuelle du taux de saturation au voisinage des armatures, l'analyse fiabiliste proprement dite a été menée, notamment par rapport à l'incidence des conditions climatiques sur la fiabilité des ouvrages en béton vis-à-vis de la durabilité.

**Mots-clés** : carbonatation, béton armé, durabilité, modélisation, sensibilité, fiabilité.

# **Probabilistic approach to the durability of concrete structures exposed to carbonation**

## **Abstract**

Carbonation-induced corrosion of steel reinforcement in concrete structures is a major concern which begins due to decrease of pH in the pore solution.

A model (FEM) has been developed to compute the concrete carbonation depth. The proposed model is based on an earlier model, extended in such a way that the effect of temperature is accounted for by both the transfer equation and thermal-activation impacting the diffusion coefficient of carbon dioxide, diffusion coefficient of calcium ions, water viscosity, hydrates solubility and hydric isotherm.

It was intended in this work to use the model in a probabilistic context in which a huge number of simulations is usual to assess the failure probability. In order to decrease the computational cost of probabilistic approach which depends on the number of input parameters it was then necessary to identify among them those having a significant effect on the model output. A sensitivity analysis was hence performed on the model output involved in the expression of the limit states of the steel depassivation and corrosion initiation so as to reduce the stochastic dimension.

Surrogate models were then proposed for the carbonation depth and the average annual variation of the saturation degree in concrete that enter in the expression of a new durability limit state proposed for the effective onset of corrosion. Practical reliability analyses were conducted showing influence of the climatic environment on the risk of effective corrosion onset. A risk-based optimization of the concrete cover depth as function of the exposure condition and concrete porosity was finally proposed

**Keywords:** carbonation, reinforced concrete, durability, modeling, sensitivity, reliability.

## **Remerciements**

Tout d'abord, je tiens à remercier Gilles ESCADEILLAS, directeur du LMDC Toulouse, pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire et pour son enthousiasme.

Je remercie Alain SELLIER d'avoir accepté de présider mon jury de thèse, ainsi que Farid BENBOUDJEMA et Sidi Mohammed ELACHACHI pour avoir été les rapporteurs de mon manuscrit. Ils ont accepté de relire mon manuscrit pendant l'été et dans des délais contraints, et ma reconnaissance envers eux est grande. Je remercie également Géraldine VILLAIN de m'avoir fait l'honneur d'examiner mon travail. Tous m'ont formulé de nombreuses remarques qui vont grandement contribuer à l'amélioration de mon travail.

Je tiens à manifester toute ma reconnaissance particulière à Frédéric DUPRAT, mon directeur de thèse, et à Thomas DE LARRARD, mon encadrant, pour la confiance qu'ils m'ont accordée, pour leurs conseils qui ont éclairé le déroulement de mes travaux et pour leur patience tout au long de ce travail.

J'adresse mes remerciements également à l'ensemble du personnel du LMDC et plus particulièrement à mes collègues au quotidien : Célestine, Billy, Nam, Quan, Thomas, etc. pour les discussions, l'ambiance et la diversité culturelle que nous avons partagées.

Je remercie le gouvernement vietnamien pour le financement de cette thèse, et le LMDC pour sa contribution.

Enfin je voudrais adresser toute ma gratitude à ma famille pour son soutien et pour m'avoir soutenu et encouragé pendant ces années.

# Table des matières

<b>INTRODUCTION GENERALE .....</b>	<b>- 7 -</b>
<b>CHAPITRE I - CARBONATATION DES BETONS.....</b>	<b>- 11 -</b>
I.1. INTRODUCTION.....	- 12 -
I.2. PHENOMENOLOGIE DE LA CARBONATATION .....	- 13 -
I.2.1. <i>Processus physico-chimique</i> .....	- 13 -
I.2.2. <i>Evolution des propriétés de la pâte de ciment</i> .....	- 16 -
I.2.3. <i>Paramètres influents sur la cinétique de carbonatation</i> .....	- 24 -
I.3. CORROSION DES ARMATURES LIEES A LA CARBONATATION .....	- 29 -
I.3.1 <i>Processus physico-chimique</i> .....	- 29 -
I.3.2 <i>Phases d'évolution de la corrosion</i> .....	- 30 -
I.3.3 <i>Corrosion des armatures liées à la carbonatation</i> .....	- 31 -
I.3.4 <i>Paramètres influents sur la cinétique de corrosion</i> .....	- 32 -
I.3.5 <i>Impact de la corrosion des armatures</i> .....	- 35 -
I.4. MODELISATION DE LA CARBONATATION .....	- 37 -
I.4.1. <i>Stratégies de modélisation</i> .....	- 37 -
I.4.2. <i>Modélisation simplifiée</i> .....	- 39 -
I.4.3. <i>Modélisations « avancées »</i> .....	- 46 -
I.5. CONCLUSION .....	- 55 -
<b>CHAPITRE II - IMPLEMENTATION ET EXTENSION D'UN MODELE DE CARBONATATION .....</b>	<b>- 57 -</b>
II.1. INTRODUCTION.....	- 58 -
II.2. EQUATIONS CONSTITUTIVES DU MODELE .....	- 59 -
II.2.1. <i>Conservation de la masse d'eau</i> .....	- 59 -
II.2.2. <i>Conservation de la masse de dioxyde de carbone</i> .....	- 61 -
II.2.3. <i>Conservation de la masse de calcium</i> .....	- 62 -
II.2.4. <i>Variations de la porosité</i> .....	- 63 -
II.3. PRISE EN COMPTE DE LA TEMPERATURE.....	- 65 -
II.3.1. <i>Diffusion de la chaleur dans le matériau</i> .....	- 65 -
II.3.2. <i>Thermoactivation du processus de carbonatation</i> .....	- 65 -
II.4. SYNTHÈSE DES DONNÉES D'ENTRÉE DU MODELE .....	- 67 -
II.4.1. <i>Grandeurs physiques caractéristiques du matériau</i> .....	- 67 -
II.4.2. <i>Grandeurs caractéristiques de l'environnement</i> .....	- 68 -
II.4.3. <i>Grandeurs représentatives de la physique du problème</i> .....	- 68 -
II.5. MISE EN ŒUVRE DES EQUATIONS.....	- 69 -
II.5.1. <i>Implémentation dans un code aux éléments finis</i> .....	- 69 -
II.5.2. <i>Structure modélisée</i> .....	- 70 -
II.5.3. <i>Conditions initiales et conditions aux limites</i> .....	- 71 -
II.5.4. <i>Exemples</i> .....	- 71 -
II.6. VALIDATION DU MODELE .....	- 72 -
II.6.1. <i>Carbonatation accélérée</i> .....	- 72 -
II.6.2. <i>Carbonatation atmosphérique</i> .....	- 74 -
II.7. ANALYSES ET RESULTATS .....	- 80 -

II.7.1 Cas d'études .....	- 80 -
II.7.2. Prise en compte de l'exposition atmosphérique .....	- 80 -
II.7.3. Influence de la date de mise en exposition .....	- 86 -
II.7.4. Effet du gradient de température dans l'épaisseur d'enrobage .....	- 87 -
II.7.5. Effet de la diffusion du calcium : hypothèse d'un équilibre chimique local.....	- 89 -
II.8. SYNTHÈSE .....	- 91 -
<b>CHAPITRE III - METHODES STOCHASTIQUES EN DIMENSION ELEVEE .....</b>	<b>- 93 -</b>
III.1. INTRODUCTION.....	- 94 -
III.2. CADRE STOCHASTIQUE .....	- 94 -
III.2.1. Formulation du problème .....	- 95 -
III.2.2. Dimension stochastique efficace.....	- 96 -
III.3. ANALYSE DE SENSIBILITE .....	- 98 -
III.3.1. Objectif.....	- 98 -
III.3.2. Analyse de sensibilité locale.....	- 99 -
III.3.3. Analyse de sensibilité globale .....	- 100 -
III.3.4. Choix des méthodes appliquées .....	- 100 -
III.3.5. Méthode de Morris .....	- 100 -
III.3.6. Méthode de Sobol .....	- 112 -
III.4. ANALYSE DE FIABILITE .....	- 124 -
III.4.1. Formulation du problème .....	- 125 -
III.4.2. Principales méthodes de fiabilité .....	- 126 -
III.5. MODELES DE SUBSTITUTION .....	- 133 -
III.5.1. Surfaces de réponses.....	- 133 -
III.5.2. Développements en chaos polynomial.....	- 136 -
III.6. DURABILITE EN CONTEXTE INCERTAIN.....	- 141 -
III.6.1. Origine des incertitudes .....	- 142 -
III.6.2. Cadre normatif.....	- 143 -
III.7. CONCLUSION .....	- 144 -
<b>CHAPITRE IV – APPLICATION DES METHODES STOCHASTIQUES AU MODELE DE CARBONATATION.....</b>	<b>- 145 -</b>
IV.1. INTRODUCTION .....	- 146 -
IV.2. DEFINITION DU PROBLEME STOCHASTIQUE .....	- 147 -
IV.2.1. Formulation de la probabilité d'amorçage de la corrosion.....	- 147 -
IV.2.2. Définition des variables d'entrée .....	- 148 -
IV.3. REDUCTION DE LA DIMENSION STOCHASTIQUE : ANALYSE DE SENSIBILITE .....	- 149 -
IV.3.1 Démarche globale.....	- 149 -
IV.3.2. Analyse de sensibilité pour la profondeur de carbonatation $X_c$ .....	- 151 -
IV.3.3. Analyses de sensibilité pour l'amplitude de variation annuelle du taux de saturation $\Delta S_p$ .....	- 158 -
IV.4. CONSTRUCTION DES MODELES DE SUBSTITUTION .....	- 167 -
IV.4.1. Calcul des coefficients.....	- 168 -
IV.4.2. Résultats .....	- 168 -
IV.4.3. Validation de l'approximation par modèle de substitution .....	- 169 -
IV.5. ANALYSE DE FIABILITE.....	- 170 -
IV.5.1. Estimation de la probabilité d'amorçage de la corrosion .....	- 170 -



IV.5.2. Données pour le calcul .....	- 172 -
IV.5.3. Résultats d'ensemble et commentaires .....	- 174 -
IV.6. CONCLUSION .....	- 182 -
<b>CONCLUSION GENERALE .....</b>	<b>- 184 -</b>
<b>REFERENCES .....</b>	<b>- 188 -</b>
<b>ANNEXES .....</b>	<b>- 199 -</b>
ANNEXE A : CLASSE D'EXPOSITION DANS LA NORME NF EN 206-1 .....	- 200 -
ANNEXE B : INCIDENCE DU NOMBRE DE TRAJECTOIRES DANS LA METHODE DE MORRIS POUR LA SORTIE $X_c$ DU MODELE DE CARBONATATION .....	- 201 -
ANNEXE C : HIERARCHISATION DES VARIABLES ALEATOIRES PAR LA METHODE DE MORRIS POUR LA SORTIE $X_c$ DU MODELE DE CARBONATATION .....	- 208 -
ANNEXE D : DETERMINATION DU NOMBRE DE POINTS PAR TRAJECTOIRE DANS LA METHODE DE SOBOL ET HIERARCHISATION DES PARAMETRES POUR LA SORTIE $X_c$ DU MODELE DE CARBONATATION .....	- 213 -
ANNEXE E : HIERARCHISATION DES PARAMETRES PAR LA METHODE DE SOBOL POUR LA SORTIE $\Delta S_r$ DU MODELE DE TRANSFERT HYDRIQUE .....	- 221 -
ANNEXE F : COEFFICIENTS DU DEVELOPPEMENT EN CHAOS POLYNOMIAL POUR LA SORTIE $X_c$ DU MODELE DE CARBONATATION .....	- 223 -
ANNEXE G : COEFFICIENTS DU DEVELOPPEMENT EN CHAOS POLYNOMIAL POUR LA SORTIE $\Delta S_r$ DU MODELE DE CARBONATATION ..	- 227 -

---

**INTRODUCTION GÉNÉRALE**

---

Les structures en béton souffrent de nombreuses agressions d'origine interne ou externe qui conduisent à des dégradations plus ou moins sévères : gonflement et fissuration associées à la réaction alcali-granulats ou à la réaction sulfatique interne, fissuration associée à la corrosion des armatures due à la carbonatation ou la pénétration des ions chlorures, déstructuration et effritement associés à la lixiviation due aux attaques acides ou à l'eau pure, fissuration due à l'action du gel-dégel, etc. La corrosion des armatures due à la carbonatation du béton est de loin la problématique la plus rencontrée, du fait de l'exposition de la plupart des constructions à l'atmosphère, pouvant causer une pathologie allant de simples traces de rouille sur le parement jusqu'à une perte significative de capacité portante du fait de la réduction des sections d'armature et/ou de la perte d'adhérence, après fissuration et éclatement du béton d'enrobage. Cette problématique prend d'autant plus d'importance aujourd'hui que le parc structural existant vieillit et que son renouvellement n'est pas forcément jugé prioritaire devant son maintien en état fonctionnel. Les contraintes écologiques, économiques, financières et sociétales conduisent en effet les maîtres d'ouvrage et les gestionnaires d'ouvrage à privilégier un objectif d'allongement de la durée en service dans des conditions satisfaisantes de fonctionnalité et de sûreté. Quel que soit leur degré de sévérité, les diverses pathologies affectent la durabilité des structures en béton, et doivent ainsi être anticipées dans la conception et l'exploitation des constructions.

L'environnement des ouvrages étant incertain, autant que les propriétés de leurs matériaux constitutifs et de leurs grandeurs géométriques, notamment l'enrobage, les recommandations et publications relatives à la durabilité des ouvrages telles que le projet Duracrete [DURACRETE, 2000], le Life Design Code de la FIB [FIB, 2006] et plus récemment la dernière version du Model Code de la FIB [FIB, 2012] s'appuient sur une approche semi-probabiliste, voire pleinement probabiliste, pour vérifier des états limites de durabilité et/ou spécifier des grandeurs de dimensionnement. Ce type de recommandation complète utilement les normes actuelles telles que l'EN 206-1, l'EN 13369, ainsi que les Eurocodes structuraux, qui seront vraisemblablement voués à évoluer dans ce sens en ce qui concerne la durabilité structurale.

Il est généralement supposé que l'initiation de la corrosion se produit dès lors que l'enrobage est totalement carbonaté. Il s'agit d'une position intentionnellement conservatrice, car il est nécessaire, après dépassivation des armatures, que les conditions d'humidité et d'accès du dioxygène sur le site réactif soient suffisantes pour qu'un amorçage effectif de la corrosion survienne. D'autre part il peut arriver pour certains bétons confectionnés avec des ciments CEM III, que les armatures se dépassivent avant que toute la réserve d'hydrates carbonatables ait été consommée [VU, 2011]. Il semble donc nécessaire de distinguer la dépassivation des armatures de l'initiation de la corrosion. Cette distinction peut par ailleurs

se révéler utile dans des stratégies de maintenance et/ou de suivi préventif des ouvrages, étant donné que les deux états limites ainsi considérés sont atteints successivement avec un décalage dans le temps qui peut s'avérer important, souvent assimilé à la période dite d'incubation. La connaissance des échéances correspondant à la dépassivation puis à l'initiation de la corrosion, et plus encore de leurs lois de distribution, reste donc un élément clé, à la fois dans la conception durable des ouvrages neufs et dans la maintenance des ouvrages existants.

Le présent travail de thèse se place dans le contexte de la modélisation numérique du processus de carbonatation du béton et de son utilisation dans une approche probabiliste de la dépassivation et de l'initiation de la corrosion. Cette modélisation joue un rôle fondamental dans les stratégies ci-dessus mentionnées : elle intervient en effet dans l'expression des états limites concernés. La modélisation de la carbonatation atmosphérique repose sur un système d'équations différentielles couplées impliquant de nombreux paramètres liés aux propriétés de transfert et aux constituants du béton ainsi qu'aux conditions d'exposition du parement. Elle a fait l'objet de travaux antérieurs apportant à divers degrés des raffinages successifs. Peu de ces travaux ont cependant été orientés vers une utilisation en contexte probabiliste des modèles développés, avec l'objectif de maintenir dans ce contexte toute la finesse de description de la physique apportée par les modèles. La plupart des approches probabilistes de la carbonatation ont eu ainsi recours à des modèles simplifiés. Le couplage d'un modèle numérique complexe avec des algorithmes probabilistes doit relever plusieurs défis, dont le choix des variables portant l'aléa dans le modèle et le moyen de réduire l'effort de calcul, constituent les deux principaux.

Dans le cadre d'un objectif global de contribution à une meilleure estimation de la durabilité des ouvrages en béton soumis à la carbonatation dans un contexte incertain, soit en phase de conception, soit en phase de maintenance, la présente thèse vise à :

- Développer une modélisation de la carbonatation synthétisant les apports antérieurs et éclairant certains aspects du phénomène comme l'effet de la température ou de la migration des ions calcium ;
- Proposer une méthodologie de choix des paramètres intervenant dans le modèle qui peuvent être considérés comme aléatoires, basée sur une étude de sensibilité ;
- Construire les modèles de substitution issus du modèle intégral pour déterminer les grandeurs intervenant dans les expressions des états-limites de dépassivation et d'initiation de la corrosion, s'appuyant sur des développements en chaos polynomiaux ;
- Estimer les lois de distribution des échéances utiles à la conception et/ou à la maintenance, ainsi que les niveaux de probabilité de dépassement des états-limites.

Le document est divisé en quatre chapitres.

Le premier chapitre est dédié à l'état des connaissances sur la carbonatation et à l'état de l'art en matière de modélisation de cette dégradation. La phénoménologie de la dégradation est abordée dans son ensemble et les aspects les plus importants pour la modélisation sont soulignés. Une comparaison succincte des modèles simplifiés y est proposée.

Le développement de la modélisation retenue pour notre étude est présenté dans le second chapitre. La question du choix du pas de calcul en temps relativement à la description des chroniques climatiques typiques est discutée. La validation de la modélisation est argumentée sur la base de comparaison avec des résultats d'essais disponibles. Enfin, une discussion est engagée sur l'influence de la température et de la migration des ions calcium au sein de la solution interstitielle, pour savoir comment simplifier sous une certaine forme la contribution de ces physiques.

Le troisième chapitre est consacré à la présentation des outils et méthodes qui traitent des problèmes stochastiques en dimension élevée, dans un objectif d'estimation de la fiabilité structurale. La réduction stochastique par l'analyse de sensibilité, la constitution de modèles de substitution ainsi que les principales approches probabilistes pour la fiabilité sont traitées. L'analyse de sensibilité est détaillée et illustrée par des exemples tirés de la littérature, soulignant notamment la problématique du nombre d'appels au modèle de calcul pour l'estimation des indices de Sobol.

Enfin, le quatrième chapitre présente le déploiement méthodologique d'ensemble au cas de structures soumises à la carbonatation. L'analyse de sensibilité y est appliquée à la profondeur carbonatée ainsi qu'à la variation annuelle cyclique d'humidité du béton au contact des armatures. Cette analyse fournit les paramètres incertains significatifs à intégrer aux deux modèles de substitution construits en remplacement du modèle de calcul de ces grandeurs d'intérêt, afin de réduire le coût numérique d'estimation de la fiabilité. De nombreuses applications sont alors proposées, illustrant en particulier l'intérêt d'adjoindre à la dépassivation des armatures un critère de durée minimale de conditions favorables à la corrosion, dans la définition de l'état limite d'amorçage de la corrosion.

---

**CHAPITRE I - CARBONATATION DES BETONS**

---

## I.1. Introduction

La carbonatation des bétons résulte de l'action naturelle du dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ) de l'atmosphère, qui diffuse sous forme gazeuse dans le réseau poreux du béton et se dissout en formant un acide au contact de la solution interstitielle. La diffusion des ions issus de la dissolution du  $\text{CO}_2$  est environ  $10^4$  fois plus lente que sa diffusion gazeuse et est généralement ignorée [CHAUSSADENT, 1999]. Le déséquilibre ionique de la solution interstitielle conduit à son tour à la dissolution des hydrates du ciment, et notamment de la portlandite  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  qui joue un rôle de tampon sur le pH, et à la formation de calcite. Lorsque la portlandite, principale source de basicité de la solution interstitielle, a été en grande partie consommée, ou qu'elle n'est plus suffisamment accessible, le pH chute à une valeur inférieure à 9, permettant ainsi la dépassivation des armatures en acier, et le démarrage de la corrosion dans certaines conditions d'humidité et d'accessibilité de l'oxygène aux sites réactifs.

Ainsi, bien que n'étant pas délétère pour le béton lui-même, la carbonatation du béton est une des principales causes de la corrosion des armatures et de la dégradation des structures en béton armé. Les structures situées en zone urbaines et/ou à proximité des voies de circulation sont sujettes à une dégradation plus rapide du fait de l'augmentation de la fraction volumique de dioxyde de carbone par rapport à sa valeur en situation rurale. La façon la plus simple de prédire la durée de vie des ouvrages en béton armé (vis-à-vis de la corrosion des armatures) consiste à évaluer la durée de la phase d'initiation de la corrosion. En ce qui concerne la corrosion engendrée par la carbonatation, il s'agit de définir le temps  $t_{\text{dep}}$  nécessaire pour que le premier lit d'armatures soit dépassivé par l'action du  $\text{CO}_2$ , puis le temps  $t_{\text{ons}}$  au-delà duquel les conditions de démarrage effectif de la corrosion auront été réunies suffisamment longtemps, pour que d'une part le démarrage puisse être éventuellement être détecté, et d'autre part que la phase de propagation de la corrosion puisse s'enclencher [DUPRAT et al., 2013]. La Figure I.1 illustre le positionnement des 3 phases de la corrosion

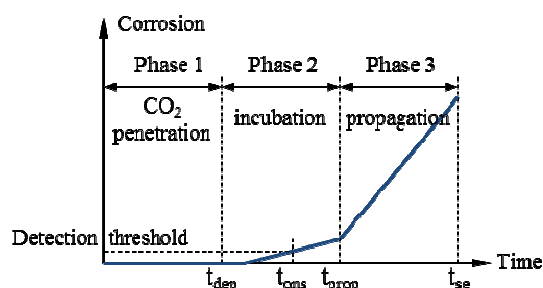


Figure I.1. Phases du processus de corrosion [DUPRAT et al., 2013]

Les aciers peuvent être rapidement dépassivés si l'humidité relative ( $H_r$ ) se stabilise dans une plage où la carbonatation est optimale (généralement pour  $40\% < H_r < 80\%$  suivant la formulation du

béton [VERBECK, 1958]) ; en revanche, le processus de corrosion est limité si la teneur en eau du matériau est trop faible ou trop élevée pour que la corrosion s'amorce.

Dans le cas de structures soumises à des cycles d'humidification-séchage, on peut ainsi observer une phase d'incubation plus courte que la phase de pénétration [SAETTA et al., 2004] [TUUTTI, 1982] qui est ralentie en raison de la difficulté qu'a le dioxyde de carbone à diffuser dans la zone d'enrobage. Notons ici que les préoccupations des gestionnaires d'ouvrages en béton portent davantage sur l'estimation de  $t_{ons}$  ou de  $t_{prop}$ , que sur celle de  $t_{dep}$ , qui est une échéance très anticipative des problématiques structurales.

Le présent chapitre décrit la phénoménologie de la carbonatation et celle de la corrosion associée, puis se focalise sur les modélisations qui permettent de prévoir la profondeur carbonatée ainsi que le temps de protection qu'offre l'enrobage à l'égard de la dépassivation des armatures.

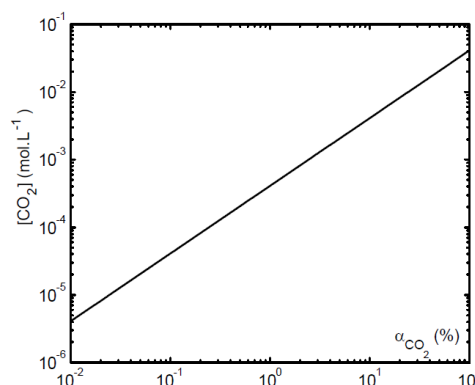
## *I.2. Phénoménologie de la carbonatation*

### **I.2.1. Processus physico-chimique**

#### *I.2.1.1. Le dioxyde de carbone dans l'environnement*

Dans un milieu rural, la fraction volumique en  $CO_2$  est d'environ 0,03%. Dans un local mal ventilé, ce pourcentage peut atteindre 0,1% ; dans les grandes villes, le pourcentage moyen est de 0,3% et peut atteindre 1%. La paroi des tunnels routiers est un exemple de béton soumis à une concentration élevée de  $CO_2$  [THIERY, 2005]. Le dioxyde de carbone est ainsi un agresseur des ouvrages en béton armé dans leur environnement naturel.

La Figure I.2 [THIERY, 2005] présente la concentration en  $CO_2$  en fonction de la fraction volumique de  $CO_2$ , pour une température de  $20^{\circ}C$  et une pression atmosphérique de  $10^5$  Pa.



**Figure I.2. Concentration en  $CO_2$  dans la phase gazeuse en fonction de la fraction volumique en  $CO_2$  (à  $20^{\circ}C$  et sous une pression atmosphérique de  $10^5$  Pa [THIERY, 2005]**



### I.2.1.2. La transformation du dioxyde de carbone dans la pâte de ciment

La carbonatation proprement dite se produit dans la solution interstitielle de la pâte de ciment hydratée. Le  $\text{CO}_2$  sous forme gazeuse pénètre dans des pores de la matrice cimentaire. Il réagit avec l'eau libre dans le béton pour former de l'acide carbonique ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ) :



L'acide carbonique est un diacide faible, donc dans la solution interstitielle (milieu alcalin), il se dissout :



Le processus de dissolution des ions  $\text{HCO}_3^-$  se poursuit :



A chacune de ces deux réactions (I.2) et (I.3) correspond une espèce acide carbonatée différente : l'ion bicarbonate  $\text{HCO}_3^-$  et l'ion carbonate  $\text{CO}_3^{2-}$ . À l'équilibre, ces deux espèces acides ont des domaines de prédominance en fonction du pH disjoints comme l'illustre la Figure I.3. Dans le matériau sain où le pH initial est voisin de 13, l'ion  $\text{CO}_3^{2-}$  prédomine. Au fur et à mesure de la carbonatation, la prédominance revient à l'ion bicarbonate  $\text{HCO}_3^-$ . La prédominance de l'ion carbonate ou de l'ion bicarbonate ne modifie pas la carbonatation des principaux hydrates de la pâte de ciment lorsque le pH reste supérieur à 8. En deçà de cette valeur, l'acide carbonique est présent et les bases alcalines telles que les hydroxydes de sodium NaOH ou de potassium KOH peuvent réagir avec ce dernier pour former des carbonates, qui réagissent à leur tour avec la portlandite pour former de la calcite et reformer les bases initiales. La dissolution de la portlandite peut alors être très rapide.

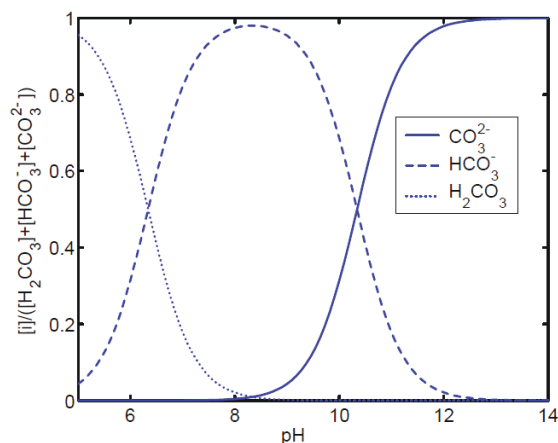


Figure I.3. Fractions molaires des espèces  $\text{H}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{HCO}_3^-$  et  $\text{CO}_3^{2-}$  en fonction du pH (à  $20^\circ\text{C}$  et à l'équilibre) [THIERY, 2005]

### 1.2.1.3. Dissolution de la portlandite $Ca(OH)_2$

D'après les réactions (I.2) et (I.3), le passage en solution du  $CO_2$  entraîne une hausse de la concentration en ions  $H^+$ , conduisant à une forte diminution du pH de la solution interstitielle. Pour compenser l'élévation de la concentration en ions  $H^+$ , la portlandite se dissocie pour libérer des ions hydroxydes  $OH^-$  :



Les ions calciums et les ions carbonates réagissent pour former le carbonate de calcium ( $CaCO_3$ ) :



Les ions calcium peuvent réagir avec les ions  $HCO_3^-$  pour former  $Ca(HCO_3)_2$ , mais Cowie et Glasser [COWIE, 1992] indiquent cependant que ce composé est minoritaire dans les matériaux cimentaires carbonatés car il n'existe pas à l'état solide et ne peut pas se précipiter. On considère donc que les ions  $Ca^{2+}$  précipitent uniquement sous forme de  $CaCO_3$ .

Ainsi, les produits de la carbonatation de la portlandite sont le carbonate de calcium ( $CaCO_3$ ) et l'eau libre. Trois isomorphes du carbonate de calcium existent : l'aragonite, la vaterite et la calcite. Cette dernière est la forme la plus stable dans les conditions standards de température et de pression [HUET, 2005].

### 1.2.1.4. Dissolution des silicates de calcium hydratés (CSH)

La carbonatation des CSH forme des carbonates de calcium, un gel siliceux hydraté et de l'eau libre. La réaction synthétique des CSH avec l'acide carbonique est la suivante :



Dunster [DUNSTER, 1989] propose un mécanisme de carbonatation des CSH. Le  $CO_2$  qui se dissout en solution arrache des ions calcium aux CSH en libérant des anions silicates. Les ions calcium précipitent avec les ions carbonates, tandis que les anions silicates peuvent se condenser avec d'autres silicates dans les CSH. Les espèces produites sont des intermédiaires qui peuvent à leur tour se condenser sur d'autres anions silicates pour finalement conduire à la formation de chaînes silicatées de plus en plus longues et de plus en plus pauvres en calcium, au point de mener à un matériau amorphe qui s'apparente à un gel de silice. Il a conclu que la carbonatation des CSH correspond à un processus de polymérisation

des silicates en formant des espèces qui ne sont plus représentatives des CSH initiaux. L'évolution vers un gel de silice n'est cependant observée qu'en carbonatation accélérée.

[DUNSTER, 1989] et [GROVES et al., 1990] ont observé sur la pâte de ciment que la carbonatation en condition accélérée de la portlandite et des silicates de calcium hydratés est simultanée, même si leur cinétique de réaction est différente. Après une première phase où la carbonatation de la portlandite est prioritaire par rapport à celle des CSH, la carbonatation de la portlandite se stabilise ensuite rapidement en raison d'une réduction d'accessibilité liée à la formation de carbonates de calcium ; par contre, celle des CSH se progresse continûment, à vitesse à peu près constante, jusqu'à ce qu'un niveau de carbonatation quasiment total soit atteint. Des essais de carbonatation à différentes pressions de CO<sub>2</sub> sur des mortiers normalisés ont cependant montré que la concomitance de la carbonatation des deux hydrates est plus évidente à forte pression et beaucoup moins marquée à faible pression (condition atmosphérique) du fait probablement du fort décalage de la cinétique de réaction [HYVERT, 2009]. Les silicates de calcium hydratés ne semblent se carbonater qu'une fois que la portlandite a été consommée, du fait de leur plus faible pouvoir tampon, même si in fine leur carbonatation semble complète. [AUROY, 2015] montre sur des pâtes de ciment que la décalcification des CSH est plus importante lorsque la concentration initiale de portlandite est relativement faible.

#### *1.2.1.5. Dissolution des autres constituants des matériaux cimentaires*

Outre la portlandite et les silicates de calcium hydratés, la pâte de ciment est constituée notamment d'aluminates de calcium hydratés (C<sub>x</sub>AH<sub>y</sub>), de trisulfo-aluminates de calcium (A<sub>3</sub>T, ettringite) et de mono-sulfo-aluminates de calcium (AFm).

Les aluminates sont sensibles à la carbonatation. Des études indiquent qu'ils se carbonatent en produisant des carbonates de calcium, des hydroxydes d'aluminium et de l'eau [SAUMAN et al., 1972]. La carbonatation de l'ettringite et du mono-sulfo-aluminate de calcium produit du gypse est soluble dans l'eau.

### **1.2.2. Evolution des propriétés de la pâte de ciment**

La carbonatation ne présente pas d'effets directs particulièrement délétères sur la pâte de ciment, dont par exemple la résistance a plutôt tendance à augmenter sous l'effet de la formation de la calcite.

#### *1.2.2.1. Diminution de la porosité*

Au cours de la carbonatation, la microstructure de la pâte de ciment évolue avec une diminution de la porosité (une augmentation du volume de la phase solide). Le volume molaire de la calcite CaCO<sub>3</sub> quel que soit l'isomorphe considéré, est en effet plus important que celui de la portlandite. Cette

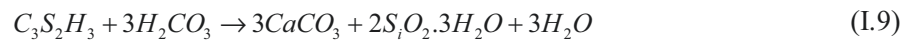
différence de volumes molaires s'applique également pour les produits initiaux et finaux de la carbonatation des CSH.

La variation de volume pour un volume molaire de pâte de ciment au cours du processus de carbonatation, en considérant seulement la participation de la portlandite et des CSH peut être déterminée par :

$$\Delta V = (V_{CaCO_3} - V_{Ca(OH)_2}) \times n_{CaCO_3} + \Delta V_{CSH} \times (n_{CSH} - n_{CSH,0}) \quad (I.8)$$

Où  $n_{CaCO_3} = n^0_{Ca(OH)_2,0} - n^i_{Ca(OH)_2}$ , est la teneur de  $CaCO_3$  formée à partir de  $Ca(OH)_2$ , en respectant la stœchiométrie de la réaction (1 mole de portlandite pour 1 mole de calcite) ;  $n^0$  et  $n^i$  sont respectivement les quantités initiale et finale de  $Ca(OH)_2$  dans la pâte de ciment.

La composition minéralogique des CSH peut varier sensiblement. Si elle est approximativement représentée par  $C_3S_2H_3$ , la réaction (I.7) devient :



Une mole de  $C_3S_2H_3$  correspond à la formation de 3 moles de  $CaCO_3$  et la formule (I.8) devient :

$$\Delta V = (V_{CaCO_3} - V_{Ca(OH)_2}) \times n_{CaCO_3} + \frac{1}{3} \Delta V_{CSH} \times n_{CaCO_3}^{CSH} \quad (I.10)$$

Dans les équations (I.8) à (I.10)  $V_{CaCO_3}$ ,  $V_{Ca(OH)_2}$ ,  $\Delta V_{CSH}$  correspondent respectivement aux volumes molaires de  $CaCO_3$ ,  $Ca(OH)_2$  (en moyenne  $V_{CaCO_3} = 37 \text{ cm}^3/\text{mol}$  et  $V_{Ca(OH)_2} = 33 \text{ cm}^3/\text{mol}$  d'après [PAPADAKIS, 1989]) et à la variation de volume molaire des CSH. Cette dernière grandeur est relativement mal maîtrisée. On peut l'estimer en minimisant l'écart entre les mesures de  $\Delta V$  et les valeurs calculées à partir de l'équation (I.10). On trouve ainsi une valeur optimale de  $\Delta V_{CSH}$  égale  $39 \text{ cm}^3/\text{mol}$ . Thiéry [THIERY, 2005] ont comparé, pour des bétons M25, M40 et M50, la baisse de porosité accessible à l'eau à celle calculée à partir de la formule (I.10) et notent une bonne concordance entre les mesures directes de  $\Delta V$  et les estimations par simulation numérique avec  $\Delta V_{CSH} = 39 \text{ cm}^3/\text{mol}$ .

De fait, la chute de porosité est fonction de la teneur en  $CaCO_3$  formée et elle évolue au cours de la carbonatation et en fonction de la composition chimique du ciment.

Les Tableaux I.1, I.2 et I.3 ainsi que la Figure I.4 présentent des résultats de détermination de la porosité de quelques bétons non carbonatés ou carbonatés. On constate que la baisse de la porosité peut être significative et dépasser 30%.

Type de béton	M25	B35	M50
Etat non carbonaté (%)	15,07	14,68	13,58
Etat carbonaté (%)	13,69	11,09	9,27
Variation	- 9,2%	- 24,5%	- 31,7%

**Tableau I.1. Porosité accessible à l'eau pour des bétons non carbonatés ou carbonatés [JAAFAR, 2003]**

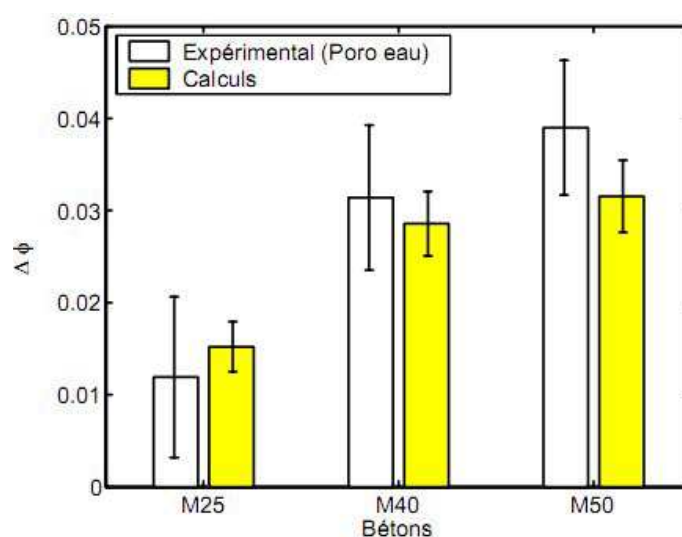
Type de béton	CEM I	CEM II	CEM III
Etat non carbonaté (%)	14,5	16,3	16,0
Etat carbonaté (%)	8,8	10,4	10,8
Variation	- 39,3%	- 36,2%	- 32,5%

**Tableau I.2. Porosité accessible à l'eau pour des bétons non carbonatés ou carbonatés [VU, 2011]**

Type de mortier	CEM I	CEM II	CEM III
Etat non carbonaté (%)	14,4	13,9	12,3
Etat carbonaté (%) (296 jours, naturelle)	12,9	12,2	11,3
Etat carbonaté (%) (157 jours, accélérée)	8,8	10,8	8,3

**Tableau I.3. Porosité accessible au mercure pour des mortiers non carbonatés ou carbonatés**

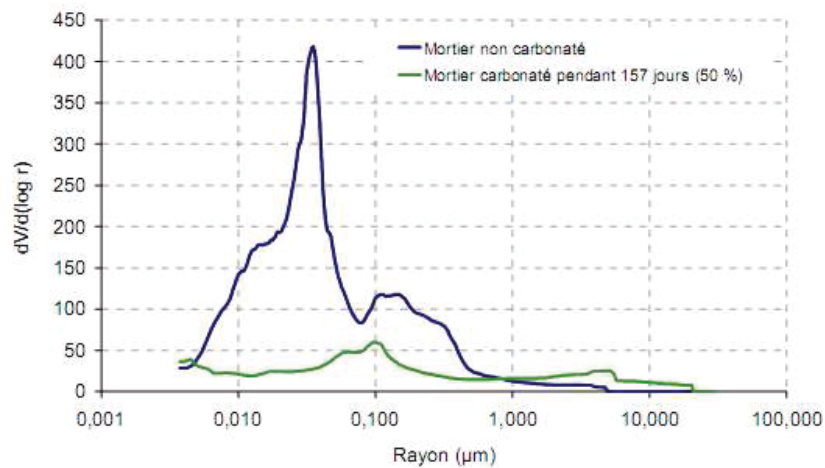
[HYVERT, 2009]



**Figure I.4. Variation de la porosité de différents bétons due à la carbonatation [THIERY, 2005]**

### 1.2.2.2. Modification de la distribution poreuse

La distribution de taille des pores est également fortement modifiée par la carbonatation. L'augmentation ou la diminution de la porosité totale, la disparition ou l'apparition d'une classe de taille de pores dépendent notamment du rapport E/C et sont relativement difficiles à interpréter. La Figure I.5 montre les résultats de porosimétrie mercure sur un mortier normalisé avant et après carbonatation accélérée [HYVERT, 2009]. On constate bien l'obturation des pores de diamètre inférieur à 1  $\mu\text{m}$ , tandis qu'un mode poral semble apparaître au voisinage de 5  $\mu\text{m}$ .



**Figure I.5. Evolution de la distribution poreuse avec la carbonatation d'un mortier normalisé à base de CEM I [HYVERT, 2009]**

Pour interpréter le changement de la distribution poreuse par la carbonatation, il existe deux explications principales rappelées par Thiéry [THIERY, 2005]:

- Eitel [EITEL, 1966] a indiqué que le gel siliceux de CSH qui se forme après la carbonatation est très poreux avec notamment des pores de rayon 200nm environ;
- Swenson et Sereda [SWENSON et al., 1968] signalent que l'apparition de cette macroporosité pourrait être la conséquence de fissures et de craquelures apparues entre les cristaux de  $\text{CaCO}_3$ , et autour des cristaux de  $\text{Ca(OH)}_2$ . L'eau libérée par la carbonatation peut diffuser le long de ces fissures en orientant des cristaux et éventuellement former ainsi un nouveau réseau poreux.

Bier et Kropp [BIER et al., 1987] ont renforcé la première explication par des observations sur des matériaux pauvres en  $\text{Ca(OH)}_2$ , à base de cendres volantes ou de laitiers. Mais Moorehead [MOOREHEAD, 1986] a appuyé la seconde théorie par la carbonatation accélérée des pâtes de chaux hydratée compactée. Donc, il est difficile de trancher entre ces deux explications. Il est probable qu'elles contribuent toutes les deux partiellement à la justification du phénomène observé.

### 1.2.2.3. La variation de pH

Au cours de la carbonatation, le pH de la solution interstitielle passe d'une valeur proche de 13 à une valeur inférieure à 9. Quand la majeure partie de la portlandite est consommée, le pH de la solution interstitielle diminue fortement. La réaction (I.4) :  $\text{Ca(OH)}_2 \rightarrow \text{Ca}^{2+} + 2\text{OH}^-$  se ralentit tandis que les réactions (I.1), (I.2), (I.3) continuent. La quantité d'ions  $\text{H}^+$  en solution augmente, et de ce fait le pH diminue. La mesure de la profondeur carbonatée  $X_c$  passe ainsi par celle du pH de la solution interstitielle. Afin d'éviter une mesure directe du pH, difficile à réaliser, on a recours à un indicateur coloré, comme la phénolphthaléine, dont le pH de virage est proche de celui du matériau carbonaté. Un front de carbonatation apparaît alors clairement (Figure I.6). Cependant la distinction entre zone carbonatée et zone non carbonatée n'est pas toujours aussi nette. Elle peut dépendre bien sûr de la qualité de la fracture réalisée pour la mesure, mais également du matériau lui-même. Vu montre ainsi que la notion de front est moins valable pour un béton confectionné à base de CEM III, comme l'illustre la Figure I.7 [VU, 2011]. Le lien entre la variation de pH et la proportion d'hydrates décalcifiés responsable de cette variation n'est pas aisé à déterminer. Dans le cas de la carbonatation naturelle, on peut établir une équivalence entre une consommation de 30% à 50% des hydrates initiaux et une baisse de pH jusqu'à une valeur inférieure à 9.

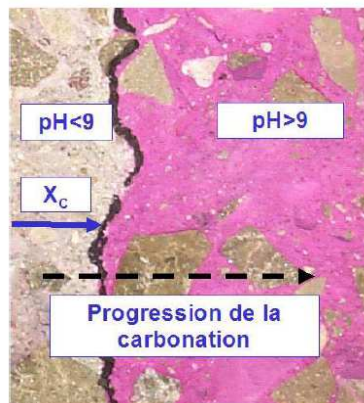


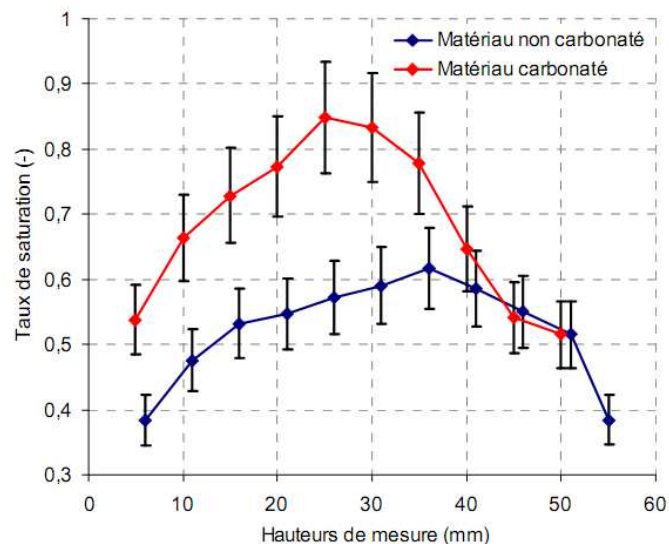
Figure I.6. Front de carbonatation détecté par projection de phénolphthaléine pour un béton à base de CEM I [THIERY, 2005]



**Figure I.7. Front de carbonatation détecté par projection de phénolphtaléine pour un béton à base de CEM III [VU, 2011]**

#### *I.2.2.4. L'augmentation de la teneur en eau*

La carbonatation induit une accumulation d'humidité dans les pores du fait de la libération d'une partie de l'eau de structure des hydrates. On observe expérimentalement sur un matériau carbonaté une augmentation de la teneur en eau évaporable par séchage à 105°C [PIHLAJAVAARAM, 1968], [SWENSON et al., 1968]. La carbonatation de la portlandite est la source principale de libération d'eau. Couplée à une réduction de la porosité l'accumulation d'humidité se traduit par une augmentation du taux de saturation, dans des conditions d'équilibre identique, comme l'illustre la Figure I.8.



**Figure I.8. Taux de saturation d'un échantillon de mortier normalisé à base de CEM I obtenu par gamma-densimétrie [HYVERT, 2009]**

Dans le cadre d'une approche simplifiée, le mécanisme réactionnel de carbonatation de  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  est synthétisé par la réaction suivante :





On constate par cette réaction que la carbonatation de la portlandite s'accompagne globalement d'une libération d'eau de structure.

L'eau qui provient des CSH est plus complexe à considérer : elle peut être intégrée au gel de silice formé ou peut rester piégée dans la microstructure des CSH.

#### *1.2.2.5. Evolution des propriétés du transfert*

##### *a. La perméabilité*

La perméabilité d'un matériau se définit comme son aptitude à se laisser traverser par un fluide (eau ou gaz par exemple) sous l'effet d'un gradient de pression. Elle est le paramètre principal de la loi de Darcy :

$$Q = -K \frac{A}{\mu} \frac{dP}{dz} \quad (I.12)$$

Où  $Q$  est le débit volumique du fluide ( $m^3/s$ ),  $\mu$  est la viscosité dynamique ( $Pa \cdot s$ ) ;  $K$  est la perméabilité du milieu ( $m^2$ ) ;  $A$  est l'aire apparente du matériau ( $m^2$ ) et  $dP/dz$  est le gradient de pression.

Klinkenberg a proposé une relation générale de l'écoulement des gaz à travers un milieu poreux :

$$K = K_{int} \left( 1 + \frac{\beta}{P_{moy}} \right) \quad (I.13)$$

avec 
$$P_{moy} = \frac{P_0 + P_{adm}}{2} \quad (I.14)$$

Où  $K_{int}$  est définie comme étant la perméabilité intrinsèque ;  $P_0$  est la pression atmosphérique ;  $P_{adm}$  est la pression absolue du milieu,  $\beta$  la constante de Klinkenberg [VILLAIN et al., 2001][JAAFAR, 2003], c'est-à-dire celle d'un fluide gaz ou liquide n'ayant aucune interaction avec la matrice solide. Dans le cas du béton, c'est généralement l'éthanol ou l'oxygène qui est utilisé.

La perméabilité intrinsèque est modifiée par la carbonatation. L'obturation de la porosité par les cristaux de calcite conduit le plus souvent à une réduction de la perméabilité mais la création d'un nouveau mode poral peut aussi se traduire par son augmentation dans le cas des bétons confectionnés avec un fort rapport E/C comme on peut le voir dans les Tableaux I.4 et I.5.

Type de béton	CEM I	CEM II	CEM III
Etat non carbonaté (m <sup>2</sup> )	0,2853×10 <sup>16</sup>	0,3120×10 <sup>16</sup>	1,5685×10 <sup>16</sup>
Etat carbonaté (m <sup>2</sup> )	0,5310×10 <sup>16</sup>	0,3304×10 <sup>16</sup>	1,6318×10 <sup>16</sup>
Variation	+ 86,1%	+ 5,9%	+ 4.0%

**Tableau I.4. Perméabilité à l'oxygène de bétons non carbonatés ou carbonatés [VU, 2011]**

Type de béton	M25	M40	M50
Etat non carbonaté (m <sup>2</sup> )	3,69±0,98×10 <sup>16</sup>	2,17±1,48×10 <sup>16</sup>	0,56±0,40×10 <sup>16</sup>
Etat carbonaté (m <sup>2</sup> )	8,00±2,77×10 <sup>16</sup>	0,91±0,38×10 <sup>16</sup>	0,57±0,38×10 <sup>16</sup>

**Tableau I.5. Perméabilité intrinsèque au gaz de bétons non carbonatés ou carbonatés [THIERY, 2005]**

*b. La diffusion*

La diffusion désigne le processus de transport d'un constituant dans un milieu donné sous l'effet de son agitation aléatoire à l'échelle moléculaire. S'il existe des différences de concentration entre deux points du milieu, il y aura un transport du constituant de la zone la plus concentrée vers la zone la moins concentrée. Les transports par diffusion peuvent se produire sous deux formes : en phase liquide (ions chlore, sulfates, calcium) et en phase gazeuse (oxygène, CO<sub>2</sub>). La modification de la structure poreuse des bétons par la carbonatation conduit naturellement à une modification de la diffusivité, qui a tendance à diminuer après carbonatation, aussi bien pour la phase liquide que pour la phase gazeuse.

En utilisant un échantillon d'épaisseur 2 cm, Hyvert [HYVERT, 2009] a identifié les coefficients de diffusion indiqués dans le Tableau I.6, où l'on voit que la diminution peut presque atteindre un ordre de grandeur.

Type de mortier	CEM I	CEM II	CEM III
Etat non carbonaté (m <sup>2</sup> /s)	1,5×10 <sup>-12</sup>	3,3×10 <sup>-12</sup>	0,8×10 <sup>-12</sup>
Etat carbonaté (m <sup>2</sup> /s)	0,2×10 <sup>-12</sup>	0,5×10 <sup>-12</sup>	0,3×10 <sup>-12</sup>

**Tableau I.6. Coefficient de diffusion des chlorures dans des mortiers normalisés carbonatés ou non carbonatés [HYVERT, 2009]**

*c. La tortuosité*

La tortuosité est définie par la relation :

$$\tau = \left( \frac{L}{L_e} \right)^2 \quad (\text{I.15})$$

Où  $L$  et  $L_e$  sont respectivement la longueur moyenne des lignes de courant traversant l'échantillon et celle de l'échantillon.

On remarque qu'après le processus de la carbonatation, la tortuosité diminue pour tous les bétons [JAAFAR, 2003].

### I.2.3. Paramètres influents sur la cinétique de carbonatation

#### I.2.3.1. Les paramètres de formulation de la pâte de ciment

##### a. Le rapport eau/ciment (E/C)

De nombreuses recherches ont été réalisées pour connaître l'influence du rapport E/C sur la vitesse de carbonatation, par exemple [VEUNAT et al., 1968], [DUVAL, 1992], [LOO, 1994], [BAROGHEL et al., 1994]. Le rapport E/C a une grande importance dans l'interconnexion du réseau poreux et donc sur la diffusivité des espèces gazeuses. Il détermine en grande partie la perméabilité, la teneur en eau et le degré d'hydratation du matériau. D'abord on constate que le rapport E/C exerce une grande influence sur la porosité de la pâte de ciment hydraté car il gouverne directement l'espacement initial entre les grains de ciment en suspension dans l'eau de gâchage. Avec un rapport E/C faible, les grains de ciment dans un volume unitaire sont nombreux et rapprochés, les espaces entre les grains de ciment sont moins grands et la réduction du rapport E/C permet non seulement de diminuer le volume total des pores capillaires, mais également de réduire leur diamètre. Donc pour un E/C plus faible la porosité capillaire est en fait constituée d'un réseau de pores plus fin et plus discontinu. Dans ces conditions, il n'est pas facile pour le dioxyde de carbone de pénétrer dans la pâte de ciment. D'autre part, quand les grains de ciment se rapprochent, la surface d'échange entre le dioxyde de carbone en solution et la matrice cimentaire diminue. De ce fait, le rapport E/C a une grande influence sur la vitesse de carbonatation, comme illustré sur la Figure I.9.

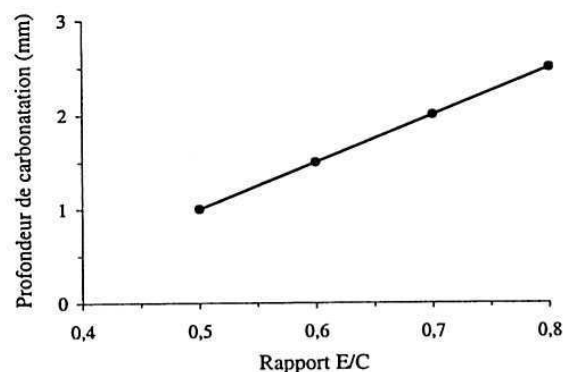


Figure I.9. Influence du rapport E/C sur la carbonatation des pâtes de ciment [BAROGHEL et al., 1994]

b. Le dosage en ciment

La migration du dioxyde de carbone gazeux à travers le système poreux du béton dépend de son dosage en ciment. L'épaisseur carbonatée diminue lorsque la teneur en ciment du béton augmente. Cette propriété s'explique par la compacité du matériau qui s'améliore lorsque le dosage en ciment du matériau est élevé. Cependant, ce paramètre est moins influent que le rapport E/C [LOO, 1994].

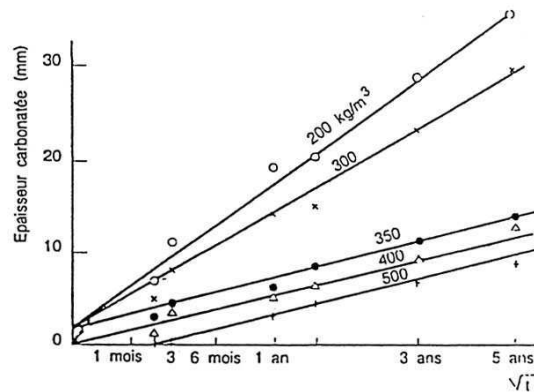


Figure I.10. Relation entre épaisseur carbonatée et dosage en ciment, extrait de [HYVERT, 2009]

I.2.3.2. Les caractéristiques de l'environnement

a. La teneur en dioxyde de carbone dans l'atmosphère

Il existe évidemment une étroite corrélation entre la concentration en CO<sub>2</sub> de l'atmosphère et la vitesse de carbonatation. Les épaisseurs carbonatées sont plus élevées dans les ambiances plus riches en CO<sub>2</sub>, comme le montrent les Figures I.11 à I.13 obtenues sur des mortiers normalisés. On constate que la profondeur carbonatée pour une pression partielle de 10% et de l'ordre de 3 fois (pour un mortier à base de CEM I) à 4 fois (pour un mortier à base de CEM II ou CEM III) plus élevée que pour une pression partielle atmosphérique (0,03%).

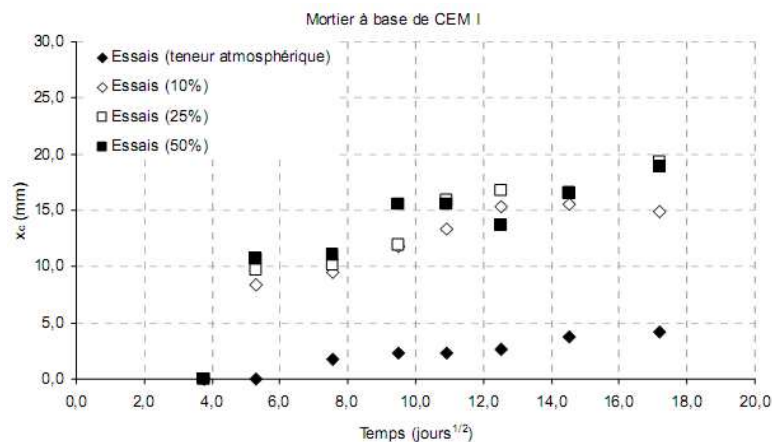


Figure I.11. Evolution dans le temps de l'épaisseur carbonatée mesurée pour le mortier à base de CEM I et pour les différentes teneurs de CO<sub>2</sub> [HYVERT, 2009]

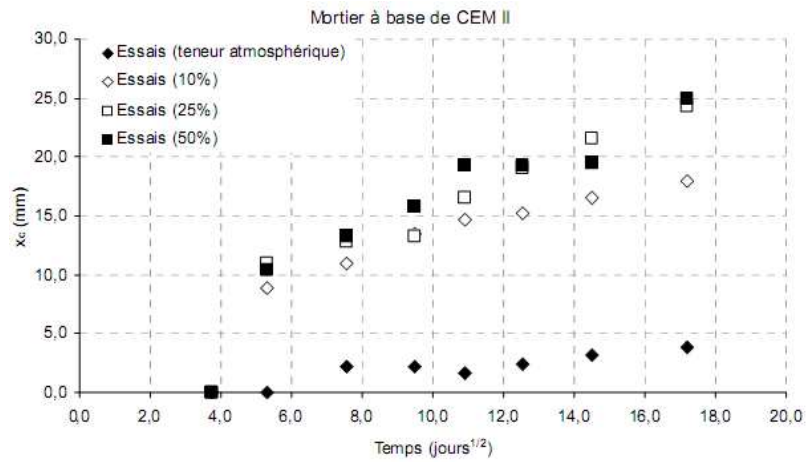


Figure I.12. Evolution dans le temps de l'épaisseur carbonatée mesurée pour le mortier à base de CEM II et pour les différentes teneurs de CO<sub>2</sub> [HYVERT, 2009]

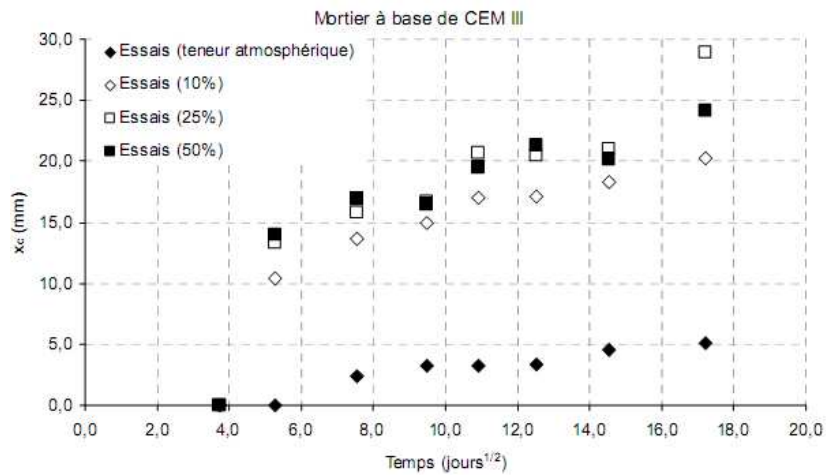


Figure I.13. Evolution dans le temps de l'épaisseur carbonatée mesurée pour le mortier à base de CEM III et pour les différentes teneurs de CO<sub>2</sub> [HYVERT, 2009]

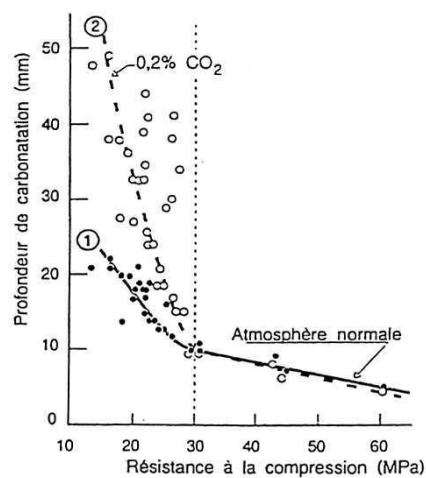


Figure I.14. Influence de la teneur en dioxyde de carbone sur la carbonatation [NISCHER, 1984]

La Figure I.14 montre que la sensibilité à la pression partielle de CO<sub>2</sub> est d'autant plus forte que la résistance est faible et seulement si la résistance est inférieure à 30 MPa. La différence de résistance pouvant cependant être liée à de nombreux paramètres ayant eux-mêmes une influence sur la carbonatation, il paraît difficile d'affirmer que cette tendance est générale. On note d'ailleurs que pour les mortiers discutés ci-avant, la résistance est supérieure à 50 MPa, ce qui contredit les résultats de la Figure I.14.

La loi de Henry (I.16) exprime la concentration de l'acide carbonique (H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) dans la solution en fonction de p<sub>CO<sub>2</sub></sub>, la pression partielle en CO<sub>2</sub> :

$$[H_2CO_3] = H \times p_{CO_2} \quad (I.16)$$

Où  $p_{CO_2} = \alpha_{CO_2} \times p_{atm}$  ;  $\alpha_{CO_2}$  est la fraction volumique en CO<sub>2</sub> dans l'atmosphère ;  $p_{atm}$  est la pression atmosphérique et  $H$  est la constante de Henry pour le CO<sub>2</sub> (mol/L/Pa). Elle dépend de la nature de l'électrolyte étudié et de la température. Pour une solution suffisamment diluée, on montre que  $H$  diffère peu de la constante de Henry  $H_0$  pour l'eau pure [DANCKWERTS, 1970].

Chaussadent [CHAUSSADENT, 1999] a montré la relation entre la fraction volumique du CO<sub>2</sub> et la concentration de CO<sub>2</sub> (mol/l) en phase gazeuse :

$$[CO_2] = \alpha_{CO_2} \times \frac{p_{atm}}{R \times T} \quad (I.17)$$

Donc, la quantité d'acide carbonique (H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) formé dans la solution interstitielle est fonction de la concentration en CO<sub>2</sub> dans l'atmosphère :

$$[H_2CO_3] = H_0 \times \alpha_{CO_2} \times p_{atm} = H_0 \times R \times T \times [CO_2] \quad (I.18)$$

#### *b. L'humidité relative*

La vitesse de carbonatation du béton dépend de la diffusion du dioxyde de carbone qui est également fonction de l'état hygroscopique des pores du matériau. Les études réalisées sur la carbonatation accélérée des bétons montrent que la vitesse maximale de carbonatation à 20°C pour les bétons traditionnels est obtenue pour une humidité relative comprise entre 50% et 70%.

Les faibles taux d'humidité relative correspondent à des niveaux minimaux en eau adsorbée sur la surface des pores, ce qui limite la solubilité du dioxyde de carbone. Au contraire, les fortes teneurs en eau correspondent à un degré de saturation élevé des pores, ce qui augmente la solubilité du dioxyde de carbone mais la quantité de CO<sub>2</sub> gazeux est d'autant plus faible que les pores sont saturés de liquide. Le coefficient de diffusion du dioxyde de carbone en phase liquide est 10<sup>4</sup> fois plus faible que sous forme

gazeuse [CHAUSSADENT, 1999]. Par conséquent, lorsque la structure poreuse du matériau est saturée d'eau, les processus de diffusion du dioxyde de carbone vers la surface des minéraux réactifs sont extrêmement faibles.

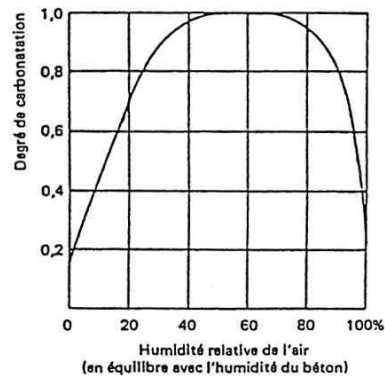


Figure I.15. Vitesse de carbonatation en fonction de l'humidité relative [VERBECK, 1958]

c. Température du milieu

L'effet de la température sur la vitesse de carbonatation est assez incertain. D'une part, une élévation de température accélère les réactions chimiques (thermo-activation selon la loi d'Arrhenius, qui permet de décrire la variation de la vitesse d'une réaction chimique en fonction de la température), d'autre part elle favorise le séchage des pores et ainsi l'accès du  $\text{CO}_2$  dans la matrice cimentaire. Cependant une augmentation de la température diminue aussi la solubilité du  $\text{CO}_2$  (diminution de la constante de Henry,  $H_0$ ) et réduit la concentration en  $\text{CO}_2$  dans la phase gazeuse suivant l'équation (I.17). D'après les travaux de Drouet, la profondeur de carbonatation augmente lorsque la température passe de  $20^\circ\text{C}$  à  $50^\circ\text{C}$  quelle que soit la formulation du béton [DROUET, 2010].

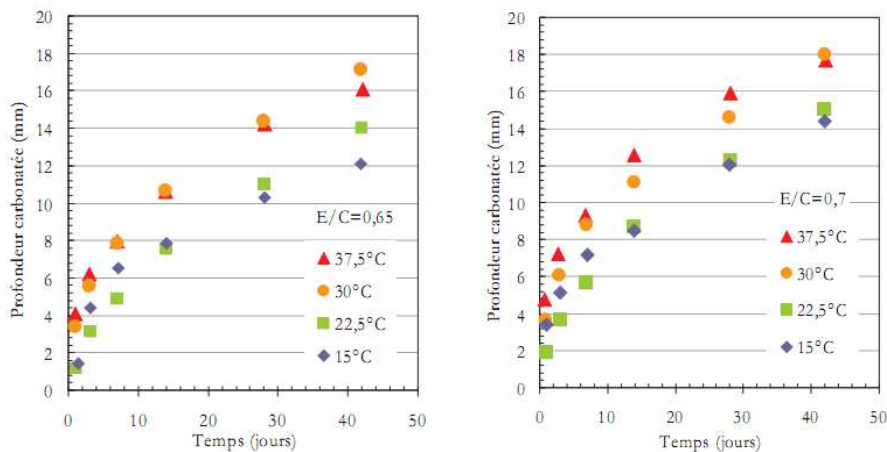


Figure I.16. Profondeur de carbonatation pour les températures différentes d'après les essais de [JOHN et al., 1990]

Les expérimentations de [JOHN et al., 1990] confirment l'effet de la température sur l'accroissement de la profondeur de carbonatation, comme l'illustre la Figure I.16.

### *I.3. Corrosion des armatures liées à la carbonatation*

#### **I.3.1 Processus physico-chimique**

La corrosion des aciers dans le béton est une réaction électrochimique, qui nécessite la présence simultanée de quatre milieux : une zone anodique (oxydation du fer), une zone cathodique (réduction d'espèces chimiques en solution : eau ou oxygène dissous), un milieu conducteur d'électrons (l'acier) et un milieu électrolytique (le liquide interstitiel du béton).

D'un point de vue général, la corrosion du fer implique deux réactions électrochimiques simultanées (qui sont deux demi-réactions d'oxydo-réduction). Une réaction d'oxydation du fer se produit en zone anodique :



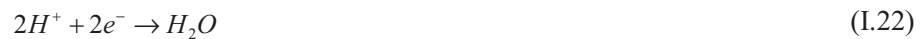
La réaction cathodique résulte de la consommation des électrons produits par la réaction d'oxydation. En présence d'oxygène, la réaction cathodique correspond à la réduction du dioxygène :



Et/ou :



En l'absence d'oxygène, le couple redox entrant en jeu est H<sub>2</sub>O (ou H<sup>+</sup>)/H<sub>2</sub> :



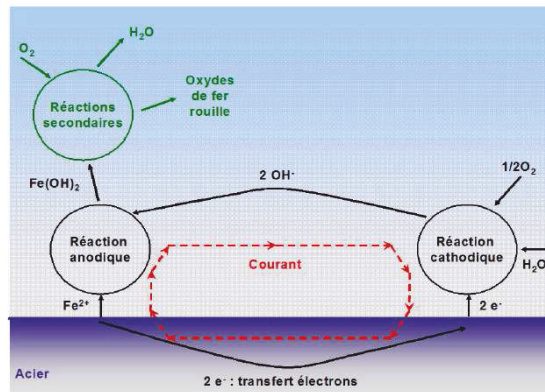
Et/ou :



Enfin, les ions hydroxydes OH<sup>-</sup> diffusent vers l'anode, où ils réagissent avec les ions Fe<sup>2+</sup> pour former des hydroxydes ferreux :







**Figure I.17. Représentation schématique de la réaction de corrosion des aciers [THIERRY, 2005]**

Compte tenu des équations de Nernst exprimant les potentiels d'équilibre des réactions d'oxydo-réductions à l'anode et à la cathode, il est possible de proposer une expression de la force électro-motrice de corrosion  $FE$  existant entre l'anode et la cathode (sur la base d'une température de 25°C et en supposant que l'électrode de référence est l'électrode standard à l'hydrogène) :

$$FE = 1,67 + 0,0148 \times \log[O_2] - 0,06 \times pH - 0,03 \times \log[Fe^{2+}] \quad (I.25)$$

Où  $[O_2]$  et  $[Fe^{2+}]$  sont les concentrations en mol/m<sup>3</sup>. Notons que l'équation (I.25) traduit un équilibre thermodynamique mais ne donne aucune information sur la cinétique de corrosion. Cette dernière peut être approchée par les équations de Butler-Volmer et de Tafel dans le cas de la corrosion uniforme par micro-pile.

### I.3.2 Phases d'évolution de la corrosion

Tuutti [TUUTTI, 1982] a été le premier à décrire l'évolution de la corrosion des armatures du béton armé, en suggérant deux phases :

1 - Une première phase où la corrosion est à l'état passif, l'acier est protégée par le film passif qui empêche la formation de rouille. Pendant cette période, les caractéristiques chimiques du béton autour de l'armature ne sont pas modifiées et la vitesse de corrosion des armatures reste négligeable. Ensuite, les agents agressifs pénètrent dans le béton et attaquent les armatures qui se dépassivent progressivement. Cette dépassivation peut être engendrée par la carbonatation et/ou la pénétration des ions chlorures. Cette phase est appelée « phase d'initiation du processus de corrosion ».

2 - Une deuxième phase où la corrosion est à l'état actif, les réactions d'oxydation à la surface de l'armature produisent des oxydes et hydroxydes qui modifient la composition de la solution interstitielle au voisinage de l'armature. La formation de ces produits d'oxydation va causer un gonflement et

apparaître des fissurations sur l'enrobage de béton et à long terme causé la destruction de la construction. Cette phase est appelée « phase de propagation du processus de corrosion ».

Dans cette modélisation est faite l'hypothèse que les conditions pour que la corrosion passe à l'état actif (humidité et présence de dioxygène) sont immédiatement présentes dès que les armatures sont dépassivées. Les propositions actuelles des recommandations internationales relatives à la conception des structures en béton adoptent également cette hypothèse dans la définition d'un état limite de durabilité [DURACRETE, 2000], [FIB, 2010]. Ainsi seule la première phase est considérée, car la corrosion est supposée active dès après la dépassivation. Il s'agit là d'une hypothèse excessivement conservatrice pour bien des ouvrages, pour lesquels la dégradation structurale due à la corrosion ne se manifeste que bien des années après la dépassivation des armatures. Il existe en réalité une période dite d'incubation de la corrosion pendant laquelle les processus d'activation de la corrosion se mettent en place une fois les armatures dépassivées. C'est pendant cette phase d'incubation que le démarrage effectif de la corrosion se produit : Vu a proposé de le caractériser de façon probabiliste à partir de mesures électrochimiques (potentiel de corrosion et résistance de polarisation) et gravimétriques de la masse de produit de corrosion [VU, 2011]. La Figure I.1 illustre ce modèle de corrosion en 3 phases. L'un des enjeux de la présente thèse est de pouvoir proposer une modélisation et une expression d'état limite de démarrage effectif de la corrosion, intégrant l'agrégation des conditions favorables à ce démarrage, et notamment une durée suffisamment importante de période à humidité optimale (ou pessimale en fonction du point de vue choisi).

### **I.3.3 Corrosion des armatures liées à la carbonatation**

À l'état sain, l'armature en acier est protégée par une couche d'oxydes de fer ou hydroxydes de fer formée lors de l'exposition de l'acier à l'environnement alcalin très basique du milieu cimentaire. Cette couche d'oxyde est donc stable dans la solution interstitielle alcaline du matériau. Après la carbonatation de la pâte de ciment, le pH de la solution interstitielle diminue, cette couche perd sa stabilité et l'armature est dépassivée.

Quand la corrosion est initiée, se forment à la surface de l'acier les anodes et cathodes des piles de corrosion. Des anodes apparaissent aux lieux de potentiels électrochimiques bas, ce sont les lieux où le pH de la solution diminue. Des cathodes apparaissent aux lieux de potentiels plus élevés [HANSSON et al., 2006]. Du fait de la disposition variable des granulats, de la variabilité de la composition de la pâte de ciment et de ses propriétés de transfert, la profondeur de carbonatation n'est pas uniforme le long d'une même barre, et la différence de pH qui en résulte induit une variation de potentiel. Entre l'anode et la cathode, des électrons vont se déplacer depuis le point qui a le potentiel le plus bas vers celui dont le

potentiel est le plus élevé. On réalise alors une pile électrolytique, si l'électrolyte présent permet la migration des ions.

Lorsque deux électrodes sont placées dans des électrolytes différents, la réaction de corrosion se produit entre deux électrodes (l'anode et la cathode) et forme des hydroxydes ferreux  $\text{Fe}(\text{OH})_2$  qui ne sont généralement pas stable. La nature des produits formés par la suite dépend des conditions de pH, d'oxygénation de l'eau, des ions présents en solution et de la valence de l'atome de fer.

Parmi les produits de corrosion, les plus courants sont l'hydroxyde ferreux  $\text{Fe}(\text{OH})_2$ , la magnétite  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , la lépidocrocite  $\gamma\text{-FeOOH}$ , la goéthite  $\alpha\text{-FeOOH}$ , la sidérite  $\text{FeCO}_3$  (dans les zones où le béton est déjà carbonaté) et les rouilles vertes (ou Green Rust GR). Les rouilles vertes, les oxydes de fer de valence II/III sont des espèces intermédiaires qui interviennent dans la ré-oxydation des oxydes de fer de valence II [NASSER, 2010]. Elles sont synthétisées en solution carbonatée faiblement alcaline (pH = 8 à 9). Selon la nature des espèces en solution aqueuse, les rouilles vertes enrichies en chlorures (GR1) ou en sulfates (GR2) peuvent se former [HUET, 2005]. Il s'agit de composés solides en suspension, apparaissant sous forme de gel, éventuellement susceptible de pénétrer dans la porosité de la pâte de ciment (par la diffusion ou la perméabilité), et ils sont très instables. Ces composés sont les plus expansifs parmi les différentes variétés d'oxydes de fer que l'on peut trouver en milieu cimentaire.

### **I.3.4 Paramètres influents sur la cinétique de corrosion**

#### *I.3.4.1. La carbonatation de la pâte de ciment*

La chute de potentiel des armatures liée à l'abaissement du pH du fait de la carbonatation est significative comme le montrent les résultats de Vu [VU, 2011]. Ainsi, dans le cas d'éprouvettes en béton à base de CEM III exposées à des cycles d'humification-séchage après 83 jours d'exposition, le potentiel libre de corrosion par rapport à l'électrode standard à l'hydrogène est -17,87 mV avant dépassivation (enrobage non carbonaté) alors qu'il atteint -344,70 mV après dépassivation (enrobage carbonaté) [VU, 2011]. Comme le montre le diagramme de Pourbaix de la Figure I.18, l'acier entre dans le domaine de corrosion en passant d'un potentiel de -17,87 mV à pH 12-13 à un potentiel de -344,70 mV à pH 8-9.

En outre le diagramme de Pourbaix met en évidence plusieurs domaines :

- Zone de stabilité : l'hématite ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ) et la magnétite ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) sont présentes initialement sur l'armature. Elles sont stables dans un milieu basique comme la solution interstitielle avant la carbonatation.
- Zone d'immunité : il n'y a pas de réaction d'oxydation, le fer est stable.

- Zone de corrosion : le fer est soluble sous forme d'ion  $Fe^{2+}$  quand le pH diminue. Les réactions d'oxydation correspondant au phénomène de corrosion sont possibles.

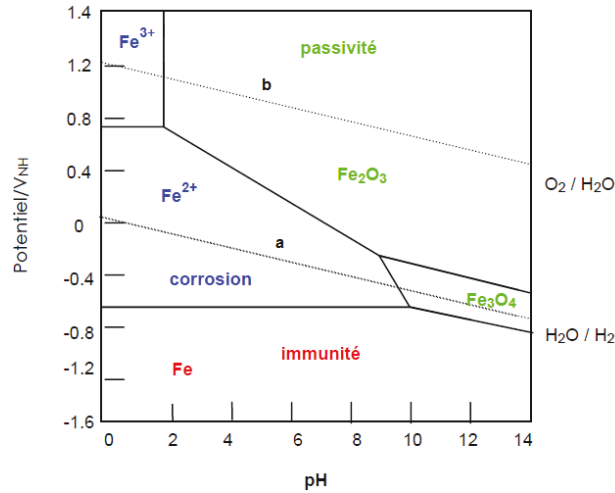
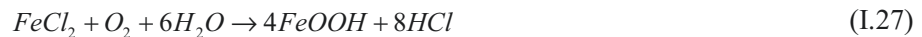


Figure I.18. Diagramme simplifié de Pourbaix pour le système Fe – H<sub>2</sub>O à 25°C extrait de [NASSER, 2010]

#### I.3.4.2. La présence de chlorures

En présence de l'eau et de l'oxygène, les chlorures forment de l'acide chlorhydrique :



Cet acide détruit le film passivant qui protège le métal. La destruction de cette protection se produit localement sur les surfaces les plus sensibles, ce qui conduit à l'apparition de piqûres qui correspondent à l'apparition de macro-piles dans lesquelles la surface de la cathode est supérieure à celle de l'anode, avec un pH très bas d'environ 4 à 5 [CHEN et al., 2008].

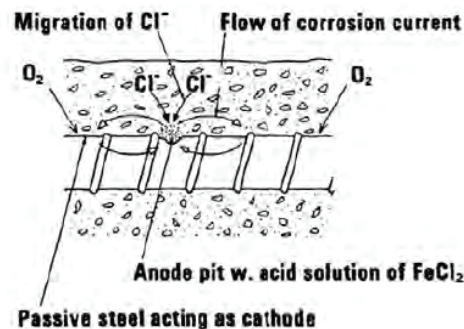


Figure I.19 Schéma électrochimique de la corrosion par piqûre [ARUP, 1983]

#### 1.3.4.3. L'humidité relative

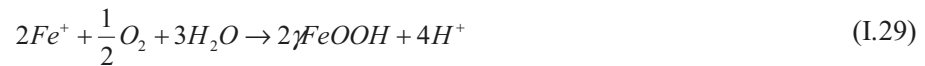
L'humidité relative a une grande influence sur la vitesse de corrosion. L'eau a un rôle important pour dissoudre et transporter l'oxygène (aussi bien que les chlorures) influençant la cinétique du processus de corrosion.

En effet, l'eau est nécessaire à toutes les étapes de la formation des produits de corrosion :

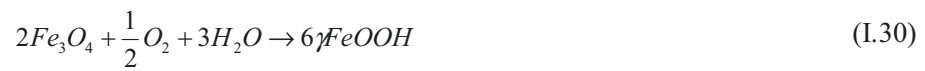
- La réduction de l'oxygène à la cathode en milieu aqueux selon l'équation (I.20). Cette réaction permet d'établir le circuit des charges électriques portées par les ions entre l'anode et la cathode.
- L'oxydation des hydroxydes de fer II forme hydroxyde de fer III:



- La formation la 'rouille'  $\gamma$ -FeOOH (lépidocrocite) à l'anode:



- la réaction entre la magnétite avec l'oxygène de l'air pour reformer  $\gamma$ -FeOOH:



Cependant lorsque l'humidité est très élevée, d'une part l'accessibilité de l'oxygène aux sites réactifs est très réduite (le coefficient de diffusion de l'oxygène dissous est inférieur à  $0,3 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ ), et d'autre part le courant d'échange cathodique est limité par la diffusion de l'oxygène. La vitesse de corrosion se ralentit. Au contraire, en cas de séchage important, il n'y a pas d'eau pour dissoudre l'oxygène. À l'anode, il y a alors un blocage progressif de la réaction, la concentration en hydroxydes s'atténue et la vitesse de corrosion devient très faible. À la cathode, le circuit des charges électriques ne peut pas se former.

Les études de Enevoldsen ont montré qu'un certain degré critique l'humidité relative existe, voisin de 60% au-dessous duquel aucune corrosion notable ne se produit [ENEVOLDSEN et al., 1994]. La vitesse de corrosion est maximale pour une humidité relative de 95% [TUUTTI, 1982].

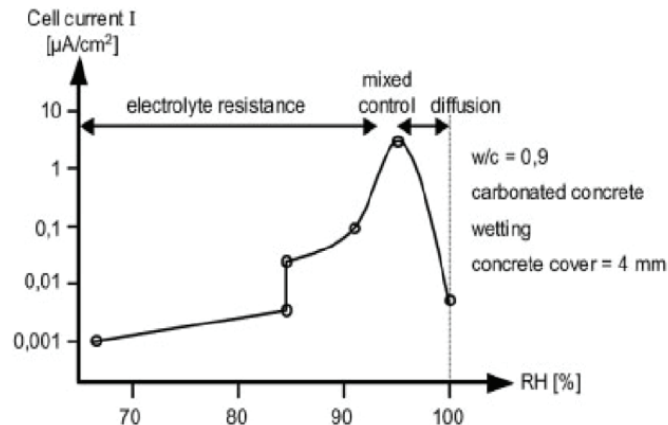


Figure I.20. Evolution de la vitesse de corrosion en fonction de l'humidité relative [TUUTTI, 1982]

#### I.3.4.4. Sulfates et silicates

Le processus de corrosion dépend de la quantité de sulfates et de silicates dans la solution interstitielle, mais les réactions chimiques avec ces composés sont très complexes.

### I.3.5 Impact de la corrosion des armatures

#### I.3.5.1. Diminution progressive de la section des armatures

La corrosion conduit à une diminution progressive de la section des armatures. La perte de poids d'acier par unité de surface au cours du temps est pilotée par la vitesse de corrosion de l'acier :

$$\Delta m_{lan} = \frac{V_{corr}}{A \times \rho} \quad (\text{I.31})$$

Où  $\Delta m_{lan}$  est la perte de masse (g/an) ;  $V_{corr}$  est la vitesse de corrosion (cm/an) ;  $A$  est la surface du métal corrodé ( $\text{cm}^2$ ) et  $\rho$  est la densité du fer ( $\text{g}/\text{cm}^3$ )

La loi de FARADAY permet de relier le courant de corrosion à cette perte de masse :

$$\Delta m = \frac{M \times I_{corr} \times t}{n \times F} \quad (\text{I.32})$$

Où  $M$  est la masse atomique du métal (g/mol) ;  $I_{corr}$  est le courant de corrosion (A) ;  $t$  est le temps de corrosion (s) ;  $n$  est le nombre d'électrons de valence et  $F$  est la constante de Faraday (96500 C/mol).

Les résultats de l'essai de perte de masse de Nasser sur les échantillons en milieu aéré, à  $H_r$  (%) contrôlée [NASSER, 2010] sont donnés dans le Tableau I.7. La durée d'essai étant identique, on constate que le courant de corrosion est accru de 20% lorsque l'humidité relative passe de 80% à 95%, ce qui ne

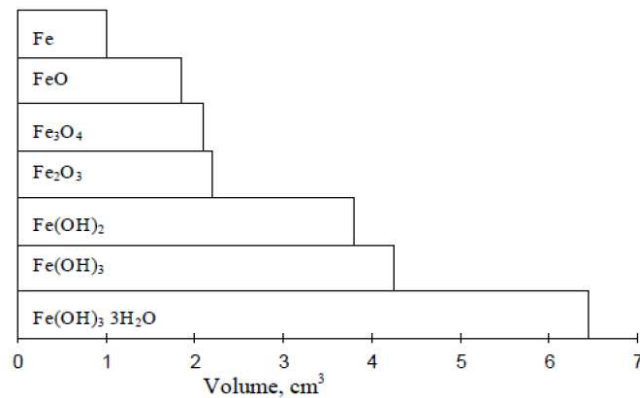
correspond pas exactement à la variation portée sur la courbe I.20, où l'augmentation de la densité du courant de corrosion est dans un rapport 1000 pour les mêmes humidités relatives.

Éprouvette	La masse initiale du métal $m^0$ (mg)	La masse du métal après un an de corrosion $m^1$ (mg)	$\Delta m$ (mg)
HR80	48 232,4	48 068,5	163,9
HR90	48 310,1	48 122,6	187,5
HR95	48 315,1	48 118,4	196,7

**Tableau I.7. Perte de masse des échantillons conservés un an en  $H_r$ (%) [NASSER, 2010]**

### I.3.5.2. Apparition de contraintes locales de traction dans le béton d'enrobage

La formation des produits de corrosion engendre des contraintes locales de traction dans le béton d'enrobage. En effet, tous les produits de corrosion ont un volume plus important que le métal à l'état initial comme l'illustre la Figure I.21. Même si certaines formes de ces produits, par leur faible raideur, permettent à l'expansion volumique d'occuper les vides, puis l'espace des fissures une fois qu'elles sont apparues (ce qui atténue la pression et la traction sur le béton), le résultat à long terme reste identique. Les produits de corrosion peuvent engendrer la fissuration du béton d'enrobage et provoquer l'écaillage du béton de surface. En outre, la fissuration ainsi provoquée est un trajet de diffusion préférentiel pour les espèces agressives de l'environnement de la structure considérée.



**Figure I.21. Volume relatif du fer et des produits de corrosion [LIU et al., 1996]**

En plus, les produits de corrosion qui se forment à l'interface de l'acier et du béton constituent une couche friable et stratifiée pouvant entraîner une perte d'adhérence des armatures.

## *I.4. Modélisation de la carbonatation*

### **I.4.1. Stratégies de modélisation**

La modélisation de la carbonatation doit permettre de couvrir l'ensemble des phénomènes qui se produisent lors de la carbonatation, leurs interactions ainsi que l'interaction avec les conditions extérieures. Il s'agit donc de considérer :

- La diffusion du dioxyde de carbone en phase gazeuse, sa dilution en phase liquide, son effet sur les cinétiques de réaction et sa consommation par la formation de calcite ;
- Les transferts hydriques en phase gazeuse et en phase liquide, la production d'eau par les différentes réactions et les conditions d'équilibre avec l'ambiance extérieure ;
- Les réactions de décalcification des différents hydrates de la pâte de ciment et leurs cinétiques propres ;
- La réaction de production de calcite et sa cinétique ;
- La conservation des espèces ioniques dans la solution interstitielle ;
- Le transfert thermique, la thermoactivation des réactions et l'équilibre avec l'ambiance extérieure ;
- Les effets de colmatage de la porosité et leur traduction sur la diffusivité des espèces.

De nombreux modèles ont été développés pour estimer la profondeur de carbonatation du béton se distinguant notamment par la complétude des approches mais aussi par les objectifs visés.

Les modèles simplifiés comme le modèle de Ying-Yu et Qui-Dong [YIN, 1987], de Papadakis [PAPADAKIS et al., 1991], de Bakker [BAKKER, 1993], de CEB code [CEB, 1997], de Duracrete [DURACRETE, 1999], de Miragliotta [MIRAGLIOTTA, 2000], d'Oxand [PET, 2001], de Hyvert [HYVERT, 2009] ont été établis avec l'objectif de fournir des outils pour l'ingénieur combinant la pertinence d'estimation de la profondeur carbonatée avec une certaine facilité d'emploi, notamment dans le nombre de paramètres d'entrée à fournir. Ils sont généralement basés sur l'hypothèse d'une variation linéaire de pression partielle de CO<sub>2</sub> depuis la surface du matériau jusqu'au front de carbonatation où cette pression s'annule, ce qui conduit à une solution mathématique en racine carrée du temps.

Les modèles avancés comme le modèle de Thiéry [THIERY, 2005], de Bary [BARY et al., 2004], de Saetta [SAETTA et al., 1995], de Mai-Nhu [MAI-NHU, 2013], de Burkan-Isgor [BURKAN ISGOR et al., 2002] ont permis d'affiner les connaissances sur les phénomènes et ont été proposés comme outils



pour le chercheur. Ces modèles avancés ont toutefois recours, comme les modèles simplifiés, à des hypothèses simplificatrices.

Le Tableau I.8 résume les principales caractéristiques de certaines modélisations [CERIB, 2007].

Modèles	Ying-Yu et Qui-Dong	Papadakis, Vayenas et Fardis	Al-Akchar, Baroghel-Bouny et Raharinaivo	Bakker	Oxand	Saetta, Schrefler et Vitaliani	Miragliotta	Task group 5.1 du CEB	Bary et Sellier	Thiéry
<b>Paramètres</b>										
Cinétique chimique de carbonatation de $\text{Ca}(\text{OH})_2$			X			X			X	X
Diffusivité du $\text{CO}_2$	X	X	X	X		X	X	X	X	X
Transport de l'eau en phase aqueuse ou gazeuse				X		X			X	X
<b>Conditions initiales</b>										
$F_{\text{cm},28}$					X					
Teneur en $\text{Ca}(\text{OH})_2$	X	X	X	X			X	X	X	X
Teneur en CSH		X					X		X	X
Teneur en $\text{C}_3\text{S}$		X					X		X	
Teneur en $\text{C}_2\text{S}$		X					X		X	
Taux de saturation		X					X		X	X
Profil de saturation						X			X	X
Porosité		X				X			X	X
Profil de porosité							X		X	X
<b>Conditions aux limites</b>										
Humidité relative extérieure				X	X	X		X		X
Température						X				
<b>Sorties du modèle</b>										
Front de carbonatation	X	X	X	X	X		X	X		X
Profil pH						X				X
Profil de concentration en $\text{Ca}(\text{OH})_2$ et $\text{CaCO}_3$						X				X
Carbonatation naturelle (cycles humidification/séchage)				X		X				X

Tableau I.8. Comparaison des principaux modèles de carbonatation [CERIB, 2007]

## I.4.2. Modélisation simplifiée

### I.4.2.1. Le modèle de Ying-Yu et Qui-Dong [YIN, 1987]

Ce modèle concerne la carbonatation naturelle autant que la carbonatation accélérée, avec les hypothèses simplificatrices suivantes :

- La progression du front de carbonatation s'effectue dans un matériau homogène avant carbonatation ;
- Le matériau peut être schématisé en trois zones distinctes : la zone carbonatée, la zone en cours de carbonatation et la zone non carbonatée.

La profondeur de carbonatation  $X_c$  (m) est déterminée selon :

$$X_c = a + \left( \frac{2 \times D_c \times P_{CO_2}}{k \times \rho} \times t \right)^{1/2} \quad (I.33)$$

Où  $a$  est un paramètre empirique ;  $D_c$  est le coefficient de diffusion du  $CO_2$  dans le matériau ( $m^2/s$ ) ;  $P_{CO_2}$  est la pression partielle de  $CO_2$  dans la phase gazeuse (Pa) ;  $k$  est la quantité de  $CO_2$  absorbée ( $m^3/kg$ ) ;  $\rho$  est la masse volumique ( $kg/m^3$ ) ;  $t$  est le temps (s).

Ce modèle se limite à la seule pénétration du dioxyde de carbone sans tenir compte de la complexité des réactions chimiques entre les hydrates et la phase aqueuse.

### I.4.2.2. Le modèle de Papadakis, Vayenas et Fardis [PAPADAKIS et al., 1991]

Ce modèle repose sur les hypothèses suivantes :

- La réaction de carbonatation est infiniment plus rapide que la diffusion de  $CO_2$  dans le béton ;
- La quantité de  $CO_2$  dissoute dans la solution interstitielle de la matrice cimentaire est très inférieure à la quantité de matière carbonatable ( $Ca(OH)_2$ , CSH,  $C_2S$  et  $C_3S$ ).

La profondeur de carbonatation  $X_c$  (mm) en fonction du temps (s) est :

$$X_c = \left( \frac{2 \times D_c \times [C]}{[CH]_0 + 3[CSH]_0 + 3[C_3S]_0 + 2[C_2S]_0} \times t \right)^{1/2} \quad (I.34)$$

Où  $D_c$  est le coefficient de diffusion effectif du  $CO_2$  dans le béton carbonaté ( $m^2/s$ ) ;  $[C]$  est la concentration en  $CO_2$  dans la phase gazeuse au contact du béton ( $mol/m^3$ ) ;  $[composé]_0$  est la concentration initiale des hydrates (CH, CSH) et des anhydres ( $C_2S$ ,  $C_3S$ ) dans le béton ( $mol/m^3$ ).

Ce modèle prend en compte les hydrates formés et les anhydres qui peuvent subir potentiellement une carbonatation. L'accessibilité de ces anhydres n'est pas questionnée, bien qu'on puisse penser qu'elle soit de plus en plus réduite au fur et à mesure que la calcite se développe. La porosité finale est estimée et impacte la diffusivité du milieu par un facteur correctif du coefficient de diffusion du CO<sub>2</sub> intégrant également l'effet de l'humidité relative. Ce modèle a été largement corroboré par les expérimentations menées par ses auteurs dans le cas de la carbonatation accélérée

#### I.4.2.3. Le modèle de Bakker [BAKKER, 1993]

Dans ce modèle, le calcul de la profondeur de carbonatation ne s'effectue pas avec l'âge réel du matériau. L'âge du béton pris en compte dans les calculs est le temps d'exposition du matériau auquel on soustrait la somme des périodes d'humidification trop forte pour permettre l'avancée de la carbonatation. La profondeur de carbonatation  $X_c$  (m) peut donc être calculée après  $n$  cycles d'humidification/séchage d'après l'expression :

$$X_c = A \times \sum_{i=1}^n \left( t_{di} \times \frac{x_{ci-1}}{B} \right)^{1/2} \quad (\text{I.35})$$

Où  $t_{di}$  est la durée de la  $i^{\text{ème}}$  période de séchage (années) ;  $x_{ci}$  est la profondeur de carbonatation après la  $(i-1)^{\text{ème}}$  période d'humidification (m) ;  $A$  est l'évolution de la profondeur de carbonatation (m) :

$$A = \left( \frac{2 \times D_c \times \Delta[C]}{a} \right)^{1/2} \quad (\text{I.36})$$

$B$  est la position du front de séchage (m) :

$$B = \left( \frac{2 \times D_v \times \Delta[C_p]}{b} \right)^{1/2} \quad (\text{I.37})$$

Dans les expressions de  $A$  et  $B$  ;  $D_c$  est le coefficient de diffusion effectif du CO<sub>2</sub> dans le béton (m<sup>2</sup>/s<sup>1</sup>) ;  $D_v$  est le coefficient de diffusion effectif de la vapeur d'eau dans un béton (m<sup>2</sup>/s<sup>1</sup>) ;  $\Delta[C]$  est la différence de concentration en CO<sub>2</sub> entre le milieu extérieur et le béton (kg/m<sup>3</sup>) ;  $\Delta[C_p]$  est la différence de concentration en vapeur d'eau entre le milieu extérieur et le front d'évaporation (kgH<sub>2</sub>O/m<sup>3</sup>) ;  $a$  est la quantité de substance pouvant se carbonater dans le béton (kg/m<sup>3</sup>) ;  $b$  est la quantité d'eau évaporable dans un béton (kg/m<sup>3</sup>).

Le modèle de Bakker a été défini pour évaluer le degré de carbonatation d'un béton soumis à des conditions climatiques variables dans le temps. Ce modèle prend en compte les cycles de mouillage et de séchage du béton exposé en milieu naturel.

#### I.4.2.4. Le modèle du Task Group 5.1 du CEB [CEB, 1997]

Dans ce modèle, la profondeur de carbonatation  $X_c$  (m) en fonction du temps  $t$  (s) d'exposition est donnée par :

$$X_c = \left( \frac{2 \times k_c \times k_e \times D_C \times [C]}{a} \times t \right)^{1/2} \times \left( \frac{t_0}{t} \right)^n \quad (\text{I.38})$$

Où  $D_C$  est le coefficient de diffusion effectif du  $\text{CO}_2$  dans le béton ( $\text{m}^2/\text{s}^1$ ) ;  $a$  est la quantité de  $\text{CO}_2$  nécessaire à la carbonatation complète du matériau faisant intervenir la quantité de portlandite disponible ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) ;  $[C]$  est la concentration en  $\text{CO}_2$  à la surface du matériau ( $\text{kgCO}_2/\text{m}^3$ ) ;  $k_c$  et  $k_e$  sont les paramètres permettant de prendre en compte respectivement les conditions de cure du béton et les conditions climatiques du béton (en particulier le taux de saturation moyen) ;  $n$  est le paramètre permettant de prendre en compte l'orientation et la localisation de la structure de béton ;  $t_0$  est la période de référence (prise égale à un an).

Ce modèle présente l'avantage de considérer certains aspects du processus de fabrication (notamment la cure) et des conditions environnementales (cycles d'exposition à la pluie et de séchage, orientation de la structure). Il a été intégré au Model Code 2010 de la FIB.

#### I.4.2.5. Le modèle Duracrete [DURACRETE, 1999]

La profondeur de carbonatation  $X_c$  (m) est exprimée :

$$X_c = \left( \frac{2 \times k_c \times k_e \times D_C \times \Delta[C]}{a} \times t \right)^{1/2} \times \left( \frac{t_0}{t} \right)^w \quad (\text{I.39})$$

Où  $D_C$  est le coefficient de diffusion effectif du  $\text{CO}_2$  dans le béton à la période de référence  $t_0$  ( $\text{m}^2/\text{s}^1$ ) ;  $a$  est la quantité de  $\text{CO}_2$  nécessaire à la carbonatation complète du matériau ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) ;  $\Delta[C]$  est la différence de concentration en  $\text{CO}_2$  entre le matériau au niveau du front de carbonatation et le milieu extérieur ( $\text{mol}/\text{m}^3$ ) ;  $k_c$  et  $k_e$  sont les mêmes paramètres que dans le modèle Task Group 5.1 du CEB ;  $n$  est la quantité d'eau contenue dans le béton ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) ;  $t_0$  est la période de référence.

Dans la relation (I.39) la résistance à la carbonatation naturelle  $R_{NAC,0}$  peut être introduite, étant égale au rapport  $a/D_C$ . Il est proposé d'estimer cette dernière à partir de la résistance à la carbonatation accélérée, selon la relation :

$$\frac{1}{R_{NAC,0}} = \frac{k_t}{R_{ACC}} + \varepsilon_t \quad (\text{I.40})$$

Où  $R_{NAC,0}$  est la résistance d'un béton à la carbonatation déterminée dans des conditions hydriques constantes ( $H_r = 65\%$ ) et par le biais d'un essai de carbonatation naturelle ;  $R_{ACC}$  est la résistance d'un béton à la carbonatation déterminée par le biais d'un essai de carbonatation accélérée ;  $k_t$  est un paramètre de régression considérant l'influence du mode opératoire utilisé pour l'essai accéléré ;  $\varepsilon_t$  est un terme d'erreur qui prend en compte l'écart aléatoire que l'on pourrait constater en considérant une corrélation entre le résultat d'un essai accéléré et celui d'un essai naturel.

#### I.4.2.6. Le modèle de Miragliotta [MIRAGLIOTTA, 2000]

Ce modèle fait intervenir, comme le modèle de Papadakis, à la fois les hydrates et les anhydres susceptibles d'être carbonatés. Parmi ces derniers sont également considérés les aluminates de calcium. La porosité du béton, ainsi que son taux de saturation, sont explicitement pris en compte. La profondeur de carbonatation  $X_c$  (m) est exprimée par :

$$X_c = \left( \frac{2 \times \phi \times (1 - S_r) \times D_C \times [C]}{(1 - \phi) \times ([CH]_0 + 3[CSH]_0 + 3[C_3S]_0 + 2[C_2S]_0 + 4[C_4AF]_0 + [C_3A]_0)} \times t \right)^{1/2} \quad (I.41)$$

Où  $\phi$  est la porosité totale du béton ;  $S_r$  est le degré de saturation du matériau ;  $D_C$  est le coefficient de diffusion effectif du  $CO_2$  dans le béton ( $m^2/s^1$ ) ;  $[C]$  est la concentration atmosphérique du  $CO_2$  ( $mol/m^3$ ) ;  $[composé]_0$  est la concentration initiale des hydrates et des anhydres dans le béton ( $mol/m^3$ ). Ce modèle a été validé par une large campagne expérimentale sur des essais en carbonatation accélérée.

#### I.4.2.7. Le modèle Oxand [PET, 2001]

Ce modèle comprend peu de paramètres, et ils sont généralement disponibles, ce qui rend ce modèle facilement applicatif dans une pratique quotidienne d'ingénierie. La profondeur carbonatée  $X_c$  (m) est exprimée par :

$$X_c = \gamma \times f(H_r) \times k(R_c) \times \sqrt{t} \quad (I.42)$$

Où  $\gamma$  est le coefficient d'exposition prenant en compte des conditions extérieures (teneur en  $CO_2$ , humidité relative) ;  $H_r$  est l'humidité relative supposée en équilibre avec le béton, sur la profondeur de carbonatation ;  $k(R_c)$  est le coefficient de transport du béton ( $m/an^{0,5}$ ) ;  $t$  est le temps (années). Les fonctions  $f(H_r)$  et  $k(R_c)$  ont respectivement pour expressions :

$$f(H_r) = 0,2 + 3,4833 \times H_r - 3,5833 \times H_r^2 \quad (I.43)$$

$$k(R_c) = 365^{1/2} \times \left( (2.1 \times R_c^{1/2})^{-1} - 0,06 \right) \quad (I.44)$$

#### 1.4.2.8. Le modèle de Hyvert [HYVERT, 2009]

Ce modèle permet d'estimer la profondeur de carbonatation pour n'importe quelle valeur de pression partielle de CO<sub>2</sub>, en intégrant son effet quant à la susceptibilité des gels de CSH vis-à-vis de la carbonatation. La diffusivité et la quantité de matériau carbonatable sont ainsi modifiées par la pression partielle. Ce modèle a été validé expérimentalement sur des essais à différentes pressions et pour différents mortiers normalisés. La profondeur de la zone carbonatée  $X_c$  (m) est déterminée par :

$$X_c = \left( \frac{2 \times k_e \times k_c \times D_C \times P_{CO_2}}{1000 \times R \times T \times V_p \times \left( 1 + \alpha \times C2 \times \left( \frac{P_{CO_2}}{P_{atm}} \right)^n \right) \times \left( \frac{C2}{n+1} \times \left( \frac{P_{CO_2}}{P_{atm}} \right)^n + C1 \right)} \right)^{1/2} \quad (I.45)$$

Où  $k_c$  et  $k_e$  sont les mêmes paramètres que dans le modèle Duracrete et du Task Group 5.1 du CEB ;  $D_C$  est le coefficient de diffusion du CO<sub>2</sub> en zone carbonatée pour une pression d'exposition correspondant à la pression naturelle ( $0,03 \% \cdot P_{atm}$ ) ( $m^2/s^1$ ) ;  $P_{atm}$  est la pression atmosphérique ;  $P_{CO_2}$  est la pression externe de CO<sub>2</sub> (Pa) ;  $R$  est la constante des gaz parfaits ( $m^2 \times kg/mol/K/s^2$ ) ;  $T$  est la température (K) ;  $V_p$  est la fraction volumique de la pâte dans le béton ;  $C1$  est le nombre de moles de calcium initialement contenu dans les hydrates CH, AF<sub>m</sub> et AF<sub>i</sub>) (mol/L) ;  $C2$  est le nombre de moles de calcium initialement contenu dans les CSH (mol/L) ;  $\alpha$  et  $n$  sont les coefficients indépendants du type de ciment (égal à 23,5 L/mol et 0,67 respectivement),  $t$  est le temps (s).

#### 1.4.2.9. Exemples et comparaisons des modèles simplifiés

Les données nécessaires aux modèles précédemment présentés sont indiquées dans le Tableau I.9.

Donnée		Modèle							
		Ying-Yu	Papadakis	Bakker	CEB	Duracrete	Miragliotta	Oxand	Hyvert
Environnement	P <sub>CO2</sub>	X	X	X	X	X	X	X	X
	H <sub>r</sub>		X	X	X	X		X	X
	T			X					X
Matériaux	φ	X	X	X	X	X	X		
	S <sub>r</sub>	X	X	X			X		
	[hydrate]		X	X	X	X	X	X	X
Conditions de cure du béton					X	X			X

Tableau I.9. Données pour les modèles simplifiés

En l'absence de données expérimentales de profondeurs carbonatées à plusieurs échéances pour un même béton dans des conditions de carbonatation naturelle, il paraît difficile de comparer les performances des modèles, qui ont tous été calibrés à partir de résultats obtenus en carbonatation accélérée. On peut cependant établir une comparaison des modèles entre eux sur la base des compositions types de béton considérées dans le cadre du projet ANR EvaDéOS. Ces compositions conduisent aux paramètres d'entrée des modèles rappelées dans le Tableau I.10.

Paramètres	Type de béton		
	C45	C35	C25
R <sub>C</sub> (MPa)	58,0	46,2	40,2
E/C	0,51	0,56	0,68
φ	0,11	0,12	0,18
V <sub>p</sub>	0,24	0,26	0,35

**Tableau I.10. Propriétés des bétons utilisés dans le projet ANR EvaDéOS**

Les données identiques pour tous les bétons et tous les modèles (lorsque nécessaire) sont :

- La concentration en CO<sub>2</sub> à la surface du béton est égale à  $C_{CO_2} = 6,5 \times 10^{-4} \text{ kg/m}^3$  ;
- Le paramètre prenant en compte les conditions de cure du béton  $k_c = 0,63$  ;
- Le paramètre prenant en compte les conditions climatiques d'exposition  $k_e = 0,85$  ;
- Le paramètre prenant en compte l'orientation et la localisation de la structure de béton,  $n = 0,4$  ;
- Le coefficient de diffusion du dioxyde de carbone dans l'air  $D_{CO_2} = 1,39 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$  ;

On retrouve également les paramètres décrivant les conditions d'exposition :

- La pression partielle de CO<sub>2</sub>,  $P_{CO_2} = 36 \text{ Pa}$  ;
- La température  $T = 293^\circ\text{K}$  ;
- L'humidité relative extérieure  $H_r = 0,75$

Hormis les données figurant dans le Tableau I.10, les données qui changent en fonction des bétons sont les quantités d'hydrates et d'anhydres à considérer. Sur les Figures I.22 à I.24 sont illustrées les différences d'estimation de la profondeur carbonatée du béton selon 3 modèles simplifiés utilisés pour les 3 formulations. On y observe une tendance très similaire pour les 3 modèles utilisés, bien qu'un écart existe entre les estimations. On observe également une augmentation de la profondeur carbonatée avec l'abaissement de la classe de résistance du béton, ce qui semble cohérent.

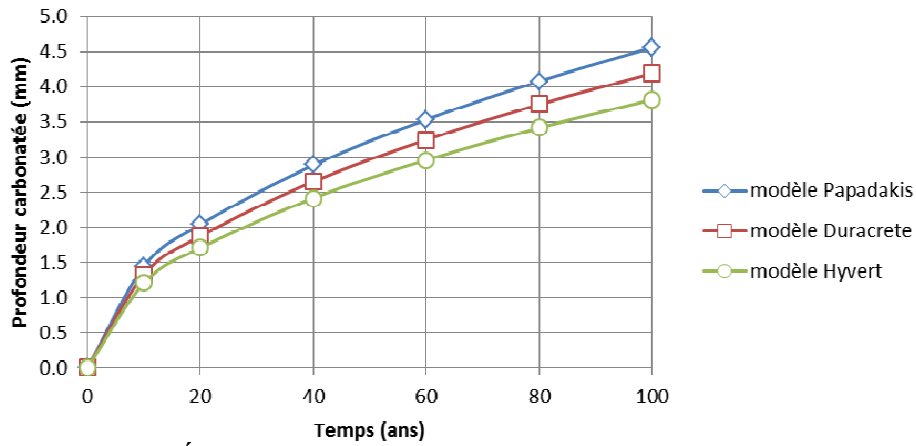


Figure I.22. Évolution de la profondeur de carbonatation pour le béton C45

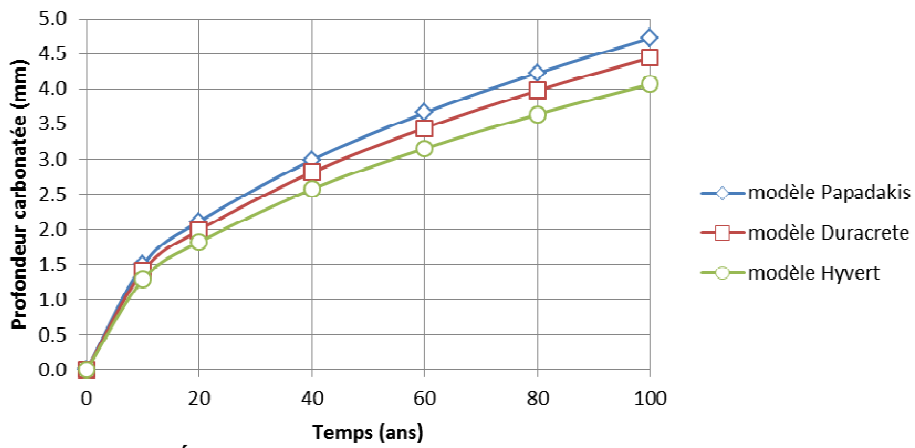


Figure I.23. Évolution de la profondeur de carbonatation pour le béton C35

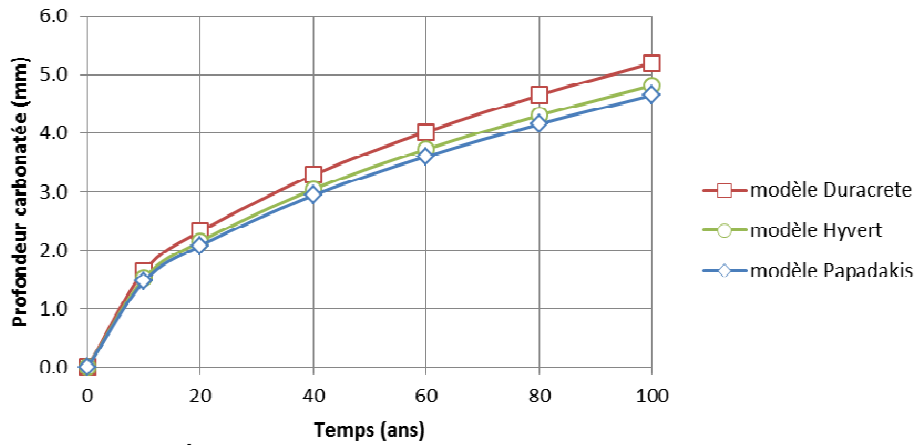


Figure I.24. Évolution de la profondeur de carbonatation pour le béton C25



### I.4.3. Modélisations « avancées »

Les modèles dits avancés ont pour objectif de décrire les phénomènes en jeu, ainsi que les divers facteurs qui peuvent les influencer, de façon plus fine et détaillée que les modèles simplifiés présentés précédemment. Ces modèles reposent principalement sur la résolution d'équation de conservation de la masse, et nécessitent pour la résolution l'implémentation dans un code de calculs (éléments finis, différences finies ou volumes finis).

#### I.4.3.1. Le modèle de Saetta [SAETTA et al., 1995]

Ce modèle intègre les équations de conservation suivantes :

- L'équation de conservation de la masse d'eau :

$$\frac{\partial H_r}{\partial t} = \text{div}(D_{Hr} \times \text{grad}(H_r)) + \frac{\partial H_{rs}}{\partial t} + K \times \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial H_{rc}}{\partial t} \quad (\text{I.46})$$

Où  $H_r$  est l'humidité relative ;  $D_{Hr}$  est le coefficient de diffusion de l'humidité ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) ;  $K$  est le coefficient hygrothermique ;  $T$  est la température (K) ;  $dH_{rs}/dt$  et  $dH_{rc}/dt$  expriment le changement d'humidité à travers la dessiccation du matériau et par diffusion entre les zones saturées et les zones les plus sèches.

- L'équation de conservation de la chaleur :

$$\rho \times c \times \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \times \text{grad}(T)) + \frac{\partial Q_h}{\partial t} + \frac{\partial Q_c}{\partial t} \quad (\text{I.47})$$

Où  $\rho$  est la masse volumique ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) ;  $c$  est la chaleur massique ( $\text{J}/\text{kg}/\text{K}$ ) ;  $\lambda$  est la conductivité thermique ( $\text{W}/\text{m}/\text{K}$ ) ;  $Q_c$  est l'énergie d'activation du processus de diffusion ( $\text{J}/\text{m}^3$ ) ;  $Q_h$  est la chaleur produite par unité de volume de solide ( $\text{J}/\text{m}^3$ ).

- L'équation de conservation de la masse de dioxyde de carbone :

$$\frac{\partial [C]}{\partial t} = \text{div}(D_c \times \text{grad}([C])) + \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial [C]_c}{\partial t} \quad (\text{I.48})$$

Où  $[C]$  est la concentration en  $\text{CO}_2$  ( $\text{mol}/\text{m}^3$ ) ;  $D_c$  est le coefficient de diffusion effectif du  $\text{CO}_2$  ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) ;  $[C]_{\text{total}}$  est la concentration totale de  $\text{CO}_2$  ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) ;  $dw/dt$  et  $d[C]_c/dt$  expriment respectivement les variations de teneur en eau et de concentration totale des espèces.

La vitesse de formation du carbonate de calcium au cours de la dégradation de la portlandite peut s'écrire comme une combinaison de plusieurs fonctions :

$$V = \alpha_1 \times f_1(H_r) \times f_2([C]) \times f_3([c]) \times f_4(T) \quad (\text{I.49})$$

Où  $\alpha_1$  est un paramètre tenant compte des caractéristiques du béton (rapport E/C, composition, taux d'hydratation, conditions de cure, etc.).

La fonction  $f_1(H_r)$  exprime l'influence de la présence d'eau dans le processus chimique. Pour le béton sec ( $H_r < 0,5$ ), cette fonction est égale à 0, signifiant que la progression de la carbonatation est stoppée [SAETTA et al., 1993] :

$$f_1(H_r) = \begin{cases} 0 & 0 \leq H_r \leq 0,5 \\ \frac{5}{2} \times (H_r - 0,5) & 0,5 \leq H_r \leq 0,9 \\ 1 & 0,9 \leq H_r \leq 1 \end{cases} \quad (\text{I.50})$$

La fonction  $f_2([C])$  décrit l'influence de la concentration du dioxyde de carbone et est comprise entre 0, dans les zones où le dioxyde de carbone n'a pas encore pénétré, et 1, là où la concentration de dioxyde de carbone est égale à sa valeur maximale  $[C]_{\max}$ . [SAETTA et al., 1993] utilise la relation linéaire suivante :

$$f_2([C]) = \frac{[C]}{[C]_{\max}} \quad (\text{I.51})$$

La fonction  $f_3([c])$  décrit l'influence du degré de carbonatation  $c$ . Elle varie entre 0 et 1 en fonction de la relation suivante [SAETTA et al., 1993]:

$$f_3([c]) = 1 - \left( \frac{c}{c_{\max}} \right)^m \quad (\text{I.52})$$

Où  $c_{\max}$  est la valeur maximum de carbonate de calcium et  $m$  est un paramètre généralement pris égal à 1.

La fonction  $f_4(T)$  exprime l'influence de la température sur le processus chimique :

$$f_4(T) = \exp\left(\frac{Q}{R} \times \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right) \quad (\text{I.53})$$

Où  $Q$  est l'énergie d'activation du processus de diffusion, avec  $Q/R = 4700\text{K}$  [SAETTA et al, 1993] ;  $T_0$  est la température de référence, égale à 296K.

Le modèle est utilisable dans des conditions de carbonatation atmosphérique ou dans des conditions expérimentales favorisant la carbonatation accélérée. Saetta a fait intervenir trois équations différentielles pour tenir compte de l'eau libérée par la réaction de carbonatation, de la diffusion de la

chaleur couplée au séchage du béton et de la diminution de la teneur en dioxyde de carbone au cours de sa diffusion dans le matériau.

La sortie du modèle est le pourcentage de calcite formée par le processus de carbonatation. La Figure I.25 illustre les résultats de simulation sur un échantillon de béton à base de ciment Portland ordinaire (OPC) avec un rapport E/C égal à 0,5 [SAETTA et al., 1995].

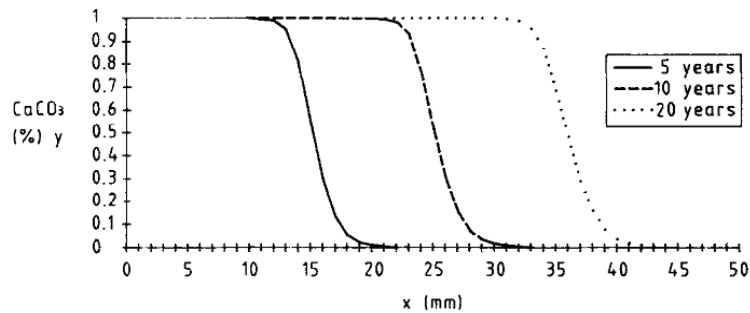


Figure I.25. Profils de calcite obtenus par [SAETTA et al., 1995]

#### I.4.3.2. Le modèle de Thiéry

Le modèle développé par Thiéry [THIERY, 2005] [THIERY et al., 2007] permet d'obtenir de nombreux profils : profil de teneur en carbonates de calcium, profils de teneur en hydrates, profil de porosité, profil de pH qui montrent la modification du matériau en fonction du processus de carbonatation. Les phénomènes physiques suivants, qui pilotent l'accessibilité du CO<sub>2</sub> dans la matrice cimentaire, sont pris en compte dans le modèle :

- Variation de la microstructure de la matrice cimentaire au cours de la carbonatation ;
- Changements d'état hydrique du matériau au cours de la carbonatation ;
- Evolution de la composition chimique et minéralogique du matériau.

Les caractéristiques du matériau telles que la porosité, la teneur en portlandite et CSH, la perméabilité intrinsèque à l'eau, le coefficient de diffusion ionique (pour les ions calcium en solution) et la courbe de sorption-désorption du matériau, sont utilisées comme données d'entrée du modèle. D'autres données liées à l'environnement extérieur (la concentration en CO<sub>2</sub>, l'humidité, la température) interviennent également.

Les différents profils sont calculés notamment grâce aux équations de conservation écrites :

- Pour le dioxyde de carbone en phase gazeuse :

$$\frac{\partial n_{CO_2}}{\partial t} = -div(w_{CO_2}) - \xi_H^O \quad (I.54)$$

- Pour les espèces H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, HCO<sup>3-</sup>, CO<sub>3</sub><sup>-2</sup>, Ca<sup>2+</sup>, OH<sup>-</sup>, H<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>O en solution:

$$\frac{\partial n_{\text{espèce}}}{\partial t} = -\text{div}(w_{\text{espèce}}) - \sum \xi_{\text{espèce}} \quad (\text{I.55})$$

- Pour les phases solides, comme  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , CSH,  $\text{CaCO}_3$  :

$$\frac{\partial n_{\text{composé}}}{\partial t} = \xi_{\text{composé}} \quad (\text{I.56})$$

Où  $n_i$  et  $w_i$  sont successivement la teneur molaire et le flux molaire de l'espèce  $i$  ;  $\xi_i$  est le taux d'avancement de la réaction chimique.

Ce modèle a été comparé avec des résultats expérimentaux obtenus pour différents bétons et pâtes de ciment. Des illustrations des concordances observées entre résultats des simulations et résultats expérimentaux sont présentées sur les Figures I.26 à I.28 [THIERY, 2005] :

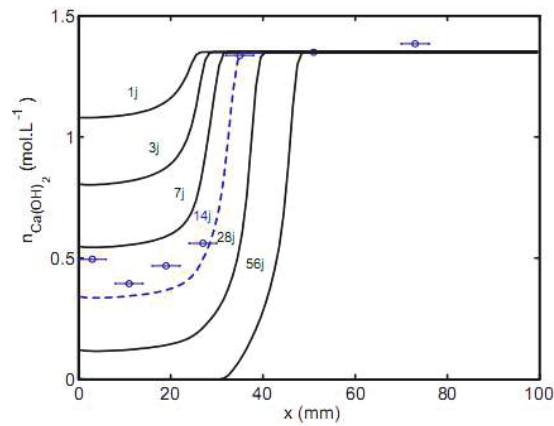


Figure I.26. Profils calculés de teneur en  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  après 1, 7, 14, 28 et 56 jours et profil expérimental obtenu par A.T.G-A.C après 14 jours de carbonatation accélérée [THIERY, 2005].

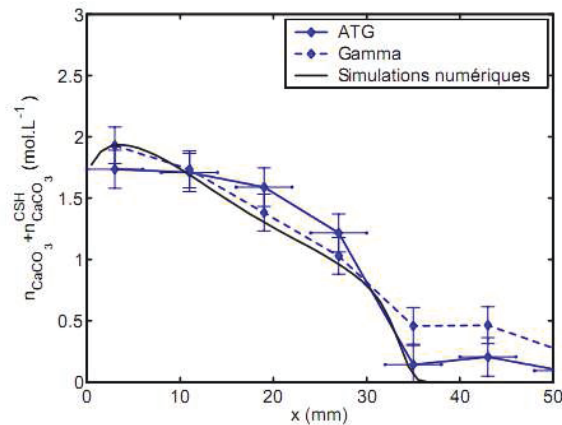
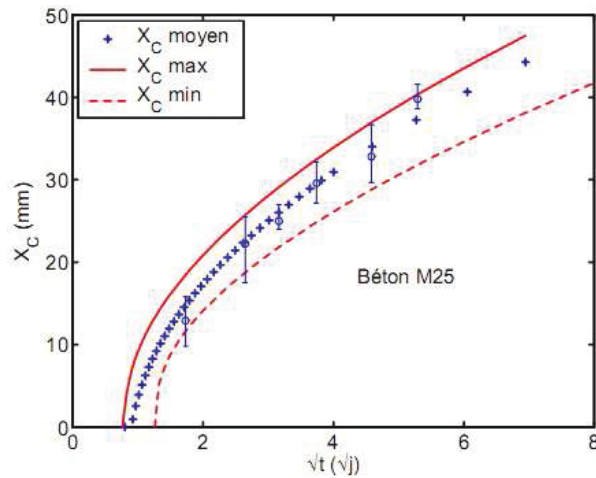


Figure I.27. Profils calculés de teneur total en carbonates de calcium et profils expérimentaux obtenus par A.T.G-A.C et par gammadensimétrie après 14 jours de carbonatation accélérée [THIERY, 2005].



**Figure I.28. Profondeur de carbonatation calculée et mesurée par projection de phénophtaléine en fonction de la racine carrée du temps [THIERY, 2005].**

Le modèle de Thiery décrit le mécanisme physico-chimique de la carbonatation de la portlandite et des CSH, mais ne prend pas en compte d'autres espèces comme l'ettringite et les monosulfoaluminates.

#### I.4.3.3. Le modèle de Bary et Sellier

Le modèle de Bary et Sellier [BARY et al., 2004] suppose que le béton est constitué de trois phases (liquide, solide et gazeuse), aux interfaces desquelles se produisent des réactions chimiques de dissolution, solidification, vaporisation et liquéfaction. Les phénomènes pris en compte dans ce modèle sont :

- La dissolution progressive des hydrates de la pâte de ciment et la migration consécutive des ions calcium dans la phase liquide de la solution interstitielle ;
- La formation de calcite par réaction entre les ions calcium et le CO<sub>2</sub> dissous ;
- La diffusion du CO<sub>2</sub> dans la phase gazeuse de la solution interstitielle ;
- La diffusion et la perméation de l'eau à travers le milieu poreux, notamment pendant le séchage ;
- La migration du calcium lors du processus de colmatage de la zone carbonatée ;
- La variation de la porosité due à la décalcification (augmentation de la porosité) et à la formation de calcite (diminution).

Ce modèle repose sur trois équations de conservation de la masse :

- Conservation de la masse de calcium :

$$\frac{\partial(C_a \times \phi \times S_r)}{\partial t} = -div\left(C_a \times \frac{w_l}{\rho_l} + w_a\right) + S_a \quad (I.57)$$

- Conservation de la masse d'eau :

$$\frac{\partial(\rho_l \times \phi \times S_r)}{\partial t} = -div(w_i) + S_i \quad (I.58)$$

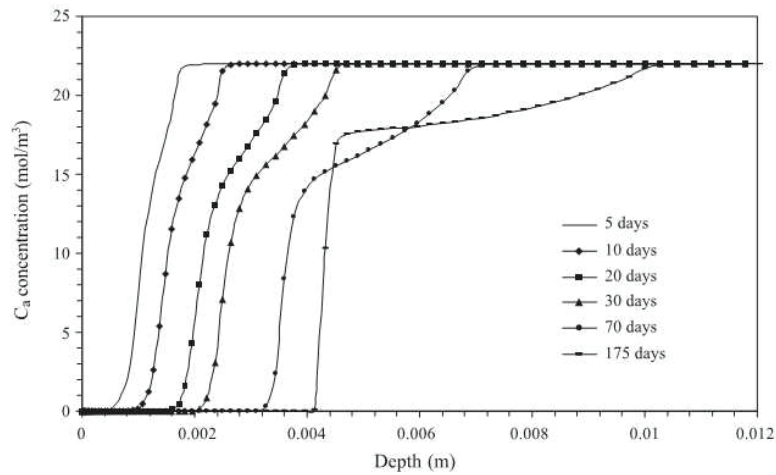
- Conservation de la masse de carbone :

$$\frac{\partial([C] \times \phi \times (1 - S_r))}{\partial t} = -div([C] \times \phi \times (1 - S_r) + w_C) + S_C \quad (I.59)$$

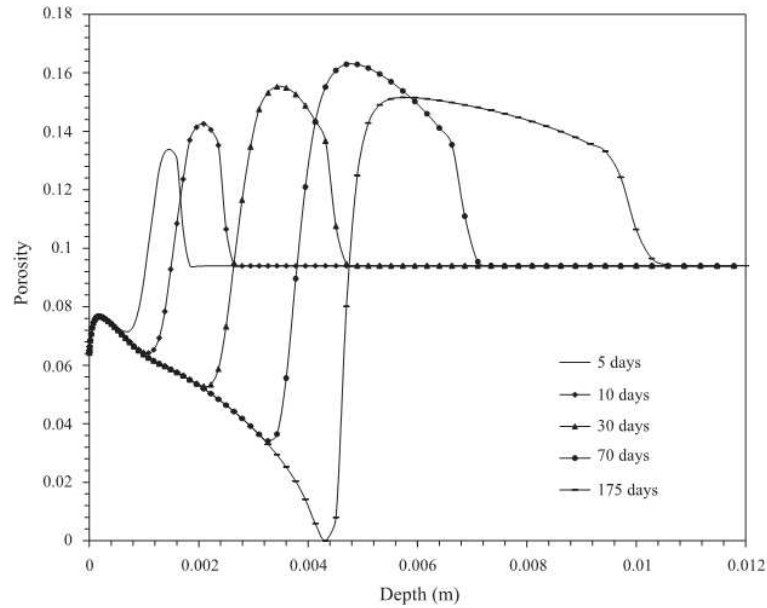
Dans les équations ci-dessus,  $w_i$  est le flux molaire et  $S_i$  est le terme source ;  $\phi$  et  $S_r$  sont la porosité et le taux de saturation du matériau ;  $C_a$  est la concentration d'ions calcium en solution ( $\text{mol/m}^3$ ) ;  $[C]$  est la concentration en  $\text{CO}_2$  ( $\text{mol/m}^3$ ).

Dans ces équations de conservation, la quantité de  $\text{CO}_2$  solubilisé dans la solution interstitielle est évaluée selon la pression partielle de  $\text{CO}_2$  dans la phase gazeuse, le degré de saturation du matériau dépend du changement de la porosité et des réactions de dissolution des hydrates. Ainsi, la quantité de calcite créée est fonction de la teneur en calcium de la solution interstitielle, de la porosité et de l'état de saturation du béton. Les concentrations des espèces chimiques présentes dans la matrice cimentaire sont déterminées d'après les constantes d'équilibre de ces phases.

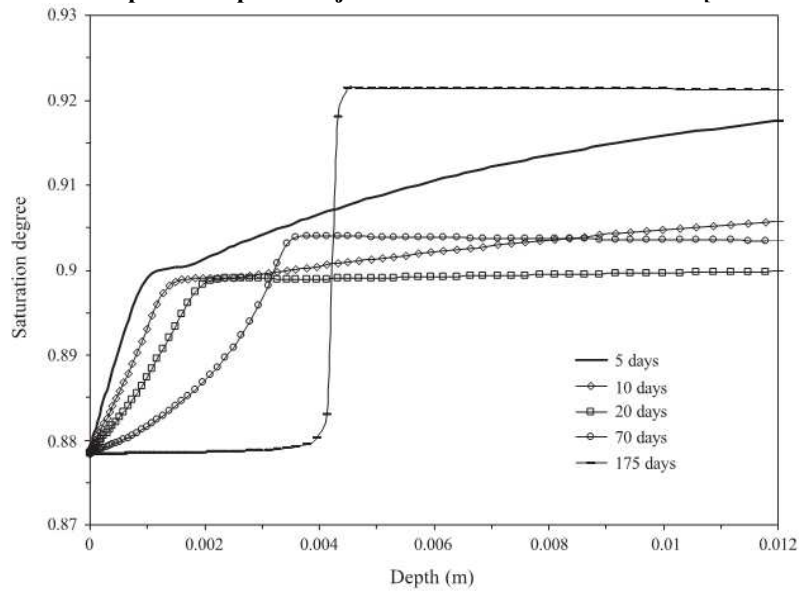
Les sorties du modèle sont le changement de la porosité, de la concentration en calcium et le degré de saturation du matériau.



**Figure I.29. Concentration de calcium dans la solution interstitielle après 175 jours de carbonatation accélérée [BARY et al., 2004].**

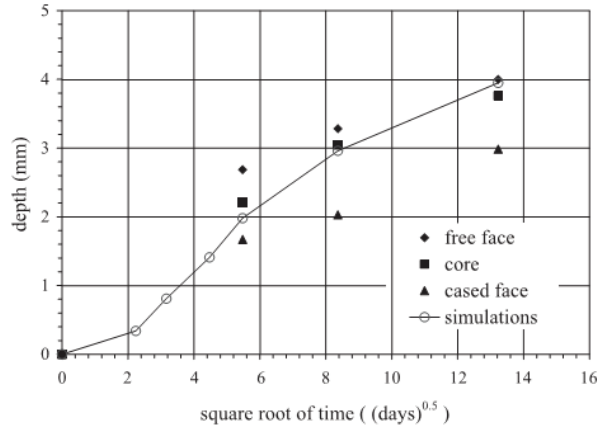


**Figure I.30. Profils de porosité après 175 jours de carbonatation accélérée [BARY et al., 2004].**



**Figure I.31. Profils du degré de saturation après 175 jours de carbonatation accélérée [BARY et al., 2004].**

La profondeur de carbonatation estimée pour une pâte de ciment avec une porosité  $\phi = 0,094$ , en considérant le coefficient de diffusion effectif du dioxyde de carbone  $D_C = 8 \times 10^{-7} \text{ (m}^2/\text{s}^1)$ , l'humidité initiale de l'échantillon et l'humidité extérieure étant respectivement de 0,94 et 0,65 et la pression du  $\text{CO}_2$  étant de 50 kPa (correspondant à un cas de carbonatation accélérée) est présentée dans la Figure suivante I.32.



**Figure I.32. La profondeur de carbonatation accélérée [BARY et al., 2004].**

Ce modèle est relativement bien descriptif en ce qui concerne les mécanismes physico-chimiques de pénétration du CO<sub>2</sub> dans la matrice cimentaire et les réactions entre le CO<sub>2</sub> dissous et les hydrates. Les modifications microstructurales et de composition de la solution interstitielle qui en résultent sont ainsi évaluées.

#### I.4.3.4. Le modèle de Mai-Nhu

De la même manière que le modèle de Bary et Sellier, le modèle développé par Mai-Nhu [MAI-NHU, 2013] repose également sur les équations de conservation pour la prédiction de la profondeur de carbonatation. Il a la particularité de coupler la carbonatation avec la pénétration des chlorures, ainsi que l'estimation de perte de section d'armature due à la corrosion.

Les notations sont identiques que dans le modèle précédent, de Bary et Sellier:

- Modélisation des transferts d'humidité, qui décrivent le transport diffusif et convectif de l'eau liquide et le transport purement diffusif de la phase gazeuse considérée comme un mélange de vapeur d'eau et d'air sec :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_l \times \phi \times S_r + \rho_v \times \phi \times (1 - S_r)] = -\text{div}(w_l + w_v) + S_l \quad (\text{I.60})$$

- Modélisation de la pénétration du dioxyde de carbone en phase gazeuse :

$$\frac{\partial [C] \times \phi \times (1 - S_r)}{\partial t} = -\text{div}(w_c) - S_{CO_3^{-2}} \quad (\text{I.61})$$

Où  $S_{CO_3^{-2}}$  est la formation des ions carbonates.

- Modélisation de la pénétration des ions carbonates :

$$S_{CO_3^{-2}} = \frac{\partial CO_3^{-2}}{\partial t} = K_{CO_3} \times ([CO_3^{-2}]_{eq} - [CO_3^{-2}]) \quad (\text{I.62})$$



Où  $K_{CO_3}$  est un paramètre de calibration pour les réactions de formation des carbonates [MAI-NHU, 2013] ;  $[CO_3^{-2}]_{eq}$  est la quantité maximale de carbonate pouvant être formée en fonction de la pression de dioxyde de carbone et du pH de la solution interstitielle.

- Carbonatation des hydrates :

o Dissolution de la portlandite :

$$\frac{\partial[Ca_{CH}]}{\partial t} = -K_{hyd} \times [Ca_{CH}] \times [CO_3^{-2}] \quad (I.63)$$

o Dissolution des silicates de calcium hydratés :

$$\frac{\partial[Ca_{CSH}]}{\partial t} = -K_{hyd} \times [Ca_{CSH}] \times [CO_3^{-2}]^n \quad (I.64)$$

o Dissolution de l'ettringite :

$$\frac{\partial[Ca_{AFt}]}{\partial t} = -K_{hyd} \times [Ca_{AFt}] \times [CO_3^{-2}] \quad (I.65)$$

o Dissolution des monosulfoaluminates de calcium hydraté :

$$\frac{\partial[Ca_{AFm}]}{\partial t} = -K_{hyd} \times [Ca_{AFm}] \times [CO_3^{-2}] \quad (I.66)$$

o Dissolution des sels de Friedel notés SF :

$$\frac{\partial[Ca_{SF}]}{\partial t} = -K_{hyd} \times [Ca_{SF}] \times [CO_3^{-2}] \quad (I.67)$$

Où  $K_{hyd}$  est un paramètre de calibration pour les réactions de formation des carbonates [MAI-NHU, 2013] ;  $[Ca_i]$  représente les concentrations molaires de calcium de chaque hydrate définies par mètre cube apparent de matériau ( $\text{mol}/\text{m}^3$  de béton) ;  $[CO_3^{-2}]$  représente la concentration molaire des ions carbonates exprimée en  $\text{mol}/\text{m}^3$  de solution.

- Formation de la calcite :

$$\frac{\partial[Ca]}{\partial t} = - \left( \frac{\partial[Ca_{CH}]}{\partial t} + \frac{\partial[Ca_{CSH}]}{\partial t} + \frac{\partial[Ca_{AFt}]}{\partial t} + \frac{\partial[Ca_{AFm}]}{\partial t} + \frac{\partial[Ca_{SF}]}{\partial t} \right) \quad (I.68)$$

- Variation de la porosité due au phénomène de carbonatation :

$$\phi = \phi_0 - [V_{CaCO_3} \times ([CaCO_3] - ([CSH]_0 - [CSH]))] - [V_{CH} \times ([CH]_0 - [CH])] + [\Delta V_{CSH} \times ([CSH]_0 - [CSH])] \quad (I.69)$$

Où  $\phi_0$  est la porosité initiale du béton,  $V_i$  représente le volume molaire du composé i,  $[composé]_0$  est la concentration initiale des hydrates,  $\Delta V_{CSH}$  représente la variation du volume molaire des CSH due à la carbonatation progressive de ces hydrates.

- Estimation du pH de la solution interstitielle :

$$pH = -\frac{1}{\ln(10)} \times \left( \ln \left( \frac{1}{2} [Cl^-] + [CO_3^{-2}] + 10^{-7} \sqrt{25 \times 10^{12} [Cl^-] \times [CO_3^{-2}] + 10^{14} [CO_3^{-2}] + 1} \right) \times \left( 1 - \frac{[CH]}{[CH]_0} \right) \right) + \frac{[CH] \times (11.7 + 0.7 \times \exp(-8[Cl^-]) \times \exp(-12[CO_3^{-2}]))}{[CH]_0} \quad (I.70)$$

Ce modèle repose également sur un certain nombre d'hypothèses :

- Le matériau est composé d'une phase solide, une phase liquide et une phase gazeuse ;
- Les effets de la température ne sont pas pris en compte ( $T = 293K$ ) ;
- Les réactions chimiques ne sont pas instantanées ;
- Les réactions de carbonatation des bases alcalines de type NaOH et KOH ne sont pas prises en compte dans l'estimation du pH de la solution interstitielle.

Le modèle est calibré à partir de résultats expérimentaux sous des conditions initiales différentes F1, F2, F3 et F4 [MAI-NHU, 2013] et pour des conditions de dégradation accéléré en conditions hydriques stables ( $H_r = 55\%$ ).

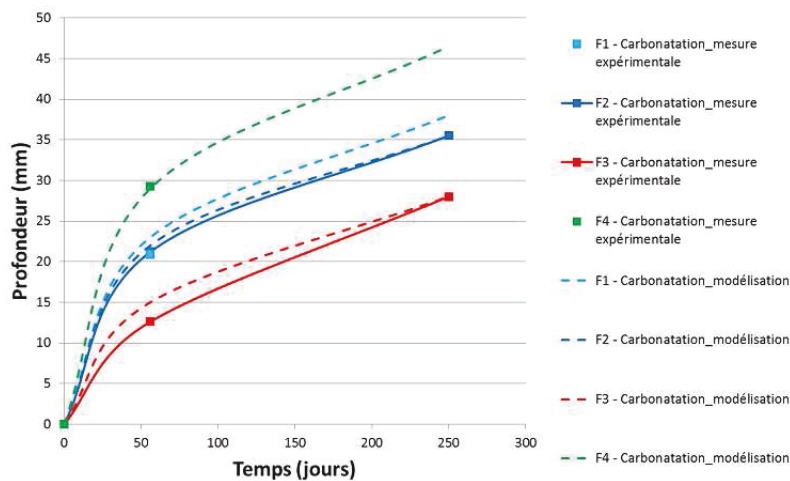


Figure I.33. Carbonatation - calibration du modèle sur les résultats expérimentaux [MAI-NHU, 2013].

## 1.5. Conclusion

Le processus de carbonatation se déroule dans la matrice cimentaire et est conditionné notamment par des paramètres de formulation de la pâte de ciment (le rapport E/C, le dosage en ciment) et les conditions climatiques (température, humidité). La carbonatation a une influence significative sur la durabilité des structures en béton armé. D'une part, ce processus a pour effet une diminution de la porosité de la pâte de ciment. Il modifie la distribution poreuse et altère les propriétés de transfert du matériau tel que le coefficient de diffusion, la tortuosité et la perméabilité du matériau. D'autre part, la carbonatation entraîne une baisse du pH de la solution interstitielle qui conduit à la dépasseivation de l'acier des armatures. Elle détruit ainsi la couche protectrice d'oxydes de l'armature et initie alors le

processus de corrosion. Quand ce processus de dégradation atteint un seuil critique, la rouille provoque l'éclatement du béton d'enrobage et laisse apparaître, à partir d'épaufrures, les armatures oxydées. Donc, avec les facteurs comme la présence de chlorures, sulfates, silicates ou l'humidité relative, la carbonatation de la pâte de ciment est un facteur important agissant sur le processus de corrosion.

Nous avons également présenté dans ce chapitre quelques formes simplifiées et complètes des modèles existants de carbonatation avec leurs paramètres d'entrée et leurs sorties principales, les hypothèses sur les conditions initiales et aux limites de ces modèles. La connaissance de ces éléments est nécessaire pour choisir un modèle en fonction d'une application précise.

La démarche mise en œuvre dans cette thèse est d'inscrire un modèle de carbonatation dans un cadre probabiliste, c'est-à-dire, notamment de propager de l'incertitude et de la variabilité à travers une modélisation de la carbonatation depuis les paramètres d'entrées (caractéristiques du matériau, conditions agressives) vers la sortie du modèle (la cinétique de pénétration du front de carbonatation). Ce type de démarche n'est pertinent que si le modèle repose sur une description suffisamment physique du processus pour que la variabilité en question puisse être renseignée en entrée de modèle, ce qui exclut les modèles d'ingénierie ou modèles simplifiés. A contrario, les modèles physiques avancés, reposant sur des simulations numériques aux éléments finis, se heurtent à l'écueil du coût de ces simulations numériques, pouvant facilement devenir prohibitif. Le chapitre suivant présente l'outil de simulation numérique de la carbonatation développé pour la mise en œuvre de cette démarche.

---

## CHAPITRE II - IMPLEMENTATION ET EXTENSION D'UN MODELE DE CARBONATATION

---

## *II.1. Introduction*

Le modèle présenté dans ce chapitre est une évolution du modèle initialement proposé par Bary et Sellier [BARY et al., 2004], [BARY, 2005]. Il s'agit d'un modèle qui couple les transferts de  $\text{CO}_2$  en phase gazeuse avec les transferts de l'eau liquide et des ions calcium  $\text{Ca}^{2+}$  en solution aqueuse. Comme la carbonatation repose sur une décalcification-dissolution de la matrice cimentaire due à la diminution de la concentration des ions  $\text{Ca}^{2+}$  dans la solution interstitielle (compte tenu de la précipitation de la calcite  $\text{CaCO}_3$ ), ils utilisent un modèle chimique de lixiviation des hydrates gouverné par la seule concentration en ions  $\text{Ca}^{2+}$ . Cette approche permet de prendre en compte la carbonatation de l'ensemble des phases hydratées : la portlandite, les CSH, l'ettringite (AFt ou trisulfoaluminate) et le monosulfoaluminate (AFm). Dans ce modèle, on observe qu'un transport des ions  $\text{Ca}^{2+}$ , par diffusion en phase aqueuse et par convection dans le mouvement d'ensemble de l'eau liquide, se manifeste de la zone non carbonatée (riche en  $\text{Ca}^{2+}$ ) vers la zone carbonatée (pauvre en  $\text{Ca}^{2+}$ ), induisant de ce fait un début de décalcification, la formation de carbonate de calcium en zone carbonatée conduit à des variations importantes de porosité, la formation d'une gangue de  $\text{CaCO}_3$  autour des cristaux de  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ .

Les équations de conservation de masse exposées dans [BARY et al., 2004] sont reprises dans notre modélisation afin de simuler la diffusion du  $\text{CO}_2$ , la perméabilité à l'eau, la variation de porosité, la migration des ions calcium, la dissolution des hydrates et la formation de la calcite. Les caractéristiques physico-chimiques du matériau requises sont : la porosité accessible à l'eau, la perméabilité à l'eau liquide, le coefficient de diffusion, la teneur en  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , la courbe d'adsorption-désorption, etc. Ces paramètres sont estimés grâce aux résultats obtenus sur des bétons proches de celui étudié. Etant donné qu'on s'intéresse à une dégradation atmosphérique, les données climatiques sont également une entrée importante du modèle. Les conditions environnementales ont été estimées sur la période 1970-2000 (station météorologique de Toulouse- Blagnac, Sud de la France). L'outil de modélisation est utilisé aussi bien pour simuler des essais accélérés que des dégradations atmosphériques. Les sorties du modèle (notamment les profils de portlandite à partir desquels sont définies les profondeurs de carbonatation) sont exploitées pour la validation par comparaison avec des résultats antérieurs issus de la littérature scientifique.

## II.2. Equations constitutives du modèle

La modélisation proposée est basée sur trois équations principales de conservation de la masse : la teneur en eau, la quantité de dioxyde de carbone et la concentration en calcium.

### II.2.1. Conservation de la masse d'eau

#### II.2.1.1. Equation de transfert hydrique

La variation de la masse d'eau (phase liquide) dans une unité de volume, sur un intervalle de temps (dt), est basée sur le flux d'eau (par un processus de diffusion d'eau) et la quantité d'eau libérée par la dissolution des produits hydratés :

$$\frac{\partial(\rho_l \times \phi \times S_r)}{\partial t} = S_l - \text{div}[w_l] \quad (\text{II.1})$$

Où  $w_l$  est le flux massique d'eau donné par :

$$w_l = \frac{K^\phi \times \rho_l}{\eta} \times k_{r,l} \times p' \times H_r \times \text{grad}(S_r) \quad (\text{II.2})$$

Et le terme source  $S_l$  ( $\text{kg/m}^3/\text{s}^1$ ) signifie l'eau libérée par la dissolution des hydrates dans la pâte de ciment :

$$S_l = -k_{sl} \times M_{H_2O} \times n_w \times \frac{dC_a}{dt} \quad (\text{II.3})$$

Dans ces expressions,  $\rho_l$  est la masse volumique d'eau ( $\text{kg/m}^3$ ) ;  $\phi$  est la porosité du matériau ;  $S_r$  est le degré de saturation du matériau ;  $\eta$  est le coefficient de viscosité dynamique de l'eau ( $\text{kg/m/s}$ ) ;  $p$  est la pression de l'eau (Pa) ;  $H_r$  est l'humidité relative ; le terme  $n_w$  représente la concentration d'eau impliquée dans la dissolution de la phase solide par une unité de volume du matériau et sa valeur dépend de la concentration de calcium dans la solution interstitielle [FAUCON et al., 1998], [MAINGUY et al., 2000] ;  $C_a$  est la concentration d'ion  $\text{Ca}^{2+}$  dans la solution interstitielle ( $\text{mol/m}^3$ ).

Le coefficient  $k_{r,l}$  pondère la saturation en eau, qui dépend du degré de saturation  $S_r$  du béton [GENUCHTEN, 1980] :

$$k_{r,l} = \sqrt{S_r} \times \left[ 1 - (1 - S_r^b)^{1/b} \right]^2 \quad (\text{II.4})$$

Où  $b$  est un paramètre scalaire, égal à 1,65 pour les applications numériques.

Le coefficient  $k_{sl}$  est un coefficient exprimant l'influence du degré de saturation sur le processus de réaction (en raison de la variation de la surface de contact entre l'eau et les hydrates) [BAZANT et al., 1972] :

$$k_{sl} = \frac{1}{[1 + 625 \times (1 - S_r)^4]} \quad (\text{II.5})$$

La perméabilité intrinsèque du matériau  $K^\phi$  (m<sup>2</sup>), qui dépend de la porosité  $\phi$  à chaque instant, est déterminée suivant l'équation de Van Genuchten [GENUCHTEN, 1980] :

$$K^\phi = K^0 \times \left(\frac{\phi}{\phi_0}\right)^3 \times \left(\frac{1 - \phi_0}{1 - \phi}\right)^2 \quad (\text{II.6})$$

Avec  $K^0$  (m<sup>2</sup>) est la perméabilité intrinsèque du matériau qui correspond à la porosité initiale  $\phi_0$  du béton non carbonaté.

#### II.2.1.2. Modélisation de l'isotherme de désorption

L'isotherme de désorption est modélisée par une approximation polynomiale, donc les coefficients sont calés sur des données expérimentales [BARY et al., 2004], [BARY, 2005]. Il est à noter que, par hypothèse, la sorption et la désorption seront modélisées par une même approximation.

Ainsi, les relations entre le taux de saturation ( $S_r$ ) et l'humidité relative ( $H_r$ ) sont estimées en fonction de la composition du matériau. La forme générale de la relation est (II.7)

$$S_r = A \times H_r^3 + B \times H_r^2 + C \times H_r + D \quad (\text{II.7})$$

$$H_r = a + b \times (c \times S_r + d)^{1/3} + e \times (c \times S_r + d)^{-1/3} \quad (\text{II.8})$$

Où  $A, B, C, D, a, b, c, d, e$  sont des coefficients dépendant du matériau, par exemple :

Matériau	$A$	$B$	$C$	$D$	$a$	$b$	$c$	$d$	$e$
$R_{28}=65,9$ MPa, CEM I E/C=0,45 ; $\phi = 0,095$ [BARY et al., 2004]	6,43	-15,46	12,52	-2,5	0,79	0,52	1,1	-1	-0,013
Pâtes de ciment C45 CEM I E/C=0,45 ; $\phi = 0,21$ [THIERY, 2005]	2,51	-3,13	1,62	0	0,396	0,48	3,31	-0,9	-0,065
Béton M25 $R_{28}=24$ MPa, CEM I E/C=0,84 ; $\phi = 0,15$ [THIERY, 2005]	1,66	-1,18	0,52	0	0,305	0,15	140	-18	-0,25

Tableau II.1. Exemples d'approximation pour l'isotherme de sorption/désorption

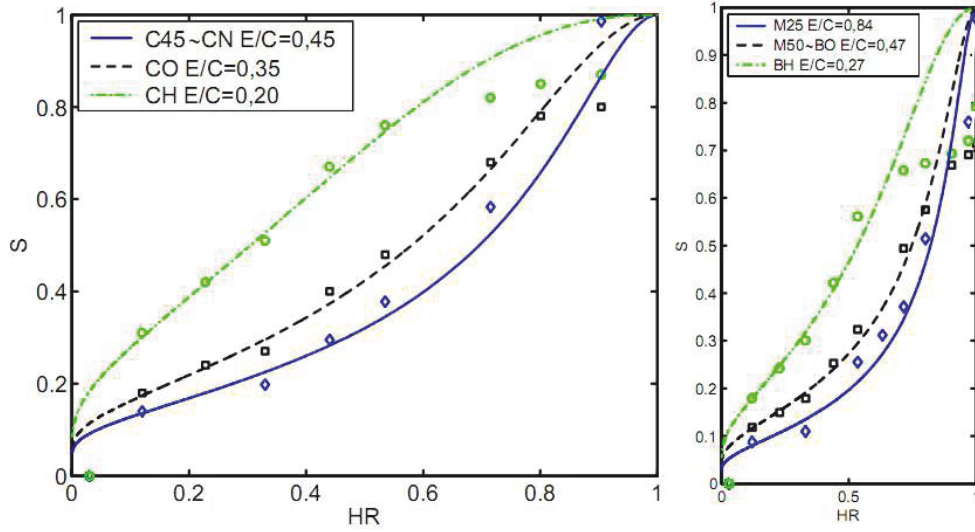


Figure II.1. Courbes de désorption du ciment C45 et du béton M25 [THIERY, 2005] : valeurs expérimentales et approximation

## II.2.2. Conservation de la masse de dioxyde de carbone

La variation de la masse de dioxyde de carbone par unité de volume, pendant un intervalle de temps ( $dt$ ), est fonction du flux de  $CO_2$  à travers ce volume et sa consommation par la réaction chimique pour former la calcite :

$$\frac{\partial(\phi \times (1 - S_r) \times \rho_c)}{\partial t} = -S_c - \text{div}[w_c] \quad (\text{II.9})$$

Où  $w_c$  est le flux massique de  $CO_2$  [MAINGUY, 2000] :

$$w_c = -f_{(\phi, S_r)} \times D_{CO_2} \times \frac{M_c}{R.T} \times \text{grad}(p_c) \quad (\text{II.10})$$

Où  $D_{CO_2}$  est le coefficient de diffusion de  $CO_2$  dans l'air ( $m^2/s$ ) ;  $M_c$  est la masse molaire de  $CO_2$  ( $kg/mol$ ) ;  $R$  est la constante des gaz parfaits ( $m^2 \times kg/mol/K/s^2$ ) ;  $T$  est la température ( $K$ ) ;  $p_c$  est la pression  $CO_2$  ( $Pa$ ) [BARY et al., 2004].

$f_{(\phi, S_r)}$  est un facteur de résistance à la diffusion qui traduit l'effet global de la porosité et du degré de saturation du béton sur le coefficient de diffusion du  $CO_2$  [THIERY, 2005] :

$$f_{(\phi, S_r)} = \phi^{2,74} \times (1 - S_r)^{4,2} \quad (\text{II.11})$$

Le terme source  $S_c$  ( $kg/m^3/s$ ) est la masse de  $CO_2$  précipité par unité de temps pour former la calcite est exprimé à partir du taux molaire de formation de calcite  $N_{cal}^o$ .



$$S_c = M_c \times \phi \times S_r \times N_{cal}^{\circ} \quad (\text{II.12})$$

Le taux molaire de formation de calcite peut exprimer sous la forme [BARY, 2005] :

$$N_{cal}^{\circ} = \phi \times S_r \times k_C \times \min\left(\langle C_a - C_a^* \rangle, \langle C_c - C_c^* \rangle \times k_H\right) \quad (\text{II.13})$$

Où  $C_a$  est la concentration en concentration en ions calcium dans la solution interstitielle ;  $C_a^*$  est la concentration en calcium correspondant à l'équilibre chimique local entre la solution porale et la matrice cimentaire ;  $C_c$  est la concentration en carbonates ;  $C_c^*$  est la concentration en carbonates à l'équilibre dépendant uniquement de la concentration de calcium en solution ;  $k_H$  est la constante de Henry ( $k_H = 23 \times 10^{-5} \text{ mol/m}^3/\text{Pa}$ ).

Le coefficient cinétique de formation de la calcite  $k_C$  a été initialement proposé par Thierry [THIERY, 2005]. Ce coefficient exprime la formation et la croissance d'une couche de calcite autour de cristaux sphériques de portlandite au cours du processus de carbonatation.

$$k_C = \frac{3 \times V_p}{R_{CH,0}} (1 - k_{CH})^{2/3} \frac{D_{CaCO_3}}{\lambda + R_{CH,0} \times \left[ \left( 1 + k_{CH} \left( \frac{V_{CaCO_3}}{V_{CH}} - 1 \right) \right)^{1/3} - (1 - k_{CH})^{1/3} \right]} \quad (\text{II.14})$$

Où  $R_{CH,0}$  est le rayon initial équivalent des cristaux de portlandite (m) ;  $V_{CH}$  et  $V_{CaCO_3}$  sont respectivement les volumes molaires de la portlandite et de la calcite ( $\text{m}^3/\text{mol}$ ) ;  $\lambda$  est un paramètre qui s'interprète comme l'épaisseur équivalente de la gangue de calcite ;  $D_{CaCO_3}$  est le coefficient de diffusion ionique à travers cette gangue ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) ;  $k_{CH}$  est l'indice de dégradation défini par :

$$k_{CH} = 1 - \frac{V_p}{V_{p,0}} \quad (\text{II.15})$$

Avec  $V_p$  et  $V_{p,0}$  sont les fractions volumiques de produits hydratés actuelle et initiale.

### II.2.3. Conservation de la masse de calcium

La variation de la concentration de calcium dans la solution interstitielle est exprimée de la manière suivante pour une unité de volume :

$$\frac{\partial(\phi \times S_r \times C_a)}{\partial t} = S_a - \text{div} \left[ C_a \times \frac{w_l}{\rho_l} + w_a \right] \quad (\text{II.16})$$

Avec  $C_a$  la concentration de calcium dans la solution ( $\text{mol/m}^3$ ). Le terme  $C_a \frac{w_l}{\rho_l}$  exprime la convection et caractérise le transport de calcium en raison de la circulation de l'eau ;  $w_a$  est le flux de diffusion moléculaire du  $C_a$  dans l'eau, exprimé par l'équation de Fick :

$$w_a = -D_{Ca} \times \text{grad}(C_a) \quad (\text{II.17})$$

Où  $D_{Ca} = k_{sl} \times D_{(\phi)}$  est le coefficient de diffusion effectif des ions calcium dans la solution porale, en fonction du degré de saturation et la porosité, dans laquelle,  $D_{(\phi)} = 2,3 \times 10^{-13} \times \exp[9,95 \times \phi]$ , [BARY, 2005].

Le terme source  $S_a$  ( $\text{kg/m}^3/\text{s}^1$ ) représente la production d'ions calcium libérés à partir des hydrates au cours de la décalcification [JOHANNESON, 1997]. Cette production des ions calcium est partiellement compensée par une consommation de calcium par la formation de calcite :

$$S_a = -k_{sl} \times n_{CaS} \times \frac{dC_a}{dt} - \phi \times S_r \times N_{cal}^\circ \quad (\text{II.18})$$

Où  $n_{CaS}$  ( $\text{mol/m}^3$ ) est la concentration de calcium dans la phase solide dans un volume unitaire d'un matériau poreux.

## II.2.4. Variations de la porosité

La porosité  $\phi$  évolue pendant la dégradation est donnée par :

$$\phi = \phi_0 + V_{dS}(t) - V_{cal}(t) \quad (\text{II.19})$$

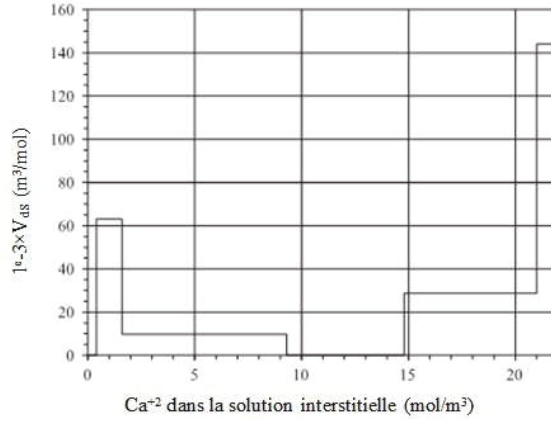
Où  $V_{dS}(t)$  et  $V_{cal}(t)$  sont respectivement les volumes d'hydrates dissous et de calcite par unité de volume de matériau, et sont déduits des relations suivantes :

$$\frac{dV_{cal}(t)}{dt} = V_{CaCO_3} \times \phi \times S_r \times N_{cal}^\circ \quad (\text{II.20})$$

$$\frac{dV_{dS}(t)}{dt} = k_{sl} \times \frac{dV_{dS}}{dC_a} \times \frac{dC_a}{dt} \quad (\text{II.21})$$

Où  $V_{CaCO_3}$  est le volume molaire de la calcite.

La variation du volume des hydrates par rapport à la concentration du calcium en solution est donnée par l'évolution de la composition du matériau en fonction de la dissolution des différentes phases (portlandite, CSH, etc ...) tel que représenté sur la Figure II.2.



**Figure II.2. Variation du volume d'hydrates par rapport à la concentration en ions calcium dans la solution interstitielle [Bary et al., 2004]**

Le taux de formation de la calcite  $N_{cal}^o$  est exprimé à partir de la vitesse de dissolution de la portlandite et des autres hydrates (principalement CSH) :

$$N_{cal}^o = \frac{\partial n_{cal}}{\partial t} = \left( \frac{\partial n_{CH}}{\partial t} + \frac{\partial n_{CSH}}{\partial t} \times \frac{1}{\alpha_{HYD}} \right) \quad (\text{II.22})$$

Où  $\alpha_{HYD}$  est le coefficient de stœchiométrie moyen en calcium des hydrates hors portlandite.

Le taux de dissolution de la portlandite est proposé par [THIERY, 2005], [BARY, 2006] :

$$\frac{\partial n_{CH}}{\partial t} = -k_{sl} \times k_{CO_2} \times k_C \times p_c \quad (\text{II.23})$$

Où  $k_{CO_2}$  est la constante de dioxyde de carbone ( $\text{mol}/\text{m}^3/\text{Pa}$ ) [MAINGUY et al., 2001] ;  $k_C$  est la cinétique de dissolution de portlandite, présentée dans l'équation (II.14).

Le taux de dissolution des autres hydrates est supposé dépendant linéairement de la pression de dioxyde de carbone [THIERY, 2005]:

$$\frac{\partial n_{CSH}}{\partial t} = -k_{sl} \times k_{CO_2} \times k_{CSH} \times p_c \quad (\text{II.24})$$

Où  $k_{CSH}$  est le coefficient cinétique de dissolution d'hydrates, calculé pour les CSH [THIERY, 2005], [BARY, 2006] :

$$k_{CSH} = \alpha_{CSH} \times \frac{n_{CSH}}{n_{CSH,0}} \quad (\text{II.25})$$

Avec  $\alpha_{CSH}$  est un coefficient du modèle ;  $n_{CSH,0}$  et  $n_{CSH}$  sont successivement la quantité initiale et le courant d'autres hydrates assimilés à des CSH ( $\text{mol}/\text{m}^3$ ).

## II.3. Prise en compte de la température

### II.3.1. Diffusion de la chaleur dans le matériau

Le béton soumis à la carbonatation atmosphérique est un matériau exposé à des variations climatiques : aléas des conditions extérieurs notamment d'humidité et de température.

Or, la température influe sur nombre de phénomènes physiques impliqués dans le processus de carbonatation. Il importe donc de tenir compte de la température dans le matériau soumis à la dégradation et de ses effets.

Le profil de température dans l'épaisseur de matériau considéré est déterminé par la résolution de l'équation de la chaleur :

$$\rho_m \times c_m \times (1 - \phi) \times \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}[\lambda_m \times \text{grad}(T)] + \rho_m \times c_m \times T \times \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (\text{II.26})$$

Où  $\rho_m$  est la masse volumique ( $\text{kg/m}^3$ ) ;  $c_m$  est la chaleur massique ( $\text{J/kg/K}$ ) et  $\lambda_m$  est la conductivité thermique du matériau ( $\text{J/kg/K}$ ) ;  $T$  est la température dans le matériau ( $\text{K}$ ).

### II.3.2. Thermoactivation du processus de carbonatation

#### II.3.2.1. Diffusion du $\text{CO}_2$ et du calcium

Le coefficient de diffusion du  $\text{CO}_2$  augmente en fonction de la température.

$$D_{\text{CO}_2}(T) = D_{\text{CO}_2}(T_{\text{ref}}) \times \exp\left(-\frac{Q_{p\_CO_2}}{R} \times \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{\text{ref}}}\right)\right) \quad (\text{II.27})$$

Où  $D_{\text{CO}_2}(T_{\text{ref}})$  est le coefficient de diffusion de  $\text{CO}_2$  ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) à la température de référence  $T_{\text{ref}} = 298\text{K}$  ;  $Q_{p\_CO_2}$  est l'énergie d'activation pour le processus de diffusion ( $Q_{p\_CO_2} = 39 \text{ kJ/mol}$ ) ;  $R$  est la constante des gaz parfaits. La même thermoactivation est appliquée à la diffusion du calcium.

#### II.3.2.2. Solubilité rétrograde des hydrates

Les hydrates sont plus stables lorsque la température augmente, ce qui se traduit par une loi de thermoactivation avec énergie d'activation négative ( $-40 \text{ kJ/mol}$ ) appliquée aux coefficients cinétiques de dissolution de la portlandite et des autres hydrates.

$$k_c(T) = k_c(T_{\text{ref}}) \times \exp\left(-\frac{Q_{p\_kCH}}{R} \times \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{\text{ref}}}\right)\right) \quad (\text{II.28})$$

### II.3.2.3. Loi de Henry

Le coefficient de la loi de Henry donne la relation entre pression partielle de CO<sub>2</sub> gazeux et CO<sub>2</sub> dissous dans la solution interstitielle. Il est modifié en fonction de la température par une fonction d'Arrhenius, avec une énergie d'activation  $Q_{p\_kH}$  égale à 19,95 kJ/mol [BAZANT et al., 1972] :

$$k_H(T) = k_H(T_{ref}) \times \exp\left(-\frac{Q_{p\_kH}}{R} \times \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right) \quad (\text{II.29})$$

### II.3.2.4. Viscosité de l'eau

La viscosité de l'eau diminue lorsque la température augmente [THIERY, 2005], [BARY et al., 2006] et est modélisée par une fonction d'Arrhenius où  $Q_{p\_η}$  est l'énergie d'activation de ce phénomène égale à -15,7kJ/mol.

$$\eta(T) = \eta(T_{ref}) \times \exp\left(-\frac{Q_{p\_η}}{R} \times \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right) \quad (\text{II.30})$$

### II.3.2.5. Isothermes de désorption

Les isothermes de sorption/désorption sont modifiées par la température. Il est proposé ici de prendre en compte cette modification à travers une adaptation de ce qui a été initialement proposé par Poyet [POYET et al., 2009] sur la base des résultats expérimentaux de Hundt & Kantelberg (1978) [PAPADAKIS et al., 1991], [SAEKI et al., 1991].

$$S_r(T) = S_r(T_{ref}) \times \exp\left(-\frac{Q_{p\_Sr}}{R} \times \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right) \quad (\text{II.31})$$

Avec l'énergie d'activation :

$$Q_{p\_Sr} = a_1 + \frac{a_2}{\left(a_3 + \frac{p_l}{P_m(T)}\right)^2} \quad (\text{II.32})$$

Où  $P_m(T) = a_4 + a_5 \times (T - T_{ref})$ ; les coefficients expérimentaux  $a_1 = 427$  J/mol,  $a_2 = 646$  J/mol,  $a_3 = 1,31$ ,  $a_4 = -52,35$  MPa ;  $a_5 = 1,46$  MPa/K [de LARRARD et al., 2014].

## II.4. Synthèse des données d'entrée du modèle

### II.4.1. Grandeurs physiques caractéristiques du matériau

#### II.4.1.1. Composition

Le modèle nécessite la connaissance de la composition de la pâte de ciment, ses phases hydratées principales sont supposées être: la portlandite (CH), les silicates de calcium hydratés (CSH), le monosulfoaluminate (AFm), le trisulfoaluminate (AFt).

- La quantité initiale de portlandite ( $n_{CH,0}$ )
- La quantité initiale d'autres hydrates - principalement CSH ( $n_{CSH,0}$ )
- La quantité initiale de monosulfate ( $n_{AFm,0}$ )
- La quantité initiale de hexahydrate ( $n_{Hexa,0}$ )
- La fraction volumique de pâte de ciment ( $V_p$ )

A ces paramètres de composition s'ajoutent certaines caractéristiques du matériau poreux :

- La porosité initiale ( $\phi_0$ )
- L'humidité relative initiale du matériau ( $H_{rini}$ )
- La température initiale du matériau ( $T_{ini}$ )

#### II.4.1.2. Grandeur du transfert

- La perméabilité intrinsèque du matériau correspondant à la porosité initiale  $\phi_0$  ( $K^0$ )
- Le coefficient de diffusion de  $CO_2$  dans l'air ( $D_{CO_2}$ ),
- Le coefficient de diffusion effective des ions calcium dans la solution de pores ( $D_{Ca}$ ),
- Le coefficient de diffusion d'ionique traversé cette gangue ( $D_{CaCO_3}$ )
- Le coefficient de viscosité dynamique de l'eau ( $\eta$ )
- L'énergie d'activation pour le processus de diffusion du  $CO_2$  ( $Q_{p\_CO_2}$ )
- L'énergie d'activation de la cinétique de formation de la calcite de portlandite ( $Q_{p\_kCH}$ )
- L'énergie d'activation du coefficient de Henry ( $Q_{p\_kH}$ )
- L'énergie d'activation de la viscosité de l'eau ( $Q_{p\_n}$ )
- La cinétique de dissolution-précipitation d'hydrates - sauf CH ( $\alpha_{CSH}$ )

## II.4.2. Grandeurs caractéristiques de l'environnement

- L'humidité relative extérieure moyenne ( $H_{\text{ext}}$ )
- La température extérieure moyenne ( $T_{\text{ext}}$ )
- La pression partielle de  $\text{CO}_2$  en phase gazeuse ( $p_{\text{CO}_2}$ )

## II.4.3. Grandeurs représentatives de la physique du problème

- L'épaisseur équivalente de la calcite ( $\lambda$ )
- Le volume molaire de  $\text{CaCO}_3$  ( $V_{\text{CaCO}_3}$ )
- Le volume molaire de la portlandite ( $V_{\text{CH}}$ )
- Le volume molaire du CSH ( $V_{\text{CSH}}$ )
- Le rayon équivalent initial de produits hydratés ( $R_{p0}$ )
- La teneur en eau stœchiométrique moyenne en hydrates – sauf CH ( $\alpha_{\text{HYD}}$ )

La Tableau II.2 se présente toutes les données d'entrée du modèle :

N°	Variables	Indice du modèle	Unité	N°	Variables	Indice du modèle	Unité
1	$\phi_0$	phi0	-	17	$\eta_{T_{\text{ref}}}$	eta_Tref	kg/m×s
2	$V_p$	V_p	-	18	$Q_{p\_CO2}$	Qp_CO2	m <sup>2</sup> ×kg/s <sup>2</sup> /mol
3	$n_{\text{CH},0}$	nCH,0	mol/m <sup>3</sup>	19	$Q_{p\_kCH}$	Qp_kCH	m <sup>2</sup> ×kg/s <sup>2</sup> /mol
4	$n_{\text{CSH},0}$	nCSH,0	mol/m <sup>3</sup>	20	$Q_{p\_kH}$	Qp_kH	m <sup>2</sup> ×kg/s <sup>2</sup> /mol
5	$n_{\text{AFm},0}$	nAFm,0	mol/m <sup>3</sup>	21	$Q_{p\_eta}$	Qp_eta	m <sup>2</sup> ×kg/s <sup>2</sup> /mol
6	$n_{\text{Hexa},0}$	nHexa,0	mol/m <sup>3</sup>	22	$p_{\text{CO}_2}$	pCO2	Pa
7	$\rho_l$	rho	kg/m <sup>3</sup>	23	$K^0$	k,0	m <sup>2</sup>
8	$p_0$	p0	kg/m/s <sup>2</sup>	24	$\lambda$	Lamda	m
9	$b$	b	-	25	$D_{\text{Ca}}$	DCa	m <sup>2</sup> /s
10	$V_{\text{CaCO}_3}$	V_CaCO3	m <sup>3</sup> /mol	26	$R_{p0}$	Rp,0	m
11	$V_{\text{CH}}$	V_CH	m <sup>3</sup> /mol	27	$\alpha_{\text{CSH}}$	anphaCSH	-
12	$V_{\text{CSH}}$	V_CSH	m <sup>3</sup> /mol	28	$Hr_{\text{ini}}$	Hr_ini	-
13	$Ca_0$	Ca,0	mol/m <sup>3</sup>	29	$Hr_{\text{moy}}$	Hr_moy	-
14	$\alpha_{\text{HYD}}$	alphaHYD	-	30	$T_{\text{ini}}$	T_ini	K
15	$D_{\text{CO}_2, T_{\text{ref}}}$	DCO2_Tref	m <sup>2</sup> /s	31	$T_{\text{moy}}$	T_moy	K
16	$k_{\text{H}, T_{\text{ref}}}$	kH_Tref	-	32	$a_1$	a1	-

Tableau II.2. Grandeurs physiques d'entrée du modèle

## II.5. Mise en œuvre des équations

### II.5.1. Implémentation dans un code aux éléments finis

Les équations présentées dans la partie précédente sont implémentées dans le code de calcul Comsol Multiphysic, et plus particulièrement dans le module « Heat Transfer in Solids », en vue d'une résolution par la méthode des éléments finis.

Le principe de la résolution est d'exploiter l'analogie des équations de conservation avec l'équation de la chaleur dans sa forme la plus générale (II.33) avec un terme capacitif, un terme diffusif et un terme source.

$$\rho \times C_p \times \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k \times \nabla T) + Q \quad (\text{II.33})$$

Où  $\rho$  est la densité de matériau ;  $C_p$  est la capacité thermique ;  $k$  est la conductivité thermique ;  $Q$  est le terme source de chaleur ;  $T$  est la température.

Ainsi, les équations dans le modèle proposé deviennent :

- Conservation de la masse d'eau :

$$\rho_l \times \phi \times \frac{\partial S_r}{\partial t} = -\text{div} \left[ \frac{K^\phi \times \rho_l}{\eta} \times k_{rl} \times p'_{cap} \times H'_r \times \text{grad}(S_r) \right] - k_{sl} \times M_{H_2O} \times n_w \times \frac{\partial Ca}{\partial t} - \rho_l \times S_r \times \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (\text{II.34})$$

- Conservation de la masse de dioxyde de carbone :

$$\phi \times (1 - S_r) \times \frac{\partial p_c}{\partial t} = \text{div} [f_{(\phi, S_r)} \times D_{CO_2} \times \text{grad}(p_c)] - R \times T \times \frac{\partial n_{cal}}{\partial t} + \phi \times p_c \times \frac{\partial S_r}{\partial t} - (1 - S_r) \times p_c \times \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (\text{II.35})$$

- Conservation de la masse de calcium :

$$[S_r \times \phi + k_{sl} \times n_{CaS}] \times \frac{\partial C_a}{\partial t} = \text{div} [D_{Ca} \times \text{grad}(C_a)] - \text{div} [D_{Ca} \times \text{grad}(C_{a\_eq})] - \text{div} \left[ \frac{(C_{a\_cal} - C_{a\_eq}) K^\phi}{\eta} \times k_{rl} \times p'_{cap} \times H'_r \times \text{grad}(S_r) \right] - \frac{\partial n_{cal}}{\partial t} - \phi \times C_a \times \frac{\partial S_r}{\partial t} - S_r \times C_a \times \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (\text{II.36})$$

- Variation de la porosité :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -k_{sl} \times V_{dS} \times \frac{\partial C_a}{\partial t} - V_{CaCO_3} \times \phi \times S_r \times \frac{\partial n_{cal}}{\partial t} \quad (\text{II.37})$$

- Variation de la teneur en portlandite :



$$\frac{\partial n_{CH}}{\partial t} = -k_{sl} \times k_{CO2} \times k_C \times p_c \quad (\text{II.38})$$

- Variation de la teneur en autres hydrates :

$$\frac{\partial n_{CSH}}{\partial t} = -k_{sl} \times k_{CO2} \times k_{CSH} \times p_c \quad (\text{II.39})$$

- Variation de la teneur en calcite :

$$\frac{\partial n_{cal}}{\partial t} = \left( \frac{\partial n_{CH}}{\partial t} + \frac{\partial n_{CSH}}{\partial t} \times \frac{1}{\alpha_{HYD}} \right) \quad (\text{II.40})$$

- Diffusion de la chaleur :

$$\rho_m \times c_m \times (1 - \phi) \times \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}[\lambda_m \times \text{grad}(T)] + \rho_m \times c_m \times T \times \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (\text{II.41})$$

## II.5.2. Structure modélisée

Ce modèle est appliqué à une structure bidimensionnelle qui simule un échantillon de béton exposé à des conditions atmosphériques. Cet échantillon est un rectangle de dimensions 10 cm × 10 cm, avec deux faces exposées. Il représente un quart d'un poteau ou d'une poutre en béton renforcé avec une armature. Le diamètre de l'armature est  $d_{arm}$  (mm) et l'enrobage est égal à  $c$  (mm). La direction de carbonatation est estimée suivant 2 sections 1\_1 ou 2\_2 comme montré dans la Figure II.3. Le maillage est construit de sorte que la distance entre les nœuds soit environ égale à 1 mm. Le maillage comprend 101 nœuds (ou 100 éléments) (Figure II.4).

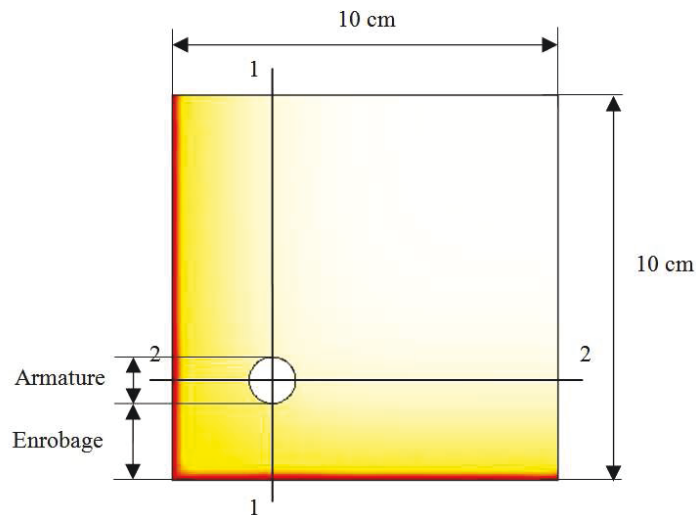


Figure II.3. Géométrie 2D du modèle structure en béton armé

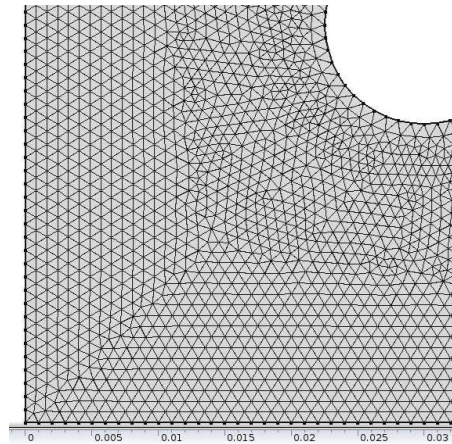


Figure II.4. Illustration du maillage à l'angle de la structure

### II.5.3. Conditions initiales et conditions aux limites

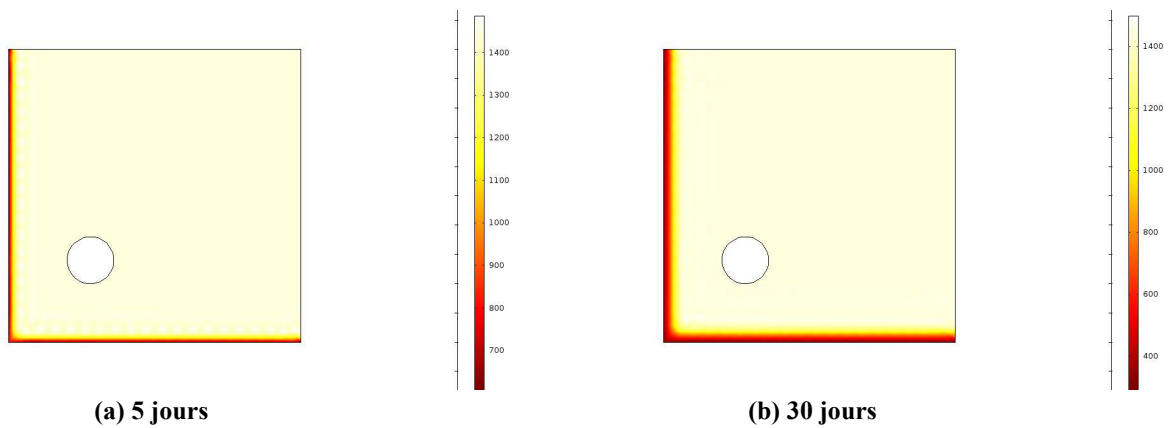
L'instant initial est celui de la mise en exposition du matériau. A cet instant, l'état du béton est supposé homogène en saturation et en température.

Sur les faces exposées, une condition de Dirichlet est imposée pour la pression de CO<sub>2</sub> (35 Pa pour une dégradation atmosphérique, 50 kPa pour une dégradation accélérée), la température et l'humidité relative. On notera dans ce cas que la condition aux limites en température ne prend pas en compte les problématiques de flux convectifs ou de rayonnements, qui seront négligées dans cette étude.

Les autres conditions aux limites sont de Neumann : on impose un flux nul.

### II.5.4. Exemples

La Figure II.5 illustre la teneur en portlandite pour un essai accéléré à diverses échéances.



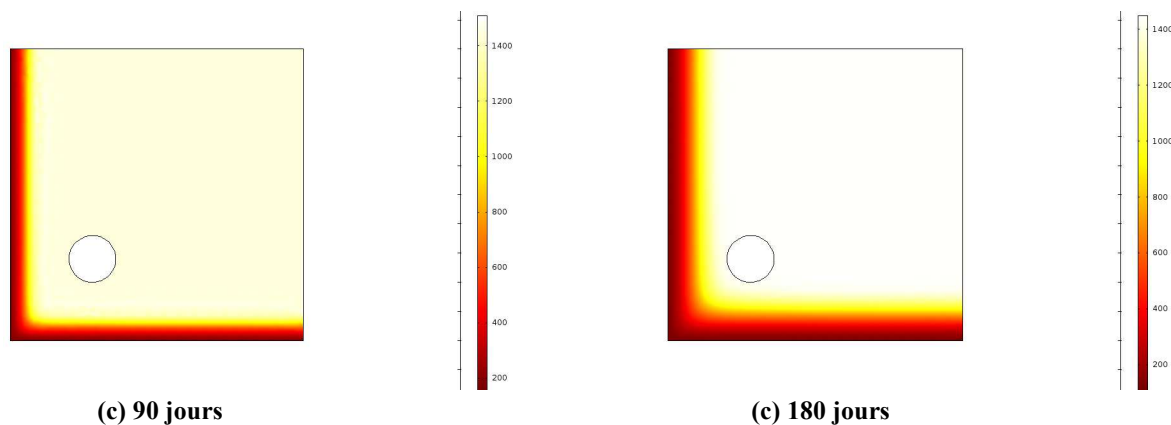


Figure II.5. Teneur en portlandite pour un essai accéléré sur le béton C25

## II.6. Validation du modèle

Afin de valider le modèle proposé, des comparaisons avec d'autres modèles antérieurement publiés, et avec des essais de carbonatation accélérée et atmosphérique ont été établies.

La profondeur de carbonatation est déterminée par la dissolution de la portlandite. Cette valeur du seuil de dissolution n'est pas unique. Plusieurs valeurs ont été proposées et utilisées dans la littérature pour ce seuil. Pour les applications présentées dans cette étude, la profondeur de la carbonatation a été définie pour différentes valeurs de ce seuil : la profondeur carbonatée correspond à l'épaisseur de béton dans laquelle la teneur en portlandite à un instant donné est inférieure à 60%, 70% ou 80% de la teneur initiale ( $n_{CH,0}$ ).

### II.6.1. Carbonatation accélérée

Le matériau initial est totalement saturé et ensuite exposé à une humidité relative de 65% et une température de 20°C sur la surface extérieure. Le matériau étudié est un béton de CEM I avec rapport eau/ciment égal à 0,42. Les paramètres d'entrée sont semblables à ceux utilisés pour des modèles antérieurs [BARY, 2006], [de LARRARD et al., 2013].

La profondeur estimée de la carbonatation à partir du modèle proposé après 230 jours est comparée aux prédictions des modèles précédents [BARY, 2006], [de LARRARD et al., 2013] sur la base des mêmes équations dans des conditions d'exposition constantes. On peut voir sur la Figure II.6 que tous les modèles donnent des résultats très similaires, avec le même taux de carbonatation  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,9$ . Précisons que le seuil de dissolution de la portlandite à partir duquel est définie la profondeur de carbonatation n'a pas d'influence significative dans le cas de carbonatation accélérée étant donnés les fronts de dissolution très raide de portlandite comme cela apparaît sur la Figure II.7, par opposition à ce que l'on peut constater pour de la carbonatation atmosphérique.

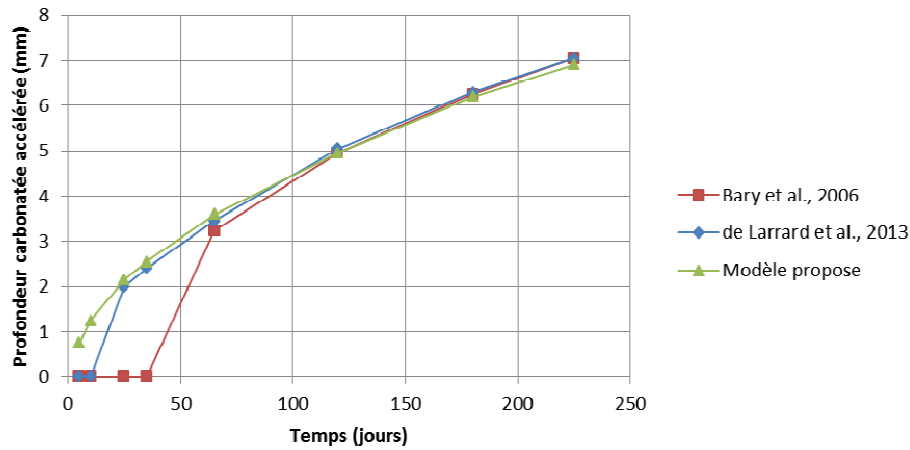


Figure II.6. Comparaison entre notre modélisation et des modélisations antérieures [BARY, 2006], [de LARRARD et al., 2013]

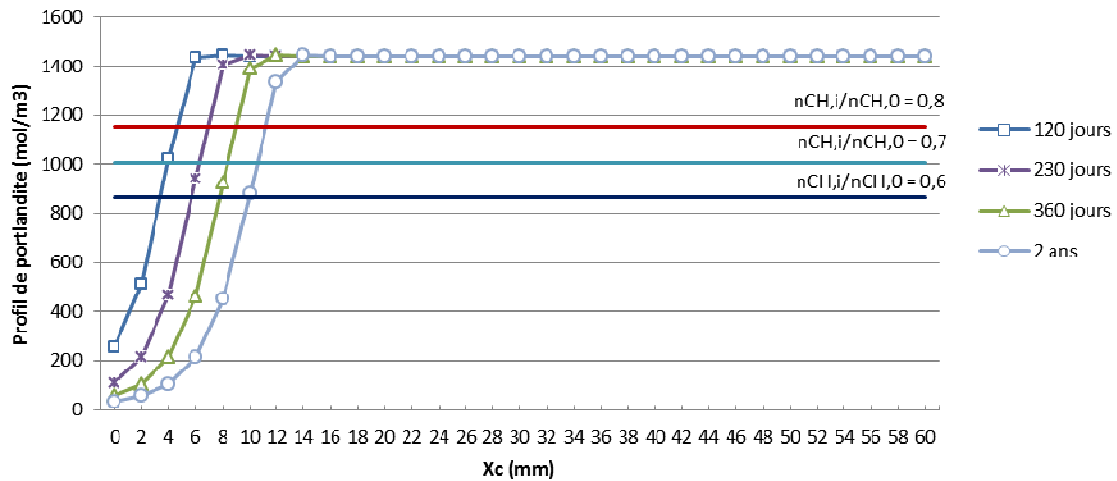


Figure II.7. Illustration des profils de portlandite obtenus par simulation sur la carbonatation accélérée

La comparaison avec les résultats expérimentaux de [THIERRY, 2005] présentée sur la Figure II.8, ne montre pas un accord parfait du profil du portlandite à 14 jours : les points expérimentaux ne coïncident pas exactement avec la prédiction. Ces différences peuvent être expliquées par le fait que ces résultats sont obtenus avec des paramètres d'entrée sur lesquels subsiste une incertitude relativement importante, ce qui illustre la difficulté de renseigner ce type de modèles (besoin de beaucoup de données expérimentales). Les sorties du modèle se trouvent donc dans un intervalle au lieu d'une seule valeur.

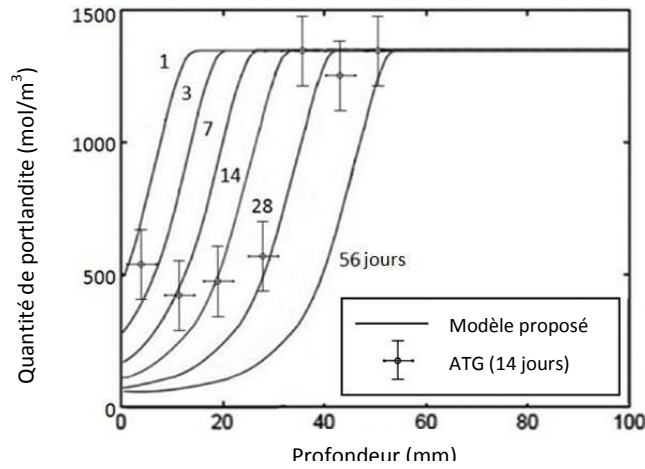


Figure II.8. Comparaison du profil de portlandite avec les résultats expérimentaux [THIERY, 2005]

## II.6.2. Carbonatation atmosphérique

Le modèle a également été utilisé pour simuler des dégradations en conditions atmosphériques sur la base de données publiées dans la littérature scientifique.

Les premières données exploitées sont celles de [ANN et al., 2010]. Les conditions environnementales (température et humidité relative sur la face exposée) sont présentées sur la Figure II.10. Les mesures de profondeurs de carbonatation sont effectuées après 18 ans d'exposition sur des carottes de béton extraites d'une pile de pont. La composition du béton comprend  $320 \text{ kg/m}^3$  de ciment Portland,  $144 \text{ kg/m}^3$  d'eau,  $813 \text{ kg/m}^3$  du sable 2-6 et  $1062 \text{ kg/m}^3$  du gravillon (taille maximale: 20 mm).

La comparaison entre la simulation (pour différentes valeur du seuil de dissolution de la portlandite) et les résultats expérimentaux apparait sur la Figure II.11. Cette comparaison est satisfaisante même s'il convient de tempérer ces résultats par le peu de données expérimentales disponibles.

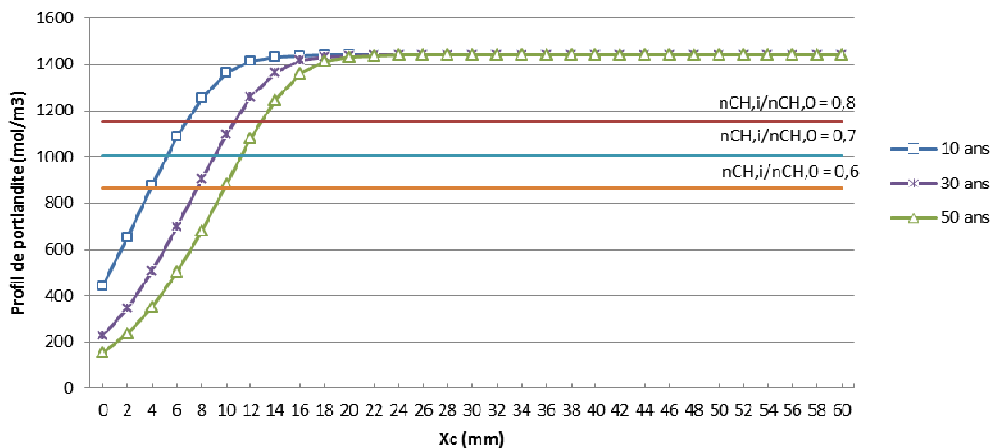


Figure II.9. Illustration des profils de portlandite obtenus par simulation sur la carbonatation atmosphérique

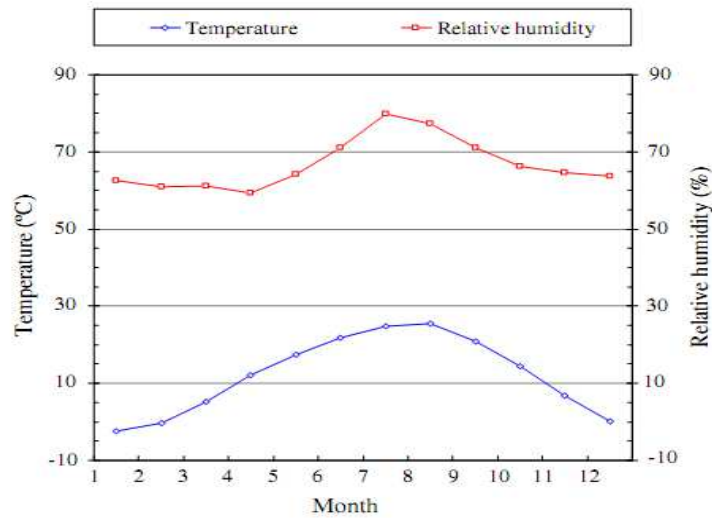


Figure II.10. Condition d'exposition annuelle de [ANN et al., 2010]

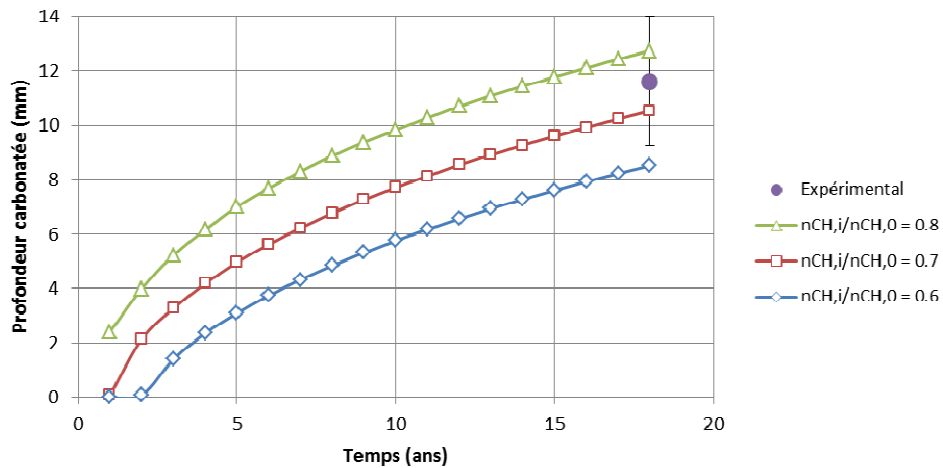


Figure II.11. Profondeur de carbonatation du modèle proposé et résultats expérimentaux de [ANN et al., 2010]

Le modèle est utilisé pour simuler des essais réalisés par [HAN et al., 2013] pour deux bétons (respectivement  $f_c=21$  MPa et  $E/C=0,53$  pour l'un ;  $f_c=24$  MPa et  $E/C=0,47$  pour l'autre). Les résultats apparaissent dans les Figures II.12 et II.13. Comme dans le cas précédent, il est délicat d'estimer les données d'entrée du modèle à partir des données expérimentales. On constate cependant que le modèle corrobore bien les profondeurs mesurées.

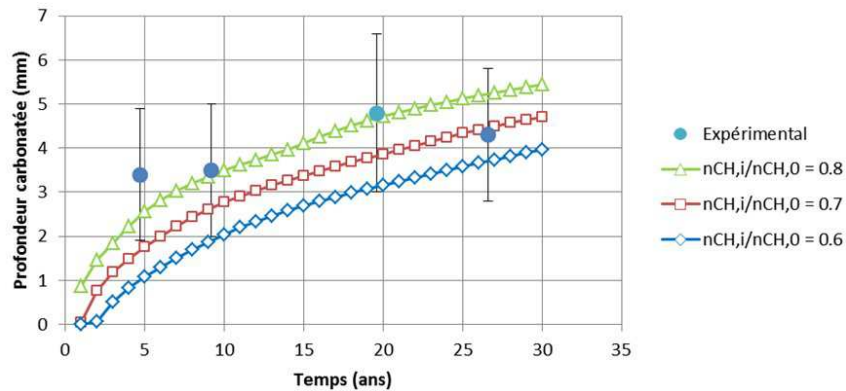


Figure II.12. Comparaison avec le béton 21 MPa de [HAN et al., 2013]

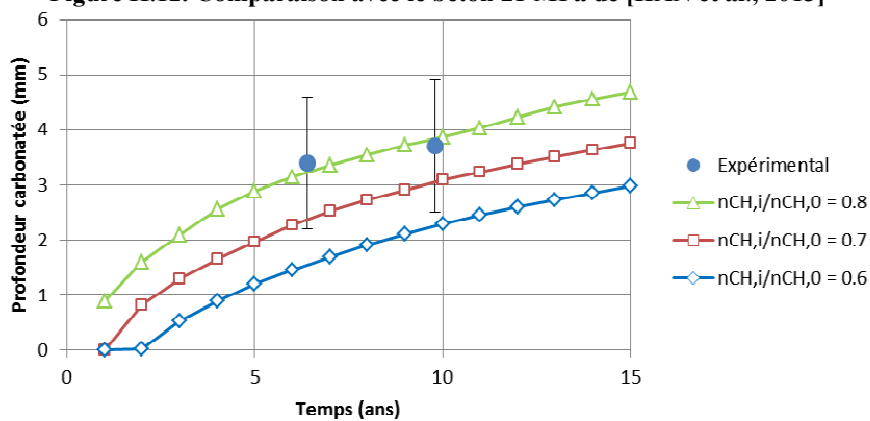


Figure II.13. Comparaison avec le béton 24 MPa de [HAN et al., 2013]

La campagne expérimentale du [GUIGLIA et al., 2013] a impliqué environ 1350 essais sur des bétons CEM II/AL, CEM II/BL et CEM I avec une résistance moyenne à la compression de 20 à 50  $N/mm^2$ . Les essais ont été réalisés sur des carottes prélevées aux extrémités d'un tunnel, sur une butée et une jetée, après 5 ans d'exposition. Les Figures II.14, II.15 et II.16 montrent qu'une bonne partie des points expérimentaux se situe dans le fuseau de courbes obtenues par le modèle pour plusieurs hypothèses du rapport  $n_{CH,i}/n_{CH,0}$ . Même si l'on pourrait penser, pour les points localisés en dehors de ce fuseau, que le modèle sous-estime la profondeur carbonatée, il apparaît que les prévisions du modèle sont assez satisfaisantes.

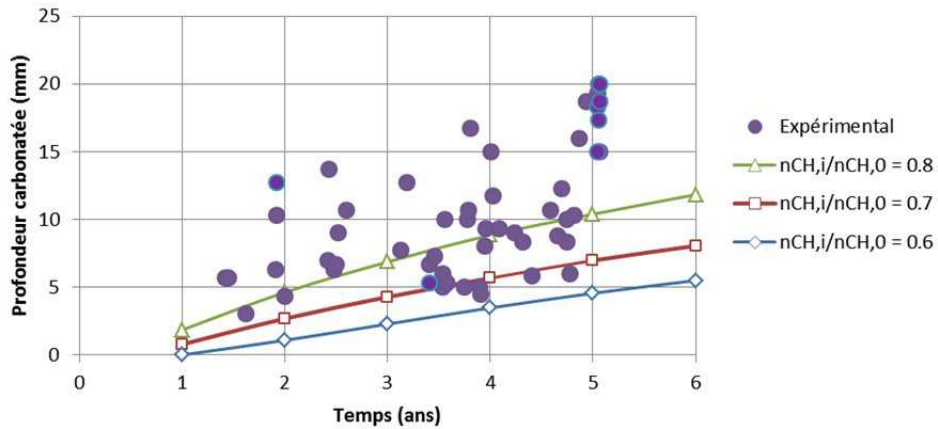


Figure II.14. Profondeur de carbonatation du modèle proposé et résultats expérimentaux sur une jetée de [GUIGLIA et al., 2013]

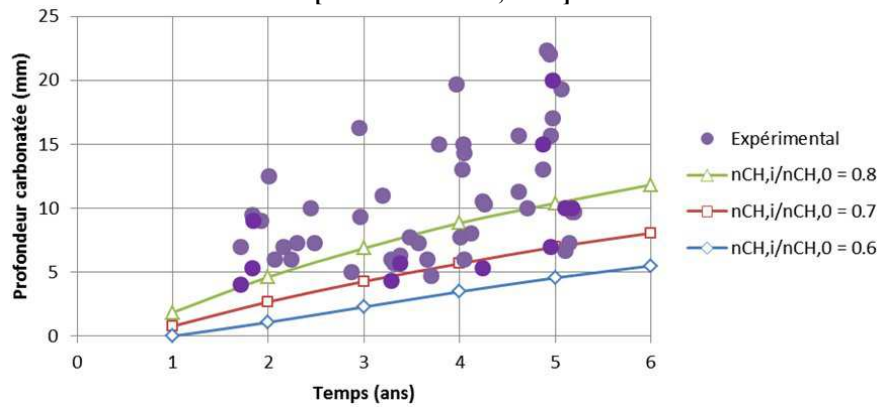


Figure II.15. Profondeur de carbonatation du modèle proposé et résultats expérimentaux sur une butée de [GUIGLIA et al., 2013]

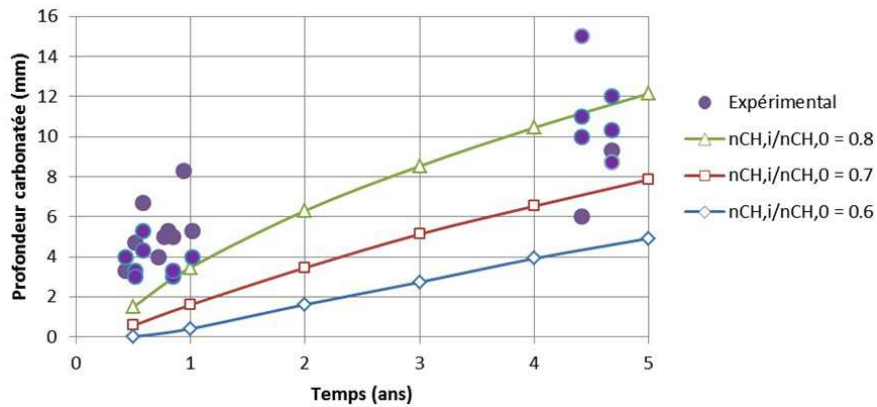


Figure II.16. Profondeur de carbonatation du modèle proposé et résultats expérimentaux sur un tunnel de [GUIGLIA et al., 2013]

Enfin, on s'intéresse aux résultats de [VU, 2011], dans lesquels la profondeur de carbonatation est déterminée par phénolphtaléine après 41 jours d'exposition à une dégradation accélérée puis 434 jours de dégradation atmosphérique. Le béton utilisé est un CEM I, la résistance à 28 jours est de 40,2 MPa, la



porosité est égale à 14,5%. On effectue des simulations de Monte Carlo pour obtenir la distribution de la grandeur de sortie. On a procédé à 2000 tirages, nombre suffisant dans cette application pour assurer une bonne estimation des centiles 97,5% et 2,5% de la profondeur de carbonatation simulée. On peut constater sur la Figure II.19, avec  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,6$ , que de nombreux points expérimentaux (60%) appartiennent à l'intervalle de confiance à 95% déterminé par le modèle. La comparaison est moins satisfaisante pour les autres valeurs de  $n_{CH,i}/n_{CH,0}$  (Figures II.17 et II.18). Il est possible que les coefficients de variation ( $c_v = 0,1-0,2$ ) des variables du modèle considérées comme aléatoires (porosité, quantité initiale de portlandite, fraction volumique de pâte de ciment, perméabilité intrinsèque du matériau, coefficient de diffusion de  $CO_2$ ) aient été choisis trop réduits pour que les intervalles de confiance couvrent correctement les points expérimentaux. On remarque toutefois que la tendance moyenne est bien captée pour  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,7$ .

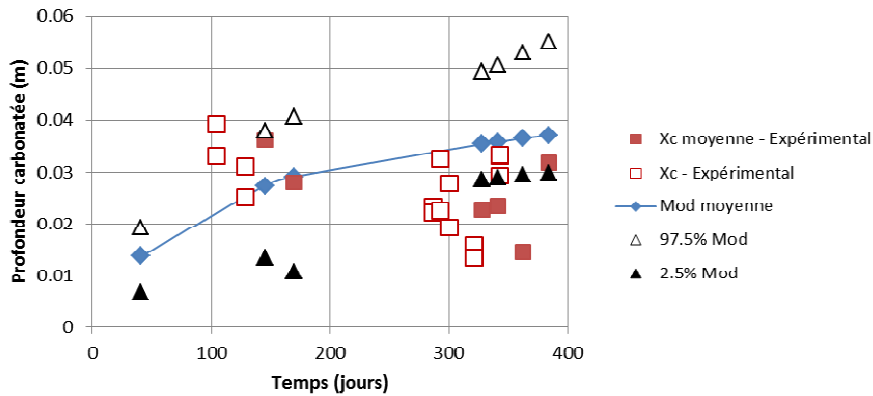


Figure II.17. Comparaison entre les résultats expérimentaux de [VU, 2011] et le modèle avec un taux de carbonatation  $n_{CH,i}/n_{CH,0} = 0,8$

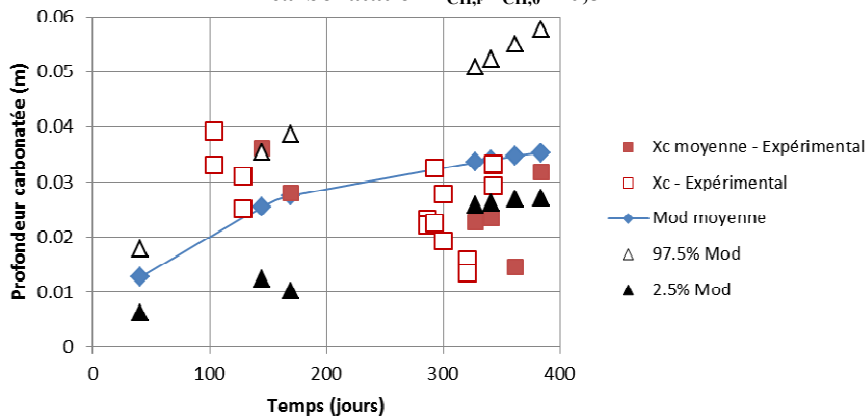


Figure II.18. Comparaison entre les résultats expérimentaux de [VU, 2011] et le modèle avec un taux de carbonatation  $n_{CH,i}/n_{CH,0} = 0,7$

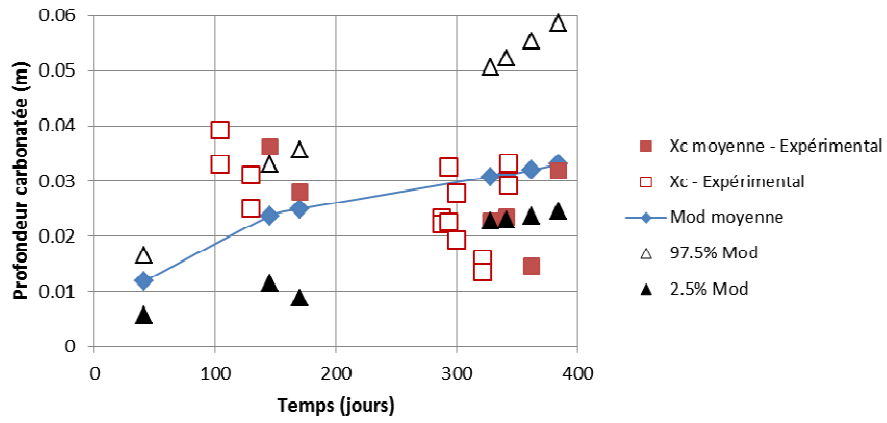


Figure II.19. Comparaison entre les résultats expérimentaux de [VU, 2011] et le modèle avec un taux de carbonatation  $n_{CH,i}/n_{CH,0} = 0,6$

## *II.7. Analyses et résultats*

Les parties précédentes de ce chapitre ont explicité les équations fondamentales du modèle développé et implémenté dans un code de calculs aux éléments finis. Le principe de la modélisation est donc la résolution couplée de trois équations de conservation de la masse et de l'équation de la chaleur. Les équations de conservation permettent de simuler l'évolution de la saturation et donc des échanges hydriques, de la pénétration du dioxyde de carbone qui pilote la dégradation par carbonatation, et enfin de du calcium, espèce chimique liant les produits initiaux (notamment la portlandite) au produit final du processus chimique de la carbonatation (la calcite).

Tel qu'il est présenté jusqu'à présent, le modèle requiert un grand nombre d'informations comme données d'entrée, qu'elles soient relatives aux propriétés du matériau (composition, porosité, propriétés de transferts, etc.) ou aux conditions d'expositions. Toutes ces données étant sujettes à un certain aléa ou un certain niveau d'incertitude, elles sont susceptibles d'être incluses dans une démarche probabiliste. Etant donnée la lourdeur des simulations numériques qui en découle, une première étape de l'analyse du modèle, proposée dans cette section, est d'étudier la pertinence de la prise en compte d'un certain nombre de phénomènes physiques dans le processus de carbonatation et le degré de précision requis pour une qualité de simulation numérique estimée satisfaisante.

### **II.7.1 Cas d'études**

Les résultats et commentaires qui seront présentés dans cette partie résulteront de simulations menées sur des bétons dont les formulations sont présentées dans le Tableau II.3. L'idée est d'observer les résultats obtenus pour un béton C25 à faible teneur en ciment, et donc faible teneur en portlandite et à haute porosité, donc peu résistant à la carbonatation, et, à l'inverse, un C45 riche en portlandite et peu poreux, moins susceptible de se dégrader rapidement. Certains résultats concernant la carbonatation accélérée sont présentés dans un but comparatif : ils correspondent seulement à l'application d'une pression partielle de dioxyde de carbone égale à 50% de la pression atmosphérique, sans considération des conditions classiques d'humidité relative et de température appliquées pour ce type d'essai.

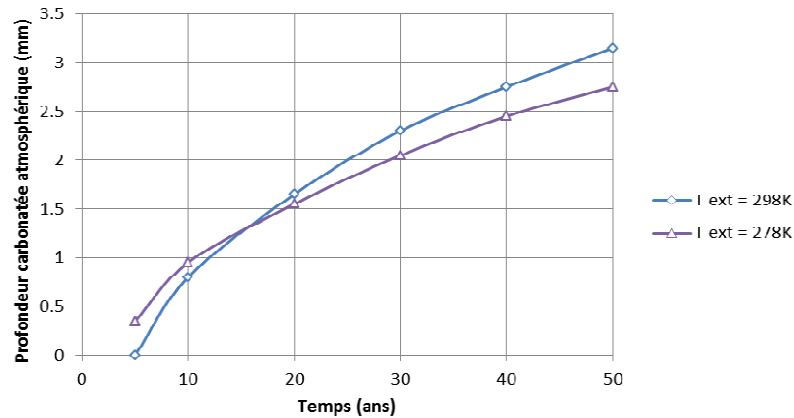
### **II.7.2. Prise en compte de l'exposition atmosphérique**

Avant même de considérer la prise en compte des aléas climatiques, c'est-à-dire des variations de température et d'humidité relative extérieure, on peut s'interroger sur l'effet de la température sur la cinétique globale de carbonatation dans les intervalles de température à considérer pour des expositions atmosphériques. Les Figures II.20 et II.21 illustrent les différences de cinétique simulées pour le C45 et le

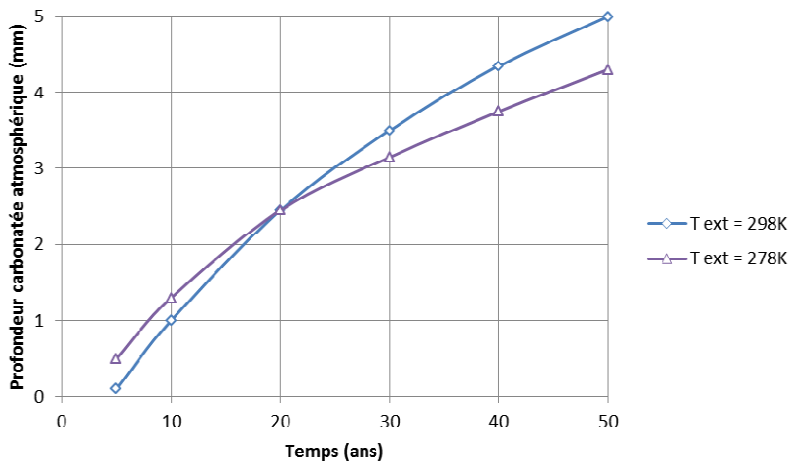
C25 quant à la vitesse de pénétration du front de carbonatation selon qu'on considère que la dégradation a lieu à une température constante et homogène de 5°C ou 25°C. On y observe que la température a un effet non négligeable sur la vitesse de dégradation. Notons également que les basses températures induisent une carbonatation plus rapide en début de dégradation (faibles profondeurs carbonatées) puis plus lentes pour les échéances ultérieures, que le béton soit faiblement ou fortement résistant à la carbonatation. Ceci illustre les effets contradictoires de la température : d'une part la solubilité des hydrates est dite rétrograde, c'est-à-dire qu'une élévation de la température diminue la solubilité des hydrates et donc augmente la résistance à la carbonatation ; d'autre part, la température favorise les phénomènes de transfert (diffusion et perméation). Ainsi pour de faibles épaisseurs dégradées, l'équilibre chimique prédomine sur la phase de transfert (faibles distances pour le transport des espèces), ce qui n'est plus le cas pour des épaisseurs carbonatées plus importantes.

		Béton C45	Béton C25
Composition de ciment(%)	Clinker	98,74	96
	SiO <sub>2</sub>	14,0	20,3
	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6,0	5,6
	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4,5	2,3
	CaO	68,0	64,2
	SO <sub>3</sub>	3,45	3,2
Mélange de béton (kg/m <sup>3</sup> )	C (ciment)	340	295
	E (eau)	153	200
	G (granulat)	1850	1781
Les hydrates principaux (mol/m <sup>3</sup> )	n <sub>CH,0</sub>	1440	1508
	n <sub>CSH,0</sub>	1118	866
Porosité $\phi_0$		0,12	0,155
Perméabilité intrinsèque $K_0$ (m <sup>2</sup> )		$2,1 \times 10^{-22}$	$5 \times 10^{-17}$
Coefficient de diffusion $D_{CO_2}$ (m <sup>2</sup> /s)		$3,84 \times 10^{-5}$	$6,2 \times 10^{-5}$
Degré d'hydratation $\alpha_{HYD}$		0,56	0,893
Coefficient cinétique de dissolution-précipitation des hydrates $\alpha_{CSH}$ (-)		$4 \times 10^{-4}$	$4 \times 10^{-4}$
Paramètre interprétant l'épaisseur équivalente de calcite $\lambda$ (m)		$5 \times 10^{-7}$	$5 \times 10^{-7}$
Rayon initial de ces produits $R_{p0}$ (m)		$20 \times 10^{-6}$	$20 \times 10^{-6}$

**Tableau II.3. Formulations et caractéristiques physiques principales pour le C45 et le C25 de l'étude numérique.**



**Figure II.20 Effet de la température du matériau sur la vitesse de carbonatation atmosphérique du béton C45**



**Figure II.21 Effet de la température du matériau sur la vitesse de carbonatation atmosphérique du béton C25**

Toutefois, la dégradation qui nous intéresse est une carbonatation atmosphérique, c'est-à-dire lorsque le matériau est exposé à des variations de températures et d'humidité relative correspondant aux aléas climatiques. Pour prendre ceci en considération, une chronique type a été établie sur la base de relevés des variations climatiques observées sur Toulouse entre 1970 et 2000. La question qui nous préoccupe dans un premier temps est de déterminer quelle précision dans la description des variations climatiques est requise pour la simulation de la carbonatation. En effet, si les variations de conditions extérieures (température et humidité relative) sont modélisables avec un pas de temps horaire, il n'est pas réaliste de mener les simulations numériques de carbonatation avec une discrétisation temporelle aussi fine. Les conditions aux limites du problème numérique, que sont la température extérieure et l'humidité relative, sont donc moyennées sur la durée du pas de temps de la simulation numérique. Plus ce pas de temps est court, plus la simulation est précise mais coûteuse en temps de calcul. Les Figures II.22 et II.23 illustrent donc la chronique de condition climatique reprise pour simuler l'environnement toulousain, avec une discrétisation temporelle allant de 5 à 90 jours.

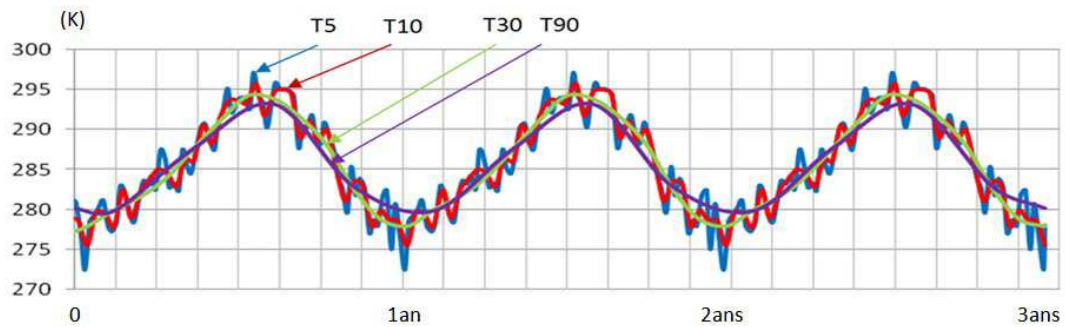


Figure II.22. Evolution annuelle de la température à Toulouse (T5, T10, T30, T90 : pas de temps utilisé respectivement de 5, 10, 30 et 90 jours)

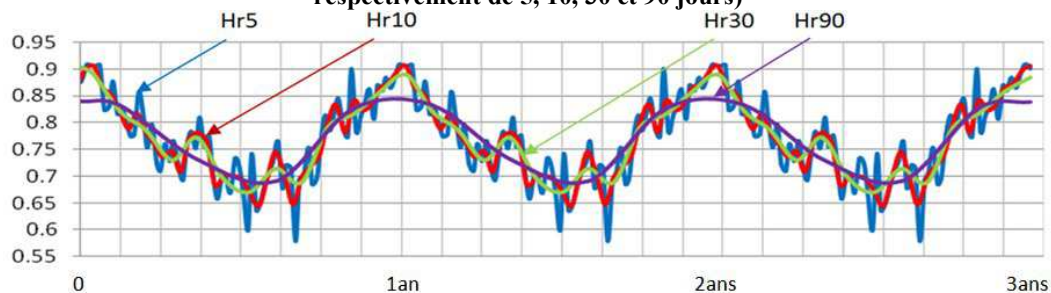


Figure II.23. Evolution annuelle de l'humidité relative à Toulouse (Hr5, Hr10, Hr30, Hr90 : pas de temps utilisé respectivement de 5, 10, 30 et 90 jours)

Les résultats des simulations de carbonatation pour les deux bétons sous les différentes hypothèses de discrétisation temporelle sont représentés dans les Figures II.24 et II.25 respectivement. Ces résultats sont synthétisés à travers le Tableau II.4, dans lequel l'écart relatif des résultats de simulation apparaît en prenant la profondeur de carbonatation à 50 ans sous le pas de temps le plus faible comme valeur de référence. On constate que l'impact d'une augmentation du pas de temps est relativement limité : la différence est d'environ 10% entre un pas de temps de 5 jours et 365 jours (valeur moyenne annuelle) après 50 ans d'exposition pour le béton C45 et béton C25.

	<i>La profondeur de la carbonatation <math>X_c</math> (mm)</i>	
Pas de temps	Béton C45	Béton C25
Hr-T – 5 jours	$X_{c,C45}$	$X_{c,C25}$
Hr-T – 10 jours	$0,986\%X_{c,C45}$	$0,979\%X_{c,C25}$
Hr-T – 30 jours	$0,966\%X_{c,C45}$	$0,968\%X_{c,C25}$
Hr-T – 90 jours	$0,946\%X_{c,C45}$	$0,947\%X_{c,C25}$
Hr-T – 365 jours	$0,915\%X_{c,C45}$	$0,926\%X_{c,C25}$

Tableau II.4. Ecart relatif de la profondeur de carbonatation estimée à 50 ans selon la discrétisation temporelle de l'exposition climatique

On observe que l'augmentation du pas de temps de la discrétisation correspond à une minoration de l'épaisseur carbonatée estimée. Cela peut sans doute s'expliquer par la combinaison de deux effets : d'une part, l'augmentation du pas de temps, en moyennant l'information climatique sur un intervalle plus

large, a pour conséquence de « lisser » les variations de température et surtout d'humidité relative, de sorte que les valeurs d'humidité relative faibles et élevées ne sont pas prises en compte (de 58% à 68% et de 85% à 90%, cf. Figure II.23); d'autre part les études montrent que la vitesse maximale de carbonatation à 20°C est obtenue pour une humidité relative comprise entre 50% et 70% [VERBECK, 1958]. Ainsi un allongement du pas de temps ne permet pas de prendre en considération les phases où la carbonatation se déroule dans des conditions optimales, et donc l'estimation globale est inférieure à la simulation de référence.

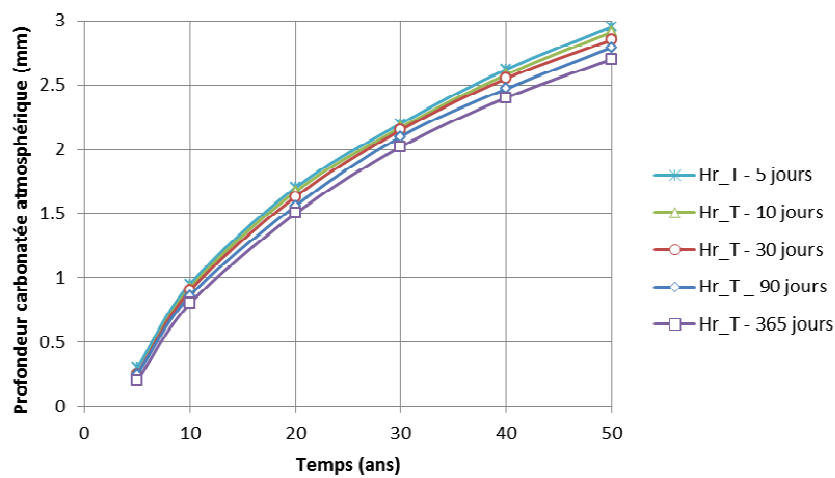


Figure II.24. Profondeur de carbonatation du béton C45 pour différents pas de temps de discrétisation des chroniques environnementales

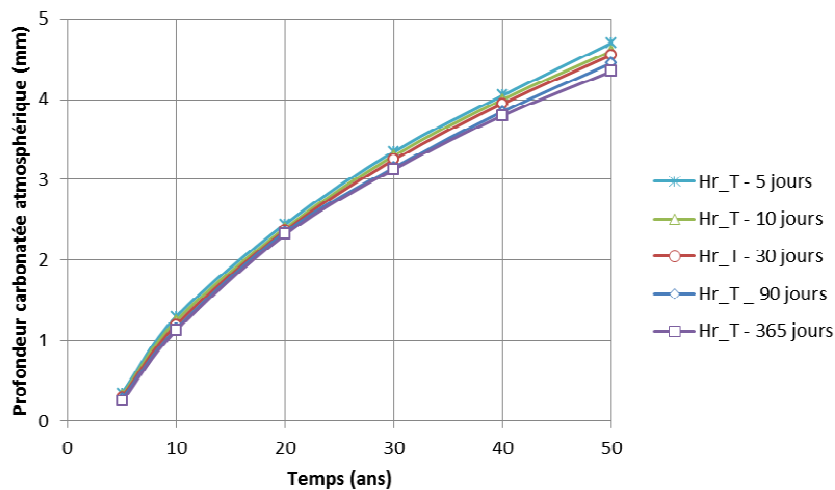


Figure II.25. Profondeur de carbonatation du béton C25 pour différents pas de temps de discrétisation des chroniques environnementales

Le temps de calcul pour une simulation numérique est fonction directement du pas de temps retenu pour modéliser les conditions extérieures et du pas de calcul de la simulation elle-même. Les

Tableaux II.5 et II.6 indiquent respectivement l’allongement de la durée des simulations de carbonatation atmosphérique à 50 ans et de carbonatation accélérée à 180 jours, et la valeur de profondeur de carbonatation estimée, selon la taille du pas de temps pour la description des chroniques climatiques et du pas des simulations numériques. Ces résultats sur la carbonatation atmosphérique et accélérée montrent que le pas de calcul n’affecte que le temps de calcul, et pas la profondeur de carbonatation.

		Pas de calcul (jours)				
Pas de temps		1	5	10	30	60
Hr-T – 5 jours	Temps de calcul (s)	$T_{5j}^{cal}$	$73\% \times T_{5j}^{cal}$	$68\% \times T_{5j}^{cal}$	$68\% \times T_{5j}^{cal}$	$67\% \times T_{5j}^{cal}$
	$X_c$ (mm)	4,77	4,78	4,77	4,78	4,77
Hr-T – 30 jours	Temps de calcul (s)	$T_{30j}^{cal}$	$47\% \times T_{30j}^{cal}$	$38\% \times T_{30j}^{cal}$	$35\% \times T_{30j}^{cal}$	$33\% \times T_{30j}^{cal}$
	$X_c$ (mm)	4,57	4,57	4,57	4,57	4,57
Hr-T – 90 jours	Temps de calcul (s)	$T_{90j}^{cal}$	$38\% \times T_{90j}^{cal}$	$28\% \times T_{90j}^{cal}$	$23\% \times T_{90j}^{cal}$	$22\% \times T_{90j}^{cal}$
	$X_c$ (mm)	4,39	4,40	4,38	4,40	4,39

**Tableau II.5. Temps de calcul de carbonatation atmosphérique après 50 ans du béton C25 selon les pas de temps et pas de calcul**

		Pas de calcul (jours)				
Pas de temps		½	1	3	5	10
Hr-T – 3 jours	Temps de calcul (s)	$T_{3j}^{cal}$	$91\% \times T_{3j}^{cal}$	$84\% \times T_{3j}^{cal}$	$84\% \times T_{3j}^{cal}$	$81\% \times T_{3j}^{cal}$
	$X_c$ (mm)	10,96	11,01	10,95	10,97	10,97
Hr-T – 5 jours	Temps de calcul (s)	$T_{5j}^{cal}$	$84\% \times T_{5j}^{cal}$	$81\% \times T_{5j}^{cal}$	$81\% \times T_{5j}^{cal}$	$81\% \times T_{5j}^{cal}$
	$X_c$ (mm)	10,92	10,92	10,92	10,92	10,93
Hr-T – 10 jours	Temps de calcul (s)	$T_{10j}^{cal}$	$80\% \times T_{10j}^{cal}$	$77\% \times T_{10j}^{cal}$	$77\% \times T_{10j}^{cal}$	$73\% \times T_{10j}^{cal}$
	$X_c$ (mm)	10,88	10,91	10,91	10,90	10,87
Hr-T – 30 jours	Temps de calcul (s)	$T_{30j}^{cal}$	$69\% \times T_{30j}^{cal}$	$59\% \times T_{30j}^{cal}$	$59\% \times T_{30j}^{cal}$	$55\% \times T_{30j}^{cal}$
	$X_c$ (mm)	10,83	10,85	10,84	10,85	10,84

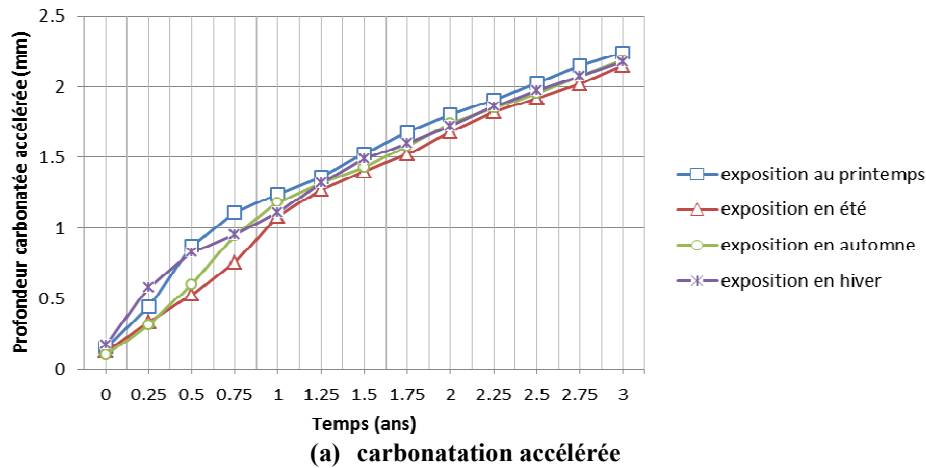
**Tableau II.6. Temps de calcul de carbonatation accélérée après 180 jours du béton C25 selon les pas de temps et pas de calcul**

Les résultats obtenus présentés ci-dessus permettent de considérer un pas de calcul et de discrétisation des chroniques environnementales de 30 jours pour la carbonatation atmosphérique et de 3 jours pour la carbonatation accélérée.

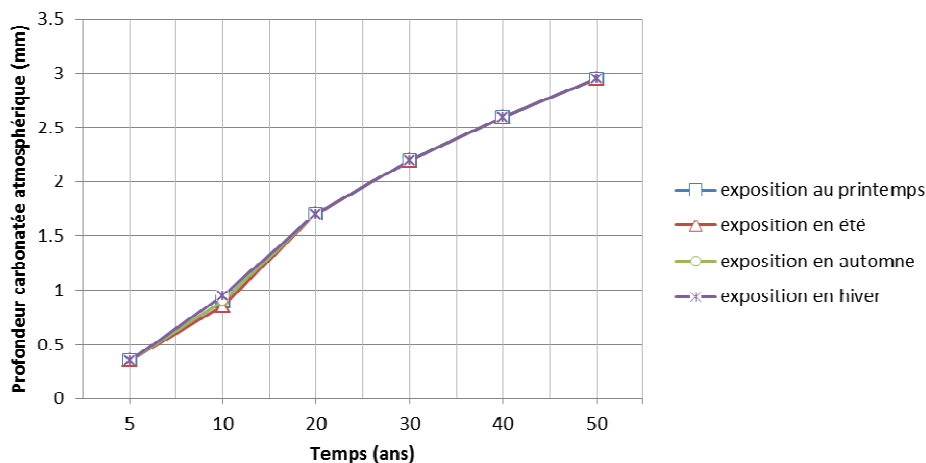


### II.7.3. Influence de la date de mise en exposition

En réalité, la température chaude et l'humidité faible sont les deux conditions qui sont favorables au processus de carbonatation du béton. Dans la mesure où la cinétique de dégradation n'est pas linéaire, on peut s'interroger sur l'influence de la saison de mise en exposition du matériau. La carbonatation est plus rapide en été sous température élevée et humidité basse, tandis que sa vitesse est lente en hiver sous une humidité de 85% à 90%, défavorable à la carbonatation. Des simulations de carbonatation atmosphérique et accélérée ont donc été menées, pour le C45 et le C25, en considérant le temps initial (mise en exposition) soit au printemps, en été, en automne ou en hiver. Si le début de la dégradation est au printemps par exemple, les six premiers mois de carbonatation sont les mois les plus chauds (et secs) de l'année, or les premiers mois sont aussi ceux pendant lesquels la dégradation est la plus rapide. De fait, la carbonatation est accélérée par rapport à un début en automne suivi par six mois froids et humides.



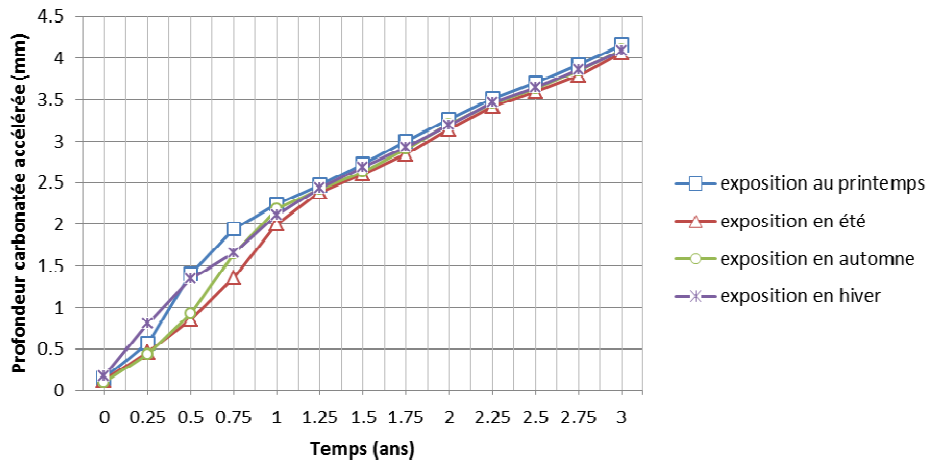
(a) carbonatation accélérée



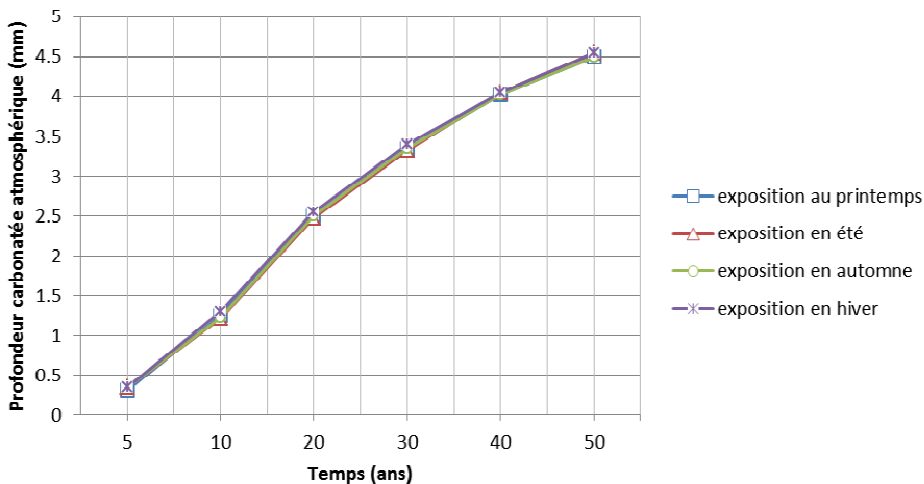
(b) carbonatation atmosphérique

Figure II.26. Evolution de la profondeur de carbonatation du béton C45 selon la saison de mise en exposition

Les résultats sont présentés dans les Figures II.26 et II.27 et montrent qu'une différence notable est observée au cours de la première année avant de diminuer. Dans le cas de la carbonatation accélérée, un faible écart subsiste toutefois entre les situations de dégradation. Cet effet n'est pas sensible pour la carbonatation atmosphérique, où la dégradation est sensiblement plus lente par rapport à la fréquence des variations climatiques, ce qui empêche cet « effet mémoire » de la dégradation.



(a) carbonatation accélérée



(b) carbonatation atmosphérique

Figure II.27. Evolution de la profondeur de carbonatation du béton C25 selon la saison de mise en exposition

#### II.7.4. Effet du gradient de température dans l'épaisseur d'enrobage

Les variations de température qui sont considérées ici sont celles de la température extérieure dont il est supposé (par hypothèse) que c'est aussi la température du matériau à l'abscisse nulle (sur la face exposée à l'environnement extérieur). Par diffusion de la chaleur dans le matériau, un gradient de température dans l'épaisseur de béton. Comme la température influence la cinétique de dégradation, le

point investigué dans cette partie est de déterminer s'il est nécessaire de prendre en compte ce gradient de température, ou bien si l'on peut remplacer la résolution de l'équation de la chaleur par l'hypothèse que la température dans le matériau, sur une épaisseur pertinente vis-à-vis de la problématique de la carbonatation (de 2 à 3 fois l'enrobage) est constante et homogène sur la durée du pas de temps de la simulation et égale à la température extérieure.

Pour illustrer cet aspect, on suppose que la conductivité thermique varie dans un rapport de 1 à 1000. Les Figures II.28 et II.29 illustrent les résultats de la simulation de carbonatation dans ces cas pour le C25 et le C45. On constate que la vitesse de pénétration du front de carbonatation n'est pas affectée par cette variation de la conductivité thermique. Dans tous les cas, la cinétique du transfert de chaleur, vers un régime permanent où la température dans le matériau est constante, homogène et égale à la température extérieure, est bien plus rapide que celle des processus de diffusion impliqués dans la carbonatation, de sorte que l'hypothèse d'un équilibre thermique immédiat de l'épaisseur considérée sur la durée du pas de temps de simulation numérique semble pertinente. Ainsi la résolution de l'équation de la chaleur n'est pas requise pour simuler la carbonatation atmosphérique.

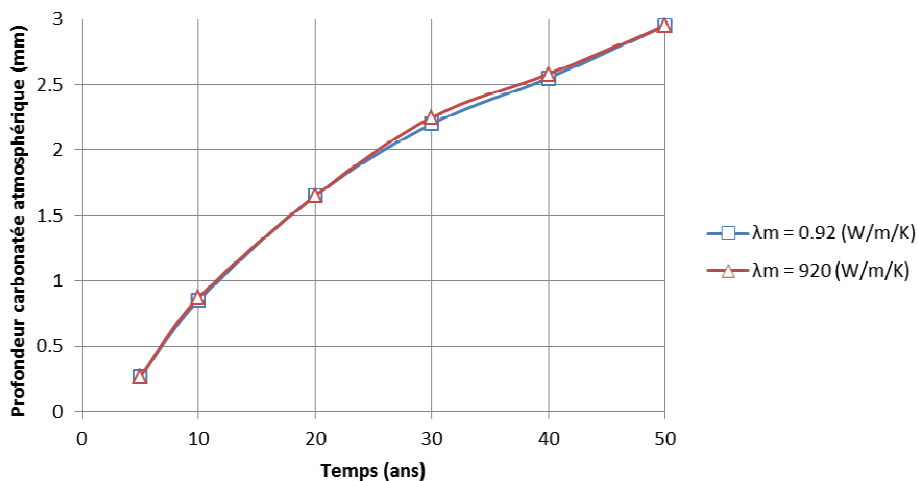


Figure II.28. Evolution de la profondeur de carbonatation du béton C45 selon la valeur de la conductivité thermique

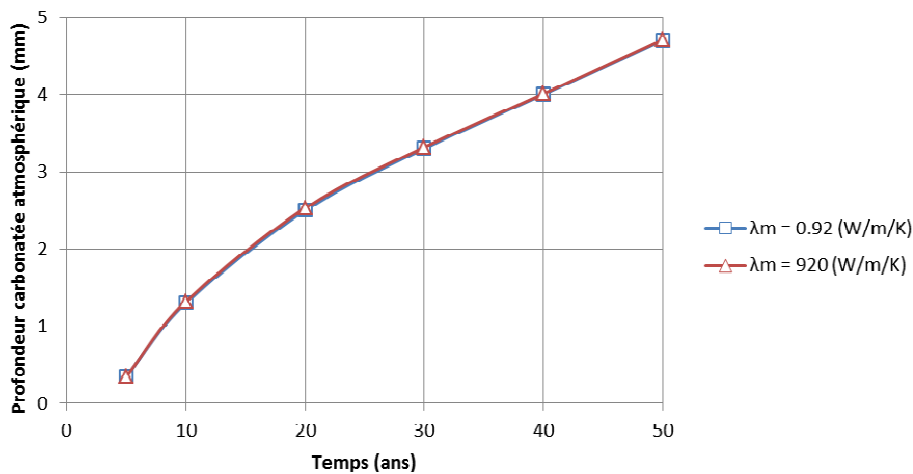


Figure II.29. Evolution de la profondeur de carbonatation du béton C25 selon la valeur de la conductivité thermique

### II.7.5. Effet de la diffusion du calcium : hypothèse d'un équilibre chimique local

Le modèle permet de prendre en compte la diffusion des ions calcium dans la solution interstitielle. Ces ions sont en équilibre avec les produits solides hydratés dans le béton à une concentration initiale de  $22 \text{ mol/m}^3$ . Pendant le processus de décalcification, selon la solubilité des composés hydratés, la concentration en ions calcium diminue jusqu'à une valeur entre 0 et  $0,4 \text{ mol/m}^3$  dans la zone entièrement carbonatée [BAROGHEL, 1999]. Donc, sous un gradient de concentration, les ions calcium sont susceptibles de diffuser à partir du béton sain vers la zone carbonatée. Le transfert de ces ions dépend du degré de saturation et de la porosité qui affectent le coefficient de diffusion de calcium. Étant donné que la cinétique du transfert des ions calcium par diffusion relève d'une cinétique sensiblement plus lente que celle des autres équations pilotant la dégradation (diffusion de l'eau et du dioxyde de carbone gazeux), dans une démarche analogue à celle menée précédemment pour le transfert de chaleur, on peut s'interroger sur la pertinence de la prise en compte de ce phénomène physique par rapport à la cinétique globale de la carbonatation. On peut voir dans les Figures II.30 et II.31 des résultats de simulations numériques de carbonatation atmosphérique pour différentes valeurs du coefficient de diffusion des ions calcium. On constate qu'une variation dans un rapport 1 à 1000 n'altère pas l'estimation de la profondeur de carbonatation. Ces résultats tendent à conforter l'hypothèse d'un équilibre chimique local : c'est-à-dire qu'on peut considérer que les ions calcium issus de la dissolution des hydrates sont consommés localement par la formation de la calcite, sans phénomène de transfert sur ces ions. Ainsi, la résolution de l'équation de conservation de la masse de calcium couplée à celles de

l'eau et du dioxyde de carbone n'est pas nécessaire pour l'estimation de la vitesse de dégradation par carbonatation.

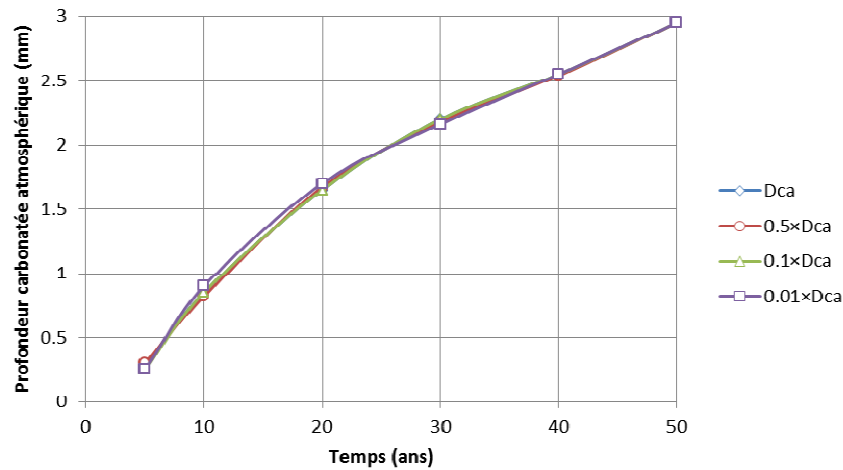


Figure II.30. Evolution de la profondeur de carbonatation du béton C45 selon la valeur du coefficient de diffusion des ions calcium

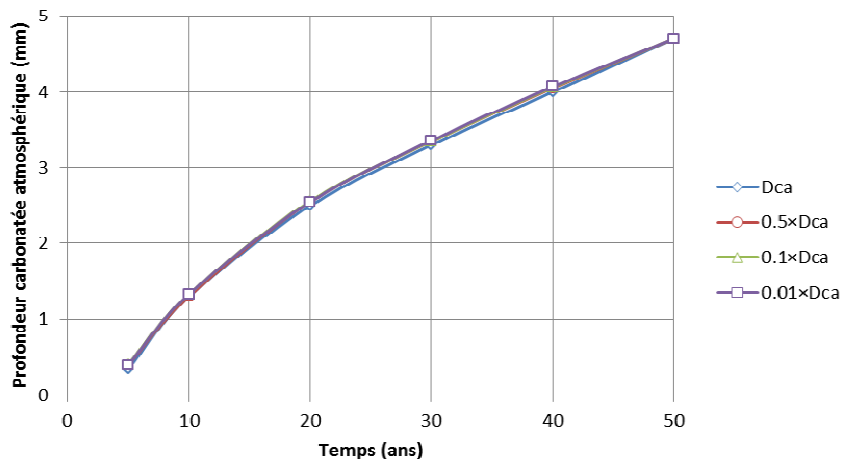


Figure II.31. Evolution de la profondeur de carbonatation du béton C25 selon la valeur du coefficient de diffusion des ions calcium

Pour conforter cette hypothèse, des simulations ont également été menées de la même façon pour un matériau où la diffusion des ions est favorisée (porosité augmentée à 18%) et dans des conditions hydriques correspondant à des cas extrêmes : un cas très humide, et un cas très sec. En effet, lorsque la surface du béton est exposée à la pluie pendant une longue période, le béton est saturé aussi bien dans les zones carbonatées et non carbonatées. Dans ce cas, un transfert plus important des ions calcium est possible, notamment par rapport à pénétration du dioxyde de carbone, bloquée en phase gazeuse par la saturation des pores. Inversement, dans le cas d'un béton ayant une humidité relativement faible, la pénétration du dioxyde de carbone est améliorée. Ces situations ont été simulées par le changement de l'humidité relative moyenne annuelle dans le béton C25 à 95% et 65% à la place de 78% (valeur obtenue pour le climat toulousain). Les résultats de ces simulations sont présentés dans les Figures II.32 et II.33.

Là encore, aucun effet de la vitesse de diffusion des ions calcium n'est observable sur la vitesse globale de la carbonatation.

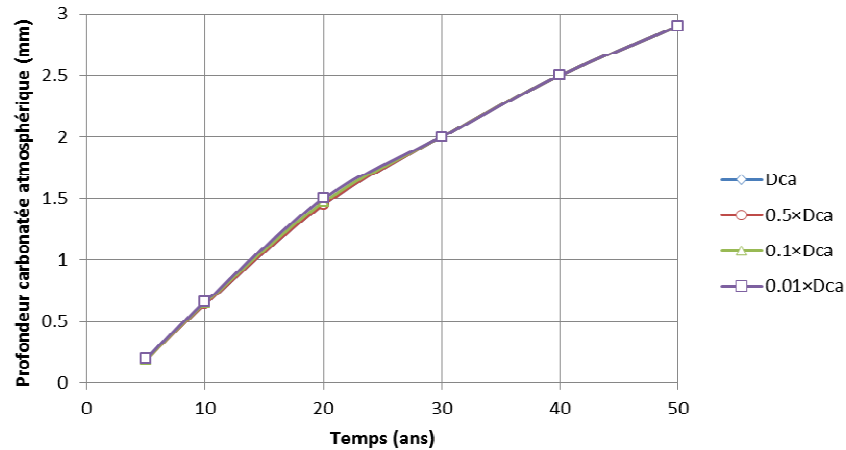


Figure II.32. Evolution de la profondeur de carbonatation du béton C25 selon la valeur du coefficient de diffusion des ions calcium en environnement saturé (porosité  $\phi_0 = 0,18$ )

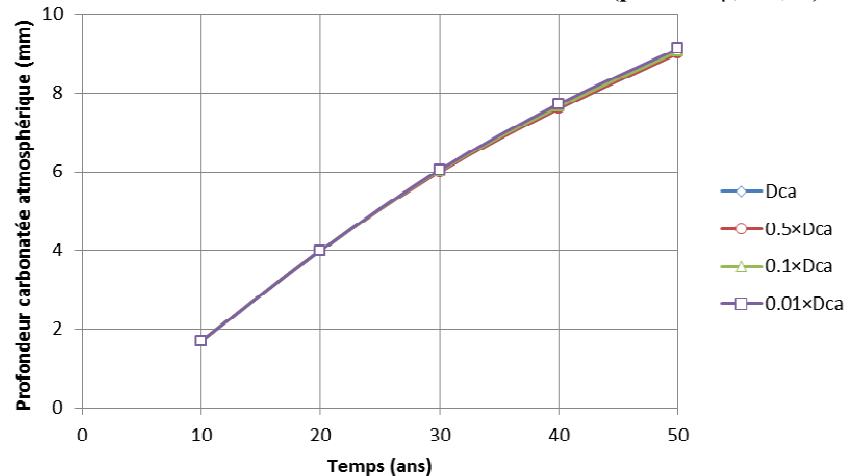


Figure II.33. Evolution de la profondeur de carbonatation du béton C25 selon la valeur du coefficient de diffusion des ions calcium en environnement extérieur sec (porosité  $\phi_0 = 0,18$ )

## II.8. Synthèse

Un outil de simulation numérique de la carbonatation a été développé et implémenté dans un code de calculs aux éléments finis, sur la base de la résolution couplée d'équations de conservation de la masse. Si la modélisation donne des résultats satisfaisants, le nombre de paramètres d'entrée à renseigner pour utiliser le modèle, et l'incertitude dont peuvent être caractérisés ces paramètres, ainsi que le coût de ces simulations numériques, rendent l'exploitation de cet outil de modélisation dans un cadre probabilisé complexe. Une première réflexion a donc été menée sur la base de considérations exclusivement physiques sur l'éventuelle nécessité d'utiliser un modèle aussi complexe en termes de phénomènes pris en compte.

Il a ainsi été mis en évidence qu'une modélisation relativement simplifiée des variations climatiques (humidité relative et température extérieure), avec une information moyennée sur 30 jours, permettait une simulation satisfaisante du processus de carbonatation.

Il est également apparu que la résolution de l'équation de la chaleur n'était pas requise et pouvait être remplacée par l'hypothèse que la température était constante et homogène sur la durée du pas de temps, égale à la température extérieure moyenne sur cette durée.

Enfin, il a été montré que l'équation de conservation de la masse de calcium (modélisant notamment la diffusion des ions calcium dans la solution interstitielle) pouvait être remplacée par une hypothèse d'équilibre chimique local du calcium.

Il apparaît ainsi que la modélisation de la carbonatation repose principalement sur la conservation des masses d'eau et de dioxyde de carbone.

Toutefois, le modèle ainsi obtenu demeure un problème de dimension stochastique élevée, dans la mesure où 32 grandeurs physiques en entrée du modèle sont susceptibles de propager de la variabilité. Ces grandeurs physiques sont recensées dans le Tableau II.2, parmi lesquelles on retrouve des données caractéristiques du matériau (composition, porosité, etc.), des variables modélisant les phénomènes physico-chimiques impliqués dans le processus de carbonatation (coefficients de diffusion, rayon des cristaux de portlandite, énergies des lois de thermoactivation, etc.) et des grandeurs caractéristiques de l'environnement extérieur (humidité relative et température extérieure, etc.). Cette dimension stochastique relativement élevée, notamment par rapport au coût élevé des simulations numériques, requiert donc la mise en œuvre de méthodes adaptées pour réduire cette dimension, qui seront développées dans le chapitre suivant.





### *III.1. Introduction*

Comme illustré dans le chapitre précédent, les problèmes d'ingénierie peuvent aujourd'hui être décrits avec réalisme dans toute leur complexité grâce à l'affinement des modèles, l'accroissement des connaissances et simultanément des moyens de calcul. La conséquence de cette augmentation de la capacité de description est le nécessaire effort d'estimation des grandeurs plus nombreuses qui y interviennent. Comme celles-ci ne peuvent être estimées qu'avec un certain degré d'imprécision, elles restent des grandeurs incertaines et contribuent à la dimension stochastique du problème. Les sources d'incertitude pour ces grandeurs sont autant liées à leur caractère aléatoire par nature qu'aux difficultés de les estimer et/ou d'en décrire la variabilité. La dimension stochastique est un paramètre crucial des approches probabilistes, auxquelles nous avons recours dans ce travail, qui conditionne fortement l'efficacité et l'utilisation pratique des méthodes disponibles pour ce type d'approches. En effet, en l'absence de connaissance précise d'une grandeur, il devient paradoxalement indispensable de la considérer comme une variable aléatoire. Dès lors la question se pose de savoir dans quelle mesure sa variabilité impacte le problème traité, afin de décider de l'intégrer ou non dans la dimension stochastique efficace du problème. Le présent chapitre repositionne la problématique de dimension stochastique élevée puis décrit les méthodes d'analyse de sensibilité de Morris et de Sobol permettant d'identifier pour les écarter de la dimension stochastique les variables peu influentes. Enfin, afin de réduire le temps de calcul résultant de l'utilisation dans l'approche probabiliste d'un modèle numériquement lourd, ce chapitre décrit également comment construire un modèle de substitution au modèle initial complet sur la base de l'utilisation de surfaces de réponse. L'ensemble des outils et méthodes présenté dans ce chapitre permettra de traiter le cas de l'utilisation en contexte incertain du modèle de carbonatation présenté dans le chapitre précédent.

### *III.2. Cadre stochastique*

La prise en compte des incertitudes dans un cadre stochastique s'appuie sur les étapes classiques de l'approche probabiliste : caractérisation des incertitudes par des variables ou des champs aléatoires, propagation des incertitudes dans le modèle décrivant la fonction de défaillance visée, exploitation des résultats probabilistes (inférence statistique sur les échantillons de sortie du modèle, estimation de la probabilité de défaillance, estimation des centiles, détermination du point de défaillance le plus probable, estimation ou calibration des coefficients partiels pour une approche normative).

### III.2.1. Formulation du problème

On désigne par  $Y$  la sortie d'un modèle (appelée aussi quantité d'intérêt), fonction (à valeurs réelles)  $f$  de  $n$  variables d'entrée notées  $X_1, \dots, X_n$ ,  $L$  paramètres constants  $a_1, \dots, a_L$ , éventuellement du temps  $t$  et de l'espace désigné par  $x$  :

$$Y = f(X_1, \dots, X_n, a_1, \dots, a_L, x, t) \quad (\text{III.1})$$

Dans le cas du modèle de carbonatation,  $Y$  peut désigner un profil de taux de saturation, un profil de concentration en portlandite, la profondeur carbonatée, etc. Les variables d'entrée sont la porosité initiale, les quantités initiales d'hydrates, l'humidité relative extérieure, la température, la pression partielle de  $\text{CO}_2$ , le coefficient de viscosité d'eau, la perméabilité, etc. Les paramètres d'entrée sont des facteurs de calcul ou parfois des grandeurs supposées constantes : exposants de la fonction de résistance à la diffusivité gazeuse, seuillage de consommation de la portlandite pour la définition de la profondeur carbonatée, etc. Par soucis de simplification, les paramètres constants de la fonction  $f$  seront omis dans la notation.

Comme précisé en introduction, les variables d'entrée du modèle sont imparfaitement connues. Pour modéliser l'incertitude sur ces variables, on affecte une loi de probabilité à chaque variable ( $X_1, \dots, X_n$ ), supposée ici discrète (on ne traite pas le cas des champs aléatoires). Cette loi est déterminée par l'utilisateur, en fonction de sa connaissance sur l'incertitude associée à chaque variable. En l'absence d'information suffisante (peu de réalisations de la variable) et/ou si aucune distribution statistique ne semble modéliser correctement les réalisations observées, on peut avoir recours à des lois non informatives, comme la loi uniforme qui est la loi la moins informative. Lorsque des informations nombreuses sont disponibles, les tests de conformité statistiques permettent généralement de dégager des distributions plausibles, dans le cas d'une inférence statistique classique ou bayésienne. La connaissance d'ingénierie intervient également, principalement dans le choix des supports : une grandeur peut n'être que positive et imposer par exemple le choix d'une loi lognormale, ou bien peut être nécessairement bornée et imposer par exemple le choix d'une loi béta. Le développement des approches semi-probabilistes ou probabilistes pour les codes de conception des ouvrages de génie civil [EUROCODES 2004], [JCSS 2000], [DURACRETE 2000], de même que l'effort de recherche relatif aux approches probabilistes en génie civil [DUPRAT, 2007],[GREGOR et al., 1983], [CASCIATI et al., 1991],[ÖSTLUND, 1991],[HASSAN, 2010],[SILVA, 2004], ont peu à peu contribué à établir des choix. On peut proposer quelques types de loi en fonction des données à représenter (Tableau III.1).

L'incertitude sur les entrées se propage sur la sortie et  $Y$  est également vue comme une variable aléatoire, dont la loi (a priori inconnue) concentre toute l'information sur l'impact de l'incertitude des variables d'entrée.

Par exemple, les deux premiers moments de cette loi s'interprètent très facilement : l'espérance de  $Y$  est la moyenne pondérée sur l'ensemble des valeurs possibles des paramètres, tandis que la variance de  $Y$  quantifie la dispersion de la sortie autour de cette moyenne, lorsque tous les paramètres varient suivant la loi qui leur est assignée. Cette variance est donc une mesure quantitative de l'impact de l'incertitude attachée aux paramètres d'entrée sur la sortie. Il est alors naturel de chercher à séparer l'impact de l'incertitude sur chacun des paramètres d'entrée, et de définir, pour chaque paramètre aléatoire  $X_i$  d'entrée du modèle, un indice quantifiant la dispersion de la sortie qui est seulement due à la variabilité de  $X_i$ . La définition et l'interprétation de ces indices, qui fait l'objet du paragraphe III.3 suivant, constituent l'analyse de sensibilité du modèle.

Variables	Distributions plausibles
Propriétés matérielles : - Résistances, modules, etc. - Diffusivité, porosité, etc.	Normale, Lognormale, Weibull, Uniforme, Gamma
Dimensions géométriques : - Longueur, aire, etc. - Enrobage, etc.	Normale, Lognormale, Béta, Uniforme
Actions : - Climatique (neige, vent, etc.) - Environnement (niveau d'eau, houle, etc.) - Tellurique (séisme, éruption volcanique, etc.) - Plancher (logement, bureau, etc.) - Trafic (viaducs, etc.) - Accidentelle (explosion, etc.)	Normale, Gumbel max, Fréchet max, Weibull
Conditions d'environnement : - Humidité relative, température, etc. - Concentration d'agresseurs (dioxyde de carbone, chlorures, etc.)	Normale, Beta

Tableau III.1. Distribution des données

### III.2.2. Dimension stochastique efficace

Pour les problèmes d'ingénierie, parmi l'ensemble des paramètres incertains considérés dans le calcul stochastique, seulement un nombre limité d'entre eux contribue efficacement à l'aléa observé sur la réponse du modèle ou sur la probabilité de défaillance [RIAHI, 2013]. Le nombre de paramètres incertains d'un modèle est la dimension stochastique nominale et le nombre de paramètres incertains qui contribuent effectivement à la variabilité de la réponse d'un modèle est la dimension stochastique efficace.

La dimension stochastique efficace est définie selon deux sens : de la superposition et de la troncature, en utilisant la décomposition de la variance ou la décomposition de la dimension.

La dimension efficace d'une fonction  $f(X_1, \dots, X_n)$  au sens de la superposition est le plus petit entier  $n_S$  tel que :

$$\sum_{X_i \leq n_S} \sigma_{X_i}^2 \geq c \times \sigma^2 \quad (\text{III.2})$$

Où  $\sigma_{X_i}^2$  est la variance partielle du paramètres d'entrée  $X_i$ ;  $c$  est un quantile seuil pris égal par exemple à 0,99 ( $0 < c < 1$ ) ;  $\sigma^2$  est la variance totale de la fonction  $f$ .

La dimension efficace au sens de la superposition est l'ordre le plus élevé de la fonction qu'il faut inclure dans la somme  $\sum_{X_i \leq n_S} \sigma_{X_i}^2$  pour atteindre le seuil  $c \times \sigma^2$ .

La dimension efficace au sens de la troncature est le plus petit entier  $n_T$  tel que :

$$\sum_{X_i \in \{1, 2, \dots, n_T\}} \sigma_{X_i}^2 \geq c \times \sigma^2 \quad (\text{III.3})$$

Ainsi,  $n_T$  est le nombre de paramètres considérés dans la somme  $\sum_{X_i \in \{1, 2, \dots, n_T\}} \sigma_{X_i}^2$  pour atteindre le seuil  $c \times \sigma^2$ . La dimension efficace au sens de la troncature  $n_T$  ne dépend pas de l'ordre des paramètres qui ont été échantillonnés, au contraire de la dimension efficace au sens de la superposition  $n_S$ .

Dans certains problèmes, la dimension efficace selon l'un ou l'autre des deux sens est bien inférieure à la dimension nominale. Notons que la dimension efficace au sens de la superposition peut être réduite en changeant l'ordre des paramètres échantillonnés [RIAHI, 2013].

En effet, en se référant à la moyenne des effets élémentaires et/ou les indices de sensibilité, on peut arranger les paramètres par ordre décroissant d'importance. Les méthodes de criblage, telle que la méthode de Morris, la méthode de Sobol, permettent de déterminer les paramètres les moins influents sur la réponse d'un modèle. Ainsi, la dimension efficace est déterminée par l'élimination des paramètres non importants de l'ensemble des paramètres incertains du modèle. Par conséquent, on peut modéliser les paramètres importants par des variables aléatoires et fixer les paramètres restant à leurs valeurs moyennes ou leurs valeurs nominales respectives.

### III.3. Analyse de sensibilité

#### III.3.1. Objectif

Considérons un modèle mathématique, formé d'un ensemble de variables d'entrée aléatoires, d'une fonction déterministe, et d'un ensemble de variables de sortie (ou réponses) aléatoires. Nous écrivons ce modèle sous la forme suivante :

$$f : R^n \rightarrow R \quad (\text{III.4})$$

$$X \rightarrow Y = f(X) \quad (\text{III.5})$$

La fonction  $f$  du modèle peut être très complexe (système d'équations différentielles), et demander un temps de calcul important (ce qui constitue une raison de plus de chercher à réduire la dimension stochastique). Nous supposons que les variables d'entrée  $X=(X_1, \dots, X_n)$  sont indépendantes. On considère une unique variable de sortie  $Y$ .

L'analyse de sensibilité étudie comment des perturbations sur les entrées du modèle engendrent des perturbations sur la réponse. Elle permet d'identifier les variables qui contribuent le plus à la variabilité de la réponse du modèle. Il est alors possible d'améliorer la qualité de la réponse du modèle. En effet connaissant les variables d'entrée les plus influentes, les erreurs sur la sortie du modèle pourront être diminuées si celles sur les entrées les plus influentes le sont également. Il sera possible de considérer les variables les moins importantes comme des paramètres déterministes, en les fixant (à leur espérance), et ainsi d'obtenir un modèle plus léger avec moins de variables d'entrée [JACQUES, 2005].

Il est possible de regrouper les méthodes d'analyse de sensibilité en trois classes : les méthodes de criblage, l'analyse de sensibilité locale et l'analyse de sensibilité globale.

Les méthodes de criblage, présentées par Saltelli [SALTELLI, 2000], analysent qualitativement l'importance des variables d'entrée sur la variabilité de la réponse du modèle. Elles permettent d'établir une hiérarchie au sein des variables d'entrée en fonction de leur influence sur la variabilité de la réponse.

L'analyse de sensibilité locale, comme l'analyse globale, sont des méthodes d'analyse quantitative, qui permettent en plus d'établir une hiérarchie au sein des variables d'entrée, de donner un ordre de grandeur des écarts au sein de cette hiérarchie. L'analyse de sensibilité locale étudie comment de petites perturbations autour d'une valeur  $X=(X_1, \dots, X_n)$  des entrées se répercutent sur la valeur de la sortie. La méthode d'analyse locale la plus classique est l'approche OAT (One-At-Time) [TARANTOLA, 2000], qui consiste à calculer ou à estimer les indices de sensibilité en exprimant l'effet sur la valeur de la variable aléatoire  $Y$  de la perturbation de chaque variable  $X_i$  autour d'une valeur nominale.

L'analyse de sensibilité globale s'intéresse à la variabilité de la sortie du modèle. Elle étudie comment la variabilité des entrées se répercute sur celle de la sortie, en déterminant quelle part de variance de la sortie est due à telles entrées ou tel ensemble d'entrées.

Il est possible de distinguer l'analyse locale de l'analyse globale de la sorte : l'analyse locale s'intéresse à la valeur de la réponse, tandis que l'analyse globale s'intéresse à sa variabilité.

### III.3.2. Analyse de sensibilité locale

L'analyse de sensibilité locale étudie comment de petites perturbations autour d'une valeur  $X=(X_1, \dots, X_n)$  des entrées se répercutent sur la valeur de la sortie. La méthode d'analyse locale la plus classique est l'approche OAT (One-At-Time) [HOMMA et al., 1995] : quand un paramètre varie, tous les autres sont maintenus constants. Elle repose sur le principe consistant à calculer les dérivées partielles des fonctions de sorties par rapport aux variables d'entrée :

$$S_i = \frac{\partial f}{\partial X_i}(X_1, \dots, X_n) \quad (\text{III.6})$$

Les calculs se font numériquement en faisant varier les entrées du modèle dans un intervalle très restreint autour d'une valeur nominale. Généralement, quand on applique cette méthode, les relations entre les entrées et la sortie sont supposées être linéaires et par conséquent, l'effet de la relative variation de la sortie du modèle en faisant varier le facteur d'entrée autour de sa valeur de base peut être estimé par la relation [ANDRIAMIHAJA, 2009] :

$$S_i = \frac{\ln Y - \ln Y_b}{\ln X_i - \ln X_{ib}} \quad (\text{III.7})$$

Où  $S_i$  désigne la sensibilité pour un paramètre  $i$  donné ;  $Y_b$  et  $Y$  sont respectivement les sorties correspondant à la valeur de base  $X_{ib}$  et à la valeur  $X_i$  (valeur de base modifiée de quelques pourcents). Cette méthode permet de connaître l'impact local des paramètres d'entrée sur la sortie du modèle ou encore la variation de la réponse par rapport à la variation d'une entrée.

La méthode de Morris s'inscrit dans les méthodes d'analyse de sensibilité locale. Chaque paramètre est discrétisé en un nombre identique de niveaux. L'exploration de l'espace des paramètres s'effectue en tirant des trajectoires en faisant varier tous les facteurs un par un dans un ordre aléatoire [HOMMA et al., 1996].

### **III.3.3. Analyse de sensibilité globale**

L'analyse de sensibilité globale s'intéresse quant à elle à la variabilité de la sortie du modèle dans son domaine de variation. Elle étudie comment la variabilité des entrées se répercute sur celle de la sortie, en déterminant quelle part de variance de la sortie est due à telles entrées ou tel ensemble d'entrées. L'analyse de sensibilité globale est une méthode quantitative basée sur l'estimation de la contribution de chaque paramètre d'entrée du modèle à la variance observée dans la sortie. Elle étudie aussi l'interaction entre ces différentes variables d'entrée. Les méthodes d'analyse de sensibilité globale dépendent étroitement de l'objectif (description, prévision, estimation, analyse d'événements rares, comparaison de scénarios,...) fixé par le modélisateur. L'objectif est formalisé à l'aide d'un critère statistique [HALTON, 1960]. L'exploration de la fonction est effectuée à l'aide d'un échantillon extrait dans l'espace des paramètres. Cet échantillon peut être aléatoire et dépendre des lois de distributions choisies pour les paramètres. La forme des lois n'est pas un choix anodin. La loi uniforme est souvent utilisée car elle est non informative. Plusieurs techniques sont largement utilisées: simulations de Monte Carlo, surfaces de réponse et test de sensibilité de Fourier [MCKAY, 1995]. Ces techniques s'affranchissent des hypothèses classiques de linéarité que supposent les principes de régression et de corrélation. Elles permettent d'analyser le modèle linéaire ou non linéaire en estimant la contribution de chaque paramètre à la variance de la sortie et l'étude des interactions entre les paramètres d'entrée [MCKAY et al, 1979].

### **III.3.4. Choix des méthodes appliquées**

Dans le cadre de notre travail, nous nous intéressons à la dimension stochastique du modèle de carbonatation et à sa réduction. Nous envisageons d'appliquer en premier lieu une analyse de sensibilité locale (la méthode de Morris) pour hiérarchiser les variables d'entrée, écarter les variables peu influentes, et ainsi alléger le modèle. Ensuite, nous appliquons une analyse de sensibilité globale (la méthode de Sobol) avec l'ensemble réduit des variables issu de l'analyse de sensibilité locale, pour choisir les variables d'entrée dont l'influence est la plus significative et qui seront retenues dans la construction du modèle de substitution.

### **III.3.5. Méthode de Morris**

La méthode d'analyse de sensibilité de Morris [MORRIS, 1999] fait partie des méthodes de criblage et permet d'identifier les paramètres les plus importants parmi les variables d'un modèle complexe. Elle permet de déterminer les effets principaux et de donner une indication sur la non-linéarité ou les interactions. Il est souligné que son inconvénient majeur est qu'elle nécessite de nombreuses simulations [SANTIAGO et al., 2012].

### III.3.5.1. Principe

La méthode de Morris consiste à identifier parmi tous les paramètres d'entrée ceux susceptibles d'avoir des effets sur la sortie :

- Négligeables;
- Linéaires et additifs;
- Non linéaires ou en interaction avec d'autres paramètres.

Cette classification est basée sur la notion d'effet élémentaire ( $EE$ ) d'un paramètre donné, assimilable au gradient de la sortie du modèle par rapport à ce paramètre. Elle n'est pas effectuée directement au moyen des effets élémentaires mais à partir de leurs statistiques (moyennes et écart-types) calculées à partir de plusieurs trajectoires.

### III.3.5.2. Les effets élémentaires

L'effet élémentaire ( $EE_i$ ) associé à un paramètre  $X_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) est défini par

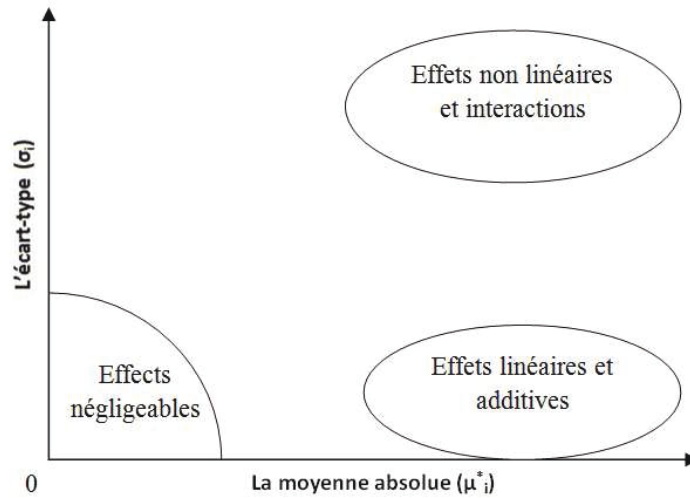
$$EE_i = \frac{f(X_1, \dots, X_{i-1}, X_i + \Delta, X_{i+1}, \dots, X_n) - f(X)}{\Delta} \quad (\text{III.8})$$

Où  $f(X)$  et  $f(X_1, \dots, X_{i-1}, X_i + \Delta, X_{i+1}, \dots, X_n)$  sont successivement la réponse du modèle avant et après perturbation de la variable  $X_i$  d'une quantité  $\Delta_i$ . La valeur de la perturbation  $\Delta_i$  est fonction du nombre  $p$  de subdivisions du domaine de variation envisagé pour la variable  $X_i$ . D'une manière pratique, si chaque variable est affectée d'un domaine de variation uniforme, l'analyse peut être menée en supposant que les paramètres d'entrée sont uniformément définis sur l'hyper-cube unitaire  $[0,1]^n$ . Une simple transformation linéaire est alors appliquée pour passer de l'espace hyper-cubique unitaire à l'espace réel des variables. L'ensemble des subdivisions (ou niveaux) est alors défini par  $\Omega = \{0, 1/(p-1), 2/(p-2), \dots, 1\}$  et peut être attribué à chaque paramètre d'entrée. Si  $X = (X_1, \dots, X_i, \dots, X_n)$  est un point de  $[0,1]^n$ , la perturbation est appliquée de telle manière que le point perturbé  $(X_1, \dots, X_i + \Delta, \dots, X_n)$  soit situé aussi dans l'hyper-cube  $[0,1]^n$ .

### III.3.5.3. Classification des variables

Les effets des variables sont négligeables si à la fois les moyennes et les écart-types des effets élémentaires sont faibles comme illustré sur la Figure III.1. Lorsque les moyennes seulement sont importantes, les effets des variables sont linéaires et additifs. Enfin, lorsque l'on observe à la fois des moyennes et des écart-types importants, on peut en déduire que les effets des variables sont non linéaires ou en interaction avec ceux d'autres variables.





**Figure III.1. Classification des paramètres d'entrée d'un modèle par la méthode de Morris**

#### III.3.5.4. Identification des indices de Morris

Dans un contexte statistique, pour estimer les indices statistiques (la moyenne, la moyenne absolue et l'écart-type), un échantillonnage significatif de trajectoires sur la grille de valeurs de  $\Omega$  doit être réalisé, chaque trajectoire permettant de déterminer les  $n$  effets élémentaires.

La moyenne  $\mu_i$  évalue la force de la sensibilité entre la  $i^{\text{ème}}$  variable d'entrée et la sortie du modèle. Quand  $\mu_i$  est élevée, la sortie a une grande sensibilité à cette variable d'entrée. Inversement, une valeur faible de  $\mu_i$  traduit un changement relativement faible sur la sortie avec le même changement  $\Delta$  sur la variable. Pour  $r$  trajectoires, la moyenne est simplement.

$$\mu_i = \frac{\sum_{j=1}^r EE_{i,j}}{r} \quad (\text{III.9})$$

La moyenne absolue  $\mu_i^*$  est la moyenne des valeurs absolues des effets élémentaires, suggérée par [CAMPOLONGO et al., 1999]. Lorsque le modèle est non monotone, sa réponse peut osciller dans des régions de valeurs positives ou négatives. Par conséquent, les effets élémentaires peuvent avoir des valeurs positives ou négatives et ses moyennes peuvent être nulles ou proche de zéro du fait de l'annulation des effets élémentaires entre eux. La moyenne absolue est proposée pour annuler l'effet des signes.

$$\mu_i^* = \frac{\sum_{j=1}^r |EE_{i,j}|}{r} \quad (\text{III.10})$$

L'écart-type  $\sigma_i$  est utilisé pour indiquer des interactions possibles avec d'autres variables et/ou que la variable a un effet non linéaire sur la sortie. Il est déterminé par :

$$\sigma_i = \sqrt{\frac{1}{(r-1)} \times \sum_{j=1}^r (EE_{i,j} - \mu_i)^2} \quad (\text{III.11})$$

L'organigramme de la Figure III.10 résume la procédure d'expérimentation proposée par Morris pour classer les variables d'entrée d'un modèle.

Pour chaque trajectoire  $j$  on commence par réaliser un tirage pseudo-aléatoire des coordonnées  $X_i$  du point initial de référence  $X^*$  parmi l'ensemble  $\{0, 1/(p-1), 2/(p-1), \dots, 1-\Delta\}$  de sorte que ces coordonnées restent dans l'intervalle  $[0, 1]$  après application de la perturbation  $\Delta$ . L'ensemble des points constituant la trajectoire, dont le point de référence, est synthétisé dans la matrice d'orientation  $B^*$  de dimension  $(n+1) \times n$ , où chaque ligne représente une réalisation du vecteur  $X$ . Entre deux lignes successives, une seule composante à la fois est modifiée, dans un ordre aléatoire, selon le principe OAT. Une même composante n'est modifiée qu'une fois. Grâce à cette propriété, les  $n+1$  lignes de la matrice  $B^*$ , représentant  $n+1$  réalisations distinctes du vecteur  $X$  fournissent  $n+1$  valeurs de la réponse du modèle qui permettent de calculer  $n$  effets élémentaires selon l'équation III.8. La matrice d'orientation  $B^*$  est définie par [KING et al., 2013]:

$$B^* = \left( J_{k+1,1} \times X^* + \frac{\Delta}{2} \times \left[ (2 \times B - J_{k+1,n}) \times D + J_{k+1,n} \right] \right) \times P^* \quad (\text{III.12})$$

Où  $J_{n+1,1}$  et  $J_{n+1,n}$  sont les matrices unités de dimension  $(n+1) \times 1$  et  $(n+1) \times n$ ;  $X^*$  est le point de référence;  $B$  est une matrice triangulaire inférieure de dimension  $(n+1) \times n$ ;  $D^*$  est une matrice diagonale de dimension  $n$  telle que ses éléments diagonaux soient choisis égaux à 1 ou -1 de façon équiprobable;  $P^*$  est une matrice carrée de dimension  $n$ , dont chaque colonne et chaque ligne comprennent un seul élément égal à 1 et qui permet de générer aléatoirement l'ordre de perturbation des composantes de  $X$ .

#### III.3.5.5. Illustration du calcul des matrices

Supposons un modèle à 3 variables aléatoires ( $n=3$ ), pour lequel le domaine est subdivisé en 4 niveaux  $p=4$ , avec l'ensemble des coordonnées possibles  $X_i = \{0, 1/3, 2/3, 1\}$  et  $\Delta=1/3$ . Les coordonnées du point de référence  $X^*$  sont choisies au hasard parmi l'ensemble des valeurs de  $X_i$  de 0 à  $(1-\Delta)$ , soit  $X^* = [1/3, 0, 2/3]^T$ .

$$\text{Matrice triangulaire inférieure } B : \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\text{Matrice unité } J : \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\text{Matrice diagonale } D^* : \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\text{Matrice carrée } P^* : \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{Matrice d'orientation } B^* : \begin{bmatrix} 1 & 1/3 & 0 \\ 1 & 2/3 & 0 \\ 1 & 2/3 & 1/3 \\ 2/3 & 2/3 & 1/3 \end{bmatrix}$$

Dans la matrice  $B^*$ , on peut voir que chaque colonne, qui concerne une variable, est modifiée “One-At-A-Time” par un  $\pm\Delta$ .

En notant  $f(X_{(k)})$  la valeur de la fonction déterminée pour le vecteur d'entrées correspondant à la  $k^{\text{ème}}$  ligne de la matrice  $B^*$ , les effets élémentaires de chaque variable sont définis par :

$$EE_1 = \frac{f(X_{(4)}) - f(X_{(3)})}{\Delta}$$

$$EE_2 = \frac{f(X_{(2)}) - f(X_{(1)})}{\Delta}$$

$$EE_3 = \frac{f(X_{(3)}) - f(X_{(2)})}{\Delta}$$

La méthode de Morris a été appliquée dans tous les domaines de l'ingénierie, et des améliorations visant à estimer plus efficacement la moyenne et l'écart-type des effets élémentaires ont été proposées, soit basées sur une meilleure exploration du domaine des variables, soit basées sur une meilleure utilisation des points générés. Ainsi [CAPOLONGO et al., 2007] ont proposé d'introduire la notion de distance entre trajectoires, puis de chercher les  $r$  combinaisons de toutes les trajectoires possibles (si  $r$  est le nombre de trajectoire requis) qui maximisent la somme globale des distances, afin de disposer d'un ensemble assurant la meilleure couverture possible du domaine. Afin de réduire le considérable effort à produire pour s'assurer de l'optimalité des combinaisons, [RUANO et al., 2012] ont suggéré une approche itérative n'explorant pas toutes les combinaisons possibles mais seulement une partie. Ils montrent que la procédure proposée permet de sélectionner un ensemble de trajectoires satisfaisantes avec un effort de calcul comparativement plus faible que celui nécessaire à une optimisation intégrale. Dans

[SANTIAGO et al., 2012] la construction de constellations est proposée à partir des points issus d'un certain nombre de trajectoires. Partant d'un point de référence pris au hasard, les points constituant les extrémités des branches de la constellation découlent d'une exploration des points proches du point de référence, selon une distance et un angle entre branches, fixés aléatoirement. Pour chaque constellation, on détermine une approximation de  $f(X)$  par interpolation linéaire dont on tire immédiatement les effets élémentaires, qui sont les coefficients du polynôme de degré 1. En définissant plusieurs familles possibles de distances et d'angles dans la formation des constellations, on obtient un grand nombre de trajectoires complémentaires. Dans cette technique, la linéarité supposée est discutable avec l'augmentation de la distance, qui peut aller jusqu'à 85% de la dimension du domaine. Dans le cas de fonction a priori très non-linéaires à analyser, cette technique ne semble pas pertinente. De même, la couverture optimale du domaine par les trajectoires n'assure pas de mieux investir les zones de plus forte sensibilité de la fonction, a priori non localisées, si ce n'est en augmentant le nombre de trajectoires. C'est donc plutôt cette voie que nous avons privilégiée.

### III.3.5.6. Choix du nombre de trajectoires

Dans l'espace défini par la moyenne absolue des effets et leur écart-type, la position du point défini pour une variable donnée est susceptible d'être modifiée en fonction du nombre de trajectoires. En effet ce dernier a une incidence sur la convergence de la statistique, mais également sur l'espace exploré du domaine et donc sur les valeurs calculées des effets individuels. Dans les exemples qui suivent, plusieurs échantillonnages de  $r$  trajectoires ont été effectués 40 fois pour plusieurs exemples de fonctions. Pour chaque trajectoire, le point de référence est simulé par hypercube latin sur l'ensemble des niveaux de subdivisions envisagés.

Le premier exemple est tiré de [ANDRIAMIHAJA, 2009]. La fonction utilisée est

$$f(X) = 5 \times \sin(X_1) + 50 \times \cos(X_2)$$

Les paramètres d'entrée  $X_1$  et  $X_2$  suivent la loi de distribution uniforme  $X_i \sim U[-\pi, \pi]$  pour  $i = 1, 2$ . Les résultats de la moyenne et de l'écart-type sont présentés sur les Figures III.2 et III.3. La variable à laquelle est particulièrement sensible la fonction est  $X_2$ . Si l'importance des variables n'apparaît pas modifiée par le nombre de trajectoires, on constate en revanche que la concentration des points relatifs à  $X_2$  est bien plus marquée avec un nombre de 1000 trajectoires, et qu'elle reste inchangée pour  $X_1$ .

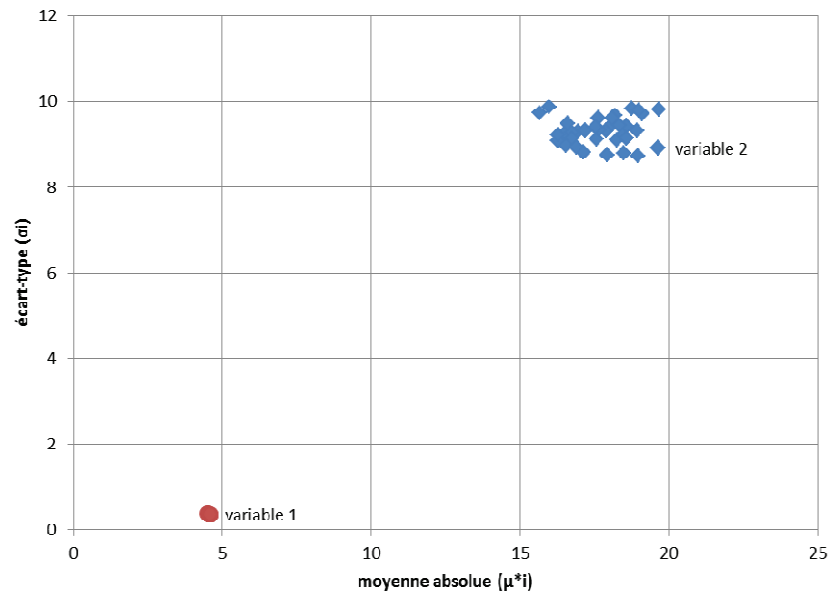


Figure III.2. Moyennes et écart-types des effets élémentaires pour la fonction définie dans [ANDRIAMIHAJA, 2009] pour  $r = 100$

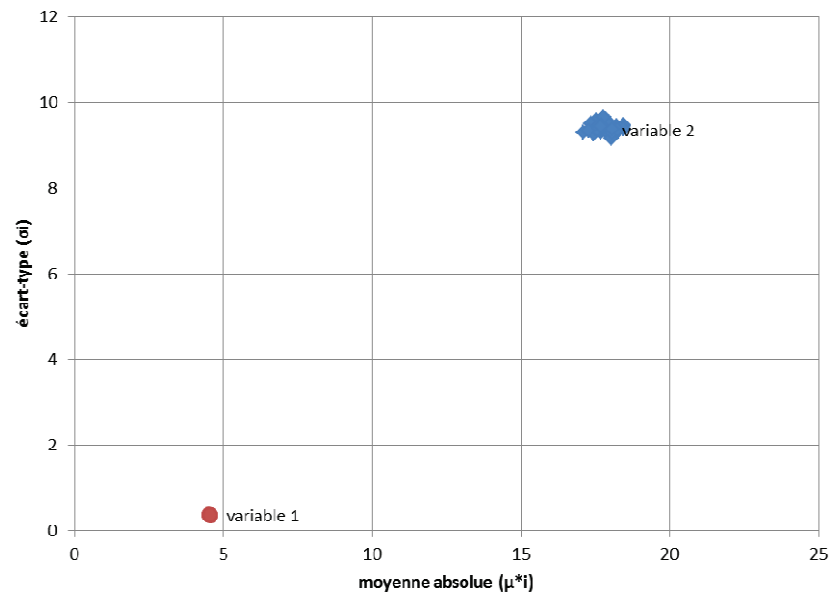


Figure III.3. Moyennes et écart-types des effets élémentaires pour la fonction définie dans [ANDRIAMIHAJA, 2009] pour  $r = 1000$

Le second exemple est proposé dans [JANON, 2012], est celui de la fonction :

$$f(X) = \sin(X_1) + 7 \times \sin^2(X_2) + X_3^4 \times \sin(X_1) / 10$$

Les variables  $X_1$ ,  $X_2$  et  $X_3$  suivent comme précédemment une loi uniforme sur  $[-\pi, \pi]$ . Les Figures III.4, pour un nombre de 20 trajectoires, et III.5 pour un nombre de 100 trajectoires, montrent à nouveau une bonne concentration des points représentatifs pour certaines variables,  $X_3$  et  $X_1$  qui sont les moins

importantes, et une réduction de dispersion bien marquée pour  $X_2$ , passant d'environ 40% pour  $r = 20$  à environ 12% pour  $r = 100$ .

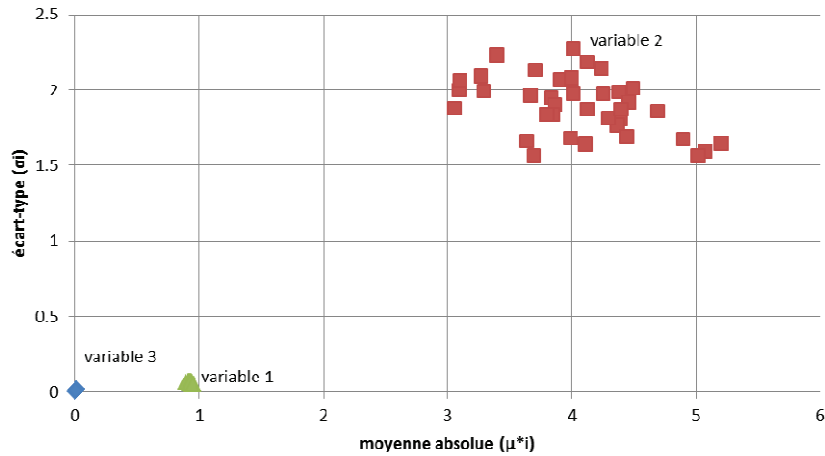


Figure III.4. Moyennes et écart-types des effets élémentaires pour la fonction définie dans [JANON, 2012], pour  $r = 20$

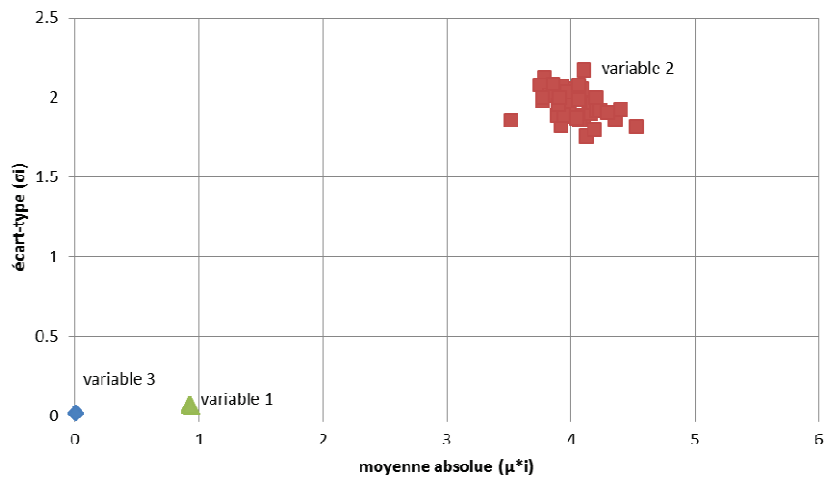


Figure III.5. Moyennes et écart-types des effets élémentaires pour la fonction définie dans [JANON, 2012], pour  $r = 100$

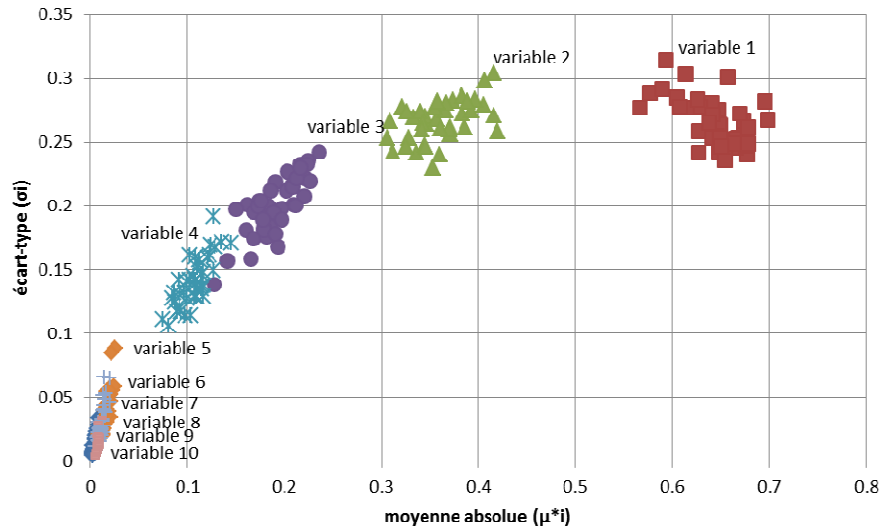
Comme dans le cas précédent, le nombre de trajectoires ne modifie pas le résultat du criblage : l'influence des variables reste bien repérable.

Le troisième exemple est suggéré dans [RIAHI, 2013]. La fonction est définie par :

$$f(X) = \sum_{i=1}^{10} (-1)^i \prod_{j=1}^i X_j \quad (\text{III.13})$$

Les variables suivent une loi uniforme sur  $[0,1]$ . La Figure III.6 et le Tableau III.2 montrent les résultats obtenus pour 90 trajectoires. La dispersion des points pour les variables  $X_1$  à  $X_4$  reste considérable, variables qui apparaissent également comme les plus influentes. Pour les variables  $X_5$  à  $X_{10}$ ,

les nuages de points sont beaucoup plus réduits. Il est facile de considérer comme peu influentes les variables  $X_6$  à  $X_{10}$ , mais il semble plus délicat de se prononcer pour la variable  $X_5$ . Les nuages de points des variables  $X_3$  à  $X_4$  s'interpénètrent : en fonction de l'échantillonnage réalisé pour 90 trajectoires, on peut considérer comme plus influente l'une ou l'autre des variables.



**Figure III.6. Moyennes et écart-types des effets élémentaires pour la fonction définie dans [RIAHI, 2013] pour  $r = 90$**

	[RIAHI, 2013], $r = 1408$		Résultats obtenus pour $r = 90$	
	$\mu_i^*$	$\sigma_i$	$\mu_i^*$	$\sigma_i$
$X_1$	0,674	0,293	0,644768	0,265351
$X_2$	0,345	0,273	0,360538	0,266916
$X_3$	0,175	0,209	0,190398	0,19991
$X_4$	0,0755	0,123	0,106963	0,140623
$X_5$	0,0414	0,0752	0,056336	0,09287
$X_6$	0,0169	0,0338	0,033158	0,060903
$X_7$	0,0121	0,0422	0,016632	0,039837
$X_8$	0,0050	0,0175	0,007149	0,020161
$X_9$	0,0052	0,0228	0,003679	0,011901
$X_{10}$	0	0	0,00048	0,001319

**Tableau III.2. Comparaison avec les valeurs moyennes des moyennes et écart-types avec les résultats proposées par [RIAHI, 2013]**

Les exemples précédents montrent que le nombre minimal de trajectoires à fixer a priori n'est pas forcément trivial. Même s'il s'agit seulement de stabiliser un résultat de criblage visant à identifier les variables peu influentes, il paraît nécessaire de faire varier le nombre de trajectoires avec un nombre d'échantillonnage suffisant. Il apparaît que cet effort est toutefois relativement peu coûteux.

### III.3.5.7. Sensibilité globale avec la méthode de Morris

Utilisée comme simple outil de criblage, la méthode de Morris permet d'identifier les paramètres les moins influents sur la réponse d'un modèle. La dimension efficace peut être déduite du criblage par élimination des paramètres identifiés de l'ensemble des paramètres incertains du modèle. Malheureusement, il est parfois difficile de dissocier les paramètres importants et non importants en se basant seulement sur le graphe construit à partir des statistiques des effets élémentaires, comme illustré dans la Figure III.7 avec par exemple le modèle de carbonatation proposé qui contient 32 paramètres d'entrées.

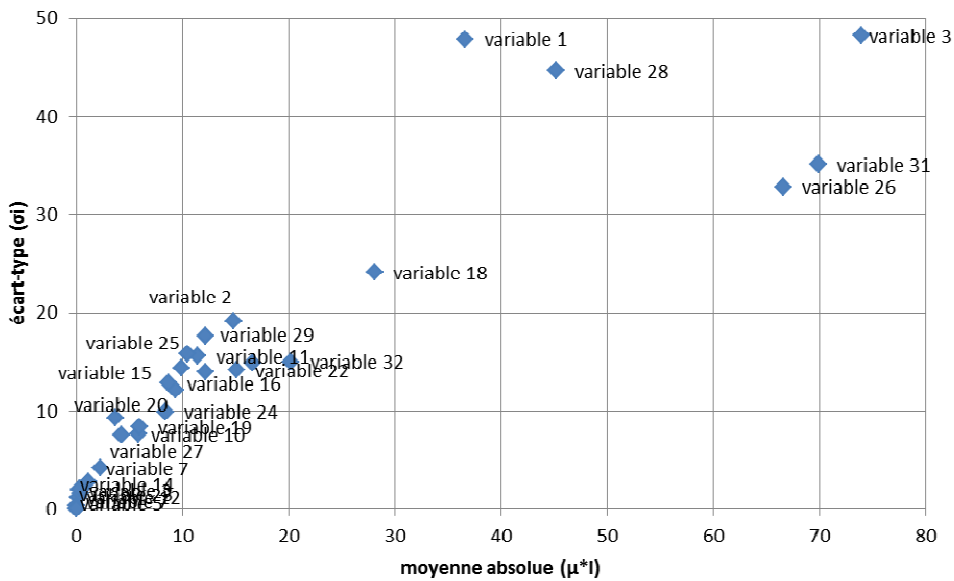


Figure III.7. Exemple de nuages de points où l'influence de certaines variables est difficile à discriminer

Afin de pallier ce problème, [GRESHAM et al, 1995] ont proposé d'utiliser une autre mesure de sensibilité pour hiérarchiser les paramètres d'un modèle qu'ils ont appelée mesure alternative de sensibilité globale. Elle est définie par :

$$G_i^* = \frac{G_i}{\sum_{i=1}^n G_i} \quad (\text{III.14})$$

Où  $G_i = \mu_i^2 + \sigma_i^2$  (III.15)

Le cumul des sensibilités globales ( $G^*_i$ ) est égal à l'unité, et peut être considéré comme une variable aléatoire discrète dont la distribution n'est autre que la distribution de la dimension stochastique nominale. En fixant un quantile  $p$ , la dimension stochastique efficace peut être définie par le nombre de paramètres, préalablement classés par ordre décroissant de valeur de  $G^*_i$ , dont la somme des mesures de sensibilité  $G^*_i$  qui leur sont associées est inférieure ou égale à  $p$ . Ce concept est illustré sur les Figures



III.8 et III.9, où les variables d'entrée  $\{X_3, X_1, X_{28}, X_{26}, X_{18}, X_2, X_{29}, X_{32}, X_{25}, X_{22}, X_{11}\}$  peuvent être considérées comme constitutives de la dimension stochastique pour le quantile  $p=95\%$ .

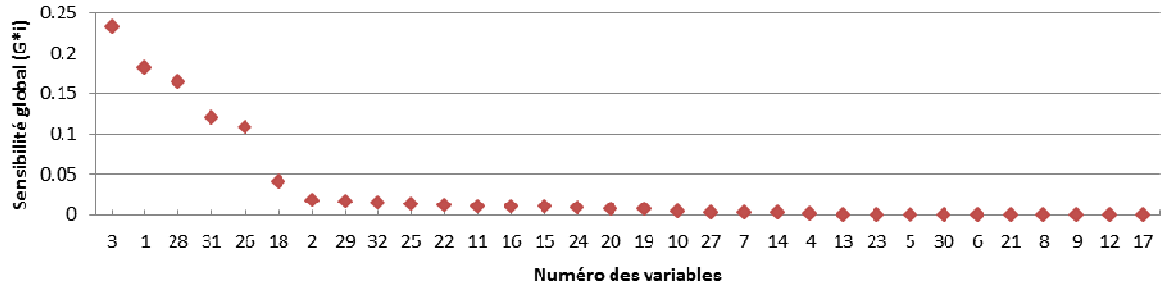


Figure III.8. Classement des variables aléatoires en se référant à la mesure de sensibilité  $G_i^*$

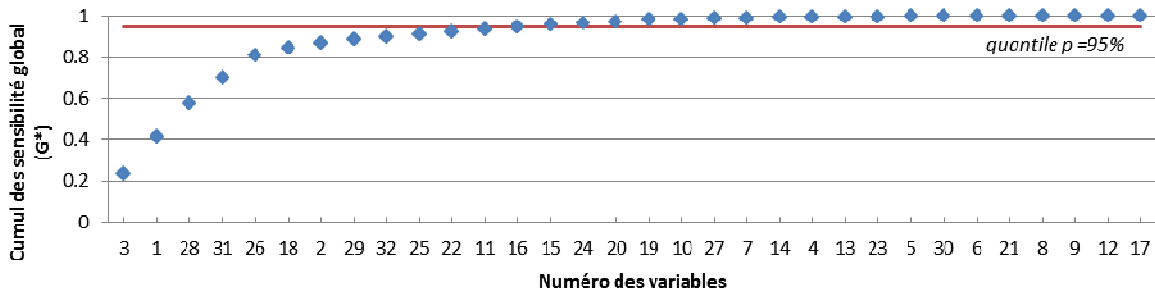


Figure III.9. Identification des variables d'entrée les plus importants pour un quantile seuil  $p = 95\%$

L'analyse globale de sensibilité peut également aider à définir le nombre de trajectoires à envisager : ce dernier peut en effet correspondre au nombre à partir duquel la hiérarchisation construite sur la base de la mesure de sensibilité globale n'est plus modifiée.

L'avantage principal de la méthode de Morris est qu'elle permet d'évaluer qualitativement, et de façon partielle quantitativement, la sensibilité de la réponse d'un modèle vis-à-vis des différentes variables d'entrée avec un coût de calcul raisonnable. Cependant, son inconvénient majeur est qu'elle ne permet pas de dissocier les effets des interactions relatives à chacune des variables. Elle fournit une mesure globale de l'effet d'interaction d'une variable avec les autres variables, mais elle ne donne pas d'information spécifique sur l'identité de cette interaction.

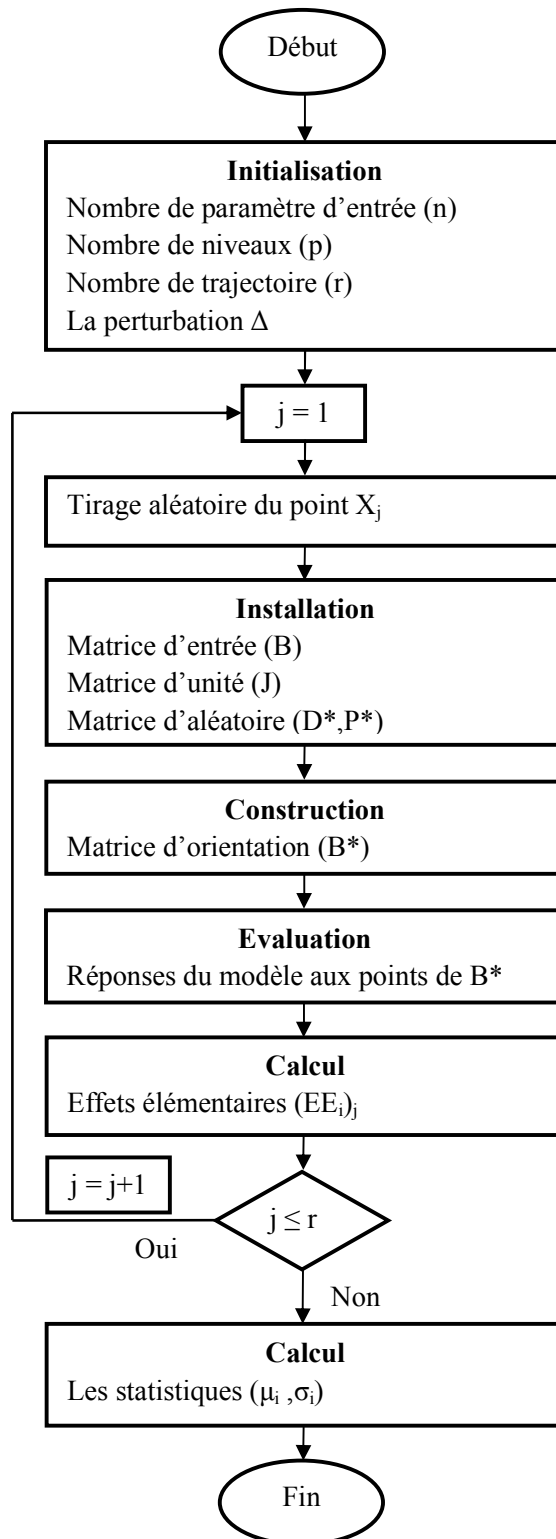


Figure III.10. Organigramme de la méthode de Morris

### III.3.6. Méthode de Sobol

Les méthodes d'analyse de sensibilité globale se basent sur l'idée que la variance d'une fonction peut être le résultat d'une superposition de variances. La décomposition de la variance consiste alors à déterminer la part de variance due aux variables prises séparément, celle due aux interactions de deux variables, de trois variables, et ainsi de suite [SALTELLI et al., 2000]. La méthode de Sobol permet d'explicitier ces variances partielles après décomposition de la fonction, puis exprime les parts de variance sous forme d'indices.

#### III.3.6.1. Notion d'indice de Sobol

Les indices de sensibilité par Sobol expriment la sensibilité de la sortie  $Y$  à une variable ou un groupe de variable d'entrée, ou encore la part de variance de  $Y$  due à une variable ou un groupe de variable d'entrée. Pour apprécier l'importance d'une variable d'entrée  $X_i$  sur la variance de la sortie  $Y$ , on étudie quantitativement la variance de  $Y$  si on fixe la variable  $X_i$  à une valeur  $X_i^*$ :  $V(Y|X_i = X_i^*)$ . Cette quantité est la variance conditionnelle de  $Y$  sachant que  $X_i = X_i^*$ . Plus la variable  $X_i$  sera importante vis-à-vis de la variance de  $Y$ , plus cette quantité sera petite.

Le modèle  $Y = f(X_1, \dots, X_n)$  où les variables aléatoires d'entrée  $X_i$  sont indépendantes est écrit sous la forme de sa décomposition de Sobol [SOBOL, 1993]:

$$Y = f_0 + \sum_{i=1}^n f_i(X_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} f_{i,j}(X_i, X_j) + \dots + f_{1,\dots,n}(X_1, \dots, X_n) \quad (\text{III.16})$$

Pour des variables uniformes sur  $[0,1]$ , Sobol montre que cette décomposition existe si  $f_0$  est constant et si :

$$\int_0^1 f_{1,\dots,s}(X_1, \dots, X_s) dX_k = 0 \quad \text{pour } 1 < k \leq s \quad (\text{III.17})$$

Dans ces conditions, on peut écrire :

$$f_0 = E[Y] \quad (\text{III.18})$$

$$f_i(X_i) = E[Y|X_i] - E[Y] \quad (\text{III.19})$$

$$f_{i,j}(X_i, X_j) = E[Y|X_i, X_j] - E[Y|X_i] - E[Y|X_j] + E[Y] \quad (\text{III.20})$$

$E[Y|X_i]$  est l'espérance conditionnelle de  $Y$  sachant  $X_i$ , et ne dépend donc que de  $X_i$ . La variance de  $Y$  s'écrit :

$$V = V\left(f_0 + \sum_{i=1}^n f_i(X_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} f_{i,j}(X_i, X_j) + \dots + f_{1,\dots,n}(X_1, \dots, X_n)\right) \quad (\text{III.21})$$

$$V = \sum_{i=1}^n V(f_i(X_i)) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} V(f_{i,j}(X_i, X_j)) + \dots + V(f_{1,\dots,n}(X_1, \dots, X_n)) \quad (\text{III.22})$$

Dans (III.22), les parts de variance s'expriment par :

$$V(f_i(X_i)) = V(E[Y|X_i] - E[Y]) = V(E[Y|X_i]) = V_i \quad (\text{III.23})$$

$$V(f_{i,j}(X_i, X_j)) = V(E[Y|X_i, X_j] - E[Y|X_i] - E[Y|X_j] + E[Y]) = V(E[Y|X_i, X_j]) - V(E[Y|X_i]) - V(E[Y|X_j])$$

$$V(f_{i,j}(X_i, X_j)) = V(E[Y|X_i, X_j]) - V_i - V_j = V_{ij} \quad (\text{III.24})$$

où  $V(E[Y|X_i])$  est la variance de l'espérance conditionnelle de  $Y$  quantifiant la dispersion de  $Y$  lorsque seul  $X_i$  varie. Plus cette variance est élevée, plus  $X_i$  est « influent » sur la sortie  $Y$ , c'est-à-dire que la variation de  $Y$  due à la variation de  $X_i$  est grande.

La variance de  $Y$  peut donc se décomposer sous la forme suivante :

$$V = \sum_{i=1}^n V_i + \sum_{1 \leq i < j \leq n} V_{ij} + \dots + V_{1,\dots,n} \quad (\text{III.25})$$

On peut définir des indices de sensibilité de premier ordre, qui expriment la sensibilité de la variance de  $Y$  à la variable  $X_i$  [SOBOL, 1993]:

$$S_i = \frac{V_i}{V} = \frac{V(E[Y|X_i])}{V} \quad (\text{III.26})$$

Les indices de sensibilité d'ordre deux expriment la sensibilité de la variance de  $Y$  à l'interaction des variables  $X_i$  et  $X_j$ , c'est-à-dire la sensibilité de  $Y$  aux variables  $X_i$  et  $X_j$  qui n'est pas prise en compte dans l'effet des variables seules [SOBOL, 1993]:

$$S_{ij} = \frac{V_{ij}}{V} = \frac{V(E[Y|X_i, X_j]) - V_i - V_j}{V} \quad (\text{III.27})$$

Et ainsi de suite jusqu'à l'ordre  $n$ , les indices de sensibilité d'ordre élevé exprimant la sensibilité de la variance de  $Y$  au groupe de variables qui n'est pas pris en compte dans l'effet des variables seules et des interactions des variables d'entrée.

Le nombre d'indices de sensibilité ainsi construit, de l'ordre 1 à l'ordre  $n$ , est égal à  $2^n - 1$ . Lorsque le nombre de variables d'entrée  $n$  est très élevé, le nombre d'indices de sensibilité est très important. L'estimation et l'interprétation de tous ces indices deviennent impossibles.

Homma et Saltelli [HOMMA et al, 1996] ont introduit des indices de sensibilité totaux, qui expriment la sensibilité totale de la variance  $Y$  à une variable, c'est-à-dire la sensibilité à la variable seule et aux interactions de cette variable avec d'autres variables. L'indice de sensibilité total  $S_{Ti}$  à la variable  $X_i$  est défini comme la somme de tous les indices de sensibilité relatifs à la variable  $X_i$  :

$$S_{Ti} = S_i + \sum_{j \neq i} S_{ij} + \sum_{j \neq i, k \neq i, j < k} S_{ijk} + \dots = 1 - \frac{V[E[Y|X_{-i}]]}{V[Y]} \quad (\text{III.28})$$

Où  $X_{-i}$  est un vecteur représentant tous les paramètres à l'exception du paramètre  $X_i$ .

D'après le théorème de la variance totale, si la variance de  $Y$  est finie, elle s'écrit  $V[Y] = V[E[Y|X_i]] + E[V[Y|X_i]]$ . Donc, l'indice de sensibilité total  $S_{Ti}$  a la forme :

$$S_{Ti} = \frac{E[V[Y|X_{-i}]]}{V[Y]} \quad (\text{III.29})$$

Le calcul pratique des indices de Sobol est très fastidieux. Aussi, il est souvent choisi de ne calculer que les indices totaux et de premier ordre, au nombre de  $2n$ , que les indices de tous les ordres, au nombre de  $(2^n - 1)$ . On peut ainsi savoir par différence si l'incidence sur la variance de l'interaction entre variables est significative. D'autre part, l'exploitation des indices de Sobol dans l'objectif de hiérarchiser les variables d'entrée par ordre d'incidence sur la variance de la fonction considérée est basée sur la connaissance des indices totaux.

### III.3.6.2. Estimation des indices de sensibilité

Les indices de sensibilité peuvent parfois être calculés formellement, lorsque la forme analytique de la fonction  $f$  du modèle est connue et relativement simple. La plupart du temps cependant, un calcul direct des indices n'est pas possible, en particulier si le modèle n'a qu'une forme numérique. Il est alors nécessaire d'estimer les indices par différentes techniques. Les simulations de Monte Carlo se prêtent bien à l'estimation des indices car elles sont simples à mettre en œuvre, avec l'inconvénient de demander parfois un grand nombre d'évaluations du modèle.

### III.3.6.3. Estimation des indices de sensibilité par simulations de Monte Carlo

Considérons un échantillon de  $m$  réalisations des variables d'entrée  $(X_1, \dots, X_n)$  :

$$X_{(m)} = (X_{j1}, \dots, X_{jn})_{j=1, \dots, m} \quad (\text{III.30})$$

Cet échantillon se présente sous la forme d'une matrice de dimension  $m \times n$ , constituant une trajectoire, où  $x_{(k)i}$  est la valeur de  $X_i$  ( $i=1,n$ ) pour le  $k^{\text{ième}}$  tirage ( $k=1,m$ ).

Chaque variable  $X_i$  est uniformément distribuée sur  $[0,1]$  et est éventuellement transformée au moment du calcul de la fonction sur un intervalle physique  $[X_{min,i}, X_{max,i}]$ . Afin d'assurer une bonne répartition des tirages aléatoires sur le domaine, chaque variable prend pour chaque point de la trajectoire une valeur parmi les  $m$  valeurs suivantes :  $\{1/2m, 1/2m+1/m, 1/2m+2/m, \dots, 1-1/2m\}$ . Le dernier point est imposé par les  $m-1$  points précédents. On assure ainsi une distance minimale entre les points de la trajectoire.

L'espérance  $E[Y]$  de  $Y$ , et sa variance  $V(Y)$ , sont estimées par :

$$E[Y] = f_0 = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m f(X_{(k)1}, \dots, X_{(k)n}) \quad (\text{III.31})$$

$$V[Y] = V = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m f^2(X_{(k)1}, \dots, X_{(k)n}) - f_0^2 \quad (\text{III.32})$$

Les indices de sensibilité de premier ordre sont alors estimés par :

$$S_i = \frac{V_i}{V} = \frac{V(E[Y|X_i])}{V} = \frac{E[E[Y|X_i]^2] - E[E[Y|X_i]]^2}{V} = \frac{U_i - E[Y]^2}{V} = \frac{U_i - f_0^2}{V} \quad (\text{III.33})$$

La quantité  $U_i$  est l'espérance du carré de l'espérance de  $Y$  conditionnellement à  $X_i$ . On peut l'estimer comme une espérance classique, mais, tenant compte du conditionnement à  $X_i$ , en faisant varier dans les deux appels à la fonction  $f$  toutes les variables sauf la variable  $X_i$ .

Le carré de l'espérance de  $Y$  conditionnellement à la valeur  $X_i$  du premier point est :

$$E[Y|X_{(1)1}]^2 = \left( \frac{1}{m} \left[ \sum_{k=1}^m f(X_{(1)1}, X_{(k)2}, \dots, X_{(k)m}) \right] \right)^2 \quad (\text{III.34})$$

Le carré de l'espérance est calculé pour chaque point de la trajectoire et l'espérance du carré conditionnellement à  $X_i$  est alors :

$$U_1 = \frac{1}{m} \left( \sum_{j=1}^m E[Y|X_{(j)1}]^2 \right) \quad (\text{III.35})$$

Le nombre d'appels à la fonction  $f$  est donc égal à  $m^2$  pour  $U_1$ , auquel on peut soustraire les calculs correspondant aux  $m$  lignes de la matrice de trajectoire requis pour l'estimation de  $f_0$ . Pour les autres variables, les calculs correspondant aux  $m$  lignes de la matrice de trajectoire ne sont pas répétés. Le nombre d'appels à la fonction est donc  $N_c = n \times (m^2 - m) + m$  pour l'ensemble des indices de premier ordre.

Les indices de sensibilité de second ordre sont :

$$S_{ij} = \frac{V_{ij}}{V} = \frac{V(E[Y|X_i, X_j]) - V_i - V_j}{V} = \frac{U_{ij} - f_0^2 - V_i - V_j}{V} \quad (\text{III.36})$$

Nous estimons les quantités  $U_{ij} = E[E[Y|X_i, X_j]^2]$  de la même manière, en faisant varier toutes les variables sauf  $X_i$  et  $X_j$ . Et ainsi de suite pour les indices de sensibilité d'ordre supérieur. L'estimation des indices de sensibilité d'ordre  $i$ , ( $1 < i \leq n$ ), nécessite une estimation des indices de sensibilité d'ordre 1 à  $i-1$ . Par contre, les indices de sensibilité totaux peuvent être estimés directement :

$$S_{Ti} = 1 - \frac{V[E[Y|X_{-i}]]}{V[Y]} = 1 - \frac{V_{-i}}{V} = 1 - \frac{E[E[Y|X_{-i}]^2] - E[E[Y|X_{-i}]]^2}{V} = 1 - \frac{U_{-i} - E[Y]^2}{V} = 1 - \frac{U_{-i} - f_0^2}{V} \quad (\text{III.37})$$

Où  $V_{-i}$  est la variance de l'espérance de  $Y$  conditionnellement à toutes les variables sauf  $X_i$ ;  $V_{-i}$  est alors estimée comme  $V$ , sauf qu'au lieu de faire varier toutes les variables sauf  $X_i$ , seul  $X_i$  varie.

Le carré de l'espérance de  $Y$  conditionnellement à toutes les variables du premier point sauf  $X_i$  est :

$$E[Y|X_{-i}]^2 = \left( \frac{1}{m} \left[ \sum_{k=1}^m f(X_{(k)1}, X_{(k)2}, \dots, X_{(k)m}) \right] \right)^2 \quad (\text{III.38})$$

Le carré de l'espérance est calculé pour chaque point de la trajectoire et l'espérance du carré conditionnellement à toutes les variables sauf  $X_i$  est :

$$U_{-i} = \frac{1}{m} \left( \sum_{i=1}^m E[Y|X_{(i)1}] \right)^2 \quad (\text{III.39})$$

Le calcul de  $U_{-i}$  ne requiert pas d'appels complémentaires à la fonction  $f$  en plus de ceux déjà nécessaires au calcul de  $U_i$ .

Jacques [JACQUES, 2005] propose une alternative pour la détermination approchée de  $U_i$  et  $U_{-i}$ . Elle consiste à combiner deux lignes successives de la matrice de trajectoire, notées (1) puis (2). Ainsi

$$U_i = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m f(X_{(k)1}^{(1)}, \dots, X_{(k)i}^{(1)}, \dots, X_{(k)n}^{(1)}) f(X_{(k)1}^{(2)}, \dots, X_{(k)i}^{(1)}, \dots, X_{(k)n}^{(2)}) \quad (\text{III.40})$$

Et

$$U_{-i} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m f(X_{(k)1}^{(1)}, \dots, X_{(k)i}^{(1)}, \dots, X_{(k)n}^{(1)}) f(X_{(k)1}^{(2)}, \dots, X_{(k)i}^{(2)}, \dots, X_{(k)n}^{(1)}) \quad (\text{III.41})$$

Ainsi le nombre d'appels est nettement plus réduit que dans le cas de l'estimation classique. Compte tenu des appels liés au calcul de  $f_0$ , le nombre total d'appels à la fonction  $f$  est  $N_f=(2n+1)\times m$ . Pour  $m=100$  et  $n=10$ , l'estimation classique requiert un nombre d'appels  $N_c=99100$  alors que l'alternative proposée par Jacques en demande  $N_f=2100$ .

Les exemples qui suivent montrent sur des fonctions de plus en plus complexes la convergence obtenues sur les indices de sensibilité, pour un ensemble de 30 trajectoires, en fonction de la méthode de calcul appliquée.

Le premier modèle proposé dans [ANDRIAMIHAJA, 2009] s'écrit :

$$f(X) = 5 \times \sin(X_1) + 50 \times \cos(X_2)$$

Les Figures III.11, III.12 révèlent que la méthode alternative d'estimation des indices proposée par Jacques ne semble pas satisfaisante pour le faible nombre de points considérés dans les trajectoires.

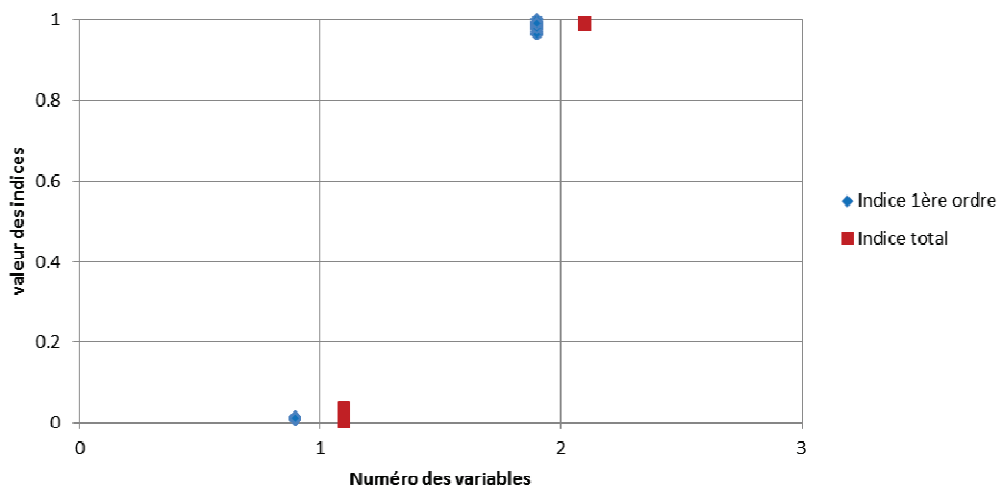
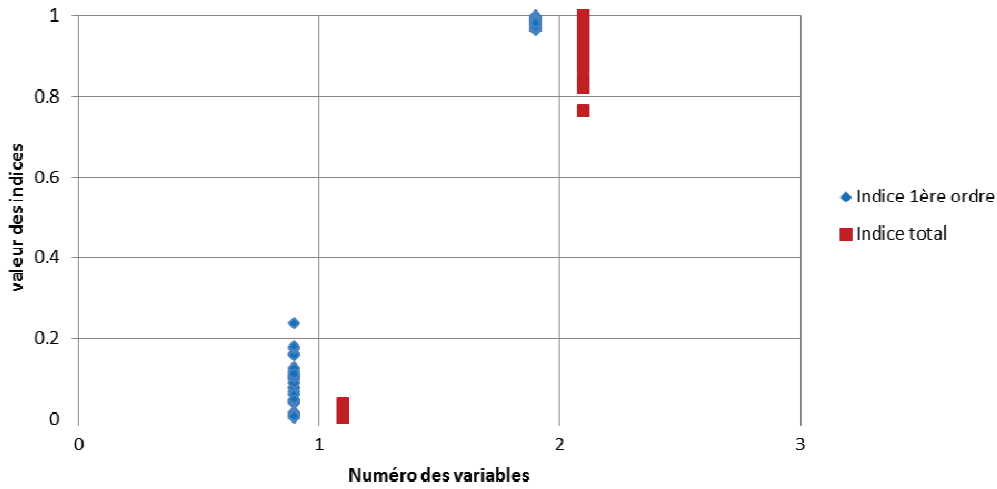


Figure III.11. Valeurs des indices de sensibilité du modèle proposé dans [ANDRIAMIHAJA, 2009], méthode classique avec  $m=30$





**Figure III.12. Valeurs des indices de sensibilité du modèle proposé dans [ANDRIAMIHAJA, 2009], méthode alternative avec m=30**

Le Tableau III.3 donne les valeurs moyennes des indices sur l'ensemble des trajectoires, avec un nombre croissant de points par trajectoire. On peut noter la bonne concordance des valeurs pour  $X_1$ , tandis que cette concordance n'est pas aussi nette pour  $X_2$ .

m=30	[ANDRIAMIHAJA, 2009]		méthode classique		méthode alternative	
	$S_i$	$S_{Ti}$	$S_i$	$S_{Ti}$	$S_i$	$S_{Ti}$
$X_1$			0,0106	0,0202	0,0361	0,0260
$X_2$			0,9891	0,9914	0,9743	0,9645
m=100	[ANDRIAMIHAJA, 2009]		méthode classique		méthode alternative	
	$S_i$	$S_{Ti}$	$S_i$	$S_{Ti}$	$S_i$	$S_{Ti}$
$X_1$	0,0168	0,0047	0,0101	0,0117	0,0100	0,0062
$X_2$	0,9953	1,0568	0,9883	0,9899	0,9938	0,9900
m=1000	[ANDRIAMIHAJA, 2009]		méthode classique		méthode alternative	
	$S_i$	$S_{Ti}$	$S_i$	$S_{Ti}$	$S_i$	$S_{Ti}$
$X_1$	0,0156	0,0088	0,0099	0,0112	0,0089	0,0099
$X_2$	0,9912	0,9944	0,9888	0,9901	0,9901	0,9911

**Tableau III.3. Comparaison des valeurs moyennes des indices de sensibilité avec les résultats proposées par [ANDRIAMIHAJA, 2009]**

Le deuxième modèle est proposé par [JANON, 2012] et comporte 3 variables d'entrées uniformément réparties sur  $[-\pi, \pi]$ , comme dans l'exemple précédent. Son expression est :

$$f(X) = \sin(X_1) + 7 \times \sin^2(X_2) + X_3^4 \times \sin(X_1) / 10$$

On peut noter sur les Figures III.13 et III.14 que les résultats sont très dispersés, aussi bien par une méthode que par l'autre, du fait d'un nombre de points excessivement faibles par trajectoire. On peut noter dans le Tableau III.4 que les valeurs moyennes des indices de premier ordre sont cohérentes lorsque le nombre de points augmente.

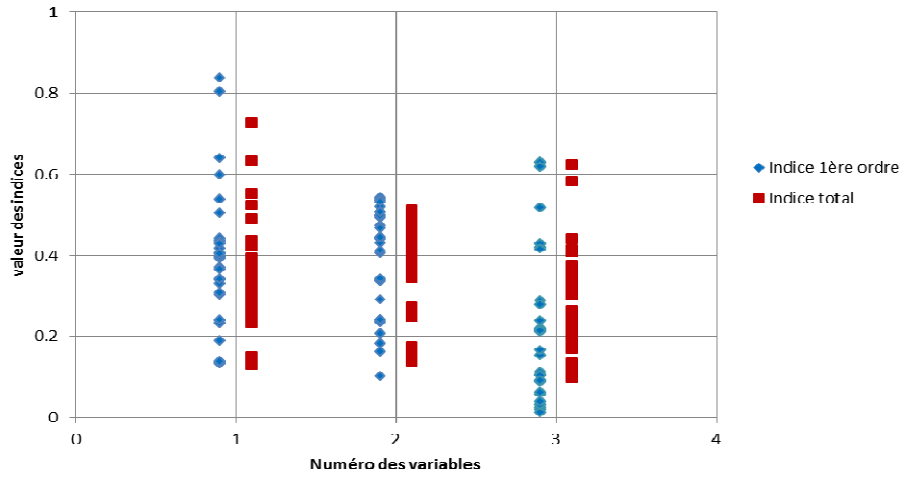


Figure III.13. Valeurs des indices de sensibilité du modèle proposé dans [JANON, 2012], la méthode classique avec  $m = 20$

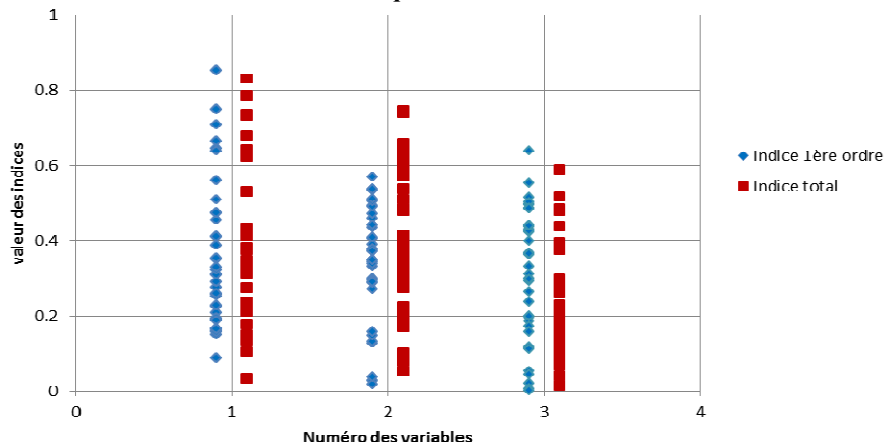


Figure III.14. Valeurs des indices de sensibilité du modèle proposé dans [JANON, 2012], méthode alternative avec  $m = 20$

m=20	[JANON, 2012]		méthode classique		méthode alternative	
	$S_i$	$S_{Ti}$	$S_i$	$S_{Ti}$	$S_i$	$S_{Ti}$
$X_1$			0,3432	0,3392	0,2641	0,3153
$X_2$			0,4597	0,4401	0,4103	0,4604
$X_3$			0,2011	0,2213	0,3442	0,2672
m=100	[JANON, 2012]		méthode classique		méthode alternative	
	$S_i$	$S_{Ti}$	$S_i$	$S_{Ti}$	$S_i$	$S_{Ti}$
$X_1$	0,318		0,3182	0,3430	0,2856	0,3012
$X_2$	0,456		0,4567	0,4417	0,4116	0,4524
$X_3$	$\approx 0$		0,0012	0,2383	0,0536	0,2620
m=1000	[JANON, 2012]		méthode classique		méthode alternative	
	$S_i$	$S_{Ti}$	$S_i$	$S_{Ti}$	$S_i$	$S_{Ti}$
$X_1$	0,316		0,3068	0,3663	0,3016	0,3615
$X_2$	0,449		0,4434	0,4426	0,4433	0,4461
$X_3$	$\approx 0$		0,0005	0,2514	0,0076	0,2522

Tableau III.4. Comparaison des valeurs moyennes des indices de sensibilité avec les résultats proposées par [JANON, 2012]

Le modèle proposé par [CAMPOLONGO et al, 1999] a pour expression :

$$f(X) = \sum_{i=1}^4 b_i w_i + \sum_{i \leq j} b_{ij} w_i w_j$$

Avec  $w_i = 2 \times (X_i - 1/2)$ , les coefficients  $b_i$  et  $b_{ij}$  se trouvent dans le Tableau suivant :

$b_i$	1	2	3	4	$b_{ij}$	11	12	13	14
Valeur	0,05	0,59	10	0,21	Valeur	0	80	60	40
$b_{ij}$	23	24	33	34	$b_{ij}$	44			
Valeur	0,73	0,18	0,64	0,93	Valeur	0,06			

On note sur les Figures III.15 et III.16 que les résultats sont légèrement plus dispersés pour la méthode alternative que pour la méthode classique. Le décalage de la tendance centrale entre les indices totaux et les indices de premier ordre est également plus important dans l'application de la méthode alternative.

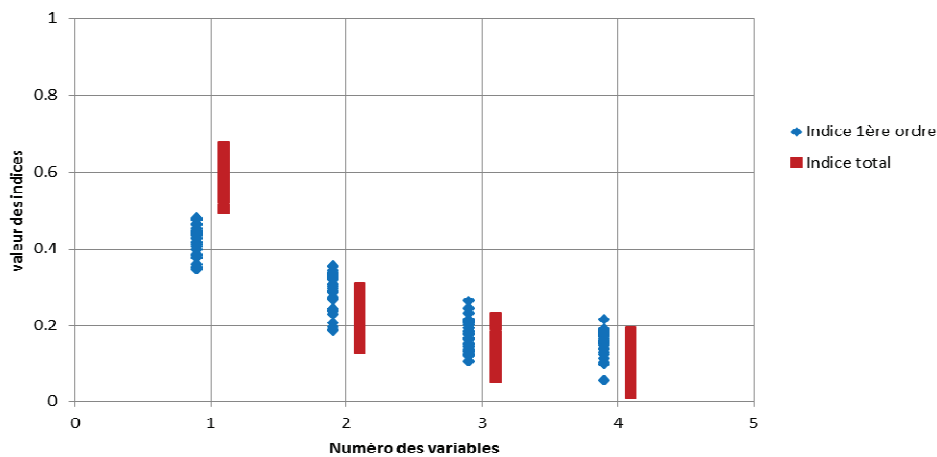


Figure III.15. Valeurs des indices de sensibilité du modèle proposé dans [CAMPOLONGO et al., 1999], méthode classique avec  $m = 450$

Le dernier modèle est celui proposé dans [RIAHI, 2013] déjà considéré au §III.3.5.6 avec 10 variables d'entrées, dont l'expression est :

$$f(X) = \sum_{i=1}^{10} (-1)^i + \prod_{j=1}^i X_j$$

La dispersion des points est assez similaire, même si elle apparaît à nouveau plus importante dans le cas de la méthode alternative, en particulier pour les variables dont les indices de sensibilité sont assez faibles ( $X_5$  à  $X_{10}$ ). Pour ces dernières, la convergence de l'estimation de l'indice de premier ordre semble assez pénalisée par l'utilisation de la méthode alternative.

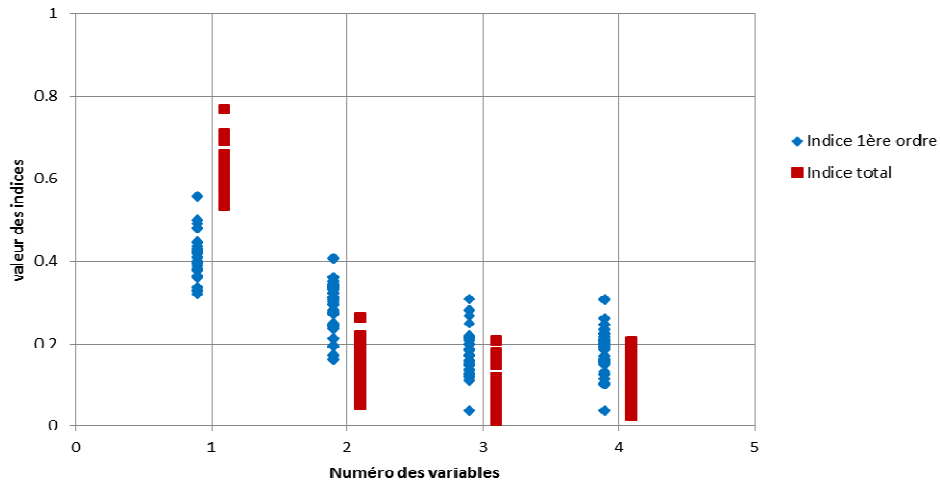


Figure III.16. Valeurs des indices de sensibilité du modèle proposé dans [CAMPOLONGO et al., 1999], méthode alternative avec  $m = 450$

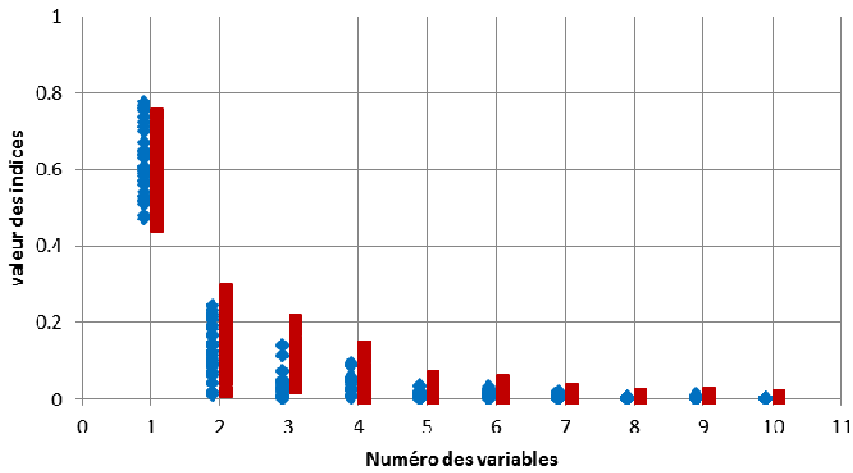


Figure III.17. Valeurs des indices de sensibilité du modèle proposé dans [RIAHI, 2013], méthode classique avec  $m = 90$

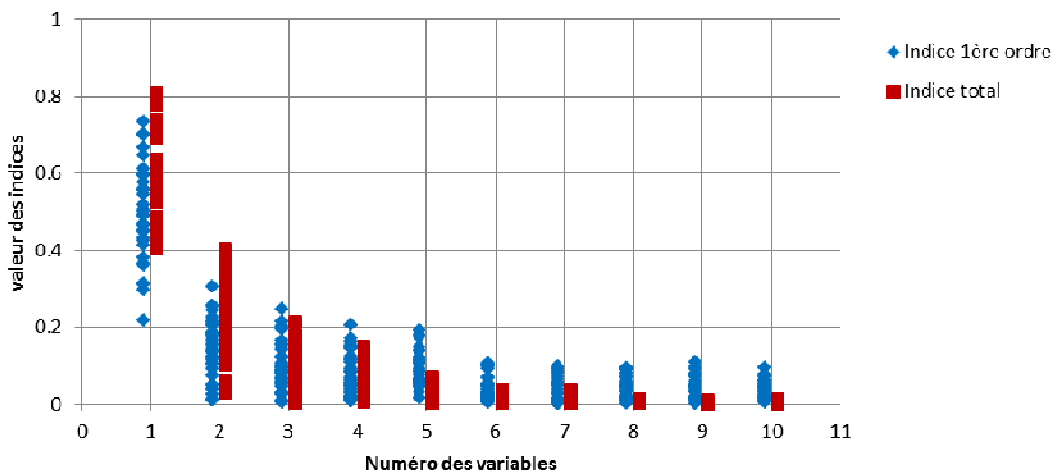


Figure III.18. Valeurs des indices de sensibilité du modèle proposé dans [RIAHI, 2013], méthode alternative avec  $m = 90$

	<b>[RIAHI, 2013], m = 196608</b>		<b>méthode classique, m = 90</b>		<b>méthode alternative, m = 90</b>	
	<b>S<sub>i</sub></b>	<b>S<sub>Ti</sub></b>	<b>S<sub>i</sub></b>	<b>S<sub>Ti</sub></b>	<b>S<sub>i</sub></b>	<b>S<sub>Ti</sub></b>
$X_1$	0,678	0,743	0,6548	0,6688	0,5392	0,6058
$X_2$	0,174	0,238	0,1732	0,1886	0,1856	0,2211
$X_3$	0,052	0,0786	0,0641	0,1286	0,0945	0,1140
$X_4$	0,027	0,0222	0,0498	0,0868	0,0545	0,0802
$X_5$	0,017	0,0109	0,0072	0,0099	0,0342	0,0215
$X_6$	0,016	0,0009	0,0055	0,0071	0,0221	0,0174
$X_7$	0,017	0,0013	0,0016	0,0036	0,0230	0,0162
$X_8$	0,017	0,0002	0,0014	0,0018	0,0242	0,0011
$X_9$	0,016	0,0002	0,0004	0,0005	0,0241	0,0001
$X_{10}$	0,017	0	0,0003	0,0000	0,0243	0,0001
	<b>[RIAHI, 2013], m = 196608</b>		<b>méthode classique, m=1000</b>		<b>méthode alternative, m=1000</b>	
	<b>S<sub>i</sub></b>	<b>S<sub>Ti</sub></b>	<b>S<sub>i</sub></b>	<b>S<sub>Ti</sub></b>	<b>S<sub>i</sub></b>	<b>S<sub>Ti</sub></b>
$X_1$	0,678	0,743	0,6663	0,7473	0,6635	0,7518
$X_2$	0,174	0,238	0,1705	0,2503	0,1616	0,2555
$X_3$	0,052	0,0786	0,0419	0,0820	0,0358	0,0884
$X_4$	0,027	0,0222	0,0138	0,0229	0,0033	0,0264
$X_5$	0,017	0,0109	0,0012	0,0112	0,0041	0,0083
$X_6$	0,016	0,0009	0,0002	0,0037	0,0050	0,0032
$X_7$	0,017	0,0013	0,0002	0,0012	0,0006	0,0005
$X_8$	0,017	0,0002	0,0002	0,0008	0,0006	0,0002
$X_9$	0,016	0,0002	0,0002	0,0008	0,0006	0,0002
$X_{10}$	0,017	0	0,0001	0,0001	0,0006	0,0001

**Tableau III.5. Comparaison des valeurs moyennes des indices de sensibilité avec les résultats proposés par [RIAHI, 2013]**

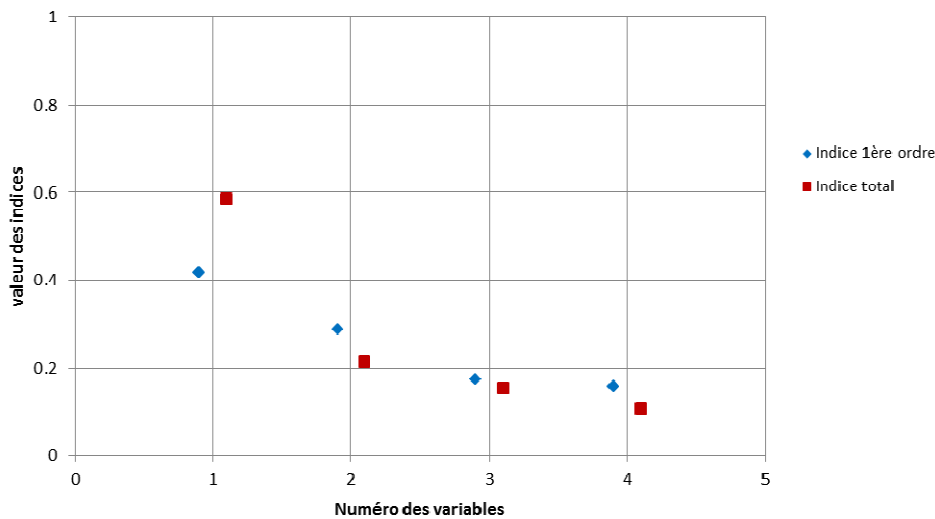
Les résultats obtenus par Riahi pour un très grand nombre de points sont portés dans le Tableau III.5. En les considérant comme résultats « de référence », on peut constater que les valeurs moyennes des indices totaux calculées pour des trajectoires de 1000 points sont en bonne correspondance avec ces résultats, quelle que soit d'ailleurs la méthode employée.

L'augmentation de la dispersion des indices de sensibilité lorsque la méthode alternative est employée à la place de la méthode classique n'est pas vraiment rédhibitoire. A contrario, on pourrait dire que l'utilisation de la méthode classique dans l'espoir de réduire la dispersion serait la plupart du temps illusoire, alors que son coût numérique peut quant à lui être rédhibitoire dans le cas d'un modèle complexe et nécessitant un temps de calcul significatif. D'autres leviers doivent être utilisés, comme par exemple l'augmentation du nombre de points des trajectoires. Dans la suite de notre travail, nous privilégierons donc la méthode alternative.

### III.3.6.5. Hiérarchisation des variables

Les variables aléatoires dans un modèle peuvent être facilement classées en fonction de la valeur des indices de sensibilité. Ils sont tous positifs et plus l'indice est grand (proche de 1), plus la variable aura de l'importance sur la variance de la sortie du modèle.

Les indices de Sobol du premier ordre et totaux sont portés sur la Figure III.19 pour le modèle proposé par [CAMPOLONGO et al., 1999]. On peut constater que ces deux indices sont très proches pour une même variable, ce qui permet de dire que les effets des interactions entre variables sur la variance de la sortie du modèle sont assez faibles. On note en conséquence que la hiérarchisation des variables d'entrée quant à leur influence sur le modèle est identique quel que soit l'indice de sensibilité choisi pour l'établir, et qu'elle donne :  $X_1$ ,  $X_2$ ,  $X_3$  et  $X_4$ .



**Figure III.19. Valeurs moyennes des indices de sensibilité du modèle proposé dans [CAMPOLONGO et al., 1999], méthode classique avec  $m = 450$**

### III.3.6.6. Choix du nombre de simulations

Pour chaque nombre de points d'une trajectoire, les valeurs possibles prises par les variables sont différentes. C'est pourquoi les valeurs des indices varient également en fonction du nombre de points d'une trajectoire. Considérons le modèle proposé dans [JACQUES, 2005] :  $f(X) = X_2^4/X_1^2$  où les domaines physiques de  $X_1$  et  $X_2$  sont  $[0,5, 1,5]$ . Les indices de Sobol totaux et de premier ordre ont été calculés pour 40 trajectoires comprenant 100 points (Figure III.20) ou 1000 points (Figure III.21). On peut voir que la dispersion des résultats est nettement réduite lorsque le nombre de points augmente. On remarque également que la tendance centrale des indices de sensibilité est légèrement modifiée par le nombre de points. Avec un nombre de points très important, les indices de sensibilité convergeraient vers une valeur « de référence ». Cependant, il n'est pas toujours possible de recourir à un grand nombre de

points par trajectoire, en raison du temps de calcul, notamment pour les modèles complexes. Il convient donc de trouver un compromis entre le temps de calcul et la précision attendue en termes de hiérarchisation des variables. Ce compromis dépend de la forme du modèle et du nombre de variables d'entrée

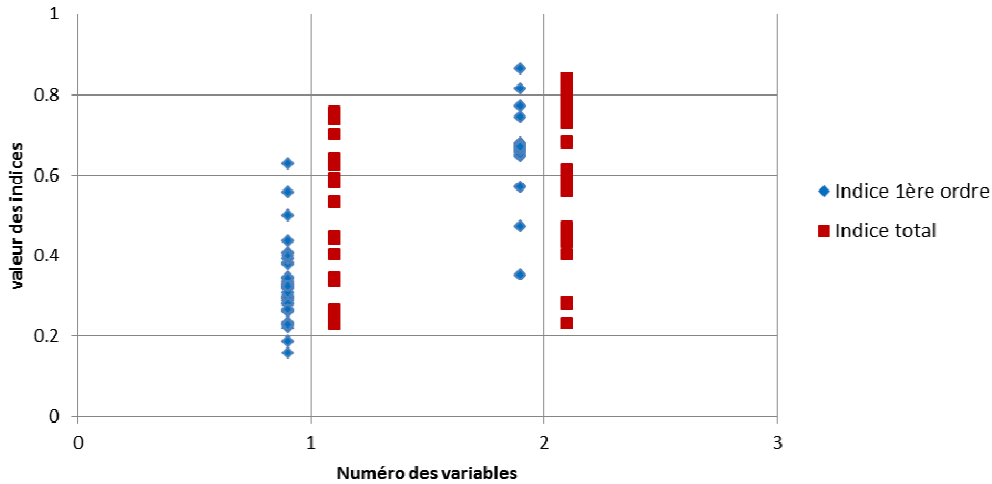


Figure III.20. Valeurs des indices de sensibilité du modèle proposé dans [JACQUES, 2005] pour une trajectoire de 100 points

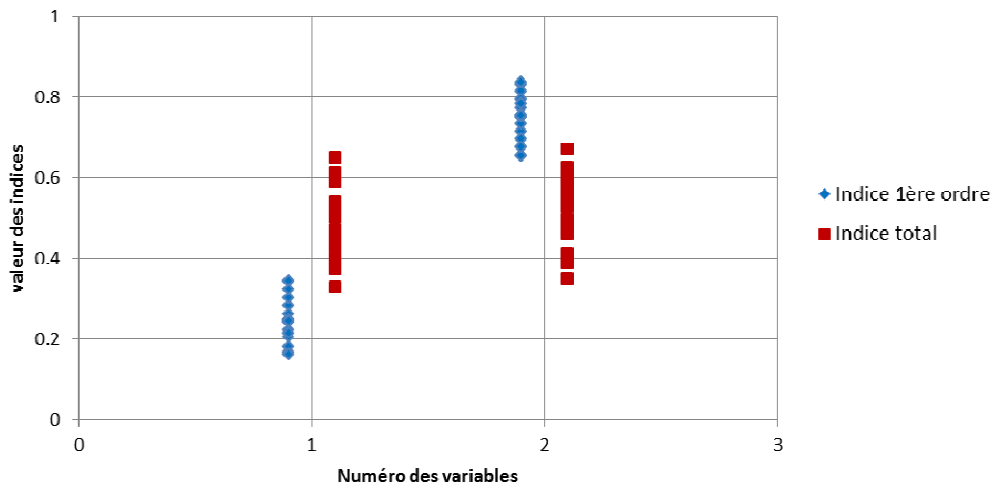


Figure III.21. Valeurs des indices de sensibilité du modèle proposé dans [JACQUES, 2005] pour une trajectoire de 1000 points

### III.4. Analyse de fiabilité

L'analyse de fiabilité est nécessaire dès lors que des performances sont attendues d'un système d'ingénierie et que les paramètres de fonctionnement du système sont incertains. Il s'agit en effet de savoir avec quelle probabilité on peut s'attendre à ce que le système fonctionne, ou au contraire à ce qu'il soit défaillant. La limite entre fonctionnement et défaillance est en rapport avec les besoins de l'utilisateur du système et de ses attentes. Elle n'est pas définie de manière intrinsèque. Dans le domaine des

structures de génie civil la défaillance peut concerner la capacité portante avec perte de la structure, les caractéristiques de fonctionnement sans perte de la structure, les considérations de durabilité en l'état initial sans altération des caractéristiques de fonctionnement. L'objet de la présente partie est de rappeler des éléments de fiabilité structurale, ainsi que de présenter les outils retenus pour l'appliquer à notre étude, pour une défaillance concernant la durabilité.

### III.4.1. Formulation du problème

L'objectif principal de l'analyse de fiabilité est la détermination de la probabilité de défaillance ( $P_f$ ) d'un système mécanique avec un critère de défaillance qui prend en considération les incertitudes qui peuvent se manifester dans la géométrie, les propriétés du matériau et les paramètres du chargement. Le critère de défaillance peut être défini comme la différence de deux quantités fondamentales désignées respectivement par la « Résistance » ( $R$ ) et la « Sollicitation » ( $S$ ) du système. La « Résistance » est ce qui s'oppose à la défaillance du système, ou contribue à l'en éloigner. La « Sollicitation » est ce qui favorise la défaillance du système, ou contribue à l'en rapprocher. Dans le cas qui nous préoccupe, la « Résistance » peut être une épaisseur d'enrobage ou bien une durée d'incubation de la corrosion, tandis que la « Sollicitation » peut être une profondeur carbonatée, ou bien une durée cumulée de conditions favorables à l'amorçage de la corrosion.

Le critère de défaillance est représentée par une fonction d'état limite  $G(X)$  définie en fonction du vecteur des paramètres incertains  $X = \{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ . L'ensemble de ces paramètres tel que  $G(X) > 0$  représente le domaine de sûreté, et celui tel que  $G(X) < 0$  est le domaine de défaillance. La frontière  $G(X) = 0$  est la surface d'état limite (ou la surface de défaillance).

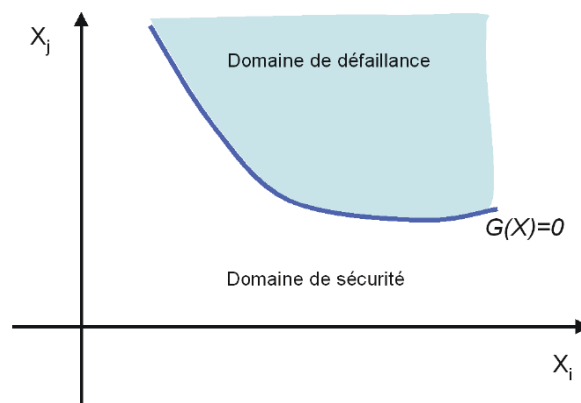


Figure III.22. Représentation du domaine probabilisé [DEBY, 2008]

L'expression la plus simple de la fonction d'état limite  $G(X)$  est celle de la marge de sûreté :

$$G(X) = R(X) - S(X) \quad (\text{III.42})$$



D'autres expressions peuvent satisfaire à la définition des domaines de défaillance et de sûreté, comme par exemple  $G(X)=R(X)/S(X) - 1$ , mais la notion de marge de sûreté y est moins explicite. La fiabilité est définie par la probabilité :

$$P_r = P[G(X) > 0] = \int_{G(X)>0} f_X(X) dX_1 \dots dX_n \quad (\text{III.43})$$

Où  $f_X(X)$  est la densité de probabilité conjointe des variables, composantes du vecteur  $X$ .

La probabilité de défaillance est alors :

$$P_f = 1 - P_r = \int_{G(X) \leq 0} f_X(X) dX_1 \dots dX_n \quad (\text{III.44})$$

La difficulté d'estimation de la fiabilité ou de la probabilité de défaillance réside dans la connaissance du domaine de défaillance du fait de la complexité de la fonction d'état limite, dans celle de la loi conjointe, qui n'est généralement pas connue, et aussi de la dimension  $n$  de l'espace aléatoire.

### III.4.2. Principales méthodes de fiabilité

Divers outils et concepts mathématiques ont été développés pour permettre l'estimation pratique de la fiabilité. Dans le cas de la fiabilité mécanique, le concept d'indice de fiabilité a été introduit dès l'émergence des problématiques de fiabilité et a été lié au dimensionnement des structures. Les simulations de Monte-Carlo sont également à la base de nombreuses possibilités d'estimation de la fiabilité.

#### III.4.2.1. Méthodes basées sur la notion d'indice de fiabilité

##### a. Indice de fiabilité de Cornell

L'indice de fiabilité de Cornell [CORNELL, 1969] est une mesure adimensionnelle de la marge de sûreté moyenne. Dans l'espace monodimensionnel de la marge de sûreté, il correspond à la distance comptabilisée en écart-types entre le point moyen et la surface de défaillance, et est défini par :

$$\beta_c = \frac{E[G(X)]}{D[G(X)]} \quad (\text{III.45})$$

Où  $E[G(X)]$  est l'espérance mathématique et  $D[G(X)]$  est écart-type de la fonction d'état limite  $G(X)$ .

Si  $R$  et  $S$  sont normales et non corrélées, en supposant que  $G(X)=R - S$ , l'indice de fiabilité de Cornell peut s'écrire comme :

$$\beta_C = \frac{\mu_R - \mu_S}{\sqrt{\sigma_R^2 + \sigma_S^2}} \quad (\text{III.46})$$

Où  $(\mu_R, \sigma_R)$ ,  $(\mu_S, \sigma_S)$  sont respectivement la moyenne et l'écart-type de la résistance  $R$  et la sollicitation  $S$ . Dans le cas où la marge de sûreté suit une loi normale, la probabilité de défaillance est liée à l'indice de fiabilité par :

$$P_f = \int_{-\infty}^0 f_G(z) dz = \int_{-\infty}^{-\beta_C} \varphi(u) du = \Phi(-\beta_C) \quad (\text{III.47})$$

Où  $\varphi$  et  $\Phi$  sont respectivement la densité de probabilité et la fonction de répartition de la loi normale centrée réduite.

Lorsque la fonction d'état limite n'est pas explicite, la définition de l'indice de Cornell peut toujours être utilisée en ayant, par exemple, recours aux simulations de Monte Carlo pour obtenir le premier et le second moment statistique de  $G(X)$ . Le principal inconvénient de l'indice de Cornell comme mesure de fiabilité est qu'il ne tient pas compte des lois de probabilité des variables aléatoires. Par ailleurs, pour deux expressions différentes d'un même état limite, par exemple  $G(X)=R - S \leq 0$  et  $G(X)=R/S \leq 1$ ,  $\beta_C$  prend des valeurs différentes alors que la probabilité de défaillance reste identique [NGUYEN S.X, 2007].

#### *b. Indice de fiabilité d'Hasofer-Lind*

Pour éviter les inconvénients liés à l'emploi de l'indice de Cornell, Hasofer et Lind [HASOFER et al., 1974] ont proposé d'utiliser un indice défini dans un espace où toutes les variables aléatoires suivent la loi normale centrée réduite et sont stochastiquement indépendantes (non corrélées), appelé espace standardisé (espace normé). Dans cet espace adimensionnel, pour tout vecteur  $U$  l'espérance est nulle  $E(U)=0$  et la matrice de covariance est la matrice diagonale unité  $Cov[U, U^T]=1$ .

Le passage du vecteur de variables aléatoires physiques  $X$ , de loi de probabilité conjointe quelconque, au vecteur standardisé  $U$  peut être opéré par diverses transformations isoprobabilistes symbolisée par  $T$  [DITLEVSEN et al., 1996] :

$$U = T(X) \quad (\text{III.48})$$

Hormis le cas du vecteur  $X$  dont les composantes suivent des lois normales, la transformation  $T$  est non linéaire et modifie la frontière de défaillance  $G(X)=0$ .

Dans l'espace standardisé, l'indice de fiabilité d'Hasofer-Lind  $\beta_{HL}$  est défini comme la distance minimale de l'origine de l'espace à un point de la surface d'état limite, dit point de conception et noté  $P^*$  (Figure III.23).

Le calcul de  $\beta_{HL}$  revient à résoudre le problème d'optimisation sous contrainte :

$$\beta_{HL} = \min(U^T U)^{1/2} \quad (\text{III.49})$$

Où  $U$  est un point sur la surface d'état limite  $G(U)=0$ .

Dans l'espace physique la formulation du problème est :

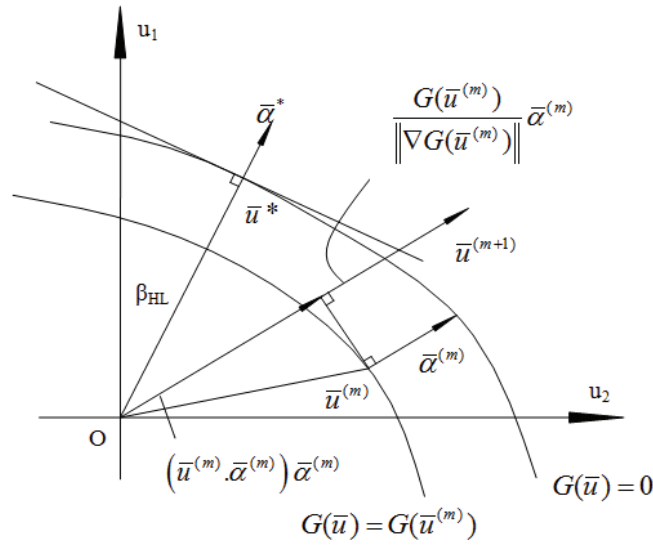
$$\beta_{HL} = \min\left[\left(T(X)^T T(X)\right)^{1/2}\right] \quad (\text{III.50})$$

Où  $X$  est un point sur la surface d'état limite  $G(X)=0$ .

La valeur du  $\beta_{HL}$  est essentiellement positive. Par convention l'indice est positif si le point origine appartient au domaine de sûreté, sinon il est négatif.

Cette définition de l'indice de fiabilité est plus générale que celle de l'indice de Cornell car l'indice ainsi défini ne dépend pas de la forme de la fonction d'état limite  $G(X)$ . Le passage de l'espace physique  $X$  à l'espace standardisé  $U$  permet en outre d'intégrer toute l'information probabiliste disponible [NGUYEN S.X, 2007], alors que seulement les deux premiers moments statistiques sont considérés dans la définition de l'indice de Cornell.

Plusieurs techniques ont été proposées pour résoudre le problème d'optimisation sous contrainte que constitue la définition de l'indice d'Hasofer-Lind, qui relèvent d'approches classiques pour ce type de problème, rappelées dans [LEMAIRE et al., 2005] : minimisation du Lagrangien de la fonction objectif intégrant la contrainte, utilisation du gradient conjugué ou du gradient projeté, prospection géométrique de l'espace par utilisation de simplex ou de traces pivotantes. L'un des algorithmes les plus efficaces et les plus utilisés actuellement pour la déterminer est l'algorithme itératif de Rackwitz-Fiessler [RACKWITZ et FIESSLER, 1979]. Il s'agit d'une adaptation de la méthode du gradient projeté au problème d'optimisation de la fiabilité mécanique. Le schéma de progression dans l'espace standardisé est présenté sur la Figure III.23.



**Figure III.23. Illustration de l'algorithme de Rackwitz-Fiessler [NGUYEN S.X, 2007]**

Le point  $U^*$  est déterminé comme la limite d'une séquence itérative  $U_0, U_{(1)}, \dots, U_{(m)}, \dots$ . Au pas  $(m+1)$ , le point suivant  $U_{(m+1)}$  est situé sur la droite issue de l'origine et parallèle à la direction du vecteur normal au plan tangent  $\alpha_{(m+1)}$ :

$$U_{(m+1)} = (U_{(m)}^T \alpha_{(m)}) \alpha_{(m)} + \frac{G(U_{(m)})}{\|\nabla G(U_{(m)})\|} \alpha_{(m)} \quad (\text{III.51})$$

Ce point contient deux termes :

- Le terme  $(U_{(m)}^T \alpha_{(m)}) \alpha_{(m)}$  est le résultat de la projection du point  $U_{(m)}$  sur la droite précédente ;
- Le vecteur  $[G(U_{(m)})/\|\Delta G(U_{(m)})\|] \times \alpha_{(m)}$  est un terme correctif tenant compte du signe de  $G(U_{(m)})$ .

Lorsque la valeur calculée de  $\beta$  est suffisamment stationnaire entre deux itérations successives  $m$  et  $m+1$  :  $|\beta^{m+1} - \beta^m| = \varepsilon$ , la convergence de la séquence est atteinte, où  $\varepsilon$  est la précision souhaitée sur l'indice de fiabilité.

Pour éviter d'obtenir une valeur de  $\beta_{HL}$  correspondant à un minimum local, il peut être nécessaire de recourir à plusieurs points initiaux dans la séquence, conduisant à plusieurs valeurs de l'indice de fiabilité valeurs  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_r$ , puis de définir  $\beta_{HL}$  par  $\beta_{HL} = \min\{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_r\}$ .

Le point de conception  $P^*$  correspondant à  $U^*$  est tel que :

$$U^* = \beta_{HL} \times \alpha^* \quad (\text{III.52})$$

Où  $\alpha^*$  est le cosinus directeur de la droite  $OU^*$

*c. Méthode FORM*

La méthode FORM pour « First Order Reliability Method » vise à estimer la probabilité de défaillance avec l'hypothèse que la surface d'état limite est assimilable à un hyperplan au voisinage du point de conception (Figure III.24). Dans ce cas :

$$P_f \approx \Phi(-\beta_{HL}) \quad (III.53)$$

L'égalité (III.53) est exacte pour le cas où les variables aléatoires sont gaussiennes et que la fonction d'état limite est linéaire. Dans ce cas l'indice de Cornell et l'indice d'Hasofer-Lind sont identiques, si la fonction d'état limite s'exprime par la différence  $R(X)-S(X)$ . L'expression (III.53) est souvent acceptable car l'incidence des points éloignés du point de conception  $P^*$  (disons à une distance supérieure à 3 dans l'espace standardisé) reste très faible sur la valeur de l'intégrale (III.47). Ainsi, si dans la zone proche de  $P^*$  la surface de défaillance est suffisamment proche d'un hyperplan, l'approximation est correcte. Les valeurs cibles de l'indice de fiabilité dans le cas d'états limites de durabilité peuvent varier de 1 à 1,5 [HYVERT, 2009], ce qui correspond à une probabilité de défaillance variant de 0,067 à 0,158.

*d. Méthode SORM*

Son appellation vient de « Second Order Reliability Method ». Elle est basée sur un développement de Taylor au deuxième ordre de la fonction d'état limite. Sa représentation est remplacée par une hyper-surface d'ordre 2. Comme le montre la Figure III.24, la méthode FORM est utilisée pour ajuster une fonction d'état de faible concavité au voisinage du point de conception. Par contre, la méthode SORM est utilisée pour une forte concavité de cette fonction au voisinage du même point [RGUIG, 2005]. Après détermination des courbures principales  $\kappa_i$  de l'hyper-surface, une approximation de la probabilité de défaillance est [BREITUNG, 1984] :

$$P_f \approx \Phi(-\beta_{HL}) \prod_{i=1}^{n-1} \frac{1}{\sqrt{1 + \beta_{HL} \kappa_i}} \quad (III.54)$$

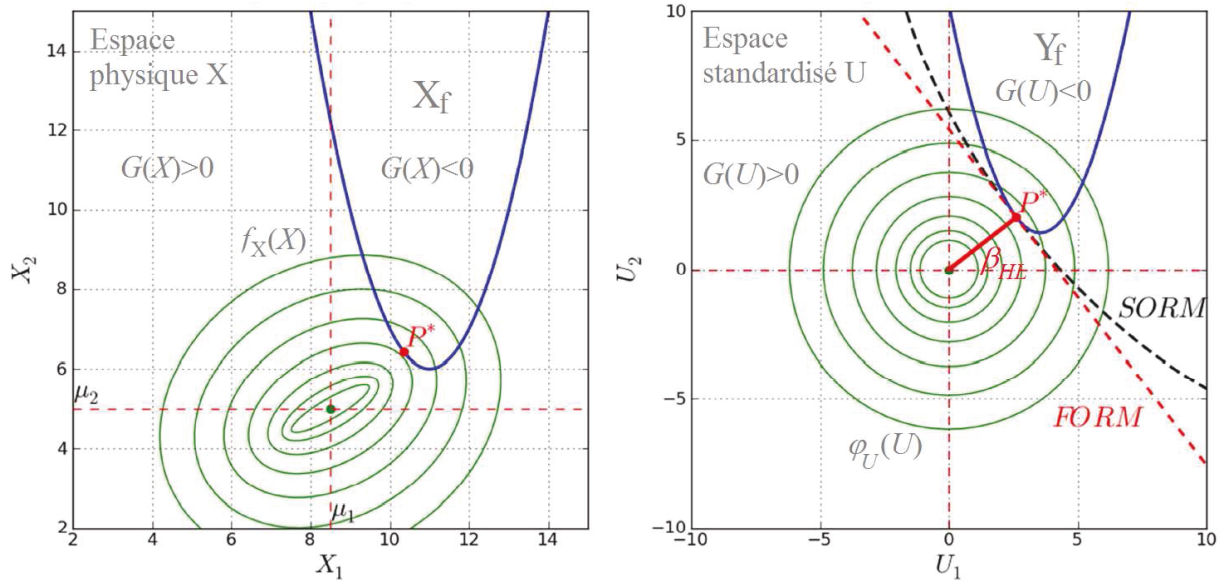


Figure III.24. Illustration des approches FORM et SORM [RIAHI, 2013]

### III.4.2.2. Méthodes basées sur l'utilisation des simulations de Monte Carlo

#### a. Estimation directe de la probabilité de défaillance

L'utilisation classique des simulations de Monte Carlo consiste à évaluer l'intégrale (III.47) par comptage des tirages tombant dans le domaine d'intégration, soit :

$$P_f \approx \frac{1}{N_{sim}} \sum_{k=1}^{N_{sim}} 1_{X_f}(X_{(k)}) \quad (III.55)$$

Où  $N_{sim}$  est le nombre de simulations, et  $1_{X_f}$  est l'indicateur valant 1 si  $G(X_k) \leq 0$  et 0 sinon. L'estimation (III.55) est en fait l'espérance de la variable aléatoire  $P_f$ , dont le coefficient de variation est  $\sqrt{(1-P_f)/(N_{sim} P_f)}$ . Le coefficient de variation peut être très élevé si à la fois la valeur de  $P_f$  et que le nombre de simulations sont faibles. On voit par exemple dans le cas d'une probabilité cible d'état limite de durabilité valant 0,067 qu'il faut un nombre minimal de 1400 simulations pour obtenir un coefficient de variation inférieur à 10%. Ce nombre est tout à fait raisonnable, cependant, il peut devenir prohibitif d'estimer une probabilité plus faible, d'un ( $N_{sim} > 15000$ ) ou de deux ( $N_{sim} > 150000$ ) ordres de grandeur. Pour accélérer la convergence de  $P_f$  avec  $N_{sim}$ , différentes méthodes ont été proposées comme la méthode des tirages d'importance, des tirages directionnels, des tirages asymptotiques, des tirages conditionnés et des subsets simulations [LEMAIRE et al., 2005].

#### b. Estimation par la méthode des tirages d'importance

Cette méthode consiste à utiliser une densité de tirage auxiliaire susceptible de fournir davantage de points dans le domaine de défaillance. Le calcul est mené dans l'espace standardisé, et la probabilité de défaillance est estimée par :

$$P_f \approx \frac{1}{N_{sim}} \sum_{k=1}^{N_{sim}} \frac{1_{X_f}(T(U_{(k)})) \varphi_U(U_{(k)})}{\varphi_U^{IS}(U_{(k)})} \quad (\text{III.56})$$

Où  $\varphi_U$  est la densité multi-normale standard et  $\varphi_U^{IS}$  est la densité de tirage choisie. Si l'indice de fiabilité est connu, le plus efficace est de choisir  $\varphi_U^{IS}$  comme la densité multi-normale centrée en  $P^*$ , et d'estimer alors  $P_f$  par :

$$P_f \approx \frac{\exp(\beta_{HL}^2/2)}{N_{sim}} \sum_{k=1}^{N_{sim}} 1_{X_f}(T(U_{(k)})) \exp(-U_{(k)}^T U^*) \quad (\text{III.57})$$

### c. Estimation par la méthode des tirages conditionnés

Le principe de la méthode consiste à écrire la probabilité de défaillance sous la forme :

$$P_f = P(U \in Y_f | U \in S_n^c) P(U \in S_n^c) \quad (\text{III.58})$$

Où  $S_n^c$  est le domaine complémentaire à l'hyperphère  $S_n$  de rayon  $\beta_{HL}$ . Les probabilités sont données par :

$$\text{Prob}(U \in S_n^c) = 1 - \chi_n^2(\beta_{HL}^2) \quad (\text{III.59})$$

Où  $\chi_n^2$  est fonction de répartition du khi2 à  $n$  degrés de liberté, et

$$P(U \in Y_f | U \in S_n^c) \approx \frac{1}{N_{sim}} \sum_{k=1}^{N_{sim}} 1_{X_f}(T(U_{(k)})) \quad (\text{III.60})$$

La simulation d'un vecteur  $U$  tel que  $\|U\| > \beta_{HL}$  est opérée en deux étapes :

- Génération d'un vecteur  $d$  uniformément réparti sur  $S_n$ ;
- Génération d'une norme  $r$  supérieure à  $\beta_{HL}$  suivant une loi de Rayleigh généralisée d'ordre  $n$  conditionnée par  $r > \beta_{HL}$ , puis application de  $U = rd$ .

La méthode des tirages conditionnés, comme la méthode des tirages d'importance nécessite de déterminer au préalable l'indice de fiabilité d'Hasofer-Lind. Il faut donc ajouter au nombre de simulations le nombre d'appels nécessaire à la détermination de  $\beta_{HL}$ . En général, le coût numérique global est moins élevé que celui de la méthode directe d'estimation de  $P_f$ .

### *III.5. Modèles de substitution*

Un des objectifs poursuivis dans l'amélioration des méthodes d'estimation de la fiabilité est l'adaptation requise lorsqu'un ou plusieurs modèles complexes interviennent dans l'expression de la fonction d'état limite, comme par exemple des modèles numériques aux éléments finis. Dans ce cas en effet plusieurs difficultés peuvent survenir du fait d'un temps de calcul trop étendu, d'un manque de robustesse des modèles soumis au crash-test des méthodes probabilistes (l'exploration large de l'espace des variables d'entrée des modèles peut conduire à des impossibilités pratiques de calcul), d'une inexactitude dans le calcul des gradients de la sortie des modèles. De façon parallèle aux améliorations apportées pour la précision d'estimation de la probabilité de défaillance ont été développées des techniques visant à remplacer les modèles physiques par des modèles de substitution (ou méta-modèles) parmi lesquels on peut trouver les réseaux de neurones artificiels, les surfaces de réponse ou bien encore les développements en chaos polynomiaux. Ces deux derniers font l'objet de la présente partie.

#### **III.5.1. Surfaces de réponses**

##### *III.5.1.1. Concept de surface de réponse*

Dans le cas général, on appelle surface de réponse, la représentation géométrique de la réponse d'un processus physique spatio-temporel aléatoire à des variables stimuli. La propriété étudiée, ou réponse  $Y$ , résulte du transfert par une fonction de réponse explicite, ou fonction de transfert, des variables d'entrée du système, le changement de valeurs de ces variables entraînant un changement de la valeur de la fonction de réponse.

En général, la forme explicite de cette fonction de transfert en fonction des variables de base est inconnue, mais on peut admettre qu'elle appartient à une famille de fonctions usuelles linéaires ou non, caractérisées par des paramètres à déterminer.

Pour construire une surface de réponse, il faut donc fournir :

- Une base de données physique ou numérique ;
- $X = \{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ , l'ensemble représentatif et ordonné des variables de base, et les valeurs prises dans la constitution de la base de données ;
- $H(X)$ , l'approximation de la réponse  $Y$ , formulée explicitement en fonction de  $X$  ;
- Une métrique dans l'espace des variables de base et de la réponse, qui permet de déterminer les paramètres de l'approximation  $H$  de la réponse  $Y$  en mesurant la qualité de son ajustement à la réponse.

##### *III.5.1.2. Surfaces de réponse polynomiales*



Dans la plupart des cas pratiques les surfaces polynomiales sont de bons candidats à la fonction d'approximation  $H$ . Il est en effet aisé d'en déterminer les paramètres, qui sont les coefficients appliqués aux variables et produits de variables de base, par la méthode des moindres carrés. On suppose en général que la fonction d'approximation remplace la fonction d'état limite dans son ensemble plutôt que la réponse d'un seul modèle mécanique. Ce choix suscite cependant des difficultés et des controverses lorsque l'on considère les points suivants [DUPRAT et al., 2012] :

- L'espace de travail : il est plus aisé de contrôler le plan d'expérience numérique dans l'espace physique pour assurer une réponse cohérente du modèle pour chaque point du plan d'expérience, mais il est plus commode de le construire dans l'espace standardisé car il est adimensionnel et facilite la liaison avec la détermination de l'indice de fiabilité ;
- Le nombre de points du plan d'expériences : avec l'augmentation du nombre de points, la convergence de la régression est améliorée (statistique - F et variance des coefficients), mais pas nécessairement la qualité de l'approximation (coefficient de corrélation ajusté  $R^2$ ), laquelle est toujours satisfaisante avec un nombre de points égal nombre de coefficients à calculer (car dans ce cas une interpolation est réalisée) ; la validité de la surface de réponse en dehors du plan d'expérience est généralement meilleure si elle a été obtenue avec un nombre important de points ; si la méthode de surface de réponse vise à réduire le coût numérique par rapport à l'utilisation du modèle physique exact, le nombre du points doit être minimisé ;
- La topologie du plan d'expériences : un plan d'expériences compact permet un ajustement de meilleure qualité, mais concentre le domaine de validité de l'approximation ; le choix des directions de l'espace prospectées dépend idéalement du comportement de la surface de réponse, qui n'est pas connue, et du modèle initial, dont on cherche à limiter le nombre de réponses à calculer ;
- La validité de la surface de réponse : en fonction de l'objectif fiabiliste (indice de fiabilité et/ou probabilité de défaillance estimée par simulations de Monte Carlo), il peut être nécessaire de valider localement ou globalement la surface de réponse ;
- L'adaptabilité de la surface de réponse ; la construction de la surface de réponse est rarement unique, en particulier si l'on cherche à la rendre performante pour un sous-domaine inconnu au départ (autour du point de défaillance le plus probable par exemple), on doit donc envisager une construction séquentielle couplée à un algorithme probabiliste, avec éventuellement une différenciation par sous-domaine ;

- Le degré et la forme du polynôme retenu : le degré du polynôme doit être inférieur ou égal au degré de non linéarité de la fonction d'état limite, inconnu, afin d'obtenir plus aisément un système linéaire bien conditionné ; la forme du polynôme est relative à la présence ou non de termes mixtes, qui contribuent à la prise en compte des interactions entre variables.

Les développements apportés depuis une dizaine d'années ont répondu dans l'ensemble à ces différents points. On peut en trouver une synthèse dans [NGUYEN S.X, 2007], [DUPRAT et al. 2012]. Nous donnons ici les principales étapes de la procédure de construction de la surface de réponse. L'expression de l'approximation dans l'espace standardisé est :

$$H(U) = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i U_i + \sum_{i=1}^n a_{ii} U_i^2 + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} U_i U_j \quad (\text{III.61})$$

On peut également écrire  $H$  comme

$$H(U) = \{1, U_i, U_i^2, U_i U_j\} \{a_0, a_i, a_{ii}, a_{ij}\}_{i,j=1,n}^T = B(U)^T a \quad (\text{III.62})$$

Les coefficients, composantes du vecteur  $a$ , sont déterminés par la méthode des moindres carrés :

$$a = (C^T W C)^{-1} C^T W Y \quad (\text{III.63})$$

Où  $C$  est une matrice dont les lignes sont les vecteurs  $B(U)$ ,  $Y$  est le vecteur des valeurs de la fonction d'état limite aux points du plan d'expérience et  $W$  est une matrice diagonale de pondération des points du plan d'expérience qui permet de favoriser certaines réalisations, en fonction par exemple de la distance des points par rapport au point de conception, si ce dernier est déterminé simultanément à la construction itérative de la surface de réponse [NGUYEN S.X, 2007]. Le plan d'expérience doit comprendre au moins autant de points que le nombre de coefficients à déterminer, soit  $r \geq (n+1)(n+2)/2$ . Un nombre plus important de points permet d'obtenir une meilleure statistique sur les coefficients, et une meilleure représentativité de la surface de réponse, mais cela présente évidemment un coût numérique plus élevé. La qualité de la surface de réponse est donnée par le coefficient de détermination ajusté :

$$R^2 = 1 - \frac{(r-1) \sum_{k=1}^r (H(U_{(k)}) - Y_{(k)})^2}{(r-n-1) \sum_{k=1}^r (\bar{Y} - Y_{(k)})^2} \quad (\text{III.64})$$

Où  $\bar{Y}$  est la moyenne des valeurs de  $Y$ .  $R^2=1$  indique une parfaite adéquation, tandis que  $R^2=0$  correspond à une très mauvaise approximation. Cependant le coefficient  $R^2$  doit être utilisé avec précaution, car il a tendance à sous-estimer la véritable erreur d'approximation. En effet dans le cas où  $r=(n+1)(n+2)/2$ , l'approximation interpole les réalisations du modèle, ce qui implique  $R^2 = 1$  alors que

l'erreur peut se révéler importante en des points n'appartenant pas au plan d'expériences. Ce phénomène est connu sous le nom de sur-apprentissage [SUDRET et al., 2005].

La construction de la surface de réponse peut être adaptative : le degré du polynôme, le maillage du plan d'expérience, le choix des zones de l'espace à investiguer, l'enrichissement du plan d'expérience, la pondération des points sont autant de facteurs qui peuvent être modifiés au fur et à mesure de la construction.

### III.5.2. Développements en chaos polynomial

La décomposition en chaos polynomial de la sortie de modèle a été récemment utilisée de façon originale pour l'analyse de sensibilité par [BLATMAN et al., 2008] et [BLATMAN, 2009].

L'avantage de cette approche est qu'elle est facile à utiliser car elle ne nécessite pas la connaissance de la structure du modèle. [WIENER, 1938] et [XIU et al., 2003] ont montré que toute variable aléatoire qui suit une loi normale et qui possède une variance finie, peut être représentée par une décomposition en polynômes d'Hermite. Pour une variable d'entrée suivant une loi uniforme, les polynômes correspondant sont les polynômes de Legendre. Pour d'autres types de distributions sont associées des familles spécifiques de polynômes.

#### III.5.2.1. Notion de chaos polynomial

On considère un système mécanique décrit par un modèle numérique  $f$  dépendant de  $n$  variables aléatoires indépendantes  $\{X_1, \dots, X_n\}^T$ , regroupées dans un vecteur aléatoire  $X$ . En supposant que la sortie  $Y=f(X)$  du modèle possède une variance finie, elle peut s'approximer par un développement en chaos polynomial. La densité de probabilité jointe du vecteur  $X$  est :

$$f_X(X) = \prod_{i=1}^n f_i(X_i) \quad (\text{III.65})$$

Avec  $f_i(X_i)$  est la densité marginale. Pour chacune des variables aléatoires d'entrée  $X_i$ , on peut définir une famille de polynômes orthonormaux  $\{P_l^i, l \in N\}$ , telle que  $P_0^i \equiv 1$  et le degré de chaque polynôme  $P_l^i$  est  $l$  pour  $l > 0$ . L'orthonormalité est définie comme suit :

$$\langle P_l^i, P_m^i \rangle \equiv \int_{D_i} P_l^i(X) P_m^i(X) f_i(X) dX = \delta_{l,m} \quad (\text{III.66})$$

Où  $\delta_{l,m} = 1$  si  $l = m$  et 0 sinon, et  $D_i$  est le support de la variable aléatoire  $X_i$ . On peut associer des familles classiques de polynômes orthogonaux aux variables aléatoires usuelles. Si  $X_i$  est gaussienne ou uniforme, la famille associée successivement est celle des polynômes d'Hermite ou de Legendre [ABRAMOWITZ et al., 1970], [SCHOUTENS, 2000].

On peut construire une base de polynômes multivariés  $\psi_m$  ( $m \in N$ ) par tensorisation, c'est-à-dire en multipliant les polynômes univariés entre eux :

$$\psi_\alpha(X) \equiv \psi_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}(X) = P_{\alpha_1}^1(X_1) \times \dots \times P_{\alpha_n}^1(X_n) \quad (\text{III.67})$$

Soize et Ghanem [SOIZE et al, 2004] montrent que pour représenter la réponse aléatoire  $Y = f(X)$  d'un modèle mécanique, la famille  $\{\psi_\alpha \equiv \psi_\alpha(X), \alpha \in N^n\}$  forme une base dénombrable adéquate.

Et plus, vis-à-vis du produit scalaire dans l'espace des variables aléatoires de variance finie, défini par l'espérance mathématique  $\langle Y_1, Y_2 \rangle = E[Y_1, Y_2]$  et compte tenu des équations (III.66), (III.67), cette base est orthonormale par construction :

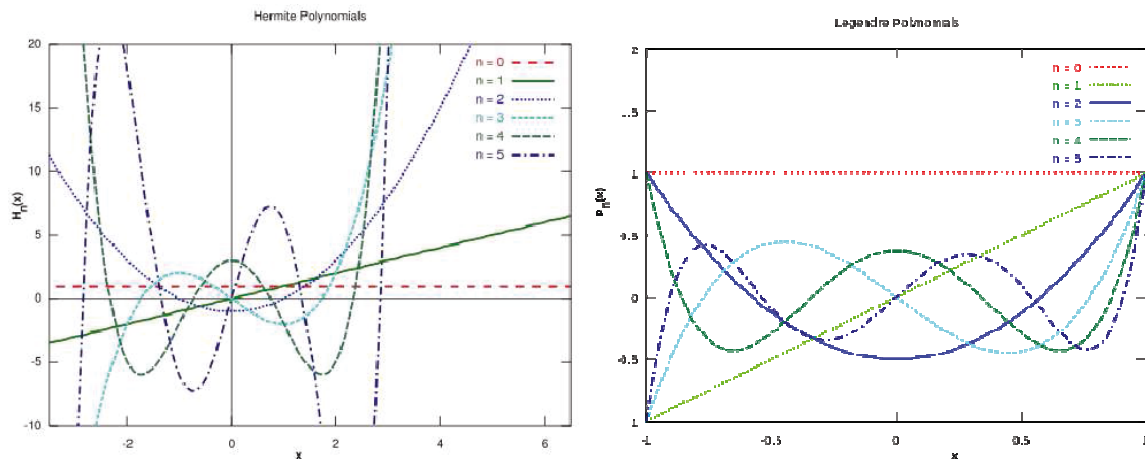
$$\langle \psi_\alpha, \psi_\beta \rangle = E[\psi_\alpha(X) \psi_\beta(X)] = \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{III.68})$$

On ordonne les éléments de la base par ordre de degré polynomial total  $p$  croissant, en les numérotant de  $m = 0$  à l'infini. En pratique, il est nécessaire de ne conserver qu'un nombre fini de termes dans le développement par CP.

On réduit normalement la série de sorte à ne conserver que les polynômes  $\psi_m$  de la base dont le degré total est inférieur ou égal à  $p$  donné. On obtient ainsi une série tronquée comprenant  $P$  termes

$$Y \approx f^{CP}(X) = \sum_{m=0}^{P-1} a_m \psi_m(X) \quad (\text{III.69})$$

Où l'on démontre que  $(P-1) = (n+p)! / (n! \times p!)$  ;  $n$  est le nombre de variable d'entrée ;  $p$  est le degré du polynôme, dont l'incidence est illustrée sur la Figure III.25.



### III.5.2.2. Exemple de constitution d'un chaos

Considérons la réponse aléatoire  $Y$  d'un modèle mécanique  $Y = f(X_1, X_2, X_3)$  dépendant de trois variables aléatoires normales  $X_1, X_2$  et  $X_3$ , de moyennes et d'écart types respectifs  $\mu_1, \mu_2, \mu_3$  et  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ .

Par transformations linéaires pour les polynôme Hermite  $\xi_i = (X_i - \mu_i)/\sigma_i$ , on peut exprimer la réponse en fonction de trois variables aléatoires centrées réduites, soit  $Y = f^{CP}(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ .

Supposons que l'on développe la réponse aléatoire  $Y$  sur une base de chaos polynomial d'Hermite avec un degré maximal  $p = 2$ .

L'approximation de la réponse du modèle s'écrit sous la forme :

$$Y \approx f^{CP}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \equiv \sum_{m=0}^9 a_m \psi_m(\xi) \quad (\text{III.70})$$

Où les coefficients  $\{a_m, m = 0, \dots, 9\}$  sont à déterminer. Les polynômes multivariés  $\psi_m$  sont les produits des polynômes univariés  $\{\psi_m, m = 0, \dots, 9\}$  de degré inférieur ou égal à  $p$ , soit  $\psi_0(\xi)=1$ ,  $\psi_1(\xi)=\xi$  et  $\psi_2(\xi)=\xi^2-1$ . Les polynômes multivariés sont indiqués dans le Tableau III.6.

$m$	$\alpha_m$	$\psi_m$	$m$	$\alpha_m$	$\psi_m$
0	[0,0,0]	$\psi_0 = 1$	6	[0,1,1]	$\psi_6 = \xi_2 \xi_3$
1	[1,0,0]	$\psi_1 = \xi_1$	7	[2,0,0]	$\psi_7 = \xi_1^2 - 1$
2	[0,1,0]	$\psi_2 = \xi_2$	8	[0,2,0]	$\psi_8 = \xi_2^2 - 1$
3	[0,0,1]	$\psi_3 = \xi_3$	9	[0,0,2]	$\psi_9 = \xi_3^2 - 1$
4	[1,1,0]	$\psi_4 = \xi_1 \xi_2$			
5	[1,0,1]	$\psi_5 = \xi_1 \xi_3$			

Tableau III.6. Exemple de construction d'un chaos polynomial de degré 2 à 3 variables

### III.5.2.3. Calcul des coefficients du chaos polynomial

Les méthodes dites non intrusives, parce qu'elles ne recourent pas à la modification de la formulation du modèle, ont été développées depuis quelques années [SUDRET et al., 2012]. Parmi les méthodes non intrusives, on distingue la méthode par projection [MÂTRE et al., 2001], [BAROTH, 2005] et la méthode par régression [BERVEILLER, 2005], [BERVEILLER et al., 2006] pour déterminer les coefficients du chaos.

#### a. Méthode de projection

Cette méthode s'appuie sur l'orthogonalité de la base polynomiale, qui permet d'écrire pour le  $m^{\text{ème}}$  élément du développement du chaos :

$$\alpha_m E[\psi_m^2] = E[f \psi_m] \quad (\text{III.71})$$

L'espérance  $E[\psi_m^2]$  étant connue et indépendante des valeurs prises par les variables, la détermination de  $\alpha_m$  revient au calcul d'une intégrale [SUDRET et al., 2012] :

$$\alpha_m = \frac{E[f \psi_m]}{E[\psi_m^2]} = \frac{1}{E[\psi_m^2]} \int_{D_\xi} f(\xi) \psi_m(\xi) f_\Xi(\xi) d\xi \quad (\text{III.72})$$

Où  $f_\Xi$  est la densité des variables de définition des polynômes utilisés (loi uniforme sur  $[-1,1]$  pour les polynômes de Legendre ou loi normale centrée réduite pour les polynômes d'Hermite) et  $D_\xi$  est le domaine de définition de ces variables. En pratique, on estime l'intégrale au moyen de techniques d'intégration numérique comme les simulations de Monte Carlo ou les quadratures de Gauss.

#### b. Méthodes de régression

Il s'agit dans cette méthode de déterminer le jeu de coefficients qui minimise la somme des carrés des écarts entre un ensemble de  $r$  réalisations du modèle  $f$ , calculées pour les points du plan d'expérience à constituer, et de ses approximations par le développement en chaos polynomial [SUDRET et al., 2012] :

$$\hat{a} = \arg \min \sum_{k=1}^r (a^T \psi(\xi_{(k)}) - f(\xi_{(k)}))^2 \quad (\text{III.73})$$

Où  $a = \{a_0, a_1, \dots, a_m\}^T$  et  $\psi(\xi_{(k)}) = \{\psi_0(\xi_{(k)}), \dots, \psi_{p-1}(\xi_{(k)})\}^T$ . La solution s'écrit sous la forme analytique similaire à (III.63) :

$$\hat{a} = (Z^T Z)^{-1} Z^T Y \quad (\text{III.74})$$

Où  $Z$  est la matrice dont les lignes sont les polynômes multivariés

$$Z = \begin{pmatrix} \psi_0(\xi_{(1)}) & \dots & \psi_{p-1}(\xi_{(1)}) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_0(\xi_{(r)}) & \dots & \psi_{p-1}(\xi_{(r)}) \end{pmatrix} \quad (\text{III.75})$$

$Y$  est le vecteur des réalisations de  $f$ ,  $Y = \{Y_{(1)}, \dots, Y_{(r)}\}^T$ . L'objectif étant ici de construire une approximation du modèle mécanique  $f$ , au lieu de la fonction d'état limite comme c'est le cas dans la méthode des surfaces de réponse, le plan d'expérience doit être réparti au mieux sur l'ensemble du domaine des variables  $\xi$  et, par transformation, des variables  $X$ , par exemple grâce à un tirage par hypercube latin. De même, il n'est pas recommandé ici de pondérer les points du plan d'expérience puisqu'aucune zone du domaine ne doit être a priori privilégiée.

#### III.5.2.4. Choix de la méthode de calcul

La méthode de projection donne la meilleure approximation des coefficients  $a_m$  indépendamment du degré  $p$  maximal retenu pour les polynômes. Si la méthode de Monte Carlo est utilisée pour le calcul de l'intégrale dans (III.72), un seul échantillon doit ainsi permettre d'estimer tous les coefficients, quel que soit  $p$ . Toutefois, les erreurs introduites dans le calcul des coefficients sont supérieures à celles résultant du calcul par la méthode de régression, pour un même degré  $p$  et une même dimension  $r$  de l'échantillonnage [SUDRET et al, 2005]. Au contraire, la méthode de régression sélectionne le meilleur ensemble de coefficients pour un degré donné  $p$ , mais la dimension de l'échantillonnage en dépend ( $r$  doit être 2 à 3 fois plus important que  $P-1$ ).

Les travaux de [BERVEILLER, 2005] et [BERVEILLER et al, 2006] ont montré que la méthode de régression s'avère particulièrement efficace pour calculer les coefficients du développement. Cette méthode permet également de définir des estimateurs d'erreur a posteriori et une méthodologie de construction adaptative de la base du chaos polynomial [BLATMAN, 2009]. Elle présente ainsi également un caractère adaptatif en ce sens que le plan d'expérience peut toujours être enrichi si les estimateurs d'erreur ne sont pas satisfaisants, sans perdre le bénéfice des calculs précédents de la réponse du modèle  $f$  [RIAHI, 2013].

#### III.5.2.5. Estimation de l'erreur

L'erreur d'approximation pour un développement par chaos polynomial est quantifiée par le coefficient de détermination ajusté  $R^2$  selon l'expression (III.64), où  $f^{CP}(\xi_{(k)})$  remplace  $H(U_{(k)})$ . Comme dans le cas des surfaces de réponse, la proximité à 1 de  $R^2$  indique une bonne qualité de l'approximation offerte par le développement en chaos, mais peut aussi correspondre à une interpolation et non à une régression, dans le cas extrême où  $r=P$ . La qualité d'extrapolation du développement par chaos polynomial en dehors du domaine d'ajustement doit toujours être questionnée.

La Figure III.26 résume les étapes suivies pour la construction du développement en chaos polynomial.

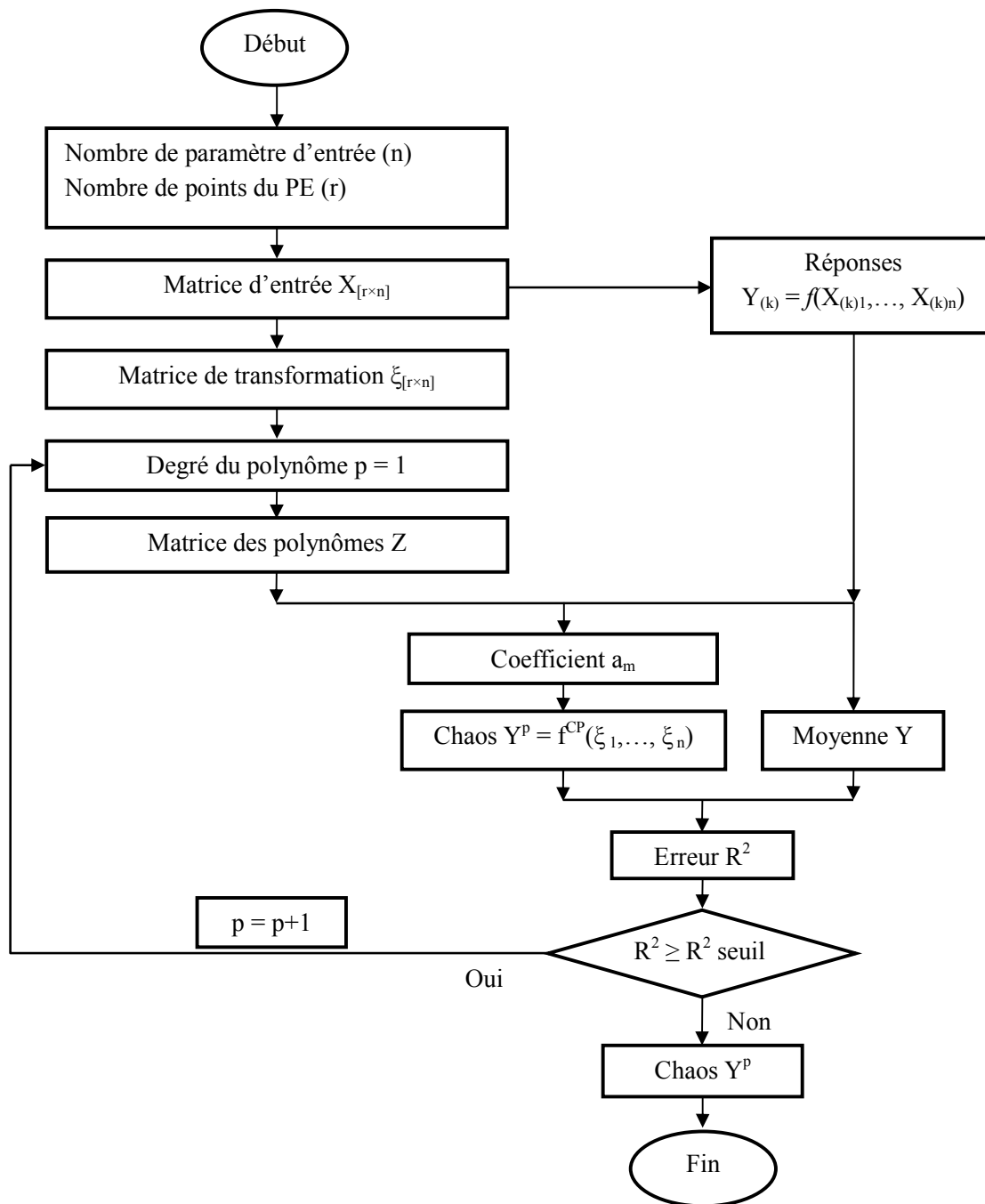


Figure III.26. Organigramme de détermination d'un chaos polynômial

### III.6. Durabilité en contexte incertain

Les phénomènes qui concernent la durabilité des structures en béton sont pour la plupart incertains. En effet, d'une part ils sont imparfaitement décrits puis modélisés, et d'autre part les grandeurs qui les caractérisent sont elles-mêmes incertaines. Il convient donc d'aborder la durabilité des ouvrages



comme leur intégrité structurale, c'est-à-dire en tenant compte des incertitudes qui en rendent complexe la prévision et nécessitent le recours aux méthodes stochastiques.

### **III.6.1. Origine des incertitudes**

Les mécanismes de dégradation des structures en béton armé dépendent des caractéristiques du matériau, de l'environnement et du chargement. Ces facteurs présentent des sources d'incertitudes :

- Les conditions d'environnement (humidité extérieure, température, pression du dioxyde de carbone), qui sont à l'origine des différents chargements appliqués sur une structure, du point de vue de sa durabilité. Les tendances moyennes des conditions d'environnement sont généralement assez bien connues et peuvent être approchées sur la base d'enregistrements suffisamment longs de stations météorologiques, notamment par des fonctions trigonométriques à période annuelle, saisonnière ou journalière. L'incertitude sur les tendances n'est pas pour autant négligeable. De même les écarts par rapport aux tendances moyennes sont quant à eux d'autant plus importants que les périodes considérées sont courtes ;
- La donnée géométrique principale vis-à-vis de la durabilité est l'épaisseur d'enrobage. Cette épaisseur est variable d'un point à un autre de la structure, en raison d'écarts aléatoires par rapport à la prescription lors de la réalisation de l'ouvrage ;
- Les grandeurs caractéristiques du matériau (porosité à l'eau, perméabilité à l'eau, composants des hydrates, dimension des produits hydratés,...) et les grandeurs physico-chimiques (coefficient de diffusion de CO<sub>2</sub> dans l'air, coefficient de viscosité dynamique de l'eau, concentration initiale des ions calcium, volume molaire des composants, ...) ne sont connus qu'avec une certaine incertitude. Le caractère aléatoire de ces paramètres est lié à l'hétérogénéité naturelle du matériau, aux défauts de mise en œuvre aux conditions de fabrication, et est éventuellement accentué par l'acquisition de données expérimentales.

Les incertitudes relatives à la modélisation des mécanismes (hypothèses simplificatrices, idéalisation des phénomènes, méthode numérique inappropriée) s'ajoutent aux précédentes, de mêmes que les incertitudes statistiques résultant de l'utilisation de modèles probabilistes simplifiés, ou de la supposition d'une indépendance entre les variables aléatoires. Elles peuvent aussi résulter de l'utilisation d'une taille limitée des échantillons dans l'estimation des paramètres statistiques ou des modèles probabilistes des variables aléatoires du modèle [MELCHERS, 1999].

Enfin, l'incertitude de décision associée à la définition même de l'état limite visée, ou de la probabilité de défaillance acceptable contribue au contexte incertain [MELCHERS, 1999].

### **III.6.2. Cadre normatif**

La durabilité des structures en béton est aujourd'hui une préoccupation majeure. La prise en compte de la durabilité dès la formulation et la mise en œuvre du béton est aujourd'hui couverte par le cadre normatif.

La norme NF EN 206-1 est une norme de produit qui s'applique à la fabrication du béton de structure coulé en place ou préfabriqué pour le bâtiment et le génie civil, qu'il soit béton prêt à l'emploi (BPE), fabriqué dans une usine de production de produits préfabriqués, ou fabriqué sur chantier. Les exigences de durabilité du béton doivent permettre de garantir une durée de vie présumée des structures d'au moins 50 ans, dans des conditions d'entretien optimales. Il est donc important de définir dans les marchés les conditions environnementales des structures avec toutes les précisions utiles. Les spécifications pour permettre à la structure de résister aux agressions de l'environnement sont préconisées en termes de propriétés et de valeurs limites de composition du béton, en fonction de la classe d'exposition.

L'Eurocode 2 (NF EN 1992-1-1) prescrit des épaisseurs d'enrobage minimales en fonction de la classe d'exposition, de la durée de service attendue, de la classe de résistance du béton, de la nature des armatures et des conditions d'exécution tant sur le béton que sur le positionnement des armatures. Le fait d'imposer un écart additionnel sur l'enrobage nominal lié à la qualité d'exécution, et donc aux incertitudes qui affectent les paramètres de dimensionnement de l'enrobage, permet d'apparenter la démarche de prescription de l'enrobage à une approche semi-probabiliste. L'Eurocode permet par ailleurs, de manière implicite, d'utiliser une approche probabiliste pour le dimensionnement de l'enrobage qu'il n'écarte pas des autres problématiques de dimensionnement, purement mécaniques, pour lesquelles l'approche est autorisée.

Les travaux entrepris au niveau européen [DURACRETE 2000], [FIB 2006], [FIB 2012] ont quant à eux abouti à des recommandations définissant clairement le cadre dans lequel les approches semi-probabilistes ou probabilistes peuvent être déployées pour garantir une fiabilité cible vis-à-vis de la durabilité.

### *III.7. Conclusion*

Le présent chapitre a permis de développer des éléments de calcul stochastique qui seront par la suite appliqués dans le cadre de notre problématique de carbonatation des structures en béton.

Une des difficultés principales dans la résolution des problèmes de calcul stochastique est la dimension stochastique, définie par le nombre de variables aléatoires utilisées dans un modèle. En effet, plus la dimension stochastique est élevée, plus le temps de calcul pour déterminer les grandeurs d'intérêt est long. Avec un modèle contenant plus de trente paramètres incertains, et dont le temps de calcul est significatif, le problème de calcul stochastique devient ardu. Il convient donc dans un premier temps d'identifier la dimension stochastique efficace, représentant le nombre de paramètres importants du modèle, avant d'entamer le calcul stochastique proprement dit. La dimension efficace, qui peut être très inférieure à la quantité de variables d'entrée, est déterminée à partir d'une hiérarchisation de ces variables s'appuyant sur une analyse de sensibilité. A cette fin, nous avons présenté la méthode de criblage de Morris, en montrant sur des exemples comment interagissent la forme du modèle et le nombre de variables d'entrée dans le choix du nombre de trajectoires à considérer. Nous avons également utilisé une mesure de sensibilité globale permettant d'étendre les résultats de la méthode à une première hiérarchisation des variables. Le complément nécessaire à l'application de la méthode de Morris nous a semblé être l'estimation des indices de Sobol, en particulier les indices de premier ordre et les indices totaux. Ces derniers constituent en effet des critères rationnels de hiérarchisation des variables d'entrée, dont certaines peuvent être déjà préalablement écartées au regard des résultats de la méthode de Morris. Nous avons montré sur plusieurs exemples qu'une alternative de calcul des indices proposée par [JACQUES, 2005], moins coûteuse numériquement, pouvait être pertinente.

Les méthodes classiques de fiabilité mécanique des structures, qui sont les éléments de calcul stochastique proprement dits, ont été rappelées. Elles sont directement transposables à l'estimation de la fiabilité à l'égard de la durabilité. Pour pouvoir appliquer ces méthodes avec efficacité, et pour contourner la difficulté de les utiliser en couplage direct avec des modèles numériques lourds, peuvent être employés des modèles de substitution à la place des modèles réels. Ces derniers sont généralement construits sous forme de surfaces de réponse polynomiales ou de développement en chaos polynomiaux. Nous avons donc rappelé comment sont construits ces modèles de substitution. Comme pour toute autre approximation n'étant pas basée sur des modèles physiques, mais seulement sur des considérations mathématiques, se pose la question de la représentativité des modèles de substitution en dehors du domaine pour lequel ils sont calibrés. La dernière partie du chapitre positionne la problématique de la durabilité en contexte incertain.

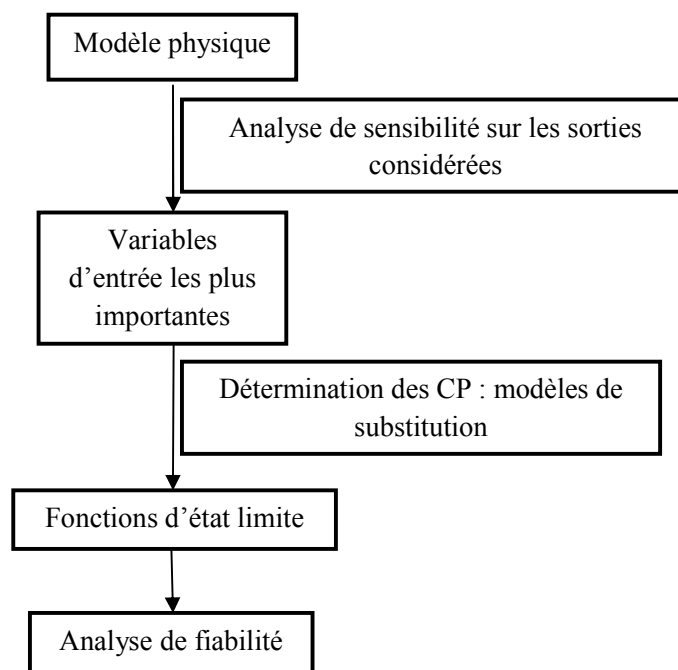
---

**CHAPITRE IV – APPLICATION DES METHODES STOCHASTIQUES AU MODELE DE CARBONATATION**

---

## IV.1. Introduction

Les deux chapitres précédents ont traité de l'établissement du modèle de carbonatation et des méthodes d'analyses stochastiques. Le présent chapitre vise à déployer la méthodologie d'ensemble de l'approche telle que présentée dans la Figure IV.1.



**Figure I ;V.1. Organigramme pour l'analyse de fiabilité**

Les étapes de la démarche sont classiques : la formulation du problème probabiliste, la réduction de la dimension stochastique, la construction d'un modèle de substitution et enfin l'estimation de la fiabilité. Cette dernière sera exprimée sous forme d'indice de fiabilité, ce qui permettra de connaître directement l'incidence des variables aléatoires sur la fiabilité, et de la comparer avec la hiérarchisation offerte par l'analyse de sensibilité des sorties du modèle de carbonatation. Un autre intérêt de l'estimation par l'indice de fiabilité est qu'il constitue une mesure de fiabilité reconnue par les codes de conception et les recommandations. Il est donc possible de savoir, pour un objectif particulier de fiabilité à l'égard de la durabilité, si le dimensionnement proposé est adéquat. Il est également possible, pour un béton et un environnement donnés, d'optimiser le dimensionnement de l'enrobage. Afin d'illustrer comment les conditions climatiques peuvent modifier le niveau de fiabilité, les applications envisagées concernent les villes de Toulouse et de Marseille, dont les situations météorologiques sont assez contrastées.

## IV.2. Définition du problème stochastique

Le problème stochastique découle de la performance de durabilité attendue des structures en béton soumises à la carbonatation. Il s'agit de maintenir à un niveau acceptable le risque d'amorçage de la corrosion, en jouant principalement sur la probabilité d'occurrence de l'événement. C'est donc cette dernière que l'on va estimer. L'identification des variables aléatoires qui constituent la dimension stochastique est bien sûr partie intégrante du problème.

### IV.2.1. Formulation de la probabilité d'amorçage de la corrosion

La dépassement des armatures est une condition préalable au démarrage de la corrosion. L'hypothèse souvent admise que l'initiation de la corrosion survient dès lors que l'enrobage est carbonaté est conservatrice. Il est en effet nécessaire que les conditions favorables à la corrosion soit réellement présentes et réunies suffisamment longtemps pour que celle-ci s'enclenche de façon définitive, expliquant l'observation de la période dite d'incubation pendant laquelle l'activation de la corrosion reste faible. Les deux facteurs favorisant la corrosion, après dépassement de l'acier, sont l'humidité du béton au voisinage des armatures et l'apport d'oxygène sur le site réactif cathodique. Le modèle que nous avons développé ne permet pas de déterminer la concentration en dioxygène dissout, qui aurait été utile si le développement même de la corrosion avait été visé, mais seulement la concentration des hydrates consommés par la carbonatation et le taux de saturation du béton. Cependant, s'agissant des conditions propices à l'amorçage de la corrosion, et non à sa propagation, pour une structure exposée à l'atmosphère, on peut imaginer qu'une certaine plage de taux de saturation corresponde simultanément à une humidité suffisante du matériau et à la possibilité pour le dioxygène de diffuser aisément dans la porosité non saturée.

Ainsi, nous proposons de considérer les deux conditions suivantes comme permettant le démarrage de la corrosion : l'atteinte de l'enrobage  $c$  par la profondeur de carbonatation  $X_c$  et l'atteinte d'une durée minimale  $t_{seuil}$  par le temps cumulé  $t_{corr}$  pendant lequel les conditions d'humidité favorables à la corrosion ont été réunies.

Dans ces conditions la probabilité de démarrage de la corrosion s'écrit :

$$P_f = P(t_{corr} > t_{seuil} \cap X_c \geq c) = P(t_{corr} > t_{seuil} | X_c \geq c) P(X_c \geq c) \quad (IV.1)$$

Afin de faciliter le calcul de  $P_f$ , les quantités  $t_{corr}$  et  $X_c$  ont été déterminées grâce aux modèles de substitution, présentés dans la partie 4 de ce chapitre.

## IV.2.2. Définition des variables d'entrée

### IV.2.2.1. Paramètres matériau

On s'intéresse dans l'étude à des bétons constitués à partir de ciment CEM I avec un rapport E/C variant de 0,3 à 0,7. Les phases hydratées principales de la pâte de ciment sont supposées être : la portlandite (*CH*), les silicates de calcium hydratés (*CSH*), le monosulfoaluminate (*AFm*), le trisulfoaluminate (*AFt*), les hexa-hydrates (*Hexa*). Notons que d'un point de vue thermodynamique ne peuvent coexister qu'une des deux phases contenant des sulfates (*AFm* ou *AFt*) [BARY, 2005]. Nous avons considéré la phase *AFm*. Compte tenu d'une composition théorique du béton, avec pour chaque constituant une plage de variation donnée, on détermine la fraction volumique de pâte correspondante (volume de la pâte anhydre) et la porosité théorique dans le matériau durci. Ces informations sont résumées dans le Tableau VI.1.

Ciment (kg/m <sup>3</sup> )	[320, 380]
Eau (kg/m <sup>3</sup> )	[114, 224]
Sable 0/4 (kg/m <sup>3</sup> )	[800, 850]
Gravillon 5/12,5 (kg/m <sup>3</sup> )	[950, 1000]
Masse volumique béton	[2300, 2450]
Volume théorique des granulats (m <sup>3</sup> )	[0,618, 0,673]
Volume théorique de la pâte anhydre (m <sup>3</sup> )	[0,21, 0,35]
Porosité théorique	[0,06, 0,18]

Tableau VI.1. Caractéristiques principales des bétons CEM I

En fixant un rapport E/C pour le matériau, on peut calculer le nombre de moles des espèces de base pour un litre de pâte de ciment en fonction des quantités d'anhydres. On obtient la composition chimique indiquée dans le Tableau IV.2.

<i>CaO</i>	<i>SiO<sub>2</sub></i>	<i>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>+Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub></i>	<i>SO<sub>3</sub></i>	<i>H<sub>2</sub>O</i>	<i>Na</i>	<i>K</i>
[12,40, 19,43]	[2,38, 3,73]	[1,64, 2,58]	[0,44, 0,69]	[0,97, 1,51]	[0,029, 0,047]	[0,35, 0,55]

Tableau IV.2. Composition théorique d'un litre de pâte de ciment CEM I (mol/l)

A partir de cette composition chimique de pâte en mole par litre, on en déduit la composition (idéalisée) des hydrates principaux (mol/l) selon le système d'équations :

$$\begin{cases} AFm & = & SO_3 \\ Hexa & = & Al_2O_3 + Fe_2O_3 \\ CSH(C_a / S_i = 1,65) & = & SiO_2 \\ CH & = & CaO - 4 \times AFm - 3 \times Hexa - 1,65 \times CSH \end{cases} \quad (IV.2)$$

#### *IV.2.2.2. Variables aléatoires*

La mise en œuvre du modèle de carbonatation présenté au Chapitre II a été l'occasion d'en identifier les paramètres d'entrée. Parmi ceux jugés incertains et potentiellement influents sur la réponse du modèle, au nombre de 32, certains sont liés au matériau, dont la variation a été abordée ci-avant, d'autres aux conditions d'exposition et d'autres enfin constituent des coefficients physico-chimiques. Les informations disponibles sur les domaines de variabilité des paramètres ne sont pas toujours très riches. Dans le cadre d'une analyse de sensibilité, ces domaines doivent toutefois rester réalistes dans la mesure du possible. Dans le Tableau IV.3 sont portées les plages de variation retenues pour l'analyse de sensibilité.

### *IV.3. Réduction de la dimension stochastique : analyse de sensibilité*

Avec un modèle contenant 32 paramètres incertains, le problème de calcul stochastique devient très ardu. En effet, plus la dimension stochastique est élevée, plus le temps de calcul pour déterminer les grandeurs d'intérêt est long. C'est pourquoi, dans cette partie, nous proposons une stratégie de réduction de la dimension stochastique s'appuyant sur une analyse de sensibilité. La probabilité d'amorçage de la corrosion fait intervenir la profondeur carbonatée  $X_c$  et la durée cumulée  $t_{corr}$  de conditions d'humidité favorables à la corrosion. L'analyse de sensibilité est donc menée sur  $X_c$ , qui découle de l'exploitation du profil de portlandite, mais ne peut pas l'être directement sur  $t_{corr}$ , qui nécessite de connaître la variation annuelle du taux de saturation, une fois ce dernier stabilisé autour d'une valeur moyenne. C'est donc plutôt l'amplitude annuelle du taux de saturation qui doit faire l'objet d'une analyse de sensibilité.

#### **IV.3.1 Démarche globale**

Le recours aux seuls indices de Sobol permettrait de hiérarchiser les paramètres incertains et de figer ceux peu influents à leurs valeurs moyennes. Cependant ce choix conduirait à un coût de calcul important : en se basant sur une matrice de trajectoire minimale de 100 points, l'estimation des indices de Sobol totaux et de premier ordre requiert dans sa forme originale 316900 appels au modèle mécanique, soit environ 2640 heures de calcul, et dans sa forme alternative proposée par [JACQUES, 2005] 6500 appels au modèle mécanique, soit environ 54 heures de calcul. Comme il est possible que le nombre minimal de points soit plus important, il est préférable de scinder l'analyse de sensibilité en deux étapes. La première consiste à appliquer la méthode de criblage de Morris (demandant dans les mêmes conditions un nombre de 3300 appels au modèle mécanique), ce qui permet une première réduction de la dimension stochastique par élimination des paramètres les moins importants. La seconde vise à hiérarchiser, par les indices de Sobol totaux, les paramètres non éliminés par la méthode de criblage. A l'issue de cette



seconde étape, les paramètres jugés influents seront intégrés comme variables aléatoires dans la construction des modèles de substitution.

<i>N°</i>	<i>Variables</i>	<i>Unité</i>	<i>Moyenne</i>	<i>Minimum</i>	<i>Maximum</i>
1	$\phi_0$	-	0,18	0,10	0,26
2	$V_p$	-	0,25	0,21	0,35
3	$n_{CH,0}$	mol/m <sup>3</sup>	5760	1810	8060
4	$n_{CSH,0}$	mol/m <sup>3</sup>	4470	2510	6420
5	$n_{AFm,0}$	mol/m <sup>3</sup>	570	460	640
6	$n_{Hexa,0}$	mol/m <sup>3</sup>	290	60	550
7	$\rho_l$	kg/m <sup>3</sup>	998	948	1048
8	$p_0$	kg/m×s <sup>2</sup>	5,91×10 <sup>7</sup>	5,6145×10 <sup>7</sup>	6,2055×10 <sup>7</sup>
9	$b$	-	1,65	1,5675	1,7325
10	$V_{CaCO_3}$	m <sup>3</sup> /mol	36,9×10 <sup>-6</sup>	2,77×10 <sup>-5</sup>	4,61×10 <sup>-5</sup>
11	$V_{CH}$	m <sup>3</sup> /mol	33×10 <sup>-6</sup>	2,64×10 <sup>-5</sup>	3,96×10 <sup>-5</sup>
12	$V_{CSH}$	m <sup>3</sup> /mol	39×10 <sup>-6</sup>	2,73×10 <sup>-5</sup>	5,07×10 <sup>-5</sup>
13	$Ca_0$	mol/m <sup>3</sup>	22	16,5	27,5
14	$\alpha_{HYD}$	-	0,56	0,504	0,616
15	$D_{CO_2\_T_{ref}}$	m <sup>2</sup> /s	3,84×10 <sup>-5</sup>	3,46×10 <sup>-5</sup>	4,222×10 <sup>-5</sup>
16	$k_{H\_T_{ref}}$	-	23×10 <sup>-5</sup>	20,7×10 <sup>-5</sup>	25,3×10 <sup>-5</sup>
17	$\eta\_T_{ref}$	kg/m×s	0,001003	0,000903	0,001103
18	$Q_{p\_CO_2}$	m <sup>2</sup> ×kg/s <sup>2</sup> ×mol	39000	31200	46800
19	$Q_{p\_kCH}$	m <sup>2</sup> ×kg/s <sup>2</sup> ×mol	-40000	-48000	-32000
20	$Q_{p\_kH}$	m <sup>2</sup> ×kg/s <sup>2</sup> ×mol	19950	15960	23940
21	$Q_{p\_η}$	m <sup>2</sup> ×kg/s <sup>2</sup> ×mol	-15700	-18840	-12560
22	$p_{CO_2}$	Pa	35	29,75	40,25
23	$K^0$	m <sup>2</sup>	2,1×10 <sup>-22</sup>	1,47×10 <sup>-22</sup>	2,73×10 <sup>-22</sup>
24	$\lambda$	m	5×10 <sup>-7</sup>	3,75×10 <sup>-7</sup>	6,25×10 <sup>-7</sup>
25	$D_{Ca}$	m <sup>2</sup> /s	5×10 <sup>-13</sup>	3,75×10 <sup>-13</sup>	6,25×10 <sup>-13</sup>
26	$R_{p0}$	m	20×10 <sup>-6</sup>	10e×10 <sup>-6</sup>	50×10 <sup>-6</sup>
27	$\alpha_{CSH}$	-	4×10 <sup>-4</sup>	3.6×10 <sup>-4</sup>	4,4×10 <sup>-4</sup>
28	$H_{rini}$	-	0,94	0,89	0,98
29	$H_{rmoy}$	-	0,772	0,695	0,849
30	$T_{ini}$	°K	282,5	268,4	296,6
31	$T_{moy}$	°K	286	257,4	314,6
32	$\alpha_l$	-	427	341,6	512,4

Tableau IV.3. Variables d'entrées du modèle propose

### IV.3.2. Analyse de sensibilité pour la profondeur de carbonatation $X_c$

La profondeur de carbonatation à une échéance donnée est déterminée à partir du profil en profondeur de concentration résiduelle de portlandite. La profondeur de carbonatation est la profondeur pour laquelle la concentration résiduelle passe en deçà d'un certain seuil par rapport à la concentration initiale. Des résultats sont présentés pour des valeurs de ce seuil fixées à 60%, 70% ou 80%.

#### IV.3.2.1. Hiérarchisation des variables d'entrée par la méthode de Morris

##### a. Nombre de trajectoires

Comme précisé dans le Chapitre III, le nombre minimal de trajectoires ne peut pas être choisi a priori : il dépend à la fois du nombre de variables et de la non linéarité du modèle. L'incidence qualitative des variables d'entrée est indiquée par les valeurs de la moyenne absolue  $\mu_i^*$  et de l'écart-type  $\sigma_i$  des effets élémentaires. L'échantillonnage aléatoire de plusieurs séries d'un même nombre de trajectoires ne fait pas nécessairement apparaître une incidence identique pour toutes les séries. Comme on peut le voir sur la Figure IV.2, où les résultats de 4 séries de 60 trajectoires ont été portés, certaines variables montrent une incidence forte ( $X_1, X_3, X_{18}, X_{26}, X_{28}, X_{31}$ ) ou faible quelle que soit la série, tandis que pour d'autres, l'effet n'est pas clairement établi ( $X_2, X_{20}, X_{22}, X_{29}, X_{30}$ ).

Le calcul de la sensibilité globale  $G_i^*$  (équation III.15) de chaque variable apporte une richesse complémentaire à l'analyse qualitative et permet de hiérarchiser les variables d'entrée. En classant les variables par ordre de sensibilité globale décroissante et en calculant le cumul des sensibilités (dont la somme vaut 1), on obtient une hiérarchisation des paramètres qui croisent les résultats qualitatifs. Ces derniers sont également affinés si l'on considère une valeur seuil du cumul des sensibilités au-delà de laquelle l'apport d'une variable n'est plus significatif : on peut ainsi qualifier les variables comme ayant une forte influence, une faible influence ou une influence indéfinie (voir Figure IV.3). Le nombre minimal de trajectoires est celui au-delà duquel l'ordre des paramètres ayant une influence forte, et à moindre titre ceux ayant une influence indéfinie, n'est plus modifié.

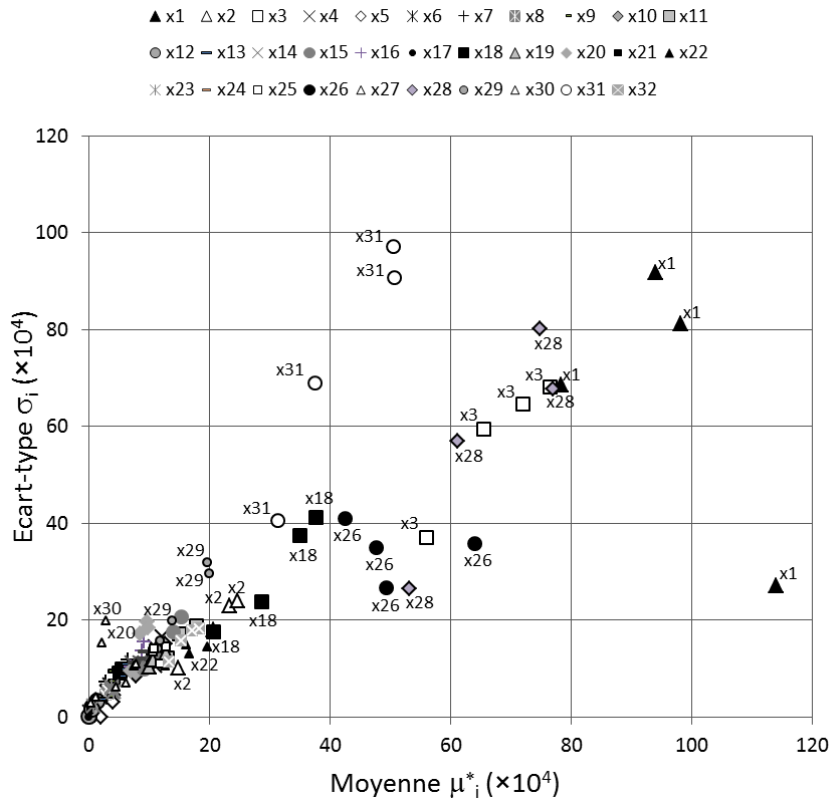


Figure IV.2. Indicateurs de Morris pour  $X_c$  ( $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,7$  ; après 50 ans d'exposition)

Comme on peut le constater dans le Tableau IV.4, le classement des paramètres est d'autant moins modifié entre plusieurs séries pour un même nombre de trajectoires, que le nombre de trajectoires augmente. In fine, on peut proposer d'utiliser 60 trajectoires pour hiérarchiser les paramètres d'entrée pour  $X_c$ . Les résultats obtenus pour d'autres configurations (valeur de  $n_{CH,i}/n_{CH,0}$ , durée d'exposition) sont présentés en Annexe B. Ils montrent que ce nombre de trajectoires reste satisfaisant.

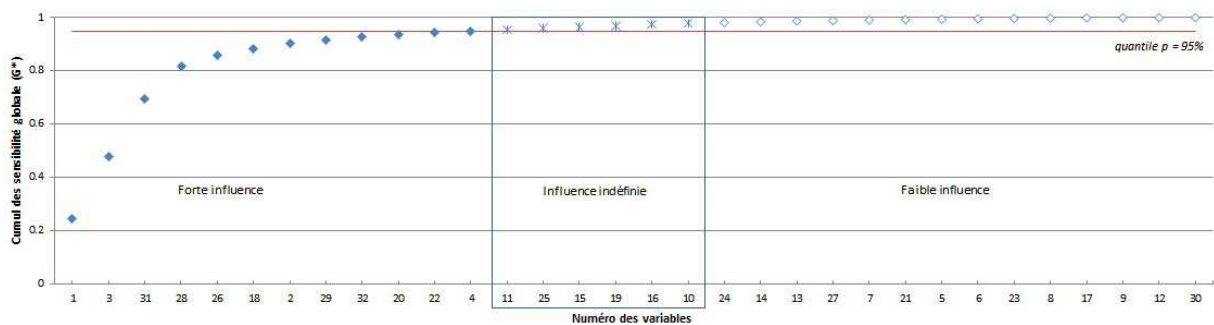


Figure IV.3. Sensibilités globales cumulées pour  $X_c$  ( $n_{CH,i}/n_{CH,0} = 0,7$  après 50 ans d'exposition)

		Hiérarchisation des paramètres d'entrées du modèle									
Nombre de trajectoires	20				40				60	80	
Caractéristique des paramètres	Série 1	Série 2	Série3	Série 4	Série 1	Série 2	Série3	Série 4	Série 1	Série 1	
<i>Forte influence</i>	26	26	26	26	26	26	26	26	1	1	
	1	1	1	1	1	1	1	1	3	3	
	3	3	3	3	3	3	3	3	31	31	
	11	11	11	11	11	25	11	11	28	28	
	25	25	10	25	25	11	25	25	26	26	
	22	2	25	22	22	22	2	22	18	18	
	10	15	18	10	10	10	22	18	2	2	
	32	22	9	2	19	24	32	23	29	29	
	2	10	22	16	14	2	15	4	32	32	
	17	13	2	17	32	4	10	24	20	20	
19	7	32	8	23	32	28	2	22	22		
23	<b>14</b>	17	<b>20</b>	2	15	18	10	4	4		
7	<b>9</b>	13	<b>18</b>	4	18	<b>16</b>	<b>20</b>	<b>11</b>	<b>11</b>		
<b>15</b>	<b>21</b>	14	<b>15</b>	<b>16</b>	19	<b>17</b>	<b>7</b>	<b>25</b>	<b>25</b>		
<b>13</b>	<b>4</b>	15	<b>27</b>	<b>13</b>	21	<b>19</b>	<b>9</b>	<b>15</b>	<b>15</b>		
<b>27</b>	<b>27</b>	7	<b>23</b>	<b>8</b>	<b>16</b>	<b>7</b>	<b>16</b>	<b>19</b>	<b>19</b>		
<b>24</b>	32	<b>8</b>	13	<b>7</b>	<b>14</b>	<b>14</b>	<b>28</b>	<b>16</b>	<b>16</b>		
16	16	<b>19</b>	7	18	<b>28</b>	20	27	<b>10</b>	<b>10</b>		
8	19	<b>5</b>	14	9	<b>23</b>	21	17	24	24		
14	18	4	32	20	<b>20</b>	9	19	14	14		
4	24	21	4	15	27	27	32	13	13		
18	8	23	5	17	7	8	15	27	5		
28	23	24	28	24	8	24	13	7	7		
5	20	28	24	27	13	5	8	21	27		
21	17	16	9	28	5	4	21	5	23		
9	28	20	6	12	17	13	5	6	6		
20	5	27	19	21	9	6	14	23	17		
6	29	30	21	5	12	12	12	8	21		
30	12	31	31	30	6	23	6	17	8		
12	6	6	29	6	29	31	29	9	12		
29	30	12	12	29	30	30	31	12	9		
31	31	29	30	31	31	29	30	30	30		

Tableau IV.4. Hiérarchisation des paramètres d'entrée pour  $X_c$  en fonction du nombre de trajectoires ( $n_{CH,i}/n_{CH,0} = 0,7$  après 50 ans d'exposition)

b. Résultats

La méthode de Morris a été appliquée après 10, 35 et 50 ans de carbonatation atmosphérique (les résultats sont présentés en Annexe C).

Les résultats pour tous les seuils  $n_{CH,i}/n_{CH,0}$  sont résumés dans le Tableau IV.5. On peut noter que l'incidence de certaines variables change en fonction des échéances de carbonatation. C'est le cas notamment de la concentration initiale en gel de  $CSH$   $n_{CSH0}$ , dont l'incidence, faible à une échéance de 10 ans, devient forte à 50 ans. On peut attribuer ce résultat au décalage de cinétique de la carbonatation des gels de  $CSH$  par rapport à celle de la portlandite. Nous proposons finalement de conserver les 18 paramètres les plus influents comme variables d'entrée pour l'analyse de sensibilité globale par la

méthode de Sobol. Les 14 autres variables deviennent déterministes et ont été fixées à leurs valeurs moyennes.

#### IV.3.2.2. Hiérarchisation des variables d'entrée par la méthode de Sobol

L'estimation des indices de sensibilité totaux de Sobol par simulations de Monte Carlo est basée sur la méthode alternative proposée par [JACQUES, 2005].

##### a. Nombre de points

Selon le même principe que pour la méthode de Morris, le nombre minimal de points pour une trajectoire (une série de calcul) est celui au-delà duquel la hiérarchisation des variables d'entrée ne change plus avec la série de calculs, et les indices obtenus avec différentes séries pour une même variable d'entrée restent identiquement positionnés par rapport à l'indice seuil choisi, que nous avons fixé à 5%. Les indices de Sobol ont été estimés pour 5 séries de 60 à 300 points. On peut constater sur la Figure IV.4 qu'un nombre de 60 points est nettement insuffisant. Pour la variable  $X_{26}$  par exemple l'indice total passe de 0,7% pour la série 4 à 28% pour la série 2. De même, pour plusieurs variables, l'indice passe d'une valeur inférieure au seuil à une valeur supérieure à ce dernier, ce qui ne permet pas de statuer quant à l'incidence de la variable sur la variance de la réponse. La figure IV.5 montre au contraire qu'un nombre de 240 points permet de stabiliser les résultats de façon satisfaisante pour toutes les séries, mis à part les résultats de la série 4 pour les variables  $X_3$  et  $X_{31}$ .

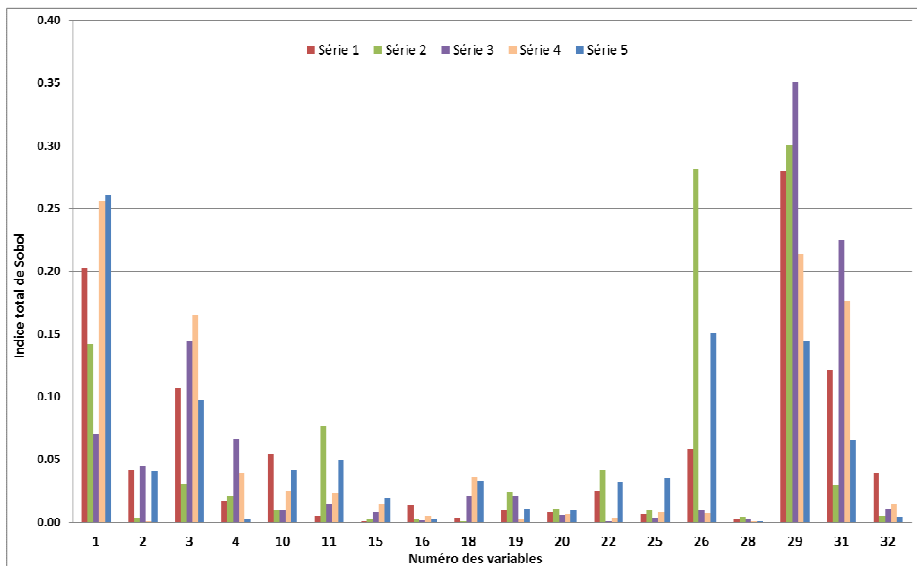


Figure IV.4. Indice de Sobol total pour 60 points ( $n_{CH,t}/n_{CH,0} = 0,7$  après 50 ans d'exposition)

<b>Hierarchisation des variables d'entrée par la méthode de Morris</b>											
	$T_{cal}$ (ans)	10			35			50			
	$n_{CH,i} / n_{CH,0}$	0,6	0,7	0,8	0,6	0,7	0,8	0,6	0,7	0,8	
N°	Variables										Variables retenues
1	$\phi_0$	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	✓
2	$V_P$	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	✓
3	$n_{CH,0}$	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	✓
4	$n_{CSH,0}$	-	-	X	X	X	X	X	◇	◇	✓
5	$n_{AFm,0}$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
6	$n_{Hexa,0}$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
7	$\rho_l$	-	-	X	-	X	X	-	-	-	
8	$p_0$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
9	$b$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
10	$V_{CaCO_3}$	X	X	X	X	X	X	X	X	X	✓
11	$V_{CH}$	◇	◇	X	◇	◇	X	◇	X	X	✓
12	$V_{CSH}$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
13	$Ca_0$	-	-	-	-	X	-	-	X	-	
14	$\alpha_{HYD}$	-	-	X	X	X	X	X	X	X	
15	$D_{CO_2} T_{ref}$	X	X	◇	◇	◇	◇	◇	X	◇	✓
16	$k_H T_{ref}$	X	◇	X	X	X	X	X	X	X	✓
17	$\eta T_{ref}$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
18	$Q_{p\_CO_2}$	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	✓
19	$Q_{p\_kCH}$	X	X	◇	◇	X	X	X	X	◇	✓
20	$Q_{p\_kH}$	X	X	◇	X	◇	X	◇	◇	X	✓
21	$Q_{p\_n}$	-	-	-	-	X	-	-	-	-	
22	$p_{CO_2}$	◇	◇	◇	◇	X	◇	◇	◇	◇	✓
23	$K^0$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
24	$\lambda$	X	X	X	X	X	X	X	X	X	
25	$D_{Ca}$	◇	◇	◇	X	X	X	X	X	◇	✓
26	$R_{p0}$	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	✓
27	$\alpha_{CSH}$	-	-	X	X	X	-	-	X	-	
28	$H_{rini}$	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	✓
29	$H_{moy}$	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	✓
30	$T_{ini}$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
31	$T_{moy}$	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	✓
32	$a_1$	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	◇	✓
		◇	Forte influence								
		X	Influence indéfinie								
		-	Faible influence								

Tableau IV.5. Ensemble des résultats de la méthode de Morris

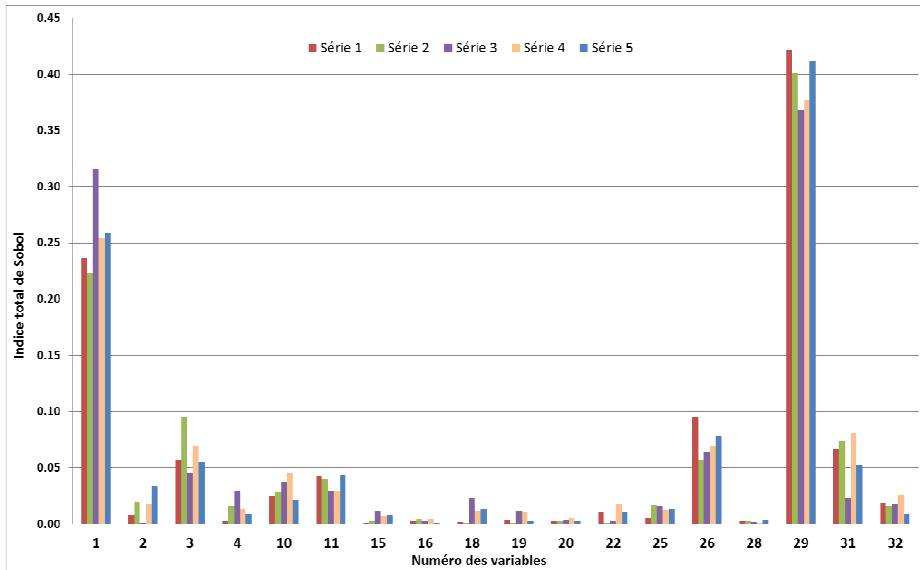


Figure IV.5. Indice de Sobol total pour 240 points ( $n_{CH,i}/n_{CH,0} = 0,7$  après 50 ans d'exposition)

Les indices de Sobol totaux moyennés sur 5 séries sont portés sur la Figure IV.6. Ils permettent de retenir  $X_{29}$ ,  $X_1$ ,  $X_{26}$ ,  $X_{31}$ ,  $X_3$ .

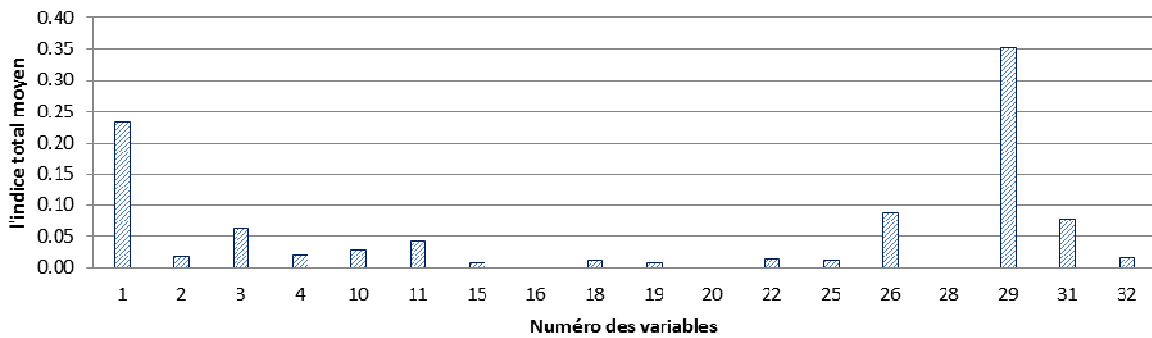


Figure IV.6 Indice de Sobol total moyen pour 5 séries de 240 points ( $n_{CH,i}/n_{CH,0} = 0,7$  après 50 ans d'exposition)

### b. Résultats

Dans le Tableau IV.6 sont indiquées les valeurs moyennes sur 5 séries des indices de Sobol totaux pour l'ensemble des valeurs du seuil  $n_{CH,i}/n_{CH,0}$ . L'identification des variables les plus influentes est repérée dans le tableau par leurs numéros en gras soulignés. On constate que les variables identifiées restent inchangées, quel que soit le nombre de points considéré par trajectoire. Le principe choisi pour fixer le nombre minimal de points peut alors paraître sévère mais assure toutefois la stabilisation de l'ordre d'importance des variables.

Les variables dont l'incidence est significative sont finalement  $X_1$ ,  $X_3$ ,  $X_{26}$ ,  $X_{29}$  et  $X_{31}$ .

	<i>Hierarchisation des variables d'entrée par la méthode de Sobol</i>														
$n_{CH,i}/n_{CH,0}$	0,6					0,7					0,8				
N° trajectoire	60	120	180	240	300	60	120	180	240	300	60	120	180	240	300
Indice total	Numéro des variables					Numéro des variables					Numéro des variables				
$\geq 0,05$	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>	<u>29</u>
	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>	<u>1</u>
	<u>31</u>	<u>26</u>	<u>26</u>	<u>26</u>	<u>26</u>	<u>31</u>	<u>26</u>	<u>26</u>	<u>26</u>	<u>31</u>	<u>31</u>	<u>31</u>	<u>31</u>	<u>31</u>	<u>31</u>
	<u>26</u>	<u>31</u>	<u>31</u>	<u>3</u>	<u>3</u>	<u>3</u>	<u>31</u>	<u>31</u>	<u>3</u>	<u>3</u>	<u>3</u>	<u>26</u>	<u>3</u>	<u>3</u>	<u>3</u>
	<u>3</u>	<u>3</u>	<u>3</u>	<u>31</u>	<u>31</u>	<u>26</u>	<u>3</u>	<u>3</u>	<u>31</u>	<u>26</u>	<u>26</u>	<u>3</u>	26	26	26
< 0,05	11	11	<u>11</u>	11	11	11	11	11	11	11	2	2	10	10	10
	10	10	10	10	10	4	4	10	10	10	22	4	2	22	22
	4	4	4	25	25	10	10	4	32	32	4	10	4	4	2
	2	2	25	4	32	2	2	2	2	2	10	22	32	18	15
	18	25	32	32	22	22	22	32	4	25	18	32	22	2	18
	22	18	2	2	28	18	18	22	25	18	32	18	18	32	11
	19	22	18	18	2	32	32	18	18	15	15	15	15	15	32
	25	19	22	22	18	19	19	25	22	4	11	11	11	11	4
	32	32	19	19	20	25	25	19	15	16	20	25	25	25	25
	15	15	15	28	15	15	15	15	19	28	25	20	20	20	16
	20	20	20	15	16	20	20	20	16	22	19	19	19	19	19
	16	28	28	20	19	16	16	16	20	19	16	16	16	16	20
28	16	16	16	4	28	28	28	28	20	28	28	28	28	28	

**Tableau IV.6. Ensemble des résultats de la méthode de Sobol (après 50 ans d'exposition)**

La dimension stochastique efficace a donc été réduite à 5 sur l'ensemble des 32 variables aléatoires initiales. Les variables retenues sont nominativement :

$\phi_0$  - porosité initiale (-), variable  $X_1$

$n_{CH,0}$  - quantité initiale de portlandite ( $\text{mol/m}^3$ ), variable  $X_4$

$R_{p0}$  - rayon équivalent initial des sphères de portlandite (m), variable  $X_{26}$

$H_{rmoy}$  - humidité extérieur moyenne (-), variable  $X_{29}$

$T_{moy}$  - température extérieur moyenne (K), variable  $X_{31}$

L'importance numérique de ces variables est bien corroborée par leur signification physique dans le phénomène de carbonatation. La porosité est un facteur général d'accessibilité du dioxyde de carbone dans le béton. La quantité initiale de portlandite constitue la réserve de matériau carbonatable le plus rapidement mobilisable. La dimension des cristaux de portlandite joue sur la cinétique de réaction et sur l'obturation de la porosité. L'humidité relative intervient à la fois dans l'accessibilité au travers de la porosité non saturée, et dans la dissolution de dioxyde de carbone nécessaire à la carbonatation des hydrates. La température pilote la thermo-activation des réactions, et à moindre titre la diffusivité des espèces. Parmi les variables dont les indices sont proches du seuil par valeur inférieure se trouvent celles



qui gèrent en second lieu l'évolution de la porosité comme les volumes molaires de la calcite et de la portlandite (respectivement  $X_{10}$  et  $X_{11}$ ), et la concentration initiale en gel de CSH ( $X_4$ ).

#### IV.3.2.3. Efficacité de la stratégie de calcul

Pour apprécier l'effet de la combinaison de la méthode de Morris et de la méthode de Sobol, soit originale, soit selon l'alternative proposée par [JACQUES, 2005], nous avons établi une comparaison du nombre de calculs et du temps de calcul entre la combinaison de 2 méthodes et l'utilisation successive de chaque méthode. Le temps de calcul pour un appel au modèle à l'échéance d'exposition 50 ans est environ de 30 secondes. Le Tableau IV.7 montre l'économie réalisée, notamment par rapport à l'utilisation de la seule méthode de Sobol sur l'ensemble des 32 variables aléatoires initiales (en supposant un nombre inchangé de points).

Méthode utilisée	Nombre d'appels au modèle	Temps de calcul (h)
Morris avec $n=32$ variables	$r \times (n+1) = 1980$ pour $r=60$ trajectoires	17
Sobol (alternative) avec $n=32$ variables	$m \times (2n+1) = 15600$ pour $m=240$ points	130
Sobol (originale) avec $n=32$ variables	$n \times (m^2 - m) + m = 1835760$ pour $m=240$ points	15298
Morris et Sobol (alternative) avec $n=32$ variables	17580	147
Morris avec $n=32$ variables et Sobol (alternative) avec $n=18$ variables	<b>10860</b>	<b>91</b>

Tableau IV.7. Nombre d'appels au modèle et temps de calcul

On peut conclure d'après cette comparaison que la stratégie retenue a été pertinente.

### IV.3.3. Analyses de sensibilité pour l'amplitude de variation annuelle du taux de saturation $\Delta S_r$

#### IV.3.3.1. Problématique hydrique

La connaissance de la variation annuelle d'humidité dans le béton au voisinage des armatures permet de déterminer la durée cumulée annuelle pour laquelle le taux de saturation se situe dans la plage de valeurs favorable à l'amorçage de la corrosion, une fois l'enrobage totalement carbonaté. En supposant la répétition annuelle à l'identique des conditions climatiques, la durée cumulée totale de conditions propices au démarrage de la corrosion est déterminée par simple addition des durées cumulées annuelles, sur la période qui s'étend depuis la date de carbonatation de l'enrobage jusqu'à la fin de la durée d'exploitation prévue de la structure. Trois grandeurs sont nécessaires à la détermination de la durée

annuelle cumulée des conditions d'humidité favorables à la corrosion, comme illustré sur la Figure IV.7 : la variation annuelle du taux de saturation  $\Delta S_r$ , le taux de saturation moyen  $S_{r_{moy}}$  et le temps de stabilisation  $t_{stab}$ .

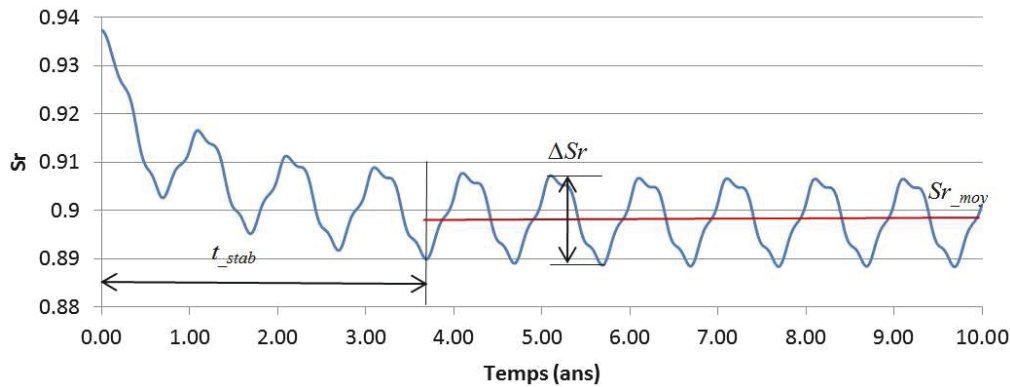


Figure IV.7. Variation du taux de saturation en fonction du temps à une profondeur de 3 cm

a. Modélisation du transfert hydrique

La modélisation de la carbonatation intègre la résolution de l'équation de transfert hydrique (équation II.34) couplée aux autres équations de conservation. Dans le cadre d'une analyse de sensibilité portant sur la variation annuelle du taux de saturation, après atteinte de l'enrobage par la carbonatation, il a été jugé opportun de proposer une modélisation du transfert hydrique découplée afin d'accélérer le temps de calcul, résolvant l'équation :

$$\rho_l \phi_c \cdot \frac{\partial S_r}{\partial t} = -div \left[ \frac{K^\phi \cdot \rho_l}{\eta} \cdot k_{rl} \cdot p'_{cap} \cdot h'_r \cdot grad(S_r) \right] \quad (IV.3)$$

Dans cette équation,  $\phi_c$  est la porosité du béton carbonaté. Il est à noter que les termes relatifs à la thermo-activation ont été également introduits dans cette modélisation : viscosité de l'eau (équation II.30), isotherme de désorption (équations II.31 et II.32).

b. Conditions d'exposition

La variation du taux de saturation est liée aux conditions d'exposition climatiques. Pour l'analyse de sensibilité, nous nous sommes référés à la chronique horaire d'humidité relative moyennée sur 30 ans de 1970 à 2000, gracieusement mise à disposition par le centre de Météo-France de Toulouse-Blagnac (31). Une chronique type a été modélisée à partir de la chronique réelle comme une superposition de fonctions sinusoïdales, selon :

$$H_{rex}(t) = H_{ra}(t) + H_{rm}(t) + H_{rj}(t) \quad (IV.4)$$

Où  $H_{ra}$  est la tendance moyenne annuelle,  $H_{rm}$  est la variation saisonnière moyenne par rapport à la tendance annuelle et  $H_{rj}$  est la variation moyennée sur 3 jours par rapport à la variation saisonnière. Les expressions des fonctions sont :

$$H_{ra}(t) = H_{rmoy} + \Delta H_r \times \sin(2\pi t / 3600 / 24 / 365 + \pi / 2) \quad (IV.5)$$

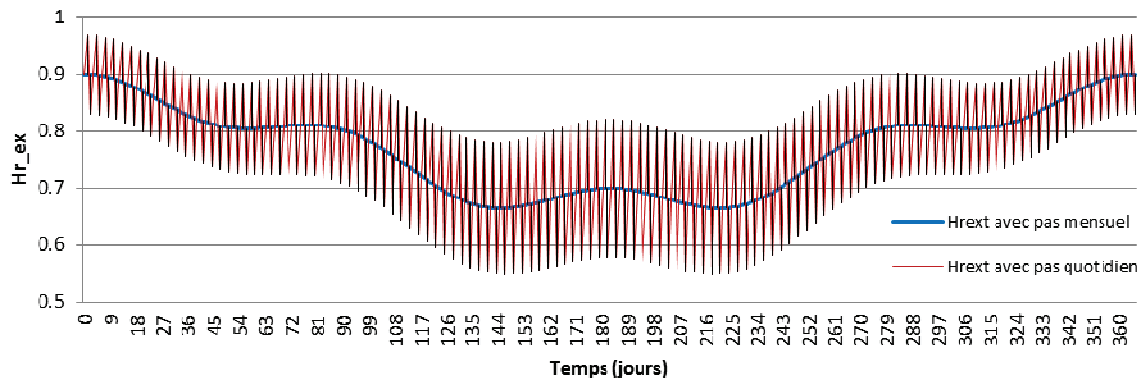
$$H_{rm}(t) = \Delta H_{rm} \times \sin(2\pi t / 3600 / 6 / 365 + 2\pi \times p_{Hrm}) \quad (IV.6)$$

$$H_{rj}(t) = (\Delta H_{rj0}(t) + \Delta H_{rj1}) \times \sin(2\pi t / 3600 / 24 / 3) \quad (IV.7)$$

$$\Delta H_{rj0}(t) = \Delta H_{rj2} \times \sin(2\pi t / 3600 / 24 / 365 + \pi / 2) \quad (IV.8)$$

Où  $H_{rmoy}$  est l'humidité moyenne annuelle ;  $\Delta H_r$  est l'amplitude de la variation annuelle ;  $p_{Hrm}$  est la phase pour la perturbation mensuelle ;  $\Delta H_{rm}$  est la perturbation mensuelle par rapport à la tendance annuelle ;  $\Delta H_{rj1}$  est la moyenne de la perturbation sur 3 jours par rapport à la tendance annuelle ;  $\Delta H_{rj2}$  est l'amplitude de la variation de la perturbation sur 3 jours par rapport à la tendance annuelle. Les valeurs ajustant la chronique réelle sont  $H_{rmoy}=0,77$ ,  $\Delta H_r=0,1$ ,  $\Delta H_{rm}=0,03$ ,  $p_{Hrm}=0,25$ ,  $\Delta H_{j1}=0,16$  et  $\Delta H_{j2}=0,03$ .

Bien qu'étant discrétisée de façon horaire, l'humidité relative ne peut pas être introduite avec un pas horaire dans la modélisation, en raison du temps de calcul exorbitant auquel cela conduirait. Il a donc été choisi de considérer des pas de temps quotidiens ou mensuels. La Figure IV.8 illustre l'effet du pas de temps sur la chronique typique.



**Figure IV.8. Chronique de l'humidité relative extérieure journalière ou mensuelle**

### c. Variation du taux de saturation dans le béton

La variation du taux de saturation dans le temps est d'autant plus marquée que l'on se situe à proximité de la surface du parement. La Figure IV.9, obtenue avec la chronique typique quotidienne, montre clairement l'atténuation observée avec la profondeur, ici supposée être la profondeur carbonatée, ou de façon similaire l'épaisseur d'enrobage.

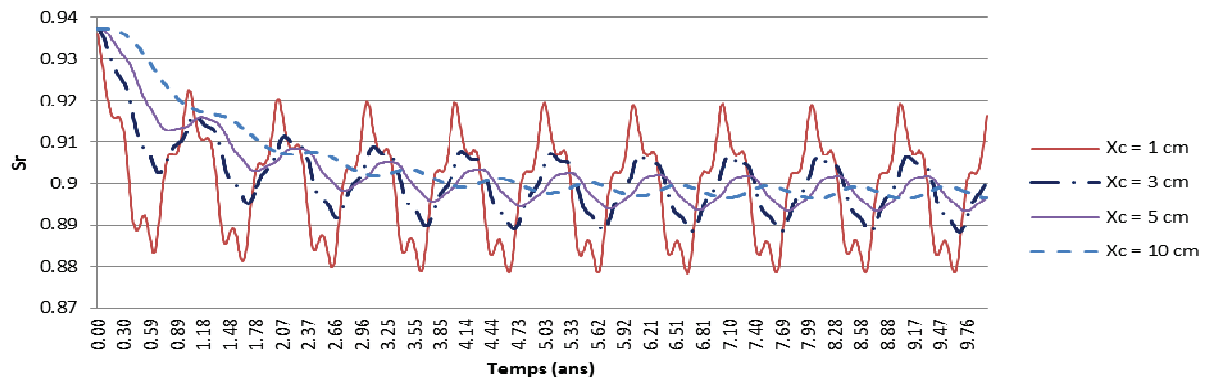


Figure IV.9. Variation de  $S_r$  est en fonction de la profondeur avec  $H_{r\text{moy}}=0,77$  et  $\phi_c=0,12$

La porosité du matériau constitue également un facteur dont l'influence déterministe est très nettement marquée comme l'illustre la Figure IV.10, obtenue avec la chronique typique quotidienne.

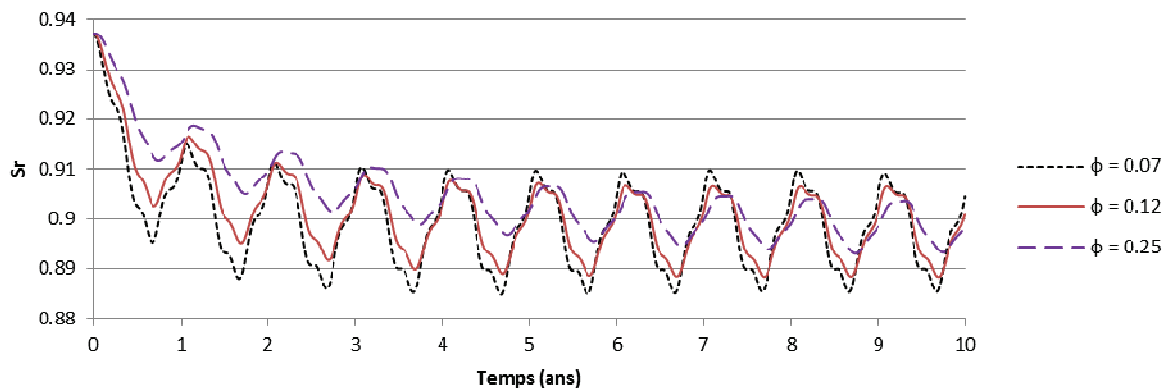


Figure IV.10. Variation de  $S_r$  est en fonction de la porosité avec  $H_{r\text{moy}}=0,77$  et pour  $X_c=3$  cm

Le pas retenu pour la chronique d'humidité relative extérieure, identique au pas de calcul du taux de saturation, a une incidence sur l'amplitude de la variation annuelle du taux de saturation, comme on peut le voir sur le Figure IV.11.

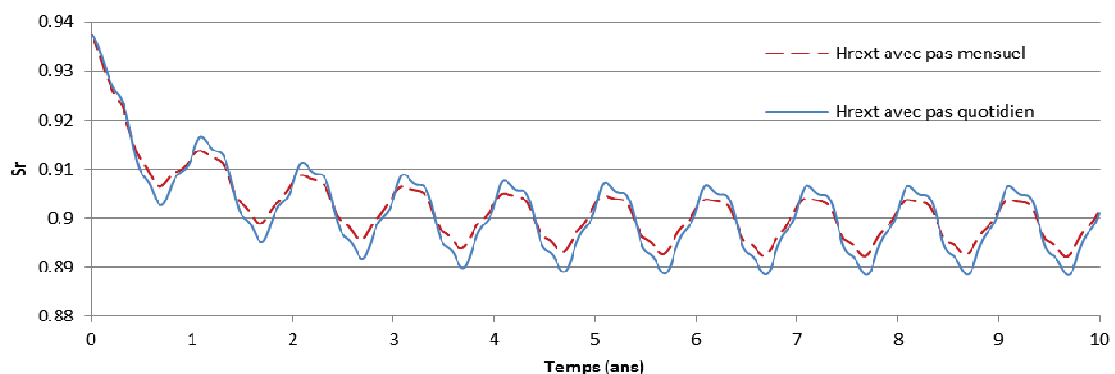


Figure IV.11. Variation de  $S_r$  est en fonction du pas de la chronique typique de  $H_r$ , avec  $H_{r\text{moy}}=0,77$ ,  $\phi_c=0,12$ ,  $X_c=3$  cm

L'amplitude est plus importante lorsque la chronique est décrite par pas quotidiens, mais le calcul est beaucoup plus long. Dès lors se pose alors la question du compromis à trouver entre la précision du résultat obtenu et la vitesse de calcul. Afin de trouver ce compromis nous avons opté pour une détermination du taux de saturation sur la base d'une chronique à pas mensuel, avec l'application d'une relation permettant de passer de l'amplitude  $\Delta S_{rm}$  déterminée avec un pas mensuel à l'amplitude  $\Delta S_{rj}$  déterminée avec un pas quotidien :

$$\Delta S_{rj} = \Delta S_{rm} + f_{\Delta Sr}(X_c, \phi_c) \quad (IV.9)$$

où  $f_{\Delta Sr}(X_c, \phi_c)$  est une fonction corrective, illustrée sur le Figure IV.12, tenant compte des conditions extérieures et du matériau. On note en particulier qu'aucune correction n'est à appliquer si l'humidité extérieure moyenne annuelle reste inférieure à 72%.

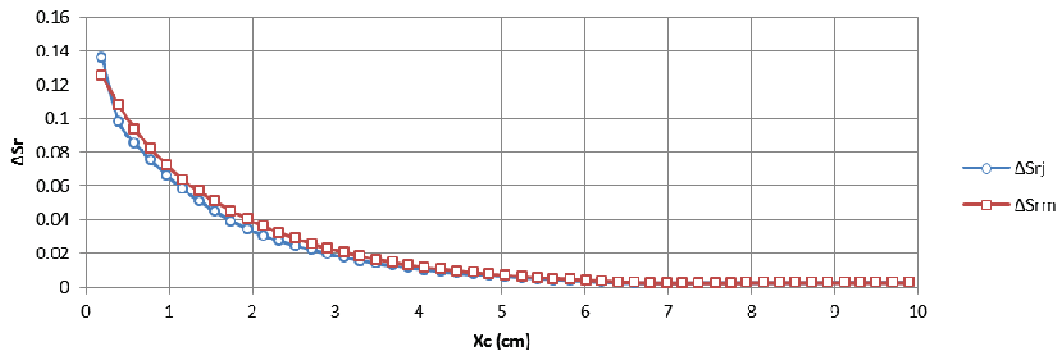


Figure IV.12. Validation des valeurs de  $\Delta S_{rj}$ , avec  $Hr_{moy}=0,66$ ,  $\phi_c=0,25$

Lorsque  $Hr_{moy} \geq 0,72$ , l'expression de  $f_{\Delta Sr}(X_c, \phi_c)$  est :

$$f_{\Delta Sr}(X_c, \phi_c) = (b_1 \times \phi_c - b_2) \times \ln(X_c) - b_3 \times \phi_c + b_4 \quad (IV.10)$$

avec  $b_1 = 0.4 \times Hr_{moy} - 0.288$

$$b_2 = -0.025 \times Hr_{moy} + 0.0278$$

$$b_3 = 0.8 \times Hr_{moy} - 0.558$$

$$b_4 = -0.1 \times Hr_{moy} + 0.098$$

Où  $Hr_{moy}$  est l'humidité moyenne annuelle ;  $\phi_c$  est la porosité du béton carbonaté ;  $X_c$  est la profondeur, qui peut éventuellement correspondre à l'enrobage carbonaté.

Les Figure IV.13 et IV.14 montrent la bonne correspondance fournie par l'équation (IV.9), entre la variation  $\Delta S_{rj}$  pour un pas quotidien estimée à partir de la variation pour un pas mensuel  $\Delta S_{rm}$ , et la variation  $\Delta S_{rj,réelle}$  obtenue par un calcul réel.

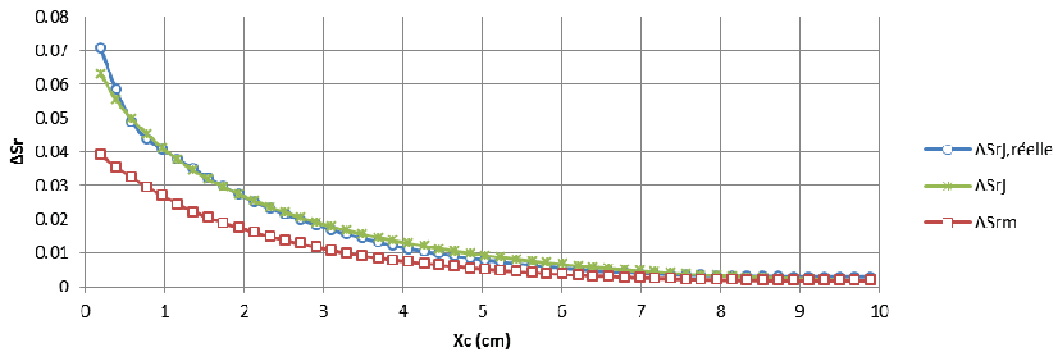


Figure IV.13. Validation des valeurs de  $\Delta S_{rj_s}$  avec  $H_{r_{moy}}=0.77$ ,  $\phi_c=0.12$

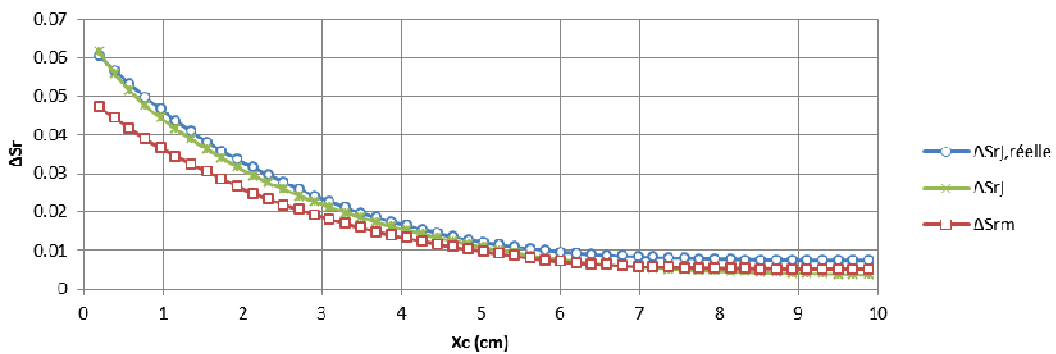


Figure IV.14. Validation des valeurs de  $\Delta S_{rj_s}$  avec  $H_{r_{moy}}=0.83$ ,  $\phi_c=0.07$

d. Calcul approché des paramètres  $t_{stab}$  et  $S_{r_{moy}}$

Le calcul du taux de saturation moyen pour des porosités de 0.069 à 0.253 a été effectué avec les chroniques climatiques typiques des régions de Toulouse, Marseille et Nantes. Les valeurs stabilisées du taux de saturation moyen annuel à une profondeur de 3 cm sont portées dans les Tableaux IV.8 et IV.9. On constate que la porosité a un effet très faible sur le taux de saturation, même si une légère augmentation apparaît lorsque la porosité augmente. Notons que ce constat est probablement dû au fait que l'isotherme de désorption utilisée ne dépend pas de la porosité.

$t$ (ans)	$\phi_0$		
	0,069	0,12	0,253
5	0,8488	0,8551	0,8711
6	0,8481	0,8523	0,8663
7	0,8476	0,8505	0,8625
8	0,8474	0,8494	0,8596
9	0,8474	0,8487	0,8573
10	0,8474	0,8483	0,8554

Tableau IV.8. Variation du taux de saturation moyen due à la porosité avec  $H_{r_{moy}} = 0,66$

$t$ (ans)	$\phi_0$		
	0,069	0.12	0.253
5	0,9028	0,9035	0,9080
6	0,9028	0,9030	0,9064
7	0,9028	0,9027	0,9053
8	0,9027	0,9026	0,9046
9	0,9027	0,9025	0,9040
10	0,9026	0,9025	0,9036

Tableau IV.9. Variation du taux de saturation moyen due à la porosité avec  $H_{r\text{moy}} = 0,8$

Sur la Figure IV.15, on peut voir qu'après cinq ans d'exposition, la valeur du taux de saturation moyen est quasi-constante si la profondeur considérée est supérieure à 1 cm.

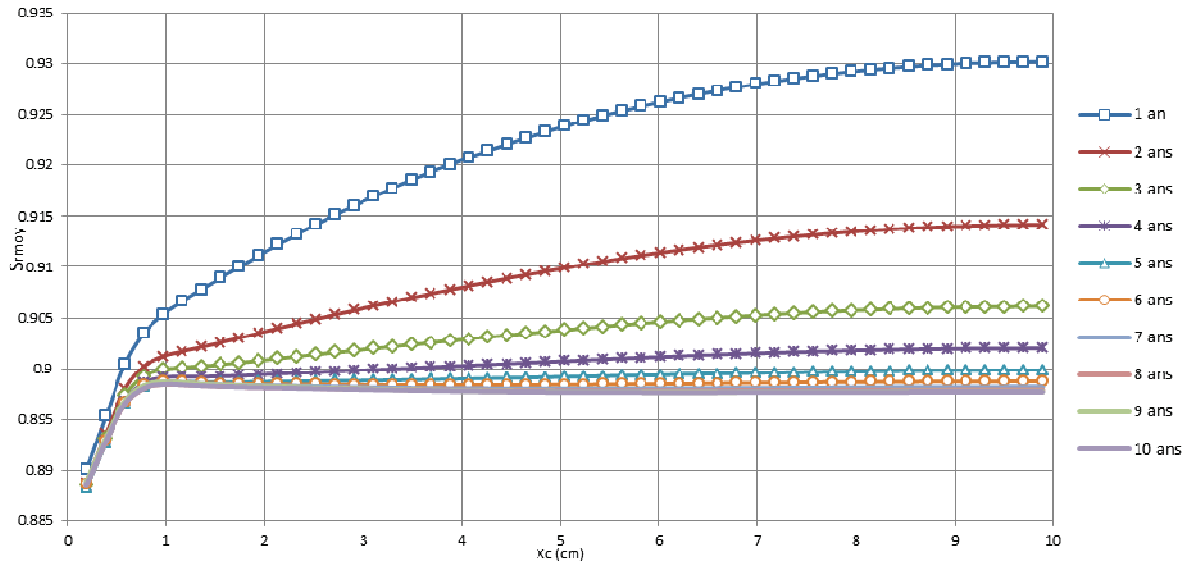


Figure IV.15. Variation du taux de saturation moyen en longueur la profondeur, avec  $H_{r\text{moy}}=0.77$ ,  $\phi_c=0.12$

Dès lors, l'influence de l'humidité sur le taux de saturation est peut-être exprimée par la relation suivante, indépendamment de la profondeur, si supérieure à 1 cm, et pour une échéance supérieure ou égale à 5 ans :

$$S_{r\text{moy}} = 0.392H_{r\text{moy}} + 0.593 \quad (\text{IV.11})$$

Le temps stabilisation  $t_{stab}$  est défini comme la période au-delà de laquelle la valeur du taux de saturation moyen annuel et celle de l'amplitude du taux de saturation sont constantes d'une période annuelle à l'autre, ce qui se traduit par la satisfaction des inéquations suivantes avec :

$$\frac{S_{r\text{moy}}^t - S_{r\text{moy}}^{t+1}}{S_{r\text{moy}}^t} \leq A(\%) \quad (\text{IV.12})$$

$$\frac{\Delta S_r^t - \Delta S_r^{t+1}}{\Delta S_r^t} \leq B(\%) \quad (IV.13)$$

Où  $S_{moy}^i$  et  $\Delta S_r^i$  successivement sont la valeur moyenne et l'amplitude du taux de saturation à la  $i^{ème}$  année.

Avec un seuil proposé de  $B=10\%$ , l'accroissement de  $t_{stab}$  en fonction de la profondeur considérée est illustré sur la Figure IV.16. Comme nous l'avons vu précédemment le taux de saturation moyen est quant à lui stabilisé après 5 ans ( $A < 2\%$ ).

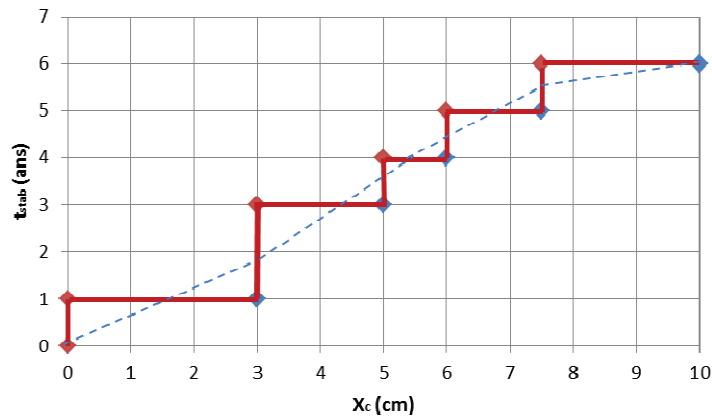


Figure IV.16. Variation du temps de stabilisation  $t_{stab}$  avec la profondeur

A une échéance supérieure à 5 ans, on constate que le cycle de variation annuelle du taux de saturation se stabilise pour une épaisseur inférieure à environ 7 cm. Pour une épaisseur d'enrobage comprise entre 1 cm et 7 cm, on peut donc dire que la représentation simplifiée de  $S_r(t)$  développée ici est satisfaisante si  $t \geq 5$  ans. Pour pouvoir l'utiliser en supposant l'enrobage carbonaté, il est donc impératif que le temps de carbonatation de l'enrobage soit supérieur à 5 ans. Il est probable cependant, dans le cas de l'application des méthodes stochastiques que nous envisageons, que des réalisations de l'enrobage soient inférieures à 1 cm et/ou que le temps de carbonatation soit inférieur à 5 ans. Dans ce cas, le taux de saturation moyen annuel ainsi que l'amplitude de variation annuelle seront sous-estimés par la représentation proposée. Comme nous le verrons dans la suite de ce chapitre, la grandeur  $t_{corr}$  sera calculée de façon cumulative sur la durée envisagée d'exploitation de la structure, et on peut admettre qu'une erreur dans le calcul sur au maximum les 5 premières années ne sera pas rédhibitoire.

*e. Fonction retenue pour l'approximation de la variation du taux de saturation*

Au-delà du temps de stabilisation, on peut raisonnablement approcher la variation du taux de saturation par une fonction sinus, comme le montre la Figure IV.17, avec une période annuelle. Ce résultat découle logiquement de la forme des chroniques typiques. Il aurait été probablement différent si



des apports soudains d'eau liquide pour une surface exposée à la pluie, avaient été considérés. L'amplitude de la fonction sinus est l'objet de la présente analyse de sensibilité et du modèle de substitution présenté ci-après.

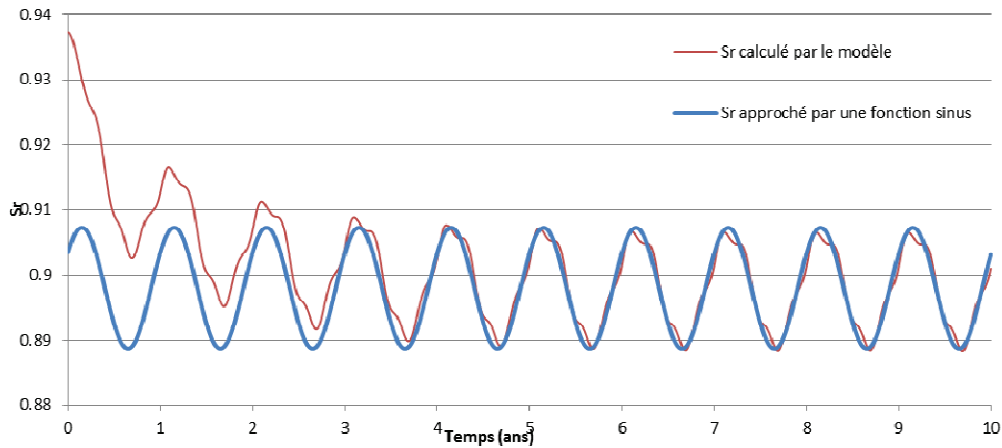


Figure IV.17. Approximation sinusoïdale de la variation de  $S_r$  avec  $X_c=3\text{cm}$ ,  $H_{r\text{moy}}=0,77$ ,  $\phi_c=0,12$

#### IV.3.3.2. Hiérarchisation des variables d'entrée par la méthode de Sobol

Les plages de variation des variables d'entrée considérées comme paramètres incertains pour le calcul de  $\Delta S_r$  sont portées dans le Tableau IV.10. La plupart sont identiques à celles indiquées dans le Tableau IV.3, sauf pour la porosité du béton, supposé carbonaté. Deux variables ont été ajoutées : la variation annuelle de l'humidité relative extérieure  $\Delta H_r$ , et celle de la température  $\Delta T$ .

$N^\circ$	Variables	Unité	Moyenne	Minimum	Maximum
1	$\phi_c$	-	0,16	0,069	0,253
2	$p_0$	$\text{kg/m}\times\text{s}^2$	$5,91\times 10^7$	$5,6145\times 10^7$	$6,2055\times 10^7$
3	$K^0$	$\text{m}^2$	$2,1\times 10^{-22}$	$1,47\times 10^{-22}$	$2,73\times 10^{-22}$
4	$\eta_{T_{ref}}$	$\text{kg/m}\times\text{s}$	0,001003	0,000903	0,001103
5	$\rho_l$	$\text{kg/m}^3$	998	948	1048
6	$Hr_{ini}$	-	0,94	0,89	0,98
7	$T_{ini}$	$^\circ\text{K}$	282	268	296
8	$Hr_{moy}$	-	0,772	0,7	0,85
9	$\Delta Hr$	-	0,1	0,07	0,13
10	$T_{moy}$	$^\circ\text{K}$	286	257,4	314,6
11	$\Delta T$	$^\circ\text{K}$	8	5	11
12	$a_l$	-	427	341,6	512,4

Tableau IV.10. Caractéristiques des variables d'entrée pour l'analyse de sensibilité de  $\Delta S_r$

Etant donné que la dimension stochastique initiale est relativement faible (12 paramètres d'entrée incertains), il n'est pas utile pour cette analyse de sensibilité de déployer intégralement la démarche globale. La méthode de Sobol a donc été directement appliquée avec 240 points par trajectoire. Notons que les calculs ont été menés pour une durée d'exposition de 10 ans, systématiquement supérieure à la période de stabilisation du taux de saturation. L'ensemble des résultats sont données en Annexe E. Les variations des indices totaux de Sobol avec la profondeur considérée sont visibles dans la Figure IV.18. On peut constater que la hiérarchisation obtenue n'est plus modifiée dès que la profondeur dépasse 1,5 cm. En fixant un seuil de 10% pour l'indice de Sobol comme critère de choix des variables d'entrée significatives, on retient au final les variables suivantes :  $\phi_c$ ,  $H_{rmoy}$ ,  $\Delta H_r$  et  $T_{moy}$ . Les autres variables peuvent être fixées à leurs valeurs moyennes. Ce résultat semble complètement pertinent eu égard au phénomène considéré.

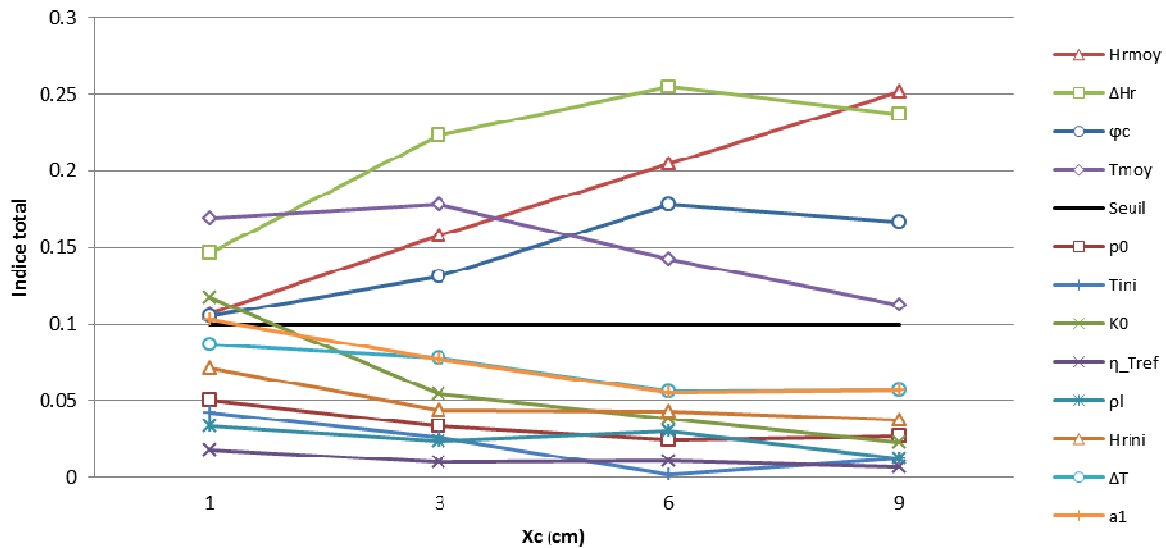


Figure IV.18. Hiérarchiser des variables d'entrée dans le modèle variation le taux de saturation par la méthode de Sobol (240 points, 10 ans d'exposition)

#### IV.4. Construction des modèles de substitution

L'analyse de sensibilité portant sur la profondeur carbonatée  $X_c$  et l'amplitude de la variation annuelle du taux de saturation  $\Delta S_r$  a été conduite afin d'identifier les variables à introduire dans les développements par chaos polynomial  $X_c^{CP}$  et  $\Delta S_r^{CP}$  des modèles implicites considérés. L'écriture générale d'un développement limité par chaos polynomial d'une fonction  $f$  est :

$$Y \approx f^{CP} = \sum_{m=0}^P a_m \psi_m(X_1, \dots, X_n) \quad (IV.14)$$

Où les polynômes multivariés  $\psi_m$  s'écrivent :

$$\psi_m(X_1, \dots, X_n) = \prod_{i=1}^n \phi \alpha_i^m(X_i) \quad (\text{IV.15})$$

et les polynômes unidimensionnels  $\phi \alpha_i^m(X_i)$  sont des polynômes d'Hermite, si les variables sont gaussiennes centrées réduites, ou des polynômes de Legendre si les variables sont uniformes sur  $[-1,1]$ .

#### IV.4.1. Calcul des coefficients

Les coefficients  $a_m$  de chaque développement par chaos polynomial, au nombre de  $(P-1) = (n+p)! / (n! \times p!)$  où  $p$  est le degré du chaos, ont été calculés par la méthode de régression à partir d'un plan d'expérience numérique comprenant  $r$  points. Ce plan a été constitué par tirages des variables aléatoires retenues après l'analyse de sensibilité, par hyper-cube latin selon les domaines de variations décrits dans les Tableau IV.3 et IV.10. Dans le cas du chaos  $X_c^{CP}$  le temps  $t$  a également été considéré comme une variable aléatoire uniformément distribuée sur [10 ans, 50 ans], dont le logarithme en base 10 a en fait été utilisé comme variable. Dans le cas du chaos  $\Delta S_r^{CP}$  a également été introduit l'enrobage  $c$  comme une variable aléatoire uniformément distribuée sur [0,5 cm, 10 cm]. Les modèles de substitution s'écrivent donc symboliquement :

$$X_c \approx X_c^{CP}(\phi_0, n_{CH,0}, R_{p0}, H_{rmoy}, t) \quad (\text{IV.16})$$

$$\Delta S_r \approx \Delta S_r^{CP}(\phi_c, H_{rmoy}, T_{moy}, \Delta H_r, c) \quad (\text{IV.17})$$

Les lois considérées pour les variables sont soit des lois normales, soit des lois uniformes. Les coordonnées des points du plan d'expérience ont donc été exprimées par transformation iso-probabilistes sur les supports des lois de distribution imposées par les polynômes.

#### IV.4.2. Résultats

Les coefficients des chaos  $X_c^{CP}$  et  $\Delta S_r^{CP}$  sont donnés dans les annexes F et G. Les tableaux IV.11 et IV.12 résument les valeurs des coefficients de détermination  $R^2$  en fonction du type et du degré des polynômes utilisés. L'approximation est satisfaisante pour le chaos  $X_c^{CP}$  quels que soient le type et le degré des polynômes. En revanche on note pour le chaos  $\Delta S_r^{CP}$  qu'il convient de recourir à des polynômes de degré 3.

$R^2$		Polynômes d'Hermite			Polynômes de Legendre		
$p=2$	$n_{CH,i}/n_{CH,0}$	0,6	0,7	0,8	0,6	0,7	0,8
	$r = 50$	<b>0,9977</b>	<b>0,9972</b>	<b>0,9964</b>	<b>0,9911</b>	<b>0,9933</b>	<b>0,9947</b>
	$r = 100$	<b>0,9993</b>	<b>0,9993</b>	<b>0,9996</b>	<b>0,9979</b>	<b>0,9983</b>	<b>0,9983</b>
$p=3$	$n_{CH,i}/n_{CH,0}$	0,6	0,7	0,8	0,6	0,7	0,8
	$r = 100$	<b>0,9999</b>	<b>0,9999</b>	<b>0,9998</b>	<b>0,9998</b>	<b>0,9998</b>	<b>0,9998</b>

Tableau IV.11. Indice de régression pour le chaos  $X_c^{CP}$

$R^2$		Polynômes d'Hermite	Polynômes de Legendre
$p=2$	$r = 50$	<b>0,9423</b>	<b>0,9321</b>
	$r = 100$	<b>0,9708</b>	<b>0,9530</b>
$p=3$	$r = 100$	<b>0,9892</b>	<b>0,9861</b>

Tableau IV.12. Indice de régression pour le chaos  $\Delta S_r^{CP}$

#### IV.4.3. Validation de l'approximation par modèle de substitution

Sur la Figure IV.19 on peut voir que le modèle de substitution de la profondeur de carbonatation n'est pas satisfaisant pour tous les degrés de polynôme, malgré la qualité de la régression soulignées ci-avant. Ainsi l'approximation fournie par le modèle de substitution construit avec des polynômes de degré 3 ne reste pertinente que pour des échéances comprises entre 20 ans et 80 ans, et ne pourra pas être employée dans le calcul du temps cumulé  $t_{corr}$ , qui requiert la connaissance de la profondeur carbonatée sur toute la durée d'exploitation de la structure. On peut voir en revanche que l'approximation est satisfaisante lorsque des polynômes de degré 2 sont utilisés.

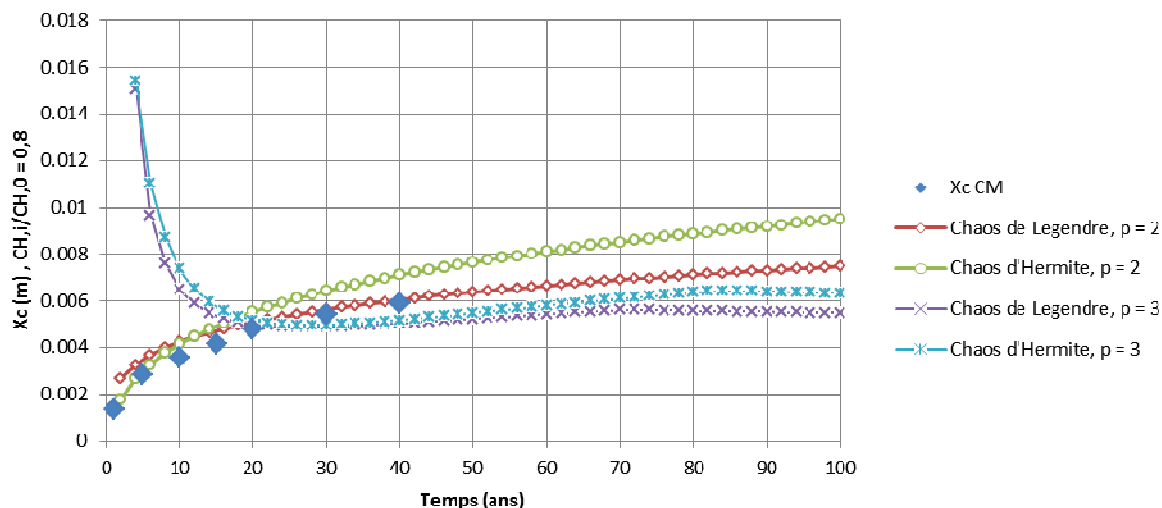


Figure IV.19. Profondeur de carbonatation obtenue par le modèle substitution et résultats du modèle de carbonatation pour  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,8$ , avec  $H_{r moy}=0,77$ ,  $\phi_0=0,18$

La Figure IV.20 montre la bonne concordance entre le modèle de substitution proposé pour estimer l'amplitude de variation annuelle du taux de saturation dans le béton avec les résultats du modèle de transfert.

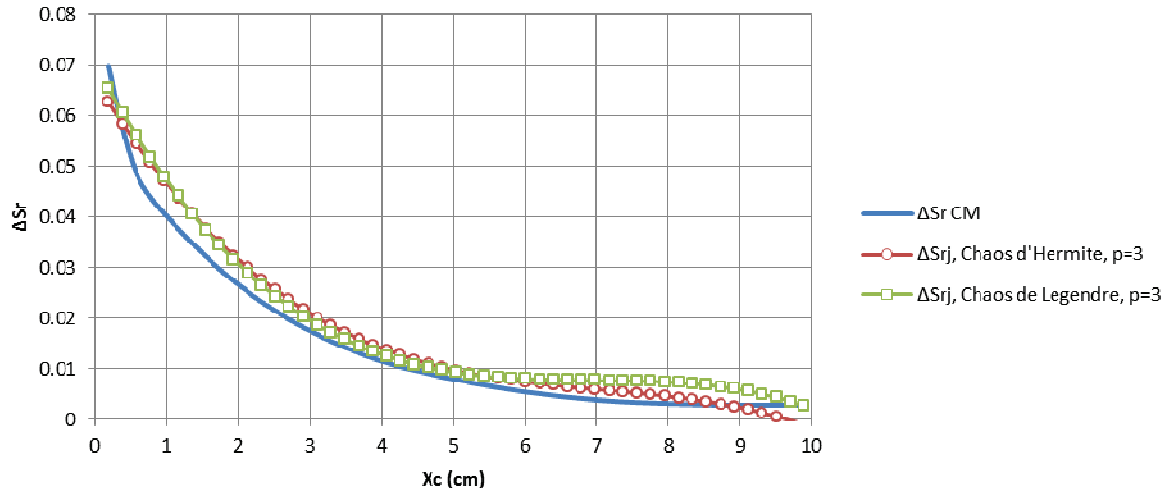


Figure IV.20. Amplitude du taux de saturation obtenue par le modèle substitution et résultats du modèle de transfert, avec  $H_{r moy}=0,77$ ,  $\phi_0=0,18$

## IV.5. Analyse de fiabilité

Disposant maintenant d'une définition de la probabilité d'amorçage de la corrosion et des modèles de substitution pour la profondeur carbonatée et pour l'amplitude de la variation annuelle du taux de saturation au voisinage des armatures, nous pouvons engager l'analyse fiabiliste proprement dite. Nous avons choisi de focaliser notre étude sur l'incidence des conditions climatiques sur la fiabilité vis-à-vis de la durabilité.

### IV.5.1. Estimation de la probabilité d'amorçage de la corrosion

#### IV.5.1.1. Calcul des évènements

La probabilité de défaillance définie par l'équation (IV.1) fait intervenir le dépassement de la profondeur carbonatée ( $X_c \geq c$ ) et le dépassement d'une durée seuil par la durée cumulée de conditions favorables à la corrosion, une fois que l'enrobage est carbonaté ( $t_{corr} \geq t_{seuil} \mid X_c \geq c$ ). Concernant le dépassement de l'enrobage par la profondeur carbonatée, le calcul de l'évènement est directement :

$$X_c^{CP}(\phi_c, n_{CH,0}, R_{p0}, H_{r moy}, T_{moy}, t) \geq c \quad (IV.18)$$

La durée cumulée  $t_{corr}$  s'exprime nécessairement en fonction de la condition de dépassivation des armatures, comme :

$$t_{corr} | X_c \geq c = \int_{t_{X_c}}^{t_L} dt | S_{rmin} \leq S_r(t) \leq S_{rmax} \quad (IV.19)$$

Où  $t_{X_c}$  est la date correspondant à la dépassement des armatures, échéance à laquelle la profondeur de carbonatation dépasse l'enrobage,  $t_L$  est la durée d'exploitation envisagée pour la structure,  $S_{rmin}$  et  $S_{rmax}$  sont les taux de saturation définissant la plage d'humidité favorable au développement de la corrosion.  $S_r(t)$  est approché grâce au modèle de substitution proposé pour  $\Delta S_r$  soit

$$S_r(t) = S_{r moy} + \frac{\Delta S_r^{CP}(\phi_c, H_{r moy}, T_{moy}, \Delta H_r, c)}{2} \times \sin\left(\frac{2\pi t}{365} + \frac{3\pi}{2}\right) \quad (IV.20)$$

Où  $t$  est le temps en jours. Si  $t_{corr,1}$  est le cumul des jours pour lesquels  $S_{rmin} \leq S_r(t) \leq S_{rmax}$  au cours de la chronique annuelle typique, il vient :

$$t_{corr} | X_c \geq c = \frac{t_{corr,1}}{365} \times \max(t_L - t_{X_c}, 0) \quad (IV.21)$$

#### IV.5.1.2. Calcul de l'indice d'Hasofer-Lind

L'algorithme classique de calcul de l'indice de fiabilité avec contrôle d'erreur sur les gradients [DUPRAT et al. 2010] a été utilisé, auquel a été adjoint un critère d'optimisation du pas de descente proposé par [LIU et al., 1991]. La convergence de l'algorithme est très rapide pour la fonction d'état limite de dépassement des armatures  $G(X_c \geq c)$ . L'algorithme est cependant inapte à déterminer l'indice de fiabilité pour la fonction d'état limite d'exposition aux conditions de corrosion  $G(t_{corr} \geq t_{seuil} | X_c \geq c)$ . Le calcul cumulatif par comptage de  $t_{corr,1}$  rend en effet cette quantité insensible aux perturbations imposées aux variables de  $\Delta S_r^{CP}$  dans le calcul du gradient de la fonction d'état limite, qui par conséquent reste nul, même si le gradient de  $\Delta S_r^{CP}$  à ses propres variables est quant à lui non nul. Cette situation constitue évidemment un cas d'échec de l'algorithme, ce qui nous a contraint de recourir à une autre mesure de la fiabilité pour cette fonction d'état limite.

#### IV.5.1.3. Calcul de l'indice de Cornell

L'indice de Cornell a été estimé par simulations de Monte-Carlo pour le calcul de la moyenne et de l'écart-type des fonctions d'état limite. Un tirage de 10000 réalisations pseudo-aléatoires des variables a été employé pour chaque estimation, ce qui est amplement suffisant pour assurer une variance acceptable des deux premiers moments statistiques. Afin de donner de la cohérence au calcul de la probabilité d'amorçage de la corrosion, résultant de l'intersection des deux états limites retenus, cette

dernière a été exprimée à partir des indices de Cornell déterminés pour les deux états limites, selon une approche FORM :

$$P_f = P(t_{corr} > t_{seuil} | X_c \geq c) \times P(X_c \geq c) = \Phi(-\beta_{C,t_{corr}}) \times \Phi(-\beta_{C,X_c}) \quad (IV.22)$$

## IV.5.2. Données pour le calcul

### IV.5.2.1. Situations considérées

Afin de mettre en évidence l'incidence des conditions climatiques sur le niveau de fiabilité à l'égard de la durabilité, nous avons considéré deux régions climatiquement contrastées : la région de Toulouse et la région de Marseille se différencient sensiblement par la température et l'humidité moyennes annuelles. Pour chacune de ces régions nous supposons que le parement de la structure et en contact avec l'atmosphère extérieure et à l'abri de la pluie. Les chroniques climatiques typiques établies précédemment sont plus représentatives de la classe XC2/XC3 que de la classe XC1, qui correspond normalement à une exposition à l'intérieur d'un bâtiment ou dans un endroit où l'humidité ambiante est faible. Cependant s'agissant de la région de Marseille, on pourrait considérer qu'une exposition à l'atmosphère extérieure relève de la classe XC1. L'enrobage des armatures est dimensionné selon l'EC2 pour une classe de structure S4 et une classe d'exposition du parement de structure XC1 ou XC2/XC3. La valeur de dimensionnement de l'enrobage est définie par :

$$c_{nom} = \max(c_{min,dur}, c_{min,b}) + \Delta c_{dev} \quad (IV.23)$$

Le parallèle avec le format semi-probabiliste général de la conception des structures selon l'EC2 permet de proposer l'écriture de  $c_{nom}$  sous la forme :

$$c_{nom} = \mu_c = c_k + \alpha_k \times \sigma_c \quad (IV.24)$$

Où  $\mu_c$  et  $\sigma_c$  sont respectivement la valeur moyenne et l'écart-type de l'enrobage,  $c_k$  est la valeur caractéristique telle que  $P(c \leq c_k) = k\%$ , et  $\alpha_k$  est fonction du type de loi supposé. Cette forme est cohérente avec l'hypothèse que l'enrobage constitue une variable de « résistance », pour laquelle la moyenne doit être supérieure à la valeur caractéristique. Dans le cas d'une loi lognormale, on constate dans le Tableau IV.13 que les valeurs permettant de respecter l'expression (IV.24) sont constantes pour des armatures de diamètre inférieur à  $c_{min,dur}$ .

Classe d'exposition	$c_{min, dur}$ (mm)	$\Delta c_{dev}$ (mm)	$c_{nom} = \mu_c$ (mm)	$k$	$c_k$ (mm)	$\sigma_c$ (mm)	$\alpha_k$
XC1	15	10	25	5%	15,3	7	1,43
XC2/XC3	25	10	35	5%	24,8	7	1,43
XC4	30	10	40	5%	29,6	7	1,43

Tableau IV.13. Paramètres de dimensionnement de l'enrobage

Supposer un écart-type constant est en accord avec le fait que les tolérances d'exécution le restent également ( $\Delta c_{dev} = cste$ ).

#### IV.5.2.2. Distributions des variables aléatoires

Les lois de distributions pour l'ensemble des variables sont portées dans le Tableau IV.14. Ces lois ne sont pas identiques à celle ayant servi à l'analyse de sensibilité, et en particulier, sont moins dispersées. Il est en effet normal, lorsque l'analyse de sensibilité est conduite, de légèrement « forcer le trait » sur la variabilité des paramètres.

Variabes	Unité	Loi de distribution	Moyenne	Ecart-type	Min	Max
$c$	mm	Lognormale	$c_{nom}$	7	0	-
$S_{rmin}$	-	Uniforme	-	-	0,8	0,85
$S_{rmax}$	-	Uniforme	-	-	0,92	0,97
$t_{seuil}$	ans	Uniforme	-	-	2	5
<b>Béton C25</b>						
$\phi_0$	-	Beta	0,18	0,027	0,05	0,25
$n_{CH,0}$	mol/m <sup>3</sup>	Normale	4000	800	-	-
$R_{p0}$	µm	Beta	10	2,5	1	50
<b>Béton C35</b>						
$\phi_0$	-	Beta	0,12	0,012	0,05	0,25
$n_{CH,0}$	mol/m <sup>3</sup>	Normale	4500	450	-	-
$R_{p0}$	µm	Beta	10	2,5	1	50
<b>Toulouse</b>						
$T_{moy}$	K	Uniforme	-	-	283	289
$H_{r moy}$	-	Uniforme	-	-	0,7	0,8
$\Delta R_r$	-	Uniforme	-	-	0,05	0,15
<b>Marseille</b>						
$T_{moy}$	K	Uniforme	-	-	285	291
$H_{r moy}$	-	Uniforme	-	-	0,6	0,7
$\Delta R_r$	-	Uniforme	-	-	0,05	0,10

Tableau IV.14. Distribution des variables aléatoires



### IV.5.3. Résultats d'ensemble et commentaires

#### IV.5.3.1. Influence des conditions climatiques et de l'état limite considéré

Le Tableau IV.15 résume les résultats obtenus dans le cas d'une exposition XC2/XC3 après 50 ans d'exposition. Les polynômes d'Hermite utilisés sont d'ordre 2 pour la profondeur carbonatée et d'ordre 3 pour l'amplitude annuelle de variation du taux de saturation. Les indices de fiabilité sont des indices de Cornell pour les états limite de dépassement ( $X_c \geq c$ ) et de conditions favorables à l'amorçage de la corrosion ( $t_{corr} \geq t_{seuil} \mid X_c \geq c$ ), tandis qu'il s'agit de l'indice FORM généralisé pour l'état limite d'amorçage de la corrosion, qui s'écrit :

$$\beta_{G,corr} = -\Phi^{-1}\left(\Phi(-\beta_{C,t_{corr}}) \times \Phi(-\beta_{C,X_c})\right) \quad (IV.25)$$

Ville	Béton	Etat limite	Indice de fiabilité
Toulouse	C25	Dépassement $\beta_{C,X_c}$	2,96
		Condition de corrosion $\beta_{C,t_{corr}}$	4,01
		Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	5,34
	C35	Dépassement $\beta_{C,X_c}$	3,80
		Condition de corrosion $\beta_{C,t_{corr}}$	4,04
		Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	5,89
Marseille	C25	Dépassement $\beta_{C,X_c}$	1,24
		Condition de corrosion $\beta_{C,t_{corr}}$	4,11
		Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	4,60
	C35	Dépassement $\beta_{C,X_c}$	2,16
		Condition de corrosion $\beta_{C,t_{corr}}$	4,05
		Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	4,94

**Tableau IV.15. Résultats de l'analyse de fiabilité pour la classe d'exposition XC2/XC3**

L'indice de fiabilité à l'égard de la dépassement est dans tous les cas plus faible à Marseille qu'à Toulouse. On voit là l'effet d'un abaissement de l'humidité relative moyenne annuelle qui favorise la diffusion du dioxyde de carbone dans la porosité, dans la mesure où l'humidité relative moyenne reste toutefois supérieure à 60%. On note que les conditions favorables à l'amorçage de la corrosion ne sont pas fréquemment réunies, quel que soit le lieu, ce qui conduit à un indice de fiabilité  $\beta_{C,t_{corr}}$  élevé. Par conséquent, la probabilité d'amorçage de la corrosion reste très faible, avec un indice de fiabilité  $\beta_{G,corr}$  bien plus élevé que  $\beta_{C,X_c}$ , la différence entre les deux indices étant par ailleurs plus marquée à Toulouse

qu'à Marseille. Ce constat montre à quel point considérer la dépassivation comme la seule condition nécessaire à l'initiation de la corrosion est une position très sécuritaire, même si les hypothèses de calcul adoptées ont vraisemblablement été dans ce sens. L'indice  $\beta_{C,Xc}$  prend quant à lui des valeurs également fortes, conduisant dans un seul cas à une valeur inférieure à celle recommandée par le Model Code de la *fib*, soit 1.3 : à Marseille pour le béton C25. On peut donc alors raisonnablement penser que l'adoption d'une condition d'exposition moins sévère comme XC1 serait plus avantageuse.

Le Tableau IV.16 montre sans surprise que l'indice  $\beta_{C,Xc}$  est bien plus faible que dans le cas d'une classe d'exposition XC2/XC3. Si la seule dépassivation est retenue comme état limite de durabilité, l'enrobage apparaît alors nettement insuffisant pour les structures situées à Marseille. Si l'on fait cependant référence à l'état limite d'amorçage de la corrosion, l'enrobage apparaît satisfaisant.

Ville	Béton	Etat limite	Indice de fiabilité
Toulouse	C25	Dépassivation $\beta_{C,Xc}$	1,68
		Condition de corrosion $\beta_{C,tcorr}$	4,03
		Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	4,69
	C35	Dépassivation $\beta_{C,Xc}$	2,46
		Condition de corrosion $\beta_{C,tcorr}$	4,04
		Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	5,08
Marseille	C25	Dépassivation $\beta_{C,Xc}$	0,11
		Condition de corrosion $\beta_{C,tcorr}$	4,06
		Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	4,29
	C35	Dépassivation $\beta_{C,Xc}$	0,93
		Condition de corrosion $\beta_{C,tcorr}$	4,05
		Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	4,44

**Tableau IV.16. Résultats de l'analyse de fiabilité pour la classe d'exposition XC1**

Les résultats discutés ici sont intimement liés aux hypothèses de calcul admises. Ainsi la plage de taux de saturation  $[S_{rmin}, S_{rmax}]$  retenue comme favorable à la corrosion pourrait paraître assez restrictive, et de même, la durée minimale  $t_{seuil}$  à comparer à la durée cumulée  $t_{corr}$  pourrait sembler excessive. Nous avons donc procédé à une nouvelle série de calculs en supposant que  $S_{rmin}$  varie de 77% à 82%,  $S_{rmax}$  de 95% à 98% et  $t_{seuil}$  de 1 an à 4 ans. Les résultats sont indiqués dans le Tableau IV.17 pour les deux classes d'exposition.

Ville	Exposition	Béton	Etat limite	Indice de fiabilité
Toulouse	XC2/XC3	C25	Dépassivation $\beta_{C,Xc}$	2,95
			Condition de corrosion $\beta_{C,tcorr}$	2,86
			Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	4,50
		C35	Dépassivation $\beta_{C,Xc}$	3,79
			Condition de corrosion $\beta_{C,tcorr}$	2,88
			Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	5,13
	XC1	C25	Dépassivation $\beta_{C,Xc}$	1,68
			Condition de corrosion $\beta_{C,tcorr}$	2,87
			Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	3,74
C35		Dépassivation $\beta_{C,Xc}$	2,46	
		Condition de corrosion $\beta_{C,tcorr}$	2,88	
		Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	4,19	
Marseille	XC2/XC3	C25	Dépassivation $\beta_{C,Xc}$	1,22
			Condition de corrosion $\beta_{C,tcorr}$	2,86
			Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	3,50
		C35	Dépassivation $\beta_{C,Xc}$	2,13
			Condition de corrosion $\beta_{C,tcorr}$	2,91
			Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	4,01
	XC1	C25	Dépassivation $\beta_{C,Xc}$	0,11
			Condition de corrosion $\beta_{C,tcorr}$	2,88
			Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	3,12
		C35	Dépassivation $\beta_{C,Xc}$	0,93
			Condition de corrosion $\beta_{C,tcorr}$	2,89
			Amorçage de la corrosion $\beta_{G,corr}$	3,39

**Tableau IV.17. Résultats de l'analyse de fiabilité avec des conditions favorables à la corrosion plus étendues.**

On peut noter que l'indice  $\beta_{C,tcorr}$  est réduit en prenant en compte ces hypothèses, par rapport à sa valeur avec les hypothèses précédentes. Les plages de variation de  $\beta_{G,corr}$  sont ainsi [4,69, 5,89] à Toulouse, [4,29, 4,94] à Marseille, avec les hypothèses initiales et [3,74, 5,13] à Toulouse, [3,12, 4,01] à Marseille, avec les hypothèses modifiée. L'effet sur le niveau de fiabilité dû au changement d'hypothèses

est donc légèrement plus marqué à Marseille qu'à Toulouse, et par ailleurs plus marqué pour la classe d'exposition XC1 que pour la classe XC2/XC3. Il est logique de constater que, lorsque l'enrobage est plus faible, le risque d'amorçage de la corrosion est plus significativement accru si les conditions qui lui sont favorables sont plus étendues, du fait de la plus importante amplitude de la variation annuelle du taux de saturation, par rapport à celle prévalant pour un enrobage plus important.

#### IV.5.3.2. Effet des polynômes utilisés dans le chaos polynomial

Le choix des modèles de substitution  $X_c^{CP}$  et  $\Delta S_r^{CP}$  repose sur 2 facteurs : le type et le degré des polynômes. Comme nous l'avons dans la partie 4 de ce chapitre, il est préférable d'utiliser pour  $\Delta S_r^{CP}$  des polynômes d'ordre 3 combinés, dans l'estimation de  $t_{corr} | X_c \geq c$ , à des polynômes d'ordre 2 pour  $X_c^{CP}$ . Nous pouvons toutefois comparer les indices de fiabilité de Cornell  $\beta_{C,tcorr}$ , dans le cas où des polynômes d'Hermite ou de Legendre sont utilisés. Le Tableau IV.18 montre que la différence sur  $\beta_{C,tcorr}$  reste minime en fonction du type de polynôme.

Indice $\beta_{C,tcorr}$			Chaos utilisé	
Ville	Béton	Exposition	Hermite	Legendre
Toulouse	C25	XC1	4,03	4,08
		XC2/XC3	4,01	4,12
	C35	XC1	4,04	4,05
		XC2/XC3	4,04	4,03
Marseille	C25	XC1	4,06	4,03
		XC2/XC3	4,11	4,05
	C35	XC1	4,05	4,06
		XC2/XC3	4,05	4,05

**Tableau 4.18. Comparaison des indices  $\beta_{C,tcorr}$  en fonction du type de chaos**

Le Tableau IV.19 indique les valeurs de l'indice de Cornell  $\beta_{C,Xc}$  pour toutes les 4 configurations possibles du type et du degré des polynômes. On peut voir que l'indice obtenu avec des polynômes de Legendre est systématiquement plus élevé que celui obtenu avec des polynômes d'Hermite, quel que soit le degré considéré. On peut attribuer cette tendance au fait que les variables relatives aux polynômes de Legendre sont bornées, alors que celles relatives aux polynômes d'Hermite le ne sont pas. L'incidence du degré du polynôme est plus sensible pour les indices calculés à Marseille que pour ceux calculés à Toulouse. Dans le dernier cas, les valeurs sont proches. L'écart est nettement plus important dans le premier cas où l'indice de fiabilité est plus faible pour un polynôme de degré 3. Deux raisons peuvent

amener ce constat. La première est le nombre de termes, qui plus grand pour un polynôme de degré 3, ce qui induit un écart-type de la réponse plus important et donc un indice plus réduit. Mais cela aurait dû également se vérifier pour le calcul à Toulouse. La seconde est la fidélité du chaos par rapport au modèle initial sur la tendance moyenne : celle-ci est vraisemblablement reproduite en défaut avec les données d'ambiance à Marseille, ce qui se traduit par un coefficient de variation plus fort de la réponse du chaos.

Indice $\beta_{C,Xc}$			Chaos utilisé			
			Hermite		Legendre	
Ville	Béton	Exposition	p=2	p=3	p=2	p=3
Toulouse	C25	XC1	1,68	1,75	2,29	2,31
		XC2/XC3	2,92	2,97	3,68	3,73
	C35	XC1	2,46	2,67	2,64	2,67
		XC2/XC3	3,76	4,02	4,02	4,09
Marseille	C25	XC1	0,11	-0,67	1,43	0,83
		XC2/XC3	1,26	0,02	2,78	1,95
	C35	XC1	0,93	0,18	1,86	1,35
		XC2/XC3	2,15	1,07	3,21	2,61

**Tableau IV.19. Comparaison des indices  $\beta_{C,Xc}$  en fonction du type de chaos**

#### IV.5.3.3. Justification de l'approche FORM pour la dépassivation

Pour des raisons pratiques il a été choisi de recourir à une approche FORM pour l'estimation de la probabilité de défaillance. Cette approche peut s'avérer assez grossière si la surface de défaillance s'écarte sensiblement d'un hyper-plan au voisinage du point de défaillance le plus probable. Disposant des résultats de l'indice d'Hasofer-Lind pour l'état limite de dépassivation, nous pouvons justifier l'approche FORM par comparaison avec les résultats de l'indice de Cornell. La proximité des deux indices traduit en effet une forme de linéarité de la fonction de défaillance. Le Tableau IV.20 montre que cette proximité n'est pas mise en défaut même si, comme on pouvait s'y attendre, elle n'est pas parfaite. Le fait de trouver que l'indice  $\beta_{C,Xc}$  est la plupart du temps plus faible que l'indice  $\beta_{HL,Xc}$ , donne aux conclusions des commentaires précédents un caractère encore plus conservatif, puisque ces commentaires ont été établis sur la base des indices de Cornell. Le calcul de l'indice d'Hasofer-Lind n'a pas été possible pour l'état limite de condition de corrosion : une autre façon de justifier l'approche FORM aurait été dans ce cas de d'estimer directement la probabilité de défaillance sur la base de simulations de Monte-Carlo.

Justification de l'approche FORM			Chaos utilisé			
			Hermite		Legendre	
Ville	Béton	Exposition	Indice $\beta_{C,Xc}$	Indice $\beta_{HL,Xc}$	Indice $\beta_{C,Xc}$	Indice $\beta_{HL,Xc}$
Toulouse	C25	XC1	1,68	1,76	2,29	3,04
		XC2/XC3	2,92	3,35	3,68	4,13
	C35	XC1	2,46	2,97	2,64	3,99
		XC2/XC3	3,76	5,05	4,02	6,25
Marseille	C25	XC1	0,11	0,03	1,43	1,56
		XC2/XC3	1,26	1,11	2,78	3,41
	C35	XC1	0,93	0,84	1,86	2,24
		XC2/XC3	2,15	2,23	3,21	2,83

**Tableau IV.20. Comparaison des indices  $\beta_{C,Xc}$  et  $\beta_{HL,Xc}$  en fonction du type de chaos (pour  $p=2$ )**

#### IV.5.3.4. Incidence des variables sur la fiabilité à l'égard de la dépassivation

Une exploitation complémentaire liée à l'indice d'Hasofer-Lind est de pouvoir connaître les facteurs de sensibilité et les facteurs d'importance des variables sur la fiabilité, grâce aux coordonnées du point de défaillance le plus probable  $P^*$ . Les facteurs de sensibilité  $\alpha_i^*$  sont, pour des variables non corrélées dans l'espace physique  $X$ , les cosinus directeurs du vecteur  $U^*$ , soit

$$\alpha_i^* = \frac{U_i^*}{\beta_{HL}} \quad (\text{IV.26})$$

La principale information fournie par les facteurs de sensibilité est le rôle joué par les variables dans la fonction d'état limite. Lorsque  $\alpha_i^* < 0$  cela signifie que la variable  $X_i$  doit être réduite par rapport à sa valeur moyenne pour conduire à la défaillance, c'est donc une variable de type  $R$  « résistance ». Dans le cas contraire, c'est une variable de type  $S$  « sollicitation ». Pour l'ensemble des cas étudiés le rôle des variables reste identique vis-à-vis de l'état limite de dépassivation. Les variables de type  $R$  sont l'enrobage  $c$ , le rayon initial des cristaux de portlandite  $R_{p0}$ , la concentration initiale de portlandite  $n_{CH,0}$  et l'humidité relative moyenne annuelle  $H_r$  : ces variables s'opposent à l'atteinte de la défaillance. Les variables de type  $S$  sont la porosité initiale  $\phi_0$  et la température moyenne  $T_{moy}$  : ces variables contribuent à l'atteinte de la défaillance.

Les facteurs d'importance sont les carrés des facteurs de sensibilité  $\alpha_i^{*2}$  dont la somme est égale à 1. Les facteurs d'importance sont présentés dans le Tableau IV.21 dans le cas de l'utilisation des polynômes d'Hermite avec  $p=2$ . Nous n'avons pas fait figurer dans ce tableau les valeurs des facteurs de

sensibilité : ces derniers montrent cependant qu'aucune variable ne peut être écartée, sauf éventuellement  $R_{p0}$  dont le facteur de sensibilité ne dépasse pratiquement jamais 0,05 en valeur absolue.

Ville	Toulouse				Marseille			
Béton	C25		C35		C25		C35	
Exposition	XC1	XC2/XC3	XC1	XC2/XC3	XC1	XC2/XC3	XC1	XC2/XC3
$\phi_0$	0,1802	0,1901	0,1618	0,2287	0,1399	0,1734	0,0715	0,1261
$H_{r\text{moy}}$	0,2306	0,1556	0,2199	0,1127	0,3682	0,3502	0,3887	0,2828
$T_{\text{moy}}$	0,0113	0,0156	0,0174	0,0188	0,0079	0,0112	0,0123	0,0187
$n_{CH,0}$	0,0298	0,0551	0,0118	0,0201	0,0179	0,0271	0,0070	0,0123
$R_{p0}$	0,0022	0,0040	0,0022	0,0042	0,0012	0,0018	0,0011	0,0021
$c$	0,5458	0,5794	0,5876	0,6153	0,4648	0,4361	0,5191	0,5579

**Tableau IV.21. Facteurs d'importance des variables**

L'enrobage  $c$  présente l'incidence la plus forte sur la fiabilité alors que  $R_{p0}$  est la variable la moins incidente. Deux variables jouent un rôle intermédiaire en ordre alterné :  $n_{CH,0}$  et  $T_{\text{moy}}$ . L'incidence de  $n_{CH,0}$  est plus forte pour le béton C25, et plus faible pour le béton C35. L'incidence de  $H_{r\text{moy}}$  et  $\phi_0$  dépend du lieu. A Marseille la faible valeur moyenne de  $H_{r\text{moy}}$  donne à cette variable une incidence considérable : son facteur d'importance est nettement plus élevé que celui de  $\phi_0$ . A Toulouse, l'effet de ces variables dépend de la classe d'exposition, et donc de l'enrobage. Pour un faible enrobage  $H_{r\text{moy}}$  présente une incidence plus grande alors que le contraire se produit pour un enrobage important. De façon cohérente, on note que les facteurs d'importance des variables liées au matériau ( $\phi_0$ ,  $n_{CH,0}$ ,  $R_{p0}$ ) sont plus élevés lorsque l'enrobage est lui-même plus important (classe d'exposition XC3/XC3) : leur incidence sur la fiabilité dépend ainsi de l'épaisseur de matériau que doit traverser le dioxyde de carbone pour conduire à la défaillance. L'inverse prévaut pour l'humidité relative moyenne annuelle, dont le facteur d'importance est d'autant plus fort que l'épaisseur de matériau à traverser est faible (classe d'exposition XC1).

L'enrobage, la porosité initiale et l'humidité relative moyenne annuelle sont les 3 paramètres incertains majeurs dont l'incidence sur la fiabilité à l'égard de la dépassivation des armatures est la plus forte. Ce résultat corrobore sans ambiguïté le classement des variables issu des indices de Sobol pour la profondeur carbonatée. Il est clair qu'ils jouent également un rôle primordial dans l'amorçage de la corrosion, au moins de façon indirecte.

#### IV.5.3.5. Dimensionnement probabiliste

Il a été constaté sur l'ensemble des résultats précédents que la fiabilité à l'égard de la dépassivation et de l'amorçage de la corrosion n'est pas homogène en fonction notamment des conditions climatiques. Etant donné le rôle primordial que jouent la porosité et l'enrobage dans l'atteinte de l'état limite de dépassivation, il paraît assez naturel de chercher à améliorer la fiabilité par une meilleure combinaison de ces deux paramètres, c'est-à-dire par une prescription combinée de leurs valeurs moyennes ou de leurs valeurs caractéristiques. Nous proposons donc de procéder à ce dimensionnement combiné en choisissant un indice cible vis-à-vis de la dépassivation valant 1. Cette valeur a été suggérée par [HYVERT 2009] dans le cas des bétons d'usine. Il semble tout à fait pertinent de la proposer pour des bétons ordinaires dans la mesure où l'on fixe également une valeur cible pour l'indice d'amorçage de la corrosion. Nous nous sommes placé dans le cas des conditions favorables à la corrosion ( $S_{rmin}$ ,  $S_{rmax}$  et  $t_{min}$ ) dite étendues. Le problème consiste à déterminer  $\mu_{\phi_0}$  et  $\mu_c$  tels que

$$\left(\mu_{\phi_0}, \mu_c\right)_{opt} = \underset{\mu_{\phi_0}, \mu_c}{\operatorname{argmin}} \left( \begin{array}{l} \left| \beta_{C, X_c} - 1 \right| \\ \left| \beta_{G, corr} - 3,4 \right| \end{array} \right) \quad (\text{IV.27})$$

Les résultats sont très proches en fonction des bétons. Les valeurs portées dans le Tableau IV.22 sont proposées pour les deux classes de béton, et donnent au final des indices de fiabilité variant de 1 à 1,15 pour  $\beta_{C, X_c}$  et de 3,4 à 3,45 pour  $\beta_{G, corr}$ .

Moyenne $\mu_{\phi_0}$	Marseille		Toulouse	
	$\mu_c$	$c_{min, dur}$	$\mu_c$	$c_{min, dur}$
0,10	24,0	14,0	13,5	5,5
0,12	26,0	16,0	15,0	6,5
0,14	28,5	18,5	16,5	7,5
0,16	30,5	20,5	17,5	8,5
0,18	32,5	22,5	19,5	9,5
0,20	34,5	24,5	20,5	10,5

**Tableau IV.22. Valeurs optimales de la moyenne de l'enrobage (mm) en fonction de la moyenne de la porosité initiale**

Les valeurs obtenues ne sont pas liées à une classe d'exposition, mais on pourrait suggérer qu'elles correspondent à la classe XC2/XC3 (surfaces extérieures non exposées à la pluie). Les valeurs de  $c_{min, dur}$  ont été établies d'après l'équation (IV.24). La démarche de dimensionnement consiste tout d'abord à estimer la valeur moyenne de la porosité du béton d'enrobage puis à prescrire un enrobage selon l'équation (IV.23) où  $\Delta C_{dev}=10$  mm.



La porosité du béton est un indicateur de durabilité majeur, dont l'évaluation est souvent requise mais dont l'utilisation dans les modèles dits de durabilité, ainsi que dans le dimensionnement de l'enrobage, est quasi-inexistante du fait du manque d'outils pratiques. La démarche que nous proposons le permet et s'inscrit par ailleurs dans la nécessité reconnue d'orienter la conception de la durabilité des structures en béton vers une approche performantielle.

#### *IV.6. Conclusion*

Ce chapitre a permis de synthétiser, dans une optique fiabiliste de la durabilité vis-à-vis de l'amorçage de la corrosion, l'ensemble des outils et méthodes abordés et illustrés dans les chapitres précédents, au travers de leur mise en œuvre pratique.

Le point de départ a été de proposer une formulation particulière de l'état limite d'amorçage de la corrosion, reprenant l'état limite de dépassivation des armatures, généralement reconnu comme celui de l'initiation de la corrosion, et y adjoignant un état limite relatif à la durée cumulée des conditions d'humidité favorables à la corrosion. Le profil de taux de saturation, nécessaire au calcul de cette durée, varie dans le temps et dans l'espace, et doit être décrit par plusieurs fonctions des paramètres d'entrée. Il a donc été nécessaire de proposer une approche particulière nécessitant de caractériser l'amplitude de la variation et la valeur moyenne annuelles du taux de saturation.

L'analyse de sensibilité a pu alors être conduite sur la profondeur de carbonatation puis sur l'amplitude de la variation annuelle du taux de saturation. La stratégie d'analyse a été, pour la profondeur carbonatée, d'employer successivement la méthode de criblage de Morris, afin d'obtenir une première réduction de la dimension stochastique, initialement de 32 paramètres incertains, puis la méthode de Sobol pour hiérarchiser les paramètres conservés après criblage. La dimension stochastique finale a été ainsi ramenée à 4 paramètres incertains : la porosité initiale, la concentration initiale de portlandite, le rayon initial des cristaux de portlandite et l'humidité relative moyenne annuelle. Cette stratégie s'est avérée a posteriori moins coûteuse numériquement qu'une application directe de la méthode de Sobol. Concernant l'amplitude de la variation annuelle du taux de saturation, la dimension stochastique initiale étant seulement de 12 paramètres, la méthode de Sobol a été employée directement et a conduit à une dimension stochastique finale de 5 paramètres incertains : la porosité carbonatée, l'humidité relative moyenne annuelle, la variation annuelle de l'humidité relative, la température moyenne annuelle et l'enrobage.

Afin de réduire les temps de calcul et de faciliter l'analyse de fiabilité, deux modèles de substitution ont été construits par développement en chaos polynomiaux, de la profondeur carbonatée et de l'amplitude de la variation annuelle du taux de saturation. Les coefficients des chaos ont été déterminés par la méthode de régression. Les polynômes utilisés ont été des polynômes de Legendre ou d'Hermite, degré 2 ou 3. Après validation des modèles de substitution, et sur la base des résultats fiabilistes en termes d'indice de fiabilité, il s'est avéré que les polynômes d'Hermite de degré 2 pour la profondeur carbonatée, et de degré 3 pour l'amplitude de la variation annuelle du taux de saturation, étaient les plus adaptés.

L'analyse fiabiliste a été conduite pour deux bétons, deux classes d'exposition et deux localisations permettant un contraste assez net entre les données climatiques : Toulouse et Marseille. La probabilité d'amorçage de la corrosion a été déterminée par une approche FORM basée sur les indices de Cornell des états limites. Les résultats ont montré que l'indice de fiabilité relatif à la dépassivation des armatures est significativement plus faible lorsque la structure est située à Marseille. Cependant la probabilité d'amorçage de la corrosion y reste presque aussi faible qu'à Toulouse, ce qui montre le caractère très conservatif de la prise en compte du seul état limite de dépassivation comme état limite de durabilité. La détermination de l'indice de fiabilité d'Hasofer-Lind de dépassivation a pu montrer que l'approche FORM n'était pas incompatible avec le problème, et que la hiérarchisation des paramètres obtenus avec la méthode de Sobol est cohérente avec celle déduite des coordonnées du point de défaillance le plus probable.

Ce chapitre a été l'occasion de proposer un dimensionnement probabiliste combiné de l'enrobage et de la porosité initiale du béton. A partir d'un choix d'indices cibles à l'égard de la dépassivation et à l'égard de l'amorçage de la corrosion, une optimisation de l'enrobage moyen a été réalisée compte tenu d'une moyenne de la porosité. On a pu ainsi établir un ensemble de couples de valeurs moyennes, pour chacune des localisations de la structure, permettant de satisfaire à un niveau de fiabilité donné pour chaque état limite. Des prescriptions sur l'enrobage minimal de durabilité ont pu être ainsi établies qui intègrent plus directement la connaissance du matériau.

---

**CONCLUSION GÉNÉRALE**

---

La conception actuelle de la durabilité des structures en béton soumises à la carbonatation atmosphérique est principalement basée sur un ensemble de prescriptions normatives relatives aux conditions d'exposition, aux matériaux et à l'enrobage des armatures, synthétisées notamment dans l'Eurocode 2. Certaines recommandations, comme le Model Code de la *fib*, permettent de compléter ces prescriptions par l'introduction d'un état limite de durabilité dans la conception. Ce dernier reste intentionnellement conservatif car il se limite à la dépassivation des armatures, supposée se produire lorsque l'enrobage est carbonaté et constituer une condition suffisante à l'initiation de la corrosion. Il est clair cependant que d'autres conditions doivent exister, avec une fréquence minimale ou pendant une durée cumulée minimale, pour que la corrosion s'amorce réellement, comme la présence d'oxygène et d'humidité. Afin d'améliorer la conception il convient d'une part de poursuivre l'enrichissement de la modélisation des phénomènes mis en jeu, et d'autre part de définir de façon plus précise les états limites de durabilité successifs que sont la dépassivation des armatures puis l'amorçage de la corrosion. La démarche doit tenir compte des incertitudes qui affectent les propriétés des matériaux, la géométrie, l'environnement ou encore la modélisation.

Notre travail a contribué à avancer sur cette problématique, en la plaçant dans un cadre stochastique.

Parmi les modélisations antérieures de la carbonatation, rappelées dans le Chapitre 1, nous nous sommes focalisé sur celle proposée par Bary & Sellier, dont nous avons repris les équations dans le Chapitre II. Nous avons enrichi la modélisation en y ajoutant l'effet de la température, tant par l'équation de transfert que par des termes de thermo-activation venant modifier les grandeurs de diffusion de dioxyde de carbone et des ions calcium en phase liquide, la solubilité des hydrates, la viscosité de l'eau ainsi que l'isotherme hydrique. Des conditions aux limites variables en température et humidité relative ont été également introduites sur la base d'une chronique climatique annuelle typique à pas quotidiens, déduite de moyennes horaires sur 30 ans. Il a été montré que la simulation reste satisfaisante si les conditions aux limites sont moyennées sur 30 jours, au lieu de les considérer quotidiennement, et que le temps de calcul en est considérablement réduit. Parallèlement, ce pas de calcul est suffisamment long pour pouvoir admettre l'hypothèse que la température du béton dans l'épaisseur d'enrobage est homogène et égale à la température extérieure moyenne sur le pas. Nous avons mis en évidence que la diffusion des ions calcium dans la solution interstitielle reste négligeable, même en choisissant des conditions favorables à leur migration, et peut être remplacée par une hypothèse d'équilibre chimique local du calcium. Le modèle allégé de l'équation de la chaleur et de celle de diffusion des ions calcium, présente néanmoins 32 paramètres potentiellement incertains et donnant une dimension stochastique significative.

Conserver une telle dimension stochastique aurait été pénalisant pour procéder à une analyse fiabiliste, avec un couplage direct entre le modèle développé et les algorithmes probabilistes. Nous avons donc présenté dans le Chapitre III, les méthodes d'analyse de sensibilité, qui visent à établir la dimension stochastique effective, ainsi que les méthodes de construction de modèles de substitution (ou méta-modèles) en remplacement des modèles numériques initiaux pour le calcul des états limites à considérer dans l'analyse fiabiliste.

L'analyse de sensibilité a été conduite dans le Chapitre IV sur 2 sorties scalaires indirectes du modèle de carbonatation, entrant dans la définition des états limites de durabilité. La première est la profondeur carbonatée, déduite du profil de portlandite dans le matériau, en considérant qu'elle correspond à la profondeur au-delà de laquelle la concentration de portlandite résiduelle n'est plus que de 60%, 70% ou 80% de la concentration initiale. La seconde est l'amplitude de la variation annuelle cyclique du taux de saturation, apparaissant pour une profondeur donnée après un certain temps de stabilisation. Connaissant le taux de saturation moyen, il est possible alors de décrire la variation temporelle du taux de saturation. Dans le cas de la profondeur carbonatée la stratégie choisie pour l'analyse de sensibilité a été d'appliquer en premier lieu la méthode de criblage de Morris avec l'ensemble des 32 paramètres incertains du modèle de carbonatation, puis d'appliquer la méthode de Sobol sur les 14 paramètres criblés, considérés comme influents sur la sortie du modèle. Au final, 5 paramètres incertains ont été retenus comme variables aléatoires : la porosité initiale du béton, la concentration initiale de portlandite, le diamètre équivalent des cristaux de portlandite, l'humidité relative extérieure moyenne annuelle et la température extérieure moyenne annuelle. Cette sélection corrobore bien l'effet connu par ailleurs de ces paramètres sur la carbonatation. Dans le cas de l'amplitude de la variation annuelle cyclique du taux de saturation, dépendant de seulement 12 paramètres potentiellement incertains, la méthode de Sobol a été appliquée immédiatement pour aboutir à la sélection de 4 variables aléatoires : la porosité initiale du béton, l'humidité relative extérieure moyenne annuelle, la température extérieure moyenne annuelle et la variation annuelle d'humidité relative extérieure. Notons qu'une alternative à l'estimation classique des indices de Sobol par simulations de Monte-Carlo a été employée, qui a permis de réduire significativement le nombre d'appels au modèle.

Les modèles de substitution, basés sur un développement en chaos polynomiaux de chacune des sorties du modèle de carbonatation, ont été construits à partir de plans d'expérience aléatoires obtenus selon des tirages par hyper-cube latin des variables, auxquelles a été adjoint le temps d'exposition. Le calcul des coefficients a été obtenu par régression sur les points du plan d'expérience. Des polynômes de Legendre et des polynômes d'Hermite ont été utilisés, de degré 2 et de degré 3. La comparaison du

modèle de substitution pour la profondeur de carbonatation, avec le modèle original, a été jugée satisfaisante dans le cas des polynômes de degré 2, quelle que soit le temps d'exposition considéré, mais a révélé dans le cas des polynômes de degré 3 que le modèle de substitution, bien qu'étant proche du modèle original à une échéance de 50 ans, s'en écartait sensiblement pour les échéances inférieures à 15 ans, ou supérieures à 80 ans.

Grâce aux modèles de substitution constitués, il a possible d'envisager plus aisément une analyse de fiabilité. Les états limites de durabilité retenus ont été d'une part le dépassement de l'enrobage par la profondeur carbonatée, et d'autre part le dépassement d'une durée minimale par la durée cumulée d'exposition à des conditions favorables à la corrosion, déterminée au niveau de la profondeur d'enrobage, supposée carbonatée, et sur la base la variation temporelle du taux de saturation. La combinaison en parallèle de ces deux états limites constitue l'état limite d'amorçage de la corrosion. La probabilité d'amorçage de la corrosion a été estimée à partir d'une approche FORM basée sur les indices de Cornell des états limites. Afin de souligner l'importance des conditions climatiques quant à la fiabilité à l'égard de la durabilité, l'analyse fiabiliste a été conduite pour deux bétons, deux classes d'exposition et deux localisations permettant un contraste assez net entre les données climatiques : Toulouse et Marseille. Il a été montré pour les structures localisées à Marseille que la probabilité de dépassivation des armatures y est plus élevée. La probabilité d'existence suffisamment prolongée de conditions d'humidité favorables à la corrosion restant faible pour les deux localisations, il ressort que la probabilité d'amorçage de la corrosion y est faible également. Ce constat montre le caractère très conservatif de l'assimilation de l'état limite de dépassivation des armatures à celui d'initiation de la corrosion. Les facteurs de sensibilité déterminés à partir des coordonnées du point de défaillance le plus probable, après calcul de l'indice d'Hasofer-Lind pour l'état limite de dépassivation, ont corroboré les résultats de la méthode de Sobol, et ont montré que l'incidence sur la fiabilité des paramètres liés au matériau est d'autant plus forte que l'épaisseur d'enrobage est large. Ce résultat confirme, s'il en était besoin, que la porosité du béton joue un rôle majeur à l'égard de la carbonatation de l'enrobage, presque au même titre que l'enrobage lui-même. Nous avons donc proposé un dimensionnement probabiliste combiné de l'enrobage et de la porosité, en déterminant les couples de leurs valeurs moyennes qui satisfont à des niveaux de fiabilité donnés vis-à-vis de la dépassivation et de l'amorçage de la corrosion. Les résultats sont différents par localisation de la structure mais identiques pour les deux bétons. Il s'agit d'une démarche originale car elle permet de tenir compte explicitement de la porosité dans le dimensionnement de l'enrobage.

---

## RÉFÉRENCES

---

- [ABRAMOWITZ et al., 1970] ABRAMOWITZ.M., STEGUN.I. 1970. « Handbook of mathematical functions ». Dover Publications, New York.
- [ADENOT, 1992] ADENOT.F. 1992. « Durabilité des bétons : Caractérisation et modélisation des processus physiques et chimiques de dégradation du ciment ». PhD thesis of the University of Orléans 1992 (in French).
- [ANDRIAMIHAJA, 2009] ANDRIAMIHAJA.M.F. 2009. « Conception d'un code de calcul d'analyse de sensibilité ». Thèse de doctorat, l'Université d'Antananarivo.
- [ANN et al., 2010] ANN.K.Y., PACK.S.W., HWANG.J.P., SONG.H.W., KIM.H.S. 2010. « Service life prediction of a concrete bridge structure subjected to carbonation ». *Construction and Building Materials* 24 (2010) 1494–1501.
- [ARUP, 1983] ARUP. 1983. « The mechanisms of protection of steel by concrete, in Crane, A.P., ed., *Corrosion of Reinforcement in Concrete Construction* ». Society of chemical industry, Ellis Horwood Limited.
- [AUROY, 2015] AUROY.M. 2015. « Impact de la carbonatation sur les propriétés de transport d'eau des matériaux cimentaires ». Thèse de doctorat de l'Université Paris-Est.
- [BAROTH, 2005] BAROTH.J. 2005. « Analyse par EFS de la propagation d'incertitudes à travers un modèle mécanique non linéaire ». Thèse de l'université Clermont II.
- [BARY et al., 2004] BARY.B., SELIER.A. 2004. « Coupled moisture-carbon dioxide-calcium transfer model for carbonation of concrete ». *Cement and Concrete Research* , vol.34, no10, pp.1859 -1872.
- [BARY, 2005] BARY.B. 2005. « Simulation de la carbonatation des matériaux cimentaires de la barrière ouvragée andra en conditions insaturées ». RT DPC/SCCME 05-702-A.
- [BARY et al., 2006] BARY.B., MÜGLER.C. 2006. « Simplified modelling and numerical simulations of concrete carbonation in unsaturated conditions ». *REGC*, vol.9/10, pp.1049-1072.
- [BAROGHEL et al., 1994] BAROGHEL. BONNY. 1994. « Water vapour sorption experiments on hardened cementitious materials », *Cement and Concrete Research*.
- [BAROGHEL et al., 1999] BAROGHEL.B.V., MAINGUY.M., LASSABATERE.T., COUSSY.O. 1999. « Characterization and identification of equilibrium and transfer moisture properties for ordinary and high-performance cementitious materials ». *Cement and Concrete Research*. 29, 1225–1238.



- [BAKKER, 1993] BAKKER.R. 1993. « Model to calculate the rate of carbonation in concrete under different climatic conditions ». Technical report, CMIJ by Laboratorium, Imuiden, The Netherlands.
- [BAZANT et al., 1972] BAZANT.Z.P., NAJJAR.L.J. 1972. « Nonlinear water diffusion in nonsaturated concrete ». *Mat. Struct.* 5 (25), 3 –20.
- [BERVEILLER, 2005] BERVEILLER.M. 2005. « Eléments finis stochastiques : approches intrusive et non intrusive pour des analyses de fiabilité ». Thèse de doctorat, Université B. Pascal, Clermont-Ferrand.
- [BERVEILLER et al., 2006] BERVEILLER.M., SUDRET.B., LEMAIRE.M. 2006. « Stochastic finite elements : a non intrusive approach by regression », *Eur. J. Comput. Mech.*, vol. 15, n° 1-3, p. 81-92.
- [BIER et al., 1987] BIER.T.A., KROPP.J., HILSDORF.H.K. 1987. “Carbonation and realcalinisation of concrete and hydrated cement paste”. *Durability of Construction Materials*. J.C. Maso ed. London-New York, Chapman and Hall, 927-934.
- [BLATMAN et al., 2008] BLATMAN.G., SUDRET.B. 2008. « Sparse polynomial chaos expansion and adaptive stochastic finite element using a regression approach ». *Comptes rendus de Mécanique*, 336(6), 518–523.
- [BLATMAN, 2009] BLATMAN.G. 2009. « Adaptive sparse polynomial chaos expansions for uncertainty propagation and sensitivity analysis ». Thèse de doctorat, Université Blaise Pascal - Clermont II.
- [BREITUNG, 1984] BREITUNG.K. 1984. « Asymptotic approximation for multinormal integrals ». *Journal of Engineering Mechanics ASCE*, 110, p. 357-366.
- [CAMPOLONGO et al., 1999] CAMPOLONGO.F., ROGER BRADDOCK.R. 1999. « The use of graph theory in the sensitivity analysis of the model output:a second order screening method ». *Reliability Engineering and System Safety* 64 : 1–12.
- [CAMPOLONGO et al., 2007] CAMPOLONGO.F., CARIBONIE., SALTELLI.A. 2007. « An effective screening design for sensitivity analysis of large models ». *Environmental Modelling & Software*, 22, p.1509-1518.
- [CASIATI et al., 1991] CASIATI.F., NEGRI.I., RACKWITZ.R. 1991. « Geometrical variability in structural members and systems ». *JCSS Working Document*, January 1991.
- [CHAUSSADENT, 1999] CHAUSSADENT. 1999. « Etat des lieux et réflexions sur la carbonatation du béton armé. Etudes et Recherche des Laboratoires des Ponts et Chaussées ». *Laboratoire Central de Ponts et Chaussées*.

- [CHEN et al., 2008] CHEN., MAHADEVAN. 2008. « Chloride-induced reinforcement corrosion and concrete cracking simulation ». *Cement et Concrete Composites*.
- [CORNELL, 1969] CORNELL.C.A.1996. « A probability-based structured code ». *Journal of the American Concrete Institute*, vol 66, n°12, pp 974-985.
- [COWIE et al.,1992] COWIE., GLASSER. 1992. « The reaction between cement and natural waters containing dissolved carbon dioxide ». *Advances in Cement Research*.
- [DANCKWERTS, 1970] DANCKWERTS. 1970. « Gas-Liquid Reaction ». McGraw-Hill Book Company, New York.
- [DEBY, 2008] DEBY.M.F. 2008. « Approche probabiliste de la durabilité des bétons en environnement Marin ». Thèse de doctorat, l'Université Toulouse III – Paul Sabatier.
- [DITLEVSEN et al., 1996] DITLEVSEN.O., MADSEN.H. 1996. « Structural reliability methods ». J.Wiley & Sons, Chichester.
- [DROUET, 2010] DROUET.E. 2010. « Impact de la température sur la carbonatation des matériaux cimentaires : prise en compte des transferts hydriques. » Thèse de l'ENS Cachan.
- [DUNSTER, 1989] DUNSTER.A.M. 1989. « An investigation of the carbonation of cement paste using trimethylsilylation. » *Advances in Cement Research*, 2(7), 99-106.
- [DUPRAT, 2007] DUPRAT.F. 2007. « Reliability of RC beams under chlorides ingress ». *Construction and Building Materials*, 21,p. 1605-1616.
- [DUPRAT et al., 2010] DUPRAT.F., SELLIER.A., NGUYEN.X.S., PONS.G. 2010. « The projection gradient algorithm with error control for structural reliability ». *Engineering Structures* 32, 3725–3733.
- [DUPRAT et al., 2012] DUPRAT.F., SCHOEFS.F., SUDRET.B. 2012. « Surfaces de réponses physiques et polynomiales », Chap. 7, *Fiabilité des ouvrages*, Ed. Lavoisier, p. 165-189.
- [DURACRETE, 2000] Brite Euram III – Project BE95-1347, Final Report, Ed. EU, 2000.
- [DUVAL, 1992] DUVAL. 1992. « La durabilité des armatures et du béton d'enrobage », dans « La durabilité des bétons », Collection de l'ATHIL, Presse de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Paris.
- [EITEL, 1966] EITEL. 1966. « Silicate Science ». Academic Press, New York.
- [EI HASSAN, 2010] EI HASSAN.J. 2010. « Evaluation fiabiliste de l'impact des facteurs climatiques sur la corrosion des poutres en béton armé – Application au cas libanais ». Thèse de doctorat, Université Blaise Pascal Clermont-Ferrand.

- [ENEVOLDSEN et al., 1994] ENEVOLDSEN., HANSSON. 1994. « The influence of internal relative humidity on the rate of corrosion of steel embedded in concrete an mortar ». Cement and Concrete Research.
- [EUROCODES 2004] Eurocodes Structuraux – Base de calcul des structure, NF EN 1990-1, 1990.
- [FAUCON et al., 1998] FAUCON.P., ADENOT.F., JACQUINOT.J.F., PETIT.J.C., CABRILLAC.R., JORDA.M. 1998. « Long-term behaviour of cement pastes used for nuclear waste disposal: review of physico – chemical mechanisms of water degradation ». Cem. Concr. Res. 28 (6), 847–857.
- [FIB 2006] International Federation of Structural Concrete (IFSC-*fib*), Model Code for Service Life Design, Ed. IFCS, Lausanne, 2006.
- [FIB 2012] International Federation of Structural Concrete (IFSC-*fib*), Model Code 2010, Ed. IFCS, Lausanne, 2012.
- [GENUCHTEN, 1980] VAN GENUCHTEN.M.T. 1980. « A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils ». Soil Sci. Soc. Am. Proc., 44, pages 892-898.
- [GRESHAM et al., 1995] GRESHAM.A., SOBOL.I. 1995. « On an alternative global sensitivity estimators ». In: Proceedings of SAMO, Belgirate, 40-42.
- [GROVES et al., 1990] GROVES.G.W., RODWAY.D.I., RICHARDSON.I.G. 1990. « The carbonation of hardened cement pastes ». Advances in Cement Research, Vol. 3, pp. 117-125.
- [GUIGLIA et al., 2013] GUIGLIA.M., TALIANO.M. 2013. « Comparison of carbonation depths measured on in-f eld exposed existing r.c. structures with predictions made using f b-Model Code 2010 ». Cement & Concrete Composites 38 (2013) 92–108.
- [GULIKERS, 2005] GULIKERS. 2005. « Theoretical considerations on the supposed linead relationship between concrete resistivity and corrosion rate of steel reinforcement ». Materials and Corrosion.
- [HALTON, 1960] HALTON.J.H. 1960. « On the efficiency of certain quasi-random sequences of point sequence ». Numerical Mathematics, 2 : 84–90.
- [HAMZA et al., 2012] HAMZA.S., COLLIN.A.F., RIMYALEGDO.K., BASSET.M. 2012. « Analyse de sensibilité basée sur les polynômes du chaos pour des modèles de type boîte noire ». Conférence Internationale Francophone d'Automatique, CIFA 2012, Grenoble : France.
- [HAN et al., 2013] HAN.S.H., PARK.W.S., YANG.E.I. 2013. « Evaluation of concrete durability due to carbonation in harbor concrete structures ». Construction and Building Materials 48, 1045–1049.

- [HASOFER et al., 1974] HASOFER.A.M., LIND.N.C. 1974. « An exact and invariant first order reliability format ». *Journal of Engineering Mechanics*, vol 100, pp 111-121.
- [HOMMA et al., 1995] HOMMA.T., SALTELLI.A. 1995. « Use of sobol's quasirandom sequence generator for integration of modified uncertainty importance measure ». *Journal of Nuclear Science and Technology*, 32(11) :1164–1173.
- [HOMMA et al., 1996] HOMMA.T., SALTELLI.A. 1996. « Importance measures in global sensitivity analysis of non linear models ». *Reliability Engineering and System Safety*, 52 : 1-17.
- [HUET et al., 2007] HUET.B., L'HOSTIS.V., SANTARINI.G., FERON.D., IDRISSE.H. 2007. « Steel corrosion concrete : determinist modelling of cathodic reaction as a function of water saturation degree. » *Corrosion Science*, 49, 1918-1932.
- [HYVERT, 2009] HYVERT. 2009. « Application de l'approche probabiliste à la durabilité des produits préfabriques en béton ». Thèse de l'Université Paul Sabatier – Toulouse III.
- [ISHIDA et al., 2007] ISHIDA.T., MAEKAWA.K., KISHI.T. 2007. « Enhanced modeling of moisture equilibrium and transport in cementitious materials under arbitrary temperature and relative humidity history ». *Cement and Concrete Research*. 37: 565–578.
- [JAAFAR, 2003] JAAFAR. 2003. « Influence de la carbonatation sur la porosité et la perméabilité des bétons ». Mémoire de D.E.A, Université de Marne la Valles.
- [JANON, 2012] JANON.A . 2012. « Analyse de sensibilité et réduction de dimension. Application à l'océanographie ». Thèse de doctorat, l'université de Grenoble.
- [JACQUES, 2005] JACQUES.J. 2005. « Contributions à l'analyse de sensibilité et à l'analyse discriminante généralisée ». Thèse de doctorat, l'Université Joseph Fourier - Grenoble 1.
- [JCSS 2000] Joint Committee of structural safety, Probabilistic Model Code, document accessible sur [www.jcss.ethz.ch](http://www.jcss.ethz.ch), 2001.
- [JOHANNESSON, 1997] JOHANNESSON.B.F. 1997. « Nonlinear transient phenomena in porous media with special regard to concrete and durability ». *Adv. Cem. Based Mater.* 6, 71– 75.
- [KING et al., 2013] KING.D.M., PERERA.B.J.C. 2013. « Morris method of sensitivity analysis applied to assess the importance of input variables on urban water supply yield – A case study ». *Journal of Hydrology* 477 (2013) 17–32.
- [LANDOLT, 1993] LANDOLT. 1993. « Corrosion et chimie de surface des métaux ». Presse polytechniques et universitaires romandes.

[de LARRARD, 2010] de LARRARD.T. 2010. « Variabilité des propriétés du béton : caractérisation expérimentale et modélisation probabiliste de la lixiviation ». Thèse de Doctorat de l'Ecole normale supérieure de Cachan.

[de LARRARD et al., 2013] de LARRARD.T., BARY.B., ADAM.E., KLOSS.F. 2013. « Influence of aggregate shapes on drying and carbonation phenomena in 3D concrete numerical samples ». *Computational Materials Science*, 72, 1-14.

[de LARRARD et al., 2014] de LARRARD.T., BASTIDAS.A.E., DUPRAT.F., SCHOEFS.F. 2014. « Effects of climate variations and global warming on the durability of RC structures subjected to carbonation ». *Civil Engineering and Environmental Systems*, 31:2, 153-164.

[LEMAIRE, 1998] LEMAIRE.M. 1998. « Eléments finis et fiabilité : un mariage à la mode ». *Fiabilité des Matériaux et des Structures*, pages 95–112.

[LEMAIRE et al. 2005] LEMAIRE.M., CHATEAUNEUF.A., MITEAU.J.C. 2005. « Fiabilité des structures », Ed. Lavoisier.

[LIANG et al., 2002] LIANG.M.T., QU.W., LIANG.C.H. 2002. « Mathematical modeling and prediction method of concrete carbonation and its applications ». *Journal of Marine Science and Technology*, Vol. 10, No. 2, pp. 128-135.

[LIU et al., 1991] LIU.P.L., Der KIUREGHIAN.A. 1991. « Optimization algorithms for structural reliability ». *Structural Safety*, 9, p. 161-177

[LIU et al., 1996] LIU.P.L., WEYERS. 1996. « Modeling the time to corrosion cracking of the cover concrete in chloride contaminated reinforced concrete structures ». Ph.D Dissertation, Blacksburg Virginia.

[LOO, 1994] LOO et al., 1994. « A carbonation prediction model for accelerated carbonation testing of concrete ». *Magazine of Concrete Research*.

[MAHADEVAN et al., 2003] MAHADEVAN.S., REBBA.R. 2003. « Computational model validation under uncertainty ». *Applications of Statistics and Probability in Civil Engineering*, pages 345–351.

[MAI-NHU, 2013] MAI-NHU.J. 2013. « Corrosion des armatures du béton : couplage carbonatation/chlorures en présence de cycles hydriques ». Thèse de l'Université de Toulouse.

[MAINGUY et al., 2000] MAINGUY.M., TOGNAZZI.C., TORRENTI.J.M., ADENOT.F. 2000. « Modelling of leaching in pure cement paste and mortar ». *Cem. Concr. Res.* 30, 83– 90.

- [MAINGUY et al., 2001] MAINGUY.M., COUSSY.O., BAROGHEL.B.V. 2001. « Role of air pressure in drying of weakly permeable materials ». J. Eng. Mech. 127(6), 582– 592.
- [MAÎTRE et al., 2001] MAITRE.O., KNIO.O., NAJM.H., GHANEM.R., 2001. « A stochastic projection method for fluid flow – I. Basic formulation », J. Comput. Phys., vol. 173,p. 481-511.
- [Mc GREGOR et al., 1983] Mc GREGOR.J.G., MIRZA.S.A., ELLINGWOOD.B. 1983. « Statistical analysis of reinforced and prestressed concrete members ». ACI Structural Journal, 80, p. 167-176.
- [MCKAY et al., 1979] MCKAY.M.D., BECKMAN.R., CONOVER.W. 1979. « A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code ». Technometrics, 21(2) : 239–245.
- [MCKAY, 1995] MCKAY.M.D. 1995. « Evaluating prediction uncertainty ». Technical Report NUREG/CR-6311, US Nuclear Regulatory Commission and Los Alamos National Laboratory.
- [MIRAGLIOTTA, 2000] MIRAGLIOTTA.R. 2000. “Modélisation des processus physico-chimiques de la carbonatation des bétons préfabriqués. Prise en compte des effets de parois. » Thèse de l’Université de La Rochelle.
- [MOOREHEAD, 1986] MOOREHEAD. 1986. « Cementation by the carbonatation of hydrated lime ». Cement and Concrete Research.
- [MORRIS, 1999] MORRIS.M.D. 1999. « Factorial sampling plans for preliminary computational experiments ». Technometrics 33 : 161–174.
- [NASSER, 2010] NASSER. 2010. « La corrosion des aciers dans le béton à l’état passif et par carbonatation : Prise en compte des courants galvaniques et des défauts d’interface acier-béton ». Thèse de Doctorat de l’Université de Toulouse.
- [NGALA et al., 1997] NGALA., PAGE. 1997. « Effects of carbonatation on pore structure and diffusional properties of hydrated cement pastes ». Cement and Concrete Research.
- [NGUYEN S.X, 2007] NGUYEN S.X, 2007. « Algorithmes probabilistes appliqués à la durabilité et à la mécanique des ouvrages de génie civil ». Thèse de doctorat, l’Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse
- [NISCHER, 1984] NISCHER. 1984. « Effect of environment and concrete quality on carbonatation ». Betonwerk+Fertigteil-Technik.
- [ÖSTLUND, 1991] ÖSTLUND.L. 1991. « An estimation of  $\gamma$ -values, Comité Euro-international du béton ». BI 202, p. 37-97.

- [OWEN, 1995] OWEN.A. 1995. « Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing, chapter Randomly Permuted (t,m,s)-Nets and (t,s)-Sequences ». New York : Springer-Verlag, Niederreiter,H. and Shiue,P.J.-S. (Eds).
- [PAPADAKIS et al., 1991] PAPADAKIS.V.G., VAYENAS.C.G., FARDIS.M.N. 1991. « Physical and chemical characteristics affecting the durability of concrete ». ACI Mater J. 8(2):186–195
- [PARK, 2008] PARK.D.C. 2008. « Carbonation of concrete in relation to CO<sub>2</sub> permeability and degradation of coatings ». Construction and Building Materials. 22: 2260–2268.
- [PERRATON, 1992] PERRATON.D. 1992. « La perméabilité aux gaz des bétons hydrauliques ». Thèse de l'INSA de Toulouse.
- [PIHLAJAVAARAM, 1968] PIHLAJAVAARAM. 1968. « Somme results of the effect of carbonatation on the porosity and pore size distribution of cement pastes ». Materials and Structures.
- [POYET et al., 2009] POYET.S., CHARLES. S. 2009. « Temperature dependence of the sorption isotherms of cement-based materials : Heat of sorption and Clausius–Clapeyron formula ». Cement and Concrete Research. 39: 1060–1067.
- [RIAHI, 2013] RIAHI.H. 2013. « Analyse de structures à dimension stochastique élevée : application aux toitures bois sous sollicitation sismique ». Thèse de doctorat, l'université Blaise Pascal – Clermont II.
- [RGUIG, 2005] RGUIG.M. 2005. « Méthodologie des surfaces de réponse pour l'analyse en fiabilité des plates-formes pétrolières offshore fissurées ». Thèse de doctorat, l'université de Nantes.
- [RUANO et al., 2012] RUANO.M.V., RIBES.J., SECO.A., FERRER.J. 2012. « An improved strategy based on trajectory design for application of the Morris method to systems with many input factors ». Environmental Modelling & Software, 37, p.103-109.
- [SAETTA et al., 1995] SAETTA.A.V., SCHREFLER.B.A., VITALIANI.R.V. 1995. « 2-D model for carbonation and moisture / heat flow in porous materials ». Cement and Concrete Research, Vol 25, n°8, pp. 1703-1712.
- [SAETTA et al., 2004] SAETTA.A.V., VITALIANI.R.V. 2004. « Experimental investigation and numerical modeling of carbonation process in reinforced concrete structures - Part I : theoretical formulation ». Cement and Concrete Research, vol.34, no4, pp. 571-579.
- [SAEKI et al., 1991] SAEKI.T., OHGA.H., NAGATAKI.S. 1991. « Mechanism of carbonation and prediction of carbonation process of concrete ». Concr Libr JSCE. 6:17-23.
- [SALTELLI, 2000] SALTELLI.A., CHAN.K., SCOTT.E.M. « Sensitivity Analysis ». Wiley, 2000.

- [SANTIAGO et al., 2012] SANTIAGO.J., CORRE.B., BRUNO.M.C., SERGENT.M. 2012. « Improved sensitivity through Morris extension ». *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 113 : 52-57.
- [SAUMAN et al., 1972] SAUMAN.Z., LACH.V. 1972. « Long term carbonation of the phases  $3\text{CaO}.\text{Al}_2\text{O}_3.6\text{H}_2\text{O}$  and  $3\text{CaO}.\text{Al}_2\text{O}_3.\text{SiO}_2.4\text{H}_2\text{O}$  ». *Cement and concrete Research*, 2(4), 453-446.
- [SCHOUTENS, 2000] SCHOUTENS.W. 2000. « Stochastic Processes and Orthogonal Polynomials ». Springer-Verlag, New York.
- [SILVA, 2004] SILVA.R.C. 2004. « Contribution à l'analyse probabiliste des ponts en béton armé ». Thèse de doctorat, ENPC, 2004.
- [SOBOL, 1993] SOBOL.I.M. 1993. « Sensitivity estimates for nonlinear mathematical model ». *Mathematical Modelling and Computational Experiments*, 1 : 407 – 414.
- [SOIZE et al., 2004] SOIZE.C., GHANEM.R. 2004. « Physical systems with random uncertainties : chaos representations with arbitrary probability measure », *SIAM J. Sci. Comput.*, vol. 26, n° 2, p. 395-410.
- [SUDRET et al., 2005] SUDRET.B., BERVEILLER.M., LEMAIRE.M. 2005. « A stochastic finite element procedure for moment and reliability analysis ». *Revue européenne des éléments finis*.
- [SUDRET et al., 2012] SUDRET.B., BLATMAN.G., BERVEILLER.M. « Surfaces de réponse par chaos polynomial ». Chapitre 8, *Fiabilité des ouvrages*, Ed. Lavoisier.
- [SWENSON et al., 1968] SWENSON., SEREDA. 1968. « Mechanisme of the carbonation shrinkage of lime and hydrated ». *J. appl. Chem*.
- [TARANTOLA, 2000] TARANTOLA.S. 2000. « Quantifying uncertainty importance when inputs are correlated ». In *Foresight and Precaution Conference (ESREL)*, Edinburgh (UK).
- [THIERY, 2005] THIERY.M. 2005. « Modélisation de la carbonatation atmosphérique des bétons - Prise en compte des effets cinétiques et de l'état hydrique ». Thèse de Doctorat de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- [THIERY et al., 2007] THIERY.M., VILLAIN.G., GOYER.S., PLATRET.G., CLEMENT.J.L. 2007. « Exemple d'application d'un modèle de carbonatation in situ ». HAL Id: hal-0035047.
- [THIERY et al., 2012] THIERRY.M., BAROGHEL.B.V., ORCESI.A., 2012. « Durability design of reinforced concrete structures submitted to carbonation by using an probabilistic modeling ». *Concrete Repair, Rehabilitation and Retrofitting III (ICRRR 12)*, 148-149.



- [TUUTTI, 1982] TUUTTI. 1982. « Corrosion of steel in concrete ». Swedish Cement and Concrete, Research Institute, Stockholm, Sweden.
- [VAN BALEN, 1994] VAN BALEN.K., VAN GEMERT.D. 1994. « Modelling lime mortar carbonation. » Materials and Structure. 27(7):393–401.
- [VERBECK, 1958] VERBECK. 1958. « Carbonatation of hydrated Portland cement ». ASTM Special Publication.
- [VENUAT et al., 1968] VENUAT., ALEXANDRE. 1968. « De la carbonatation du béton ». Publication du CERILH n<sup>o</sup>639.
- [VILLAIN et al., 2001] VILLAIN.G., BAROGHEL-BOUNY.V., KOUNKOU.C., HUA.C. 2001. « Mesure de la perméabilité aux gaz en fonction du taux de saturation des bétons ». Revue Européenne de Génie Civil, 5/2-3, 251-268.
- [VU, 2011] VU.N.T. 2011. « Contribution à l'étude de la corrosion par carbonatation du béton armé : approche expérimentale et probabilité ». Thèse de Doctorat de l'Université de Toulouse.
- [WIENER, 1938] WIENER.N. 1938. « The homogeneous chaos ». American Journal of Mathematics, 60(4), 897–936.
- [XIU et al., 2003] XIU.D., KARNIADAKIS.G. 2003. « Modeling uncertainty in flow simulations via generalized polynomial chaos ». Journal of Computational Physics, 187(1), 137–167.
- [YING YU et al., 1987] YING YU.L., QUI DONG.W. 1987. « The mechanism of carbonation of mortars and the dependance of carbonation on pore structure. » ACI-SP 100, concrete Durability, 1915-1943.

---

**ANNEXES**

---

*Annexe A : Classe d'exposition dans la norme NF EN 206-1*

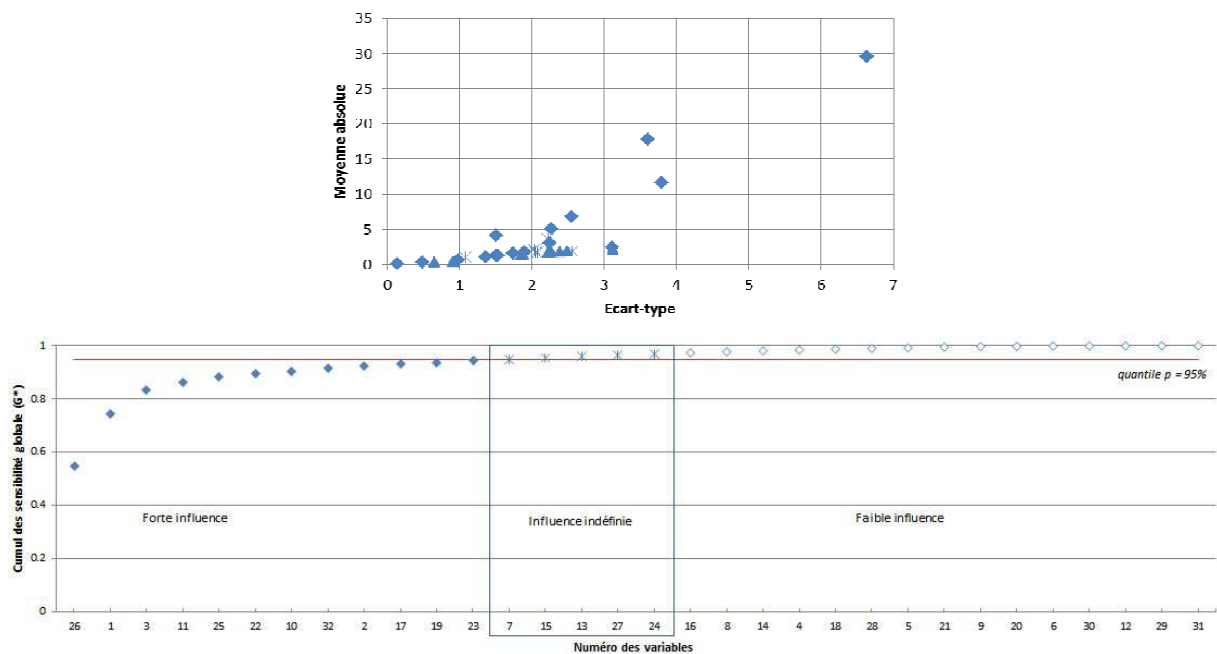
<b>Corrosion induite par carbonatation</b>		
<b>Désignation de la classe</b>	<b>Description de l'environnement</b>	<b>Exemples informatifs illustrant le choix des classes d'exposition</b>
<i>XC1</i>	Sec ou humide en permanence	Béton à l'intérieur de bâtiments où le taux d'humidité de l'air ambiant est faible.
<i>XC2</i>	Humide, rarement sec	Surface de béton soumises au contact à long terme de l'eau. Un grand nombre de fondations.
<i>XC3</i>	Humidité modérée	Béton à l'intérieur de bâtiments où le taux d'humidité de l'air ambiant est moyen ou élevé
<i>XC4</i>	Alternance d'humidité et de séchage	Surface soumises au contact de l'eau, mais n'entrant pas dans la classe d'exposition <i>XC2</i>

## Annexe B : Incidence du nombre de trajectoires dans la méthode de Morris pour la sortie $X_c$ du modèle de carbonatation

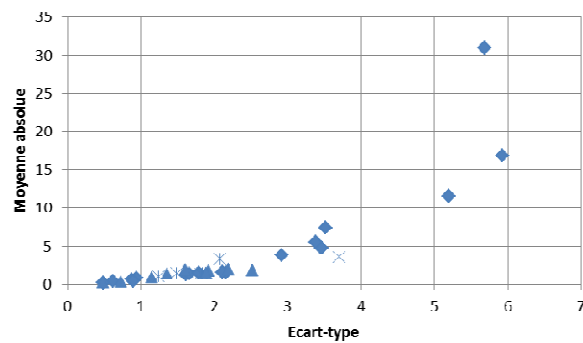
Les courbes suivantes montrent les nuages de points (moyenne absolue  $\mu^*_i$ , écart-type  $\sigma_i$ ) avec distinction de la classe d'influence des variables ainsi que leur classement en fonction de la sensibilité globale ( $G^*_i$ ). Les résultats sont présentés pour un nombre croissant et trajectoires avec  $n_{CH,i} / n_{CH,0} = 0,7$  et une durée d'exposition  $t=50$  ans.

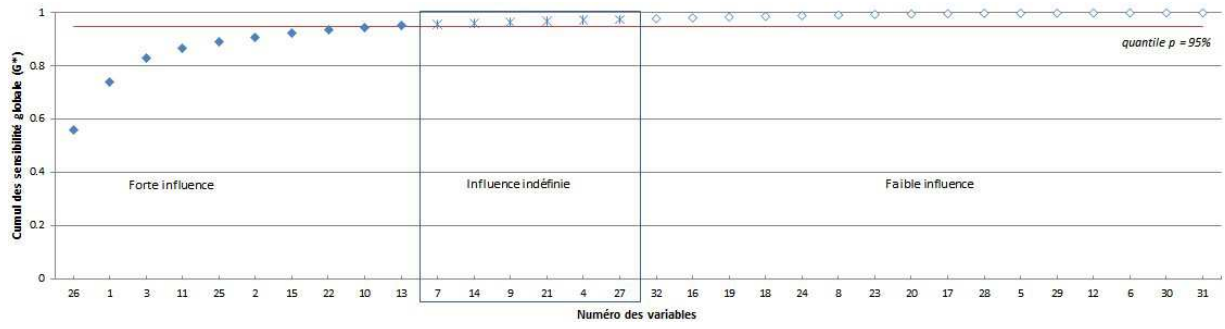
1. Nombre de trajectoires :  $r=20$

- Série 1

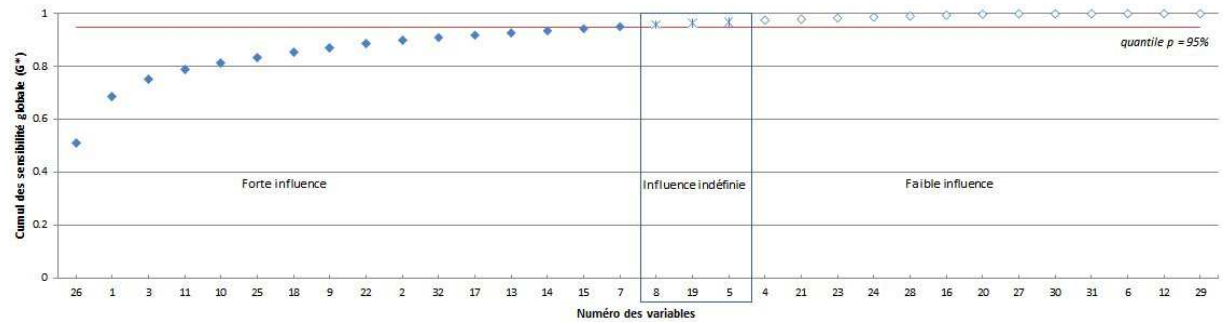
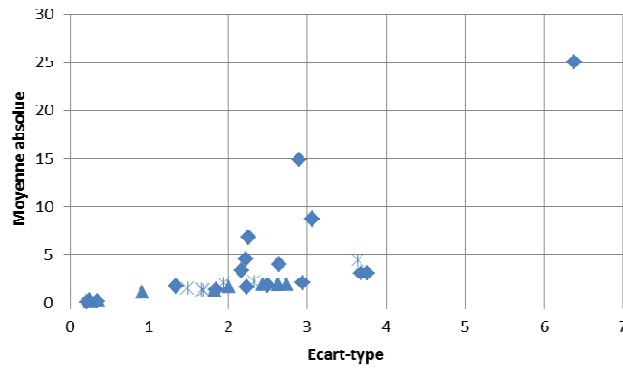


- Série 2

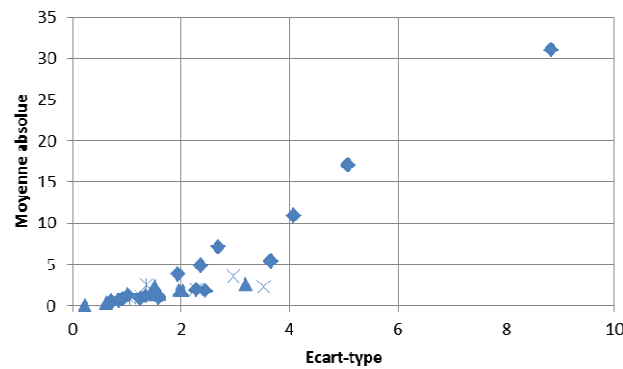


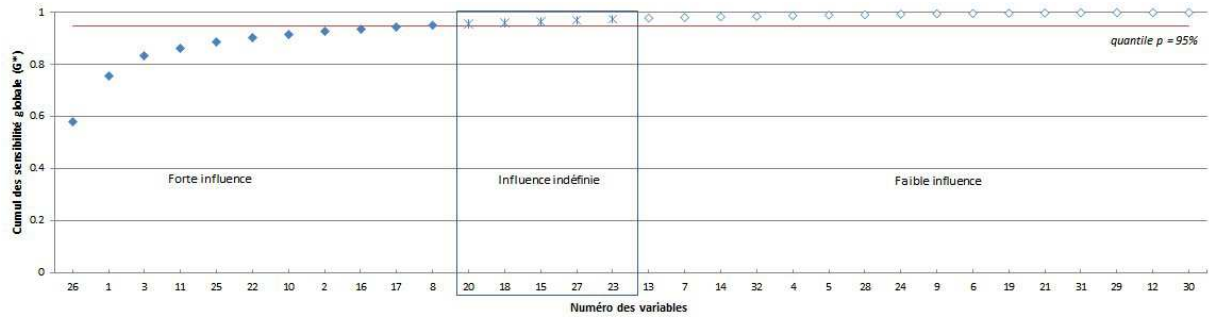


- Série 3

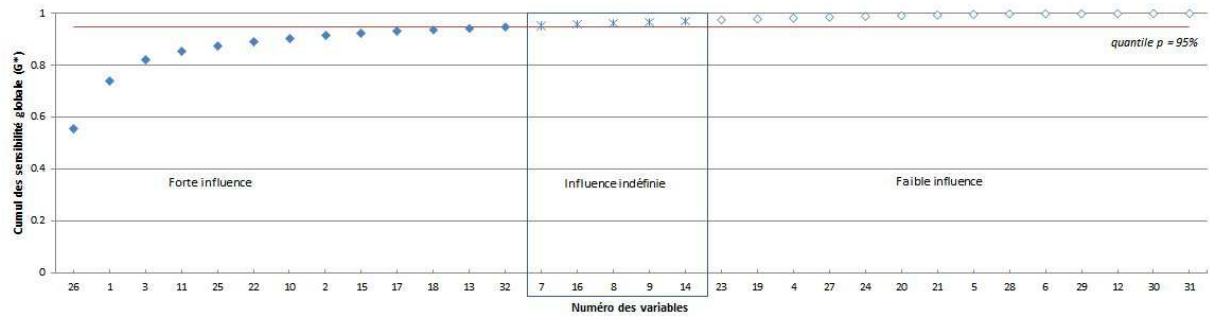
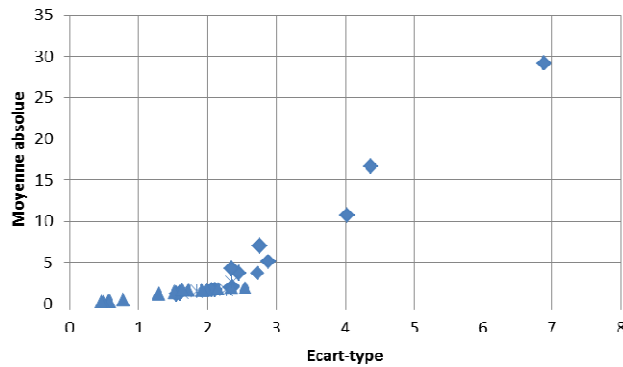


- Série 4





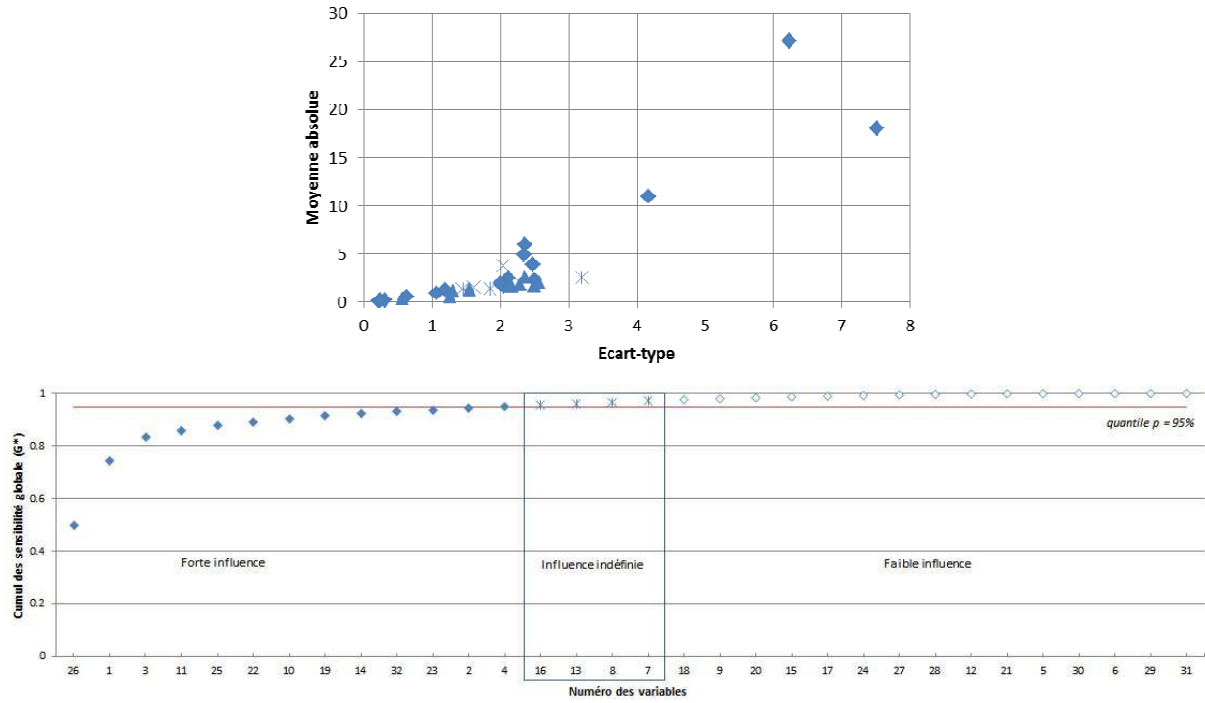
- Résultats moyennés sur l'ensemble des séries



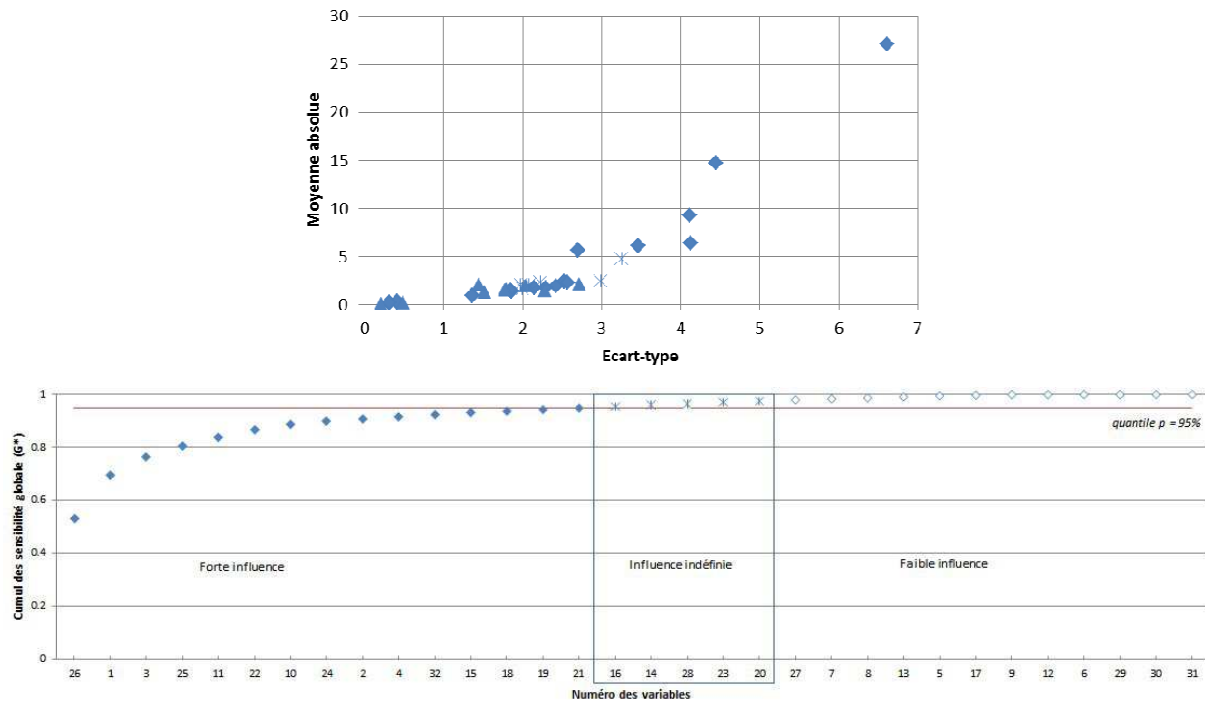
Avec  $r=20$ , l'identification des variables est à peu près stable jusqu'à un cumul des sensibilités globales de l'ordre de 0.9 (pour les 7 premières variables). Au-delà les variables peuvent changer de classement d'une série à l'autre.

2. Nombre de trajectoires :  $r=40$

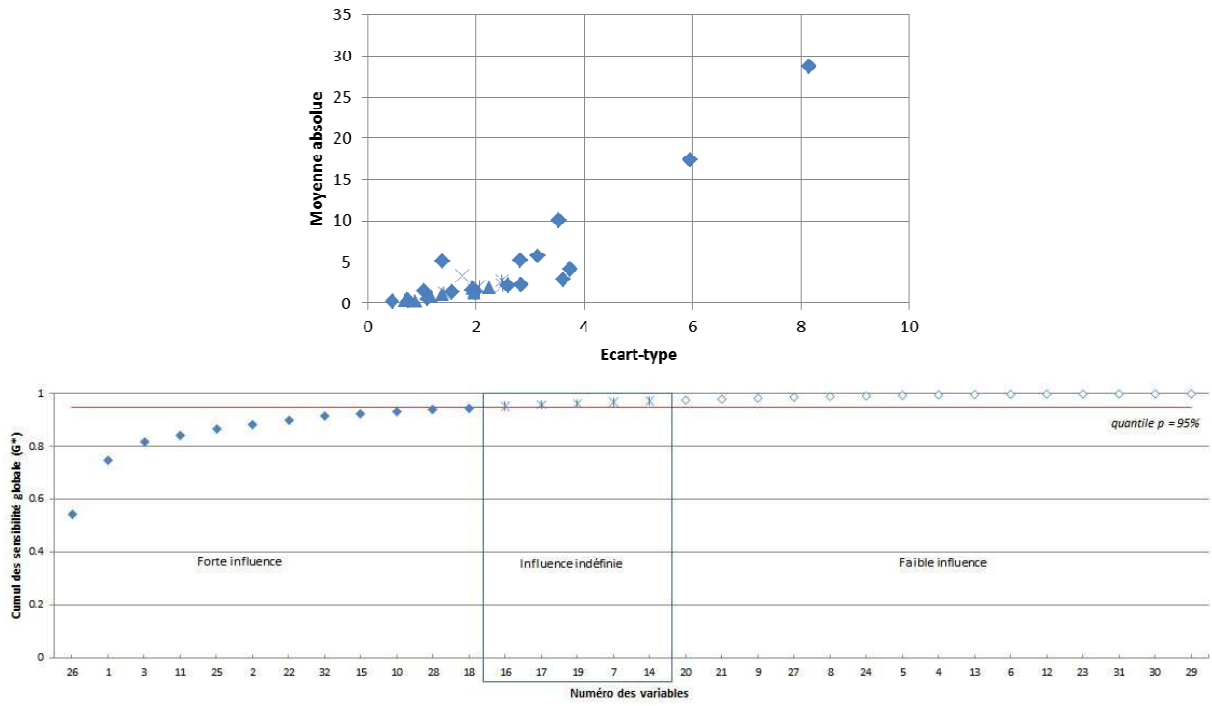
- Série 1



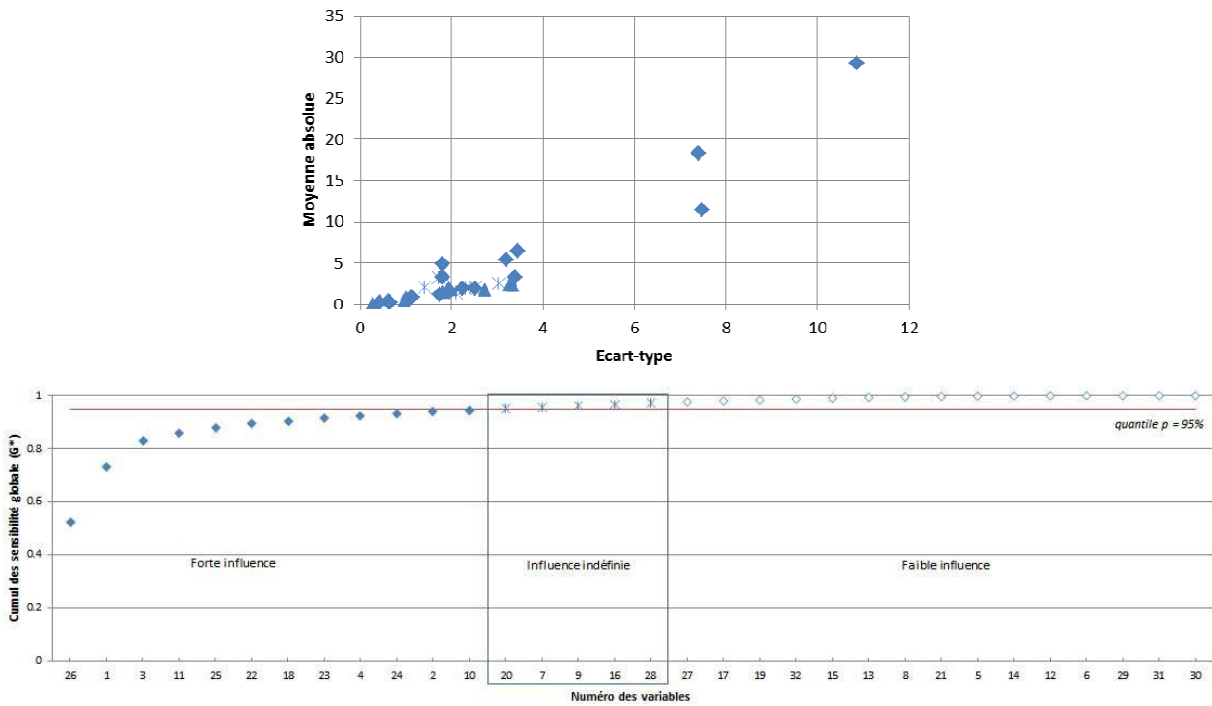
- Série 2



- Série 3

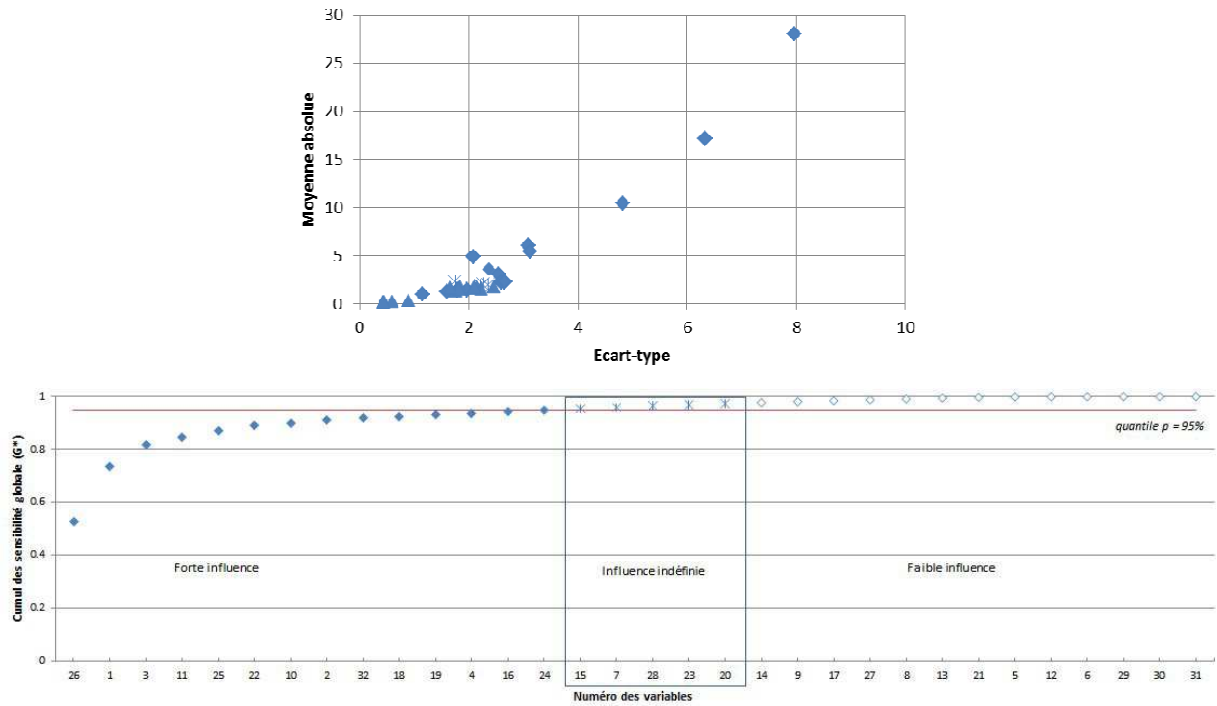


- Série 4



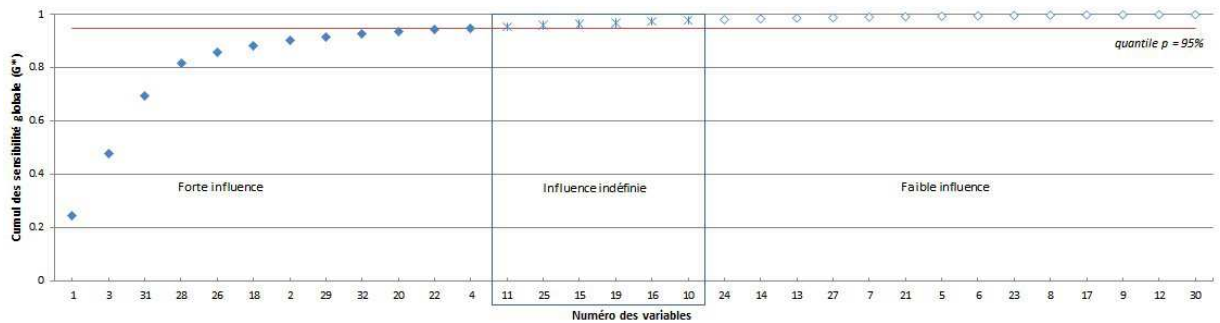


- Résultats moyennés sur l'ensemble des séries



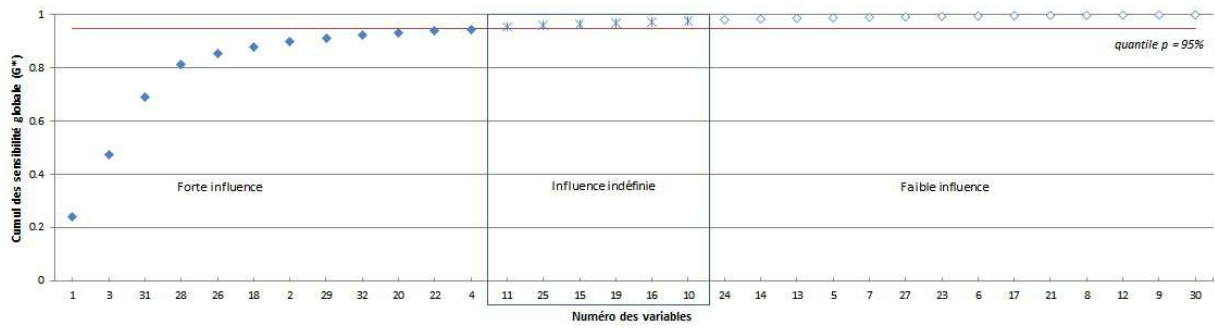
Avec  $r=40$ , on n'observe moins de changement dans le classement des variables en fonction des séries.

### 3. Nombre de trajectoires : $r = 60$ (une série)



Avec  $r=60$ , le classement des variables à forte influence ou à influence indéfinie n'est plus modifié.

4. Nombre de trajectoires :  $r = 80$  (une série)

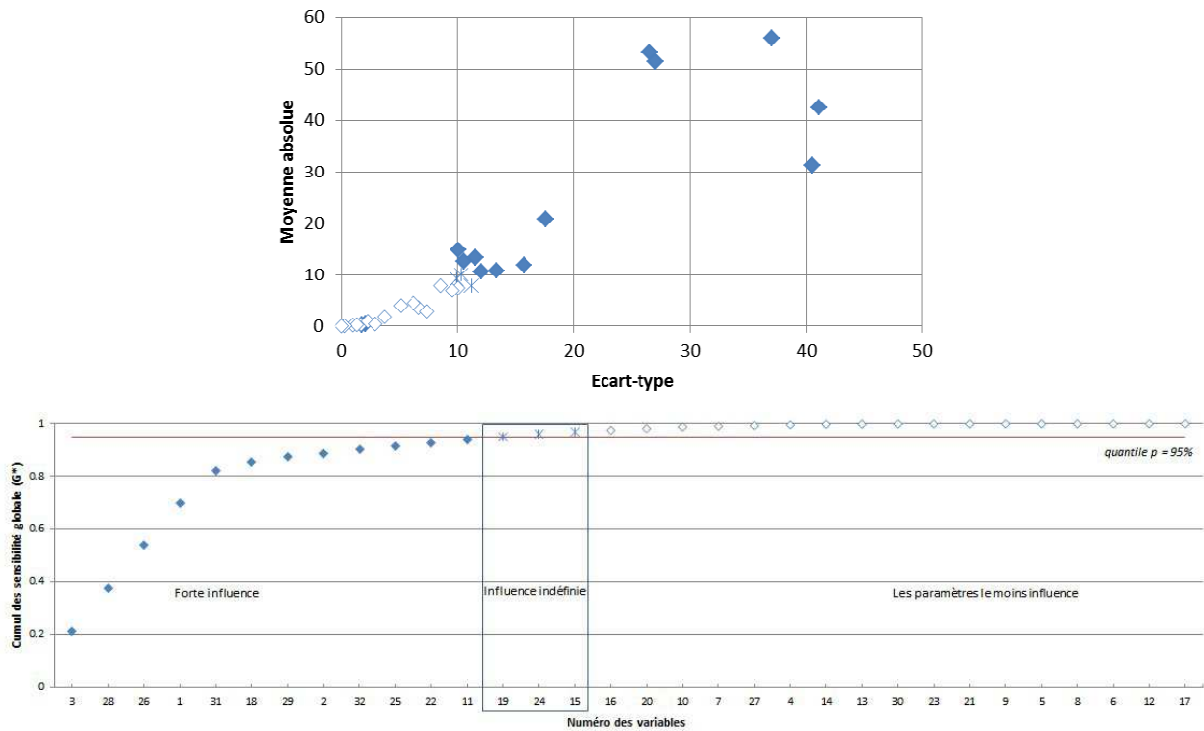


Avec  $r=80$ , le classement des variables est identique à celui obtenu avec  $r=60$ . On peut donc en conclure qu'un nombre de 60 trajectoires est satisfaisant.

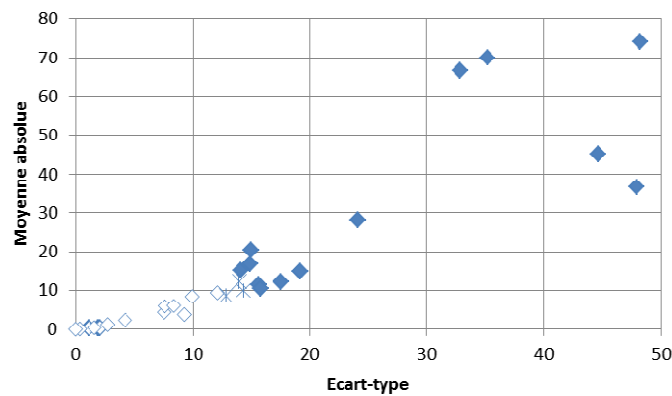
## Annexe C : Hiérarchisation des variables aléatoires par la méthode de Morris pour la sortie $X_c$ du modèle de carbonatation

Les courbes suivantes montrent les nuages de points (moyenne absolue  $\mu_i^*$ , écart-type  $\sigma_i$ ) avec distinction de la classe d'influence des variables ainsi que leur classement en fonction de la sensibilité globale ( $G_i^*$ ) obtenus avec  $r=60$ , pour différents rapport  $n_{CH,i}/n_{CH,0}$  et échéances d'exposition.

- Temps d'exposition  $t=10$  ans,  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,6$

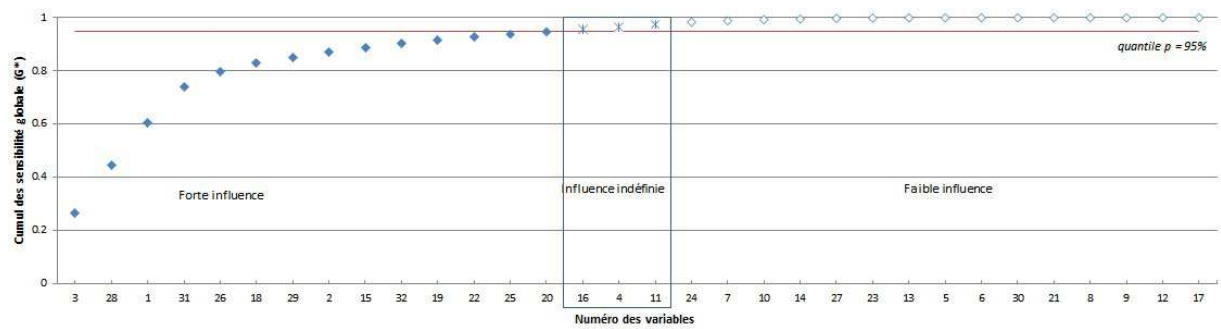
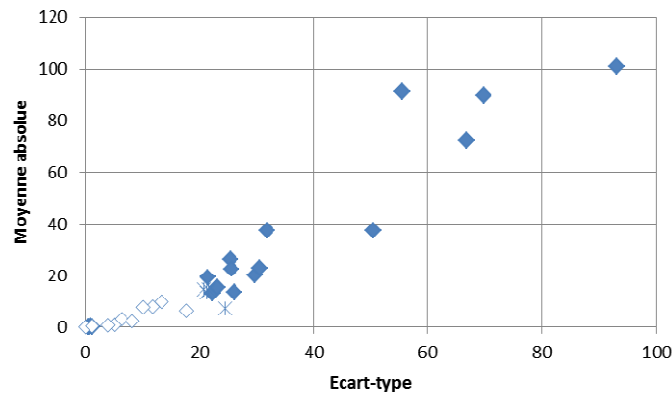


- Temps d'exposition  $t=10$  ans,  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,7$

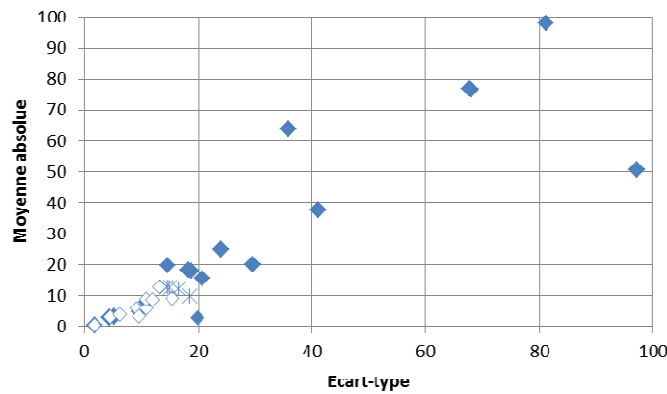


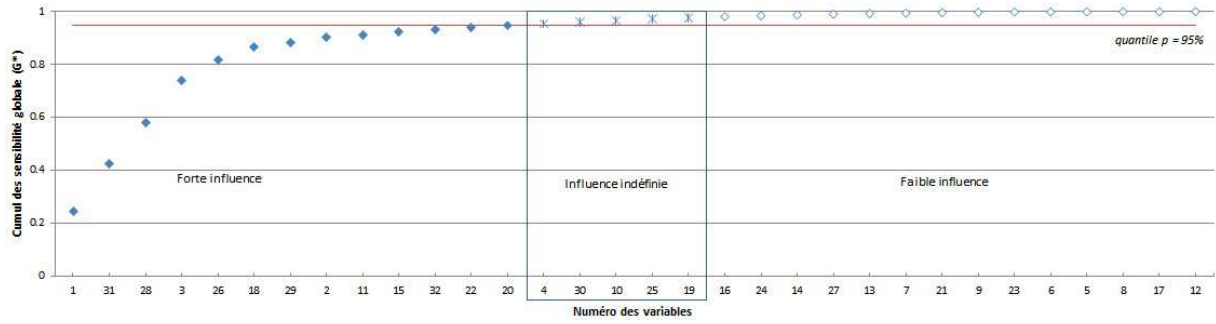


- Temps d'exposition  $t=10$  ans,  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,8$

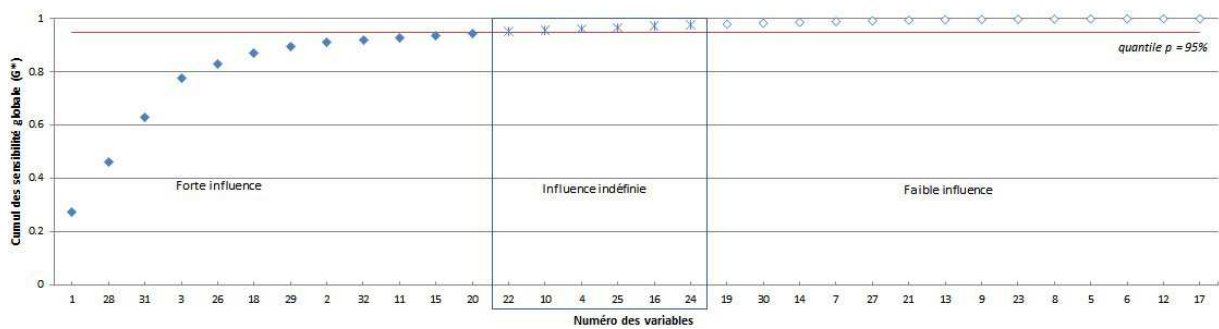
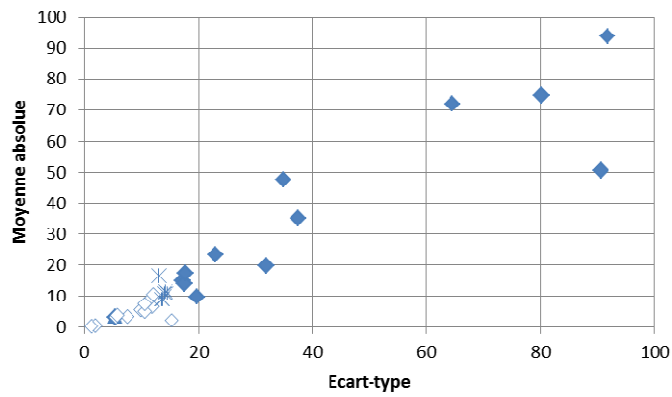


- Temps d'exposition  $t=35$  ans,  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,6$

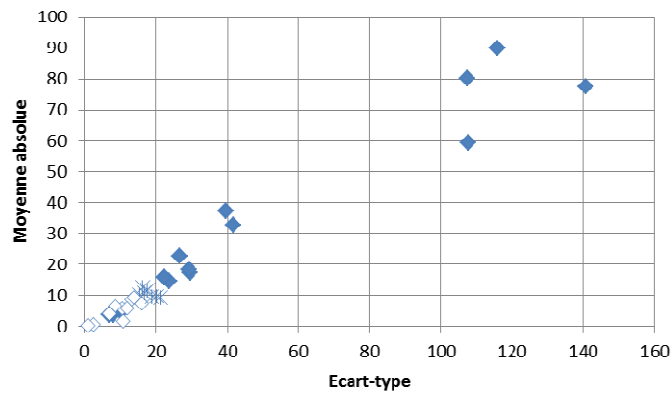


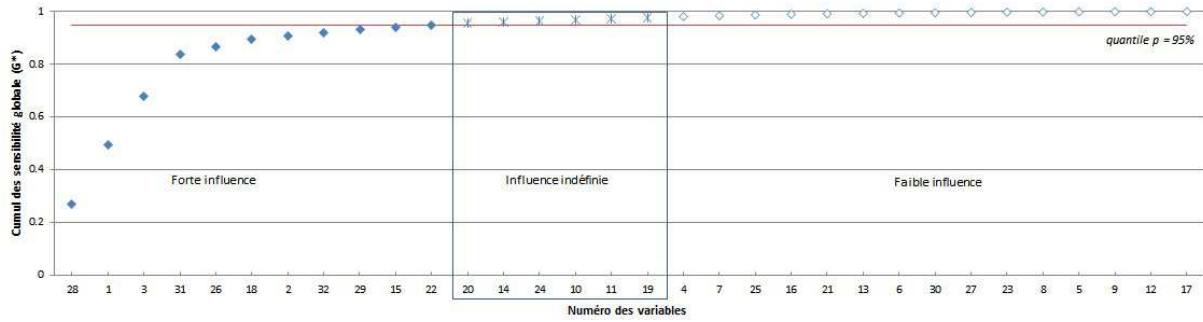


- Temps d'exposition  $t=35$  ans,  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,7$

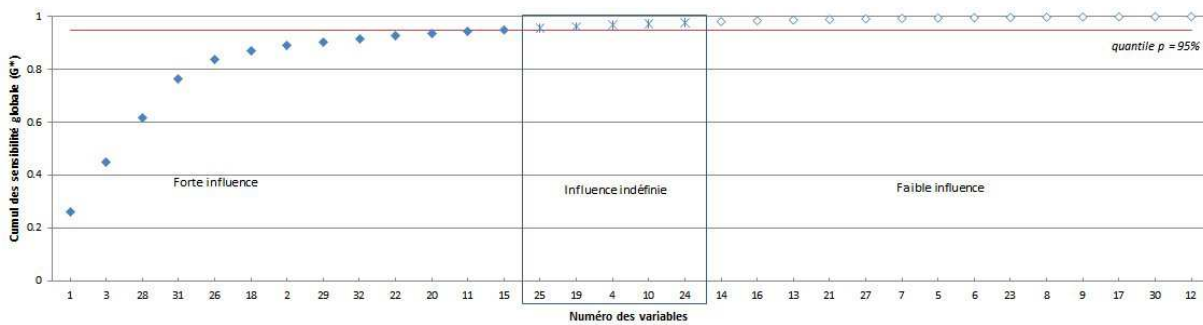
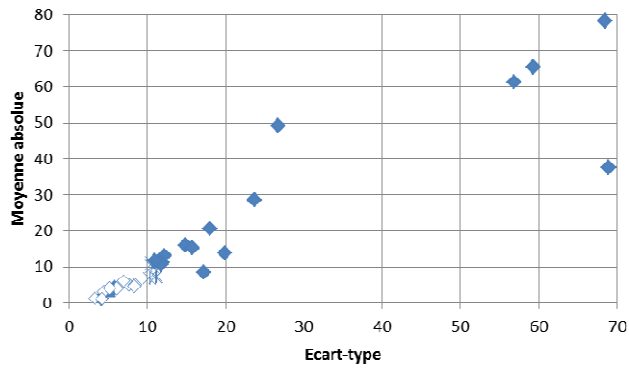


- Temps d'exposition  $t=35$  ans,  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,8$

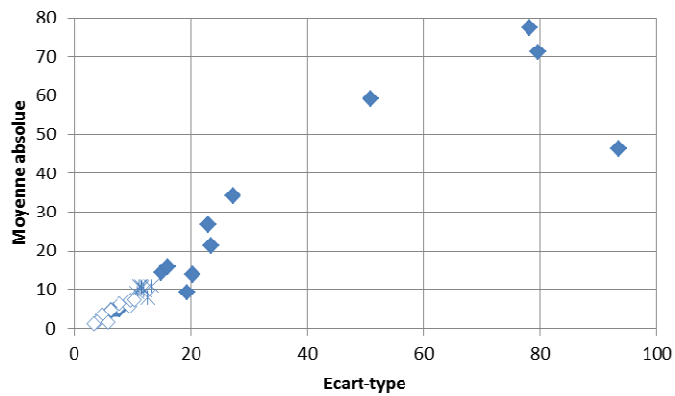


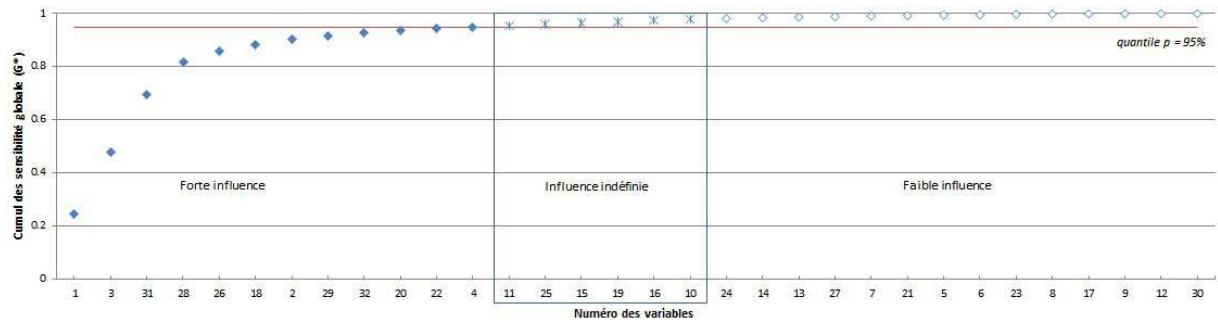


- Temps d'exposition  $t=50$  ans,  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,6$

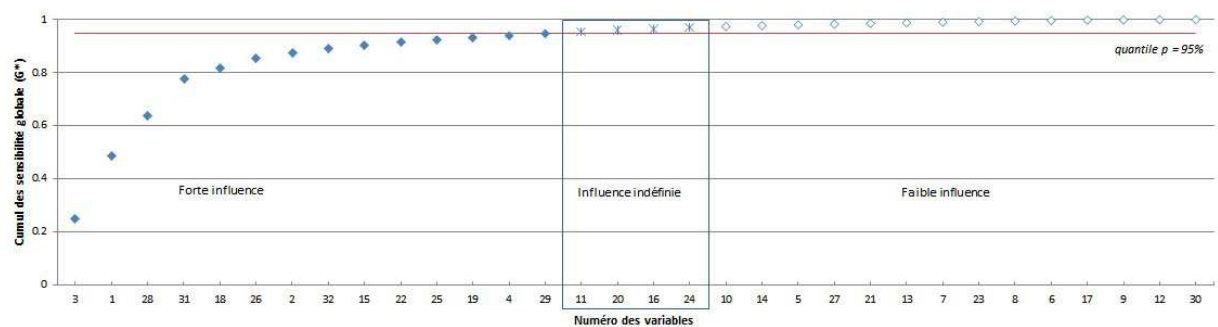
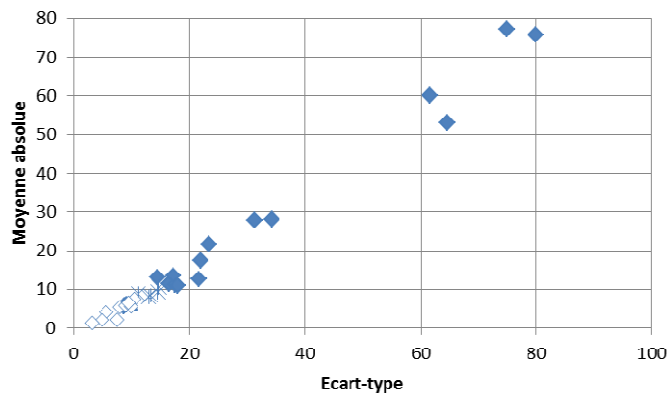


- Temps d'exposition  $t=50$  ans,  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,7$





- Temps d'exposition  $t=50$  ans,  $n_{CH,i}/n_{CH,0}=0,8$



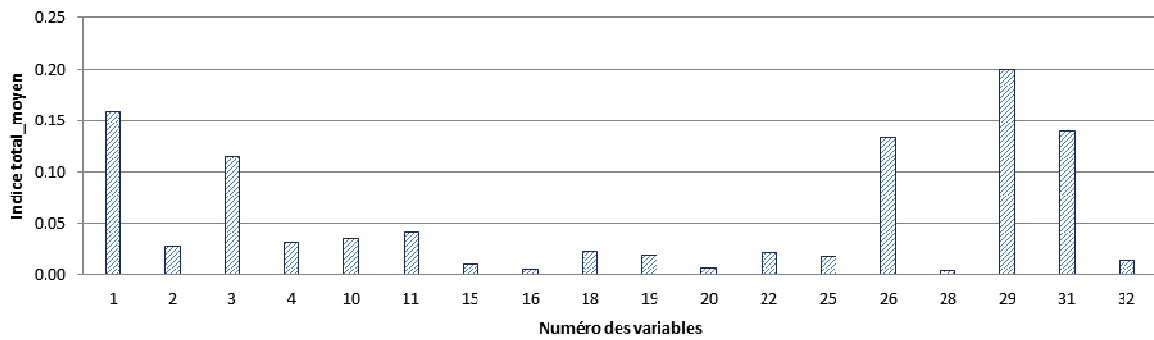
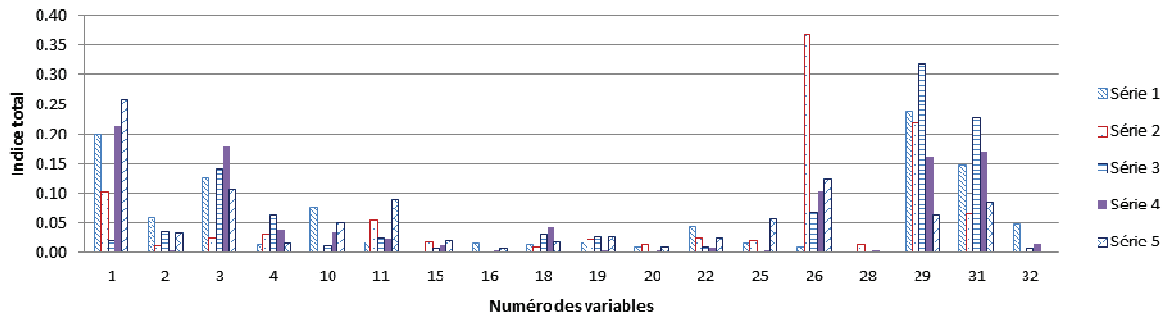
On constate sur l'ensemble des courbes que les variables de forte influence correspondant à un cumul de sensibilité globale inférieur ou égal à 0,92 sont très peu modifiées. Au-delà des changements se produisent en fonction du temps d'exposition et du seuil  $n_{CH,i}/n_{CH,0}$ , mais sans que la classe d'influence des variables soit bouleversée. Pour une variable cependant l'effet est clairement accru avec l'avancée du temps d'exposition : il s'agit de la concentration initiale de CSH, X4. On peut attribuer cette évolution à la lente cinétique de carbonatation des gels de CSH, par rapport à celle de la portlandite.

## Annexe D : Détermination du nombre de points par trajectoire dans la méthode de Sobol et hiérarchisation des paramètres pour la sortie $X_c$ du modèle de carbonatation

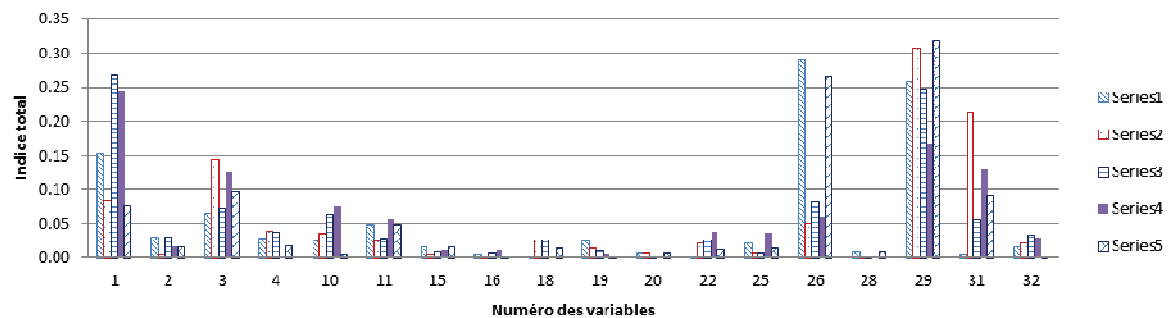
Les courbes suivantes présentent les indices de Sobol totaux obtenus par la méthode alternative de calcul des indices, pour l'échéance d'exposition  $t=50$  ans, et avec 5 séries de calcul.

- $n_{CH,i} / n_{CH,0} = 0,6$

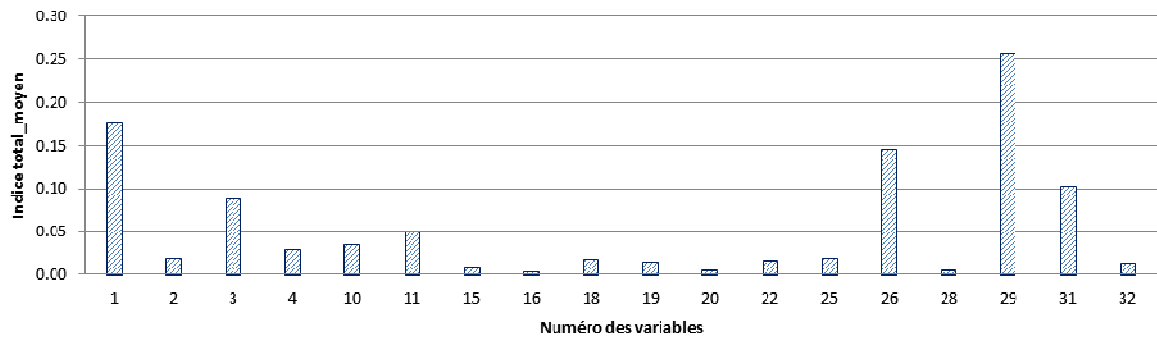
Nombre de points :  $m=60$  :



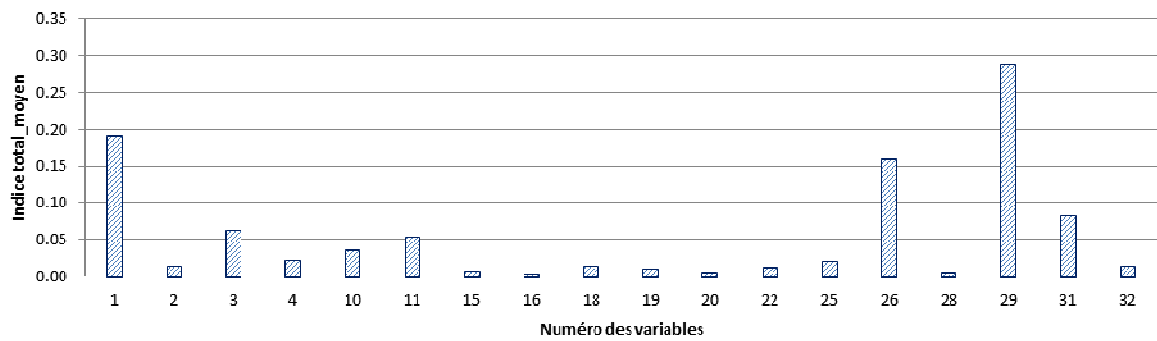
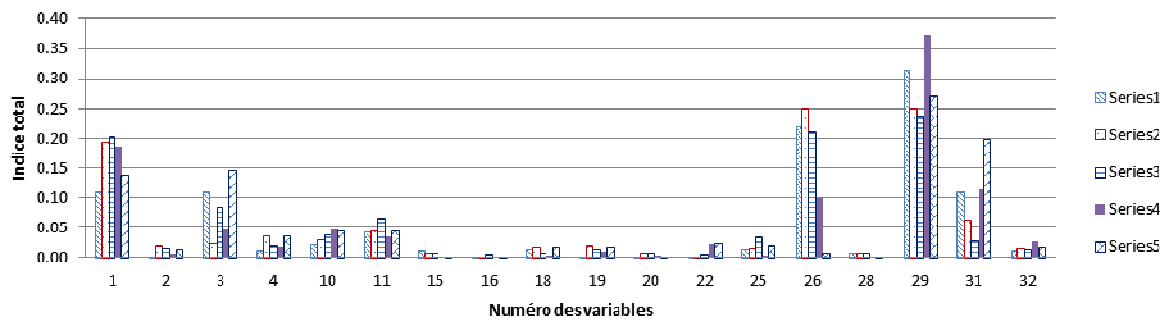
Nombre de points :  $m=120$



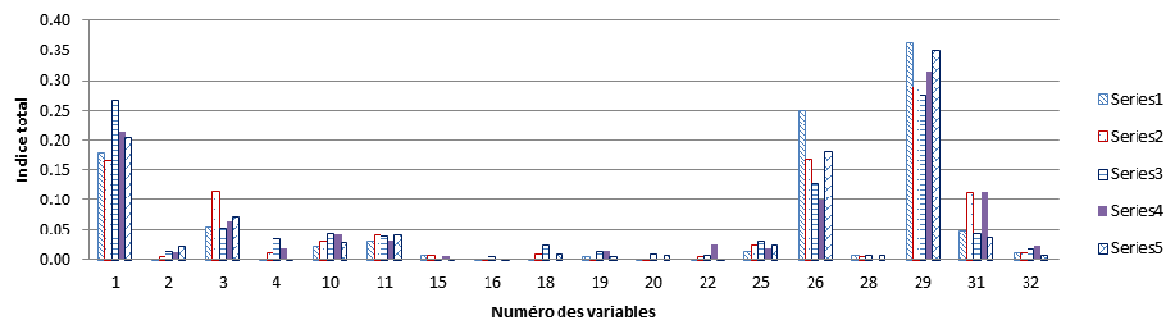


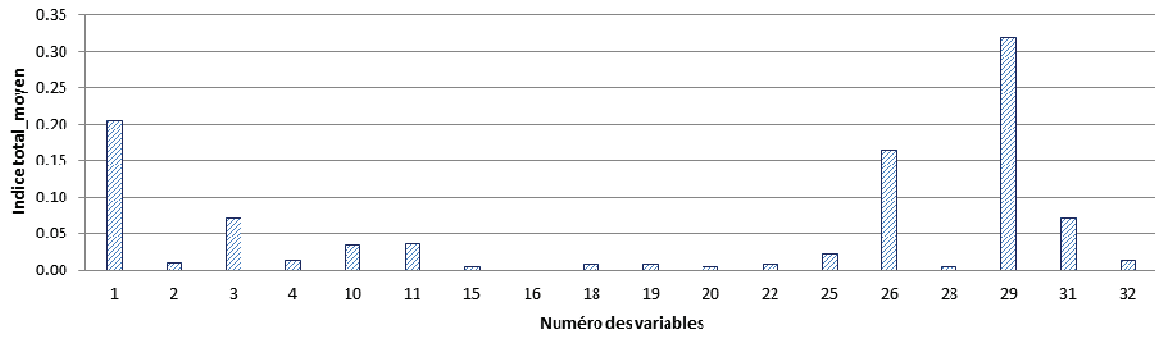


Nombre de points :  $m=180$

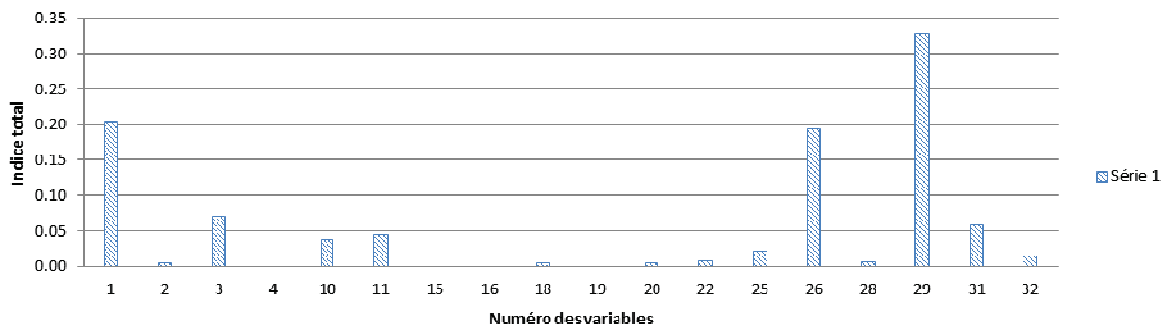


Nombre de points :  $m=240$





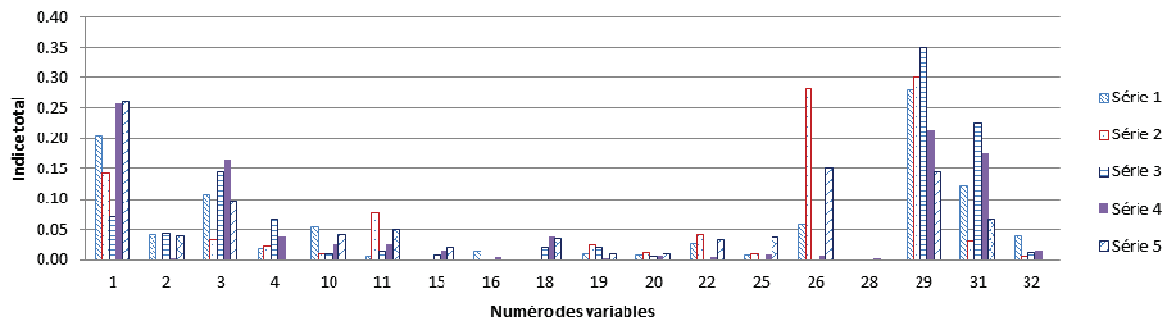
Nombre de points :  $m=300$

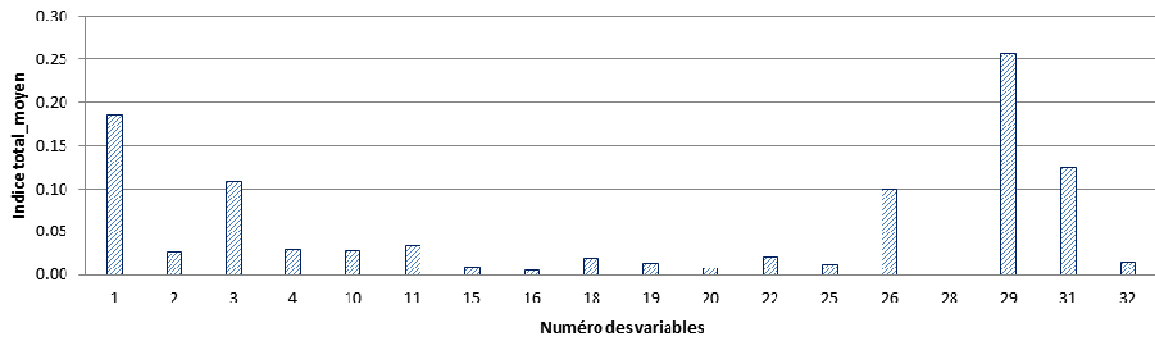


On note que les paramètres incertains dont l'indice total est supérieur à 5% restent inchangés à partir d'un nombre de 240 points par trajectoire : «  $\phi_0$  », «  $n_{CH,0}$  », «  $R_{p0}$  », «  $Hr_{moy}$  » et «  $T_{moy}$  ».

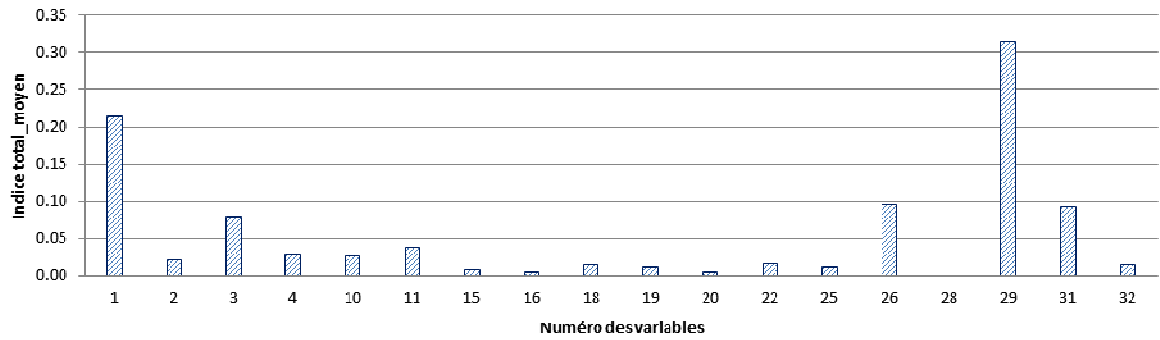
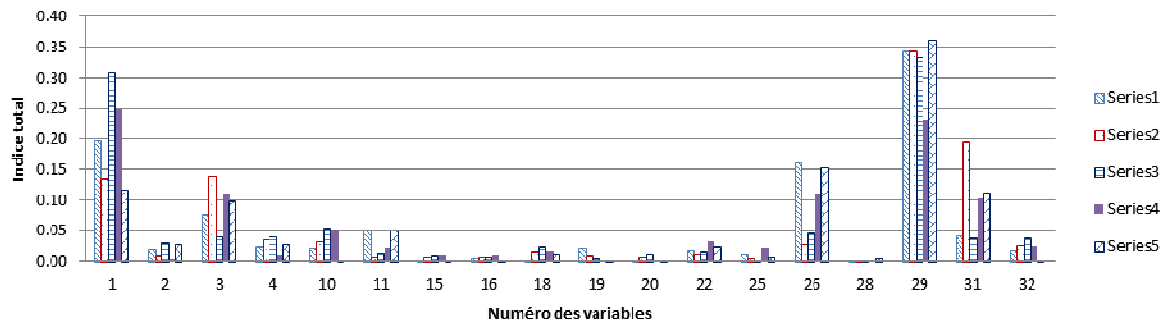
- $n_{CH,i}/n_{CH,0} = 0,7$  ; le temps d'exposition,  $t = 50$  ans

Nombre de points :  $m=60$

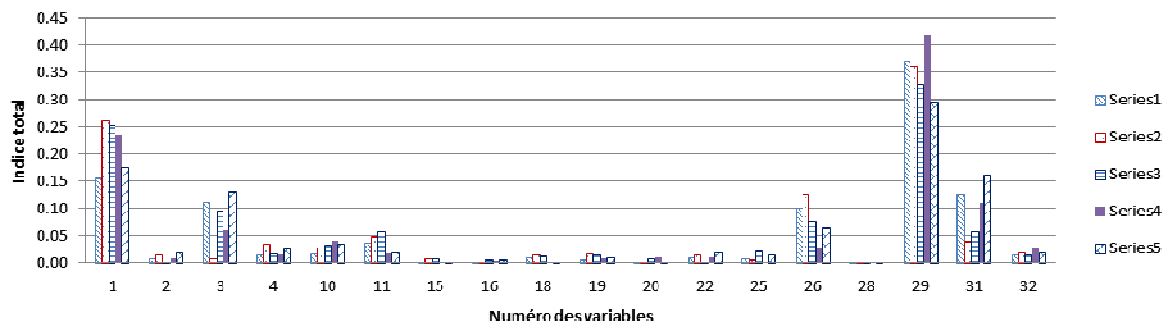


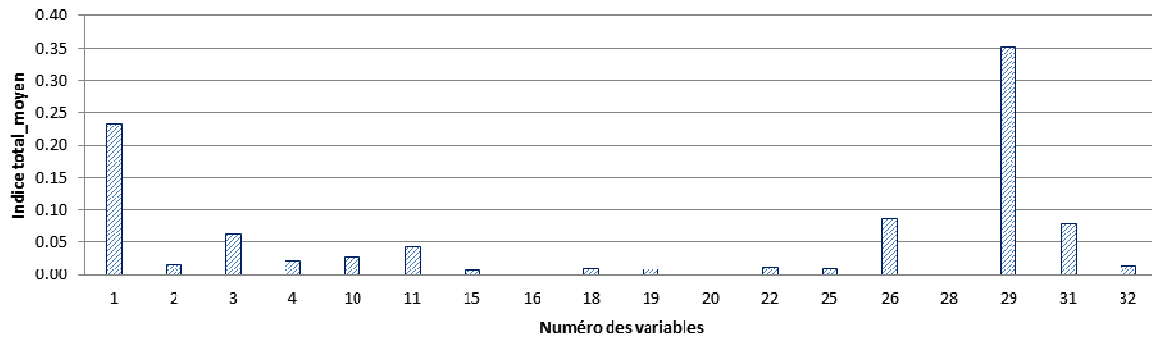


Nombre de points :  $m=120$

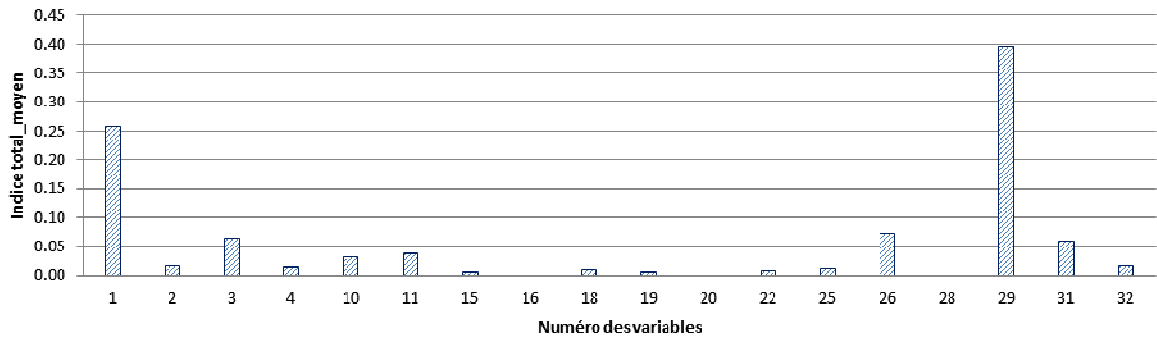
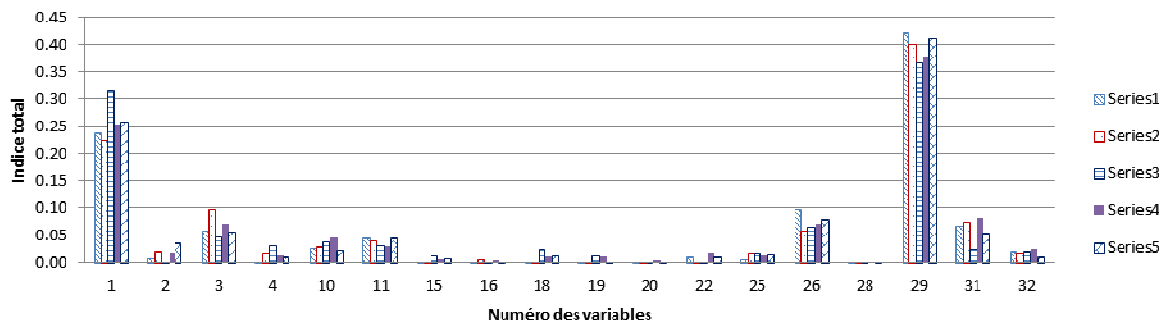


Nombre de points :  $m=180$

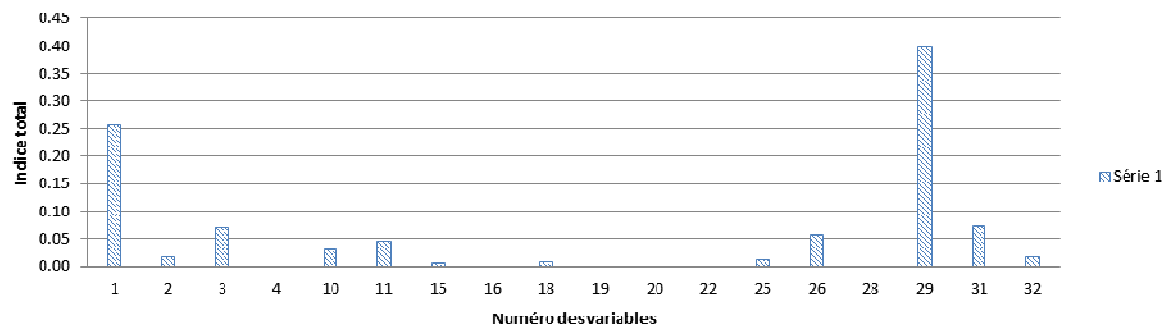




Nombre de points :  $m=240$



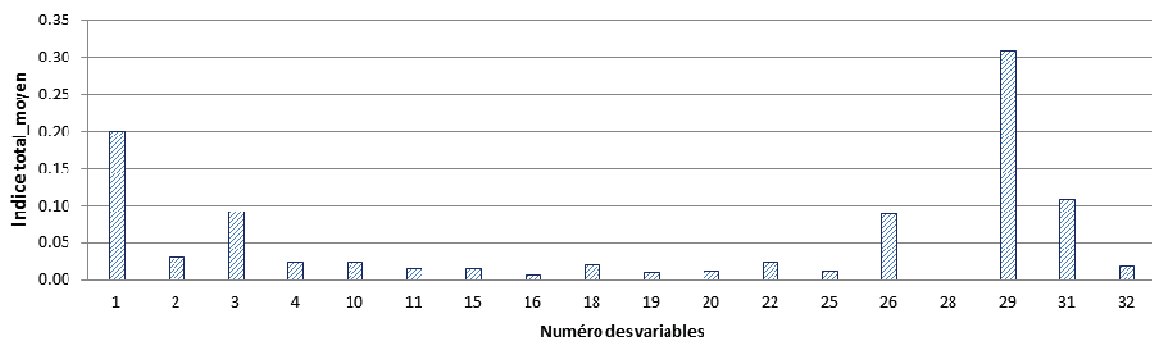
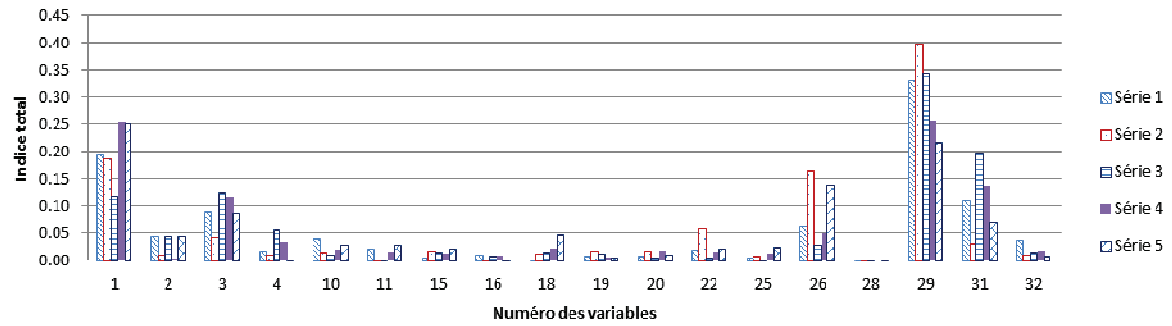
Nombre de points :  $m=300$



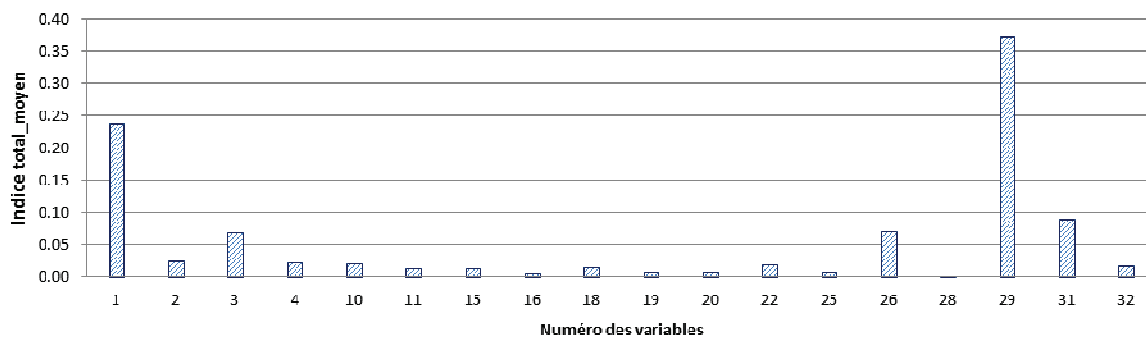
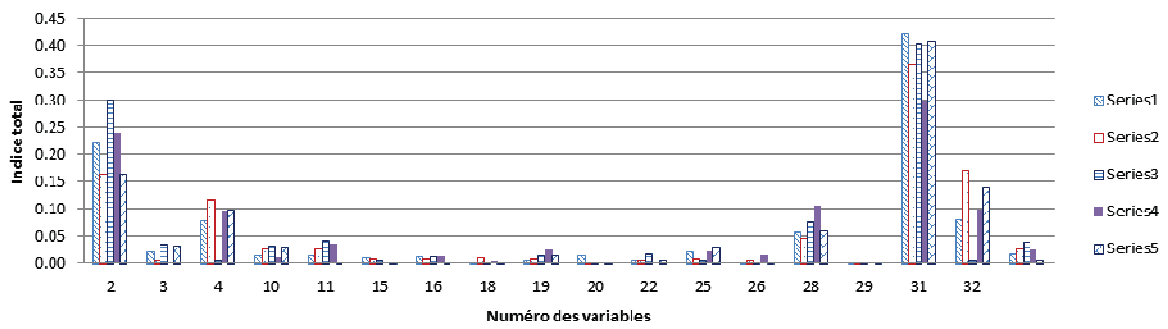
On note que les paramètres influents sont identiques à ceux identifiés pour  $n_{CH,i}/n_{CH,0} = 0,6$ .

- $n_{CH,i}/n_{CH,0} = 0,8$

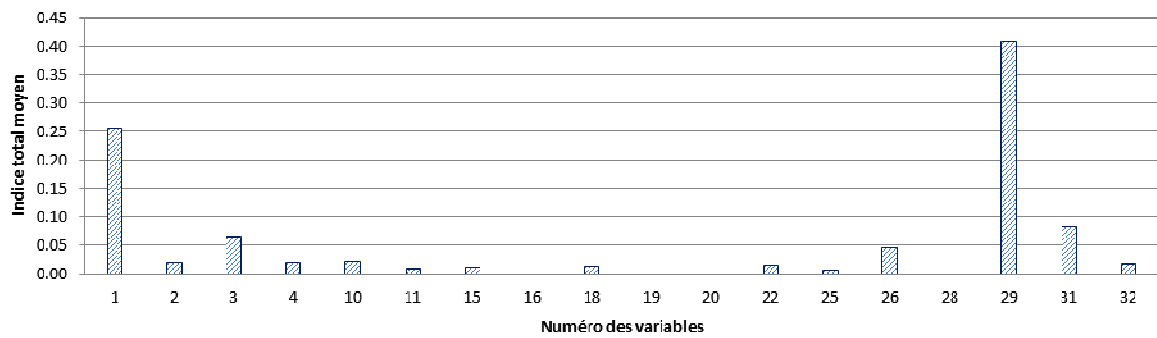
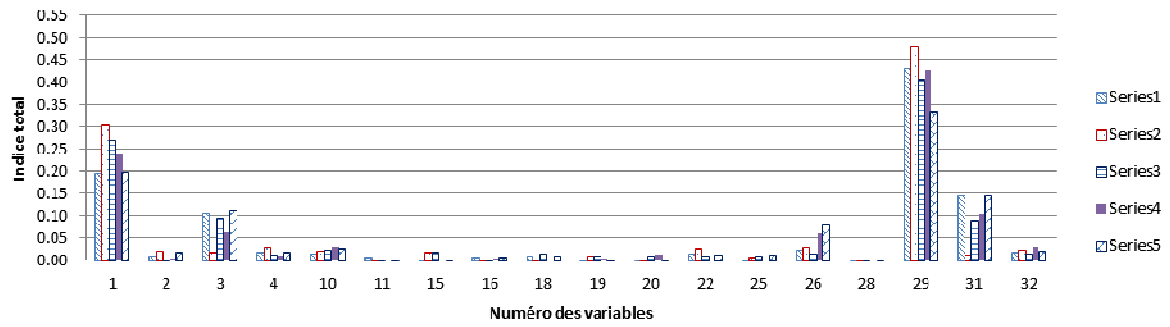
Nombre de points :  $m=60$



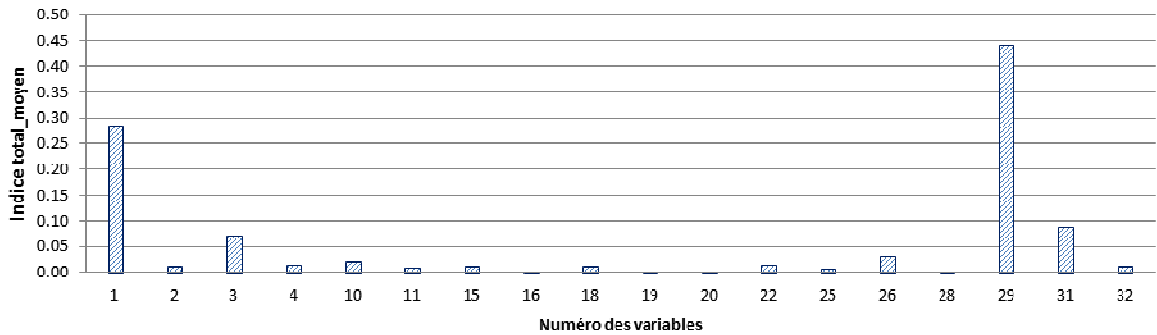
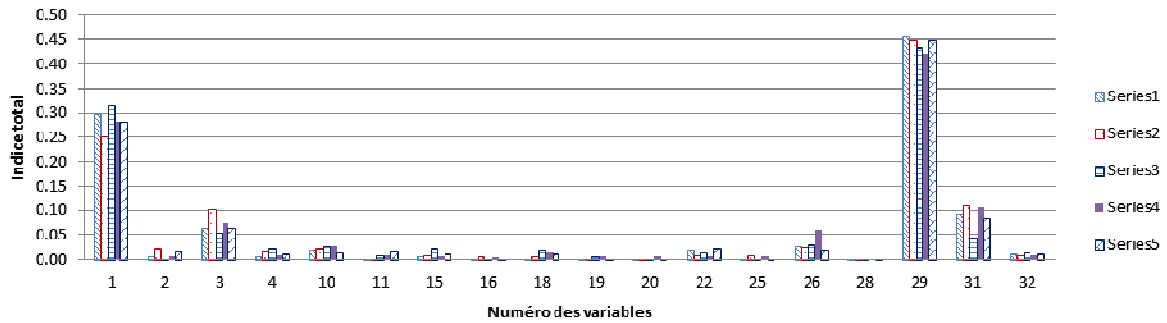
Nombre de points :  $m=120$



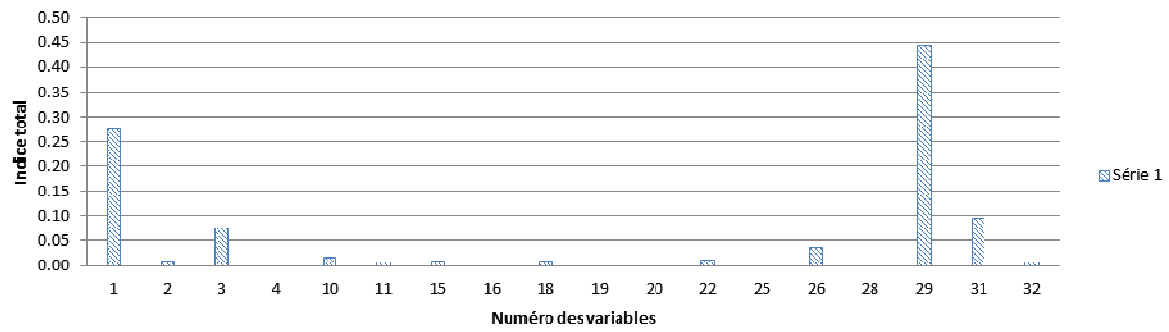
Nombre de points :  $m=180$



Nombre de points :  $m=240$



Nombre de points :  $m=300$

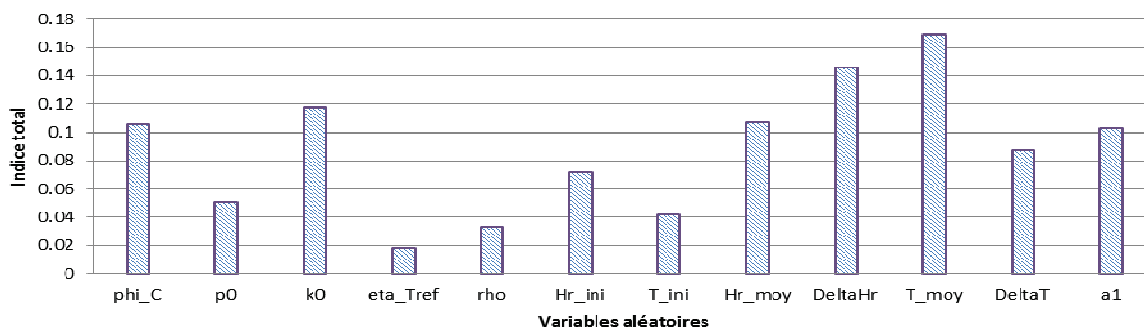


On note que l'indice du paramètre «  $R_{p0}$  » est inférieur à 5%. On décide cependant de conserver les paramètres influents identifiés pour  $n_{CH,i}/n_{CH,0} = 0,7$ .

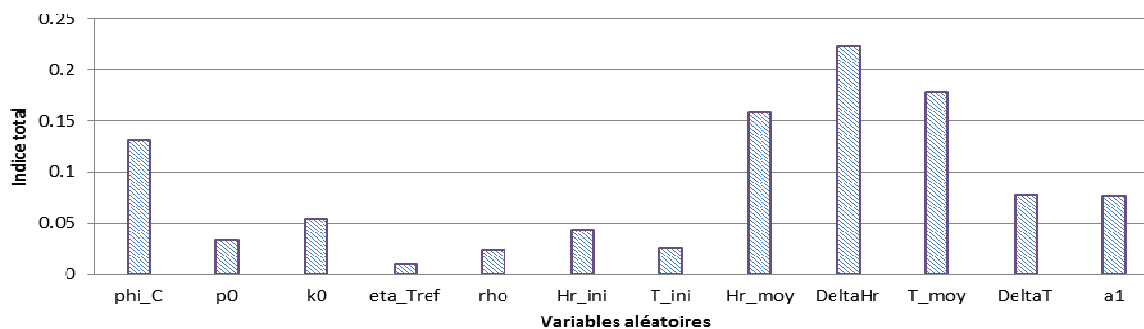
## Annexe E : Hiérarchisation des paramètres par la méthode de Sobol pour la sortie $\Delta Sr$ du modèle de transfert hydrique

Les courbes suivantes présentent les indices de Sobol totaux obtenus par la méthode alternative de calcul des indices avec  $m=240$  points, pour l'échéance d'exposition  $t=10$  ans, et pour différentes profondeurs.

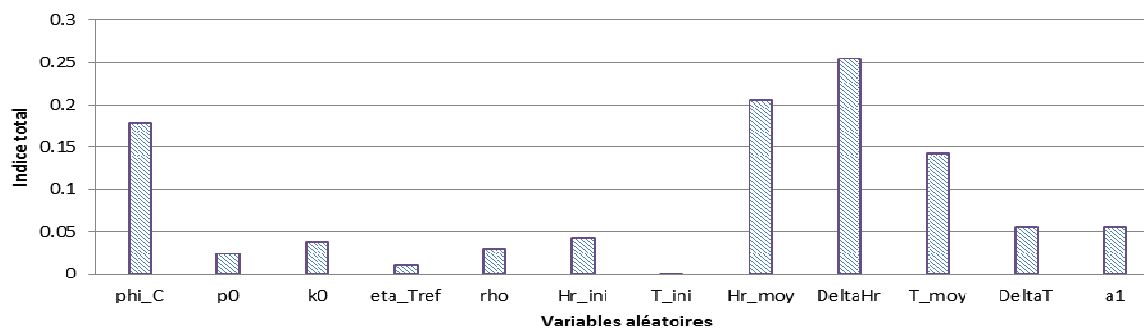
- Profondeur  $X_c = 1$  cm



- Profondeur  $X_c = 3$  cm

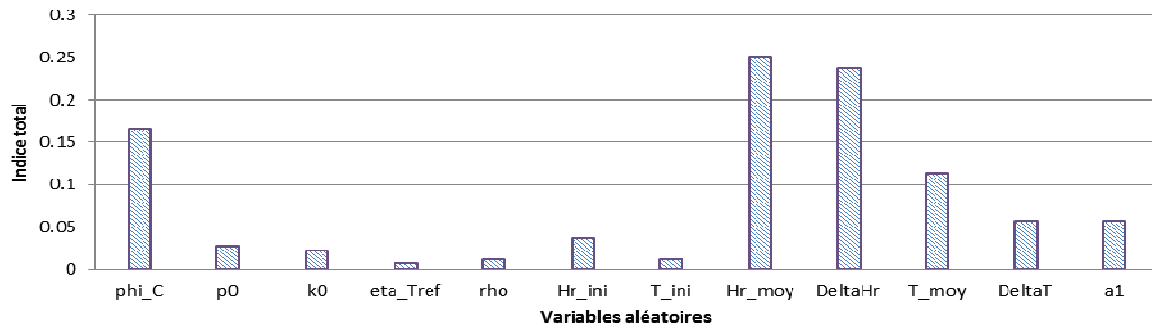


- Profondeur  $X_c = 6$  cm



- Profondeur  $X_c = 9$  cm:





On note que le nombre de paramètres dont l'indice de Sobol total est supérieur à 10% (valeur seuil choisie) est plus important à proximité du parement (pour  $X_c=1$  cm) avec notamment le rôle de la perméabilité intrinsèque. Les paramètres retenus sont finalement : «  $\phi_c$  », «  $Hr_{moy}$  », «  $\Delta Hr$  », «  $T_{moy}$  ».

## Annexe F : Coefficients du développement en chaos polynomial pour la sortie $X_c$ du modèle de carbonatation

Utilisation des polynômes de Legendre avec les lois de distributions des variables utilisées pour l'analyse de sensibilité (lois uniformes)

$m$	$p = 2 ; r = 50$			$p = 2 ; r = 100$			$p = 3 ; r = 100$			$\psi_m$
	$n_{CH,i}/n_{CH,0}$			$n_{CH,i}/n_{CH,0}$			$n_{CH,i}/n_{CH,0}$			
	0,6	0,7	0,8	0,6	0,7	0,8	0,6	0,7	0,8	
0	4.12E-03	5.10E-03	6.25E-03	4.18E-03	5.17E-03	6.32E-03	4.23E-03	5.19E-03	6.32E-03	1
1	1.32E-03	1.63E-03	1.94E-03	1.28E-03	1.56E-03	1.87E-03	1.26E-03	1.45E-03	1.71E-03	$X_1$
2	-1.52E-03	-1.96E-03	-2.53E-03	-1.56E-03	-1.99E-03	-2.51E-03	-1.62E-03	-2.08E-03	-2.65E-03	$X_2$
3	6.41E-04	1.14E-03	1.70E-03	7.16E-04	1.19E-03	1.78E-03	6.29E-04	1.07E-03	1.60E-03	$X_3$
4	-7.18E-04	-9.22E-04	-1.16E-03	-6.79E-04	-8.37E-04	-1.04E-03	-7.32E-04	-8.61E-04	-1.02E-03	$X_4$
5	-1.35E-03	-1.04E-03	-6.24E-04	-1.44E-03	-1.12E-03	-7.30E-04	-1.43E-03	-1.11E-03	-6.97E-04	$X_5$
6	4.11E-05	3.85E-05	3.18E-05	-1.40E-06	-5.33E-06	-1.49E-05	-7.30E-05	-9.52E-05	-8.86E-05	$X_6$
7	-3.56E-04	-4.61E-04	-5.37E-04	-4.38E-04	-5.86E-04	-6.78E-04	-4.96E-04	-6.12E-04	-7.05E-04	$X_1 \times X_2$
8	-2.88E-05	7.99E-05	2.60E-04	1.62E-04	3.30E-04	6.10E-04	2.58E-04	3.76E-04	5.31E-04	$X_1 \times X_3$
9	-1.39E-04	-1.49E-04	-2.39E-04	-2.75E-04	-3.70E-04	-4.73E-04	-1.92E-04	-2.17E-04	-2.44E-04	$X_1 \times X_4$
10	-1.84E-04	-5.09E-05	8.78E-05	-4.03E-04	-2.92E-04	-1.95E-04	-3.90E-04	-2.47E-04	-1.81E-04	$X_1 \times X_5$
11	-2.89E-04	-3.53E-04	-2.94E-04	-5.71E-05	-8.53E-05	-8.94E-05	-1.13E-05	5.09E-05	8.93E-05	$X_1 \times X_6$
12	-4.66E-04	-7.16E-04	-1.06E-03	-3.15E-04	-5.55E-04	-8.26E-04	-3.99E-04	-6.97E-04	-1.09E-03	$X_2 \times X_3$
13	2.52E-04	3.67E-04	4.92E-04	2.04E-04	2.68E-04	3.42E-04	2.79E-04	2.75E-04	3.75E-04	$X_2 \times X_4$
14	5.28E-04	3.78E-04	1.11E-04	7.01E-04	5.86E-04	3.76E-04	6.28E-04	5.65E-04	4.45E-04	$X_2 \times X_5$
15	-4.55E-05	-7.05E-05	-3.41E-06	-1.67E-05	-3.39E-05	-5.06E-05	1.14E-04	6.86E-05	1.01E-04	$X_2 \times X_6$
16	1.97E-04	2.15E-04	2.15E-04	1.91E-04	1.85E-04	1.60E-04	1.84E-04	2.51E-04	2.76E-04	$X_3 \times X_4$
17	-8.00E-04	-7.85E-04	-7.54E-04	-9.53E-04	-9.03E-04	-8.32E-04	-1.06E-03	-8.49E-04	-7.20E-04	$X_3 \times X_5$
18	9.91E-05	1.52E-04	2.79E-04	-5.01E-05	-4.02E-05	-2.62E-05	5.41E-05	8.21E-05	7.47E-05	$X_3 \times X_6$
19	3.65E-04	3.53E-04	3.18E-04	4.31E-04	4.53E-04	4.63E-04	4.20E-04	3.77E-04	3.91E-04	$X_4 \times X_5$
20	-1.37E-05	-4.87E-06	-4.97E-05	-9.61E-05	-8.25E-05	-6.70E-05	-3.20E-05	4.83E-06	3.67E-05	$X_4 \times X_6$
21	1.79E-04	1.93E-04	1.36E-04	-1.04E-06	2.05E-05	6.61E-05	4.36E-05	4.74E-05	5.57E-05	$X_5 \times X_6$
22	-1.31E-04	-1.74E-04	-2.25E-04	-1.37E-04	-1.51E-04	-1.12E-04	-6.96E-05	-1.43E-04	-1.38E-04	$0.5 \times (3X_1^2 - 1)$
23	2.20E-04	3.68E-04	4.91E-04	2.64E-04	4.30E-04	6.45E-04	2.99E-04	4.16E-04	6.02E-04	$0.5 \times (3X_2^2 - 1)$
24	-1.75E-04	-1.80E-04	-2.30E-04	-3.04E-04	-2.93E-04	-2.74E-04	-2.12E-04	-2.29E-04	-2.62E-04	$0.5 \times (3X_3^2 - 1)$
25	1.12E-04	1.39E-04	1.59E-04	1.65E-04	2.03E-04	2.18E-04	1.01E-04	1.23E-04	1.22E-04	$0.5 \times (3X_4^2 - 1)$
26	-1.84E-05	-8.99E-05	-1.80E-04	5.23E-05	-9.69E-06	-1.02E-04	5.13E-05	9.97E-06	-9.94E-05	$0.5 \times (3X_5^2 - 1)$
27	4.23E-06	2.44E-05	1.14E-04	5.59E-05	3.22E-05	1.74E-05	4.09E-05	8.17E-05	1.14E-04	$0.5 \times (3X_6^2 - 1)$
28							-1.49E-04	-3.18E-04	-4.60E-04	$X_1 \times X_2 \times X_3$
29							-1.77E-05	6.40E-05	1.60E-04	$X_1 \times X_2 \times X_4$
30							1.77E-04	1.57E-04	1.64E-04	$X_1 \times X_2 \times X_5$
31							1.26E-05	-5.90E-05	8.04E-05	$X_1 \times X_2 \times X_6$
32							-8.02E-05	9.79E-05	2.71E-04	$X_1 \times X_3 \times X_4$
33							-3.88E-04	-2.09E-04	-3.33E-05	$X_1 \times X_3 \times X_5$
34							-1.13E-04	-1.65E-04	-2.60E-05	$X_1 \times X_3 \times X_6$
35							2.68E-04	1.19E-04	7.11E-05	$X_1 \times X_4 \times X_5$
36							-1.54E-04	-8.67E-05	-1.71E-04	$X_1 \times X_4 \times X_6$
37							-2.96E-06	-1.56E-04	-7.65E-05	$X_1 \times X_5 \times X_6$
38							-1.37E-04	-3.06E-05	8.51E-05	$X_2 \times X_3 \times X_4$
39							2.32E-04	1.45E-04	3.30E-05	$X_2 \times X_3 \times X_5$
40							-4.79E-05	-3.03E-05	7.06E-05	$X_2 \times X_3 \times X_6$
41							-2.45E-04	-2.54E-04	-1.03E-04	$X_2 \times X_4 \times X_5$
42							-1.49E-04	-1.35E-05	3.71E-05	$X_2 \times X_4 \times X_6$

43						6.16E-05	-8.04E-05	-2.02E-04	$x_2 \times x_5 \times x_6$
44						1.05E-04	1.85E-04	3.35E-04	$x_3 \times x_4 \times x_5$
45						-1.32E-04	-1.03E-04	-1.38E-05	$x_3 \times x_4 \times x_6$
46						-9.05E-07	-2.02E-04	-3.12E-04	$x_3 \times x_5 \times x_6$
47						2.63E-05	1.38E-05	-1.36E-04	$x_4 \times x_5 \times x_6$
48						1.44E-04	4.10E-05	-1.61E-05	$0.5 \times (3x_1^2 - 1) \times x_2$
49						3.24E-05	-6.81E-05	-2.43E-04	$0.5 \times (3x_1^2 - 1) \times x_3$
50						-2.04E-06	1.17E-05	3.87E-05	$0.5 \times (3x_1^2 - 1) \times x_4$
51						3.60E-05	-2.93E-05	-3.20E-05	$0.5 \times (3x_1^2 - 1) \times x_5$
52						6.49E-05	8.62E-05	1.15E-04	$0.5 \times (3x_1^2 - 1) \times x_6$
53						8.95E-05	1.31E-04	2.04E-04	$0.5 \times (3x_2^2 - 1) \times x_1$
54						-4.03E-05	1.08E-04	2.19E-04	$0.5 \times (3x_2^2 - 1) \times x_3$
55						-1.00E-04	-1.08E-04	-7.78E-05	$0.5 \times (3x_2^2 - 1) \times x_4$
56						-2.42E-04	-1.76E-04	-1.52E-04	$0.5 \times (3x_2^2 - 1) \times x_5$
57						-2.33E-05	1.30E-05	7.85E-05	$0.5 \times (3x_2^2 - 1) \times x_6$
58						-8.49E-05	-1.50E-04	-2.26E-04	$0.5 \times (3x_3^2 - 1) \times x_1$
59						-2.88E-05	-9.64E-06	-1.92E-05	$0.5 \times (3x_3^2 - 1) \times x_2$
60						-1.94E-05	6.54E-05	5.04E-05	$0.5 \times (3x_3^2 - 1) \times x_4$
61						-5.74E-06	-1.05E-04	-2.28E-04	$0.5 \times (3x_3^2 - 1) \times x_5$
62						-5.00E-05	-1.27E-04	-1.27E-04	$0.5 \times (3x_3^2 - 1) \times x_6$
63						3.54E-05	5.33E-06	2.64E-05	$0.5 \times (3x_4^2 - 1) \times x_1$
64						-7.10E-05	-5.98E-05	-8.08E-05	$0.5 \times (3x_4^2 - 1) \times x_2$
65						-1.66E-05	-7.79E-05	-1.74E-04	$0.5 \times (3x_4^2 - 1) \times x_3$
66						-1.94E-04	-2.11E-04	-2.35E-04	$0.5 \times (3x_4^2 - 1) \times x_5$
67						2.72E-05	2.71E-05	2.94E-05	$0.5 \times (3x_4^2 - 1) \times x_6$
68						-7.34E-06	-5.16E-05	3.34E-05	$0.5 \times (3x_5^2 - 1) \times x_1$
69						-9.70E-05	-8.79E-05	-9.80E-05	$0.5 \times (3x_5^2 - 1) \times x_2$
70						2.03E-04	1.11E-04	-5.00E-05	$0.5 \times (3x_5^2 - 1) \times x_3$
71						-5.30E-05	3.09E-06	-8.84E-06	$0.5 \times (3x_5^2 - 1) \times x_4$
72						-2.86E-05	-7.78E-06	4.81E-05	$0.5 \times (3x_5^2 - 1) \times x_6$
73						3.31E-05	4.40E-05	8.97E-06	$0.5 \times (3x_6^2 - 1) \times x_1$
74						-7.27E-05	-1.11E-04	-2.53E-04	$0.5 \times (3x_6^2 - 1) \times x_2$
75						1.10E-05	-9.19E-05	-8.75E-05	$0.5 \times (3x_6^2 - 1) \times x_3$
76						2.97E-07	-4.23E-05	-6.09E-05	$0.5 \times (3x_6^2 - 1) \times x_4$
77						-5.13E-05	-9.76E-05	-8.36E-05	$0.5 \times (3x_6^2 - 1) \times x_5$
78						-1.66E-05	-1.96E-05	-4.29E-05	$0.5 \times (5x_1^3 - 3x_1)$
79						-1.20E-04	-1.52E-04	-2.15E-04	$0.5 \times (5x_2^3 - 3x_2)$
80						-3.63E-05	-1.59E-05	-1.48E-05	$0.5 \times (5x_3^3 - 3x_3)$
81						-1.67E-05	4.22E-06	4.72E-05	$0.5 \times (5x_4^3 - 3x_4)$
82						4.68E-05	4.45E-05	-3.53E-06	$0.5 \times (5x_5^3 - 3x_5)$
83						1.24E-05	-2.11E-05	-7.58E-05	$0.5 \times (5x_6^3 - 3x_6)$

Utilisation des polynômes d'Hermite avec les lois de distributions des variables utilisées pour l'analyse de sensibilité (lois normales de moyenne et écart-type identiques à ceux des lois uniformes)

<i>m</i>	<i>p</i> = 2 ; <i>r</i> = 50			<i>p</i> = 2 ; <i>r</i> = 100			<i>p</i> = 3 ; <i>r</i> = 100			$\psi_m$
	$n_{CH,i}/n_{CH,0}$			$n_{CH,i}/n_{CH,0}$			$n_{CH,i}/n_{CH,0}$			
	0,6	0,7	0,8	0,6	0,7	0,8	0,6	0,7	0,8	
0	4.17E-03	5.15E-03	6.30E-03	4.17E-03	5.15E-03	6.31E-03	4.18E-03	5.18E-03	6.26E-03	1
1	7.10E-04	8.58E-04	1.03E-03	7.09E-04	8.71E-04	1.04E-03	6.68E-04	1.06E-03	1.03E-03	x <sub>1</sub>
2	-8.48E-04	-1.09E-03	-1.37E-03	-8.83E-04	-1.13E-03	-1.43E-03	-9.16E-04	-1.23E-03	-1.52E-03	x <sub>2</sub>
3	3.81E-04	6.60E-04	9.94E-04	3.52E-04	6.33E-04	9.69E-04	3.92E-04	5.62E-04	1.10E-03	x <sub>3</sub>
4	-4.21E-04	-5.23E-04	-6.67E-04	-4.03E-04	-5.01E-04	-6.42E-04	-4.90E-04	-5.21E-04	-7.20E-04	x <sub>4</sub>
5	-7.08E-04	-5.40E-04	-3.35E-04	-7.60E-04	-5.88E-04	-3.74E-04	-7.53E-04	-5.62E-04	-4.99E-04	x <sub>5</sub>
6	-4.61E-06	-2.16E-05	1.81E-05	2.47E-06	2.76E-06	-1.25E-05	-3.28E-05	4.55E-05	-3.29E-05	x <sub>6</sub>
7	-1.43E-04	-1.68E-04	-2.00E-04	-1.63E-04	-1.91E-04	-2.47E-04	-1.45E-04	-1.73E-04	-2.65E-04	x <sub>1</sub> ×x <sub>2</sub>
8	4.43E-05	8.61E-05	1.42E-04	3.85E-05	8.84E-05	1.19E-04	7.28E-05	9.55E-05	1.29E-04	x <sub>1</sub> ×x <sub>3</sub>
9	-4.12E-05	-8.32E-05	-1.14E-04	-7.58E-05	-8.05E-05	-1.03E-04	-5.48E-05	-8.47E-05	-9.64E-05	x <sub>1</sub> ×x <sub>4</sub>
10	-1.45E-04	-1.13E-04	7.18E-06	-1.32E-04	-1.01E-04	-5.87E-05	-1.24E-04	-8.92E-05	-7.74E-05	x <sub>1</sub> ×x <sub>5</sub>
11	5.18E-05	4.16E-05	7.07E-05	4.99E-06	1.65E-07	2.31E-06	9.11E-06	-2.32E-06	1.80E-05	x <sub>1</sub> ×x <sub>6</sub>
12	-1.34E-04	-2.07E-04	-3.40E-04	-1.16E-04	-1.88E-04	-3.03E-04	-1.53E-04	-1.92E-04	-3.10E-04	x <sub>2</sub> ×x <sub>3</sub>
13	1.29E-04	1.53E-04	1.89E-04	7.88E-05	9.98E-05	1.31E-04	7.87E-05	6.79E-05	1.16E-04	x <sub>2</sub> ×x <sub>4</sub>
14	2.06E-04	1.68E-04	1.32E-04	2.43E-04	2.08E-04	1.30E-04	2.00E-04	1.59E-04	8.25E-05	x <sub>2</sub> ×x <sub>5</sub>
15	4.31E-08	-2.22E-05	2.35E-05	-1.45E-05	-3.99E-05	-4.04E-05	1.23E-05	-2.79E-05	1.73E-05	x <sub>2</sub> ×x <sub>6</sub>
16	3.85E-05	5.55E-05	1.01E-04	5.67E-05	5.70E-05	5.53E-05	8.46E-05	1.23E-04	-1.05E-05	x <sub>3</sub> ×x <sub>4</sub>
17	-3.09E-04	-3.11E-04	-3.22E-04	-3.60E-04	-3.41E-04	-3.03E-04	-3.29E-04	-2.99E-04	-3.17E-04	x <sub>3</sub> ×x <sub>5</sub>
18	-1.34E-05	-2.14E-05	-9.23E-06	1.89E-05	3.01E-05	2.32E-05	-5.84E-06	-2.65E-06	-3.45E-05	x <sub>3</sub> ×x <sub>6</sub>
19	1.54E-04	1.52E-04	1.34E-04	1.43E-04	1.39E-04	1.02E-04	1.45E-04	1.22E-04	1.27E-04	x <sub>4</sub> ×x <sub>5</sub>
20	1.83E-05	2.03E-05	-3.34E-05	1.72E-05	1.96E-05	-1.02E-05	-7.93E-07	-1.84E-05	-2.59E-05	x <sub>4</sub> ×x <sub>6</sub>
21	-5.38E-05	-6.09E-05	6.33E-05	-1.74E-06	-2.20E-06	2.70E-05	3.26E-06	-3.62E-05	5.92E-05	x <sub>5</sub> ×x <sub>6</sub>
22	-1.19E-05	-2.83E-05	-3.95E-05	-3.50E-05	-5.50E-05	-7.35E-05	-2.49E-05	-4.39E-05	-7.90E-05	x <sub>1</sub> <sup>2</sup> -1
23	1.58E-04	2.24E-04	3.04E-04	1.44E-04	2.27E-04	3.44E-04	1.23E-04	1.93E-04	3.02E-04	x <sub>2</sub> <sup>2</sup> -1
24	-1.56E-04	-1.59E-04	-1.69E-04	-1.39E-04	-1.57E-04	-1.35E-04	-1.16E-04	-1.26E-04	-1.55E-04	x <sub>3</sub> <sup>2</sup> -1
25	4.08E-05	4.05E-05	7.78E-05	6.76E-05	8.82E-05	1.12E-04	4.69E-05	9.12E-05	1.24E-04	x <sub>4</sub> <sup>2</sup> -1
26	2.49E-05	4.58E-06	-3.33E-05	1.20E-05	-1.66E-05	-7.01E-05	2.16E-05	-5.64E-06	-8.02E-05	x <sub>5</sub> <sup>2</sup> -1
27	-1.58E-05	-9.81E-06	-1.69E-05	-7.68E-06	-2.01E-05	-3.01E-05	4.46E-06	8.29E-07	-3.64E-05	x <sub>6</sub> <sup>2</sup> -1
28							-2.74E-05	-3.60E-05	2.43E-05	x <sub>1</sub> ×x <sub>2</sub> ×x <sub>3</sub>
29							3.13E-05	1.39E-05	-7.42E-05	x <sub>1</sub> ×x <sub>2</sub> ×x <sub>4</sub>
30							8.15E-06	-6.83E-05	1.15E-05	x <sub>1</sub> ×x <sub>2</sub> ×x <sub>5</sub>
31							-8.63E-07	5.08E-05	-8.89E-05	x <sub>1</sub> ×x <sub>2</sub> ×x <sub>6</sub>
32							3.12E-06	3.48E-05	2.05E-06	x <sub>1</sub> ×x <sub>3</sub> ×x <sub>4</sub>
33							-3.35E-06	-4.56E-05	-1.04E-04	x <sub>1</sub> ×x <sub>3</sub> ×x <sub>5</sub>
34							-5.39E-06	-8.64E-05	1.60E-04	x <sub>1</sub> ×x <sub>3</sub> ×x <sub>6</sub>
35							1.95E-06	-1.40E-05	3.19E-05	x <sub>1</sub> ×x <sub>4</sub> ×x <sub>5</sub>
36							-2.62E-05	-1.98E-05	-1.73E-05	x <sub>1</sub> ×x <sub>4</sub> ×x <sub>6</sub>
37							-1.08E-05	-5.94E-05	1.28E-05	x <sub>1</sub> ×x <sub>5</sub> ×x <sub>6</sub>
38							-4.62E-06	-1.01E-04	1.11E-04	x <sub>2</sub> ×x <sub>3</sub> ×x <sub>4</sub>
39							1.11E-04	1.39E-04	6.20E-06	x <sub>2</sub> ×x <sub>3</sub> ×x <sub>5</sub>
40							6.97E-07	-2.47E-05	-1.67E-05	x <sub>2</sub> ×x <sub>3</sub> ×x <sub>6</sub>
41							-1.92E-05	-1.10E-04	-2.77E-05	x <sub>2</sub> ×x <sub>4</sub> ×x <sub>5</sub>
42							3.02E-06	7.62E-05	-5.92E-06	x <sub>2</sub> ×x <sub>4</sub> ×x <sub>6</sub>
43							7.00E-06	2.03E-05	-4.85E-06	x <sub>2</sub> ×x <sub>5</sub> ×x <sub>6</sub>
44							-2.67E-05	3.43E-05	-7.14E-06	x <sub>3</sub> ×x <sub>4</sub> ×x <sub>5</sub>
45							-2.83E-06	-1.06E-04	1.14E-04	x <sub>3</sub> ×x <sub>4</sub> ×x <sub>6</sub>
46							1.04E-05	-3.75E-05	-1.20E-04	x <sub>3</sub> ×x <sub>5</sub> ×x <sub>6</sub>

47							2.03E-05	6.86E-06	-7.63E-06	$x_4 \times x_5 \times x_6$
48							1.17E-05	1.16E-05	3.84E-05	$(x_1^2 - 1) \times x_2$
49							1.83E-06	-4.30E-05	5.99E-05	$(x_1^2 - 1) \times x_3$
50							3.90E-06	-2.64E-05	2.46E-05	$(x_1^2 - 1) \times x_4$
51							1.64E-05	-6.14E-06	-3.68E-05	$(x_1^2 - 1) \times x_5$
52							-2.99E-05	6.39E-05	-2.14E-05	$(x_1^2 - 1) \times x_6$
53							2.71E-05	5.96E-05	5.61E-05	$(x_2^2 - 1) \times x_1$
54							-3.28E-05	-8.34E-06	1.33E-05	$(x_2^2 - 1) \times x_3$
55							-4.65E-05	-2.81E-05	-6.63E-05	$(x_2^2 - 1) \times x_4$
56							-9.27E-05	-6.93E-05	-5.00E-05	$(x_2^2 - 1) \times x_5$
57							1.85E-05	3.71E-05	7.20E-05	$(x_2^2 - 1) \times x_6$
58							-4.49E-05	3.86E-05	-6.34E-05	$(x_3^2 - 1) \times x_1$
59							5.00E-05	8.99E-06	6.18E-05	$(x_3^2 - 1) \times x_2$
60							2.18E-05	3.84E-05	4.33E-05	$(x_3^2 - 1) \times x_4$
61							-1.39E-05	-2.57E-05	7.32E-05	$(x_3^2 - 1) \times x_5$
62							-2.58E-06	-2.97E-05	4.10E-05	$(x_3^2 - 1) \times x_6$
63							-2.97E-05	2.11E-05	-3.06E-05	$(x_4^2 - 1) \times x_1$
64							2.83E-05	-1.08E-05	-9.39E-05	$(x_4^2 - 1) \times x_2$
65							-2.18E-05	-6.42E-05	-4.34E-05	$(x_4^2 - 1) \times x_3$
66							-2.87E-05	2.35E-06	-9.07E-05	$(x_4^2 - 1) \times x_5$
67							-2.01E-05	1.94E-05	7.16E-06	$(x_4^2 - 1) \times x_6$
68							-6.19E-07	1.76E-05	4.48E-05	$(x_5^2 - 1) \times x_1$
69							-3.65E-06	5.94E-05	3.44E-05	$(x_5^2 - 1) \times x_2$
70							5.65E-05	4.47E-05	7.03E-05	$(x_5^2 - 1) \times x_3$
71							-3.14E-06	-4.09E-05	-3.20E-05	$(x_5^2 - 1) \times x_4$
72							1.98E-05	-4.49E-05	-1.42E-05	$(x_5^2 - 1) \times x_6$
73							2.89E-06	5.54E-05	-5.48E-05	$(x_6^2 - 1) \times x_1$
74							2.71E-06	1.05E-05	1.10E-05	$(x_6^2 - 1) \times x_2$
75							2.69E-05	-3.40E-05	1.10E-05	$(x_6^2 - 1) \times x_3$
76							-2.79E-05	2.37E-05	-7.14E-05	$(x_6^2 - 1) \times x_4$
77							1.99E-05	6.03E-06	-4.82E-05	$(x_6^2 - 1) \times x_5$
78							2.36E-06	2.17E-05	2.81E-05	$(x_1^3 - 3x_1)$
79							-5.81E-05	-8.47E-05	-6.54E-05	$(x_2^3 - 3x_2)$
80							7.01E-06	-2.60E-06	2.48E-05	$(x_3^3 - 3x_3)$
81							-3.04E-05	-1.08E-05	-1.47E-05	$(x_4^3 - 3x_4)$
82							2.77E-05	3.06E-05	-2.74E-05	$(x_5^3 - 3x_5)$
83							-1.20E-05	1.09E-05	-3.12E-05	$(x_6^3 - 3x_6)$

## *Annexe G : Coefficients du développement en chaos polynomial pour la sortie $\Delta S_r$ du modèle de carbonatation*

Utilisation des polynômes de Legendre avec les lois de distributions des variables utilisées pour l'analyse de sensibilité (lois uniformes)

<b><i>m</i></b>	<b><i>p = 2 ; r = 50</i></b>	<b><i>p = 2 ; r = 100</i></b>	<b><i>p = 3 ; r = 100</i></b>	<b><math>\Psi_m</math></b>
0	0.01254	0.012593	0.013328	1
1	-0.00636	-0.00443	-0.0036	$x_1$
2	-0.00505	-0.00724	-0.00811	$x_2$
3	0.006131	0.005624	0.007406	$x_3$
4	0.005025	0.005121	0.007695	$x_4$
5	-0.01854	-0.0201	-0.02278	$x_5$
6	-0.00168	-0.00041	-0.00483	$x_1 \times x_2$
7	-0.00398	-0.00216	-0.00019	$x_1 \times x_3$
8	0.001859	-0.00153	-0.0038	$x_1 \times x_4$
9	0.008957	0.00464	0.002256	$x_1 \times x_5$
10	-0.00111	-0.00161	-0.00354	$x_2 \times x_3$
11	-0.00221	-0.00252	0.00103	$x_2 \times x_4$
12	0.005199	0.011615	0.011063	$x_2 \times x_5$
13	0.002362	0.004591	0.002155	$x_3 \times x_4$
14	-0.00856	-0.00742	-0.00516	$x_3 \times x_5$
15	-0.00741	-0.00916	-0.00662	$x_4 \times x_5$
16	0.001446	-0.00046	0.0014	$0.5 \times (3x_1^2 - 1)$
17	-0.00286	-0.00114	0.000193	$0.5 \times (3x_2^2 - 1)$
18	0.001687	7.49E-05	0.000805	$0.5 \times (3x_3^2 - 1)$
19	-0.00105	-0.00154	0.001394	$0.5 \times (3x_4^2 - 1)$
20	0.011234	0.013597	0.013358	$0.5 \times (3x_5^2 - 1)$
21			-0.00765	$x_1 \times x_2 \times x_3$
22			-0.00405	$x_1 \times x_2 \times x_4$
23			0.004272	$x_1 \times x_2 \times x_5$
24			0.000561	$x_1 \times x_3 \times x_4$
25			-0.00748	$x_1 \times x_3 \times x_5$
26			-0.00305	$x_1 \times x_4 \times x_5$
27			-0.00532	$x_2 \times x_3 \times x_4$
28			0.012166	$x_2 \times x_3 \times x_5$
29			0.002693	$x_2 \times x_4 \times x_5$
30			-0.00353	$x_3 \times x_4 \times x_5$
31			-0.00362	$0.5 \times (3x_1^2 - 1) \times x_2$
32			0.000482	$0.5 \times (3x_1^2 - 1) \times x_3$
33			-0.00452	$0.5 \times (3x_1^2 - 1) \times x_4$
34			-0.00043	$0.5 \times (3x_1^2 - 1) \times x_5$
35			0.003559	$0.5 \times (3x_2^2 - 1) \times x_1$
36			0.009185	$0.5 \times (3x_2^2 - 1) \times x_3$
37			0.005136	$0.5 \times (3x_2^2 - 1) \times x_4$
38			-0.00882	$0.5 \times (3x_2^2 - 1) \times x_5$
39			0.006042	$0.5 \times (3x_3^2 - 1) \times x_1$
40			-0.00419	$0.5 \times (3x_3^2 - 1) \times x_2$
41			-0.00013	$0.5 \times (3x_3^2 - 1) \times x_4$
42			-0.00256	$0.5 \times (3x_3^2 - 1) \times x_5$
43			-0.00414	$0.5 \times (3x_4^2 - 1) \times x_1$
44			0.00189	$0.5 \times (3x_4^2 - 1) \times x_2$

45			-0.00427	$0.5 \times (3x_4^2 - 1) \times x_3$
46			0.001986	$0.5 \times (3x_4^2 - 1) \times x_5$
47			0.000889	$0.5 \times (3x_5^2 - 1) \times x_1$
48			-0.00781	$0.5 \times (3x_5^2 - 1) \times x_2$
49			0.006607	$0.5 \times (3x_5^2 - 1) \times x_3$
50			0.005123	$0.5 \times (3x_5^2 - 1) \times x_4$
51			-5.6E-05	$0.5 \times (5x_1^3 - 3x_1)$
52			0.002373	$0.5 \times (5x_2^3 - 3x_2)$
53			-1.4E-05	$0.5 \times (5x_3^3 - 3x_3)$
54			0.001368	$0.5 \times (5x_4^3 - 3x_4)$
55			-0.0079	$0.5 \times (5x_5^3 - 3x_5)$

Utilisation des polynômes d'Hermite avec les lois de distributions des variables utilisées pour l'analyse de sensibilité (lois normales de moyenne et écart-type identiques à ceux des lois uniformes)

$m$	$p = 2 ; r = 50$	$p = 2 ; r = 100$	$p = 3 ; r = 100$	$\psi_m$
0	0.013169	0.011807	0.011922	1
1	-0.00267	-0.00297	-0.00252	$x_1$
2	-0.00388	-0.00276	0.001281	$x_2$
3	0.002005	0.001928	0.005052	$x_3$
4	0.001725	0.001329	0.002877	$x_4$
5	-0.0094	-0.01	-0.01575	$x_5$
6	0.001016	-0.00069	-8.6E-05	$x_1 \times x_2$
7	-0.00048	-0.00074	-0.00058	$x_1 \times x_3$
8	-0.00012	0.000293	-0.00015	$x_1 \times x_4$
9	0.001664	0.000716	0.001283	$x_1 \times x_5$
10	-0.00024	-8.6E-05	-0.00131	$x_2 \times x_3$
11	-0.00029	0.00169	0.001953	$x_2 \times x_4$
12	0.004076	0.001969	0.002218	$x_2 \times x_5$
13	0.000901	0.0004	0.002426	$x_3 \times x_4$
14	-0.0004	-0.00109	-0.00131	$x_3 \times x_5$
15	-0.00229	-0.00121	-0.00117	$x_4 \times x_5$
16	0.000859	0.000651	0.000326	$x_1^2 - 1$
17	0.000791	-0.00065	-0.00113	$x_2^2 - 1$
18	0.000414	0.000407	0.00012	$x_3^2 - 1$
19	0.000275	-0.00049	0.000948	$x_4^2 - 1$
20	0.004927	0.005805	0.005543	$x_5^2 - 1$
21			-6.1E-05	$x_1 \times x_2 \times x_3$
22			-0.00175	$x_1 \times x_2 \times x_4$
23			0.001052	$x_1 \times x_2 \times x_5$
24			-0.00174	$x_1 \times x_3 \times x_4$
25			-0.00046	$x_1 \times x_3 \times x_5$
26			-0.00071	$x_1 \times x_4 \times x_5$
27			-0.00153	$x_2 \times x_3 \times x_4$
28			-0.00096	$x_2 \times x_3 \times x_5$
29			-0.00114	$x_2 \times x_4 \times x_5$
30			0.000961	$x_3 \times x_4 \times x_5$
31			4.86E-05	$(x_1^2 - 1) \times x_2$
32			0.000414	$(x_1^2 - 1) \times x_3$
33			0.000132	$(x_1^2 - 1) \times x_4$
34			-0.00026	$(x_1^2 - 1) \times x_5$
35			0.000482	$(x_2^2 - 1) \times x_1$

36			0.000978	$(x_2^2-1) \times x_3$
37			-0.00259	$(x_2^2-1) \times x_4$
38			-0.00073	$(x_2^2-1) \times x_5$
39			-0.00019	$(x_3^2-1) \times x_1$
40			-0.00098	$(x_3^2-1) \times x_2$
41			0.000268	$(x_3^2-1) \times x_4$
42			-0.00028	$(x_3^2-1) \times x_5$
43			0.00063	$(x_4^2-1) \times x_1$
44			0.001335	$(x_4^2-1) \times x_2$
45			0.001763	$(x_4^2-1) \times x_3$
46			0.000862	$(x_4^2-1) \times x_5$
47			-0.00017	$(x_5^2-1) \times x_1$
48			-0.00131	$(x_5^2-1) \times x_2$
49			0.000323	$(x_5^2-1) \times x_3$
50			0.001304	$(x_5^2-1) \times x_4$
51			-0.00022	$(x_1^3-3x_1)$
52			0.002227	$(x_2^3-3x_2)$
53			7.75E-05	$(x_3^3-3x_3)$
54			0.000936	$(x_4^3-3x_4)$
55			-0.00305	$(x_5^3-3x_5)$