

Projet de recherche et développement



Stockage de CO₂ par carbonatation du béton recyclé

RAPPORT DE RECHERCHE / LIVRABLE

Modélisation de la carbonatation naturelle de la Résidence Aziyadé La Rochelle sur 50 ans dans les classes d'exposition XC1, XC3 et XC4

Auteur(s) / Organisme(s) :

Ouali Amiri, Jérôme Claverie, Farah Kaddah, Emmanuel Rozière (GeM,
Université de Nantes, CNRS)

Pierre-Yves Mahieux, Philippe Turcry (LaSIE, La Rochelle Université, CNRS)

Paulo Claude, Jonathan Mai-Nhu (Cerib)

Thème de rattachement :

GT1.2 : Modélisation du phénomène de carbonatation accélérée

FCARB/R/019

N° lettres de commande :
LC/20/FCARB/042-43-44

Date : 16 octobre 2023

Site internet : www.fastcarb.fr

Plateforme collaborative : www.omnispace.fr/fastcarb

Président : Raoul de PARISOT

Directeur : Jean-Michel TORRENTI

Gestion administrative et financière : IREX (www.irex.asso.fr), 9 rue de Berri 75008 PARIS, contact@irex.asso.fr

Sommaire

SOMMAIRE	2
1 RESUME	4
1.1 EN FRANÇAIS	4
1.2 EN ANGLAIS	4
2 INTRODUCTION	5
3 DONNEES DE L'ETUDE DE CAS	6
3.1 PRESENTATION DE LA RESIDENCE AZIYADE	6
3.2 DOCUMENTS A DISPOSITION	7
3.3 DONNEES DISPONIBLES POUR LES CALCULS	7
4 PRESENTATION DES MODELES	11
4.1 MODELES PHYSICO-CHIMIQUES A RESOLUTION NUMERIQUE	11
4.1.1 Modèle du CERIB –SDReaM-crete.....	11
4.1.1.1 Présentation des principales équations	11
4.1.1.2 Logiciel de résolution.....	13
4.1.1.3 Données d'entrée et de sortie.....	13
4.1.2 Modèle du GeM	15
4.1.2.1 Principales équations	15
4.1.2.2 Résolution numérique	16
4.1.2.3 Données d'entrée et de sortie.....	17
4.1.3 Modèle du LaSIE.....	18
4.1.3.1 Principales équations	18
4.1.3.2 Résolution numérique	19
4.1.3.3 Données d'entrée et de sortie.....	20
4.2 MODELES ANALYTIQUES.....	21
4.2.1 Modèle de la norme NF EN 16757	21
4.2.2 Modèle de la fib	22
5 RESULTATS DES CALCULS	24
5.1 MODELES NUMERIQUES.....	24
5.1.1 Résultats du Cerib	24
5.1.2 Résultats du GeM.....	30
5.1.3 Résultats du LaSIE	33
5.2 MODELES ANALYTIQUES.....	37
5.2.1 Modèle NF EN 16757	37
5.2.2 Modèle fib.....	39

6	COMPARAISON DES RESULTATS	41
6.1	COMPARAISON DES SIMULATIONS NUMERIQUES	41
6.2	COMPARAISON DES RESULTATS DE TOUS LES MODELES	42
6.2.1	Comparaison des profondeurs de carbonatation	42
6.2.2	Comparaison des quantités de CO ₂ fixé par m ²	43
6.2.3	Comparaison des quantités totales de CO ₂ fixé par le bâtiment Aziyadé	44
7	SYNTHESE	46
8	REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	47

1 Résumé

1.1 En français

Au cours de l'étude présentée ici, nous avons cherché à évaluer le potentiel de fixation du CO₂ d'un ouvrage en béton armé sur sa durée de vie réglementaire. Une étude de cas a été réalisée sur la résidence d'étudiants Aziyadé construite en 2016 à La Rochelle, bâtiment en béton préfabriqué brut de décoffrage. La quantité de CO₂ fixé sur 50 ans a été déterminée à l'aide de modèles physico-chimiques développés par trois laboratoires (Cerib, GeM, LaSIE) et de modèles analytiques (modèle de la norme EN16757 et modèle de la fib).

Les résultats des modèles s'avèrent assez dispersés : le degré de carbonatation de la résidence (rapport entre la quantité totale de CO₂ fixé et la quantité de CO₂ émise par décarbonatation du calcaire lors de la production du clinker contenu dans le bâtiment) varie de 8 à 39% après 50 ans. A minima, les calculs montrent que la re-minéralisation du CO₂ par carbonatation naturelle est à prendre en compte dans l'évaluation environnementale des bâtiments. En cas de déconstruction après 50 ans de durée de vie, la plupart des modèles montre que le potentiel de carbonatation du béton concassé doit être non négligeable, ce qui justifie un procédé de carbonatation accéléré tel que ceux envisagés au cours du PN FastCarb.

1.2 En anglais

During the present study, our aim was to evaluate the CO₂ binding capacity of a reinforced concrete structure over its service life. A case study was carried out on the Aziyadé residence built in 2016 in La Rochelle, a raw prefabricated concrete building. The quantity of bound CO₂ over 50 years was evaluated using models developed by three laboratories (Cerib, GeM, LaSIE) and two analytical models (EN16757 standard model and fib model).

The results of the models are quite dispersed: the carbonation degree of Aziyadé (ratio between the quantity of bound CO₂ and the quantity of CO₂ emitted by the limestone decarbonation during the production of the clinker contained in Aziyadé) varies from 8 to 39% after 50 years. The calculations show that the re-mineralization of CO₂ by natural carbonation should be considered in the environmental assessment of concrete structures. In the case of a deconstruction after 50 years of service life, most models show that the carbonation potential of crushed concrete should be non-negligible, which justifies an accelerated carbonation process such as those investigated during the Project FastCarb.

2 Introduction

Le Projet National FastCarb s'intéresse au piégeage de CO₂ par carbonatation accélérée de granulats recyclés issus du concassage de déchets de déconstruction de structures en béton. Néanmoins, la minéralisation du CO₂ atmosphérique commence dès le début de la vie de ces dernières.

Au cours de l'étude présentée dans ce rapport, nous avons cherché à évaluer le potentiel de fixation du CO₂ par un ouvrage en béton armé sur sa durée de vie (50 ans). Cette évaluation s'est faite par l'intermédiaire d'une étude de cas, à savoir l'étude de la résidence Aziyadé construite en 2016 à La Rochelle. Ce bâtiment présente un intérêt majeur : il est construit en béton préfabriqué brut de décoffrage, donc sans enduit ou autre peinture limitant les échanges entre la surface du béton et le milieu ambiant. Par conséquent, l'évaluation du piégeage du CO₂ par ce bâtiment peut se faire avec des modèles de carbonatation conçus généralement pour l'étude de la durabilité des ouvrages d'art en béton brut.

Ce travail peut se voir aussi comme un benchmark, car les mêmes données ont été fournies aux participants à l'étude (Cerib, GeM, LaSIE) qui ont utilisé leur propre modèle de carbonatation. Ces modèles ont déjà fait l'objet d'un benchmark au début du PN FastCarb (Jacquemet et al, 2020). En outre, deux modèles analytiques ont été utilisés pour évaluer la carbonatation de la résidence Aziyadé : le modèle de la norme EN16757, qui sert à calculer réglementairement l'absorption de CO₂ fixé par les ouvrages en béton (donnée d'entrée des DEP, déclarations environnementales des produits de construction) et le modèle de la fib.

Le rapport présente dans un premier temps l'étude de cas et les données fournies aux participants. Dans une deuxième partie sont décrits brièvement les modèles des laboratoires ainsi que les deux modèles analytiques. Dans la troisième partie sont donnés les résultats des simulations numériques et des calculs analytiques, qui sont comparés dans la dernière partie.

3 Données de l'étude de cas

3.1 Présentation de la résidence Aziyadé

Située à La Rochelle, Aziyadé est une résidence d'étudiants de 92 studios (de 18 à 23 m²) avec différentes salles communes et un parking au rez-de-chaussée (Figure 1). Le bâtiment a été conçu par l'agence d'architecture HOBO¹ à la demande du CROUS² et réalisé par l'entreprise CIR PREFEA³. L'ensemble des voiles et éléments horizontaux a été préfabriqué pour être ensuite assemblé sur le site de construction.



Figure 1. Vue de la résidence Aziyadé, La Rochelle, 2020 (P-Y. Mahieux).

Les surfaces de l'enveloppe structurelle sont en béton brut, blanc ou gris, matricé ou poli. Les éléments en béton sont exposés à l'air ambiant donc soumis à une carbonatation naturelle. Les panneaux verticaux préfabriqués sont constitués de trois éléments assemblés en sandwich : un panneau intérieur en béton armé de 16 cm, un isolant en laine minérale de roche de 12 cm et un panneau extérieur en béton armé de 8 cm, soit une épaisseur totale de 38 cm.

En quelques chiffres, la résidence Aziyadé représente 1500 m³ de béton, 4100 m² de surface horizontale, 223 éléments de plancher préfabriqués en béton armé, des éléments verticaux intérieurs de panneaux préfabriqués en béton armé, 99 panneaux sandwichs et divers éléments structurels tels que des poteaux, des poutres, des escaliers et des paliers. Les connexions entre les éléments sont réalisées par clavetage et par scellement chimique des barres d'acier.

¹ www.hobo-architecture.com/projets/azyade

² www.crous-poitiers.fr/logement/residence-azyade-2/

³ cir-prefa.com/content/azyade-crous-la-rochelle-17

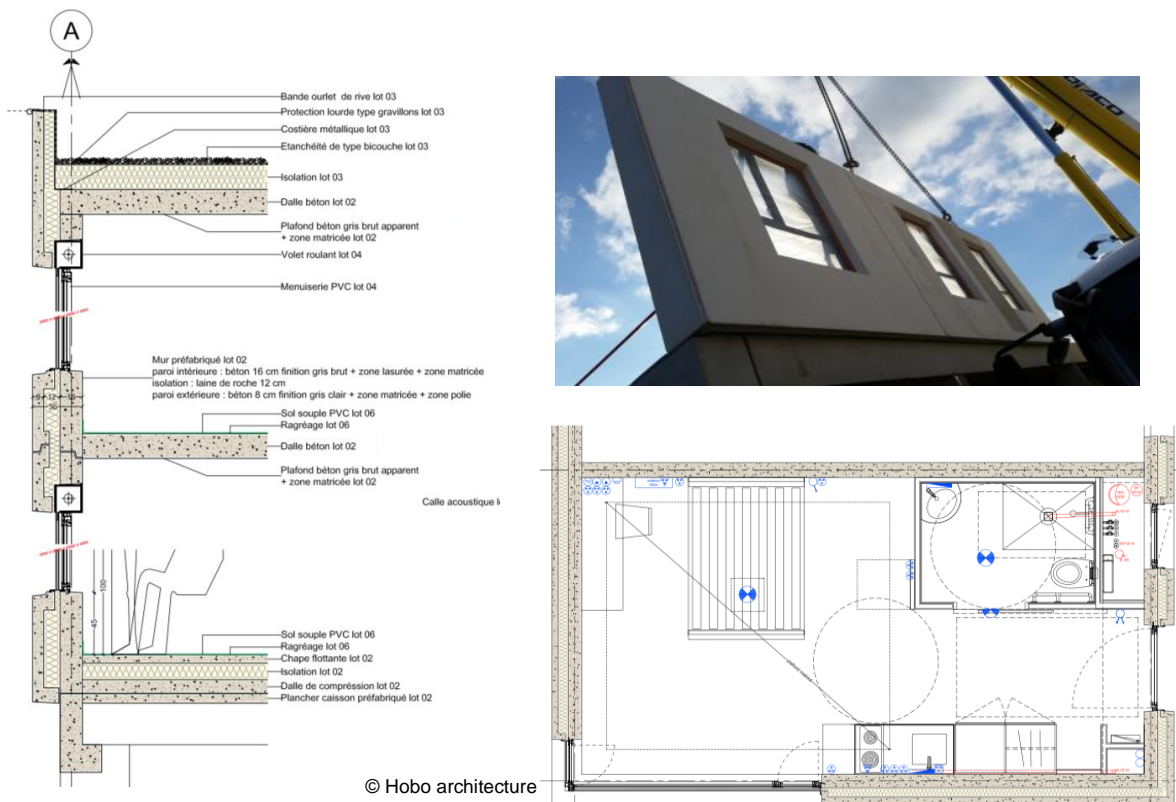


Figure 2. Voile préfabriqué de la résidence Aziyadé : photographie et vues en coupe.

3.2 Documents à disposition

Les documents suivants ont été mis à disposition des modélisateurs sur la plateforme collaborative du PN FastCarb :

- Fiches techniques des 2 ciments et des 2 bétons ;
- Plans GO du RDC au R+5 ;
- Plans d'architecte ;
- Données météorologiques sur les années 2016, 2017, 2018.

3.3 Données disponibles pour les calculs

- **Ciments :**

Peu d'informations sont disponibles dans la fiche technique du ciment blanc de type CEM I 52,5 R provenant d'Espagne (Tudela-Veguín) utilisé pour les murs extérieurs. Le ciment gris,

un CEM I 52,5 R provenant du Beaucaire, est bien mieux renseigné, puisque la composition chimique et minéralogique sont clairement mentionnées dans la fiche (Tableau 1).

Tableau 1. Composition chimiques et minéralogiques du ciment CEM I 52,5 R gris.

Major oxides (mass %)					Clinker mineralogical composition (mass %)			
SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	C ₃ S	C ₂ S	C ₃ A	C ₄ AF
20.4	5.0	2.7	65.2	1.0	71	9	8	9

- **Compositions des bétons :**

Deux bétons ont été utilisés : un C30/37 pour le panneau extérieur de 8 cm et un C35/45 pour le panneau intérieur de 16 cm. Le C30/37 est formulé avec le ciment blanc et C35/45 est avec le ciment gris. Les formulations ont été fournies par CIR PREFA (Tableau 2).

Tableau 2. Composition (en kg/m³) et propriétés des bétons.

	C30/37	C35/45
Cement CEM I 52.5R	340	330
Water	194	185
W/C	0.57	0.56
Filler	-	160
Fine aggregates	(0/2.5) ¹ 850	(0/4) 760
Coarse aggregates 1	(4/10) 1000	(4/8) 270
Coarse aggregates 2	-	(8/16) 665
Admixture Viscocrete KRONO 37	-	0.80%
Admixture Master X seed 100	-	3.00%
Admixture Master Glenium SKY 537	0.30%	-
18h compressive strength	19.1 MPa	23.8 MPa
18d compressive strength	43.4 MPa	57.7 MPa

¹ Particles size fraction of aggregates in parentheses (d/D)

- **Classes d'exposition :**

D'après les plans d'exécution, les classes d'expositions sont : XC1 pour l'intérieur (noté « ins ») et XF1 (XC4) pour l'extérieur (noté « out »). Compte tenu de la particularité des panneaux de façade, on peut considérer une troisième classe d'exposition pour les surfaces en contact avec l'isolant (noté « insu »), c'est-à-dire la classe XC3.

- ***Distances d'enrobage :***

Les distances d'enrobage sont de 20 mm pour les faces intérieures et de 40 mm pour les faces extérieures. Pour les surfaces au contact de l'isolant, nous n'avons pas d'information mais nous pouvons supposer que les distances d'enrobage ont été prises égales à 40 mm,

- ***Catégories de surface :***

Nous considérons 2 catégories de surface à savoir les surfaces verticales et les surfaces horizontales, notées respectivement VS et HS.

- ***Environnements :***

Nous considérons trois types d'environnement (intérieur, extérieur, isolant), correspondant par ailleurs aux trois classes d'exposition retenues (XC1, XC4 et XC3), pour deux concentrations en CO₂ et 4 humidités relatives, détaillées ci-après.

- ***Concentrations en CO₂ :***

Pour l'intérieur du bâtiment, nous avons retenu une concentration de 630 ppm. Cette concentration tient compte du taux d'occupation et du système de ventilation utilisé dans les studios. Pour l'extérieur, nous pouvons convenir d'une concentration de 450 ppm. Dans une première approche, nous avons considéré que la concentration en CO₂ dans l'isolant est identique à celle de l'extérieur, soit 450 ppm. Mais nous pourrions aussi considérer que la concentration est plus faible compte tenu du confinement même partiel de ce milieu.

- ***Humidités relatives :***

Nous considérons 4 humidités relatives : 50+/-10% HR à l'intérieur du bâtiment et 77% HR à l'extérieur. Pour cette dernière, l'humidité relative est une valeur moyenne issue des données météorologique de l'année 2018. Dans l'isolant, nous avons considéré deux humidités relatives, côté intérieur et extérieur, de 54 et 74% respectivement. Un profil d'humidité dans l'isolant a été déterminé à l'aide du logiciel UBAKUS basé sur le diagramme de Glaser (Figure 3). Pour obtenir ce profil de HR à l'équilibre, nous avons considéré des températures dans le bâtiment et à l'extérieur respectivement de 20°C et 14,3°C (moyenne sur l'année 2018).

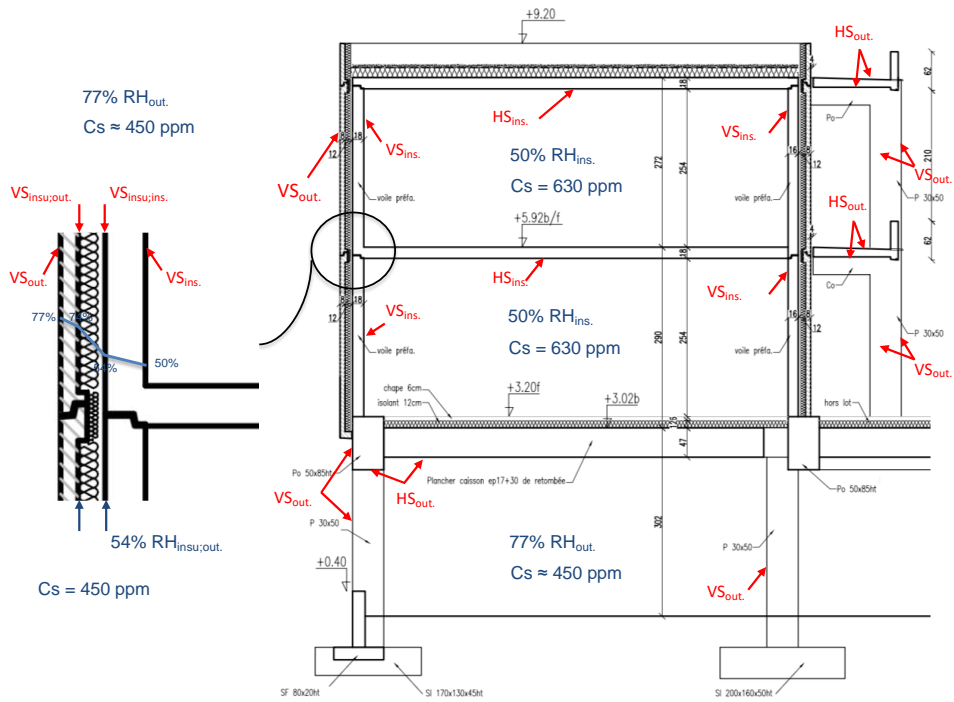


Figure 3. Conditions limites (CO₂ et humidité relative) des différents éléments en béton armé.

- **Surface des parois :**

D'après les plans à disposition, nous avons fait le métré détaillé pour chaque catégorie de surface. Les surfaces et les conditions ambiantes sont récapitulées dans le Tableau 3.

Tableau 3. Surface des différentes parois et conditions aux limites.

Surfaces (catégories)	RDC (m ²)	Etages (m ²)	Total (m ²)	HR (%)	Cs (ppm)
VS _{out} .	480	2010	2490	77	450
HS _{out} .	1500	1040	2550	77	450
VS _{ins} .	0	7240	7240	50	630
HS _{ins} .	0	2400	2400	50	630
VS _{insu,out} .	0	1620	1620	74	450
VS _{insu,ins} .	0	1620	1620	54	450

Note : « out » et « ins » désignent les parois respectivement extérieures et intérieures. « insu » désignent les surfaces en contact avec l'isolant.

4 Présentation des modèles

Dans cette section sont présentés les différents modèles de l'étude. Les modèles du Cerib, du GeM et du LaSIE ont déjà fait l'objet d'une présentation dans le rapport FCARB002 du PN FastCarb (N. Jacquemet et al, 2020).

4.1 Modèles physico-chimiques à résolution numérique

4.1.1 Modèle du CERIB –SDReaM-crete

Le modèle SDReaM-crete a été développé par J. Mai-Nhu lors de sa thèse réalisée entre le CERIB et le LMDC à Toulouse (Mai-Nhu, 2013).

4.1.1.1 Présentation des principales équations

Dans son modèle, Mai-Nhu (2013) adapte l'équation de Richard (Richard, 1931) pour décrire les mouvements d'eau dans le béton (Equation 1) :

$$\left[\rho_l \cdot \varphi \cdot \frac{\partial S_r}{\partial h} + \frac{p_{vsat} \cdot M_{H_2O}}{RT} \cdot \varphi \cdot \left(1 - S_r - h \frac{\partial S_r}{\partial h} \right) \right] \frac{\partial h}{\partial t} \quad \text{Equation 1}$$

$$= \text{div} \left(\rho_l^2 \frac{k_l}{\eta_l} \cdot k_{rl} \cdot \frac{RT}{M_{H_2O}} \cdot \frac{1}{h} \cdot \overrightarrow{\text{grad}h} + \frac{M_{H_2O}}{RT} \cdot p_{vsat} \cdot R_d \cdot D \cdot \overrightarrow{\text{grad}h} \right) + \beta_{H_2O}$$

Où : S_r est le taux de saturation du béton qui dépend de l'humidité relative de l'environnement, ρ_l la masse volumique de l'eau (kg/m^3), φ la porosité (-), M_{H_2O} la masse molaire de l'eau (kg/mol), k_l la perméabilité à l'eau liquide (m^2), η_l la viscosité dynamique de l'eau ($\text{Pa}\cdot\text{s}$), k_{rl} représente la perméabilité relative à l'eau liquide qui est estimé à partir du modèle de Mualem et Van Genuchten (-), D le coefficient de diffusion de la vapeur d'eau hors milieu poreux (m^2/s).

L'Equation 2 donne la quantité d'eau libérée lors de la carbonatation de la portlandite. Le modèle ne prend pas en compte l'eau libérée par les autres hydrates (Morandeau, 2013).

$$\beta_{H_2O} = - \frac{\partial [\text{CH}]}{\partial t} \cdot M_{H_2O} \quad \text{Equation 2}$$

R_d représente la résistance à la diffusion dans un milieu partiellement saturé en eau (Millington, 1959) repris par (Thiéry, 2005) (Equation 3).

$$R_d = \varphi^{1,2} \cdot (1 - S_r)^{3,3} \quad \text{Equation 3}$$

La pénétration du CO₂ dans la matrice cimentaire est gérée par des équations de conservation de masse (Equation 4). Ici, on considère le transport du dioxyde de carbone sous forme gazeux et sous forme d'ions carbonate.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\varphi \cdot (1 - S_r) \cdot \frac{P_{CO_2}}{RT} \right) = -\text{div} \overrightarrow{\Phi_{CO_2}} - \beta_{CO_3^{2-}} \quad \text{Equation 4}$$

Avec $\overrightarrow{\Phi_{CO_2}}$ le flux de dioxyde de carbone qui est considéré comme uniquement diffusif ici. Il est donné par la loi de Fick (Equation 5).

$$\overrightarrow{\Phi_{CO_2}} = -D_0 \cdot R_d \cdot \overrightarrow{\text{grad}} \frac{P_{CO_2}}{RT} \quad \text{Equation 5}$$

$\beta_{CO_3^{2-}}$ est la vitesse de formation des ions carbonate (Equation 6).

$$\beta_{CO_3^{2-}} = \frac{\partial [CO_3^{2-}]}{\partial t} = \frac{1}{\tau_1} \cdot ([CO_3^{2-}]_{eq} - [CO_3^{2-}]) \quad \text{Equation 6}$$

Avec $[CO_3^{2-}]_{eq}$ la quantité maximale d'ions carbonate qu'il est possible de former (et qui dépend du taux de CO₂ de l'air, du pH de la solution et de constantes d'équilibres thermodynamiques).

Le transport des ions carbonates est exprimé par une équation de conservation de masse :

$$\varphi \cdot S_r \cdot \frac{\partial [CO_3^{2-}]}{\partial t} = -\text{div} \left(\overrightarrow{\Phi_{CO_3^{2-}}} \right) - \beta_{CaCO_3} + \beta_{CO_3^{2-}} \quad \text{Equation 7}$$

Avec $\overrightarrow{\Phi_{CO_3^{2-}}}$ le flux des ions carbonate, somme d'un flux diffusif et d'un flux convectif.

$$\overrightarrow{\Phi_{CO_3^{2-}}} = -D_{CO_3^{2-}(S_r=1)} \cdot S_r^6 \cdot \overrightarrow{\text{grad}} [CO_3^{2-}] + \overrightarrow{v_{water}} \cdot [CO_3^{2-}] \quad \text{Equation 8}$$

Dans l'Equation 7, β_{CaCO_3} donne la formation de calcite lors de la progression du front de carbonatation. La quantité de calcite formée correspond à la consommation du calcium des hydrates de la matrice cimentaire et des sels de Friedel (Equation 9).

$$\beta_{CaCO_3} = \frac{1}{\tau_2} \cdot [CO_3^{2-}] \cdot ([Ca_{(CH)}] + [Ca_{(AFt)}] + [Ca_{(AFm)}] + [Ca_{(FS)}]) + \frac{1}{\tau_2} \cdot [CO_3^{2-}]^n \cdot [Ca_{(C-S-H)}] \quad \text{Equation 9}$$

Le fait de prendre en compte la carbonatation des sels de Friedel est un élément fort de couplage avec la pénétration des ions chlorure. Dans ce travail, la pénétration des ions chlorure n'est pas abordée.

Le pH est calculé en se basant sur la condition d'électro-neutralité de la solution interstitielle du béton en considérant les principaux ions en présence (Ca²⁺, OH⁻, H₃O⁺, Cl⁻ et CO₃²⁻) mais pas les alcalins (Equation 10).

$$[H_3O^+] + 2 [Ca^{2+}] = [OH^-] + [Cl^-] + 2 [CO_3^{2-}] \quad \text{Equation 10}$$

Le pH est ensuite extrait grâce à la concentration en ions hydronium $[H_3O^+]$.

L'évolution de la porosité est calculée en s'appuyant sur les volumes molaires des espèces en présence et de leur quantité (Equation 11).

$$\begin{aligned} \varphi = \varphi_{\text{initial}} - & (V_{m_{CaCO_3}} \cdot ([CaCO_3] - ([C - S - H]_{\text{ini}} - [C - S - H]))) - V_{m_{CH}} \\ & \cdot ([CH]_{\text{ini}} - [CH]) + \Delta V_{m_{C-S-H}} \\ & \cdot ([C - S - H]_{\text{ini}} - [C - S - H]) \end{aligned} \quad \text{Equation 11}$$

L'utilisation optimale du modèle SDReaM-crete se situe entre 55 % et 100 % d'humidité relative.

4.1.1.2 Logiciel de résolution

Pour réaliser les calculs, on utilise le logiciel ComsolMultiPhysics (MP) basé sur la méthode des éléments finis.

4.1.1.3 Données d'entrée et de sortie

Le modèle SDReaM-crete compte un certain nombre de paramètres d'entrée étant donné la diversité des phénomènes qu'il peut prendre en compte. Pour la carbonatation, les données d'entrée qui sont à adapter pour chaque simulation sont présentées dans le Tableau 4. Les données de sorties concernant le phénomène de carbonatation sont présentées dans le Tableau 5.

Tableau 4. Données d'entrée du modèle *SDReaM-crete* pour modéliser le phénomène de carbonatation.

Paramètre	Unité
Porosité du béton	-
Quantité de calcium carbonatable CH	mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable CSH	mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable Aft*	mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable Afm*	mol/m ³ de béton
Durée de vie souhaitée	Années (ou jours dans ce cas précis)
Enrobage ou diamètre du granulat	mm
Amplitude pour la variation de HR annuelle	%
Humidité moyenne annuelle	%
Coefficients des isothermes de désorption	-
Perméabilité à l'eau liquide	m ²
Concentration en CO ₂ de l'environnement	Pa

*considérés comme étant égaux à 0 pour cette étude

Tableau 5. Données de sorties du modèle *SDReaM-crete* lors de la modélisation de la carbonatation.

Paramètre	Unité
Porosité du béton	-
Quantité de calcium carbonatable CH	mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable CSH	mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable Aft	mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable Afm	mol/m ³ de béton
Taux de saturation du béton	-
pH du béton	-
Quantité de CO ₂ absorbée par la matrice cimentaire	kgCO ₂ /T de béton

4.1.2 Modèle du GeM

Dans le modèle du GeM, les phénomènes de transport sont modélisés en considérant les interactions entre les ions dans la solution porale et avec la matrice cimentaire (Achour, 2018). Les réactions chimiques (dissolution de la portlandite et des CSH, formation de la calcite et du gel de silice) depuis la dissolution du CO₂ de l'air dans l'eau sont intégrées dans le bilan de matière. L'évolution de la microstructure et de l'état hydrique est aussi considérée.

4.1.2.1 Principales équations

Le transport du dioxyde de carbone est considéré diffusif à travers la phase gazeuse :

$$J_{\text{CO}_2} = -D_{\text{CO}_2}(\varphi, S_e)\text{grad}[\text{CO}_2] \quad \text{Equation 12}$$

(Thiery, 2005) a calé l'expression empirique du calcul du coefficient de diffusion en comparant ces résultats numériques avec ceux des essais expérimentaux de (Papadakis, 1999) :

$$D_{\text{CO}_2} = D_{\text{CO}_2}^0 \varphi^{2.74} (1 - S_e)^{4.2} \quad \text{Equation 13}$$

Concernant le mouvement convectif de l'eau et le mouvement diffusif de la vapeur d'eau, l'équation de conservation de masse est la suivante :

$$\frac{\partial(\rho_e w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_v w_v)}{\partial t} = -\text{div}(J_e + J_v) + \beta_{\text{H}_2\text{O}} \quad \text{Equation 14}$$

Où : w et w_v sont respectivement les teneurs volumiques de l'eau liquide et de la vapeur d'eau ; $\beta_{\text{H}_2\text{O}}$ est un terme source qui modélise la libération de l'eau liquide pendant la carbonatation des hydrates. En l'absence de données sur la quantité d'eau libérée par la carbonatation des C-S-H, nous considérons uniquement la libération d'eau provoquée par la carbonatation de la portlandite.

$$\beta_{\text{H}_2\text{O}} = -\frac{\partial[\text{CaOH}_2] \cdot M_e}{\rho_e} \quad \text{Equation 15}$$

Où : $[\text{CaOH}_2]$ est la teneur solide de la portlandite en mol/m³. Il reste à combiner les équations précédentes pour obtenir l'équation de conservation de l'eau :

$$\frac{\partial(\varphi \rho_e S_e)}{\partial t} = -\text{div}\left(\rho_e \frac{K_e K_{re}}{\mu_e} \frac{\partial P_c}{\partial S_e} \text{grad} S_e + R_a D_{va} \text{grad} \rho_v\right) - \frac{\partial[\text{CaOH}_2] \cdot M_e}{\rho_e} \quad \text{Equation 16}$$

Le modèle intègre aussi la dissolution de la portlandite (et CSH) selon l'approche de Thiery (2005).

Enfin, la loi d'évolution de la porosité est exprimée en fonction de l'état de carbonatation de la portlandite et des CSH. L'évolution de la porosité est exprimée par :

$$\Delta\varphi = \bar{\gamma}_{\text{CaCO}_3} S_{\text{CaCO}_3} - \bar{\gamma}_{\text{CaOH}_2} (S_{\text{CaOH}_2}^0 - S_{\text{CaOH}_2}) + \Delta\bar{\gamma}_{\text{CSH}} (S_{\text{CSH}}^0 - S_{\text{CSH}}) \quad \text{Equation 17}$$

4.1.2.2 Résolution numérique

Dans la littérature, la technique des volumes finis est la plus utilisée pour la résolution du problème de transfert associé à des réactions physico-chimiques puisqu'elle respecte les équations de bilan. La résolution numérique est menée pour un problème de transfert unidirectionnel. Pour le transfert hydrique, nous considérons le schéma d'Euler implicite puisque ce schéma est inconditionnellement stable. Les autres équations sont discrétisées suivant un schéma d'Euler explicite dont la stabilité doit être vérifiée à chaque itération selon le schéma UPWIND (Leveque, 1998)

4.1.2.3 Données d'entrée et de sortie

Tableau 6. Données d'entrée du modèle du GeM.

Paramètre	Unité
Porosité du béton	-
Quantité de calcium carbonatable CH	mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable CSH	mol/m ³ de béton
Durée de vie souhaitée	Années (ou jours dans ce cas précis)
Enrobage ou diamètre du granulat	mm
Amplitude pour la variation de HR annuelle	%
Humidité moyenne annuelle	%
Coefficients des isothermes de désorption	-
Perméabilité à l'eau liquide	m ²
Concentration en CO ₂ de l'environnement	Pa

Tableau 7. Données de sorties du modèle du GeM

Paramètre	Unité
Porosité du béton	-
Quantité de calcium carbonatable CH	mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable CSH	mol/m ³ de béton
Quantité de gel de silice	mol/m ³ de béton
Concentration des ions en solution	mol/m ³ de béton
Degré de saturation du béton	-
pH du béton	-
Quantité de CO ₂ absorbée par la matrice cimentaire	kgCO ₂ /T de béton

4.1.3 Modèle du LaSIE

Le modèle de carbonatation des matériaux cimentaires a été développé sur la base de modèles antérieurs du LaSIE (Miragliotta, 2000 ; Delmi, 2005), de modèles de la littérature (Thiery, 2005 ; De Larrard et al., 2013) et du retour d'expérience acquis par le laboratoire à travers d'études expérimentales (Younsi, 2011 ; Namouniara, 2015 ; Boumaaza, 2020). La présentation qui suit se veut synthétique : le lecteur pourra trouver plus de détails dans l'annexe du rapport FCARB/R/002 et dans le mémoire de thèse de Gendron (2019).

4.1.3.1 Principales équations

Le modèle, mis en équations avec le système (Equation 18), considère le couplage entre les transferts réactifs du CO₂ et de l'eau. Les deux principales équations de conservation sont celles du CO₂ à l'état gazeux et de l'eau (équation écrite pour la variable du degré de saturation en eau S). Ces équations sont couplées à celles de consommation des hydrates, CSH et portlandite, par le CO₂. Une dernière équation modélise l'évolution de la porosité (φ) en cours de carbonatation. Les propriétés de transfert, perméabilité à l'eau et coefficient de diffusion gazeuse, varient en fonction de la porosité. Le modèle ne prend pas en compte les espèces ioniques et leur mouvement dans la phase liquide.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (\varphi(1 - S + SK_H)[CO_2]) = \text{div}(D_{CO_2}\text{grad}[CO_2]) - r_{CH} - \frac{1}{n}r_{CSH} \\ \frac{\partial}{\partial t} (\varphi S) = \text{div}(D_S\text{grad}S) + r_{CH}\bar{v}_H \\ \varphi = \Delta\bar{v}_{CH}(n_{CH}^0 - n_{CH}) + \frac{\beta}{n_0} \frac{(n_{CSH}^0 - n_{CSH})^2}{n_{CSH}} + \varphi_0 \\ \frac{\partial n_{CH}}{\partial t} = r_{CH} \\ \frac{\partial n_{CSH}}{\partial t} = r_{CSH} \\ \frac{\partial n_{CaCO_3}}{\partial t} = r_{CH} + n \cdot r_{CSH} \end{array} \right. \quad \text{Equation 18}$$

Avec : φ la porosité (-), S le degré de saturation en eau (-), K_H la constante de Henry (-), $[CO_2]$ la concentration en CO₂ de la phase gazeuse (mol/m³), D_{CO_2} le coefficient de diffusion du CO₂ gazeux (m²/s), r_{CH} et r_{CSH} les vitesses de consommation respectives de la portlandite et des CSH (mol/m³/s), n le nombre de mole de Ca par mole de CSH (-), D_S le coefficient de diffusion de l'humidité calculée en fonction de la perméabilité à l'eau et de l'isotherme de désorption de la vapeur d'eau (m²/s), \bar{v}_H le volume molaire de l'eau liquide (m³/mol), $\Delta\bar{v}_{CH}$ la différence de

volume molaire de la portlandite et du CaCO_3 (m^3/mol), β une constante (-), n_{CH} , n_{CSH} et n_{CaCO_3} le nombre de mole par volume de matériau respectivement de la portlandite, des CSH et du CaCO_3 (mol/m^3).

Dans le système d'équations, l'indice ou exposant « 0 » renvoie aux valeurs initiales des variables, c'est-à-dire avant carbonatation.

On considère que les réactions chimiques sont du premier ordre. Par conséquent, le terme r_{CH} est écrit en fonction de la concentration du CO_2 dissout par unité de volume du matériau, comme suit :

$$r_{\text{CH}} = -k_{\text{CH}}\varphi\text{SK}_H[\text{CO}_2] \quad \text{Equation 19}$$

k_{CH} est un coefficient proposé par (De Larrard et al., 2013), qui modélise le fait que le couche de CaCO_3 formé sur la surface de la portlandite en cours de carbonatation ralentit peu à peu la consommation de cet hydrate.

La vitesse de consommation des CSH est écrite de la même manière :

$$r_{\text{CSH}} = -k_{\text{CSH}}\varphi\text{SkC} \quad \text{Equation 20}$$

Contrairement au cas de la portlandite, le coefficient de cinétique k_{CSH} est pris constant.

4.1.3.2 Résolution numérique

Le système d'équations est résolu à l'aide de la méthode des éléments finis pour l'intégration spatiale et du schéma implicite d'Euler pour l'intégration temporelle (plateforme open-source Python FEniCS).

4.1.3.3 Données d'entrée et de sortie

Tableau 8. Données d'entrée du modèle du LaSIE.

Paramètre	Unité
Porosité	-
Quantité de calcium carbonatable CH	mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable CSH	mol/m ³ de béton
Perméabilité à l'eau liquide	m ²
Degré de saturation en eau	-
Constantes de l'isotherme de désorption (Van Genuchten)	-
Humidité relative ambiante	-
Concentration en CO ₂ ambiante	%
Diamètre du granulat	m

Tableau 9. Données de sorties du modèle du LaSIE.

Paramètre	Unité
Porosité	-
Quantité de calcium carbonatable CH	mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable CSH	mol/m ³ de béton
Quantité de carbonates de calcium formés CaCO ₃	mol/m ³ de béton
Degré de saturation en eau	-
Quantité de CO ₂ absorbée par la matrice cimentaire	kgCO ₂ /T de béton

4.2 Modèles analytiques

4.2.1 Modèle de la norme NF EN 16757

L'annexe BB de la norme NF EN 16757 relative au calcul d'absorption du CO₂ par carbonatation du béton propose des valeurs de vitesse et de degré de carbonatation maximal, respectivement k et D_c , en fonction de la condition d'exposition et de la classe de résistance du béton (Tableau 10).

Tableau 10. Vitesse de carbonatation (k) et degré de carbonatation maximal (D_c) proposés dans l'annexe BB de la norme NF EN 16757, d'après (Lagerblad, 2005)

Résistance du béton	< 15 MPa	15 à 20 MPa	25 à 35 MPa	> 35 MPa	Degré de carbonatation D_c
Paramètres	Valeur de k en mm/an ^{0.5}				%
Ouvrages de génie civil					
Exposées à la pluie		2.7	1.6	1.1	85
A l'abri de la pluie		6.6	4.4	2.7	75
Dans le sol ^a		1.1	0.8	0.5	85
Bâtiments					
<u>Extérieur</u>					
Exposé à la pluie	5.5	2.7	1.6	1.1	85
A l'abri de la pluie	11	6.6	4.4	2.7	75
<u>Intérieur en climat sec ^c</u>					
Avec revêtement ^b	11.6	6.9	4.6	2.7	40
Sans revêtement	16.5	9.9	6.6	3.8	40
<u>Dans le sol ^a</u>	-	1.1	0.8	0.5	85
^a Sous la nappe phréatique, $k = 0.2$.					
^b Peinture ou papier peint (sous un carrelage, parquet ou stratifié, k est prise égale à 0).					
^c Intérieur en climat sec signifie que l'humidité relative (HR) se situe en général entre 45% et 65%.					

La vitesse de carbonatation correspond au facteur de proportionnalité entre la profondeur de carbonatation d et la racine carrée du temps :

$$d = k\sqrt{t} \quad \text{Equation 21}$$

La quantité de CO₂ piégée par carbonatation à un temps donné, appelée « absorption », est calculée comme suit :

$$\text{Absorption} = k \cdot \left(\frac{\sqrt{t}}{1000}\right) \cdot U_{\text{tcc}} \cdot C \cdot D_c \quad \text{Equation 22}$$

Où : C est la teneur en ciment en kg par m³ de béton et U_{tcc} est l'absorption théorique maximale en kg_{CO2} par kg de ciment pour le béton carbonaté. Cette dernière est fonction de la masse de liant c et corrélée à la quantité w de CaO réactif présent dans le liant.

$$U_{\text{tcc}} = w \cdot c \cdot \left(\frac{M_{\text{CO}_2}}{M_{\text{CaO}}}\right) \quad \text{Equation 23}$$

Afin d'avoir une approche conservatrice, on ne considère que le CaO présent dans le clinker donc c est la masse de clinker (le CaO présent dans les éventuelles additions minérales est considéré inerte).

4.2.2 Modèle de la fib

La fib propose un modèle permettant d'accéder à l'évolution de la profondeur de carbonatation en fonction de la racine carré du temps, en tenant compte des propriétés et du dosage en ciment d'un béton, ainsi que des conditions environnementales. La profondeur de carbonatation *d* en mm est écrite comme suit :

$$d = \sqrt{2 \cdot k_e \cdot k_c \cdot R_{NAC,0}^{-1} \cdot C_s \cdot W(t)} \cdot \sqrt{t} \quad \text{Equation 24}$$

Où : *k_e* est une constante calculée avec l'humidité relative ambiante (-) ; *k_c* est un paramètre de prenant en compte la cure (-) ; *R_{NAC,0}*⁻¹ est la résistance effective inverse à la carbonatation naturelle du béton en mm²/an/(kg_{CO2}/m³) ; *C_s* est la concentration atmosphérique de CO₂ ; *W(t)* est une fonction météorologique.

La fonction environnementale *k_e*, donnée par l'Equation 25, prend en compte l'effet de l'humidité relative (RH) sur le coefficient de diffusion du CO₂ par rapport à une humidité relative de référence (RH_{ref}) égale à 65%.

$$k_e = \left\{ \frac{\left(1 - \left(\frac{RH}{100}\right)^5\right)}{\left(1 - \left(\frac{RH_{\text{ref}}}{100}\right)^5\right)} \right\}^{2.5} \quad \text{Equation 25}$$

La fonction météorologique (Equation 26) prend en compte les événements pluvieux et les conditions d'exposition, c'est-à-dire le type de surface (verticale, horizontale). t_0 est un temps de référence par défaut de 28 jours. P_{SR} est la probabilité de pluie battante sur les éléments et elle est considérée égale à 0,25 ou 1 respectivement pour les éléments verticaux et horizontaux. T_0W est une fréquence d'immersion, c'est-à-dire la fréquence annuelle des jours avec plus de 2,5 mm de précipitations. b_w est une constante égale à 0,446.

$$W(t) = \left(\frac{t_0}{t}\right)^{\frac{(P_{SR}T_0W)^{b_w}}{2}} \quad \text{Equation 26}$$

5 Résultats des calculs

5.1 Modèles numériques

5.1.1 Résultats du Cerib

- Données d'entrée

Les données utilisées pour les simulations du Cerib sont les suivantes.

Tableau 11. Données d'entrée du modèle du CERIB

Paramètre	Valeur initiale
Porosité	14.9%
Quantité de calcium carbonatable de CH	1102 mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable de C _{3,4} S ₂ H _x	1627 mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable des Afm	357 mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable des Aft	290 mol/m ³ de béton
Perméabilité à l'eau liquide	4,7.10 ⁻¹⁹ m ²
Degré de saturation en eau initial	1
Constantes de l'isotherme de désorption (Equation polynomial)	$Sr = -3.44 + 16.2 \times HR$ $- 21.19 \times HR^2$ $+ 9.4 \times HR^3$

- Profils obtenus

Dans les figures suivantes sont représentés les profils de principales variables : humidité relative (RH), concentration de portlandite par unité volumique de béton (CH), porosité, concentration de CO₂ fixée par carbonatation des hydrates. Les simulations ont été faites pour un mur donné (8 ou 16 cm d'épaisseur) en ne considérant qu'une seule surface en contact avec le milieu extérieur. A la surface opposée, une condition de flux nul a été imposée. Dans les figures ci-après, la profondeur nulle correspond à la surface en contact avec le milieu ambiant.

Les profils d'humidité relative montrent une mise à l'équilibre hydrique très rapide, puisqu'il est atteint en moins de 1 an (voire moins de 3 mois) pour les deux conditions limites de chaque paroi (8 et 16 cm). Cette rapidité vient sans doute du choix de la valeur élevée de la perméabilité à l'eau ($4,7 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$) qui est la principale propriété contrôlant le séchage. La carbonatation sur 50 ans dépendra donc peu de la vitesse de séchage des parois.

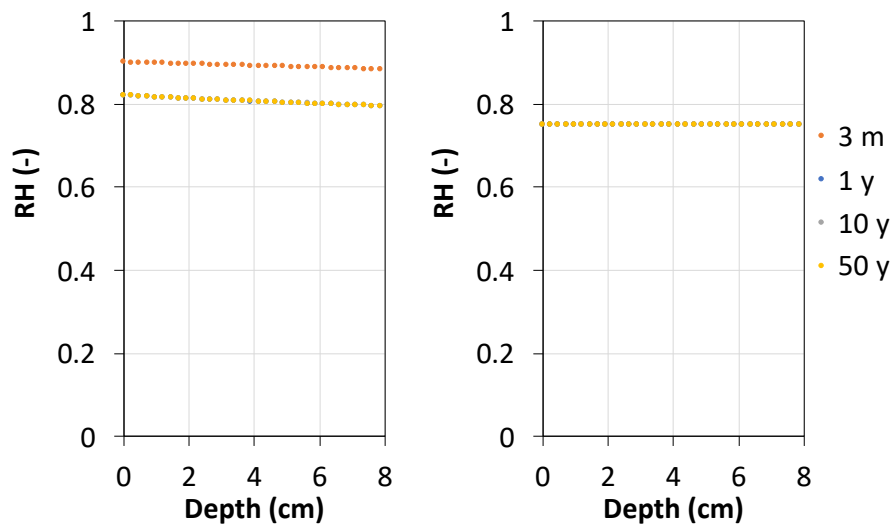


Figure 4. Profils d'humidité relative dans la paroi de 8 cm, surface extérieure (à gauche) et surface au contact de l'isolant (à droite) à différentes échéances.

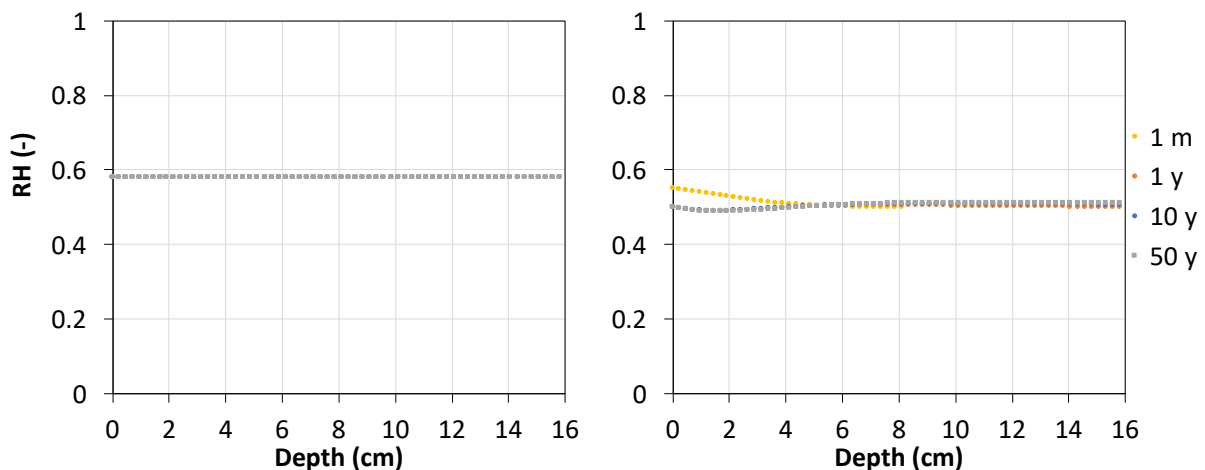


Figure 5. Profils d'humidité relative dans la paroi de 16 cm, surface extérieure (à gauche) et surface au contact de l'isolant (à droite) à différentes échéances.

De la Figure 6 à la Figure 10, on observe les profils de concentration en portlandite, en trois zones : une première zone où la portlandite a disparu, une deuxième zone de transition et une troisième avec la concentration initiale. La deuxième zone s'étale sur 1 à 2 cm environ. Cet étalement est plus grand dans la paroi de 16 cm que dans celle de 8 cm, parce que la teneur en eau est plus faible dans la première (comme le montrent les profils d'humidité relative).

L'absence de front raide montre que le contrôle du transfert réactif qu'est le phénomène de carbonatation n'est pas seulement diffusif.

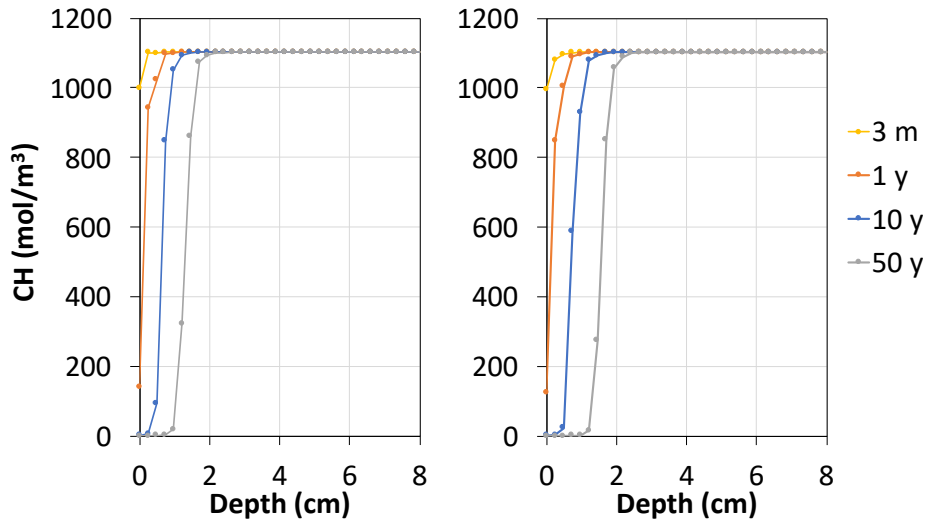


Figure 6. Profils de concentration en portlandite dans la paroi de 8 cm, surface extérieure (à gauche) et surface au contact de l'isolant (à droite) à différentes échéances.

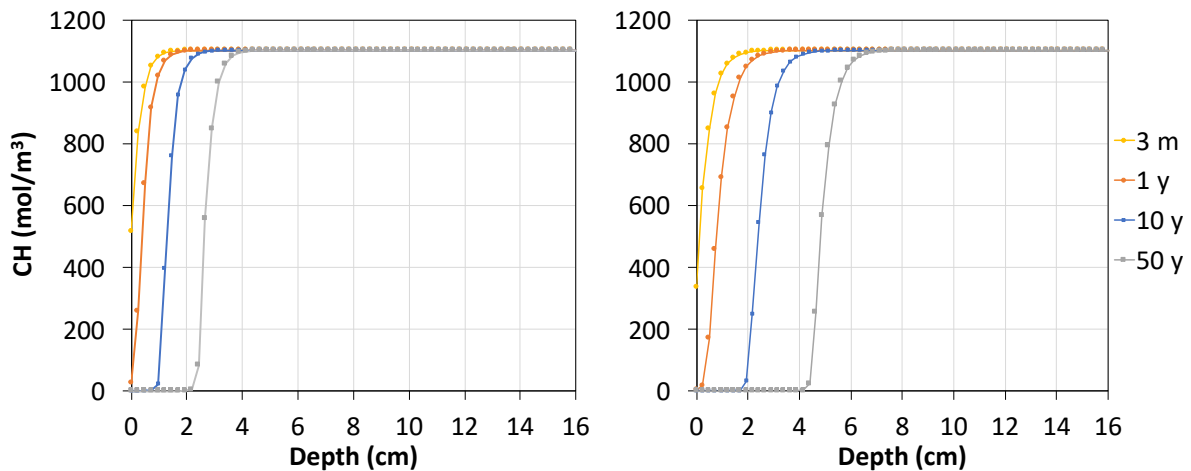


Figure 7. Profils de concentration en portlandite dans la paroi de 16 cm, surface au contact de l'isolant (à gauche) et surface intérieure (à droite) à différentes échéances.

Sur la base des concentrations ioniques, le modèle permet de calculer le pH de béton. A partir des profils de pH, non représentés ici, on peut en déduire la position d'un front de carbonatation (pour un pH égal à 9). La Figure 8 montre l'avancement de ce front dans le temps pour les quatre surfaces d'exposition. Dans la paroi de 8 cm exposé à des humidités relatives élevées (supérieures à 70%), la profondeur de carbonatation ainsi définie reste inférieure à 15 mm à 50 ans, alors qu'elle dépasse largement la distance d'enrobage des aciers (20 mm) dans la paroi de 16 cm. Cela étant, le risque de corrosion doit rester très minime compte-tenu de la faible teneur en eau de cette paroi. Sur la Figure 8, la profondeur est également donnée en fonction de la racine carrée du temps. La linéarité observée suggère

qu'il est possible, comme on le fait classiquement, de modéliser l'avancement du front avec un modèle purement diffusif (bien que le phénomène de carbonatation soit aussi contrôlé par les cinétiques chimiques comme supposé plus haut sur la base des profils de portlandite).

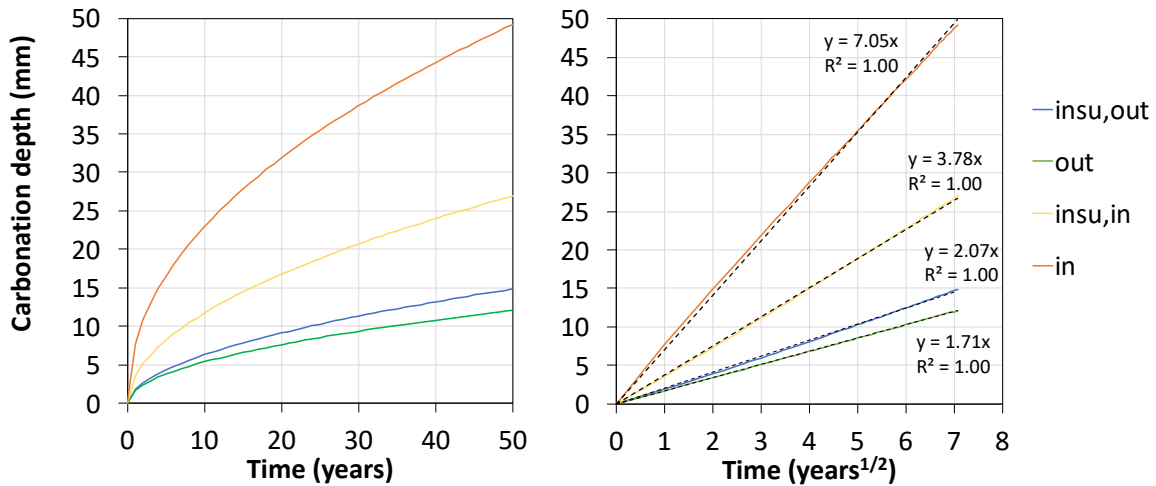


Figure 8. Évolution dans le temps de la profondeur de carbonatation déduite des profils de pH calculés par le modèle pour les quatre surfaces d'exposition.

A cause de la carbonatation, la porosité passe de 15% à moins de 9% (Figure 20). En conséquence, toutes les propriétés de transfert, en particulier le coefficient de diffusion du CO_2 , diminuent au cours du temps en surface des parois.

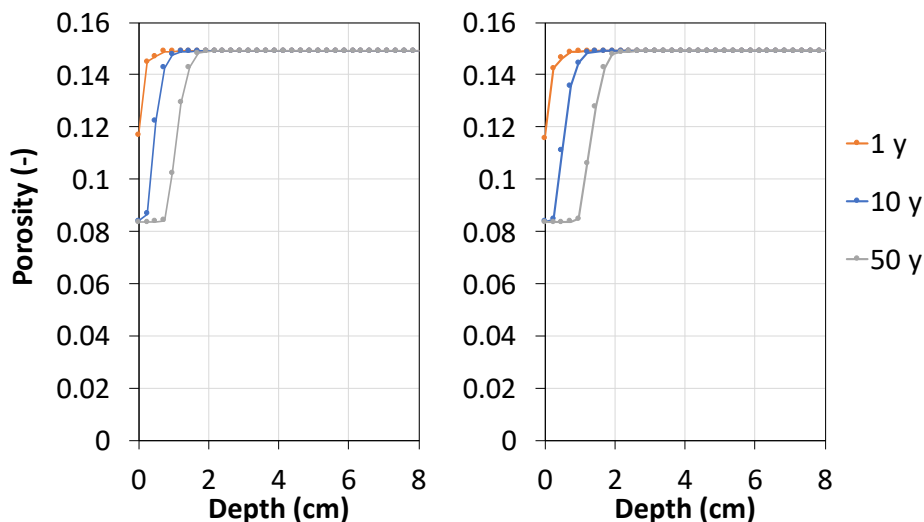


Figure 9. Profils de porosité dans la paroi de 8 cm, surface extérieure (à gauche) et surface au contact de l'isolant (à droite) à différentes échéances.

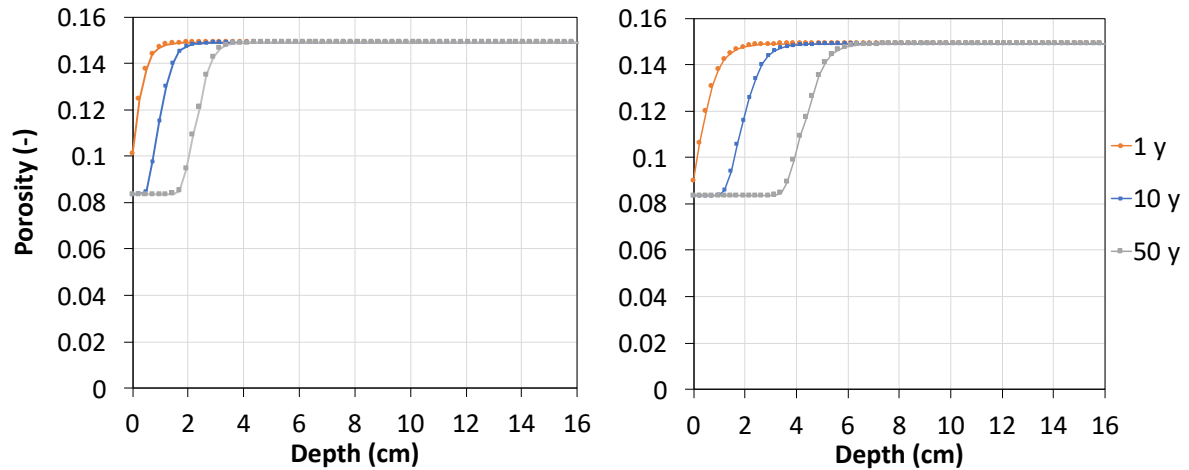


Figure 10. Profils de porosité dans la paroi de 16 cm, surface au contact de l'isolant (à gauche) et surface intérieure (à droite) à différentes échéances.

Une sortie du modèle est la quantité de CaCO_3 par unité de volume issu de la carbonatation. On en déduit les profils de CO_2 ainsi minéralisé (Figure 11 et Figure 12). Dans l'épaisseur totalement carbonatée (totalement car sans variation spatiale de la concentration en CO_2 fixé), la concentration atteint 3379 mol/m^3 , soit presque 3 fois la concentration en Ca(OH)_2 . Tous les hydrates (CSH, Afm, Aft) participent donc à la fixation du CO_2 (Equation 9).

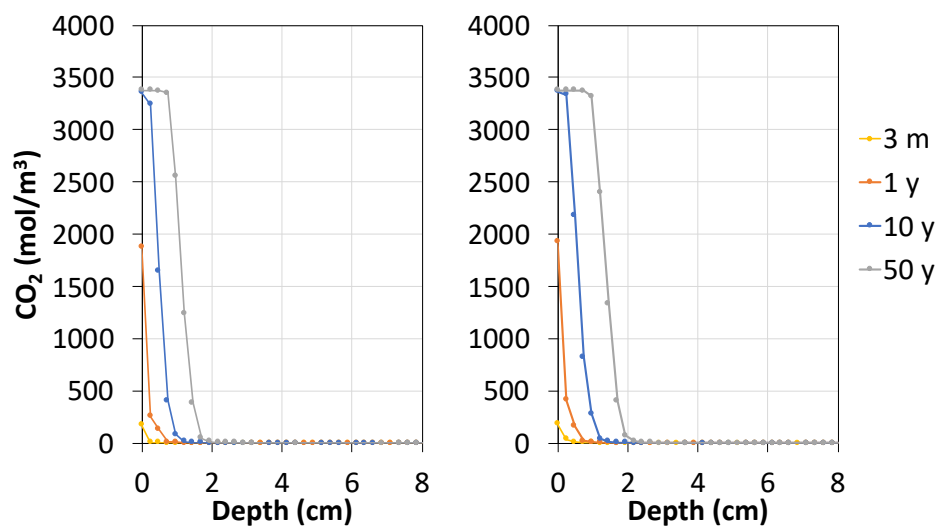


Figure 11. Profils de concentration en CO_2 fixé dans la paroi de 8 cm, surface extérieure (à gauche) et surface au contact de l'isolant (à droite) à différentes échéances.

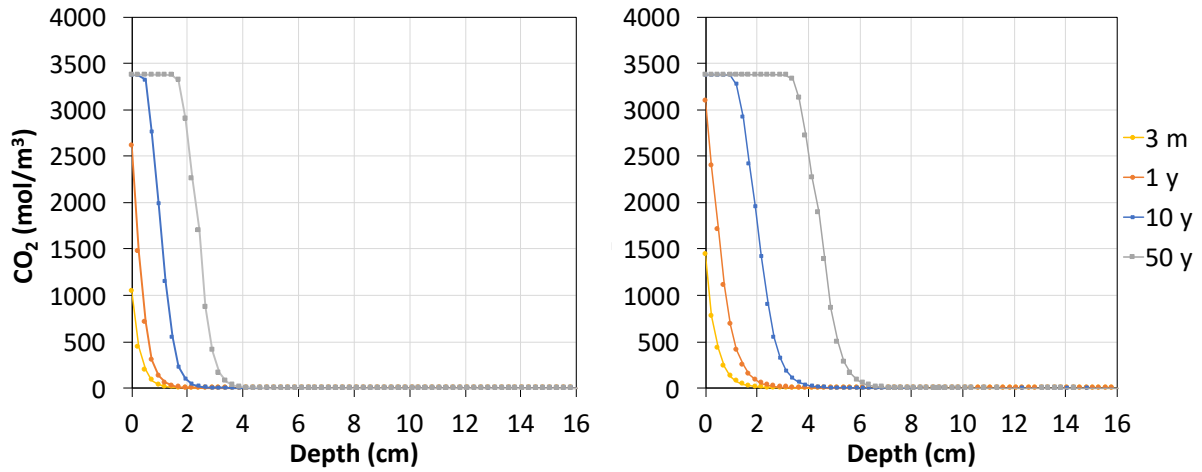


Figure 12. Profils de concentration en CO_2 fixé dans la paroi de 16 cm, surface au contact de l'isolant (à gauche) et surface intérieure (à droite) à différentes échéances.

- Quantité de CO_2 fixée au cours du temps

A partir des profils de CO_2 , la quantité de CO_2 cumulée au cours du temps est calculé pour les quatre surfaces d'exposition : paroi de 8 cm en contact avec l'extérieur (out) ou en contact avec l'isolant (insu,out), paroi de 16 cm surface en contact avec l'isolant (insu,in) ou avec l'intérieur du bâtiment (in). Sur 50 ans, la paroi de 16 cm, exposée aux plus faibles humidités relatives, piège de 2 à 4 fois plus de CO_2 que la paroi extérieure de 8 cm (Figure 13).

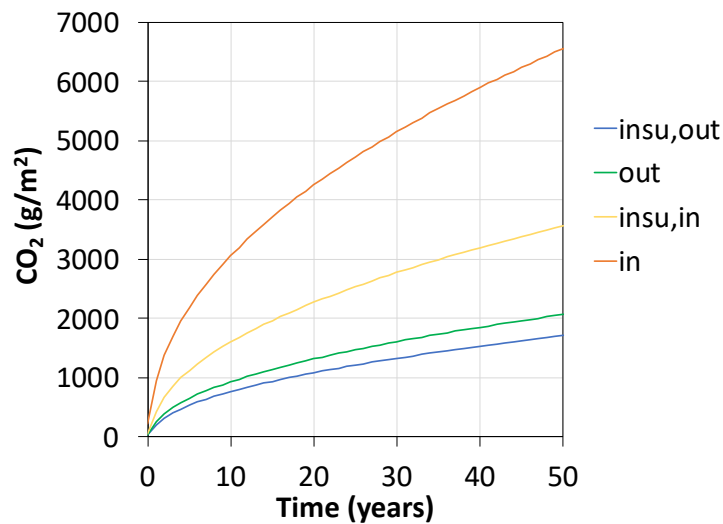


Figure 13. Quantité de CO_2 fixé par m^2 de surface exposée selon l'ambiance.

5.1.2 Résultats du GeM

- Données d'entrée

Les données utilisées par le GeM pour les simulations sont fournies dans le Tableau 12. Données d'entrée du modèle du GeM

Remarques :

- Des conditions limites identiques (humidité relative et concentration en CO₂) ont été pour les deux faces d'une même paroi (contrairement au cahier des charges fournis).
- La teneur en portlandite n'a pas été prise également dans les deux murs.

Tableau 12. Données d'entrée du modèle du GeM.

Paramètre	Valeur initiale
Porosité	14%
Quantité de calcium carbonatable de CH	Paroi extérieure : 1140 mol/m ³ de béton ; Paroi intérieure : 1000 mol/m ³
Quantité de calcium carbonatable de C _{3,4} S ₂ H _x	3,4*494 mol/m ³ de béton
Perméabilité à l'eau liquide	5.10 ⁻²¹ m ²
Degré de saturation en eau initial	0,98
Constantes de l'isotherme de désorption (Van Genuchten)	m = 0,45 et P ₀ = 35 MPa-

- Profils obtenus

Les deux parois initialement saturées en eau sont soumises à des conditions hydriques différentes. L'équilibre hydrique est atteint entre 1 et 10 ans pour la paroi de 8 cm exposée sur les deux faces opposées à une humidité relative supérieure à 70% (Figure 14). Le séchage est plus lent pour la paroi de 16 cm exposée à une humidité relative proche de 50% : l'équilibre hydrique n'est pas totalement atteint en 50 ans (Figure 14).

Dans ces parois, les profils sont symétriques car les mêmes conditions limites ont été prises pour les surfaces opposées.

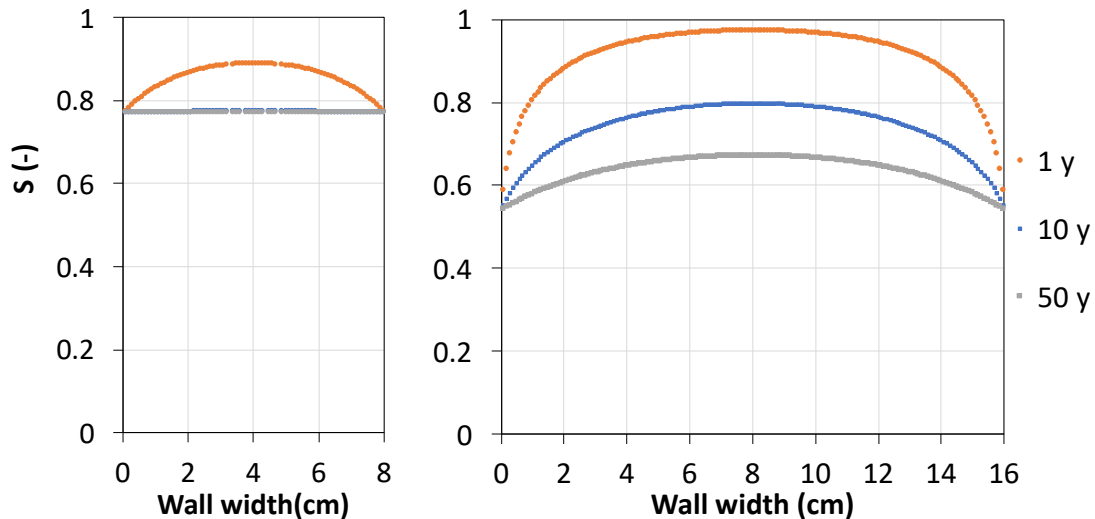


Figure 14. Profils de degré de saturation en eau dans la paroi extérieure de 8 cm (à gauche) et dans la paroi intérieure de 16 cm (à droite) à différentes échéances (en années).

A 1 an, la consommation de la portlandite est presque uniforme dans les parois (Figure 15). On n'observe pas, comme sur la Figure 6 par exemple, des profils de concentration de CH avec des pentes très marquées. A 10 ans, il n'y a encore moins de différence de concentration entre la surface et le cœur des parois. Cela signifie que, avec ce modèle et les données d'entrée utilisés ici, le transfert réactif est surtout contrôlé par les termes puits. A 50 ans, la carbonatation de la portlandite est complète. On note que la consommation est un peu moins rapide en surface que quelques mm plus en profondeur. Cela provient sans doute de degré de saturation en eau plus faible en surface car les termes puits sont écrits en fonction de S (section 4.1.2.1).

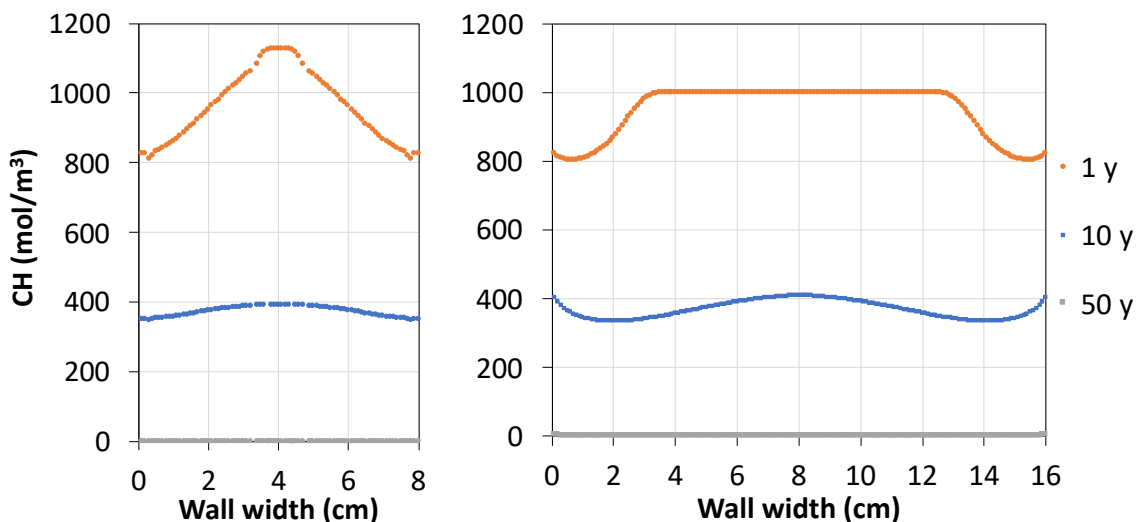


Figure 15. Profils de concentration en portlandite dans la paroi extérieure de 8 cm (à gauche) et dans la paroi intérieure de 16 cm (à droite) à différentes échéances (en années).

Les profils de concentration de CO_2 piégés par carbonatation ont la même forme générale que celle des profils de concentration de CH (Figure 16). La quantité de CO_2 piégée est environ 2 fois plus grande que la quantité de portlandite consommée ce qui montre la contribution des CSH à la minéralisation du CO_2 .

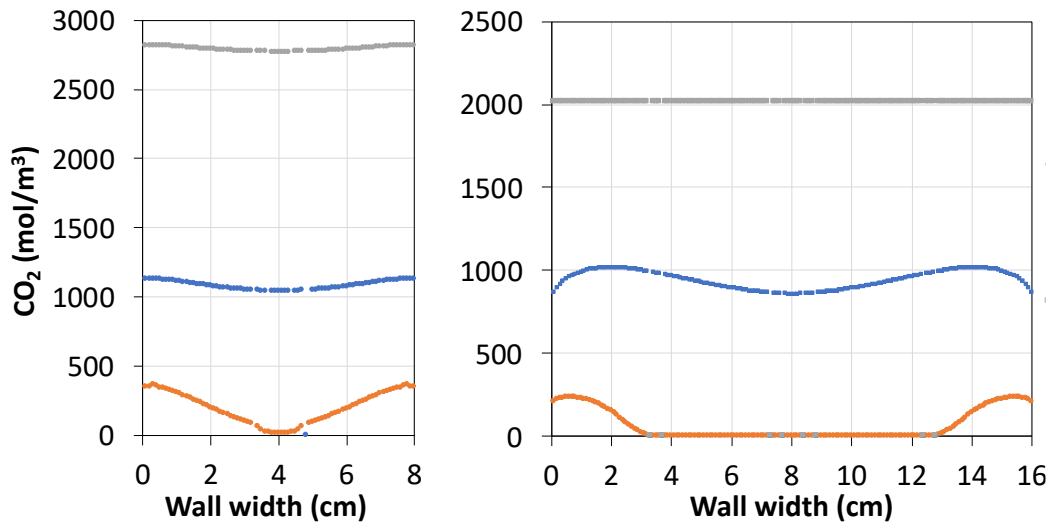


Figure 16. Profils de concentration en CO_2 fixé dans la paroi extérieure de 8 cm (à gauche) et dans la paroi intérieure de 16 cm (à droite) à différentes échéances (en années).

- Quantité de CO_2 fixée au cours du temps

La quantité de CO_2 fixé par m^2 de surface est donnée sur la Figure 17.

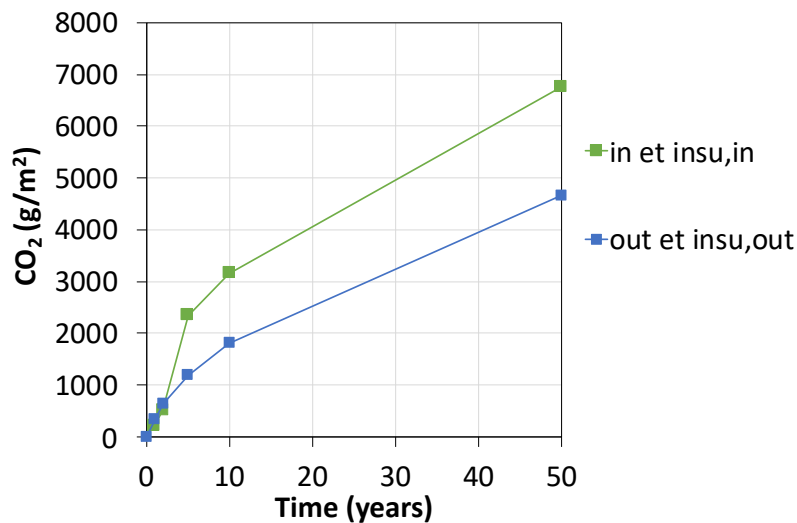


Figure 17. Quantité de CO_2 fixé par m^2 de surface exposée selon l'ambiance.

5.1.3 Résultats du LaSIE

- Données d'entrée

Le Tableau 13 donne les valeurs initiales des propriétés du matériau utilisées comme entrée des calculs. Les quantités d'hydrates (portlandite et CSH) ont été déduites de la quantité de ciment à partir du modèle d'hydratation de Papadakis (1999). Les valeurs de porosité, de perméabilité à l'eau et des constantes de l'isotherme de Van Genuchten ont été tirées, connaissant la composition du béton (CEMI, E/C=0,6), d'une base de données du LaSIE. Notons que des simulations pour une perméabilité à l'eau dix fois plus faible ont également été réalisées pour évaluer l'influence de ce paramètre (résultats non présentés ici).

Tableau 13. Données d'entrée du modèle du LaSIE.

Paramètre	Valeur initiale
Porosité	14%
Quantité de calcium carbonatable de CH	1140 mol/m ³ de béton
Quantité de calcium carbonatable de C _{3,4} S ₂ H _x	3,4*494 mol/m ³ de béton
Perméabilité à l'eau liquide	5.10 ⁻²¹ m ²
Degré de saturation en eau initial	0,98
Constantes de l'isotherme de désorption (Van Genuchten)	m = 0,45 et P ₀ = 35 MPa

- Profils obtenus

De la Figure 18 à la Figure 21 sont donnés les principaux profils issus des simulations dans les deux parois verticales de 8 cm (en contact avec l'extérieur) et 16 cm (en contact avec l'intérieur) à différentes échéances de temps, de 1 semaine à 50 ans.

Les profils d'humidité relative nous renseignent sur la mise à l'équilibre hydrique du matériau avec le milieu extérieur (Figure 18). Pour la perméabilité à l'eau utilisée ici (5.10⁻²¹ m²), propriété contrôlant la cinétique de séchage, l'équilibre est atteint entre 3 mois et 1 an pour la paroi de 8 cm et entre 1 et 10 ans pour la paroi de 16 cm. En dehors de la différence d'épaisseur, la différence de vitesse de mise à l'équilibre vient aussi des conditions limites (HR plus faible pour la paroi la plus épaisse).

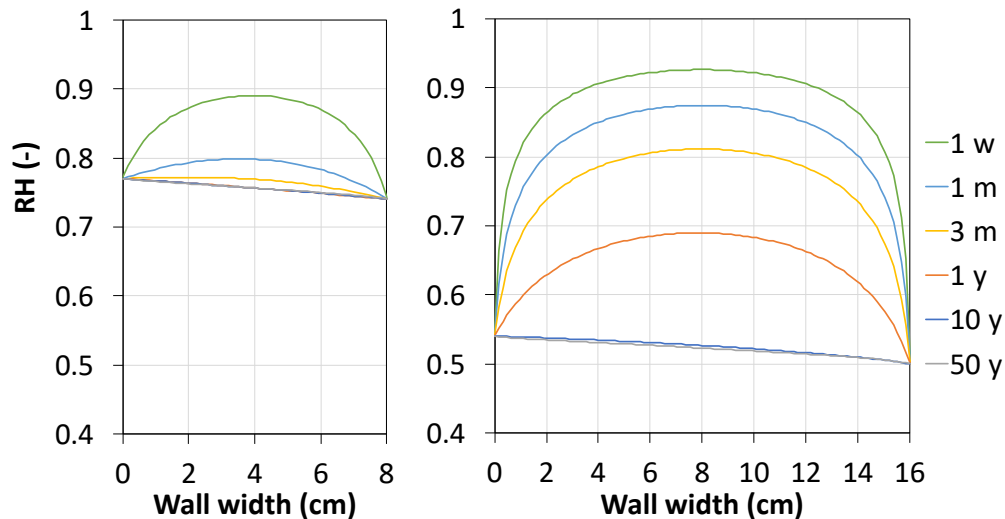


Figure 18. Profils d'humidité relative dans la paroi extérieure de 8 cm (à gauche) et dans la paroi intérieure de 16 cm (à droite) à différentes échéances ($K = 5 \cdot 10^{-21} m^2$).

Les profils suivants nous renseignent sur la carbonatation. On note d'abord l'absence de front raide. Par exemple, à 50 ans, la diminution de concentration en portlandite se fait sur environ 1,5 cm dans la paroi de 8 cm et sur environ 4 cm dans la paroi de 16 cm. Cela signifie que les temps caractéristiques des réactions (termes puits de l'équation de conservation du CO_2) ne sont pas infiniment plus faibles que ceux de la diffusion gazeuse. Dans la paroi la plus mince, les profils sont plus raides, parce que l'humidité relative y est plus élevée que dans la paroi la plus épaisse (environ 75% HR contre environ 53% HR à 50 ans). Dans la paroi de 8 cm, on s'approche donc du contrôle purement diffusif de la carbonatation, à l'instar de l'hypothèse classique du modèle en racine carré du temps.

En supposant que le saut de pH correspond à la diminution de moitié de la concentration initiale en portlandite, on peut évaluer la profondeur de carbonatation (au sens de la profondeur déterminée expérimentalement avec un indicateur de pH). A 50 ans, la profondeur à partir de la surface à l'extérieur du bâtiment est d'environ 1 cm, celle à partir de la surface à l'intérieur est d'environ 2 cm (Figure 19). Même si cette évaluation est sans doute grossière, elle nous montre le faible risque de corrosion dû à la carbonatation sur la durée de vie de l'ouvrage si l'enrobage des armatures est d'au moins 2 cm.

A cause de la carbonatation, la porosité en surface des parois passe de 14% à environ 10% (Figure 20). Le modèle de diffusivité gazeuse est une fonction de la porosité à la puissance 3. La diminution de porosité conduit donc à une diminution du coefficient de diffusion du CO_2 gazeux d'au moins 2, ce qui doit ralentir le phénomène de carbonatation.

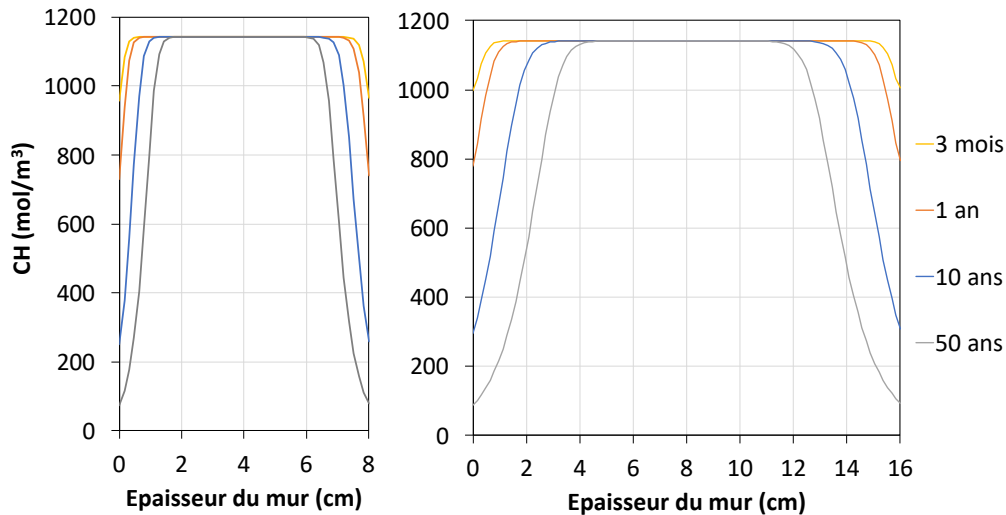


Figure 19. Profils de concentration en portlandite dans la paroi extérieure de 8 cm (à gauche) et dans la paroi intérieure de 16 cm (à droite) à différentes échéances ($K = 5 \cdot 10^{-21} \text{m}^2$).

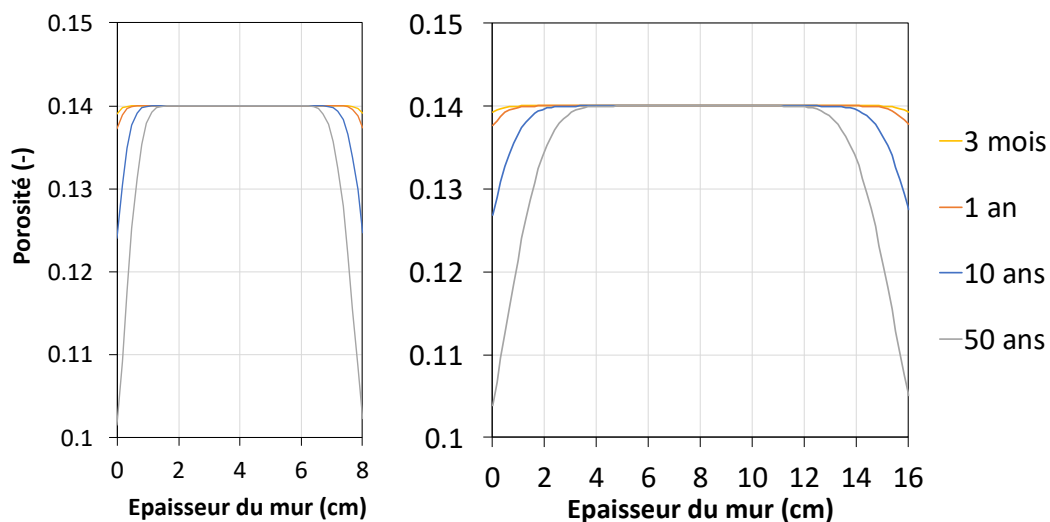


Figure 20. Profils de porosité dans la paroi extérieure de 8 cm (à gauche) et dans la paroi intérieure de 16 cm (à droite) à différentes échéances ($K = 5 \cdot 10^{-21} \text{m}^2$).

Les profils sur la Figure 21 correspondent à la quantité de CO_2 fixé dans les parois par carbonatation de la portlandite et des CSH. En surface, la portlandite tend à disparaître, ce qui signifie au maximum une minéralisation de 1140 mol/m^3 de CO_2 . La différence avec la quantité fixée en surface (environ 2200 mol/m^3) vient de la carbonatation des CSH, qui est donc loin d'être négligeable. Rappelons que selon la stœchiométrie des CSH choisie dans le modèle ($\text{C}_{3,4}\text{S}_2\text{H}_x$), 1 mole de CSH carbonatée fixe 3,4 moles de CO_2 .

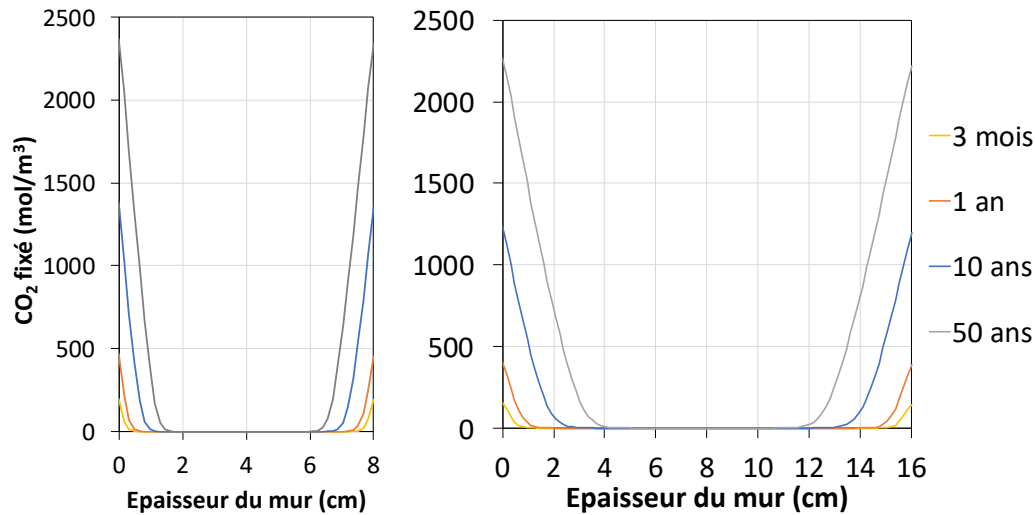


Figure 21. Profils de concentration en CO_2 fixé dans la paroi extérieure de 8 cm (à gauche) et dans la paroi intérieure de 16 cm (à droite) à différentes échéances ($K = 5 \cdot 10^{-21} \text{m}^2$).

- Quantité de CO_2 fixé au cours du temps

Les profils de CO_2 ont été intégrés pour obtenir la quantité cumulée de CO_2 au cours du temps à partir des 4 surfaces : paroi de 8 cm en contact avec l'extérieur (out) ou en contact avec l'isolant (insu,out), paroi de 16 cm surface en contact avec l'isolant (insu,in) ou avec l'intérieur du bâtiment (in). La Figure 22 montre que la paroi de 16 cm, exposée aux plus faibles humidités relatives, piège plus de CO_2 que la paroi extérieure de 8 cm, comme attendu d'après les différences de profondeur de carbonatation. Il faut noter que, dans notre modèle, la capacité de fixation du CO_2 du béton ne dépend pas de l'humidité relative, contrairement à ce qui est fait dans le modèle de la norme EN 16575 (section 4.2.1). Les différences de cumuls de CO_2 entre les parois extérieures et intérieures, dues aux différences de profondeurs de carbonatation, seront en réalité sans doute plus faibles que celles montrées par les simulations.

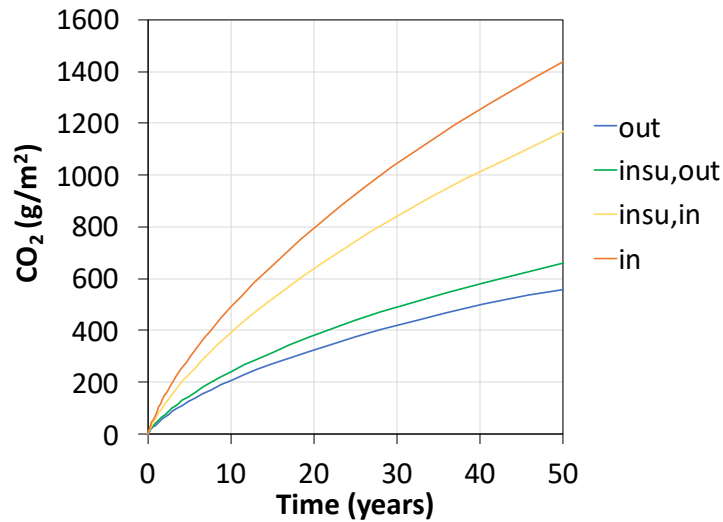


Figure 22. Quantité de CO₂ fixé par m² de surface exposée selon l'ambiance.

5.2 Modèles analytiques

5.2.1 Modèle NF EN 16757

- Données d'entrée

Pour les différentes surfaces exposées de la résidence Aziyadé, on a considéré les valeurs de vitesse de carbonatation et de degré de carbonatation récapitulées dans le Tableau 14. Comme pour k , trois classes d'exposition ont été retenues pour le degré de carbonatation D_c . Pour un élément directement en contact avec la pluie, D_c est considéré comme égal à 85%. Pour un élément situé à l'extérieur mais abrité, le degré de carbonatation est égal à 75%. Enfin, à l'intérieur du bâtiment, le degré de carbonatation est plus faible avec une valeur égale à 40%.

Tableau 14. Vitesse de carbonatation (k) et degrés de carbonatation (D_c) choisis selon la NF EN 16757 pour les surfaces exposées (VS : surface verticale ; HS : surface horizontale).

Nom	Surface (m ²)	k (mm/an ^{0.5})	D_c (%)
VS _{out.}	2490	1.1	85
HS _{out.}	2550	2.7	75
VS _{ins.}	7240	3.8	40
HS _{ins.}	2400	3.8	40
VS _{insu,out.}	1620	2.7	75
VS _{insu,ins.}	1620	2.7	40

- Résultats obtenus

Les résultats présentés dans le tableau 4 résument la démarche de calcul préconisée par la norme européenne NF EN 16757, à savoir les surfaces d'exposition, les profondeurs de carbonatation X_c , les degrés de carbonatation α_c et la masse de CO₂ absorbée pour les 50 ans de vie utile de ce bâtiment.

Tableau 15. Surfaces exposées, Profondeur de carbonatation à 50 ans, masse de CO₂ piégé selon le modèle de la norme NF EN 16757

Surfaces exposées	Front de carbonatation X_c (mm)	Volume de béton carbonaté (m ³)	Masse de CO ₂ piégé (t)
VS _{out.}	8	19,9	2,8
HS _{out.}	19	48,4	6,1
VS _{ins.}	27	195,4	13,1
HS _{ins.}	27	64,8	4,3
VS _{insu, out.}	19	30,7	3,9
VS _{insu, ins.}	19	30,7	2,1

Comme prévu, les profondeurs de carbonatation les plus avancées sont obtenues à l'intérieur du bâtiment (27 mm estimé). Cependant, même si les prédictions sont supérieures aux distances d'enrobages recommandée de 20 mm pour la classe d'exposition XC1 (béton à l'intérieur des bâtiments avec une faible humidité de l'air [16]), le risque de corrosion reste faible compte tenu de la faible humidité relative.

5.2.2 Modèle fib

- Données d'entrée

Dans le modèle, la fonction k_c traduisant l'effet de la cure est pris égale à 1. Comme les panneaux sont fabriqués en usine, on peut en effet supposer que leur cure est idéale. Dans la fonction météorologique $W(t)$, la fréquence d'immersion T_0W est prise égale à 0,049 en supposant qu'à La Rochelle il y a 18 jours de précipitations supérieures à 2,5 mm (données de 2018). La résistance effective inverse à la carbonatation du béton $R_{NAC,0}^{-1}$ a été prise égale à 2995,9 mm²/an/(kg_{CO2}/m³), valeur du bulletin fib 34 pour un béton avec un CEM I 42,5R et un rapport eau-ciment égal à 0,56. La concentration de CO₂ (C_s) est de 450 ppm (8,85.10⁻⁴ kg/m³) et 630 ppm (1,23.10⁻³ kg/m³), respectivement à l'extérieur et à l'intérieur. Dans l'isolant, la concentration en CO₂ est considérée comme identique à la concentration extérieure.

Le Tableau 16 récapitule les données d'entrée et les valeurs de différentes fonctions du modèle fib.

Tableau 16. Paramètres d'entrée du modèle de la fib et valeurs des différentes fonctions du modèles

Type de parois	Nom de la surface	RH (%)	k_e (-)	C_s (kg/m ³)	P_{SR} (-)	T_0W (-)	$W(t)$ (-)
Verticale	VSout	77	0,62	8,85.10 ⁻⁴	0,25	0,049	0,63
	VSins	50	1,26	1,23.10 ⁻³	0	0	1
	VSinsu,out	74	0,73	8,85.10 ⁻⁴	0	0	1
	VSinsu,ins	54	1,21	8,85.10 ⁻⁴	0	0	1
Horizontale	HSout	77	0,62	8,85.10 ⁻⁴	1	0,049	0,43
	HSins	50	1,26	1,23.10 ⁻³	0	0	1

- Résultats obtenus

Les résultats des calculs sont fournis dans le Tableau 17. Comme pour le modèle analytique précédent, les profondeurs de carbonatation les plus importantes se situent à l'intérieur du bâtiment avec une prédiction équivalente à l'approche proposée par la norme NF EN 16757.

Tableau 17. Surfaces exposées, Profondeur de carbonatation à 50 ans, masse de CO₂ piégé selon le modèle de la fib

Surfaces	Front de carbonatation X _c (mm)	Volume de béton carbonaté (m ³)	Masse de CO ₂ piégé (t)
VSout.	9	22,4	2,2
HSout.	7	17,8	1,7
VSins.	25	181,0	10,9
HSins.	25	60,0	3,8
VSinsu,out.	16	25,9	2,5
VSinsu,ins.	21	34,0	2,0

6 Comparaison des résultats

6.1 Comparaison des simulations numériques

La Figure 23 et la Figure 24 comparent les profils de CO₂ fixé après 50 ans obtenus avec les trois modèles, respectivement pour le mur extérieur (out) et le mur intérieur (ins). Pour rappel, le Cerib considère la carbonatation de tous les hydrates et pas uniquement de la portlandite et des CSH ; le GeM n'a pas utilisé la même quantité initiale d'hydrates dans les deux murs. Une fois ces différences initiales posées, les profils sont tout de même bien différents. La carbonatation est « totale » dans le cas du GeM. Les profils obtenus par le Cerib et le LaSIE ont des pentes assez différentes. Dans le cas du LaSIE, la zone en cours de carbonatation est très large (environ 1,5 cm dans le mur de 8 cm et d'environ 3 cm dans le mur de 16 cm). Dans le cas du Cerib, le contrôle de la carbonatation est un peu plus diffusif : on distingue une zone totalement carbonatée, une zone en cours de carbonatation et une non carbonatée. Notons que la carbonatation plus rapide dans le cas du Cerib que dans le cas du LaSIE pourrait être due, en partie, à la différence de perméabilité à l'eau ($4,7 \cdot 10^{-19}$ contre $5 \cdot 10^{-21}$ m²), et donc de séchage sur les premières années.

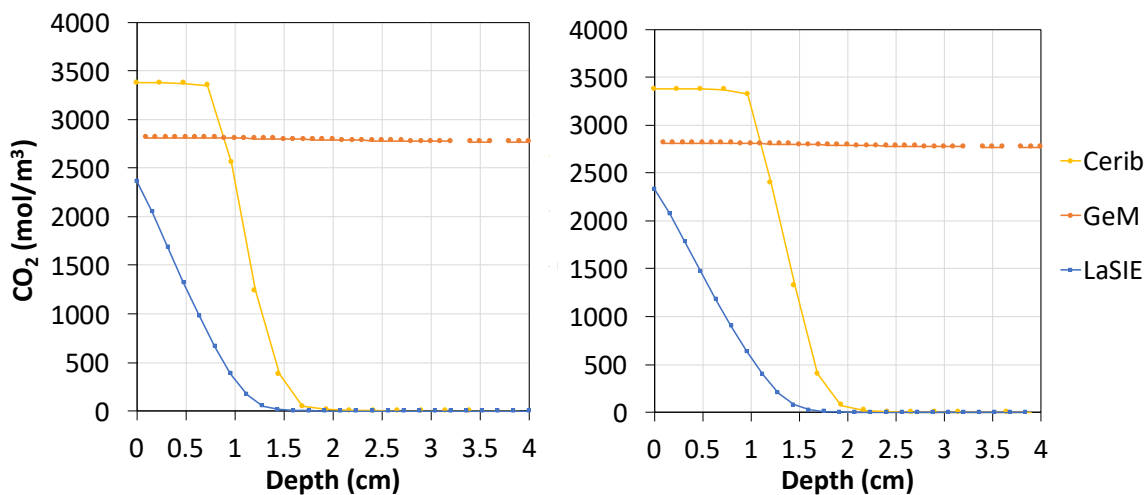


Figure 23. Profils de concentration de CO₂ fixé dans la paroi de 8 cm, surface extérieure « out » (à gauche) et surface au contact de l'isolant « insu,out » (à droite) à 50 ans.

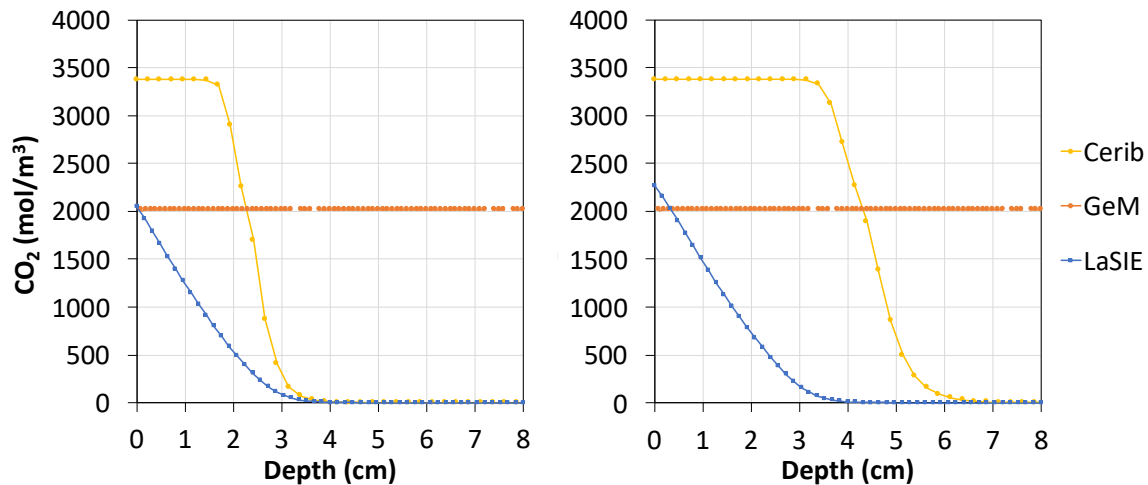


Figure 24. Profils de concentration en CO_2 fixé dans la paroi de 16 cm, surface au contact de l'isolant « insu,in » (à gauche) et surface intérieure « in » (à droite) à 50 ans.

6.2 Comparaison des résultats de tous les modèles

6.2.1 Comparaison des profondeurs de carbonatation

La Figure 25 compare les profondeurs de carbonatation après 50 ans obtenues avec les cinq modèles, avec résolution numérique (GeM, Cerib, LaSIE) ou analytique (EN16757, fib). Dans le cas du LaSIE et du GeM, la profondeur de carbonatation correspond à la profondeur pour laquelle la moitié de la portlandite a été consommée. Dans le cas du Cerib, la profondeur de carbonatation est la profondeur déterminée à partir du profil de pH. Concernant les modèles analytiques, la profondeur de carbonatation est le résultat du calcul.

Les modèles analytiques donnent des profondeurs proches, avec un écart absolu d'environ 2 mm. Ces profondeurs sont proches aussi des profondeurs obtenues avec le modèle du LaSIE (rappelons tout de même que les profondeurs du LaSIE ne sont pas calculées mais déduites des profils de concentration en portlandite).

Il n'y a pas de tendance systématique concernant le ratio entre les profondeurs des modèles analytiques et les profondeurs du Cerib, même si ces dernières sont supérieures aux premières pour trois expositions.

Dans le cas du GeM, les parois de 8 et 16 cm sont totalement carbonatées à 50 ans.

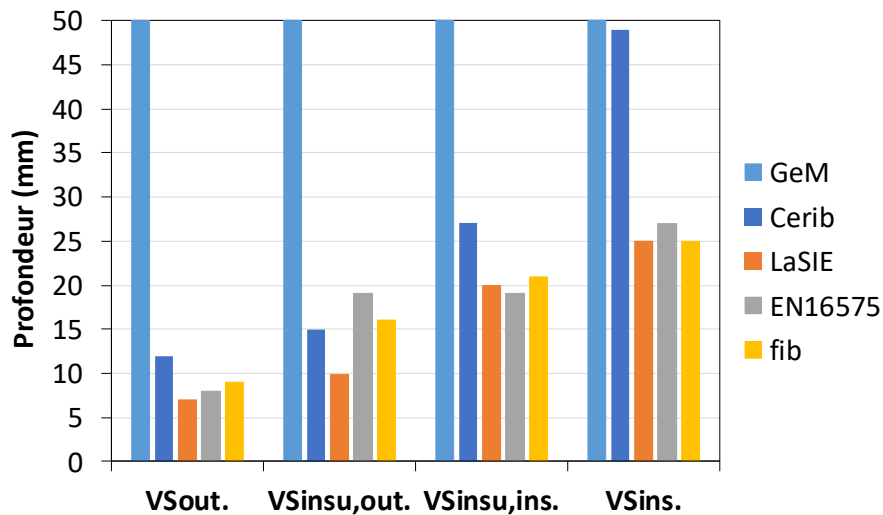


Figure 25. Profondeurs de carbonatation après 50 ans pour les quatre expositions.

6.2.2 Comparaison des quantités de CO₂ fixé par m²

La Figure 26 compare les masses de CO₂ fixé par m² calculées par les différents modèles pour les quatre ambiances.

Les quantités calculées par le modèle du GeM sont supérieures aux quantités obtenues avec les autres modèles, en toute cohérence avec le fait que les parois sont totalement carbonatées.

Les quantités calculées par le Cerib sont supérieures aux quantités obtenues avec les modèles EN165757 et fib. Cela s'explique, d'une part, par les profondeurs obtenues par le Cerib globalement plus élevées que les autres profondeurs. D'autre part, les modèles analytiques considèrent un degré de carbonatation ultime inférieur à 1, par exemple de 0,4 dans le cas de la paroi de 16 cm du côté intérieur du bâtiment. Dans le modèle du Cerib, toute la matière carbonatable, dans la « zone carbonatée », est consommée par le CO₂ (Figure 24).

Dans le cas du LaSIE, les quantités de CO₂ fixé sont environ égales à celles des modèles analytiques pour la paroi intérieure. Cela peut paraître paradoxale. En effet, si les profondeurs de carbonatation dans cette paroi sont proches pour ces trois modèles, le degré de carbonatation dans le cas des modèles EN165757 et fib est limité à 0,4. En fait, le profil de CO₂ fixé issu des simulations du LaSIE, très pentu (Figure 24), montre que la zone « carbonatée » ne l'est qu'à moitié. Dans le cas de la paroi extérieure « out », les quantités de CO₂ fixé obtenues par le LaSIE sont bien inférieures à celles des modèles analytiques, d'abord parce que les profondeurs de carbonatation sont inférieures pour les simulations numériques. Ensuite, le degré de carbonatation ultime considéré dans les modèles analytiques est pris, pour cette exposition, égal à 0,8.

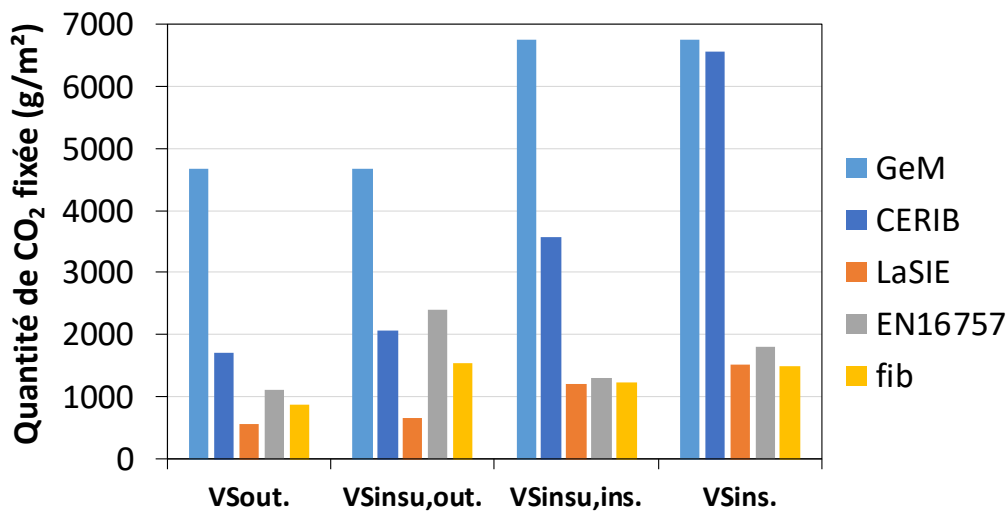


Figure 26. Quantités de CO₂ fixé en 50 ans calculées par les 5 modèles pour un m² de paroi selon l'exposition.

6.2.3 Comparaison des quantités totales de CO₂ fixé par le bâtiment Aziyadé

Le Tableau 18 récapitule, pour chaque modèle, les masses de CO₂ fixé par m² et les quantités totales pour les différents types de surface ainsi que les quantités totales à l'échelle du bâtiment.

Tableau 18. Surfaces exposées, Profondeur de carbonatation à 50 ans, masse de CO₂ piégé selon le modèle de la fib

	Surf.	GeM	Cerib	LaSIE	EN 16575	fib	GeM	Cerib	LaSIE	EN 16575	fib	
Exposition	(m ²)	(g/m ²)	(g/m ²)	(g/m ²)	(g/m ²)	(g/m ²)	(t)	(t)	(t)	(t)	(t)	
HSout.	2550	4668	1704	565	2392	667	11.9	4.3	1.4	6.1	1.7	
VSout.	2490	4668	1704	565	1124	884	11.6	4.2	1.4	2.8	2.2	
VSinsu,out.	1620	4668	6554	660	2407	1543	7.6	10.6	1.1	3.9	2.5	
VSinsu,ins.	1620	6755	6554	1215	1296	1235	10.9	10.6	2.0	2.1	2	
VSins.	7240	6755	2063	1514	1809	1506	48.9	14.9	11.0	13.1	10.9	
HSins.	2400	6755	3565	1514	1792	1583	16.2	8.6	3.6	4.3	3.8	
							Total	95.2	49.0	19.0	26.2	21.4

Si l'on considère que le volume de béton utilisé pour la résidence est de 1500 m³ avec 330 kg de ciment CEMI par m³ de béton, la quantité de clinker dans le bâtiment peut être estimée à 490 tonnes. La production d'une tonne de clinker génère environ 0,9 t éq. CO₂, dont 0,5 t liée à la décarbonatation du calcaire. La quantité de CO₂ émise par la décarbonatation pour produire le clinker de la résidence Aziyadé est donc de 245 t. Cette quantité nous permet de

calculer le degré de carbonatation de la résidence après 50 ans de durée de vie, c'est-à-dire le ratio entre la quantité de CO₂ fixé et la quantité de CO₂ émise pour la production du clinker. Sur 50 ans, la carbonatation permet de re-minéraliser, selon les modèles, entre 8 et 39% du CO₂ émis par la décarbonatation en cimenterie (Figure 27).

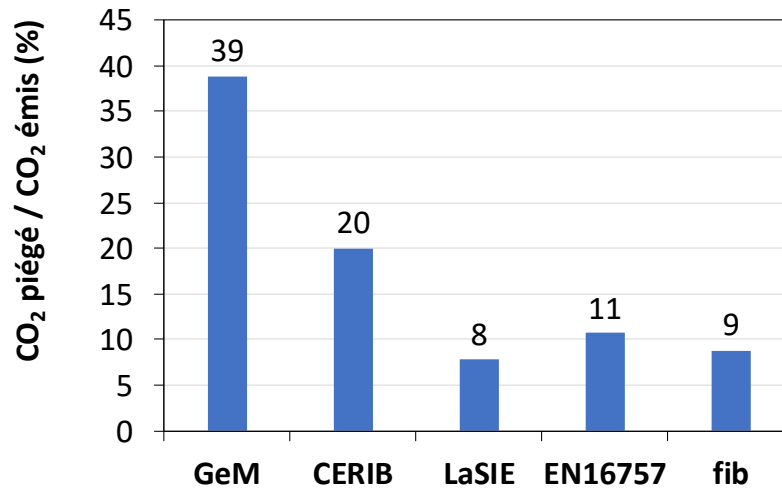


Figure 27. Degré de carbonatation de la résidence Aziyadé après 50 ans, exprimé comme la quantité de CO₂ piégé sur la quantité émise pour la production du clinker contenu dans le bâtiment.

7 Synthèse

Ce travail du PN FastCarb a permis de réaliser un nouveau benchmark de modèles de carbonatation, trois modèles physico-chimiques avec résolution numérique et deux modèles analytiques, dont le modèle de la norme EN 16757 qui est utilisé aujourd'hui pour évaluer la quantité de CO₂ absorbé par un ouvrage en béton sur sa durée de vie. La résidence Aziyadé située à La Rochelle, construite en béton préfabriqué, brut de décoffrage, a servi de support à cette étude de cas.

Au final, les résultats des modèles sont assez dispersés : le degré de carbonatation de la résidence (rapport entre la quantité totale de CO₂ fixé sur 50 ans et la quantité de CO₂ émise par décarbonatation par la production du clinker contenu dans le bâtiment) varie de 8 à 39%. A minima, les calculs montrent que la re-minéralisation du CO₂ par carbonatation naturelle est à prendre en compte, même si elle est relativement lente, dans l'évaluation environnementale des bâtiments.

En cas de déconstruction après 50 ans de durée de vie, la plupart des modèles montre que le potentiel de carbonatation du béton concassé doit être non négligeable, ce qui justifie un procédé de carbonatation accéléré tel que ceux envisagés au cours du PN FastCarb.

Les résultats de l'étude pourront être comparés, dans quelques années, aux quantités réelles de CO₂ fixé, s'il nous ait donné l'autorisation de réaliser des prélèvements dans les parois de la résidence.

Ce travail montre aussi la nécessité d'introduire dans les modèles physico-chimiques des limites sur la quantité de matière carbonatable.

8 Références bibliographiques

Achour M. (2018) « Modélisation du couplage carbonatation – chlorures et étude multi-échelle de l'influence des granulats sur la diffusivité dans les bétons », Thèse de doctorat, Université de Nantes.

Boumaaza M. (2020), « Étude expérimentale de la diffusivité du gaz et de la capacité de fixation de CO₂ des matériaux cimentaires », Thèse de doctorat de La Rochelle Université et de l'Université Technique de Munich.

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, vol. 72, pp. 1-14

Delmi M. (2005), « Etude de l'hydratation et du couplage carbonatation-échanges hydriques dans les mortiers et les bétons », Thèse de doctorat, Université de la Rochelle.

Gendron F. (2019), « Carbonatation des matériaux cimentaires : étude de la diffusion du CO₂ », Thèse de doctorat de La Rochelle Université.

Jacquement N. et al (2020), Benchmark de modèles français de carbonatation accélérée de pâte de ciment, rapport du PN FastCarb, FCARB/R/002.

Lagerblad B. (2005) "Carbon dioxide uptake during concrete life cycle - State of the art", CBI report 2:2005.

Leveque R. (1998), "Finite difference methods for differential equations," Draft version use AMath, pp. 1998–2005.

Millington R. (1959), "Gas diffusion in porous media," in Science, vol. 130, pp. 100–102.

Mualem Y. (1976), "A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media," Water Resour. Res., vol. 12, no. 3, pp. 513–522.

Mai-Nhu J. (2013) « Corrosion des armatures du béton : couplage carbonation/chlorures en présence de cycles hydriques », Thèse de doctorat de l'Université de Toulouse III.

Miragliotta R. (2000), « Modélisation des processus physico-chimiques de la carbonatation des bétons préfabriqués : prise en compte des effets de paroi », Thèse de doctorat, Université de la Rochelle.

Morandea A. (2013) "Carbonatation atmosphérique des systèmes cimentaires à faible teneur en portlandite », Thèse de doctorat de l'université Paris Est.

Namouniara D. K. (2015), « Etude expérimentale de la diffusion du CO₂ et des cinétiques de carbonatation de matériaux cimentaires à faible dosage en clinker », Thèse de doctorat, Université de la Rochelle.

Papadakis V. G. (1999), "Effect of fly ash on Portland cement systems: Part I. Low-calcium fly ash," Cem. Concr. Res., vol. 29, no. 11, pp. 1727–1736.

Richards L. A. (1931) "Capillary conduction of liquids through porous mediums", *Physics*. 1 (5), pp 318–333, 1931.

Thiery M. (2005) « Modélisation de la carbonatation atmosphérique des matériaux cimentaires », Thèse de doctorat, LCPC.

Van Genuchten M. T. (1980), "A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils1," *Soil Science Society of America Journal*, vol. 44, no. 5. p. 892.

Younsi A (2011), « Carbonatation de bétons à forts taux de substitution du ciment par des additions minérales », Thèse de doctorat, Université de la Rochelle.