

Estimation des coefficients de diffusion hydrique de matériaux du bâtiment lors du séchage

A. ZAKNOUNE¹, P. GLOUANNEC^{1*}, P. SALAGNAC², P. LE BIDEAU¹

¹Laboratoire d'Ingénierie des MATériaux de Bretagne – Equipe Thermique et Energétique, Université Européenne de Bretagne, B.P. 92116, 56321 Lorient Cedex

²Laboratoire d'Etudes des Phénomènes de Transfert et de l'Instantanéité : Agro-industrie et Bâtiment, Université de La Rochelle, 17042 La Rochelle Cedex

* (auteur correspondant : patrick.glouannec@univ-ubs.fr)

Résumé - Dans ce travail, nous présentons une méthodologie pour estimer les coefficients de diffusion hydrique lors de séchage convectif de deux matériaux de construction. Ces paramètres ont été déterminés par méthode inverse en minimisant l'écart quadratique entre les cinétiques de séchage expérimentales et simulées. La résolution des équations de transferts couplés de chaleur et masse s'est faite à l'aide de la méthode des volumes finis associée à un schéma temporel de type implicite et la minimisation de la fonctionnelle a été réalisée par un algorithme SQP. Des résultats sont présentés et analysés pour deux matériaux, le béton cellulaire et un mélange chanvre/chaux.

Nomenclature

a_w	activité de l'eau	t	temps, s
C_p	chaleur spécifique, $J.kg^{-1}.K^{-1}$	W	teneur en eau en base sèche, $kg.kg^{-1}$
D	coefficient de diffusion, $m^2.s^{-1}$	W_{eq}	teneur en eau normalisée
F_m	flux masse évaporé, $kg.m^{-2}.s^{-1}$	<i>Symboles grecs</i>	
H_r	humidité relative, %	ρ	masse volumique, $kg.m^{-3}$
h_c	coefficient de convection, $W.m^{-2}.K^{-1}$	v	vitesse de filtration, $m.s^{-1}$
h_r	coefficient de rayonnement, $W.m^{-2}.K^{-1}$	μ	facteur de tortuosité
k_m	coeff. de transfert de masse, $m.s^{-1}$	λ^*	conductivité thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$
K_r^g	perméabilité relative à la vapeur	\mathcal{E}	tolérance sur la fonction objectif
L_v	chaleur latente de vaporisation, $J.kg^{-1}$	\mathcal{E}'	tolérance sur les paramètres
M	masse molaire, $kg.mol^{-1}$	<i>Indices et exposants</i>	
P_{va}	pression atmosphérique, Pa	a	air
$P_{v\infty}$	pression partielle à l'ambiance, Pa	v	vapeur
P_{vsat}	pression de vapeur saturante, Pa	l	liquide
R	constante des gaz parfaits, $J.mol^{-1}.K^{-1}$	s	solide
T	température, K		

1. Introduction

L'objectif de ce travail est de modéliser et d'appréhender le comportement thermo-hydrique d'un matériau capillaro-poreux en cours de séchage. Pour disposer d'un modèle permettant de prédire les cinétiques de séchage à différentes conditions d'ambiance, il est nécessaire de connaître les propriétés hydriques du matériau étudié, notamment les coefficients de diffusion hydrique. Ces derniers expriment la capacité des molécules d'eau à diffuser à travers le réseau poreux d'un matériau sous l'effet d'un gradient de température ou d'un gradient de teneur en eau. Les techniques expérimentales actuelles permettant de déterminer ces coefficients sont relativement lentes (plusieurs mois) et doivent être adaptées à la quantité et à la nature de l'eau dans le matériau. Une approche de type « problème inverse » se révèle intéressante pour déterminer ces coefficients à partir des cinétiques de séchage expérimentales. Cependant, la résolution du problème inverse est complexe. En effet, une faible erreur de mesure sur la

température ou la masse peut engendrer des changements d'une amplitude importante dans les solutions obtenues.

Dans cette communication, nous présentons la méthodologie développée ainsi que des essais d'estimation du coefficient de diffusion massique relative au gradient de teneur en eau et de la perméabilité relative à la vapeur. Un modèle macroscopique classique permettant de déterminer les cinétiques de séchage a tout d'abord été développé. Une méthode d'optimisation de type déterministe a été retenue. Cette méthode permet de résoudre avec succès les problèmes d'optimisation sous contraintes.

Les résultats présentés concernent deux matériaux : le béton cellulaire sur lequel il existe des informations abondantes dans la littérature et un mélange chanvre/chaux dont les coefficients de diffusion sont inconnus.

2. Modélisation physique et numérique

La mise en équations des phénomènes de transfert de chaleur et de masse dans les matériaux capillaro-poreux hygroscopiques, particulièrement les matériaux de construction, a été la cible d'importants travaux de recherche (Luikov [1], Whitaker [2], Philip et De Vries [3]). Ces travaux se basent sur les lois de Fick et de Darcy pour décrire la diffusion de fluide en phase liquide et en phase vapeur, et la loi de Fourier pour la diffusion de la chaleur.

Le modèle retenu reflète l'approche macroscopique développée par Whitaker [2] décrite par la notion de volume élémentaire représentatif. Le milieu étudié a la forme d'un parallélépipède. Il est considéré comme homogène et est constitué de trois phases : solide, liquide et gazeuse. Les variables du modèle sont la température et la teneur en eau massique. La pression totale de la phase gazeuse (mélange d'air sec et de vapeur d'eau) est considérée constante et égale à la pression atmosphérique. Les transferts de masse et de chaleur sont supposés unidimensionnels. Les phénomènes de transport convectif et ceux liés à la gravité sont négligés [4].

Le système d'équations de transfert de chaleur et de masse s'écrit ainsi :

$$\frac{\partial W}{\partial t} - \bar{\nabla} \cdot \left[\frac{1}{\rho_s} \left((D_l^T + D_v^T) \bar{\nabla} T + (D_l^W + D_v^W) \bar{\nabla} W \right) \right] = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \bar{\nabla} \cdot (\lambda \bar{\nabla} T) - \bar{\nabla} \cdot (D_v^T \bar{\nabla} T + D_v^W \bar{\nabla} W) \Delta H_v = 0 \quad (2)$$

A l'interface air-produit, les transferts s'écrivent :

$$-\lambda \nabla T + \rho_l \bar{v}_l \Delta H_v = h_c (T_a - T(0,t)) + h_r (T_p - T(0,t)) \quad (3)$$

$$-(\bar{\rho}_v^s \bar{v}_v + \rho_l \bar{v}_l) = F_m \quad (4)$$

Le flux masse évaporé est :
$$F_m = k_m \frac{P_{atm} M_v}{RT_f} \ln \left(\frac{P_{atm} - P_{\infty}}{P_{atm} - a_w P_{vsat}} \right) \quad (5)$$

A l'interface creuset-produit, la face est imperméable et sa température est égale à celle obtenue expérimentalement.

La résolution numérique est réalisée par la méthode des volumes finis associée à un schéma temporel de type implicite.

Les coefficients de diffusion D_L^W , D_V^W , D_L^T et D_V^T sont les paramètres importants de cette étude. Plusieurs auteurs ont utilisé la solution analytique de la seconde loi de Fick [5] pour estimer le coefficient de diffusion dans le cas d'un matériau en couche mince. Ketelaars et al. [6] montrent que l'évolution du coefficient de diffusion en phase liquide avec la teneur en eau

peut être représentée par une forme exponentielle. Dietl et al. [7], quant à eux, proposent d'estimer par technique inverse les paramètres de coefficient de diffusion en phase liquide et la perméabilité relative à la phase vapeur.

Les expressions des coefficients de diffusions retenues sont indiquées dans le tableau 1.

Phase liquide	gradient de température	$D_L^T = 0$	
	gradient de teneur en eau	$D_L^W = \exp\left(p_1 + \frac{p_2}{W}\right)$	
Phase vapeur	gradient de température	$D_V^T = \mu K_r^g D_0 \left(\frac{M_a M_v}{MRT}\right) \left(\frac{\partial P_v^g}{\partial T}\right)$	$\begin{cases} \mu K_r^g = p_3 + p_4 W_{eq}^2 + p_5 W_{eq}^3 \\ D_0 = 2,17 \cdot 10^{-7} \left(\frac{T}{273,15}\right)^{1,88} \\ W_{eq} = \frac{W - W_{hyg}}{W_{sat} - W_{hyg}} \end{cases}$
	gradient de teneur en eau	$D_V^W = \mu K_r^g D_0 \left(\frac{M_a M_v}{MRT}\right) \left(\frac{\partial P_v^g}{\partial W}\right)$	

Tableau 1. Expressions des coefficients de diffusion.

3. Description de la méthode inverse

Les paramètres inconnus de ce modèle sont p_1, p_2, p_3, p_4 et p_5 . Les variables de sortie sont : T et W. Le problème inverse consiste à identifier les paramètres inconnus à partir des valeurs des variables de sortie. L'identification se fait par la minimisation de la somme des écarts quadratiques entre les valeurs des variables de sortie expérimentales et celles des variables de sortie modélisées, en utilisant une méthode d'optimisation basée sur l'algorithme SQP (programmation quadratique successive). La fonction objectif $S(p)$ s'écrit :

$$S(p) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[\alpha \left(\frac{W_i^{moy} - \tilde{W}_i^{moy}(p)}{\max(W^{moy})} \right)^2 + \beta \left(\frac{T_i^{surf} - \tilde{T}_i^{surf}(p)}{\max(T^{surf})} \right)^2 \right] \quad (6)$$

α et β sont des coefficients de pondération.

Les valeurs des paramètres sont bornées. Le calcul est arrêté lorsque l'un des critères suivants est satisfait : $S(p^k) < \varepsilon$ ou $\|p^{k+1} - p^k\| < \varepsilon'$.

La minimisation est réalisée sous les deux contraintes
$$\begin{cases} K_r^g(W_{eq_{max}} = 1) = 0 \\ K_r^g(W_{eq_{min}} = 0) \leq 1 \end{cases}$$

L'étude des sensibilités des variables de sortie (T,W) par rapport aux variations des paramètres p_i est importante pour déterminer la possibilité d'estimer les cinq paramètres simultanément. Le coefficient de sensibilité réduit normalisé de la variable \tilde{Y}_j au paramètre

p_i est défini ainsi :

$$C_{ij}(t, p) = p_i \frac{\frac{\partial \tilde{Y}_j}{\partial p_i}}{\max_{p_{k,k \neq i}} \left| \frac{\partial \tilde{Y}_j}{\partial p_i} \right|} \quad (7)$$

La dérivée partielle est calculée à l'aide d'une approximation en différences centrées. La valeur choisie pour Δp_i est très petite (1% de p_i).

4. Application de la méthode inverse

Initialement, afin d'évaluer les performances numériques de la méthode d'estimation, nous avons traité le cas du séchage d'un matériau bien connu et fabriqué d'une façon industrielle (béton cellulaire). Il est homogène, hygroscopique, de porosité proche de 0,8 et pour lequel il existe des informations abondantes dans la littérature [8-9], ce qui nous a permis de disposer des coefficients de diffusion ainsi que les cinétiques de séchage convectif [9].

Par la suite, nous nous sommes intéressés plus particulièrement au mélange chanvre-chaux. Ce dernier est obtenu en mélangeant : un liant à base de chaux (51% en masse), des particules végétales (8% en masse) et de l'eau (41% en masse). La nature très différente des constituants fait que les propriétés du matériau résultant dépendent fortement des concentrations volumiques, des propriétés physiques intrinsèques et des interactions possibles entre chaque constituant, ce qui fait de ce matériau, un système très complexe et fortement hétérogène.

Pour déterminer expérimentalement les cinétiques de séchage de ces produits, les études sont menées sur des échantillons de forme parallélépipédique (10cm×10cm×4cm) positionnés dans un creuset. Afin de se placer dans le cas d'échange unidimensionnel, seule la face supérieure du produit est en contact avec l'écoulement d'air. Une métrologie adaptée a été mise en place afin d'appréhender le comportement thermique et hydrique du matériau (balance, thermocouples positionnés au sein du produit, pyromètre optique pour mesurer la température de surface, hygromètre...). Les cinétiques de séchage convectif du béton cellulaire et du mélange chanvre chaux sont représentées respectivement par les figures (1.a et 1.b).

5. Résultats et discussion

L'évolution au cours du temps des sensibilités relatives normalisées de la température de surface et de la teneur en eau moyenne par rapport aux variations des cinq paramètres sont représentées par les figures 2.a et 2.b. Une dépendance linéaire est observée entre le paramètre p_4 et p_5 et entre le paramètre p_1 et p_2 . Cette corrélation entre les paramètres peut par la suite affecter leurs estimations. L'information que l'on peut retirer de cette étude de sensibilité c'est que la température de surface seule et la teneur en eau moyenne seule ne peuvent pas fournir assez d'informations pour estimer correctement les cinq paramètres. Il est donc nécessaire de tenir compte des deux contributions simultanément.

Plusieurs estimations sont réalisées avec différents jeux de paramètres initiaux. L'algorithme converge vers la même solution avec un temps de calcul et un nombre d'itérations plus ou moins importants. Le paramètre p_5 tend vers sa borne inférieure pour les deux matériaux (Tableau 2). (B.C : béton cellulaire, M.C.C : mélange chanvre chaux).

Paramètres	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5
Initiaux	-5	-2	1	-3	2
Lim. Inf.	-30	-30	10^{-3}	-30	10^{-3}
Lim. Sup.	-1	-10^{-3}	3	-10^{-3}	6
Estimés (B.C)	-11,32±2,33	-0,429±0,011	0,2951±0,0001	-0,2961	10^{-3}
Estimés (M.C.C)	-12,06±1,90	-0,272±0,003	1,0001±0,0014	-1,0011	10^{-3}

Tableau 2. Valeur des paramètres et intervalle de confiance à 99% ($\alpha = \beta = 0,5$)

Dans le cas du béton cellulaire, les résultats d'estimation obtenus montrent la validité de la démarche et par ailleurs, l'égalité des contributions de la teneur en eau moyenne et de la température de surface dans les premières itérations. A partir de la 5^{ème} itération, la contribution de la teneur en eau devient prédominante. Un écart entre la température de

surface mesurée et la température estimée est enregistré durant la phase isenthalpe ainsi que durant la montée en température, ce qui correspond à une surestimation de la diffusion de l'eau par le modèle (figure 3.a). Les valeurs des coefficients de diffusion obtenus sont très proches des valeurs trouvées dans la littérature (figure 3.b). D'une façon globale, le résultat de minimisation est considéré satisfaisant.

La figure 4.b confronte des cinétiques de séchage simulée et expérimentale dans le cas du mélange chanvre / chaux. Les valeurs de la température de surface et de la teneur en eau moyenne obtenues sont conformes à l'expérience. L'erreur moyenne sur la teneur en eau est inférieure à $0,005 \text{ kg.kg}^{-1}$, ce qui correspond à une erreur moyenne sur la masse de 1,2 g. L'évolution de la teneur en eau est correctement représentée. Durant la première phase de séchage, la température de surface calculée est en dessous de la température mesurée avec un écart d'environ 1°C .

6. Conclusion

Nous avons montré à travers cette étude qu'il était possible d'estimer simultanément plusieurs coefficients de diffusion hydrique. Une application sur deux matériaux de construction et pour différents paramètres initiaux a été réalisée. La méthode conduit vers une estimation correcte des cinq paramètres simultanément avec des erreurs faibles. Les cinétiques de séchage des deux matériaux ont été correctement prédites. Dans le cas du mélange chanvre/chaux, les teneurs en eau expérimentale et simulée sont parfaitement superposées. Par contre, la température de surface simulée est en dessous de la température mesurée durant la phase isenthalpe, ce qui est probablement due à une surestimation du coefficient de diffusion en phase liquide et aux erreurs de mesure de la température (erreur de 1°C environ pour les températures proches de l'ambiance).

Remerciement

Les auteurs adressent leurs remerciements à l'agence nationale de recherche (ANR), la région de Bretagne et le conseil général pour le soutien financier de ces travaux.

Références

- [1] AV. Luikov, Systems of differential equations of heat and mass transfer in capillary porous bodies. Pergamon Press, Oxford, 1975.
- [2] S. Whitaker, Simultaneous heat, mass, and momentum transfer in porous media: a theory of drying, *Adv. Heat Transfer*, 1977, 54, 13.119-13-13.203.
- [3] J.R. Philip, D.A. De Vries, Moisture movement in porous material under temperature gradients, *Trans. Am. Geoph. Union*, 1957, 222-232.
- [4] P. Salagnac, P. Glouannec, D. Lecharpentier, Numerical modelling of heat and mass transfer in porous medium during combined hot air, infrared and microwaves drying, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, (2004), 47 (19-20), 4479-4489.
- [5] J. Crank, *The mathematics of diffusion*, 2nd edition, Clarendon Press Oxford.
- [6] A. Ketelaars, L. Pel, W. Coumans, P. Kerkhof, Drying kinetics: a comparison of diffusion coefficients from moisture concentration profiles and drying curves, *Chemical Engineering Sciences*, (1995), 50, 1187-1191.
- [7] C. Dietl, E. Winter, R. Viskanta, An efficient simulation of heat and mass transfer processes during drying of capillary porous, hygroscopic materials, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, (1998), 41, 3611-3625.
- [8] J.M. Couture, Modélisation fine d'un problème de séchage, développement d'outils adaptés, Thèse de doctorat, Université de Bordeaux I, 1995.
- [9] D. Lecharpentier, Optimisation d'un procédé de séchage. Problématique liée au transfert de masse et de chaleur lors d'utilisation de technologie rayonnantes micro-onde et infrarouge. Thèse de doctorat, Université de Nantes, 2002.

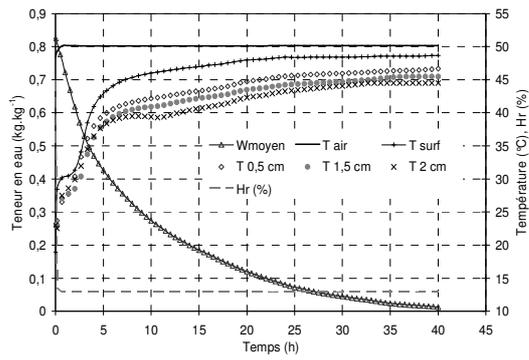


Figure 1.a. Cinétique de séchage du béton cellulaire ($e=2,5$ cm, $T_{air}=50^{\circ}\text{C}$, $V_{air}=3$ m.s⁻¹)

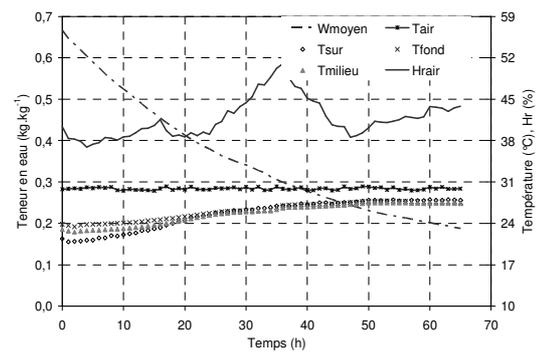


Figure 1.b. Cinétique de séchage du chanvre chaux ($e=3,8$ cm, $T_{air}=30^{\circ}\text{C}$, $V_{air}=1,2$ m.s⁻¹)

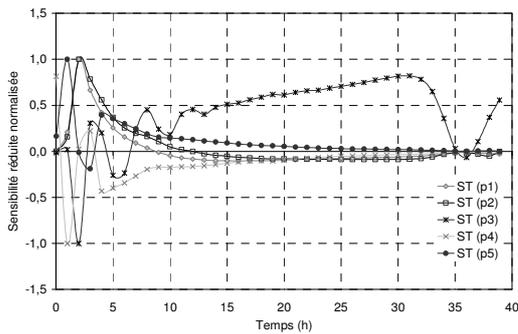


Figure 2.a. Sensibilité de la température de surface par rapport aux paramètres à estimer

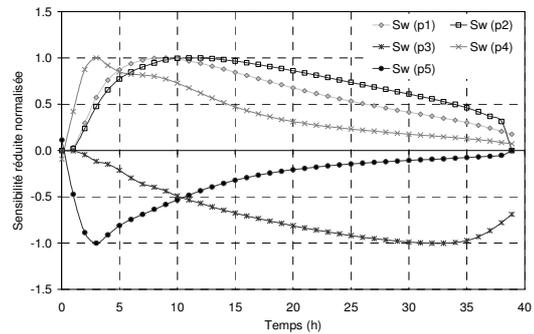


Figure 2.b. Sensibilité de la teneur en eau moyenne par rapport aux paramètres à estimer

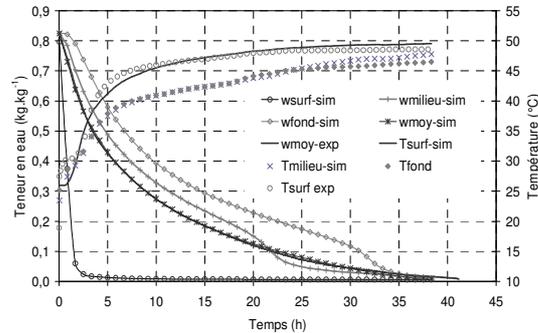


Figure 3.a. Confrontation des cinétiques expérimentale et simulée « béton cellulaire »

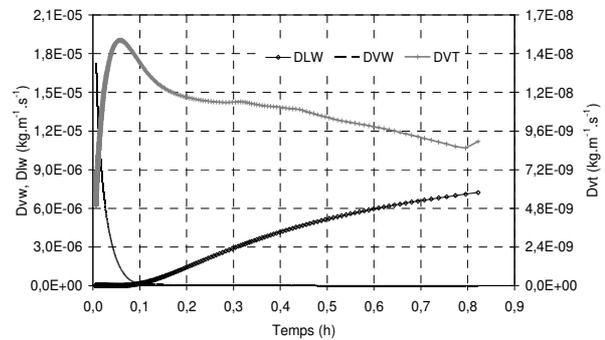


Figure 3.b. Coefficients de diffusion estimés « béton cellulaire »

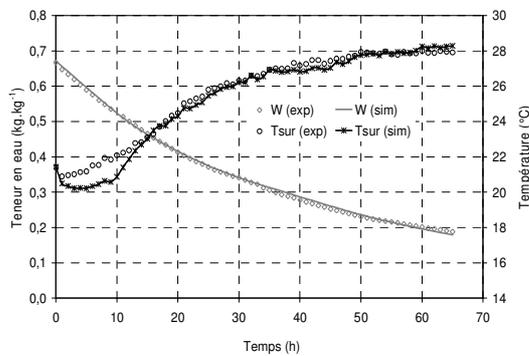


Figure 4.a. Confrontation des cinétiques expérimentale et simulée « chanvre/chaux »

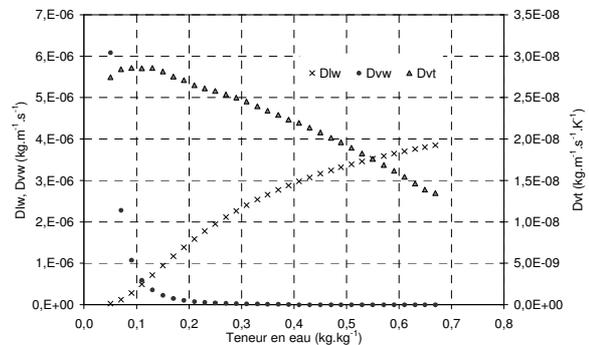


Figure 4.b. Coefficients de diffusion estimés « chanvre/chaux »