
Calcul des propriétés diffusives des pâtes de ciment en cours d'hydratation via la Méthode Lattice Boltzmann

E. Walther¹, **M. Bogdan**², **R. Bennacer**³, **C. Desa**⁴

LMT-Cachan UMR 8535
61, avenue du Président Wilson
94230 Cachan, FRANCE

¹ walther@lmt.ens-cachan.fr; ² bogdan@lmt.ens-cachan.fr; ³ bennacer@lmt.ens-cachan.fr; ⁴ desa@lmt.ens-cachan.fr

RÉSUMÉ. Une méthode de création de morphologies de pâtes de ciment en cours d'hydratation à l'aide d'excursions de champs aléatoires est présentée dans cet article. On détaille ensuite la Méthode Lattice Boltzmann pour la simulation de la diffusion. Celle-ci est ensuite utilisée pour calculer les propriétés diffusives apparentes d'un grand nombre de pâtes de ciment reconstruites à l'aide d'un outil basé sur les excursions de champs aléatoires.

ABSTRACT. The construction of cement paste morphologies during hydration using level set method is presented in this work. We then detail the basics of the Lattice Boltzmann Method for the simulation of diffusion process in homogeneous and heterogeneous media. The method presented allows for the calculation of homogenised diffusive properties for a great number of reconstructed morphologies.

MOTS-CLÉS : morphologies, champs aléatoires corrélés, méthodes level-set, pâte de ciment, diffusivité, LBM

KEYWORDS: morphology, correlated random fields, level-set method, cement paste, diffusivity, Lattice Boltzmann

1. Introduction

À plusieurs égards, la compréhension et la modélisation des matériaux à base de pâte de ciment soulèvent des défis, tels que la prédiction de la durabilité ou des propriétés effectives. Dans cette communication, une tentative originale de modélisation de la microstructure d'une pâte de ciment est présentée, de concert avec une technique numérique atypique utilisée pour le calcul des propriétés diffusives.

Dans un premier temps, nous introduisons un outil de modélisation morphologique basé sur les excursions de champs aléatoires corrélés. À l'inverse de la plupart des modèles existants, de tels outils permettent de générer de morphologies "aléatoires" ayant une fraction volume/surface contrôlée. De plus, cette méthode permet d'avoir la main sur la structure entière de la morphologie via un nombre réduit de paramètres. L'évolution de la microstructure est elle contrôlée par un seul paramètre. Par opposition aux modèles "particulaires" ([van 91], [Gar 91]) qui requièrent un jeu de trois paramètres pour décrire chaque inclusion (en 2D), un seuil unique contrôle la morphologie dans le cas présent. Ce modèle sera utilisé à l'échelle de la pâte de ciment en 2D afin de générer des morphologies de la pâte de ciment au cours de l'hydratation.

La méthode Lattice Boltzmann (LBM) permet de simuler les phénomènes de transport en milieu hétérogène tel que la pâte de ciment (*e.g* la modélisation en 3D de [Zha 11]). La formulation explicite de la méthode et son maillage régulier défini une seule fois permet une implémentation simple de l'algorithme pour des géométries évolutives à différents instants dans le temps, ce qui est le but final de cette étude. La LBM est non-seulement explicite mais aussi fortement locale, exhibant ainsi un fort potentiel de parallélisation et la rendant compétitive *versus* les méthodes traditionnelles de calcul.

Cet aspect revêt un intérêt particulier pour les études de variabilité : étant donné que la reconstitution de morphologies de matériaux cimentaires est basée sur des champs aléatoires statistiques, un grand nombre de simulations est nécessaire pour obtenir un résultat significatif. Ceci est mis en exergue dans l'application finale de cette étude, qui est l'extension de la preuve du concept donnée dans [Wal 14a].

L'effet de seuil de percolation étant plus important en trois dimensions en raison de la connectivité des pores, le calcul en 2D de la diffusivité homogénéisée est moins pertinent dans le cas de matériaux à porosité communicante. Par rapport à l'approche extensive proposée par [Zha 12] et [Zha 11], l'originalité du présent travail réside néanmoins dans l'analyse de stabilité de la LBM autant que dans la détermination statistique de la diffusivité équivalente basée sur la génération indépendante de nombreuses morphologies tel que dans [Rou 14]. De plus, l'étude menée ici est considérée comme la validation d'un code LBM interne au laboratoire qui sera étendu à la dimension 3 dans un proche futur.

2. Description de la morphologie

Dans cette première partie nous introduirons un outil de modélisation morphologique original reposant sur les excursions de champs aléatoires corrélés. Dans un second temps nous développerons un modèle simplifié d'hydratation, qui couplé au modèle morphologique permettra de créer des morphologies de pâte de ciment en cours d'hydratation. Seules les idées fondamentales seront développées. L'objectif est de pouvoir représenter une pâte de ciment à l'état frais et de la faire évoluer dans le temps avec l'apparition des hydrates.

2.1. Champs corrélés et méthodes level-set

La méthode proposée ici repose sur le seuillage de réalisations de champs aléatoires corrélés Gaussiens. Ces derniers ont la particularité d'être définis par peu de paramètres : une longueur de corrélation L_c , une variance σ (respectivement la largeur et hauteur moyenne des sommets/vallées, figure 1(a)). On pourrait ajouter ici l'espérance de ces champs, mais dans toute la suite nous travaillerons avec des espérances nulles.

Dans le cadre de ce travail, ces champs aléatoires seront ici considérés comme des fonctions aléatoires : $\gamma(\mathbf{x}, \omega) : M \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^k$ où M est un espace euclidien à 2 dimensions, \mathbf{x} est la variable d'espace et ω la variable aléatoire. Ainsi nous travaillons uniquement avec des champs aléatoires définis au sein d'un carré de taille T , à valeurs dans \mathbb{R} . Une excursion A_u d'une réalisation d'un tel champ se définit par « l'ensemble des points de M où les valeurs de γ sont au-dessus d'un certain seuil u » :

$$A_u \equiv A_u(\gamma, M) = \{\mathbf{x} \in M : \gamma(\mathbf{x}) \geq u\} \quad (1)$$

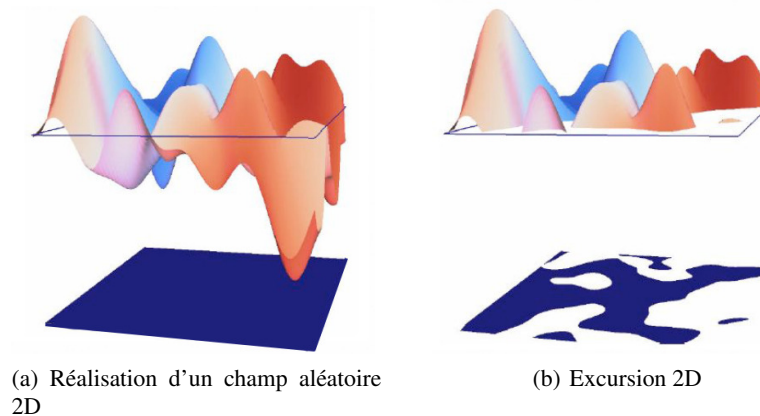
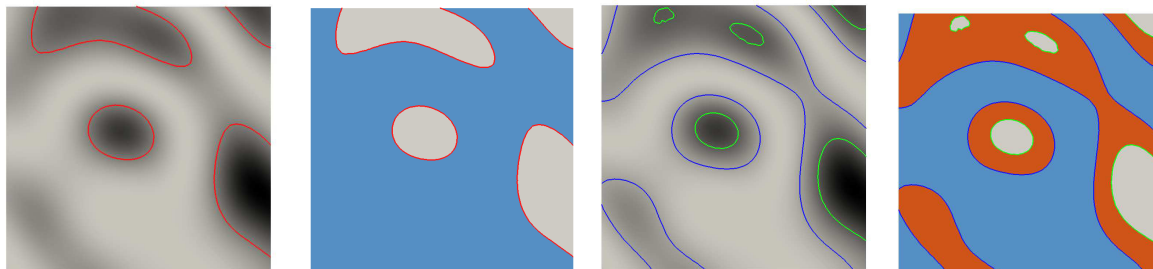


Figure 1. Réalisation d'un champs aléatoire et excursion

Un exemple est donné figure 1. A gauche on voit une réalisation γ sur un carré de taille T (figure 1(a)), et à droite le seuillage avec l'excursion en-dessous (figure 1(b)).

Le point clé de cette méthode de création de morphologies réside dans les travaux de [ADL 09]. Ces derniers ont établi un lien probabiliste entre d'une part les paramètres du champ aléatoire (L_c et σ) et le seuil u , et d'autre part les caractéristiques géométriques et topologiques de l'excursion. Il est ainsi possible, pour un seuil donné, de connaître dans le cas $2D$ la fraction surfacique, la taille moyenne des inclusions créées, ainsi qu'une mesure de leur connectivité. L'utilité principale de la méthode se dessine ici, car il sera possible par exemple de générer des morphologies avec une fraction surfacique donnée, et de les faire évoluer au travers d'un unique paramètre. Pour plus de détail sur le lien probabiliste et formules explicites, se référer aux travaux de [Adl 08] et [Rou 13].

Dans la suite, nous allons représenter des morphologies de pâte de ciment, et nous aurons donc besoin d'avoir des morphologies triphasiques. De la même façon qu'en appliquant un seuil à une réalisation de champ aléatoire, ajouter un second seuil va créer une nouvelle phase « concentrique » aux inclusions initiales (voir Figure 2(c) et 2(d)).



(a) Une réalisation de champ aléatoire seuillée à u (b) Morphologie initiale : grains de ciment et eau (c) Même réalisation avec $v \geq u$, et $w \leq u$ (d) Hydratation du ciment : grains de ciment, eau et hydrates

Figure 2. De la création du champ aléatoire à l'obtention d'une morphologie de pâte de ciment - gris : ciment anhydre ; bleu : eau ; orange : produits d'hydratation.

2.2. L'hydratation des pâtes de ciment : un modèle simplifié

Afin de décrire au mieux la morphologie des pâtes de ciment hydratées, ou en cours d'hydratation, nous devons utiliser un modèle permettant de décrire l'évolution du ciment anhydre et des hydrates au cours du temps. Nous avons choisi ici le modèle de Powers [Pow 47], par souci de simplicité (peu de phases prises en compte, tant pour les réactifs que pour les produits d'hydratation). Traditionnellement, ce modèle considère cinq phases : le ciment anhydre, les hydrates, l'eau libre, l'eau du gel, et l'apparition de "vide" associée à la diminution de volume due au retrait chimique. Pour chacune des phases est donnée une description en termes de fraction volumique, ne

dépendant que d'un paramètre temporel : le degré d'hydratation ξ . Nous avons choisi de ne garder que trois phases, en considérant que l'eau du gel fait partie des hydrates, et que le retrait n'est pas pris en compte (sa fraction volumique est incorporée à l'eau libre). Ainsi la description complète de nos morphologies peut se résumer à l'Equation [2] :

$$\begin{aligned} p &= \frac{w/c}{w/c + \rho_w/\rho_c} \\ V_{anh} &= (1-p)(1-\xi) \\ V_h &= 2.12(1-p)\xi \\ V_w &= 1 - V_{anh} - V_{hyd} \end{aligned} \quad (2)$$

où p est la porosité initiale du mélange à l'état frais, w/c le rapport massique eau sur ciment, ξ le degré d'hydratation, V_{anh} , V_h , V_w respectivement les fractions volumiques de ciment anhydre, d'hydrates et d'eau, et enfin ρ_w et ρ_c les masses volumiques de l'eau et du ciment anhydre. Un exemple de réalisation est fourni Figure 4. On peut souligner la simplicité de la description de l'hydratation par un seul paramètre (le degré d'hydratation ξ) pilotant l'évolution temporelle de chaque fraction volumique. D'un point de vue pratique, pour la description de nos morphologies nous utiliserons deux faits :

- la porosité initiale p nous informe sur la surface initiale (fraction volumique) des grains de ciment dans la pâte fraîche,
- l'évolution des trois phases, et donc des deux seuils se fait à l'aide **d'un unique paramètre**.

Pour de plus amples informations sur l'application des méthodes level-set visant à modéliser l'hydratation des pâtes de ciment, ainsi que le passage à trois dimensions, se référer à [Bog 12], [Rou 13].

3. Calcul de la diffusivité apparente de la pâte de ciment hydratée avec la Lattice Boltzmann Method

Dans cette partie, nous présentons dans un premier la méthode Lattice Boltzmann pour le calcul de diffusif en milieu homogène puis sa modification simple afin de simuler un milieu hétérogène. Une étape critique de ce genre de simulations, à savoir le passage entre monde LBM et monde réel est également détaillé.

3.1. Principe de la méthode pour la cas homogène

La LBM ou "méthode Boltzmann sur gaz réseau" est une approche mésoscopique des problèmes aux dérivées partielles. Elle consiste à considérer une population représentative de particules pour représenter le comportement macroscopique d'un fluide ou d'un solide. À l'inverse des équations de Navier-Stokes qui décrivent un comportement macroscopique puis qu'on discrétise vers le microscopique, il s'agit d'une approche "ascendante", où l'agitation particulaire définie par la distribution de Maxwell permet une extrapolation consistante vers le comportement macroscopique. Le lien entre les échelles macro et mésoscopique est fait via l'expansion de Chapman-Enskog [Moh 11].

On considère donc des distributions de particules se déplaçant dans des directions privilégiées, c'est-à-dire entre les points du maillage. Afin de faciliter les calculs, les échelles de temps et d'espace sont liées de sorte que les particules du maillage se déplacent de proche en proche sur les noeuds du maillage uniquement et échangent leur énergie par collision à chaque pas de temps (voir aussi le point 3.3 à ce sujet). La figure 3 ci-dessous donne un exemple de propagation des distributions pour le modèle D_2Q_9 où 2 représente la dimension d'espace et 9 le nombre de distributions se propageant par point de la grille (8 directions de propagation possibles, plus la possibilité de rester en position).

L'équation de Boltzmann qui régit le mouvement des particules est donnée sous la forme suivante, avec f la densité de probabilité de position des particules, c la vitesse de propagation des particules et Ω l'opérateur de collision.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c\nabla f = \Omega(f) \quad (3)$$

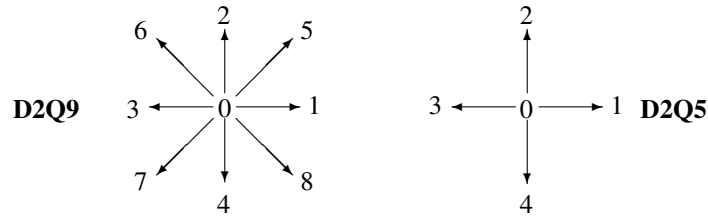


Figure 3. Flèches indiquant les directions possibles de propagation—Schémas à 9 et 5 vitesses (D_2Q_9 et D_2Q_5)

Soit après discrétisation sur l'espace D_2Q_9 défini précédemment, avec $0 \leq k \leq 8$, et $c_k = 1$ "lattice par pas de temps" comme vitesse mésoscopique de la particule sur la grille :

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + c_k \frac{\partial f_k}{\partial dx} = \Omega_k \quad (4)$$

Dans l'approche de Bhatnagar-Gross et Crook (BGK) on approxime l'opérateur de collision comme une relaxation de la fonction de distribution vers l'équilibre :

$$\Omega_k = -\frac{1}{\tau}(f_k - f_k^{eq}) \quad (5)$$

La fonction d'équilibre f_k^{eq} de l'équation 5 est approximée en effectuant un développement limité de l'équation de Maxwell-Boltzmann, avec pour le cas de la diffusion :

$$f_k^{eq} = \omega_k \rho \quad (6)$$

où ρ est simplement la somme des distributions f_k au point de l'espace considéré et représente la grandeur calculée, *e.g.* la température, la concentration. Le facteur ω_k est une pondération constante relative à chacune des directions de propagation, telle que $\sum(\omega_k) = 1$.

En posant $\omega = \Delta t/\tau$ et écrivant sous forme discrète l'équation de Boltzmann, on arrive à la forme donnant explicitement l'évolution spatio-temporelle de la fonction f ci-après :

$$f_k(x + \Delta x, t + \Delta t) = f_k(x, t) - \omega(f_k(x, t) - f_k^{eq}(x, t)) \quad (7)$$

Il est à noter que, de par les hypothèses de construction de la méthode, on a $\Delta x = \Delta y = \Delta t = 1$. De plus, pour des raisons de stabilité de la méthode, le facteur ω doit être strictement compris entre 0 et 2. La relation entre ω et la "diffusivité LBM" d d'un milieu est donnée pour le cas à deux dimensions par :

$$d = c_s^2 \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right) \quad (8)$$

où $c_s = 1/\sqrt{3}$ est la pseudo-vitesse du son dans l'espace LBM (en réalité, ce n'est qu'un paramètre de mise à l'échelle [Nou 03]). Le lien entre espace LBM et monde réel sera fait dans la section 3.3. Dans un souci de concision, nous n'entrerons pas plus avant dans les détails. Pour plus de précisions sur la LBM ainsi que ses conditions limites, se référer à [Suc 01] et [Zie 93].

Concernant les matériaux hétérogènes, la méthode est strictement similaire à cela près que le facteur ω diffère selon le matériau. Il suffit bien sûr de donner une valeur bien choisie au facteur de relaxation, ce que nous allons détailler dans le paragraphe suivant.

3.2. Cas des matériaux hétérogènes

Pour simuler la diffusion dans un matériau à deux constituants a et b , il convient de définir le facteur de relaxation pour un des matériaux puis de déterminer la valeur correspondant à l'autre en fonction du rapport des diffusivités réelles, comme explicité pas-à-pas ci-après :

$$\begin{aligned}\omega_a &= \text{choisi} \\ d_a^{LBM} &= c_s^2 \left(\frac{1}{\omega_a} - \frac{1}{2} \right) \\ d_b^{LBM} &= d_a^{LBM} \times \frac{d_b^{real}}{d_a^{real}} \\ \omega_b &= \left(\frac{d_b^{LBM}}{c_s^2} + \frac{1}{2} \right)^{-1}\end{aligned}\quad (9)$$

Cette procédure se généralise sans peine à n matériaux, avec toutefois des précautions particulières à prendre lorsque l'un des facteurs de relaxation tend vers l'une des limites (0 ou 2) [Wal 14a].

3.3. Passage au monde réel

Si l'on souhaite faire le lien entre un solide réel de diffusivité d [m²/s] pour un problème ayant un pas de temps Δt et une dimension caractéristique L_x et le "monde LBM" pour un nombre de mailles N_x , il faut faire correspondre leurs nombres de Fourier :

$$\begin{aligned}F_o &= d_{LBM} \left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right)^{LBM} = \frac{d\Delta t}{\Delta x^2} \\ \text{Soit avec } \Delta x^{LBM} &= \Delta t^{LBM} = 1 \\ d_{LBM} &= \frac{d\Delta t}{\Delta x^2}\end{aligned}\quad (10)$$

Calculons l'équivalent temps réel-temps LBM pour une pâte de ciment de taille caractéristique 10^{-4} [m] et de diffusivité $d = 10^{-12}$ [m²/s] sur un maillage de $N_x = 200$ noeuds sur une durée de 28 jours.

- On calcule la taille d'un élément de maillage : $\Delta x = 10^{-4}/200 = 5 \times 10^{-7}$ [m].
- On se fixe ensuite $\omega = 1$, ce qui implique $d_{LBM} = \frac{1}{3} \times \left(\frac{1}{1} - 0.5 \right) = 0.1667$ [LU²/TU] (d'après l'équation 8)

L'équivalence des nombres de Fourier donne alors :

$$\Delta t = \frac{0.1667}{10^{-12}} \times (5 \times 10^{-7})^2 = 0.04167 \text{ [s]}$$

Pour simuler 28 jours de diffusion dans cette microstructure, il faudra donc $28 \times 24 \times 3600/0.04167 = 5.8 \times 10^7$ pas de temps.

4. Résultats numériques

Les bases théoriques de la méthode ayant été développés, la section suivante traite des résultats numériques obtenus en termes de diffusivité équivalent pour un grand nombre de morphologies de ciment à différents stades d'hydratation. La validation du code et le comportement oscillatoire pour certaines valeurs limites du facteur de relaxation ont fait l'objet d'une communication précédente, voir [Wal 14b].

Le calcul de la diffusivité apparente en milieu hétérogène D_{eq} a été effectué en appliquant un gradient de concentration unitaire entre deux faces opposées, suivant la méthode décrite par [Pou 02]. On intègre ensuite le flux d'espèce aux frontières pour obtenir le flux macroscopique et en déduire la diffusivité homogénéisée

Afin d'obtenir une représentation statistiquement représentative de la pâte de ciment au cours de l'hydratation, nous avons utilisé la reconstruction de morphologies basée sur les excursions de champs aléatoires sur 300 tirages pour chaque degré d'hydratation. La pâte de ciment au jeune âge est composée de porosité saturée d'eau (avec

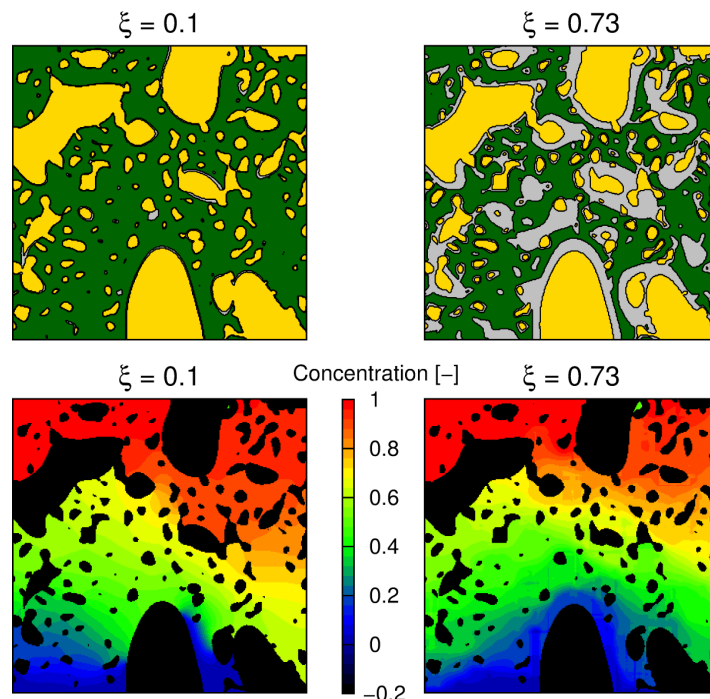


Figure 4. Évolution d'une morphologie durant l'hydratation et champ de concentration correspondants en régime établi - Jaune : ciment anhydre, Vert : eau, Gris : ciment hydraté

un coefficient diffusif de $D_w = 2.10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, d'hydrates ($D_h = 2.10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$) et de ciment anhydre, ce dernier étant considéré comme non diffusif. Un exemple de l'évolution de la morphologie est donné sur la partie haute de la figure 4 où l'on peut voir deux degrés d'hydratation éloignés. La diffusivité effective de la pâte de ciment pour un rapport $w/c = 0.4$ est calculée au cours de l'hydratation suivant le modèle présenté en partie 2.2.

Les résultats en termes de diffusivité équivalente moyenne sont tracés sur la figure 5 (et un exemple du champ de concentration est montré 4), avec un intervalle de confiance à 95% pour les 300 morphologies par état d'hydratation. Cette courbe montre qu'aux prémices de l'hydratation, la diffusivité est proche de celle de l'eau, ce qui correspond à une phase poreuse très percolante. Ensuite, alors que le degré d'hydratation augmente, la diffusivité apparente diminue avec un changement de pente significatif autour de $\xi = 0.45$. Finalement, les pores sont comblés par les hydrates et la diffusivité apparente s'approche ainsi de celle des hydrates.

Chaque point de la figure 5 ayant été moyenné sur 300 réalisations, les intervalles de confiance à 95% sont représentés. Ceux-ci exhibent une caractéristique intéressante dans la mesure où ils sont légèrement plus étroits pour les degrés d'hydratation initiaux et finaux. Dans ces états, la pâte de ciment présente une phase "très" percolée (*i.e.* l'eau percole dans les pores ou les hydrates inhibent le chemin de diffusion - la Figure 5 montre également un tel phénomène). Dans ce cas, le comportement macroscopique dépend en premier lieu de la phase "percolante". Lorsque la pente de la courbe change de manière importante, l'intervalle de confiance est moins resserré. Ceci correspond aux états d'hydratation intermédiaires, où aucune des deux phases ne prédomine sur le plan de la percolation, et où la variabilité morphologique est plus grande.

5. Conclusions

Cette étude présente une méthode pour reconstruire la morphologie des pâtes de ciment à l'aide d'excursions de champs aléatoires. Grâce à sa formulation explicite et son maillage régulier, la LBM permet une implémentation simple de l'algorithme avec application directe au calcul de la diffusivité apparente de matériaux hétérogènes à forte variabilité de propriétés diffusives au cours du temps. Les développements futurs de ce travail viseront à coupler à la fois la génération de la morphologie et le calcul diffusif par la LBM afin d'obtenir la diffusivité équivalente au cours du temps. L'extension en 3D est également planifiée en vue de comparer les résultats des deux approches de modélisation et de trouver un rapport entre elles permettant de réduire encore les coûts de calcul liés à la prédiction des propriétés effectives selon [QIA 12].

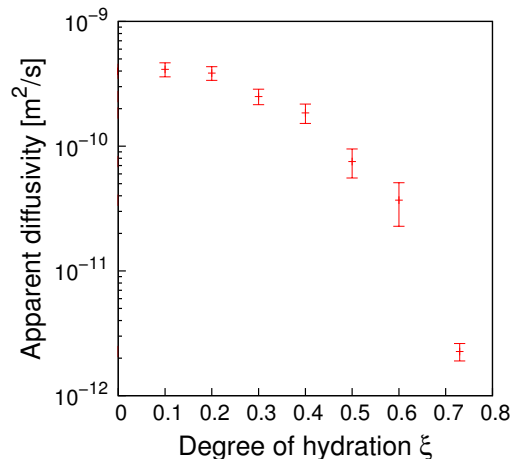


Figure 5. Moyenne simulée de la diffusivité apparente de la pâte de ciment avec intervalle de confiance à 95% en utilisant la LBM et un algorithme de génération de morphologies par excursion de champ aléatoire.

6. Bibliographie

- [Adl 08] ADLER R., « Some new random field tools for spatial analysis », *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, vol. 22, 2008.
- [Bog 12] BOGDAN M., « Morphological modeling of cement based materials and hydration process », *Microstructural-related Durability of Cementitious Composites*, Amsterdam, The Netherlands, 2012.
- [Gar 91] GARBOCZI B., BENTZ D., « Fundamental computer simulation models for cement-based material », *Materials Science of Concrete*, vol. II, n° 1, 1991.
- [Moh 11] MOHAMAD A. A., *Lattice Boltzmann Method - Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*, Springer Edition, 2011.
- [Nou 03] NOURGALIEV R. R., DINH T. N., THEOFANOUS T. G., JOSEPH D., « The lattice Boltzmann equation method : Theoretical interpretation, numerics and implications », *International Journal of Multiphase flow*, vol. 29, p. 117-169, 2003.
- [Pou 02] POUYA A., COURTOIS A., « Définition de la perméabilité équivalente des massifs fracturés par des méthodes d'homogénéisation », *Comptes-Rendus Géoscience*, vol. 13, p. 975-979, 2002.
- [Pow 47] POWERS T., BROWNYARD T., « Studies of the physical properties of hardened Portland cement paste », *Journal of the American Concrete Institute*, vol. 43, p. 101-132, 249-336, 469-505, 549-602, 669-712, 845-880, 933-992, 1947.
- [QIA 12] QIAO J., Modélisation des propriétés thermomécaniques effectives de dépôts élaborés par projection thermique, PhD thesis, Université de Technologie de Belfort-Montbéliard, 2012.
- [Rou 13] ROUBIN E., Meso-scale FE and morphological modeling of heterogeneous media : application to cementitious materials, PhD thesis, LMT Cachan, 2013.
- [Rou 14] ROUBIN E., VALLADE A., BENKEMOUN N., COLLIAT J.-B., « Multi-scale failure of heterogeneous materials : a double kinematics enhancement for embedded finite element method », *International Journal of Solids and Structures*, vol. 10, 2014.
- [Suc 01] SUCCI S., *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*, Clarendon Press, Oxford, 2001.
- [van 91] VAN BREUGEL K., Simulation and hydration and Formation of Structure in Hardening Cement-Based Materials, PhD thesis, Delft University of Technology, The Netherlands, 1991.
- [Wal 14a] WALTHER E., BENNACER R., DESA C., « Lattice Boltzmann Method applied to Diffusion in restructured Heterogeneous Media », *Defect and Diffusion Forum*, vol. 354, p. 237-242, 2014.
- [Wal 14b] WALTHER E., BOGDAN M., BENNACER R., DESA C., « Morphologies et Homogénéisation par la Lattice Boltzmann Method », *32^e Rencontres universitaires de l'AUGC*, Orléans, France, 2014.
- [Zha 11] ZHANG M., YE G., VAN BREUGEL K., « Lattice Boltzmann simulation of the ionic diffusivity of cement paste », *International RILEM Conference on Advances in Construction Materials Through Science and Engineering*, p. 1-9, 2011.
- [Zha 12] ZHANG M., YE G., VAN BREUGEL K., « Modeling of ionic diffusivity in non-saturated cement-based materials using lattice Boltzmann method », *Cement and Concrete Research*, vol. 42, p. 1524-1533, 2012.
- [Zie 93] ZIEGLER D. P., « Boundary conditions for lattice Boltzmann simulations », *Journal of Statistical Physics*, vol. 71, p. 1171-7, 1993.