

Impact de la carbonatation d'un béton sur son intégrité structurelle

Source : M. Thiery, *Modélisation de la carbonatation atmosphérique des matériaux cimentaires : prise en compte des effets cinétiques et des modifications microstructurales et hydriques*, 2005

Introduction - Contextualisation de l'étude

L'ancrage d'un bâtiment dans le sol est fondamental afin d'assurer son intégrité structurelle (**figure 1a**). Cette fonction est assurée à la fois par les fondations et les murs de soubassement qui garantissent la stabilité du bâtiment et par la dalle qui relie les fondations entre elles et sert ensuite de base rigide permettant de soutenir les murs. Une structure métallique, appelée treillis, intégrée à la dalle permet une amélioration de ses performances mécaniques en compression et d'en assurer la cohésion.



a.



b.

Figure 1 - Exemple de dalle d'une terrasse (a) et exemple d'un béton carbonaté (b)

Il existe de nombreux modes de défaillance d'une dalle de béton tels que la fissuration liée à une déformation excessive et la granulation du substrat de la dalle induit par un non-respect des proportions de sable, gravier et ciment.

Dans ce sujet, nous nous intéresserons à l'une des dégradations les plus courantes : la carbonatation du béton. Le dioxyde de carbone présent dans l'air se dissout dans le béton. Ce phénomène induit une oxydation de l'armature métallique dont le volume varie. Il en résulte alors un écaillage du béton mettant à nu la structure métallique. Des observations similaires à la **figure 1b** sont caractéristiques de cette dégradation.

Dans le but d'étudier ce phénomène, le sujet sera divisé en trois parties indépendantes :

- la **partie I** visera à déterminer la valeur du pH à la suite de la dissolution du dioxyde de carbone de l'air dans le béton ;
- la **partie II** abordera la diffusion du CO_2 dans le béton ;
- la **partie III** traitera de l'oxydation de la structure métallique et de son impact sur le risque d'écaillage du béton.

On supposera les bibliothèques `numpy` et `matplotlib` chargées. L'**annexe 1** présente des fonctions usuelles de Python. Les commentaires suffisants à la compréhension du programme devront être apportés et des noms de variables explicites devront être utilisés lorsque ceux-ci ne sont pas imposés.

Partie I - Acidification du milieu

Cette première partie aborde la dissolution du dioxyde de carbone de l'air ambiant dans le béton. Pour ce faire, l'étude sera divisée en deux sous parties. Tout d'abord, la dissolution du CO_2 dans la solution dite interstitielle sera caractérisée afin d'estimer le risque de carbonatation du béton. La réaction de cette solution avec la portlandite, principe actif du ciment, sera ensuite étudiée afin de déterminer la valeur du pH de la solution.

I.1 - Risque de carbonatation à l'air ambiant

Dans la suite de ce sujet, la carbonatation d'une dalle en béton armé de 20 cm d'épaisseur (**figure 2**) sera analysée et décrite. Le béton étant un milieu poreux, de l'eau prend place dans les pores et dans les interstices du béton. Cette eau sera désignée par liquide interstitiel dans la suite du sujet. On supposera que le géotextile sur lequel repose la dalle empêche tout échange d'énergie ou de matière avec le support de la dalle ou du géotextile (**figure 2**).

Dans cette sous-partie, la réaction de la dalle avec l'air ambiant, de température $T_{\text{air}} = 25^\circ\text{C}$ et de pression $p_{\text{air}} = 1 \text{ bar}$, est étudiée. La **table 1** rappelle la composition de l'air et indique la fraction molaire de chaque composé. La concentration standard et la pression standard valent respectivement $c^0 = 1 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ et $p^0 = 1 \text{ bar}$.

Composant	CO_2	O_2	N_2	Autres gaz
Fraction molaire en phase gazeuse	0,04 %	21 %	78 %	0,96 %

Table 1 - Composition de l'air

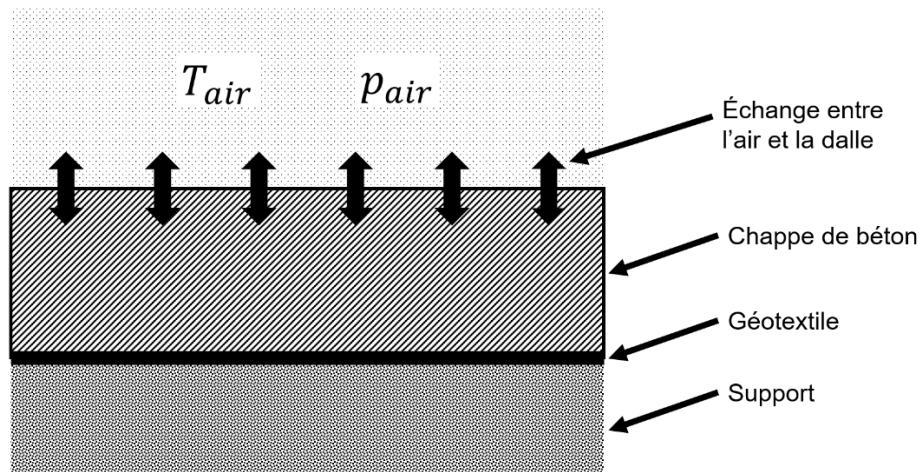


Figure 2 - Schématisation du problème

- Q1.** Exprimer la pression partielle en dioxyde de carbone p_{CO_2} en fonction de sa fraction molaire dans l'air x_{CO_2} et de la pression atmosphérique p_{air} .
- Q2.** Donner l'équation de dissolution du $\text{CO}_{2(\text{g})}$ dans l'eau en $\text{CO}_{2(\text{aq})}$. On note K_d la constante de cette équation. En déduire une relation entre la concentration en $\text{CO}_{2(\text{aq})}$, notée $[\text{CO}_{2(\text{aq})}]$, la pression partielle p_{CO_2} , K_d , p^0 et c^0 .

La loi de Henry stipule : « À température constante et à saturation, la pression partielle dans la phase vapeur d'un soluté volatil est proportionnelle à la concentration molaire de ce corps dans la solution liquide ».

- Q3.** a. Donner l'équation d'hydratation du dioxyde de carbone dissous $\text{CO}_{2(\text{aq})}$ en acide carbonique $\text{H}_2\text{CO}_{3(\text{aq})}$. On note K_{hyd} la constante de cette équation.
- b. En déduire une relation entre la concentration en acide carbonique notée $[\text{H}_2\text{CO}_{3(\text{aq})}]$, K_{hyd} et $[\text{CO}_{2(\text{aq})}]$.
- c. Exprimer la constante de Henry H telle que $[\text{H}_2\text{CO}_{3(\text{aq})}] = Hp_{\text{CO}_2}$ en fonction de K_{hyd} , K_d , p^0 et de c^0 .
- Q4.** En déduire l'expression de $[\text{H}_2\text{CO}_{3(\text{aq})}]$ en fonction de x_{CO_2} , p_{air} et de H .
- Q5.** Rappeler les équations des réactions acide-base permettant la formation du $\text{CO}_3^{2-}(\text{aq})$ à partir du diacide $\text{H}_2\text{CO}_{3(\text{aq})}$ en milieu basique.
- Q6.** Donner les expressions des constantes d'équilibre K_1 et K_2 associées respectivement à la réaction ayant le $\text{H}_2\text{CO}_{3(\text{aq})}$ comme réactif et la réaction ayant le $\text{CO}_3^{2-}(\text{aq})$ comme produit.
- Q7.** Donner le tracé du diagramme de prédominance du diacide $\text{H}_2\text{CO}_{3(\text{aq})}$ en fonction du pH. On donne $pK_{a1} = 6,4$ et $pK_{a2} = 10,3$.
- Q8.** Rappeler l'équation d'autoprotolyse de l'eau et donner l'expression de sa constante d'équilibre K_E .

Le ciment est un composé minéral dérivant de la chaux vive obtenu par la calcination du calcaire. L'hydratation de l'oxyde de calcium permet la synthèse du principe actif du ciment : l'hydroxyde de calcium solide, également nommé portlandite et de formule chimique $\text{Ca}(\text{OH})_2$.

- Q9.** Donner l'équation de réaction de dissolution de la portlandite $\text{Ca}(\text{OH})_{2(\text{s})}$. En déduire l'expression du produit de solubilité de cette réaction, noté K_p .
- Q10.** Les ions calcium ainsi libérés dans la réaction précédente précipitent avec les ions carbonates $\text{CO}_3^{2-}(\text{aq})$ pour former du carbonate de calcium $\text{CaCO}_{3(\text{s})}$. Donner l'équation de précipitation du carbonate de calcium $\text{CaCO}_{3(\text{s})}$. Donner l'expression du produit de solubilité du carbonate de calcium $\text{CaCO}_{3(\text{s})}$, noté K_c .
- Q11.** Déduire des **Q6**, **Q9** et **Q10** une expression de la concentration en $\text{H}_2\text{CO}_{3(\text{aq})}$ en fonction de K_1 , K_2 , K_c et de K_p . On donne $\log K_1 = 7,6$, $\log K_2 = 3,7$, $\log K_p = -5$ et $\log K_c = -8,4$. Donner la valeur de l'application numérique.

Il y aura risque de carbonatation si $x_{\text{CO}_2} \ll 0,04 \%$. On donne $H = 4 \cdot 10^{-2} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{bar}^{-1}$.

- Q12.** En déduire la valeur de x_{CO_2} . Y a-t-il risque de carbonatation à l'air ambiant ? Pourquoi ?

I.2 - Calcul du pH dans la solution interstitielle

Dans cette sous-partie, le pH de la solution interstitielle sera déterminé. On rappelle la condition d'électroneutralité dans la solution interstitielle :

$$[\text{H}_3\text{O}^+] + 2[\text{Ca}^{2+}] = [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{OH}^-] \quad (1)$$

- Q13.** En utilisant les expressions des différentes constantes d'équilibre et l'équation (1), montrer que la concentration en OH^- est régie par l'équation (2).

$$f([OH^-]) = \frac{2K_p}{[OH^-]^2} + \frac{K_E}{[OH^-]} - \frac{2K_c}{K_p}[OH^-]^2 - \frac{K_c}{K_2K_p}[OH^-] - [OH^-] = 0 \quad (2)$$

La résolution de cette équation étant difficile analytiquement, il est nécessaire de développer un code Python pour en proposer une solution. Ce code proposera la solution de l'équation (2) par la méthode de Newton, dont l'**annexe 2** rappelle les grandes lignes. On supposera que les différentes constantes ont déjà été définies dans le code principal.

- Q14. a.** Donner en justifiant l'intervalle des valeurs de x considéré usuellement de la fonction f . Proposer une valeur initiale pour l'algorithme de Newton.
- b.** Proposer alors une instruction définissant la variable `pH_depart`. Proposer une instruction permettant de calculer à partir de `pH_depart`, la variable `OH_depart` qui sera utilisée comme point de départ pour la méthode de Newton.
- Q15. a.** Proposer une fonction `Fonction(x)` renvoyant l'image de x par la fonction f définie par l'équation (2).
- b.** Déterminer l'expression de f' , dérivée de la fonction f .
- c.** Proposer une fonction `Derive(x)` prenant en argument une variable x et renvoyant l'image de x par la fonction dérivée f' .
- Q16.** Proposer la fonction `Newton(g, dg, Pt, Er)` prenant en arguments une fonction g , sa dérivée dg , un point de départ Pt et une précision Er , définie auparavant. Cette fonction renvoie la solution de l'équation (2) par la méthode de Newton.
- Q17.** Proposer une instruction appelant les fonctions définies aux **Q15** et **Q16** et renvoyant la grandeur `OH_Sol`, solution de l'équation (2).
- On trouve `OH_Sol = 10**(-1.6)`.
- Q18.** Déterminer le pH de la solution interstitielle. En déduire l'espèce prédominante pour le diacide H_2CO_3 .

Partie II - Propagation du front de carbonatation

La première partie a permis de montrer l'importance du rôle du dioxyde de carbone dans la carbonatation. Autrement dit, sans CO_2 , il ne peut pas y avoir de carbonatation et donc de modification du pH. Toutefois, ce gaz n'est pas naturellement présent dans le béton. La dissolution du CO_2 dans le liquide interstitiel explique la carbonatation à cœur. L'objet de cette partie sera de quantifier la propagation du CO_2 dans le béton afin de vérifier que le béton carbonate aux environs de l'armature métallique du béton.

II.1 - Mise en équation du problème

Une dalle de béton exposée à l'air libre à une extrémité repose sur un géotextile interdisant tout échange de particules ou d'énergie avec le sol. Au vu des dimensions de la dalle, le problème sera supposé comme plan. Ainsi la schématisation de la **figure 3** est adoptée.

Le béton est considéré comme homogène. Les hypothèses suivantes seront retenues :

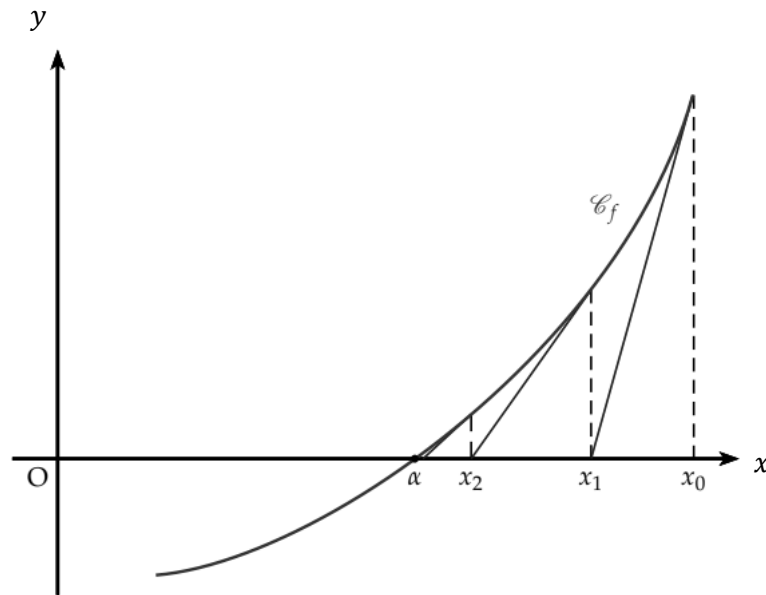
- la carbonatation n'a pas d'impact sur la densité du béton ni sur sa microstructure ;
- le taux de CO_2 dans l'air ne varie pas au cours du temps ;
- le béton est à l'équilibre hygrométrique avec l'humidité relative ambiante.

Annexe 2 - L'algorithme de Newton

Présentation de la méthode :

L'algorithme de Newton est une méthode consistant à faire converger une suite $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ vers la solution de l'équation $f(x) = 0$ dont on note C_f la courbe représentative. Cette méthode se décompose en plusieurs étapes.

- Initialisation de x_0 à une valeur quelconque.
- Calcul de x_1 à partir de la tangente à C_f en x_0 . Cette dernière intersecte l'axe des abscisses en x_1 .
- Calcul de x_{i+1} en fonction de x_i tant que la distance $|x_{i+1} - x_i|$ est supérieure à l'erreur souhaitée.



Formule de récurrence :

Par définition, x_{i+1} est l'abscisse du point d'intersection de la tangente C_f en x_i avec l'axe des abscisses. L'équation de la tangente est donc : $y = f'(x_i)(x - x_i) + f(x_i)$.

Cette tangente coupe l'axe des abscisses si : $y = 0$.

On a ainsi : $f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + f(x_i) = 0$.

Soit : $x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$.

FIN