

Modélisation mathématique et numérique des transferts d'humidité en milieu poreux

Pierre NICOLAS

études et recherches
des laboratoires des ponts et chaussées

lpc

série sciences de l'ingénieur **SI 2**



Ministère de l'Équipement,
du Logement et des Transports

Laboratoire Central
des Ponts et Chaussées



Conformément à la note du 04/07/2014 de la direction générale de l'Ifsttar précisant la politique de diffusion des ouvrages parus dans les collections éditées par l'Institut, la reproduction de cet ouvrage est autorisée selon les termes de la licence CC BY-NC-ND. Cette licence autorise la redistribution non commerciale de copies identiques à l'original. Dans ce cadre, cet ouvrage peut être copié, distribué et communiqué par tous moyens et sous tous formats.



Attribution — Vous devez créditer l'Oeuvre et intégrer un lien vers la licence. Vous devez indiquer ces informations par tous les moyens possibles mais vous ne pouvez pas suggérer que l'Ifsttar vous soutient ou soutient la façon dont vous avez utilisé son Oeuvre.



Pas d'Utilisation Commerciale — Vous n'êtes pas autorisé à faire un usage commercial de cette Oeuvre, tout ou partie du matériel la composant.



Pas de modifications — Dans le cas où vous effectuez une adaptation, que vous transformez, ou créez à partir du matériel composant l'Oeuvre originale (par exemple, une traduction, etc.), vous n'êtes pas autorisé à distribuer ou mettre à disposition l'Oeuvre modifiée.

Le patrimoine scientifique de l'Ifsttar

Le libre accès à l'information scientifique est aujourd'hui devenu essentiel pour favoriser la circulation du savoir et pour contribuer à l'innovation et au développement socio-économique. Pour que les résultats des recherches soient plus largement diffusés, lus et utilisés pour de nouveaux travaux, l'Ifsttar a entrepris la numérisation et la mise en ligne de son fonds documentaire. Ainsi, en complément des ouvrages disponibles à la vente, certaines références des collections de l'INRETS et du LCPC sont dès à présent mises à disposition en téléchargement gratuit selon les termes de la licence Creative Commons CC BY-NC-ND.

Le service Politique éditoriale scientifique et technique de l'Ifsttar diffuse différentes collections qui sont le reflet des recherches menées par l'institut :

- Les collections de l'INRETS, Actes
- Les collections de l'INRETS, Outils et Méthodes
- Les collections de l'INRETS, Recherches
- Les collections de l'INRETS, Synthèses
- Les collections du LCPC, Actes
- Les collections du LCPC, Etudes et recherches des laboratoires des ponts et chaussées
- Les collections du LCPC, Rapport de recherche des laboratoires des ponts et chaussées
- Les collections du LCPC, Techniques et méthodes des laboratoires des ponts et chaussées, Guide technique
- Les collections du LCPC, Techniques et méthodes des laboratoires des ponts et chaussées, Méthode d'essai



Institut Français des Sciences et Techniques des Réseaux,
de l'Aménagement et des Transports
14-20 Boulevard Newton, Cité Descartes, Champs sur Marne
F-77447 Marne la Vallée Cedex 2

Contact : diffusion-publications@ifsttar.fr

www.ifsttar.fr



Modélisation mathématique et numérique des transferts d'humidité en milieu poreux

Pierre NICOLAS

3^e trimestre 1992



**Laboratoire Central des Ponts et Chaussées
58, bd Lefebvre, F 75732 Paris Cedex 15**

**Collection « Études et recherches des Laboratoires des Ponts et Chaussées »,
série Sciences de l'ingénieur, ISSN 1167-4865.
Fait suite à la collection « Rapports des laboratoires »,
série Physique et chimie, ISSN 0755-2351.**

Pierre NICOLAS
Docteur de l'université Paris VI
Ingénieur TPE
Service Mathématiques

*Ce rapport est issu de la thèse de doctorat de l'université Paris VI,
spécialité Analyse numérique,
soutenue le 3 avril 1992 par M. Pierre NICOLAS.*

Diffusion :
Laboratoire Central des Ponts et Chaussées
IST - section Publications
58, bd Lefebvre, F 75732 Paris Cedex 15
☎ 33 (1) 40435226 - Télécopie : 33 (1) 40435498

Prix : 80 F

REMERCIEMENTS

Je tiens à exprimer ma reconnaissance aux personnalités qui ont bien voulu constituer le jury pour examiner les travaux qui font l'objet de ce mémoire.

J'adresse mes vifs remerciements à M. Yann BRENIER pour l'honneur qu'il me fait en assurant sa présidence.

L'intérêt que MM. Guy CHAVENT et Giuseppe GEYMONAT ont bien voulu porter à cette thèse en acceptant de l'examiner m'honore. Je les en remercie très vivement.

Je remercie MM. Karl Heinz HOFFMANN et Quoc Son NGUYEN d'avoir accepté de juger ce travail.

Je sais gré à M. Olivier COUSSY pour l'intérêt qu'il a témoigné à cette thèse et pour la volonté permanente de coopération dont il a fait preuve. Je lui en suis très reconnaissant.

Ce travail a été mené au sein du Laboratoire Central des Ponts et Chaussées. Je remercie M. Jean-François COSTE de m'avoir offert un cadre propice à son bon développement.

J'ai trouvé au Service de Mathématiques une équipe dynamique et compétente sur des sujets très variés. Mes remerciements vont tout d'abord à M. Michel FREMOND qui m'a fait bénéficier de l'étendue de ses connaissances en mécanique. Mme Monique LEVY m'a apporté une aide fructueuse dans la programmation des sorties graphiques. Je l'en remercie vivement. Enfin, M. Gilles FRANCFORT s'est toujours montré attentif à mes activités. Je lui suis très reconnaissant pour son soutien moral.

Merci également à tous mes collègues du Service Informatique qui ont contribué au bon déroulement de la partie informatique.

Je remercie vivement M. Paul ACKER pour sa grande disponibilité et ses précieux conseils sur les phénomènes physico-chimiques qui interviennent lors du séchage des bétons.

Je voudrais aussi exprimer ma gratitude aux responsables du P.I.R.S.E.M. - C.N.R.S. notamment à M. Pierre RIVET qui m'a témoigné sa confiance dans le cadre de l'action "Thermique du Bâtiment" et qui m'a permis ainsi de multiplier d'utiles contacts scientifiques.

J'adresse mes remerciements chaleureux au C.S.T.B. de Grenoble qui m'a soutenu par son amitié et sa collaboration.

Je tiens particulièrement à remercier M. Dominique BLANCHARD. Sa solide amitié, ses nombreuses suggestions et son étroite collaboration ont été, pour moi, un guide des plus précieux.

J'adresse mes plus vifs remerciements à M. Patrick LE TALLEC. La clarté de son enseignement, la précision de ses conseils, la constance de ses encouragements, l'exemple de rigueur scientifique qu'il m'a donné ainsi que sa profonde amitié m'ont aidé tout au long de la réalisation de cette thèse.

La dactylographie de ce mémoire est l'oeuvre de Mme Christiane DEMARS que je remercie sincèrement pour le soin et le dévouement qu'elle y a apportés.

Enfin, que toutes les personnes qui ont participé, de près ou de loin, à la réalisation de ce travail, trouvent ici les remerciements qui leur sont dûs.

RESUME

L'objet de cette étude est de décrire les transferts d'humidité dans les milieux poreux en incluant les couplages thermiques et les changements de phase liquide-vapeur. On se place dans le cadre de la thermo-mécanique des milieux continus. Dans la modélisation, deux méthodes sont proposées pour prendre en compte des liaisons convexes sur les variables internes. L'originalité du modèle provient de la modification de l'énergie libre de l'eau qui traduit l'interaction du squelette sur l'eau. La pression de la phase gazeuse n'est pas supposée constante. Les lois phénoménologiques de Fourier, Darcy et Fick apparaissent comme des lois de comportement déduites du second principe. La loi de Kelvin et l'expression de la pression capillaire ne sont plus classiques. Une dissipation sur le taux de changement de phase permet d'obtenir des boucles d'hystérésis dynamiques. Du point de vue numérique, les inconnues de calcul sont la température et les masses volumiques apparentes d'air, de vapeur d'eau et d'eau liquide. Une approche mixte volumes finis et éléments finis est introduite de manière à privilégier le caractère conservatif et la stabilité de l'approximation. Plusieurs schémas de discrétisation en temps sont comparés ; le schéma totalement implicite associé à une résolution du système non linéaire par un algorithme de Newton s'est avéré le plus compétitif. Des simulations numériques sont présentées pour deux milieux poreux : le mortier et le sable.

SUMMARY

A description of humidity transfer through a porous medium is considered which includes thermal effects and change of phase liquid/vapour. In the proposed model derived within the framework of Continuum Mechanics, the convex constraints on the internal variables are imposed by two different techniques. The premise of the approach consists in modifying the free energy of the water to take into account the interaction between the water and the skeleton. The gas pressure is not assumed to be constant. The Fourier, Darcy and Fick's phenomenological laws are obtained as constitutive laws derived from Clausius-Duhem inequality. The expressions for Kelvin's law as well as for the capillary pressure are not classical. The dissipative character of the change of phase allows the description of dynamic hysteretic loops. From a numerical standpoint, the unknowns are the temperature and the apparent densities of air, water vapour and liquid water. Finite volumes and finite elements are used together which ensures that the approximation is stable and conservative. Several discretization schemes in time are compared ; a totally implicit scheme combined with a Newton algorithm for the solution of the non linear system appears to be the best choice. Different numerical simulations involving mortar and sand as porous media are presented.

ZUSAMMENFASSUNG

Aufgabe dieser Untersuchung ist es, den Feuchtigkeitstransfer in porösem Milieu zu beschreiben, unter Einschluß der thermischen Koppelungen und der Phasenänderungen Flüssigkeit-Dampf. Ausgegangen wird vom Rahmen der Thermomechanik kontinuierlicher Medien. In der Modellisierung werden zwei Methoden vorgeschlagen, um die konvexen Verbindungen über interne Variablen zu berücksichtigen. Die Originalität des Modells liegt in der Modifizierung der freien Energie des Wassers, welches die Wechselwirkung des Skeletts auf das Wasser wiedergibt. Der Druck des gasförmigen Zustandes wird nicht als konstant angenommen. Die phänomenologischen Gesetze von Fourier, Darcy und Fick erscheinen als Verhaltensgesetze, die von Fourier, Darcy und Fick erscheinen als Verhaltensgesetze, die vom zweiten Prinzip abgeleitet sind. Das kelvinsche Gesetz und der Ausdruck des Kapillardruckes sind nicht mehr klassisch. Eine Streuung des Phasenänderungsanteils gestattet es, dynamische Hystereseschleifen zu erhalten. Vom numerischen Gesichtspunkt aus sind die Unbekannten der Rechnung die Temperatur und Schüttdichten der Luft, des Wasserdampfs und des flüssigen Wassers. Eine gemischte Behandlung finiter Volumen und finiter Elemente wird eingeführt, um den bewahrenden Charakter und die Stabilität der Annäherung zu bevorzugen. Mehrere Schemas für die zeitliche Diskretisierung werden verglichen. Das vollkommen implizite Schema in Verbindung mit einer Auflösung des nicht linearen Systems durch einen Algorithmus nach Newton hat sich als besonders günstig erwiesen. Für zwei poröse Milieus, Mörtel und Sand, werden numerische Simulationen vorgestellt.

SOMMAIRE

LISTE DES PRINCIPAUX SYMBOLES	11
LISTE DES FIGURES	15
INTRODUCTION	19

PREMIERE PARTIE MODELISATION

Chapitre 1 : Position du problème physique

1.1. Introduction	24
1.2. La loi de Fourier	26
1.3. La loi de Darcy	26
1.4. La loi de Fick	27
1.5. La loi de Kelvin	28
1.6. Isothermes de sorption-désorption	30

Chapitre 2 : Modélisation mathématique

2.1. Introduction	34
2.2. Un exemple	34
2.2.1. Energie libre irrégulière	36
2.2.2. Energie libre régulière	38
2.3. Définition du milieu poreux	41
2.4. Hypothèses du modèle	42
2.5. Lois de conservation	42
2.6. Obtention des lois de comportement	43
2.6.1. Energies libres spécifiques	44
2.6.2. Choix des variables	45
2.6.3. Dissipation intrinsèque	45
2.6.4. Choix du potentiel de dissipation	49
2.6.5. Lois de comportement	52
2.7. Interprétation du modèle obtenu	54
2.7.1. Gaz parfaits	54
2.7.2. Energie libre de la vapeur d'eau	55
2.7.3. Pression capillaire - Loi de Kelvin	57

2.7.4. Lois de Darcy	58
2.7.5. Loi de Fick	59
2.7.6. Cas limites	59
2.7.7. Effets hystérétiques	60
2.7.8. Résumé.....	62
2.8. Identification expérimentale de la fonction d'interaction.....	63
2.8.1. Contraintes a priori.....	63
2.8.2. Comportement aux limites et forme a priori.....	63
2.8.3. Dispositif expérimental	65
2.8.4. Identification numérique	66
2.8.5. Exemple type mortier.....	69
2.8.6. Exemple type sable	74
2.9. Forme finale des lois de comportement	78

DEUXIEME PARTIE APPROCHE NUMERIQUE

Chapitre 3 : Problème aux limites

3.1. Le problème	84
3.2. Les inconnues.....	84
3.3. Equations.....	85
3.4. Données physiques	88
3.5. Conditions aux limites	89
3.6. Conditions initiales	90

Chapitre 4 : Approximation en espace

4.1. Définition du maillage.....	92
4.2. Approximation de l'équation en température	93
4.2.1. Terme de convection	93
4.2.2. Terme de diffusion	94
4.2.3. Terme d'évolution et de chaleur latente	94
4.2.4. Terme de bord.....	95
4.3. Approximation des autres équations	95
4.3.1. Equations discrétisées par volumes finis	95
4.3.2. Schéma conservatif	97
4.3.3. Analyse du schéma par volumes finis	97

Chapitre 5 : Approximation en temps par Peaceman-Rachford

5.1. Schéma de base	106
---------------------------	-----

5.2. Ordre du schéma	109
5.3. Transformation de la 2ème étape.....	111
5.4. Test numérique	111
5.4.1. Problème test	111
5.4.2. Résultats	113
5.5. Analyse simplifiée des irrégularités observées	118

Chapitre 6 : Approximation en temps implicite

6.1. Schéma implicite.....	122
6.2. Résolution du problème non linéaire de Jacobi.....	123
6.2.1. Algorithme de résolution.....	124
6.2.2. Convergence de l'algorithme	124
6.2.3. Stratégie du choix du pas de temps	125
6.2.4. Test numérique.....	126
6.3. Résolution du problème non linéaire par Newton	129
6.3.1. Tests numériques	130
6.3.2. Comparaison des méthodes Jacobi-Newton.....	132

Chapitre 7 : Simulations Numériques

7.1. Deux milieux modèles.....	136
7.1.1. Paramètres physiques du mortier	136
7.1.2. Paramètres physiques du sable.....	137
7.1.3. Les coefficients K_{av} et K_g	138
7.2. Remontée capillaire	141
7.2.1. Description du problème traité.....	141
7.2.2. Présentation et analyse des résultats numériques	144
7.3. Influence des variations de la pression totale du gaz.....	149
7.3.1. Description du problème traité.....	149
7.3.2. Présentation et analyse des résultats numériques	150
7.4. Effets hystérétiques	157
7.4.1. Description du problème traité.....	157
7.4.2. Présentation et analyse des résultats numériques	158
7.5. Effets thermiques	163
7.5.1. Description du problème traité.....	163
7.5.2. Présentation et analyse des résultats numériques	163
7.6. Séchage bidimensionnel	169
7.6.1. Description du problème traité.....	169
7.6.2. Présentation et analyse des résultats numériques	169

CONCLUSION.....	175
-----------------	-----

ANNEXES

Annexe 1 : Macroscopic thermodynamics of porous media	179
Annexe 2 : Dissipation dans les matériaux à variables internes attirées par un convexe ...	201
Annexe 3 : Calcul des dérivées du terme de transport	209
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	215

LISTE DES PRINCIPAUX SYMBOLES

Lettre latines

- $\mathcal{A}(\mathcal{C}_i)$: aire de la cellule \mathcal{C}_i [m^2]
 \mathcal{C} : ensemble convexe
 c_i : capacité calorifique du fluide i à volume constant [$J/kg.K$]
 $I_{\mathcal{C}}$: fonction indicatrice de l'ensemble \mathcal{C}
 \mathcal{C}_i : cellule relative au sommet P_i
 $\partial\mathcal{C}_i$: frontière de la cellule \mathcal{C}_i
 $\partial\mathcal{C}_{ik}^j$: frontière de la cellule \mathcal{C}_i à l'intérieur du triangle T_j entre les sommets P_i et P_k (fig. 15)
 d_1 : dissipation intrinsèque
 d_2 : dissipation thermique
 \mathbf{D} : tenseur des taux de déformation
 e_i : énergie interne spécifique du fluide i [J/kg]
 F : taux de changement de phase (193)
 F_i : second membre de l'équation relative au fluide i (225)
 g : module de l'accélération de la pesanteur [m^2/s]
 g_i : enthalpie libre spécifique du fluide i [J/kg]
 G : fonction relative à la chaleur latente L (192)
 h : pas d'espace de la triangulation [m]
 h : fonction d'interaction du milieu poreux sur l'eau
 H_1 : terme de transport
 H_2 : terme source
 HR : humidité relative
 Id : opérateur identité
 k : coefficient de dissipation sur le taux de changement de phase [$J.m^3.s/kg^2$]
 K : cône convexe
 K_o : cône polaire du cône K
 K_i : perméabilité de la phase i [$m^2/s.P_a$]
 K_{av} : coefficient de diffusion de la vapeur dans l'air [$m^2/s.P_a$]
 L : chaleur latente de vaporisation de l'eau (127) [J/kg]
 L_h : opérateur rendant les fonctions constantes par cellule
 \mathcal{L} : longueur de la frontière de la cellule \mathcal{C} [m]

M_a : masse molaire de l'air [kg/mol]
 M_v : masse molaire de l'eau [kg/mol]
 \vec{n} : normale extérieure
 P_i : sommet de la triangulation
 P_j : pression au sein du fluide j [P_a]
 P_c : pression capillaire [P_a]
 P_k : pression de "Kelvin" (142) [P_a]
 P_{vs}^o : pression de vapeur saturante de l'eau en milieu libre [P_a]
 P_{vs} : pression de vapeur saturante de l'eau en milieu poreux [P_a]
 \vec{q}_T : vecteur courant de chaleur [W/m^2]
 \vec{q}_i : flux massique de la phase i [$kg/m^2.s$]
 R : constante des gaz parfaits [$J/mol.K$]
 s_i : entropie spécifique du fluide i [$J/kg.K$]
 t : temps [s]
 T : température absolue [K]
 T_j : triangle
 T_h : triangulation de pas d'espace h
 \vec{u}_i : vitesse du fluide i [m/s]
 \vec{u}_g : vitesse moyenne molaire du gaz [m/s]

Lettres grecques

α : coefficient de la condition de Fourier-Robin
 α_c : coefficient de centrage-décentrage (216)
 β_i : teneur volumique du constituant i [m^3/m^3]
 Γ : frontière du milieu Ω
 $\vec{\gamma}_i$: accélération du fluide i [m/s^2]
 δ_{ij} : symbole de Kronecker
 Δt : pas de temps (s)
 ε : porosité [m^3/m^3]
 λ : conductivité thermique [$W/m.K$]
 ρ_i : masse volumique du constituant i [kg/m^3]
 σ : tension superficielle [N/m]
 σ_i : tenseur de Cauchy du constituant i
 φ_m : fonction de base associée au sommet P_m

ψ_i : énergie libre spécifique du constituant i [J/kg]

Φ : pseudo-potentiel de dissipation

Ω : espace occupé par le milieu continu étudié

Indices

a : air

g : gaz (air + vapeur)

l : liquide

o : polaire

s : squelette

spl : spline

v : vapeur

vs : vapeur saturante

Exposants

$dév$: déviatorique

ext : extérieur

imp : imposé

ini : initial

int : intérieur

n : relatif au temps t^n

LISTE DES FIGURES

Figure 1 : Capillarité	28
Figure 2 : Isothermes expérimentales de sorption de l'eau pour un mortier à différentes températures [19]...	31
Figure 3 : Isotherme expérimentale de sorption de l'eau pour un sable ; ω est la teneur en eau pondérale [20].	31
Figure 4 : Isotherme expérimentale de sorption-désorption avec boucle d'hystérésis pour une pâte de ciment.	32
Figure 5 : Changement de phase à une température T_o	38
Figure 6 : Vitesses vérifiant $\frac{d\beta}{dt} \in K_o(\beta)$ avec $K = \partial I_C(\hat{\beta})$	40
Figure 7 : Allure d'une boucle d'hystérésis à température fixée	62
Figure 8 : Fonction analytique h du type mortier.	71
Figure 9 : Isotherme de sorption du type mortier (courbe analytique).	72
Figure 10 : Pression capillaire P_c (139) en trait fort et pression P_k (142) en trait fin du type mortier à $T = 293K$ (courbes analytiques).	73
Figure 11 : Fonction analytique h du type sable.....	75
Figure 12 : Isotherme de sorption du type sable (courbe analytique).	76
Figure 13 : Pression capillaire P_c (139) en trait fort et pression P_k (142) en trait fin du type sable à $T = 293K$ (courbes analytiques).	77
Figure 14 : Le problème physique	84
Figure 15 : La cellule \mathcal{C}_i associée au sommet P_i interne à Ω	92
Figure 16 : La cellule \mathcal{C}_i associée au sommet P_i de la frontière de Ω .	93
Figure 17 : Evolution du pas de temps.....	116
Figure 18 : Evolution de la pression de vapeur en un point situé à 5cm du bord.	116
Figure 19 : Profils verticaux de la pression de vapeur au temps $t = 400s$	117
Figure 20 : Evolution de la teneur en eau en un point situé à 5cm du bord.	117
Figure 21 : Evolution de la pression de vapeur en un point situé à 5 cm du bord.	128
Figure 22 : Evolution du pas de temps.....	128
Figure 23 : Evolution du pas de temps (pression du gaz constante).	131

Figure 24 : Evolution du pas de temps (pression du gaz variable).	131
Figure 25 : Evolution de la pression d'air en un point situé à 5 cm du bord.	132
Figure 26 : Essai de la coupelle	139
Figure 27 : Maillage. <i>Remontée capillaire dans un mortier.</i>	143
Figure 28 : Evolution du pas de temps. <i>Remontée capillaire dans un mortier.</i>	143
Figure 29 : Profil vertical de la pression d'eau liquide au temps $t = 3h$. <i>Remontée capillaire dans un mortier.</i>	145
Figure 30 : Vitesses d'eau liquide au temps $t = 3h$. <i>Remontée capillaire dans un mortier.</i>	145
Figure 31 : Evolution de la teneur en eau à 3cm de la base de l'éprouvette. <i>Remontée capillaire dans un mortier.</i>	146
Figure 32 : Evolution de la pression de vapeur à 3cm de la base de l'éprouvette. <i>Remontée capillaire dans un mortier.</i>	146
Figure 33 : Evolution de la pression du gaz à 3cm de la base de l'éprouvette. <i>Remontée capillaire dans un mortier.</i>	147
Figure 34 : Vitesses d'air au temps $t = 3h$. <i>Remontée capillaire dans un mortier.</i>	147
Figure 35 : Profil vertical de la pression d'air au temps $t = 3h$. <i>Remontée capillaire dans un mortier.</i>	148
Figure 36 : Evolution de la pression du gaz à 3cm de la base de l'éprouvette. <i>Remontée capillaire dans un sable.</i>	148
Figure 37 : Maillage. <i>Effets de la pression du gaz.</i>	150
Figure 38 : Vitesses d'air au temps $t = 0.1s$. <i>Effets de la pression du gaz.</i>	151
Figure 39 : Profil vertical de la pression du gaz au temps $t = 0.1s$. <i>Effets de la pression du gaz.</i>	152
Figure 40 : Profil vertical de la pression du gaz au temps $t = 5s$. <i>Effets de la pression du gaz.</i>	152
Figure 41 : Evolution de la pression du gaz à 5cm de la surface du récipient. <i>Effets de la pression du gaz.</i>	153

Figure 42 : Evolution de la pression du gaz au fond du récipient. <i>Effets de la pression du gaz.</i>	153
Figure 43 : Profil vertical de la teneur en eau liquide au temps $t = 0.1s$. <i>Effets de la pression du gaz.</i>	154
Figure 44 : Profil vertical de la teneur en eau liquide au temps $t = 5s$. <i>Effets de la pression du gaz.</i>	154
Figure 45 : Evolution de la teneur en eau liquide à 5cm de la surface du récipient. <i>Effets de la pression du gaz.</i>	155
Figure 46 : Evolution de la teneur en eau liquide à 5cm de la surface du récipient si P_g est constant. <i>Effets de la pression du gaz.</i>	155
Figure 47: Evolution de la teneur en eau liquide au fond du récipient. <i>Effets de la pression du gaz.</i>	156
Figure 48 : Evolution de la teneur en eau liquide au fond du récipient si P_g est constant. <i>Effets de la pression du gaz.</i>	156
Figure 49 : Evolution de la teneur en eau liquide à 5cm du bord de la paroi. <i>Effets hystérétiques.</i>	159
Figure 50 : Evolution de la teneur en eau liquide à 10cm du bord de la paroi. <i>Effets hystérétiques.</i>	159
Figure 51 : Evolution de l'humidité relative à 5cm du bord de la paroi. <i>Effets hystérétiques.</i>	160
Figure 52 : Evolution de l'humidité relative à 10cm du bord de la paroi. <i>Effets hystérétiques.</i>	160
Figure 53 : Evolution de l'humidité relative en fonction de la teneur en eau à 5cm du bord de la paroi. Isotherme de sorption à l'équilibre (en pointillés). <i>Effets hystérétiques.</i>	161
Figure 54 : Evolution de l'humidité relative en fonction de la teneur en eau à 10cm du bord de la paroi. Isotherme de sorption à l'équilibre (en pointillés). <i>Effets hystérétiques.</i>	161
Figure 55 : Profil vertical d'humidité relative au temps $t = 25$ jours. <i>Effets hystérétiques.</i>	162
Figure 56 : Profil vertical d'humidité relative au temps $t = 60$ jours. <i>Effets hystérétiques.</i>	162

Figure 57 : Profil vertical de la température au temps $t = 60s$, le changement de phase étant pris en compte. <i>Effets thermiques</i>	165
Figure 58 : Profil vertical de la température au temps $t = 60s$, le changement de phase étant négligé. <i>Effets thermiques</i>	165
Figure 59 : Profil vertical de la température au temps $t = 1$ jour, le changement de phase étant pris en compte. <i>Effets thermiques</i>	166
Figure 60 : Profil vertical de la température au temps $t = 1$ jour, le changement de phase étant négligé. <i>Effets thermiques</i>	166
Figure 61 : Profil vertical de la température au temps $t = 60$ jours, le changement de phase étant pris en compte. <i>Effets thermiques</i>	167
Figure 62 : Profil vertical de la teneur en eau liquide au temps $t = 3$ jours, <i>Effets thermiques</i>	167
Figure 63 : Profil vertical de la pression de vapeur au temps $t = 3$ jours, le changement de phase étant pris en compte. <i>Effets thermiques</i>	168
Figure 64 : Profil vertical de la pression de vapeur au temps $t = 3$ jours, le changement de phase étant négligé. <i>Effets thermiques</i>	168
Figure 65 : Champ de la teneur en eau liquide au temps $t = 10j$. <i>Séchage bidimensionnel</i>	170
Figure 66 : Champ de la teneur en eau liquide au temps $t = 60j$. <i>Séchage bidimensionnel</i>	171
Figure 67 : Champ d'humidité relative au temps $t = 10j$. <i>Séchage bidimensionnel</i>	172
Figure 68 : Champ d'humidité relative au temps $t = 60j$. <i>Séchage bidimensionnel</i>	173
Figure 69 : Profils verticaux de la teneur en eau à différents temps, situés à 15 cm du côté imperméable. <i>Séchage bidimensionnel</i>	174

INTRODUCTION

Cette thèse a pour objet l'étude des transferts d'humidité dans les milieux poreux.

Notre travail a consisté, dans un premier temps, à modéliser ces phénomènes de transport en incluant les couplages dûs à l'évolution du champ de température et au changement de phase liquide-vapeur de l'eau.

Un premier problème mathématique apparaît pour prendre en compte des liaisons convexes sur les variables internes, par exemple les proportions volumiques bornées des constituants. Nous proposons deux méthodes. Soit, nous modifions les énergies libres par un terme non régulier. Des difficultés concernant le calcul de la dérivée par rapport au temps de ce terme ont conduit à se limiter à des dérivées à gauche dans l'expression de la dissipation. Soit nous assurons les liaisons convexes via l'introduction d'un potentiel de dissipation. Le calcul de la dissipation est alors classique et les lois de comportement ainsi obtenues sont formulées de façon plus précise. Cette prise en compte des liaisons convexes nous renseigne sur les comportements dans les cas extrêmes : si le milieu est totalement sec, la pression de vapeur d'eau admet une limite supérieure ; dans le cas contraire, la pression d'eau est minorée. C'est la méthode adoptée pour introduire notre modèle.

D'un point de vue physique, nous avons alors supposé le squelette du milieu poreux indéformable et immobile, la masse volumique de l'eau constante, les gaz air et vapeur d'eau comme des gaz parfaits, la température identique pour tous les constituants. Enfin, aucune réaction chimique n'est prise en compte.

D'un point de vue mathématique, nous nous sommes placés au niveau macroscopique dans le cadre général de la mécanique et de la thermodynamique des milieux continus et plus particulièrement, dans celui des matériaux standard généralisés. A partir de la donnée des énergies libres de chaque constituant et des potentiels de dissipation (intrinsèque et thermique) on déduit toutes les lois de comportement. Nous avons aussi retrouvé les lois phénoménologiques, lois de Darcy, de Fick et de Fourier, énoncées au chapitre 1.

Les effets hygroscopiques ont été introduits dans le modèle en modifiant l'énergie libre de l'eau. Cette modification est accessible par l'expérience : les isothermes de sorption.

Nous retrouvons l'égalité des enthalpies libres de l'eau liquide et de sa vapeur en équilibre.

Nous analysons les effets hystérétiques par l'introduction d'une dissipation sur le taux de changement de phase.

Dans un deuxième temps, nous nous sommes consacrés à la modélisation numérique des équations aux dérivées partielles de notre modèle. Nos inconnues de calcul sont la température et les masses volumiques apparentes de l'air, de la vapeur d'eau et de l'eau liquide. Le problème consiste à trouver l'évolution de ces variables pour un milieu poreux dont on connaît la géométrie, l'état initial et l'environnement thermodynamique (chapitre 3).

La discrétisation en espace de ces équations est mixte : les termes de diffusion et de convection thermique (chapitre 4) sont discrétisés par éléments finis, tandis que tous les autres termes le sont par volumes finis. Cette approche utilise donc en parallèle deux maillages duaux l'un de l'autre. Ce choix a été motivé par le souci d'une grande précision pour le calcul des flux de masse, indispensable à l'étude approfondie des transferts d'humidité. Pour assurer une meilleure stabilité à ce schéma conservatif, nous avons introduit un décentrage paramétré au niveau du terme de transport.

Nous avons utilisé plusieurs schémas de discrétisation en temps.

Pour séparer le traitement des deux non linéarités apparaissant dans les termes sources et les termes de transport, nous avons choisi le schéma de directions alternées de Peaceman-Rachford (chapitre 5). Nous avons montré que ce schéma est d'ordre 2 en temps et vérifié qu'il est stable numériquement. Mais il reste peu précis. Une erreur significative sur les pressions apparaît sur les premiers pas de temps et à chaque changement de pas de temps.

Ceci nous a conduit à considérer un schéma totalement implicite en temps (chapitre 6). Par souci de simplicité, nous avons d'abord résolu les équations de transferts d'humidité par une méthode de Jacobi non linéaire. La convergence de ce schéma est linéaire par rapport au pas de temps. Cependant, les calculs numériques nécessitent des pas de temps très petits. Au vu des temps de calcul prohibitifs, nous avons ensuite opté pour la méthode de Newton qui palie cet inconvénient.

La méthode numérique finalement choisie se résume donc par :

- * une discrétisation en espace par volumes finis non structurés définis sur la grille duale d'un maillage Eléments Finis,
- * un calcul éventuellement décentré des termes de transport,
- * un schéma implicite en temps,
- * le découplage de l'équation en température,
- * la résolution des trois autres équations par un algorithme de Newton.

Cette dernière méthode a été utilisée pour effectuer des simulations numériques présentées au chapitre 7.

PREMIERE PARTIE

MODELISATION

Chapitre 1 :

POSITION DU PROBLEME PHYSIQUE

1.1. Introduction

Les matériaux de construction sont pour la plupart des milieux poreux. En tant que tels, ils ont tendance à capter, plus ou moins, l'humidité de l'air ambiant. Les changements de la quantité d'eau contenue dans ces matériaux (soit dus aux variations climatiques, soit à leur fabrication, soit à leur mise en oeuvre...) affectent de manière très importante leurs propriétés physico-chimiques et par conséquent leurs propriétés thermo-mécaniques. Ainsi apparaissent certains phénomènes tels que la fissuration, le retrait, le gonflement, le fluage de dessiccation qui mettent en cause la durabilité des matériaux de construction. Ceci explique pourquoi l'étude des transferts d'humidité à travers les milieux poreux est un thème de recherche important aussi bien dans le domaine du génie civil que dans le domaine du bâtiment.

Mais comment la structure poreuse transmet-elle un caractère hygroscopique à ces matériaux ? Deux phénomènes entrent en jeu : l'adsorption de surface et la capillarité. D'une part les forces d'attraction (forces de Van Der Waals) exercées par le squelette -la phase solide- sur les molécules d'eau provoquent la condensation d'une ou de quelques couches moléculaires d'eau. D'autre part, l'interface entre les phases liquide et gazeuse est soumise à une tension superficielle qui se traduit par la formation de ménisques et par une discontinuité de pression au sein de ces deux phases, appelée pression capillaire. Ces phénomènes de condensation dépendent bien sûr de l'humidité relative de l'air dans lequel les matériaux poreux évoluent. L'expérience la plus caractéristique consiste à mesurer la prise (ou la perte) de poids d'un échantillon de milieu poreux suivant l'humidité relative ambiante. Si cette expérience est effectuée à température constante et en prenant soin d'attendre la mise en équilibre de l'échantillon avec la vapeur d'eau environnante, nous obtenons une "isotherme de sorption", i.e. une relation entre la teneur en eau de l'échantillon et l'humidité relative de l'air. Il faut remarquer que, pour une température fixée, suivant l'évolution de l'humidité relative (valeurs croissantes - sorption ou bien valeurs décroissantes - désorption) les isothermes obtenues ne coïncident pas : la sorption-désorption de milieu poreux présente un effet hystérétique.

Avant de s'attaquer au problème de durabilité des milieux poreux vis-à-vis de l'humidité, il faut essayer de modéliser les transferts d'humidité pour prévoir la répartition et l'évolution des teneurs en eau à l'intérieur des matériaux considérés. Plusieurs approches ont été développées ces dernières années ; le but ici n'étant pas de dresser une liste exhaustive des travaux sur ce sujet mais seulement d'énumérer brièvement les différents axes de recherche actuels.

La méthode d'homogénéisation consiste à regarder le milieu poreux comme un assemblage périodique de cellules. Son but est de trouver des

lois macroscopiques (à l'échelle d'un nombre important de cellules) à partir de lois microscopiques (par exemple les équations de Stokes) appliquées au niveau de chaque cellule. C'est ainsi que l'on a pu retrouver la loi de Darcy en milieu saturé ([44], [49]) et en écoulement biphasique [2]. La loi de Darcy exprime la proportionnalité du débit massique de fluide par rapport au gradient de la pression au sein de ce fluide. Même si l'homogénéisation n'a été appliquée qu'à des cas simples d'écoulements à travers les milieux poreux (une très grande complexité mathématique est rapidement atteinte au niveau des cellules) elle a déjà apporté une certaine lumière dans le passage microscopique-macroscopique.

Une démarche analogue à la théorie de l'homogénéisation est la prise de moyenne spatiale. Elle est utilisée pour déduire la forme correcte des équations aux dérivées partielles régissant les phénomènes de transport multiphasiques et pour déterminer les coefficients effectifs qui apparaissent dans les équations lissées. Une justification théorique de la loi de Darcy a pu être ainsi menée [47]. Les résultats des milieux homogènes ont été étendus aux milieux hétérogènes grâce à la prise de moyenne à grande échelle [42].

L'approche la plus récente est aussi une approche microscopique. Elle fait appel à la notion de percolation [28]. Le milieu poreux est représenté par un réseau plus ou moins complexe de capillaires cylindriques de différents diamètres en relation avec les diamètres des pores du milieu considéré. L'humidité relative régnant au voisinage d'un capillaire détermine son état de condensation tant dans le domaine de l'adsorption que dans le domaine capillaire (loi de Laplace-Kelvin). A partir de lois d'écoulements plus ou moins élaborées, de l'eau liquide et de sa vapeur, les modèles type percolation fournissent des explications physiques des phénomènes de sorption-désorption et notamment de l'hystérésis qu'ils engendrent : apparition d'amas d'eau piégés ([17], [41]). Les paramètres de transferts macroscopiques peuvent aussi être modélisés ([11], [26]). Cet accès aux paramètres macroscopiques est d'autant plus important qu'il est très difficile de les obtenir expérimentalement. Malgré tout l'approche de type réseau est plutôt qualitative et explicative car une section de milieux poreux (par exemple la pâte de ciment) vue au microscope électronique ne s'assimile guère à des capillaires cylindriques connectés les uns aux autres.

La dernière approche, celle que nous retiendrons dans cette étude, se place à l'échelle macroscopique. Elle suppose que le milieu poreux peut être considéré comme un milieu continu : les différentes phases (solide-liquide-gaz) occupant tout l'espace géométrique se superposent et sont caractérisées par des champs continus de variables physiques qui représentent une quantité moyenne sur un "volume élémentaire représentatif". Les premières modélisations de cette catégorie régissaient les mouvements d'humidité à

partir des lois de conservation de la masse d'eau et de l'énergie et de lois phénoménologiques : loi de Darcy pour l'écoulement liquide, loi de Fick pour la diffusion de la vapeur d'eau et la loi de Fourier pour la diffusion de la chaleur [39]. Ensuite la thermodynamique des milieux continus [27] a permis de tenir compte du changement de phase liquide-vapeur [4]. Les lois phénoménologiques ont été complétées par des termes de couplages notamment des effets thermiques ([14], [38]). Par des arguments dissipatifs, cette théorie a permis d'obtenir, pour un milieu saturé, les lois de Darcy et de Fourier [13], et pour un milieu non saturé par une phase liquide, solution idéale d'une espèce chimique, les lois de Darcy et Fick [5]. Dans ce dernier cas, la loi de Fick correspond à la diffusion d'une espèce chimique dans la phase liquide et aucun changement de phase n'était pris en compte. La loi de Fick s'applique à la diffusion de la vapeur d'eau dans la phase gazeuse qui n'est pas supposée être à pression constante. En tenant compte du changement de phase liquide-vapeur, nous obtenons la loi de Kelvin qui est l'égalité des enthalpies libres de l'eau et de sa vapeur lorsqu'elles sont en équilibre.

Dans le chapitre 1, nous rappelons les lois phénoménologiques mentionnées ci-dessus, la loi de Kelvin et les différents types d'isothermes de sorption-désorption. Ces lois seront retrouvées au chapitre 2 à partir d'un modèle général de thermodynamique des milieux continus dissipatifs.

1.2. La loi de Fourier

La loi de Fourier détermine le vecteur courant de chaleur \vec{q}_T en fonction du gradient de la température T :

$$\vec{q}_T = -\lambda \nabla T. \quad (1)$$

Cette loi est une loi de conduction de la chaleur isotrope et linéaire. La conductivité thermique λ est un scalaire positif ou nul qui peut dépendre des variables du système considéré. Dans la plupart des cas λ est une fonction de la teneur en eau et de la température. Si l'on considère un volume \mathcal{V} de milieu poreux, le taux de chaleur reçue par conduction est $-\int_{\partial\mathcal{V}} \vec{q}_T \cdot \vec{n} ds$ où $\partial\mathcal{V}$ est la surface limitant \mathcal{V} et \vec{n} la normale extérieure à \mathcal{V} .

1.3. La loi de Darcy

La loi de Darcy s'applique à chacune des phases fluides :

$$\text{a) phase liquide } \vec{q}_l = -\rho_l K_l \nabla(P_l + \rho_l g z) \quad (2)$$

$$\text{b) phase gazeuse } \vec{q}_g = -\rho_g K_g \nabla P_g \quad (3)$$

où \vec{q}_i est le flux massique de la phase i , ρ_i sa masse volumique, P_i sa pression, K_i sa perméabilité, g le module de l'accélération de la pesanteur et z la cote

verticale orientée vers le haut. L'effet de la pesanteur est négligé pour décrire les mouvements de la phase gazeuse.

Dans les milieux poreux, ces lois sont en fait des lois de Darcy généralisées car les perméabilités, scalaires positifs ou nuls, dépendent de la teneur en eau.

1.4. La loi de Fick

La théorie de la cinétique des gaz est à l'origine de la loi de Fick [45]. Pour un mélange de deux espèces, elle indique la proportionnalité entre le flux massique d'une d'entre elles par rapport à la vitesse moyenne du mélange et le gradient de concentration de cette espèce. Dans le cas de la diffusion de la vapeur d'eau dans l'air et en supposant qu'ils se comportent comme des gaz parfaits, la loi de Fick s'écrit :

$$\rho_v(\vec{u}_v - \vec{u}_g) = -\frac{D}{P_g} \rho_g \nabla \frac{P_v}{P_g} \quad (4)$$

avec

$$P_g = P_a + P_v, \quad (5)$$

$$P_a = \frac{\rho_a RT}{M_a}, P_v = \frac{\rho_v RT}{M_v}, P_g = \frac{\rho_g RT}{M_g}, \quad (6)$$

$$\vec{u}_g = \frac{P_a}{P_g} \vec{u}_a + \frac{P_v}{P_g} \vec{u}_v. \quad (7)$$

Les indices a, v, g correspondent respectivement à l'air, à la vapeur d'eau et à la phase gazeuse formée des deux espèces précédentes. La concentration molaire de la vapeur est donnée par le rapport des pressions P_v/P_g . La vitesse \vec{u}_g est la vitesse moyenne molaire du gaz. Le coefficient de diffusion D dépend essentiellement de la température T . R est la constante des gaz parfaits et M_i la masse molaire du gaz i . La loi de Fick (4) donnée en fonction des vitesses d'air et de vapeur est

$$\vec{u}_v - \vec{u}_a = -D \frac{P_g}{P_a P_v} \nabla \frac{P_v}{P_g} = D \frac{P_g}{P_a P_v} \nabla \frac{P_a}{P_g}. \quad (8)$$

Cette loi est symétrique en air et vapeur.

Lorsque le mélange gazeux se trouve à l'intérieur d'un milieu poreux, le flux massique donné par l'équation (4) est multiplié par la teneur en gaz β_g , rapport du volume de gaz sur le volume total du milieu poreux.

La loi de Fick se généralise dans les milieux poreux par :

$$\beta_g(\vec{u}_v - \vec{u}_a) = -K_{av} \frac{P_g^3}{P_a P_v} \nabla \frac{P_v}{P_g}. \quad (9)$$

Le coefficient de diffusion K_{av} (scalaire positif ou nul) a été introduit de telle sorte qu'il ait la dimension des perméabilités K_l, K_g . Il dépend de la teneur en eau, de la température et des pressions des gaz.

Remarque : Dans la plupart des modèles continus la pression de la phase gazeuse est supposée constante (et égale à 1 atm). En appliquant la loi de Darcy (3), nous obtenons une vitesse de la phase gazeuse nulle :

$$\vec{u}_g = \vec{0}$$

et donc la loi de Fick (9) devient

$$\beta_g \rho_v \vec{u}_v = -K_{av} \rho_g \nabla P_v. \quad (10)$$

Même si cette loi s'apparente à une loi de Darcy, elle n'en a pas du tout la même origine.

1.5. La loi de Kelvin

Appliquons la loi de Kelvin au cas simple d'un capillaire cylindrique dont la base est en contact avec de l'eau liquide "libre" (fig. 1). A l'équilibre l'eau s'est élevée dans le capillaire et un ménisque sépare les phases liquide et gazeuse. La pression du gaz P_g est supposée uniforme ainsi que la température T .

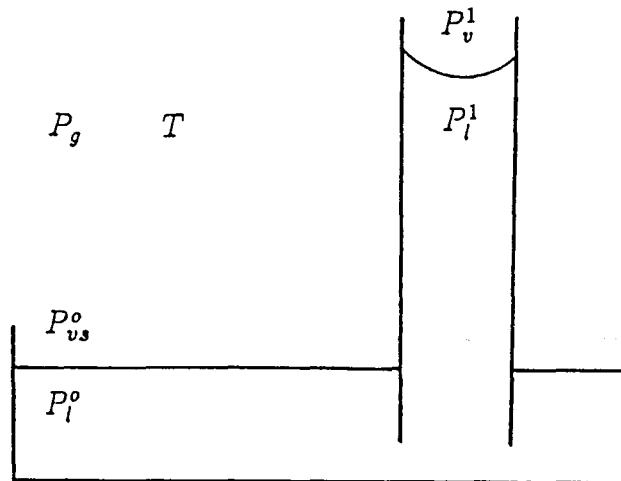


Figure 1 : Capillarité

L'eau liquide et sa vapeur sont en équilibre

- à l'extérieur du capillaire (exposant 0) : l'eau liquide est libre ; sa pression P_l est égale à celle du gaz P_g ; l'interface liquide-vapeur est plane ; la pression de vapeur qui règne est la pression de vapeur en "milieu libre" P_{vs}^o ;

- à l'intérieur du capillaire (exposant 1) : le ménisque sépare l'eau liquide à la pression P_l^1 et la vapeur d'eau à la pression P_v^1 .

La loi de Kelvin exprime l'égalité des enthalpies libres g_l de l'eau liquide et g_v de sa vapeur lorsqu'elles sont en équilibre. Suivant que l'on se place à l'intérieur ou à l'extérieur du capillaire, nous obtenons :

$$g_l^1 = g_v^1, \quad (11)$$

$$g_l^o = g_v^o. \quad (12)$$

En supposant l'eau incompressible et les gaz parfaits, les enthalpies libres peuvent se mettre sous la forme

$$g_l = f_l(T) + \frac{P_l}{\rho_l}, \quad (13)$$

$$g_v = f_v(T) + \frac{RT}{M_v} \text{Log} P_v, \quad (14)$$

avec f_l et f_v deux fonctions de la température T et Log la fonction logarithmique népérien.

A température T donnée, la différence des égalités des enthalpies libres (11) et (12) donne

$$\frac{P_l^1 - P_l^o}{\rho_l} = \frac{RT}{M_v} \text{Log} \frac{P_v^1}{P_{vs}^o} \quad (15)$$

ou bien encore

$$P_l^1 - P_g = \frac{\rho_l RT}{M_v} \text{Log} \frac{P_v^1}{P_{vs}^o}. \quad (16)$$

La pression capillaire P_c et l'humidité relative HR sont définies par

$$P_c = P_g - P_l^1, \quad (17)$$

$$HR = \frac{P_v^1}{P_{vs}^o}. \quad (18)$$

Finalement l'équation (16) devient

$$P_c = -\frac{\rho_l RT}{M_v} \text{Log} HR. \quad (19)$$

Elle est communément appelée loi de Kelvin. Elle relie le saut de pression à travers le ménisque à l'humidité relative régnant dans son voisinage.

1.6. Isothermes de sorption-désorption

Plaçons un échantillon de milieu poreux dans une enceinte régulière en température et en humidité relative. Si l'on fait varier l'humidité tout en maintenant la température constante, le poids de l'échantillon varie. Une augmentation de l'humidité relative correspond à une condensation de la vapeur d'eau (sorption) et à un gain de poids. Une diminution de l'humidité relative correspond à une évaporation de l'eau liquide (désorption) et à une perte de poids. Les courbes humidité relative-variation de poids par rapport à un état de référence obtenues par l'expérience décrite ci-dessus en prenant soin d'attendre la stabilisation du poids à chaque changement d'humidité sont appelées isothermes de sorption ou de désorption suivant la variation de l'humidité relative. La teneur en eau étant une fonction de la variation de poids, les isothermes sont souvent tracées dans le plan humidité relative-teneur en eau (fig. 2 et fig. 3). Les isothermes de sorption traduisent les phénomènes microscopiques de condensation tant par capillarité que par adsorption. Les isothermes de désorption ne s'identifient pas en général avec les isothermes de sorption : la sorption-désorption présente une hystérésis (fig. 4).

Ces courbes sont des données essentielles pour les modèles continus. En effet, à l'aide de la loi de Kelvin (19) et des courbes de sorption-désorption, la pression capillaire apparaît comme une fonction de la teneur en eau, variable du modèle. La pression capillaire est la source de mouvement d'humidité via la loi de Darcy.

Même s'il est très difficile expérimentalement d'obtenir ces isothermes (l'équilibre est-il atteint ? La composition chimique du milieu poreux a-t-elle évolué au cours de l'expérience ? par exemple la carbonatation pour une pâte de ciment. Le milieu poreux s'est-il fissuré ? La porosité a-t-elle changé ? ...) nous considérons les isothermes comme une caractéristique du milieu poreux étudié.

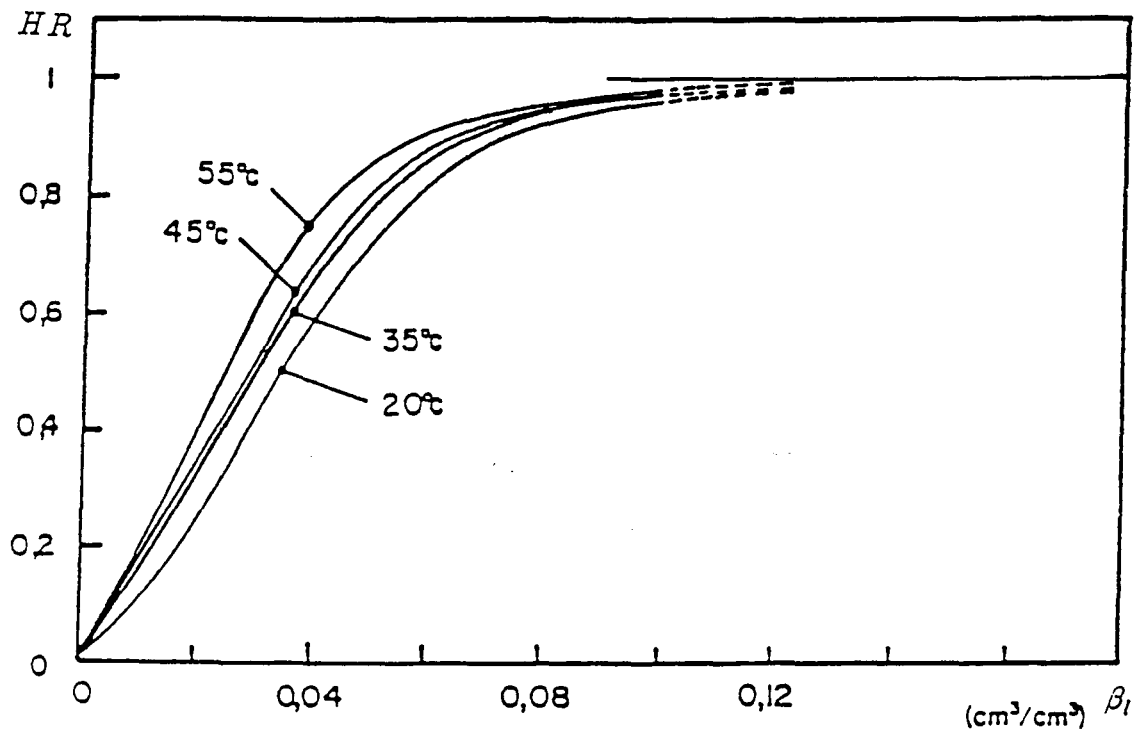


Figure 2 : Isothermes expérimentales de sorption de l'eau pour un mortier à différentes températures [16].

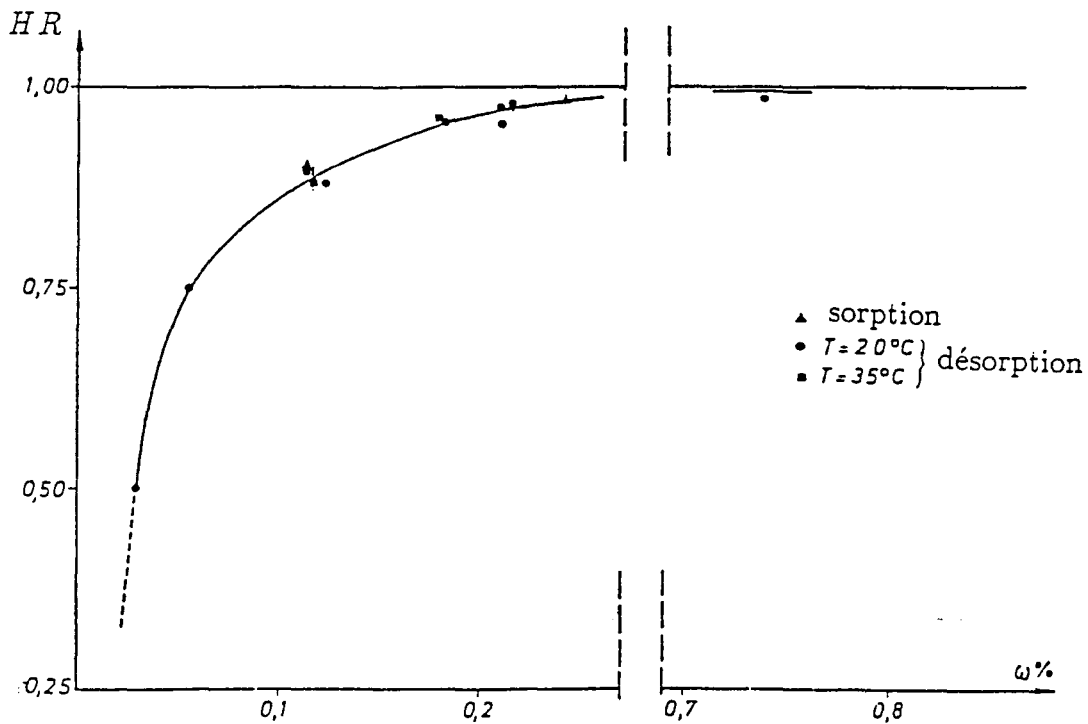


Figure 3 : Isotherme expérimentale de sorption de l'eau pour un sable ; ω est la teneur en eau pondérale [15].

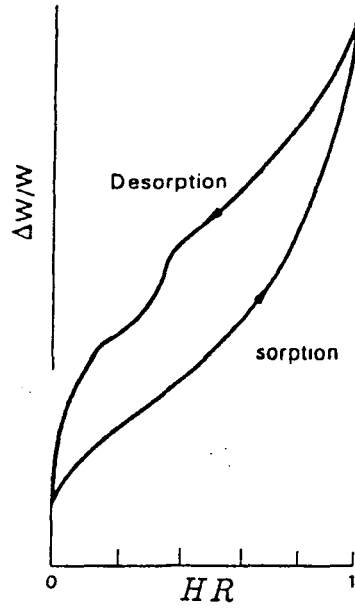


Figure 4 : Isotherme expérimentale de sorption-désorption avec boucle d'hystérésis pour une pâte de ciment.
 $\Delta w/w$ est la variation relative du poids [21].

Chapitre 2 :

MODELISATION MATHEMATIQUE

2.1. Introduction

Le modèle présenté dans ce chapitre est basé sur la mécanique et la thermodynamique des milieux continus [27]. Cette étude se place dans le cadre des matériaux standard généralisés [29]. L'état du matériau est décrit par des variables d'état indépendantes dont certaines sont soumises à des liaisons. Par exemple, les proportions volumiques des constituants sont bornées. Ces liaisons que nous supposons convexes sont en général de deux types : elles portent soit sur les variables elle-mêmes, soit sur leur vitesse ([6], [20], [22], [23], [25]). Dans le premier cas, les liaisons internes sont prises en compte en modifiant l'énergie libre classique par un terme non régulier : la fonction indicatrice de l'ensemble des liaisons. Des difficultés concernant le calcul de la dérivée par rapport au temps de ce terme irrégulier ont conduit à se limiter à des dérivées à gauche dans l'expression de la dissipation [24]. La deuxième méthode consiste à assurer les liaisons convexes via l'introduction d'un potentiel de dissipation tout en ne conservant que l'expression régulière de l'énergie libre [7]. Le calcul de la dissipation est alors classique et les lois de comportement ainsi obtenues sont formulées de façon plus précise, en particulier dans le cas de non linéarités sur les vitesses [8]. Afin d'illustrer la différence entre ces deux méthodes, nous avons jugé utile de les comparer sur un exemple simple de changement de phase.

En ce qui concerne l'obtention du modèle décrivant les transferts d'humidité dans les milieux poreux que nous avons développé, nous avons choisi d'utiliser l'approche "énergie libre régulière". Ce choix a été motivé par deux raisons. D'une part, la considération d'énergie libre régulière nous dispense de toute question relative au sens des dérivées en temps utilisées dans le calcul de la dissipation. D'autre part, l'obtention des lois de Darcy, Fick et Kelvin, vues comme des lois de comportement issues du calcul de la dissipation, nous semble très facilitée par l'absence de terme irrégulier dans l'énergie libre. Des effets hystérétiques de sorption-désorption sont analysés via l'introduction d'une dissipation sur le taux de changement de phase liquide-vapeur. Ce nouveau modèle est en fait la synthèse de trois travaux : le premier en collaboration avec M. FREMOND où nous considérons des énergies libres irrégulières [24], le second avec D. BLANCHARD et G. GEYMONAT où nous avons introduit dans un cas plus général un potentiel de dissipation qui prend en compte les contraintes sur les variables internes [7], le troisième avec D. BLANCHARD sur l'introduction des lois phénoménologiques dans ce type de modèle (article à paraître). Les références [24] et [7] constituent les annexes 1 et 2 de la thèse.

2.2. Un exemple

Pour illustrer les deux approches qui permettent de prendre en compte les contraintes sur les variables internes, considérons un milieu constitué

de deux phases notées 1 et 2 qui ne coexistent qu'à une seule température $T_o(T_o > 0)$:

$$\begin{aligned} &\text{si } T > T_o, \text{ seule la phase 1 existe,} \\ &\text{si } T < T_o, \text{ seule la phase 2 existe,} \\ &\text{si } T = T_o, \text{ l'une ou l'autre ou les deux phases peuvent exister.} \end{aligned} \quad (20)$$

On note β la proportion volumique de la phase 1 :

$$\beta = \frac{\text{volume occupé par la phase 1 dans un volume élémentaire } \mathcal{V}}{\text{volume élémentaire } \mathcal{V} \text{ du milieu}}. \quad (21)$$

Pour simplifier au maximum cet exemple, chaque phase est supposée immobile ; leur masse volumique, leur capacité calorifique et la chaleur latente de changement de phase sont prises égales à l'unité. L'état du mélange des deux phases est alors décrit par les variables indépendantes suivantes : la température absolue T et la teneur β de la phase 1. L'énergie libre ψ caractérisant le milieu est une fonction de ces deux variables d'état T et β . Dans ce cadre simple, le second principe de la thermodynamique impose que la dissipation d_1 donnée par

$$d_1 = -\frac{d\psi}{dt} + \frac{\partial\psi}{\partial T} \frac{dT}{dt} \quad (22)$$

est positive pour toute évolution réelle. Par sa définition même, la variable β est soumise à la contrainte

$$\beta \in \mathcal{C} \quad (23)$$

où \mathcal{C} est l'intervalle convexe fermé $[0, 1]$.

Pour ce type de problème, si l'on oublie de prendre en compte la liaison sur la variable interne β (23), l'énergie libre prend la forme

$$\psi(T, \beta) = -T \text{Log} T - \frac{T - T_o}{T_o} \beta. \quad (24)$$

Cette expression conduit à une énergie interne

$$e(T, \beta) = \psi - \frac{\partial\psi}{\partial T} T = T + \beta$$

qui est bien celle considérée pour les changements de phase classiques. Cette énergie libre est modifiée dans l'approche "énergie libre irrégulière".

2.2.1. Énergie libre irrégulière

Dans ce modèle, on se donne l'énergie libre sous la forme [25]

$$\psi(T, \beta) = -T \text{Log} T - \frac{T - T_o}{T_o} \beta + I_C(\beta) \quad (25)$$

où l'indicatrice I_C [35] du convexe fermé $\mathcal{C} = [0, 1]$ est la fonction

$$\begin{cases} I_C(\beta) = 0 & \text{si } \beta \in \mathcal{C} \\ I_C(\beta) = +\infty & \text{si } \beta \notin \mathcal{C}. \end{cases} \quad (26)$$

Ensuite le second principe impose

$$d_1 \geq 0 \quad (27)$$

pour toute évolution réelle du mélange. En fait l'énergie libre prend sa valeur physique lorsque la contrainte (23) est satisfaite et la valeur $+\infty$ sinon. L'indicatrice I_C et donc l'énergie ψ sont sous-différentiables en β [35]. L'énergie ψ étant une fonction régulière en température, la dissipation au temps t s'écrit

$$d_1 = \lim_{\Delta t \rightarrow 0^-} \frac{-\psi(T(t), \beta(t + \Delta t)) + \psi(T(t), \beta(t))}{\Delta t}$$

si l'on considère les dérivées à gauche en temps.

Par définition du sous-différentiel $\partial\psi(\beta(t))$ de la fonction $\beta \rightarrow \psi(T, \beta)$ à température T fixée, on a

$$\begin{aligned} \forall B \in \partial\psi(\beta(t)) \\ \psi(T(t), \beta(t + \Delta t)) - \psi(T(t), \beta(t)) \geq B \cdot (\beta(t + \Delta t) - \beta(t)). \end{aligned} \quad (28)$$

En divisant l'inégalité (28) par l'accroissement de temps négatif Δt et en faisant tendre Δt vers 0^- , on a

$$\forall B \in \partial\psi(\beta(t)), \quad d_1 \geq -B \cdot \frac{d\beta}{dt}, \quad (29)$$

où $\frac{d\beta}{dt}$ est la dérivée à gauche en temps.

Pour assurer le second principe de la thermodynamique (27), nous supposons pour toute évolution réelle $\beta(t)$

$$\exists B \in \partial\psi(\beta(t)), t.q. -B \cdot \frac{d\beta}{dt} \geq 0. \quad (30)$$

En fait on remplace la dissipation intrinsèque par une autre expression \hat{d}_1 qui la minimise

$$\hat{d}_1 = -B \cdot \frac{d\beta}{dt}. \quad (31)$$

Toujours pour des raisons de simplicité, nous traitons le cas du changement de phase non dissipatif :

$$\hat{d}_1 = 0 \quad (32)$$

pour toutes évolutions réelles. La loi de comportement s'écrit alors

$$B = 0 \in \partial\psi(\beta). \quad (33)$$

Elle devient, de par l'expression de l'énergie libre ψ (25),

$$\frac{T - T_o}{T_o} \in \partial I_C(\beta). \quad (34)$$

Le sous-différentiel ∂I_C de l'indicatrice I_C (25) est donné par

$$\left\{ \begin{array}{ll} \partial I_C(\beta) = \emptyset & \text{si } \beta \notin [0, 1] \\ \partial I_C(\beta) = 0 & \text{si } \beta \in]0, 1[\\ \partial I_C(0) = \mathbb{R}^- & \\ \partial I_C(1) = \mathbb{R}^+ & \end{array} \right.$$

De la loi de comportement (34) nous déduisons la loi recherchée (20) (voir fig. 5) :

$$\begin{array}{ll} \text{(i) } \partial I_C(\beta) \neq \emptyset \Rightarrow \beta \in [0, 1] & \\ \text{(ii) } T > T_o \text{ arbitraire si } \beta = 1 & \\ \text{(iii) } T < T_o \text{ arbitraire si } \beta = 0 & \\ \text{(iv) } T = T_o \text{ si } \beta \in]0, 1[. & \end{array} \quad (35)$$

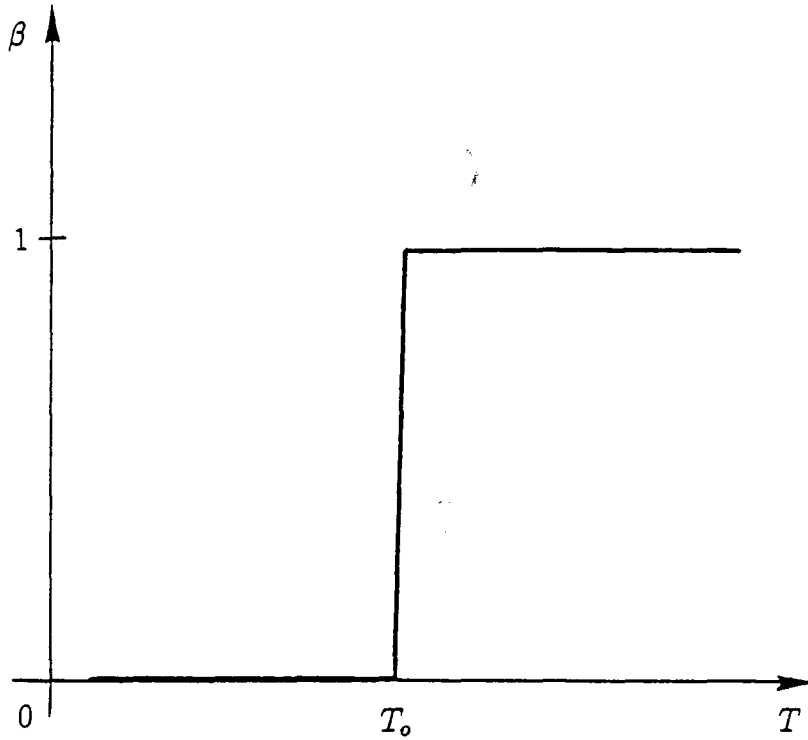


Figure 5 : Changement de phase à une température T_0

2.2.2. Energie libre régulière

L'énergie libre est ici la partie régulière ou physique (24)

$$\psi(T, \beta) = -T \text{Log} T - \frac{T - T_0}{T_0} \beta \quad (36)$$

Ainsi les problèmes liés au calcul de la dissipation intrinsèque d_1 disparaissent

$$d_1 = -\frac{d\psi}{dt} + \frac{\partial\psi}{\partial T} \frac{dT}{dt} = -\frac{\partial\psi}{\partial\beta} \frac{d\beta}{dt} = \frac{T - T_0}{T_0} \frac{d\beta}{dt}. \quad (37)$$

L'inégalité (27) est assurée en écrivant la loi de comportement

$$-\frac{\partial\psi}{\partial\beta} \in \partial\Phi\left(\beta, \frac{d\beta}{dt}\right) \quad (38)$$

où $\Phi\left(\beta, \frac{d\beta}{dt}\right)$ est une fonction positive convexe et nulle pour $\frac{d\beta}{dt} = 0$ et où $\partial\Phi\left(\beta, \frac{d\beta}{dt}\right)$ est le sous-différentiel de la fonction $\frac{d\beta}{dt} \rightarrow \Phi\left(\beta, \frac{d\beta}{dt}\right)$. Dans cette approche le potentiel Φ tient compte de la liaison convexe. Cette liaison sur la variable β , " $\beta \in \mathcal{C}$ ", est transposée sur la vitesse $\frac{d\beta}{dt}$. Elle est en fait plus générale :

"la distance de $\beta(t)$ au convexe fermé \mathcal{C} est décroissante en temps". (39)

Elle n'oblige pas la variable β à appartenir au convexe \mathcal{C} . Par contre si à un instant donné " $\beta \in \mathcal{C}$ " alors cette propriété reste vraie pour tout instant ultérieur.

Soit β un point de l'espace des réels \mathbb{R} ; soit $\hat{\beta}$ sa projection sur \mathcal{C} caractérisée par :

$$\forall c \in \mathcal{C} (\beta - \hat{\beta}).(c - \hat{\beta}) \geq 0. \quad (40)$$

Soient $K(\beta)$ un cône convexe, pouvant dépendre de β , de sommet 0 et tel que

$$\beta - \hat{\beta} \in K(\beta) \quad (41)$$

et $K_o(\beta)$ son cône polaire

$$K_o(\beta) = \{e \in \mathbb{R} / \forall e' \in K(\beta) e.e' \leq 0\}. \quad (42)$$

Démontrons que si $\frac{d\beta}{dt} \in K_o(\beta)$, alors $\beta(t)$ vérifie (39). En effet

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\beta - \hat{\beta}\|^2 &= (\beta - \hat{\beta}).\left(\frac{d\beta}{dt} - \frac{d\hat{\beta}}{dt}\right) \\ &= (\beta - \hat{\beta}).\frac{d\beta}{dt} - (\beta - \hat{\beta}).\frac{d\hat{\beta}}{dt} \\ &= (\beta - \hat{\beta}).\frac{d\beta}{dt} - \frac{d}{dt} I_{\mathcal{C}}(\hat{\beta}) \\ &= (\beta - \hat{\beta}).\frac{d\beta}{dt} \leq 0 \end{aligned} \quad (43)$$

car $\beta - \hat{\beta} \in \partial I_{\mathcal{C}}(\hat{\beta})$ (cf. (40)), $\beta - \hat{\beta} \in K(\beta)$, $\frac{d\beta}{dt} \in K_o(\beta)$ et $\frac{d}{dt} I_{\mathcal{C}}(\hat{\beta}) = (\beta - \hat{\beta}).\frac{d\hat{\beta}}{dt}$ d'après [9].

En conséquence notre nouvelle contrainte ne sera plus " $\beta \in \mathcal{C}$ " mais " $\frac{d\beta}{dt} \in K_o(\beta)$ " (fig. 6). Ceci nous conduit au choix final du potentiel de dissipation

$$\Phi\left(\beta, \frac{d\beta}{dt}\right) = I_{K_o(\beta)}\left(\frac{d\beta}{dt}\right). \quad (44)$$

A β fixé, Φ est une fonction positive, convexe et nulle pour $\frac{d\beta}{dt} = 0$. On en déduit la loi de comportement (38)

$$-\frac{\partial \psi}{\partial \beta} \in \partial I_{K_o(\beta)}\left(\frac{d\beta}{dt}\right) \subset K(\beta), \quad (45)$$

car $\partial I_{K_o(\beta)}\left(\frac{d\beta}{dt}\right) \subset \partial I_{K_o(\beta)}(0) = (K_o(\beta))_o = K(\beta)$.

Si on choisit $K(\beta) \subset \partial I_{\mathcal{C}}(\hat{\beta})$, la loi de comportement devient

$$-\frac{\partial \psi}{\partial \beta} \in \partial I_{K_o(\beta)}\left(\frac{d\beta}{dt}\right) \subset \partial I_{\mathcal{C}}(\hat{\beta}), \quad (46)$$

loi qui peut être plus précise que celles obtenues pour l'approche des énergies irrégulières (par exemple (34)) lorsque l'inclusion est stricte. Cette méthode est très souple vue la latitude laissée au choix du cône $K(\beta)$.

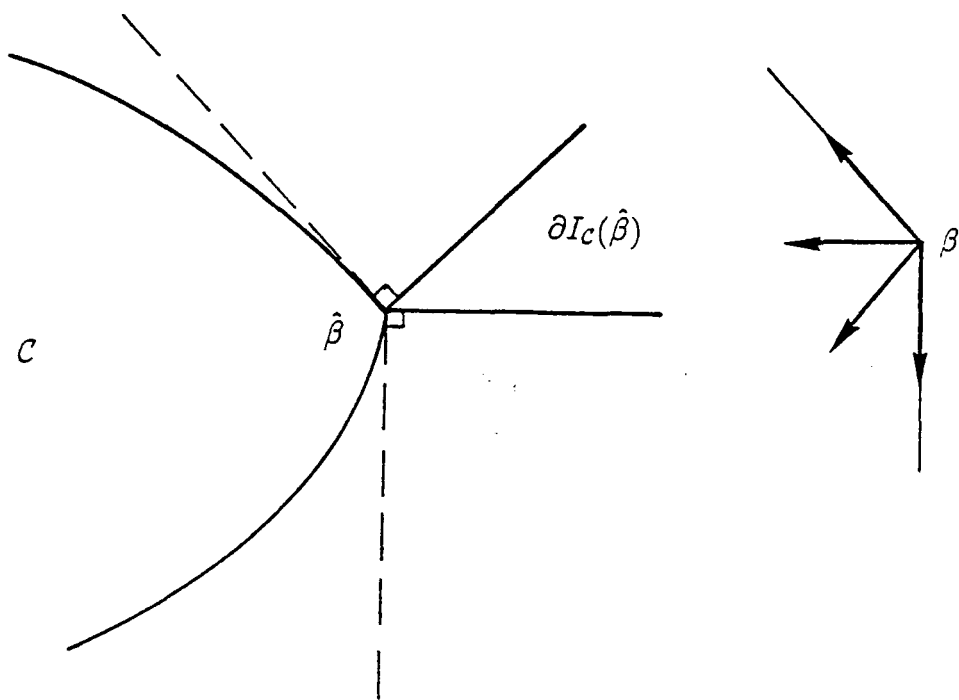


Figure 6 : Vitesses vérifiant $\frac{d\beta}{dt} \in K_o(\beta)$ avec $K = \partial I_C(\hat{\beta})$.

Dans le cas du changement de phase à la température T_o , on choisit

$$K(\beta) = \partial I_C(\hat{\beta}).$$

La condition (41) sur $K(\beta)$ est la conséquence immédiate de (40). La loi de comportement est alors

$$-\frac{\partial\psi}{\partial\beta} = \frac{T - T_o}{T_o} \in \partial I_{(\partial I_C(\hat{\beta}))_o} \left(\frac{d\beta}{dt} \right) \subset \partial I_C(\hat{\beta}). \quad (47)$$

Par un calcul direct, si $\beta(t_o) \in \mathcal{C}$, on a pour tout instant $t > t_o$

(i) $\beta(t) \in \mathcal{C}, \hat{\beta} = \beta$, (cf. (43))

(ii) $\frac{T - T_o}{T_o} \in \partial I_C(\beta)$, on retrouve ainsi la loi de comportement (34) du paragraphe 2.2.1. et ses conséquences (35) ;

(iii) $\frac{d\beta}{dt} \in (\partial I_C(\beta))_o$, c'est-à-dire

$$\begin{aligned} \frac{d\beta}{dt} & \text{ arbitraire si } \beta \in]0, 1[\\ \frac{d\beta}{dt} & \geq 0 \text{ arbitraire si } \beta = 0 \\ \frac{d\beta}{dt} & \leq 0 \text{ arbitraire si } \beta = 1 \end{aligned} \quad (48)$$

(iv) $T > T_o$ arbitraire si $\beta = 1$ et $\frac{d\beta}{dt} = 0$

(v) $T < T_o$ arbitraire si $\beta = 0$ et $\frac{d\beta}{dt} = 0$

(vi) $T = T_o$ si $\beta \in]0, 1[$ et $\frac{d\beta}{dt}$ arbitraire

si $\beta = 0$ et $\frac{d\beta}{dt} \geq 0$

si $\beta = 1$ et $\frac{d\beta}{dt} \leq 0$

Contrairement à l'approche "énergie libre irrégulière", les contraintes sur la vitesse $\frac{d\beta}{dt}$ (48) (iii) et (vi) suggèrent l'utilisation de dérivées à droite en temps; ce qui est plus usuel pour traiter des problèmes d'évolution.

Dans le modèle présenté dans ce chapitre nous optons pour la méthode "énergie libre régulière" pour prendre en compte les contraintes sur les variables internes.

2.3. Définition du milieu poreux

Le milieu que nous considérons est un mélange que nous assimilerons à un milieu continu. Ceci suppose que l'échelle que nous avons choisie pour observer le comportement de ce milieu est suffisamment grande par rapport à sa structure intime pour justifier une étude macroscopique. Le milieu poreux étudié est constitué de trois constituants. La matrice ou squelette représente la phase solide. Les pores formés par ce squelette sont occupés par de l'air et de l'eau sous forme de phases liquide et gazeuse. La phase liquide est constituée uniquement d'eau liquide, alors que la phase gazeuse est un mélange d'air et de vapeur d'eau.

Pour définir le milieu on introduit des paramètres ou des inconnues nivelés en chaque point. C'est le cas en particulier des proportions des diverses phases :

$$\beta_i = \frac{\text{volume occupé par la phase } i \text{ dans un volume élémentaire } V}{\text{volume élémentaire } V \text{ de milieu poreux}} \quad (49)$$

pour $i = g, l, s$, indices correspondant respectivement à la phase gazeuse, la phase liquide et la phase solide.

Pour des raisons de facilité d'écriture indiciaire nous posons

$$\beta_a = \beta_v = \beta_g. \quad (50)$$

En fait l'air et la vapeur d'eau (indices a et v) occupent le même espace, celui du gaz. Seule leur masse volumique les différencie. Ces teneurs volumiques ne sont pas indépendantes, elles vérifient

$$\begin{aligned} 0 \leq \beta_i \quad \text{pour } i = g, l, s \\ \text{et } \beta_g + \beta_l + \beta_s = 1. \end{aligned} \quad (51)$$

La masse volumique de chaque constituant est donnée par :

$$\rho_i = \frac{\text{masse du constituant } i}{\text{volume occupé par cette masse}}. \quad (52)$$

Nous supposons que l'on peut définir une vitesse moyenne \vec{u}_i du constituant $i = a, v, l, s$ en chaque point du milieu.

Ces définitions vont nous permettre d'écrire, après avoir listé les hypothèses du modèle, les lois de conservation.

2.4. Hypothèses du modèle

Le squelette du milieu poreux est supposé indéformable et immobile

$$\beta_s = \beta_s(x), \rho_s = \rho_s(x), \vec{u}_s = \vec{0}, \quad (53)$$

x étant les coordonnées du point du milieu poreux considéré.

La porosité ε , comme la teneur en squelette β_s , ne dépend pas du temps t

$$\varepsilon = 1 - \beta_s = \beta_g + \beta_l = \varepsilon(x) \quad (54)$$

La masse volumique de l'eau est constante. Les gaz, air et vapeur d'eau, se comportent comme des gaz parfaits. La température est la même pour tous les constituants. Enfin aucune réaction chimique n'est prise en compte à l'exception du changement de phase liquide-vapeur de l'eau. A ce niveau de présentation du modèle, les quantités $\beta_s, \varepsilon, \rho_s$ et \vec{u}_s sont données.

2.5. Lois de conservation

Comme le squelette est rigide, nous écrivons la conservation de la masse pour l'air et l'eau :

$$\frac{\partial \beta_a \rho_a}{\partial t} + \text{div}(\beta_a \rho_a \vec{u}_a) = 0, \quad (55)$$

$$\sum_{i=v,l} \left(\frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t} + \text{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i) \right) = 0. \quad (56)$$

Nous ne pouvons pas écrire une conservation de la masse de vapeur d'eau et d'eau liquide séparément car la vapeur d'eau peut se transformer en eau liquide et vice versa.

On se donne aussi une équation de conservation pour l'énergie du milieu. Pour cela, on note ϵ_i les énergies internes spécifiques (par unité de masse) des constituants $i = a, v, l, s$:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=a,v,l,s} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\beta_i \rho_i \epsilon_i) + \text{div}(\beta_i \rho_i \epsilon_i \vec{u}_i) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \beta_i \rho_i \vec{u}_i^2 \right) + \text{div} \left(\frac{1}{2} \beta_i \rho_i \vec{u}_i^2 \vec{u}_i \right) \right] = \\ & - \text{div} \vec{q} + r + \sum_{i=a,v,l} [\beta_i \vec{f}_i \cdot \vec{u}_i + \text{div}(\sigma_i \vec{u}_i)] \end{aligned} \quad (57)$$

où \vec{q} est le vecteur courant de chaleur, r le taux volumique de production de chaleur, \vec{f}_i les efforts volumiques au sein du constituant i et σ_i le tenseur de Cauchy de ce constituant. Ce tenseur est symétrique.

En utilisant le théorème de l'énergie cinétique :

$$\begin{aligned} & \sum_{i=a,v,l} \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \beta_i \rho_i \vec{u}_i^2 \right) + \text{div} \left(\frac{1}{2} \beta_i \rho_i \vec{u}_i^2 \vec{u}_i \right) \right] \\ &= \sum_{i=a,v,l} \left[\beta_i \vec{f}_i \cdot \vec{u}_i + \text{div}(\sigma_i \cdot \vec{u}_i) - \sigma_i \cdot \mathbf{D}(\vec{u}_i) \right], \end{aligned} \quad (58)$$

la conservation de l'énergie s'écrit aussi de la manière suivante :

$$\sum_{i=a,v,l,s} \frac{\partial}{\partial t} (\beta_i \rho_i e_i) + \text{div}(\beta_i \rho_i e_i \vec{u}_i) = -\text{div} \vec{q} + r + \sum_{i=a,v,l} \sigma_i \cdot \mathbf{D}(\vec{u}_i). \quad (59)$$

où $\mathbf{D}(\vec{u}_i)$ est le tenseur des taux de déformations de composantes jk

$$\begin{aligned} (\mathbf{D}(\vec{u}_i))_{jk} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} (\vec{u}_i)_k + \frac{\partial}{\partial x_k} (\vec{u}_i)_j \right) \\ \text{et } \sigma_i \cdot \mathbf{D}(\vec{u}_i) &= \sum_{j,k} (\sigma_i)_{jk} (\mathbf{D}(\vec{u}_i))_{jk}. \end{aligned} \quad (60)$$

2.6. Obtention des lois de comportement

Les lois de comportement doivent respecter le second principe de la thermodynamique. C'est-à-dire, dans notre cas, et pour toute évolution du milieu,

$$\sum_{i=a,v,l,s} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\beta_i \rho_i s_i) + \text{div}(\beta_i \rho_i s_i \vec{u}_i) \right] \geq -\text{div} \frac{\vec{q}}{T} + \frac{r}{T} \quad (61)$$

où s_i est l'entropie spécifique du constituant i et T la température absolue strictement positive. Les énergies libres spécifiques ψ_i sont reliées aux entropies et aux énergies internes par

$$\psi_i = e_i - T s_i. \quad (62)$$

En multipliant l'inégalité (61) par T et en retranchant l'équation de conservation de l'énergie (57), nous obtenons une inégalité de type Clausius-Duhem :

$$\begin{aligned} & \sum_{i=a,v,l,s} \left[-\frac{\partial}{\partial t} (\beta_i \rho_i \psi_i) - \text{div}(\beta_i \rho_i \psi_i \vec{u}_i) - \beta_i \rho_i s_i \frac{\partial T}{\partial t} - \beta_i \rho_i s_i \vec{u}_i \cdot \nabla T \right. \\ & \quad - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \beta_i \rho_i \vec{u}_i^2 \right) - \text{div} \left(\frac{1}{2} \beta_i \rho_i \vec{u}_i^2 \vec{u}_i \right) + \beta_i \vec{f}_i \cdot \vec{u}_i + \text{div}(\sigma_i \cdot \vec{u}_i) \left. \right] \\ & \quad - \frac{\vec{q}}{T} \cdot \nabla T \geq 0. \end{aligned} \quad (63)$$

Nous séparons le membre de gauche en deux termes, la dissipation intrinsèque d_1

$$d_1 = \sum_{i=a,v,l,s} \left[-\frac{\partial}{\partial t}(\beta_i \rho_i \psi_i) - \operatorname{div}(\beta_i \rho_i \psi_i \vec{u}_i) - \beta_i \rho_i s_i \frac{\partial T}{\partial t} - \beta_i \rho_i s_i \vec{u}_i \cdot \nabla T \right. \\ \left. - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \beta_i \rho_i \vec{u}_i^2 \right) - \operatorname{div} \left(\frac{1}{2} \beta_i \rho_i \vec{u}_i^2 \vec{u}_i \right) + \beta_i f_i \vec{u}_i + \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \vec{u}_i) \right] \quad (64)$$

et la dissipation thermique

$$d_2 = -\frac{\vec{q}}{T} \cdot \nabla T. \quad (65)$$

Nous allons chercher des lois de comportement qui vérifient

$$d_1 \geq 0 \quad (66)$$

et

$$d_2 \geq 0 \quad (67)$$

pour toute évolution réelle et par conséquent qui satisfont le second principe (63) ou (61). Pour cela il suffit de se donner les énergies libres spécifiques et les pseudo-potentiels de dissipation si l'on suppose que le milieu poreux est un milieu standard généralisé ([27], [29]).

2.6.1. Energies libres spécifiques

On choisit comme énergies libres spécifiques ψ_i pour l'air, la vapeur d'eau, l'eau liquide et le squelette

$$\begin{aligned} \psi_a(T, \rho_a) &= -c_a T \operatorname{Log} T + \frac{RT}{M_a} \operatorname{Log} \rho_a, \\ \psi_v(T, \rho_v) &= -c_v T \operatorname{Log} T + \frac{RT}{M_v} \operatorname{Log} \rho_v + f(T), \\ \psi_l(T, \beta_l) &= -c_l T \operatorname{Log} T + \frac{RT}{M_v} h(\beta_l), \\ \psi_s(T) &= -c_s T \operatorname{Log} T. \end{aligned} \quad (68)$$

Ici, c_i est la capacité calorifique à volume constant du constituant i , R est la constante des gaz parfaits, M_a et M_v sont les masses molaires de l'air et de l'eau. Le terme classique $-c_i T \operatorname{Log} T$ donne une contribution linéaire en température dans les énergies internes. Au comportement des gaz parfaits pour l'air et la vapeur d'eau (cf. §2.4.) correspond le terme $\frac{RT}{M_i} \operatorname{Log} \rho_i$. La fonction $f(T)$ de la température est liée à la chaleur latente du changement de phase liquide-vapeur de l'eau.

Nous avons vu au paragraphe 1.1. comment le milieu poreux peut présenter un caractère hygroscopique à un niveau microscopique. Cet effet est traduit au niveau macroscopique par l'introduction dans l'énergie libre de l'eau de la fonction $h(\beta_l)$. Le coefficient $\frac{RT}{M_v}$ permet de ne pas modifier l'énergie interne de l'eau et de rendre adimensionnelle la fonction h . Nous donnons aux paragraphes 2.7.2. et 2.7.3. une expression physique plus précise des fonctions $f(T)$ et $h(\beta_l)$.

Avant de préciser les pseudo-potentiels de dissipation, le choix des variables d'état va conduire à une nouvelle écriture de la dissipation intrinsèque.

2.6.2. Choix des variables

Le choix des variables que l'on considère pour modéliser le comportement du milieu à étudier détermine le degré de complexité du modèle. Elles sont indépendantes et caractérisent à chaque instant l'état de ce milieu.

Les variables d'état indépendantes que l'on retient sont :

- la température T
- la masse volumique d'air ρ_a ,
- la masse volumique de vapeur d'eau ρ_v ,
- la teneur en eau liquide β_l .

La teneur en gaz n'apparaît pas dans cette liste car elle est reliée à β_l par la formule (54) où la porosité ε est une donnée du modèle. En remarquant que les teneurs sont non négatives, celle de la phase liquide doit satisfaire la contrainte convexe :

$$\beta_l \in [0, \varepsilon]. \quad (69)$$

2.6.3. Dissipation intrinsèque

Nous allons regrouper chacune des vitesses $\frac{\partial T}{\partial t}$, $\frac{\partial \rho_a}{\partial t}$, $\frac{\partial \rho_v}{\partial t}$ et $\frac{\partial \beta_l}{\partial t}$ dans la dissipation intrinsèque d_1 en utilisant les lois de conservation de la masse de l'air (55) et de l'eau (56).

L'élimination des termes $div \beta_i \rho_i \vec{u}_i$ pour $i = a, v$ à partir de (55) et (56) est licite car l'inégalité (66) doit être vérifiée pour toutes les évolutions réelles, i.e. celles qui satisfont (au moins) les conservations de la masse. Dans l'expression de d_1 d'autres termes tels que les vitesses \vec{u}_i pour $i = a, v, l$ ne peuvent s'éliminer. Ils permettent l'obtention des lois de Darcy et Fick.

Mettons tout d'abord en évidence les termes $\frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t}$ et $div \beta_i \rho_i \vec{u}_i$ dans l'expression (64) de la dissipation d_1 . Nous sommes donc conduit à introduire

la variable auxiliaire $\frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{\beta_i \rho_i}$. La dissipation intrinsèque devient :

$$\begin{aligned}
d_1 = \sum_{i=a,v,l,s} [& -\psi_i \frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t} - \beta_i \rho_i \frac{\partial \psi_i}{\partial t} - \psi_i \operatorname{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i) - \beta_i \rho_i \vec{u}_i \cdot \nabla \psi_i \\
& - \beta_i \rho_i s_i \frac{\partial T}{\partial t} - \beta_i \rho_i s_i \vec{u}_i \cdot \nabla T \\
& - \frac{1}{2} \vec{u}_i^2 \frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t} - \beta_i \rho_i \vec{u}_i \cdot \frac{\partial \vec{u}_i}{\partial t} - \frac{1}{2} \vec{u}_i^2 \operatorname{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i) - \rho_i \beta_i \vec{u}_i \cdot \nabla \left(\frac{1}{2} \vec{u}_i^2 \right) \\
& + \beta_i \vec{f}_i \cdot \vec{u}_i + \frac{1}{3} \operatorname{tr} \frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{\beta_i \rho_i} \operatorname{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i) + \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{\beta_i \rho_i} \right)^{dév} \cdot \mathbf{D}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)^{dév} \\
& + \beta_i \rho_i \operatorname{div} \frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{\beta_i \rho_i} \cdot \vec{u}_i].
\end{aligned}$$

Pour un tenseur \mathbf{T} , $\operatorname{tr} \mathbf{T}$ désigne la trace

$$\operatorname{tr} \mathbf{T} = \sum_k \mathbf{T}_{kk}, \quad (70)$$

et $\mathbf{T}^{dév}$ sa partie déviatorique

$$\mathbf{T}^{dév} = \mathbf{T} - \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathbf{T} \mathcal{I} \mathbf{d}, \quad (71)$$

$\mathcal{I} \mathbf{d}$ étant le tenseur identité.

Pour chaque constituant i , notons $\vec{\gamma}_i$ son accélération

$$\vec{\gamma}_i = \frac{\partial \vec{u}_i}{\partial t} + \nabla \left(\frac{1}{2} \vec{u}_i^2 \right) \quad (72)$$

et P_i la pression au sein du constituant définie par

$$-\beta_i P_i = \frac{1}{3} \operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma}_i. \quad (73)$$

Avec ces notations, d_1 s'écrit :

$$\begin{aligned}
d_1 = \sum_{i=a,v,l,s} [& - \left(\psi_i + \frac{1}{2} \vec{u}_i^2 \right) \left(\frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i) \right) \\
& - \beta_i \rho_i \frac{\partial \psi_i}{\partial t} - \beta_i \rho_i \vec{u}_i \cdot \nabla \psi_i \\
& - \beta_i \rho_i s_i \frac{\partial T}{\partial t} - \beta_i \rho_i s_i \vec{u}_i \cdot \nabla T \\
& - \beta_i \rho_i \vec{u}_i \cdot \vec{\gamma}_i + \beta_i \vec{f}_i \cdot \vec{u}_i + \beta_i \rho_i \operatorname{div} \frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{\beta_i \rho_i} \cdot \vec{u}_i \\
& - \frac{P_i}{\rho_i} \operatorname{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i) + \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}_i}{\beta_i \rho_i} \right)^{dév} \cdot \mathbf{D}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)^{dév}].
\end{aligned} \quad (74)$$

Ceci s'écrit encore en développant le terme $\frac{\sigma_i}{\beta_i \rho_i}$ et en introduisant les enthalpies libres spécifiques du constituant i

$$g_i = \psi_i + \frac{P_i}{\rho_i} \quad (75)$$

$$\begin{aligned} d_1 = \sum_{i=a,v,l,s} & \left[-\beta_i \rho_i \frac{\partial \psi_i}{\partial t} - \beta_i \rho_i s_i \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{P_i}{\rho_i} \frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t} \right. \\ & - \left(g_i + \frac{1}{2} \bar{u}_i^2 \right) \left(\frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t} + \text{div}(\beta_i \rho_i \bar{u}_i) \right) \\ & - \left(\rho_i \nabla \psi_i + \rho_i s_i \nabla T + \rho_i \vec{\gamma}_i - \vec{f}_i + \frac{\sigma_i}{\beta_i} \cdot \frac{1}{\rho_i} \nabla \rho_i \right. \\ & - \left. \text{div} \frac{\sigma_i}{\beta_i} \right) \cdot \beta_i \bar{u}_i \\ & \left. + \left(\frac{\sigma_i}{\beta_i \rho_i} \right)^{\text{dév}} \cdot \mathbf{D}(\beta_i \rho_i \bar{u}_i)^{\text{dév}} \right] \quad (76) \end{aligned}$$

D'après les équations de conservation de la masse (55), (56), et les hypothèses (53), nous trouvons

$$\begin{aligned} d_1 = - \sum_{i=a,v,l,s} & \left(\beta_i \rho_i \frac{\partial \psi_i}{\partial t} + \beta_i \rho_i s_i \frac{\partial T}{\partial t} \right) \\ & - \left(g_l + \frac{1}{2} \bar{u}_l^2 - g_v - \frac{1}{2} \bar{u}_v^2 \right) \left(\frac{\partial \beta_l \rho_l}{\partial t} + \text{div}(\beta_l \rho_l \bar{u}_l) \right) \\ & - \sum_{i=a,v,l} \left[-\frac{P_i}{\rho_i} \frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t} \right. \\ & + \left(\rho_i \nabla \psi_i + \rho_i s_i \nabla T + \rho_i \vec{\gamma}_i - \vec{f}_i + \frac{\sigma_i}{\beta_i} \cdot \frac{1}{\rho_i} \nabla \rho_i \right. \\ & - \left. \text{div} \frac{\sigma_i}{\beta_i} \right) \cdot \beta_i \bar{u}_i \\ & \left. - \left(\frac{\sigma_i}{\beta_i \rho_i} \right)^{\text{dév}} \cdot \mathbf{D}(\beta_i \rho_i \bar{u}_i)^{\text{dév}} \right]. \quad (77) \end{aligned}$$

Pour terminer ce calcul et mettre en évidence les vitesses $\frac{\partial T}{\partial t}$, $\frac{\partial \rho_a}{\partial t}$, $\frac{\partial \rho_v}{\partial t}$ et $\frac{\partial \beta_l}{\partial t} = -\frac{\partial \beta_a}{\partial t} = -\frac{\partial \beta_v}{\partial t}$ (d'après (53)), il nous faut prendre en compte le choix des dépendances des énergies libres ψ_i par rapport aux variables (68). Nous rappelons que la masse volumique ρ_l est supposée constante en temps et en espace ($\rho_l > 0$).

On a donc :

$$\begin{aligned}
d_1 = & - \sum_{i=a,v,l,s} \beta_i \rho_i \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial T} + s_i \right) \frac{\partial T}{\partial t} \\
& - \sum_{i=a,v} \beta_i \left(\rho_i \frac{\partial \psi_i}{\partial \rho_i} - \frac{P_i}{\rho_i} \right) \frac{\partial \rho_i}{\partial t} \\
& - \rho_l \left(g_l + \frac{1}{2} \vec{u}_l^2 - g_v - \frac{1}{2} \vec{u}_v^2 + \beta_l \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} - \frac{P_l - P_a - P_v}{\rho_l} \right) \frac{\partial \beta_l}{\partial t} \\
& - \rho_l \left(g_l + \frac{1}{2} \vec{u}_l^2 - g_v - \frac{1}{2} \vec{u}_v^2 \right) \text{div}(\beta_l \vec{u}_l) \\
& - \sum_{i=a,v} \left[\rho_i \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial T} + s_i \right) \nabla T + \rho_i \vec{\gamma}_i - \vec{f}_i + \rho_i \frac{\partial \psi_i}{\partial \rho_i} \nabla \rho_i \right. \\
& \quad \left. + \frac{\sigma_i}{\beta_i} \cdot \frac{1}{\rho_i} \nabla \rho_i - \text{div} \frac{\sigma_i}{\beta_i} \right] \cdot \beta_i \vec{u}_i \\
& - \left[\rho_l \left(\frac{\partial \psi_l}{\partial T} + s_l \right) \nabla T + \rho_l \vec{\gamma}_l - \vec{f}_l + \rho_l \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} \nabla \beta_l \right. \\
& \quad \left. - \text{div} \frac{\sigma_l}{\beta_l} \right] \cdot \beta_l \vec{u}_l \\
& + \sum_{i=a,v,l} \left(\frac{\sigma_i}{\beta_i \rho_i} \right)^{\text{dév}} \cdot \mathbf{D}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)^{\text{dév}}.
\end{aligned} \tag{78}$$

Les variables d'état T, ρ_a, ρ_v et β_l sont dites normales si et seulement si on peut imposer au milieu en équilibre mécanique, i.e. pour les vitesses $\vec{u}_a, \vec{u}_v, \vec{u}_l$ toutes nulles, des variations de température arbitraires $\frac{\partial T}{\partial t}$ sans dissipation intrinsèque et sans variation des autres variables [46]. Par la suite nous nous plaçons sous cette hypothèse, appelée hypothèse d'Helmholtz, et ainsi, grâce à (78), on a

$$\left. \begin{aligned}
d_1 &= 0 \\
\frac{\partial T}{\partial t} &\text{ arbitraire} \\
\frac{\partial \rho_a}{\partial t} &= \frac{\partial \rho_v}{\partial t} = \frac{\partial \beta_l}{\partial t} = 0 \\
\vec{u}_a &= \vec{u}_v = \vec{u}_l = \vec{0}
\end{aligned} \right\} \Rightarrow \sum_{i=a,v,l,s} \beta_i \rho_i \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial T} + s_i \right) = 0. \tag{79}$$

Si de plus nous supposons, comme pour les énergies libres ψ_i , que nous pouvons écrire

$$\begin{aligned}
s_a &= s_a(T, \rho_a), \\
s_v &= s_v(T, \rho_v), \\
s_l &= s_l(T, \beta_l), \\
s_s &= s_s(T),
\end{aligned} \tag{80}$$

l'équation (79) écrite pour tout

$$T > 0, \rho_a \geq 0, \rho_v \geq 0, \varepsilon \geq \beta_l \geq 0$$

donne

$$s_i = -\frac{\partial \psi_i}{\partial T}, i = a, v, l, s. \quad (81)$$

Calculons les entropies spécifiques s_i à partir des expressions des ψ_i (68) :

$$\begin{aligned} s_a(T, \rho_a) &= c_a(1 + \text{Log}T) - \frac{R}{M_a} \text{Log}\rho_a, \\ s_v(T, \rho_v) &= c_v(1 + \text{Log}T) - \frac{R}{M_v} \text{Log}\rho_v - f'(T), \\ s_l(T, \beta_l) &= c_l(1 + \text{Log}T) - \frac{R}{M_v} h(\beta_l), \\ s_s(T) &= c_s(1 + \text{Log}T). \end{aligned} \quad (82)$$

Ainsi, d'après (62), les énergies internes spécifiques sont données par :

$$\begin{aligned} e_i &= c_i T, i = a, l, s, \\ e_v &= c_v T + f(T) - T f'(T). \end{aligned} \quad (83)$$

Elles ne dépendent que de la température. Le terme $f(T) - T f'(T)$ sera précisé au paragraphe 2.7.2.

Le terme en $\frac{\partial T}{\partial t}$ ayant disparu dans l'expression de la dissipation intrinsèque, celle-ci peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} d_1 &= A_1 \frac{\partial \rho_a}{\partial t} + A_2 \frac{\partial \rho_v}{\partial t} + A_3 \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + A_4 \text{div}(\beta_l \vec{u}_l) \\ &+ A_5 \cdot \beta_a \vec{u}_a + A_6 \cdot \beta_v \vec{u}_v + A_7 \cdot \beta_l \vec{u}_l \\ &+ A_8 \cdot \mathbf{D}(\beta_a \rho_a \vec{u}_a)^{dév} + A_9 \cdot \mathbf{D}(\beta_v \rho_v \vec{u}_v)^{dév} + A_{10} \cdot \mathbf{D}(\beta_l \rho_l \vec{u}_l)^{dév}. \end{aligned} \quad (84)$$

Les coefficients $A_i, i = 1$ à 10 , s'identifient aisément à partir de (78).

2.6.4. Choix du potentiel de dissipation

D'un point de vue mathématique, nous introduisons deux pseudo-potentiels de dissipation Φ_1 et Φ_2 correspondant aux dissipations intrinsèque et thermique du milieu. Dans le cadre des matériaux standard généralisés, si la dissipation d (d_1 ou d_2) s'écrit

$$d = \sum_{i=1}^p A_i \chi_i, \quad (85)$$

$\chi_i, i = 1, p$, étant les variables dont dépend d et A_i des coefficients, et si le potentiel de dissipation $\Phi(\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_p)$ est positif, convexe par rapport à chaque χ_i et nul en 0, alors les lois de comportement

$$A_i \in \partial_{\chi_i} \Phi \quad (86)$$

assurent la non négativité de la dissipation et donc la validité du second principe de la thermodynamique. Le sous-différentiel de la fonction $\chi_i \rightarrow \Phi(\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_p)$, pour $i \in \{1, 2, \dots, p\}$ donné, est noté $\partial_{\chi_i} \Phi$.

En ce qui concerne l'expression physique de ce potentiel Φ il faut, tout d'abord, choisir les variables χ_i par rapport auxquelles le phénomène physique montre une dissipation. Les fonctions de ces variables intervenant dans l'expression de Φ doivent ensuite vérifier les propriétés mathématiques énoncées ci-dessus. Les plus "simples" sont les formes quadratiques convexes. Nous prendrons donc comme pseudo-potentiel de dissipation une combinaison linéaire de formes quadratiques convexes.

Commençons par le cas le plus simple : la dissipation thermique. D'après (65) d_2 peut être considéré comme une fonction de $\chi = \nabla T$. Pour obtenir une loi de comportement linéaire, posons

$$\Phi_2(\nabla T) = \frac{1}{2} \frac{\lambda}{T} (\nabla T)^2, \lambda \geq 0. \quad (87)$$

Le potentiel Φ_2 est bien convexe en ∇T , positif et nul en 0. Le coefficient λ peut dépendre de variables d'état du milieu qui sont alors prises comme paramètres au niveau de Φ_2 .

Pour la dissipation intrinsèque, l'équation (84) suggère le choix suivant pour les quantités χ_i :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho_a}{\partial t}, \frac{\partial \rho_v}{\partial t}, \frac{\partial \beta_l}{\partial t}, \operatorname{div}(\beta_l \vec{u}_l), \\ & \beta_i \vec{u}_i \text{ et } \mathbf{D}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)^{dév}, i = a, v, l. \end{aligned} \quad (88)$$

L'air, la vapeur et l'eau liquide étant supposés des fluides parfaits [27], le potentiel Φ_1 ne dépend pas des quantités $\frac{\partial \rho_a}{\partial t}, \frac{\partial \rho_v}{\partial t}$ et $\mathbf{D}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)^{dév}$ pour $i = a, v, l$. Pour obtenir des effets hystérétiques, nous introduisons une dissipation sur le taux de changement de phase

$$\rho_l \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_l \beta_l \vec{u}_l).$$

Ce sont en fait les termes de l'équation de conservation de la masse d'eau (56) qui concernent l'eau liquide. Les lois de Darcy pour la phase liquide et la phase gazeuse sont déduites d'une dissipation sur la vitesse d'eau liquide

$$\beta_l \vec{u}_l$$

et sur la vitesse moyenne molaire du gaz (7)

$$\beta_g \vec{u}_g = \frac{1}{P_a + P_v} (P_a \beta_a \vec{u}_a + P_v \beta_v \vec{u}_v).$$

La quantité correspondante à la loi de Fick décrivant la diffusion de la vapeur dans l'air est la vitesse relative de la vapeur par rapport à l'air

$$\beta_g (\vec{u}_v - \vec{u}_a) = \beta_v \vec{u}_v - \beta_a \vec{u}_a.$$

La pondération des vitesses \vec{u}_a, \vec{u}_v par rapport aux pressions P_a, P_v est motivée par la loi de Fick qui relie la vitesse de diffusion au gradient de concentration. Pour un mélange de deux gaz la concentration est donnée par le rapport de la pression partielle d'un gaz sur la pression totale et non par le rapport des masses volumiques correspondantes.

En conséquence, nous choisissons Φ_1 comme la somme de quatre formes quadratiques des quantités définies ci-dessus et d'un terme irrégulier décrivant la contrainte $\beta_l \in [0, \varepsilon]$:

$$\begin{aligned} \Phi_1 & \left(\frac{\partial \rho_a}{\partial t}, \frac{\partial \rho_v}{\partial t}, \frac{\partial \beta_l}{\partial t}, \operatorname{div}(\beta_l \vec{u}_l), \beta_i \vec{u}_i, \mathbf{D}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)^{dev} \right) = \\ & \frac{1}{2} k \left(\rho_l \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_l \beta_l \vec{u}_l) \right)^2 \\ & + \frac{1}{2} K_l^{-1} (\beta_l \vec{u}_l)^2 + \frac{1}{2} \frac{K_g^{-1}}{(P_a + P_v)^2} (P_a \beta_a \vec{u}_a + P_v \beta_v \vec{u}_v)^2 \\ & + \frac{1}{2} K_{av}^{-1} \frac{|P_a P_v|}{(P_a + P_v)^2} (\beta_a \vec{u}_a - \beta_v \vec{u}_v)^2 \\ & + I_{\partial I_{[0, \varepsilon]}(\beta_l)_0} \left(\frac{\partial \beta_l}{\partial t} \right). \end{aligned} \quad (89)$$

Les scalaires k, K_l, K_g, K_{av} sont positifs. Comme ci-dessus, ils peuvent dépendre de variables d'état. Le coefficient $K_{av}^{-1} \frac{|P_a P_v|}{(P_a + P_v)^2}$ permettra de retrouver directement le coefficient de la loi de Fick (9). Le dernier terme de (89) est issu de la méthode décrite en 2.2.2. et prend en compte la contrainte (69) ; c'est l'indicatrice du cône polaire du sous-différentiel de l'indicatrice de l'intervalle $[0, \varepsilon]$. La projection de β_l sur le convexe fermé $[0, \varepsilon]$ est notée $\hat{\beta}_l$. Le potentiel Φ_1 est convexe par rapport à chacune des dix quantités χ_i (88), positif et nul en 0.

2.6.5. Lois de comportement

La loi de comportement (86) correspondante à la dissipation thermique d_2 (65) et au potentiel Φ_2 (87) devient dans ce cas

$$-\frac{\vec{q}}{T} = \frac{\lambda}{T} \nabla T$$

ou bien encore

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T \quad (90)$$

qui est bien connue sous le nom de loi de Fourier (cf. §1.2.). Le coefficient λ s'appelle la conductivité thermique.

En considérant la dissipation intrinsèque d_1 (84) et le potentiel Φ_1 (89) et en utilisant (78) et (81), les dix lois de comportement (86) deviennent

$$A_1 = -\beta_a \left(\rho_a \frac{\partial \psi_a}{\partial \rho_a} - \frac{P_a}{\rho_a} \right) = 0, \quad (91)$$

$$A_2 = -\beta_v \left(\rho_v \frac{\partial \psi_v}{\partial \rho_v} - \frac{P_v}{\rho_v} \right) = 0, \quad (92)$$

$$A_3 = -\rho_l \left(g_l + \frac{1}{2} \vec{u}_l^2 - g_v - \frac{1}{2} \vec{u}_v^2 + \beta_l \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} - \frac{P_l - P_a - P_v}{\rho_l} \right) \\ \in k \rho_l \left(\rho_l \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \text{div}(\rho_l \beta_l \vec{u}_l) \right) + \partial I_{\partial I_{[0, \epsilon]}}(\beta_l)_0 \left(\frac{\partial \beta_l}{\partial t} \right). \quad (93)$$

$$A_4 = -\rho_l \left(g_l + \frac{1}{2} \vec{u}_l^2 - g_v - \frac{1}{2} \vec{u}_v^2 \right) = k \rho_l \left(\rho_l \frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \text{div}(\rho_l \beta_l \vec{u}_l) \right), \quad (94)$$

$$A_5 = -\rho_a \vec{\gamma}_a + \vec{f}_a - \rho_a \frac{\partial \psi_a}{\partial \rho_a} \nabla \rho_a - \frac{\sigma_a}{\beta_a} \cdot \frac{1}{\rho_a} \nabla \rho_a + \text{div} \frac{\sigma_a}{\beta_a} \\ = K_g^{-1} \frac{P_a}{(P_a + P_v)^2} (P_a \beta_a \vec{u}_a + P_v \beta_v \vec{u}_v) \\ + K_{av}^{-1} \frac{|P_a P_v|}{(P_a + P_v)^2} (\beta_a \vec{u}_a - \beta_v \vec{u}_v), \quad (95)$$

$$A_6 = -\rho_v \vec{\gamma}_v + \vec{f}_v - \rho_v \frac{\partial \psi_v}{\partial \rho_v} \nabla \rho_v - \frac{\sigma_v}{\beta_v} \cdot \frac{1}{\rho_v} \nabla \rho_v + \text{div} \frac{\sigma_v}{\beta_v} \\ = K_g^{-1} \frac{P_v}{(P_a + P_v)^2} (P_a \beta_a \vec{u}_a + P_v \beta_v \vec{u}_v) \\ + K_{av}^{-1} \frac{|P_a P_v|}{(P_a + P_v)^2} (\beta_v \vec{u}_v - \beta_a \vec{u}_a), \quad (96)$$

$$A_7 = -\rho_l \vec{\gamma}_l + \vec{f}_l - \rho_l \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} \nabla \beta_l + \text{div} \frac{\sigma_l}{\beta_l} = K_l^{-1} \beta_l \vec{u}_l, \quad (97)$$

$$A_8 = \left(\frac{\sigma_a}{\beta_a \rho_a} \right)^{d\epsilon v} = 0, \quad (98)$$

$$A_9 = \left(\frac{\sigma_v}{\beta_v \rho_v} \right)^{d\epsilon v} = 0, \quad (99)$$

$$A_{10} = \left(\frac{\sigma_l}{\beta_l \rho_l} \right)^{dév} = 0. \quad (100)$$

La première conséquence est déduite de la loi (93) : le sous-différentiel est non vide. Ainsi on a

$$\frac{\partial \beta_l}{\partial t} \in \partial I_{[0, \varepsilon]}(\hat{\beta}_l)_o. \quad (101)$$

Nous avons montré que cette condition implique (voir (43))

$$\text{''la décroissance en temps de la distance de } \beta_l \text{ au convexe } [0, \varepsilon]\text{''}. \quad (102)$$

Ainsi, si à l'instant initial t_o la teneur en eau β_l admet une valeur physique, i.e. $\beta_l(t_o) \in [0, \varepsilon]$, alors nous obtenons :

$$\forall t > t_o, \beta_l(t) \in [0, \varepsilon] \quad \text{et} \quad \hat{\beta}_l(t) = \beta_l(t). \quad (103)$$

Nous nous plaçons dorénavant sous l'hypothèse " $\beta_l(t_o) \in [0, \varepsilon]$ ". Les lois (93) et (94) sont alors équivalentes à

$$\beta_l \in [0, \varepsilon], \quad (104)$$

$$-\beta_l \rho_l \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} + P_l - P_a - P_v \in \partial I_{\partial I_{[0, \varepsilon]}(\beta_l)_o} \left(\frac{\partial \beta_l}{\partial t} \right), \quad (105)$$

$$g_v + \frac{1}{2} \vec{u}_v^2 - g_l - \frac{1}{2} \vec{u}_l^2 = k \rho_l \left(\frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \text{div} \beta_l \vec{u}_l \right). \quad (106)$$

Les lois (98), (99) et (100) se résument à

$$\sigma_i^{dév} = 0, \quad i = a, v, l, \quad (107)$$

c'est-à-dire les tenseurs des contraintes sont sphériques. D'après la définition des pressions (73), on écrit de manière équivalente

$$\sigma_i = -\beta_i P_i \text{Id}. \quad (108)$$

Les lois d'état (91) et (92) sont les équations classiques d'un mélange idéal d'air et de vapeur d'eau [36] :

$$P_a = \rho_a^2 \frac{\partial \psi_a}{\partial \rho_a}, \quad P_v = \rho_v^2 \frac{\partial \psi_v}{\partial \rho_v}. \quad (109)$$

En utilisant les équations (50), (108), (109) et en combinant les lois (95) et (96), nous obtenons la vitesse moyenne molaire \vec{u}_g (7) et la vitesse de diffusion $\vec{u}_v - \vec{u}_a$ sous la forme :

$$\beta_g \vec{u}_g = K_g (-\rho_a \vec{\gamma}_a + \vec{f}_a - \nabla P_a - \rho_v \vec{\gamma}_v + \vec{f}_v - \nabla P_v), \quad (110)$$

$$\beta_g(\vec{u}_v - \vec{u}_a) = K_{av} \frac{P_a + P_v}{|P_a P_v|} [-P_a(-\rho_a \vec{\gamma}_a + \vec{f}_a - \nabla P_a) + P_v(-\rho_v \vec{\gamma}_v + \vec{f}_v - \nabla P_v)]. \quad (111)$$

De même la vitesse d'eau liquide est déduite de la loi (97) :

$$\beta_l \vec{u}_l = K_l (-\rho_l \vec{\gamma}_l + \vec{f}_l - \rho_l \frac{\partial \psi_l}{\partial \beta_l} \nabla \beta_l - \nabla P_l). \quad (112)$$

Remarque importante

Dans ce type de théorie, l'utilisation des dérivées partielles en temps n'est pas a priori justifiée car ces grandeurs ne sont en général pas objectives. Mais dans le cas présent, ces dérivées partielles sont en fait des dérivées particulières par rapport à la vitesse du squelette (supposée nulle) et donc elles sont bien objectives.

2.7. Interprétation du modèle obtenu

Nous allons maintenant interpréter les lois de comportement (105), (106), (109), (110), (111) et (112) et montrer qu'elles généralisent les lois de comportement classiquement utilisées pour les milieux poreux.

Dans cette section, nous remplaçons les énergies libres ψ_i par leur expression (68) et nous supposons que, lors d'imbibition ou de séchage naturels, les vitesses des constituants ne sont pas très grandes et que seule la phase liquide est soumise à la force volumique extérieure due à la pesanteur :

$$\vec{f}_a = \vec{f}_v = \vec{0}, \quad \vec{f}_l = -\nabla(\rho_l g z). \quad (113)$$

Nous négligeons aussi les effets d'accélération dans les lois de comportement (110), (111) et (112).

2.7.1. Gaz parfaits

Les expressions des pressions d'air et de vapeur d'eau (109) deviennent:

$$P_a = \frac{\rho_a RT}{M_a}, \quad P_v = \frac{\rho_v RT}{M_v}. \quad (114)$$

De par le choix des énergies ψ_a et ψ_v , ces deux gaz suivent la loi des gaz parfaits. Les masses volumiques étant positives, il en est de même pour les pressions P_a et P_v .

2.7.2. Energie libre de la vapeur d'eau

Nous dirons que l'eau liquide et sa vapeur sont en équilibre ou qu'il n'y a aucune dissipation sur le taux de changement de phase si

$$\frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \operatorname{div} \beta_l \vec{u}_l = 0 \quad \text{ou} \quad k = 0. \quad (115)$$

Dans ce cas particulier, la loi de comportement (106) devient

$$g_v + \frac{1}{2} \vec{u}_v^2 = g_l + \frac{1}{2} \vec{u}_l^2. \quad (116)$$

L'égalité (116) est la condition d'équilibre classique entre un liquide et sa vapeur ([19], [37]). Les vitesses étant supposées faibles, nous négligeons les termes d'origine cinétique devant les enthalpies dans la loi (116), d'où

$$g_v = g_l. \quad (117)$$

On a alors l'égalité des enthalpies libres spécifiques de l'eau et de sa vapeur qui est à l'origine de la loi de Kelvin (cf. §1.5.).

Pour déterminer la fonction $f(T)$ dans l'énergie libre ψ_v , nous considérons les lois (105) et (117) pour un état d'équilibre connu du milieu. Cet état de référence est le suivant : un mélange d'eau liquide et de sa vapeur hors d'un milieu poreux ("eau libre"). Dans ce cas, en plus de l'hypothèse (115), nous avons

$$0 < \beta_l < \varepsilon, \quad (118)$$

$$h = 0, \quad (119)$$

où h est la fonction d'interaction du milieu poreux sur l'eau liquide (68).

Les lois de comportement (105) et (117) s'écrivent alors :

$$P_l = P_a + P_{vs}^o, \quad (120)$$

$$-c_v T \operatorname{Log} T + \frac{RT}{M_v} \operatorname{Log} \rho_{vs}^o + f(T) + \frac{P_{vs}^o}{\rho_{vs}^o} = -c_l T \operatorname{Log} T + \frac{P_l}{\rho_l}, \quad (121)$$

où P_{vs}^o et ρ_{vs}^o dénotent la pression et la masse volumique de vapeur saturante de l'eau en milieu libre. Comme l'air et la vapeur sont des gaz parfaits, par élimination de la pression P_l , (120) et (121) conduisent à

$$\begin{aligned} & -c_v T \operatorname{Log} T + \frac{RT}{M_v} \operatorname{Log} P_{vs}^o - \frac{RT}{M_v} \operatorname{Log} \frac{RT}{M_v} + f(T) \\ & + \frac{RT}{M_v} \left(1 - \frac{\rho_a M_v / M_a + \rho_{vs}^o}{\rho_l} \right) = \\ & -c_l T \operatorname{Log} T. \end{aligned} \quad (122)$$

Or les expériences, effectuées dans les conditions habituelles, montrent que les masses volumiques d'air et de vapeur d'eau sont négligeables devant celle de l'eau liquide :

$$\rho_a \ll \rho_l, \quad \rho_{vs}^o \ll \rho_l. \quad (123)$$

Ainsi nous remarquons que la pression de vapeur saturante P_{vs}^o est déterminée uniquement par la température T :

$$\text{Log} P_{vs}^o = -\frac{M_v}{R}(c_l - c_v)\text{Log}T + \text{Log} \frac{RT}{M_v} - \frac{M_v}{RT}f(T) - 1. \quad (124)$$

Pour obtenir la fonction $f(T)$, nous nous donnons la pression de vapeur saturante en milieu libre $P_{vs}^o(T)$ par la formule de Dupré [10] :

$$\text{Log} P_{vs}^o = \alpha - \frac{L_o M_v}{RT} - \frac{M_v}{R}(c_l - c_v - \frac{R}{M_v})\text{Log}T. \quad (125)$$

Elle est vérifiée loin du point critique de l'eau. Elle provient de l'intégration de la formule de Clapeyron

$$\frac{1}{P_{vs}^o} \frac{dP_{vs}^o}{dT} = \frac{M_v L}{RT^2} \quad (126)$$

dans le domaine où la chaleur latente de vaporisation de l'eau est linéaire

$$L = L_o - (c_l - c_v - \frac{R}{M_v})T. \quad (127)$$

Les coefficients α et L_o sont constants. L'équation (127) suppose que la vapeur d'eau est un gaz parfait.

En éliminant P_{vs}^o de (124) et (125), on obtient finalement

$$f(T) = -\frac{R}{M_v}(1 + \alpha + \text{Log} \frac{M_v}{R})T + L_o. \quad (128)$$

Ainsi $f(T)$ est une fonction linéaire décroissante de la température.

L'énergie libre, l'énergie interne et l'entropie de la vapeur d'eau s'écrivent alors (cf. (68), (82), (83)) :

$$\psi_v(T, \rho_v) = -c_v T \text{Log}T + \frac{RT}{M_v} \text{Log} \rho_v - \frac{R}{M_v}(1 + \alpha + \text{Log} \frac{M_v}{R})T + L_o, \quad (129)$$

$$e_v(T) = c_v T + L_o. \quad (130)$$

$$s_v(T, \rho_v) = c_v(1 + \text{Log}T) - \frac{R}{M_v} \text{Log} \rho_v + \frac{R}{M_v}(1 + \alpha + \text{Log} \frac{M_v}{R}). \quad (131)$$

2.7.3. Pression capillaire - loi de Kelvin

Pour obtenir la loi de Kelvin (cf. §1.5.), il faut écrire la loi (117) dans deux états différents. Le premier a été étudié au paragraphe précédent. Pour le second, on considère un mélange liquide-vapeur en équilibre ou sans dissipation sur le taux de changement de phase, à l'intérieur du milieu poreux considéré et à la même température T que le précédent. La pression de vapeur est alors notée P_{vs} , pression de vapeur saturante à l'intérieur du milieu poreux. De la même manière qu'au paragraphe 2.7.2. d'après (117), et sous les hypothèses (118), (123), nous obtenons les équations (120), (122) modifiées seulement par la fonction d'interaction $h(\beta_l)$ qui est ici non identiquement nulle :

$$P_l = P_a + P_{vs} + \frac{\rho_l RT}{M_v} \beta_l \frac{dh(\beta_l)}{d\beta_l}, \quad (132)$$

$$\begin{aligned} -c_v T \text{Log} T + \frac{RT}{M_v} \text{Log} P_{vs} - \frac{RT}{M_v} \text{Log} \frac{RT}{M_v} + f(T) \\ + \frac{RT}{M_v} - \frac{RT}{M_v} \beta_l \frac{dh(\beta_l)}{d\beta_l} = -c_l T \text{Log} T + \frac{RT}{M_v} h(\beta_l). \end{aligned} \quad (133)$$

La fonction h est supposée dérivable. A partir de (133), nous pouvons calculer $\text{Log} P_{vs}$

$$\text{Log} P_{vs} = -\frac{M_v}{R} (c_l - c_v) \text{Log} T + \text{Log} \frac{RT}{M_v} - \frac{M_v}{RT} f(T) - 1 + \frac{d(\beta_l h(\beta_l))}{d\beta_l}. \quad (134)$$

La pression P_{vs} est donc une fonction de la température T et de la teneur en eau β_l . Par soustraction de (124) à (134) nous obtenons

$$\text{Log} \frac{P_{vs}(T, \beta_l)}{P_{vs}^o(T)} = \frac{d(\beta_l h(\beta_l))}{d\beta_l}. \quad (135)$$

En dérivant (135) par rapport à la température, nous remarquons que la formule de Clapeyron (126) reste vraie à l'intérieur du milieu poreux si l'équilibre entre les phases liquide et vapeur est atteint, i.e.

$$\frac{1}{P_{vs}^o(T)} \frac{dP_{vs}^o(T)}{dT} = \frac{1}{P_{vs}(T, \beta_l)} \frac{\partial P_{vs}(T, \beta_l)}{\partial T} = \frac{M_v L}{RT^2}. \quad (136)$$

Reprenons les définitions du paragraphe 1.5. de la pression capillaire et de l'humidité relative (cf. (17), (18)) :

$$P_c = P_a + P_{vs} - P_l. \quad (137)$$

$$HR = \frac{P_{vs}}{P_{vs}^o}. \quad (138)$$

A l'aide de (132) et (135), ces quantités vérifient à l'équilibre

$$P_c = -\frac{\rho_l RT}{M_v} \beta_l \frac{dh(\beta_l)}{d\beta_l}, \quad (139)$$

$$\text{Log}HR = \frac{d(\beta_l h(\beta_l))}{d\beta_l}. \quad (140)$$

On peut donc écrire

$$P_c = -\frac{\rho_l RT}{M_v} \text{Log}HR + \frac{\rho_l RT}{M_v} h(\beta_l). \quad (141)$$

L'équation (141) est notre nouvelle loi de Kelvin pour le milieu poreux caractérisé par l'isotherme de sorption $HR(\beta_l)$ et la fonction d'interaction $h(\beta_l)$. Si nous la comparons à celle obtenue au paragraphe 1.5., nous remarquons que le terme $\frac{\rho_l RT}{M_v} h$ corrige la pression capillaire P_k couramment utilisée dans les modèles macroscopiques de transferts d'humidité dans les milieux poreux et définie par

$$P_k = -\frac{\rho_l RT}{M_v} \text{Log}HR. \quad (142)$$

Cette correction est d'autant plus faible que la fonction d'interaction h est voisine de zéro, c'est-à-dire que le milieu poreux est proche de la saturation (β_l voisin de ε). L'approximation de la pression capillaire par la pression P_k ("pression de Kelvin") pour de fortes teneurs en eau a déjà été justifiée par la méthode de prise de moyenne spatiale [48].

2.7.4. Lois de Darcy

Les lois de comportement (110) et (112) sont en fait deux lois de Darcy, l'une pour la phase gazeuse (3) et l'autre pour la phase liquide (2) :

$$\beta_g \vec{u}_g = -K_g \nabla P_g, \quad (143)$$

$$\beta_l \vec{u}_l = -K_l \nabla (P_l + \frac{\rho_l RT}{M_v} h + \rho_l g z). \quad (144)$$

La pression du gaz P_g est définie par $P_g = P_a + P_r$ (5).

Sous l'hypothèse (118), la loi de Darcy de la phase liquide (144) s'écrit d'après (105), (137), (141) et (142)

$$\beta_l \vec{u}_l = -K_l \nabla (P_g - P_k + \rho_l g z). \quad (145)$$

Il nous faut souligner, ici, que dans la loi de Darcy de la phase liquide, intervient non pas la pression capillaire P_c définie en (137) mais la pression

P_k définie en (142). Après élimination de P_k , on retrouve donc la loi de Darcy classique.

2.7.5. Loi de Fick

La loi de comportement (111) simplifiée n'est autre que la loi de Fick concernant la diffusion de la vapeur dans l'air (9) :

$$\beta_g(\vec{u}_v - \vec{u}_a) = -K_{av} \frac{P_g^3}{P_a P_v} \nabla \frac{P_v}{P_g}. \quad (146)$$

2.7.6. Cas limites

Nous nous intéressons au cas d'un milieu ne contenant plus d'eau liquide ($\beta_l = 0$) ou ne contenant plus de gaz ($\beta_l = \varepsilon$). Sous l'hypothèse (123) et à l'équilibre (115), les lois (105) et (117) s'écrivent de façon analogue à (132) et (134)

$$P_l = P_a + P_v + \frac{\rho_l RT}{M_v} \beta_l \frac{dh(\beta_l)}{d\beta_l} + B, \quad (147)$$

$$\text{Log } P_v = -\frac{M_v}{RT}(c_l - c_v) \text{Log } T + \text{Log } \frac{RT}{M_v} - \frac{M_v}{RT} f(T) - 1 + \frac{d(\beta_l h(\beta_l))}{d\beta_l} + B, \quad (148)$$

où

$$B \in \partial I_{\partial I_{[0, \varepsilon]}(\beta_l)_o} \left(\frac{\partial \beta_l}{\partial t} \right).$$

Lorsque la vitesse $\frac{\partial \beta_l}{\partial t}$ est non nulle, nous retrouvons les équations du paragraphe 2.7.3. ; la pression de vapeur est la pression P_{vs} définie par (134) et la pression d'eau P_l est donnée par (132). En effet, l'élément B du sous-différentiel $\partial I \left(\frac{\partial \beta_l}{\partial t} \right)$ est forcément égal à zéro. Dans les cas limites ($\beta_l = 0$ ou ε), ces pressions n'ont pas nécessairement une valeur physique puisque l'un des constituants a disparu. Ces pressions sont en fait des pressions limites du cas d'un mélange d'eau liquide et de sa vapeur.

Que nous apporte l'introduction du sous-différentiel $\partial I \left(\frac{\partial \beta_l}{\partial t} \right)$ lorsque la vitesse $\frac{\partial \beta_l}{\partial t}$ est nulle ?

1er cas : $\beta_l = 0$ et $\frac{\partial \beta_l}{\partial t}(\beta_l = 0) = 0$.

En retranchant l'équation (134) à (148) pour T fixée et β_l nul, nous obtenons

$$\text{Log } \frac{P_v}{P_{vs}(T, 0)} = B \quad (149)$$

avec

$$B \in \partial I_{\partial I_{[0, \varepsilon]}(0)_o}(0) = \partial I_{(\mathbb{R}^-)_o}(0) = \partial I_{\mathbb{R}^+}(0) = \mathbb{R}^-.$$

Cette condition s'écrit

$$P_v \leq P_{vs}(T, 0). \quad (150)$$

Elle est en parfait accord avec l'expérience : la pression de la vapeur d'eau admet une limite supérieure. Si l'eau est hors de milieu poreux ($h = 0$), l'inégalité (150) devient

$$P_v \leq P_{vs}^o(T). \quad (151)$$

La limite supérieure est la pression de vapeur saturante de l'eau. Si la pression P_v est supérieure à P_{vs}^o , il y a condensation.

Nous ne faisons aucun commentaire sur la pression d'eau P_l dans ce cas puisqu'elle n'a pas de valeur physique.

2ème cas : $\beta_l = \varepsilon$ et $\frac{\partial \beta_l}{\partial t}(\beta_l = \varepsilon) = 0$.

La loi (147) s'écrit :

$$P_l = P_g + \frac{\rho_l RT}{M_v} \beta_l \frac{dh(\beta_l)}{d\beta_l} \Big|_{\beta_l = \varepsilon} + B \quad (152)$$

avec

$$B \in \partial I_{\partial I_{[0, \varepsilon]}(\varepsilon)_o}(0) = \partial I_{(\mathbb{R}^+)_o}(0) = \partial I_{\mathbb{R}^-}(0) = \mathbb{R}^+.$$

Si l'on suppose la pression de la phase gazeuse donnée et constante, la condition (152) est

$$P_l \geq P_g + \frac{\rho_l RT}{M_v} \beta_l \frac{dh(\beta_l)}{d\beta_l} \Big|_{\beta_l = \varepsilon}. \quad (153)$$

Lorsque le milieu est saturé, la pression d'eau P_l est minorée. Si l'eau est hors d'un milieu poreux ($h = 0$), l'inégalité (153) devient

$$P_l \geq P_g. \quad (154)$$

La limite inférieure est la pression du gaz. Si la pression P_l est inférieure à P_g , il y a cavitation.

Nous ne faisons aucun commentaire sur la pression de vapeur P_v dans ce cas puisqu'elle n'a pas de valeur physique.

Dans les deux cas extrêmes, la majoration ou la minoration des pressions est un effet direct de la prise en compte de la liaison (102).

2.7.7. Effets hystérétiques

Examinons le cas hors équilibre où la dissipation sur le taux de changement de phase est prise en compte. En gardant l'hypothèse (123), et en

négligeant les effets cinétiques de (106), nous éliminons la pression P_l des lois (105) et (106) pour trouver une équation analogue à (134) :

$$\begin{aligned} \text{Log} P_v = & -\frac{M_v}{R}(c_l - c_v)\text{Log}T + \text{Log}\frac{RT}{M_v} - \frac{M_v}{RT}f(T) - 1 + \frac{d(\beta_l h(\beta_l))}{d\beta_l} \\ & + k\rho_l \frac{M_v}{RT} \left(\frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \text{div} \beta_l \vec{u}_l \right) \end{aligned} \quad (155)$$

pour $0 < \beta_l < \varepsilon$. En retranchant (134) nous avons plus simplement

$$\text{Log} \frac{P_v}{P_{vs}(T, \beta_l)} = k\rho_l \frac{M_v}{RT} \left(\frac{\partial \beta_l}{\partial t} + \text{div} \beta_l \vec{u}_l \right). \quad (156)$$

Pour effectuer une analyse simplifiée de cette équation nous négligeons $\text{div} \beta_l \vec{u}_l$ (les vitesses sont supposées faibles) devant la vitesse $\frac{\partial \beta_l}{\partial t}$:

$$\text{Log} \frac{P_v}{P_{vs}(T, \beta_l)} = k\rho_l \frac{M_v}{RT} \frac{\partial \beta_l}{\partial t}. \quad (157)$$

Ainsi nous obtenons

$$P_v \geq P_{vs} \quad \text{si} \quad \frac{\partial \beta_l}{\partial t} \geq 0, \quad (158)$$

$$P_v \leq P_{vs} \quad \text{si} \quad \frac{\partial \beta_l}{\partial t} \leq 0. \quad (159)$$

La loi (156) permet donc de décrire des phénomènes hystérétiques : boucle de sorption-désorption (fig. 7). La pression de vapeur dépend des conditions expérimentales et est inférieure à la pression d'équilibre en phase de sorption, avec un phénomène inverse en désorption.

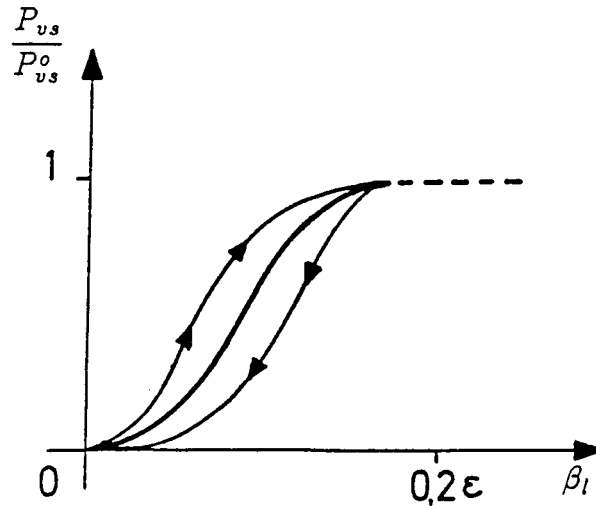


Figure 7 : Allure d'une boucle d'hystérésis à température fixée dans le plan humidité relative $\frac{P_{vs}}{P_{vs}^o}$ - teneur en eau β_l (trait fin) ; la courbe en trait fort représente l'humidité relative $\frac{P_{vs}}{P_{vs}^o}$ à l'équilibre.

2.7.8. Résumé

Les lois du paragraphe 2.6. obtenues automatiquement à partir du potentiel de dissipation donnent :

1) les lois phénoménologiques classiques de Fourier, Darcy et Fick ; la loi de Darcy pour la phase liquide, après élimination de la pression capillaire par la loi de Kelvin, est celle habituellement utilisée ;

2) l'égalité des enthalpies libres de l'eau liquide et de sa vapeur en équilibre ; la loi de Kelvin qui en découle est modifiée par un terme non classique ;

3) une loi d'évolution (hors équilibre) permettant la description de phénomènes hystérétiques.

L'utilisation d'une indicatrice dans le pseudo-potentiel de dissipation pour prendre en compte la contrainte (102)

"la décroissance en temps de la distance de β_l au convexe $[0, \varepsilon]$ "

a pour conséquences

1) si $\beta_l(t_0) \in [0, \varepsilon]$ alors $\forall t > t_0, \beta_l(t) \in [0, \varepsilon]$,

2) la pression de vapeur d'eau vue comme le cas limite d'un mélange d'eau liquide et de sa vapeur est majorée par la pression de vapeur saturante;

3) la pression d'eau liquide vue comme le cas limite d'un mélange d'eau liquide et de sa vapeur est minorée.

Remarque : Nous n'avons pas évoqué jusqu'à présent de conditions sur la fonction d'interaction, sur l'existence d'une pression P_{vs} définie par (134)...

Il y a, en fait, des limitations sur les variables d'état dues à la validité des expressions des énergies libres ψ_i (68).

2.8. Identification expérimentale de la fonction d'interaction

Reprenons l'équation (135)

$$\text{Log} \frac{P_{vs}(T, \beta_l)}{P_{vs}^o(T)} = \frac{d(\beta_l h(\beta_l))}{d\beta_l}. \quad (160)$$

A température T fixée, la fonction $\beta_l \rightarrow \frac{P_{vs}(T, \beta_l)}{P_{vs}^o(T)}$ représente l'isotherme de sorption du milieu considéré (cf. §1.6.). Cette isotherme caractérise ce milieu poreux et est supposée sans phénomène hystérétique. En effet, d'après (160), l'isotherme $\frac{P_{vs}}{P_{vs}^o}(\beta_l)$ ne dépend pas de la vitesse $\frac{\partial \beta_l}{\partial t}$ et donc du sens de parcours sur cette courbe. Elle correspond au cas idéal d'une humidification infiniment lente du milieu poreux qui, à chaque instant, est donc dans un état d'équilibre thermodynamique. Au niveau expérimental cette isotherme sera une courbe moyenne comprise entre les courbes de sorption et de désorption mesurées expérimentalement. Si nous résolvons l'équation (160) en h à partir d'une courbe de sorption donnée, nous pouvons alors obtenir la fonction $h(\beta_l)$ expérimentalement.

Avant d'aborder la procédure numérique permettant de résoudre (160), notons que cette relation montre que l'isotherme de sorption ne dépend pas de la température. Même si cela n'est pas vérifié expérimentalement [16], l'influence de la température sur ces isothermes est faible. Elle est négligée dans ce modèle.

2.8.1. Contraintes a priori

La fonction d'interaction h du modèle est introduite au niveau des énergies libres ψ_i (68). En général, ces énergies libres sont pour des raisons de stabilité du comportement physique, des fonctions concaves en température et convexes vis-à-vis des autres variables d'état. C'est ainsi que nous imposons à la fonction h d'être convexe. De plus, pour obtenir des courbes régulières de pression d'eau (132), de pression capillaire (139) ou d'isothermes de sorption (140), la fonction h est supposée de classe \mathcal{C}^2 sur l'intervalle d'étude.

2.8.2. Comportement aux limites et forme a priori

Les isothermes de sorption sont déduites de la mise en équilibre d'un échantillon de milieu poreux avec l'humidité relative de la phase gazeuse environnante. Les expériences nous fournissent seulement quelques points de cette courbe et ces points sont d'autant plus difficiles à obtenir que l'on

se rapproche de l'état sec ou saturé. Ceci est dû au manque de précision expérimentale dans ces deux zones. Il faut donc ajouter aux données expérimentales un comportement limite. Dans les exemples numériques présentés dans cette thèse, nous avons adopté le cas de figure suivant : le milieu poreux ne peut exister sous forme d'un milieu totalement sec ($\beta_l = 0$) ou totalement saturé ($\beta_l = \varepsilon$). Les deux valeurs extrêmes de β_l ne sont plus des valeurs physiquement acceptables. Ainsi nous admettons que l'interaction h devient infinie lorsque le milieu poreux se rapproche de l'état sec ou de l'état saturé. Pour tenir compte de ces deux branches infinies en $\beta_l = 0$ et $\beta_l = \varepsilon$, l'intervalle $]0, \varepsilon[$ a été décomposé en deux et la fonction h a été mise sous la forme analytique suivante :

$$h(\beta_l) = \frac{b_1}{\beta_l^2} + b_2\beta_l + b_3 \quad \text{si } \beta_l \in]0, \beta_1], \quad (161)$$

$$h(\beta_l) = \frac{a_1}{\varepsilon - \beta_l} + \frac{(\varepsilon - \beta_l)(a_2\beta_l^3 + a_3\beta_l^2 + a_4\beta_l + a_5)}{a_6\beta_l + a_7} \quad \text{si } \beta_l \in [\beta_1, \varepsilon[, \quad (162)$$

où a_i, b_i, β_1 sont des coefficients constants.

Dans le domaine d'étude expérimental, nous choisissons de représenter la fonction h par une fraction rationnelle

$$\frac{(\varepsilon - \beta_l)(a_2\beta_l^3 + a_3\beta_l^2 + a_4\beta_l + a_5)}{a_6\beta_l + a_7}.$$

Le choix d'une fonction polynomiale a donné de mauvais résultats. Cette fraction déterminant h sur $[\beta_1, \varepsilon[$, nous avons limité le dénominateur au premier degré pour mieux contrôler les pôles de la fraction. Nous aurions pu augmenter le degré du numérateur pour avoir plus de précision (plus de coefficients à déterminer) mais un polynôme du quatrième degré s'est avéré suffisant pour obtenir une fonction h convenable. Le facteur $\varepsilon - \beta_l$ permet de distinguer la contribution du terme $\frac{a_1}{\varepsilon - \beta_l}$ pour β_l voisin de ε . Les coefficients a_2 à a_7 sont définis à un facteur multiplicatif près ; nous avons donc fixé le coefficient du terme de plus haut degré du numérateur à l'unité, c'est-à-dire

$$a_2 = -1.$$

Les deux termes $\frac{a_1}{\varepsilon - \beta_l}$ et $\frac{b_1}{\beta_l^2}$ interviennent dans les cas extrêmes de β_l pour donner les deux asymptotes infinies

$$\beta_l = 0 \quad \text{et} \quad \beta_l = \varepsilon.$$

Un terme en $\frac{1}{\beta_l}$ n'est pas convenable car il ne satisfait pas la condition physique à l'équilibre :

$$\lim_{\beta_l \rightarrow 0^+} \text{Log} \frac{P_{vs}(T, \beta_l)}{P_{vs}^o(T)} = \lim_{\beta_l \rightarrow 0^+} \frac{d(\beta_l h(\beta_l))}{d\beta_l} = -\infty;$$

en effet l'humidité relative $\frac{P_{v\epsilon}}{P_{v0}}$ décroît vers 0 lorsque la teneur en eau β_l tend vers 0. L'expression $\frac{b_1}{\beta_l^2} + b_2\beta_l + b_3$ ne caractérise h qu'au voisinage de $\beta_l = 0$, ainsi β_1 sera choisi proche de 0. Les trois coefficients b_1, b_2 et b_3 sont fixés de manière à garantir un raccordement de classe \mathcal{C}^2 en $\beta_l = \beta_1$.

Si nous avons opté pour un état de saturation totale physiquement acceptable ($\beta_l = \epsilon$); nous aurions dans cet état un état comparable à celui de l'eau "libre" à l'intérieur du milieu poreux et donc pour $\beta_l = \epsilon$ nous aurions

$$HR = 1 \quad \text{et} \quad P_c = 0.$$

Ainsi, d'après (140) et (141), la fonction h devrait satisfaire

$$h(\epsilon) = 0 \quad \text{et} \quad \frac{dh}{d\beta_l}(\epsilon) = 0.$$

Dans notre cas, h étant infinie en ϵ , nous décalons ces conditions pour les imposer en une valeur $\beta_2 < \epsilon$,

$$h(\beta_2) = 0 \quad \text{et} \quad \frac{dh}{d\beta_l}(\beta_2) = 0;$$

cette valeur β_2 correspond physiquement à un échantillon de milieu poreux qui est en équilibre avec une atmosphère où règne une humidité relative de 100% ($HR = 1$) et où la pression d'eau est égale à la pression du gaz environnant ($P_c = 0$). La valeur β_2 est proche de la porosité ϵ . Expérimentalement, on remarque qu'il est difficile de saturer un milieu poreux même en laissant séjourner un échantillon plongé dans de l'eau liquide. Pour obtenir une meilleure saturation, en général on prend un échantillon mis sous vide d'air, puis on y laisse pénétrer de la vapeur d'eau qui se condense et qui sature le milieu. Même dans ce dernier cas, la saturation β_2 obtenue à l'équilibre n'est pas totale, ce qui justifie notre choix $\beta_2 < \epsilon$. Cependant, la valeur physique de β_2 est mal connue.

2.8.3. Dispositif expérimental

Pour obtenir des points de la courbe de désorption $HR(\beta_l)$ nous plaçons un échantillon de milieu poreux dans un environnement où la température, l'humidité relative et la pression du gaz (en général la pression atmosphérique) sont fixées. Pour ceci, deux procédures sont possibles. Soit on place l'échantillon dans une enceinte climatique qui maintient une température et une humidité relative données. Soit on utilise un dessiccateur, c'est-à-dire un récipient dans lequel l'humidité relative est fixée par une solution saline saturée. Des tables donnent suivant les sels utilisés les humidités

relatives correspondantes. Le dessiccateur est maintenu en température par un bain thermostaté.

En partant d'un échantillon saturé (ou supposé l'être), on suit l'évolution de sa perte de poids jusqu'à stabilisation de celui-ci. L'équilibre est alors atteint, l'humidité relative à l'intérieur du milieu est égale à l'humidité extérieure par continuité de la phase gazeuse. On calcule alors la teneur en eau β_l de l'échantillon en fonction de sa perte de poids et de la porosité ε . Un palier à l'humidité relative considérée a été effectué. Il peut durer plusieurs mois et on n'a obtenu qu'un seul point sur la courbe d'équilibre $HR(\beta_l)$.

En procédant à plusieurs paliers successifs à humidités relatives décroissantes, on détermine autant de points sur la courbe de désorption. En reprenant les paliers en sens inverse, on décrit la courbe de sorption et on met en évidence les phénomènes hystérétiques (s'ils existent dans le cadre d'évolutions infiniment lentes). Notons que le modèle actuel suppose que de tels effets n'existent pas dans des évolutions à l'équilibre.

Dans ces essais, la porosité ε du milieu peut être déterminée par la différence de poids entre l'état "totalement saturé" et l'état "totalement sec". Une information plus précise (incluant la distribution du diamètre des pores) est obtenue par des essais de porosimétrie à mercure.

2.8.4. Identification numérique

Le problème numérique est maintenant de trouver les coefficients a_i , b_i , β_1 et β_2 de telle sorte que h soit convexe, de classe C^2 sur $]0, \varepsilon[$, qu'elle vérifie au mieux l'équation (160) pour les valeurs expérimentales disponibles et que l'on ait l'équilibre

$$HR = 1 \quad \text{et} \quad P_c = 0$$

pour $\beta_1 = \beta_2$, avec β_2 proche de ε .

Nous nous donnons la porosité ε et un tableau "teneur en eau β_l - humidité relative $HR = \frac{P_{v,s}}{P_{v,s}^*}$ " représentant des points expérimentaux de l'isotherme de sorption. L'algorithme de calcul de la fonction analytique h ((161) et (162)) est alors le suivant :

1) On interpole les points expérimentaux de la courbe $\beta_l \rightarrow HR(\beta_l)$ par un spline cubique par morceau avec les conditions limites :

$$HR(0) = 0, \quad \frac{d^2 HR}{d\beta_l^2}(0) = 0,$$

$$HR(\varepsilon) = 1, \quad \frac{dHR}{d\beta_l}(\varepsilon) = 0.$$

Les valeurs limites de HR sont les valeurs classiques dans le cas où les valeurs $\beta_l = 0$ et $\beta_l = \varepsilon$ sont physiquement acceptables. Les courbes expérimentales de sorption suggèrent que la dérivée de $HR(\beta_l)$ est nulle en $\beta_l = \varepsilon$. N'ayant pas d'information dans la zone "sèche", nous avons choisi la condition $\frac{d^2HR}{d\beta_l^2} = 0$. A ce stade, nous vérifions la croissance du spline qui traduit le phénomène physique suivant : "plus la pression de vapeur d'eau est importante, plus l'eau se condense".

2) On calcule la fonction h_{exp} par intégration de (160), c'est-à-dire par intégration du logarithme du spline précédent :

$$h_{exp}(\beta_l) = -\frac{1}{\beta_l} \int_{\beta_l}^{\varepsilon} \text{Log}HR(\beta) d\beta.$$

Pour ce faire, on utilise la méthode de Simpson (méthode des trapèzes) en un nombre fixé (environ une centaine) de points équirépartis dans l'intervalle $]0, \varepsilon]$. Nous remarquons que $h_{exp}(\varepsilon) = 0$ (cf. §2.8.2.) et que la fonction h_{exp} n'est définie qu'à partir du plus petit β_l non nul β_{lm} considéré dans $]0, \varepsilon]$.

3) A partir des valeurs calculées en 2), on interpole h_{exp} par un spline cubique par morceau h_{spl} avec les conditions limites :

$$\frac{d^2 h_{spl}}{d\beta_l^2}(\beta_{lm}) = 0 \quad \text{et} \quad \frac{dh_{spl}}{d\beta_l}(\varepsilon) = 0.$$

La dernière condition est naturelle si l'on peut saturer complètement le milieu (cf. §2.8.2.). On connaît donc l'intégrale de (160) en tout point β_l de $[\beta_{lm}, \varepsilon]$. De plus, l'utilisation d'une interpolation par spline garantit une estimation stable des dérivées première et seconde de h_{exp} .

4) On détermine le plus grand intervalle $[\beta_1, \beta_2]$ pour lequel :

- (i) la fonction h_{spl} est convexe,
- (ii) la fonction $HR(\beta_l)$ définie à partir de h_{spl} par (160) est croissante,
- (iii) la pression P_c définie à partir de h_{spl} par (139) est décroissante.

5) On calcule les coefficients de la fonction analytique h définie par (161) et (162) à l'aide de l'algorithme suivant :

- On pose $a_2 = -1$ et on initialise a_1 par $a_1 = 0$.
- On calcule a_1, a_3, a_4, a_5, a_6 et a_7 par la méthode du point fixe.

(i) On résoud le système linéaire d'inconnues $(a_i)_{i=3,7}$ pour a_1 fixé, formé des équations

$$h(\beta_2) = 0,$$

$$h_{spl}(\beta_k)(a_6\beta_k + a_7) = \frac{a_1}{\varepsilon - \beta_k}(a_6\beta_k + a_7) + (\varepsilon - \beta_k)(a_2\beta_k^3 + a_3\beta_k^2 + a_4\beta_k + a_5), k = 3 \text{ à } 7,$$

où $\beta_k, k = 3 \text{ à } 7$, sont cinq points donnés de $]\beta_1, \beta_2[$.

(ii) On calcule a_1 à partir de l'équation

$$\frac{dh}{d\beta_1}(\beta_2) = 0$$

à a_3, a_4, a_5, a_6 et a_7 fixés.

- Une fois les a_i connus, on calcule b_1, b_2, b_3 de telle sorte que le raccordement de h en β_1 soit C^2 .

6) On vérifie que la fonction analytique h est convexe sur $]0, \varepsilon[$ et qu'elle détermine une courbe de sorption $HR(\beta_l)$ croissante (160) et une pression capillaire P_c décroissante (139), c'est-à-dire

$$\begin{cases} \frac{d^2 h}{d\beta_l^2} \geq 0, \\ 2\frac{dh}{d\beta_l} + \beta_l \frac{d^2 h}{d\beta_l^2} \geq 0. \\ \frac{dh}{d\beta_l} + \beta_l \frac{d^2 h}{d\beta_l^2} \geq 0. \end{cases} \quad (163)$$

Remarques :

- Les conditions de monotonie de la courbe de sorption et de la pression capillaire découlent d'observations expérimentales : plus la pression de vapeur est importante, plus l'eau se condense, moins la différence entre la pression du gaz et la pression du liquide est grande. Par contre, la convexité de la fonction h est une des hypothèses a priori des milieux standard généralisés.

- A priori nous aurions pu nous borner au calcul du spline cubique sur h_{spl} . Mais il est très difficile voire impossible d'obtenir les propriétés requises sur h (163) sans augmenter de façon considérable le nombre de points nécessaires au calcul de ce spline.

- Le spline cubique $HR(\beta_l)$ étant très sensible aux différents points donnés de la courbe à lisser, il est parfois nécessaire de modifier le tableau des valeurs expérimentales $HR - \beta_l$ qui sont connues de manière très grossière.

- Le choix des quatre points où la fonction analytique coïncide avec le spline sur h ne permet pas en général que la courbe de sorption analytique passe exactement par les points expérimentaux. Par contre, la procédure adoptée garantit que la courbe finale est physiquement acceptable.

Nous présentons dans la suite deux exemples types de milieux poreux : le mortier et le sable.

2.8.5. Exemple type mortier

Les valeurs expérimentales sont tirées des travaux de J.F. DAIAN [16] sur le mortier de ciment. Les échantillons de mortier testés ont une porosité moyenne

$$\varepsilon = 0.17 \quad m^3/m^3.$$

Les points expérimentaux de l'isotherme de sorption sont regroupés dans le tableau suivant :

$\beta_l(m^3/m^3)$	0.02	0.04	0.06	0.08	0.10	0.12
HR	0.20	0.60	0.82	0.90	0.96	0.98

La fonction analytique h correspondante à ces données (fig. 8) est obtenue pour les paramètres suivants :

$$\beta_1 = 0.01 \quad m^3/m^3,$$

a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7
$2.52 \cdot 10^{-12}$	-1.	0.44	$-6.80 \cdot 10^{-2}$	$3.65 \cdot 10^{-3}$	$2.32 \cdot 10^{-2}$	$-2.27 \cdot 10^{-4}$

b_1	b_2	b_3
5.72	$1.11 \cdot 10^7$	$-1.68 \cdot 10^5$

La courbe de sorption déduite de l'équation (160) permet de vérifier la cohérence physique entre cette courbe et les points expérimentaux (fig. 9). Au voisinage de la porosité ε , l'humidité relative devient supérieure à 1 ; ceci s'explique par la présence de petites bulles de gaz dans l'eau.

Les pressions capillaires P_c et P_k à température fixée sont données par les équations (139), (140) et (142). Ces courbes sont décroissantes de $+\infty$ à $-\infty$ (fig. 10). Elles sont presque confondues.

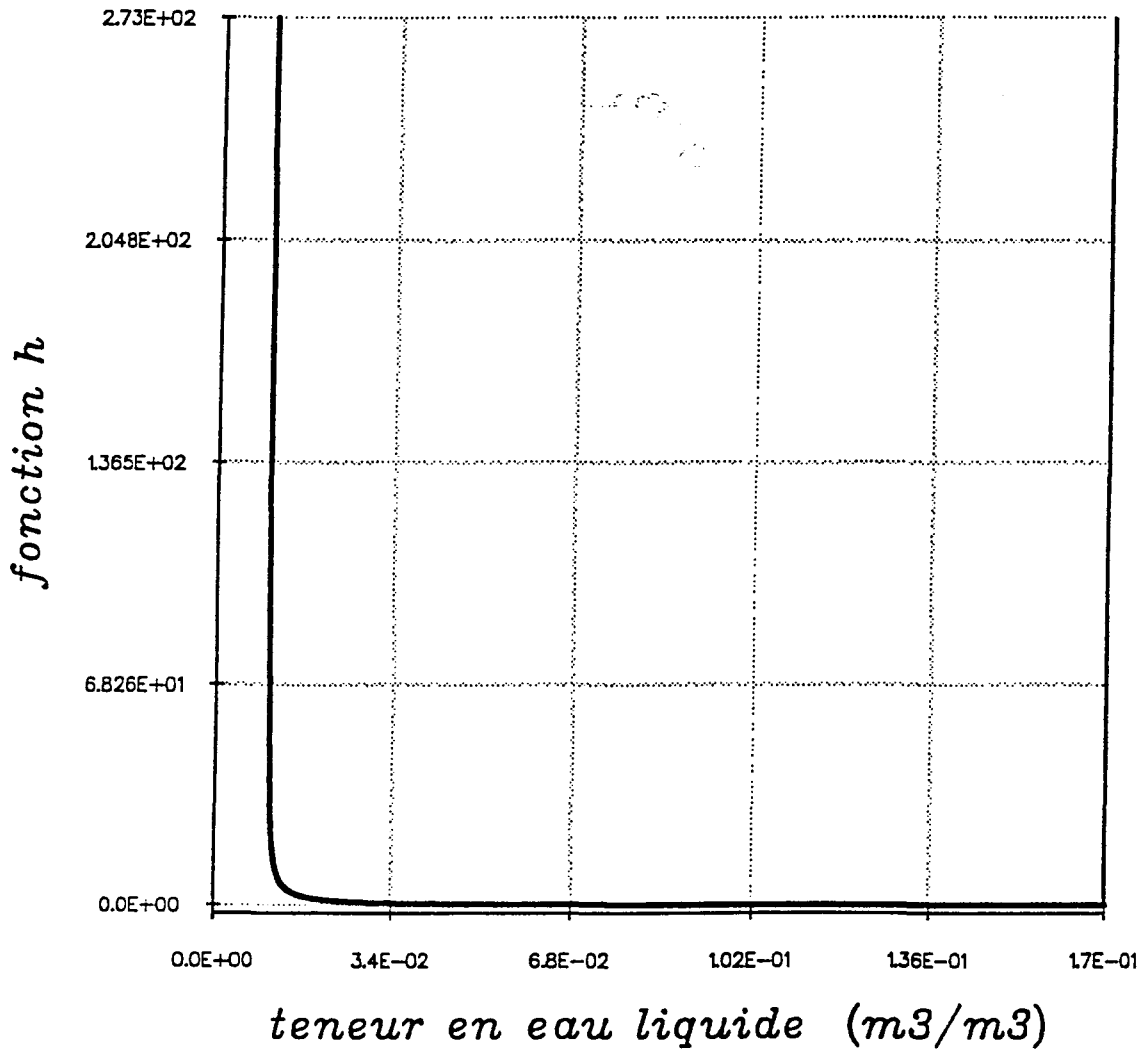


Figure 8 : fonction analytique h du type mortier.

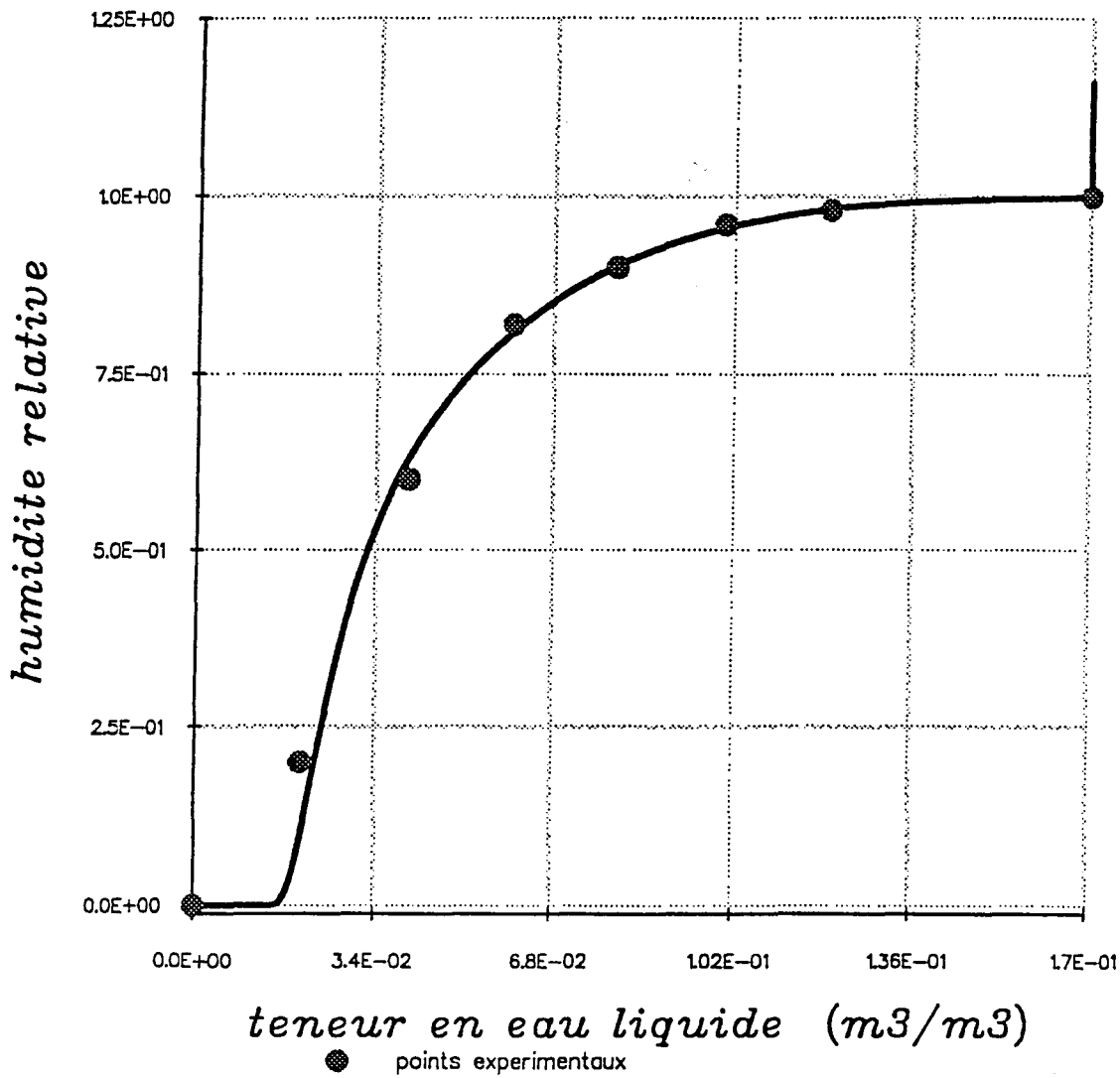


Figure 9 : Isotherme de sorption du type mortier (courbe analytique).

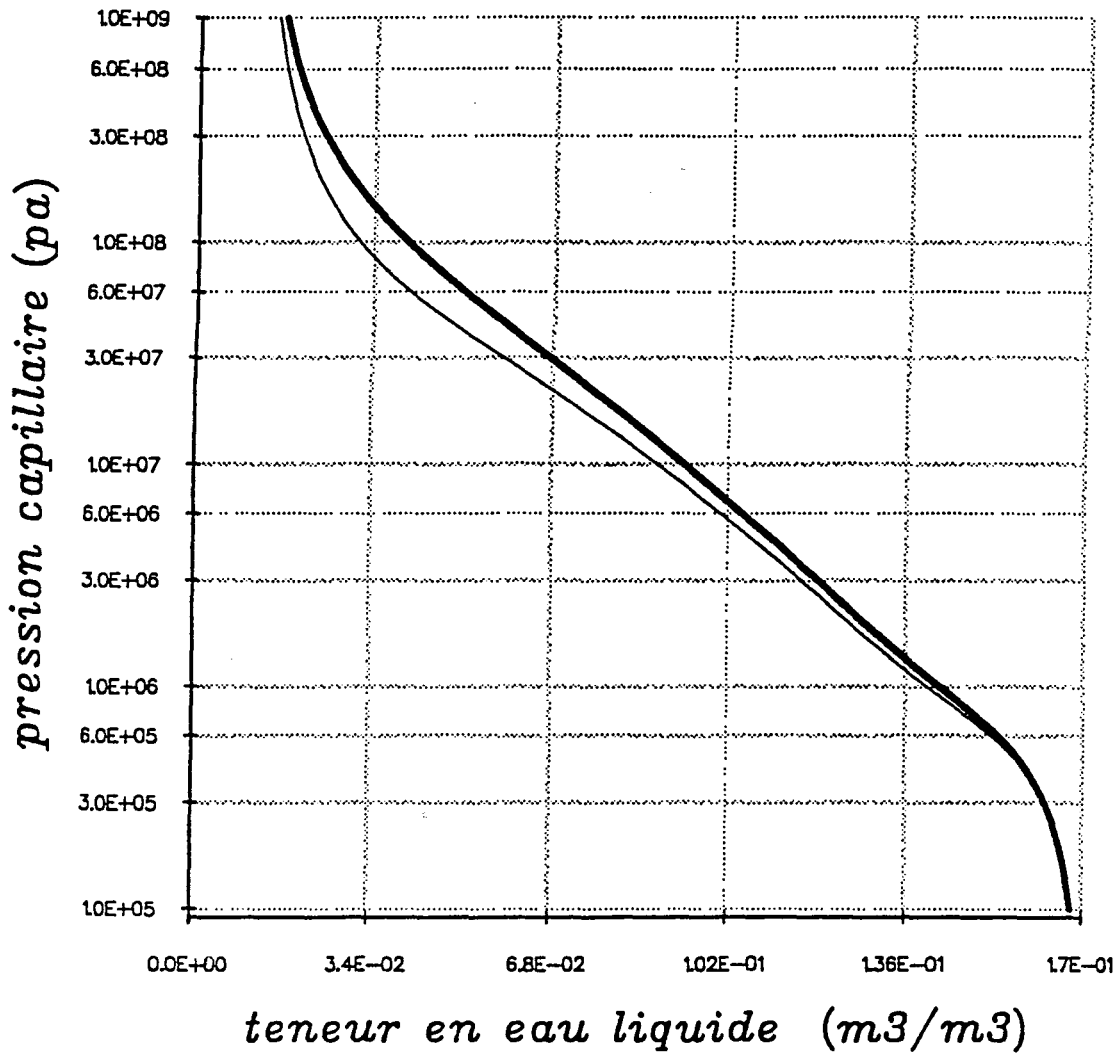


Figure 10 : Pression capillaire P_c (139) en trait fort et pression P_k (142) en trait fin du type mortier à $T = 293K$ (courbes analytiques).

2.8.6. Exemple type sable

Les valeurs expérimentales sont tirées des travaux de P. CRAUSSE [15].
Le sable étudié a une porosité

$$\varepsilon = 0.40 \quad m^3/m^3.$$

Les points expérimentaux de l'isotherme de sorption sont regroupés dans le tableau suivant :

$\beta_i(m^3/m^3)$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1.2 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$3.7 \cdot 10^{-3}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$
HR	0.500	0.750	0.887	0.976	0.985

La fonction analytique h correspondante à ces données (fig. 11) est obtenue pour les paramètres suivants :

$$\beta_1 = 3 \cdot 10^{-4} \quad m^3/m^3,$$

a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7
$5.84 \cdot 10^{-14}$	-1.	$5.56 \cdot 10^{-1}$	$8.23 \cdot 10^{-2}$	$-5.78 \cdot 10^{-2}$	-8.09	$1.27 \cdot 10^{-3}$

b_1	b_2	b_3
$2.61 \cdot 10^{-6}$	$5.44 \cdot 10^4$	$-2.54 \cdot 10^4$

Nous pouvons émettre les mêmes remarques générales concernant les courbes des figures 12 et 13 par rapport au paragraphe 2.8.5.

Comparée au milieu type mortier, la fonction d'interaction h du type sable est plus faible ; le palier de la courbe de sorption $HR = 1$ est beaucoup plus marqué (cf. fig. 9, fig. 12) ; la pression capillaire P_c a une pente plus faible pour des teneurs en eau moyennes (cf. fig. 10, fig. 13). L'écart entre les pressions P_c et P_k est plus significatif surtout pour de faibles teneurs en eau β_l .

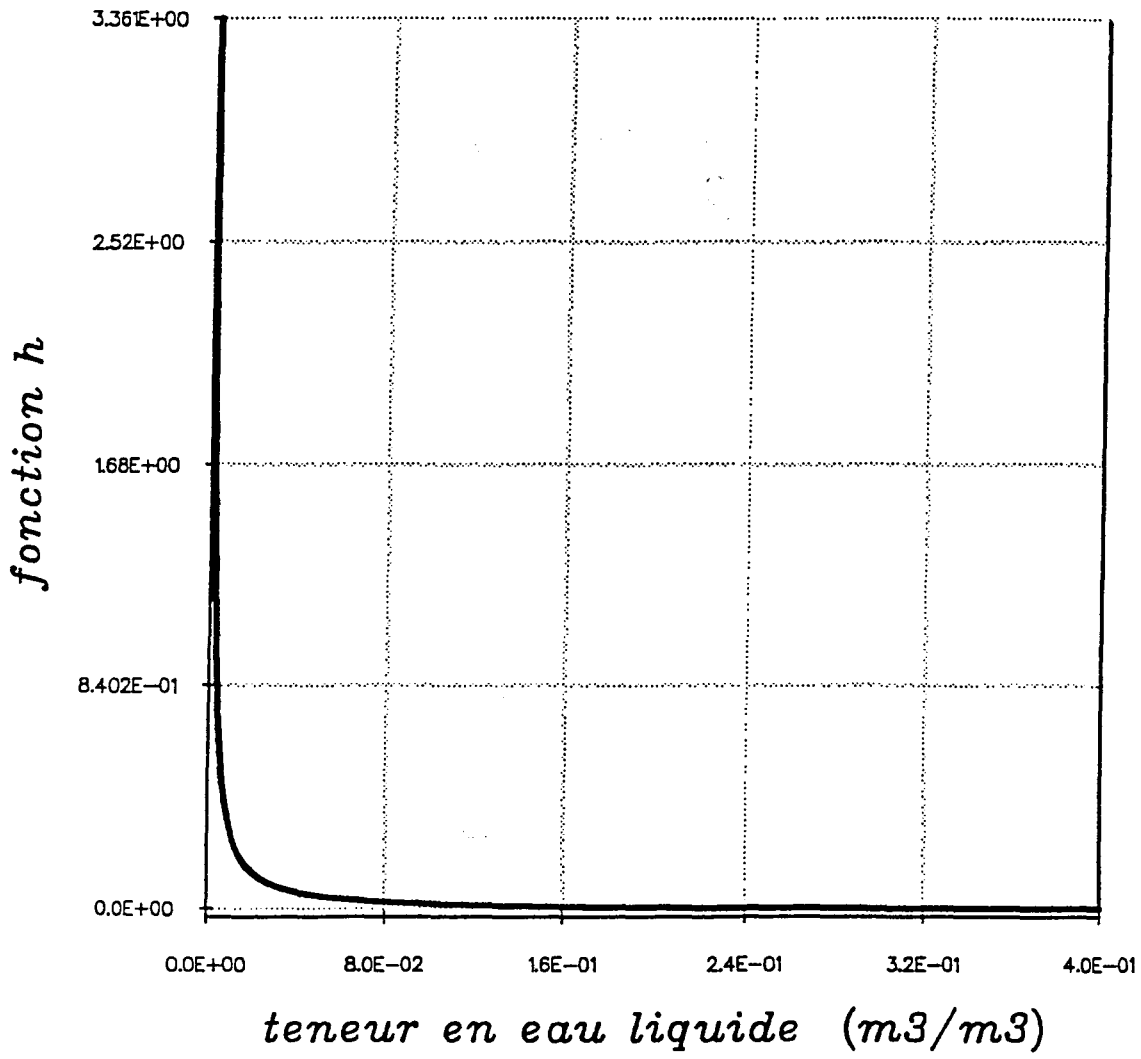


Figure 11 : fonction analytique h du type sable.

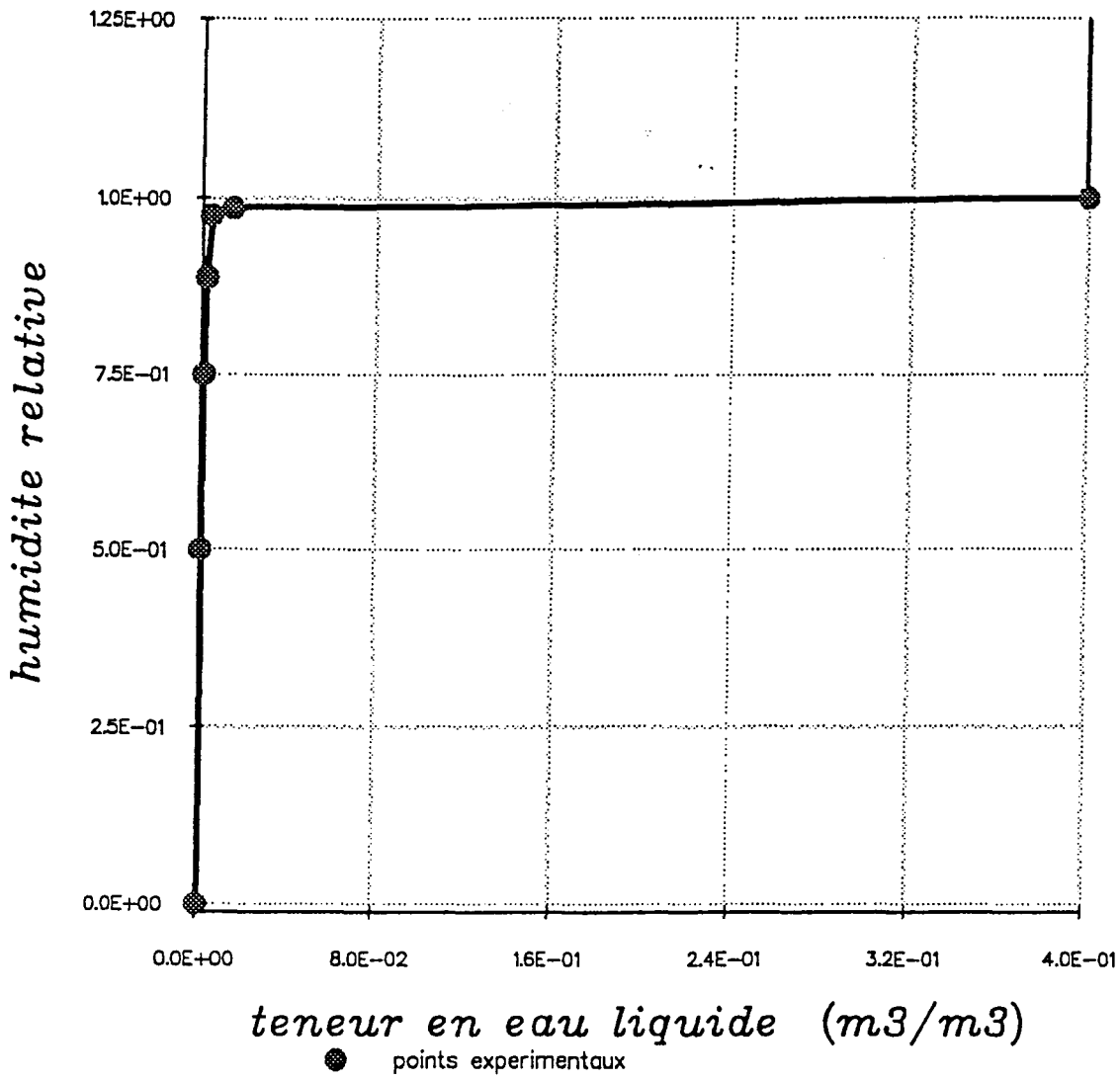


Figure 12 : Isotherme de sorption du type sable (courbe analytique).

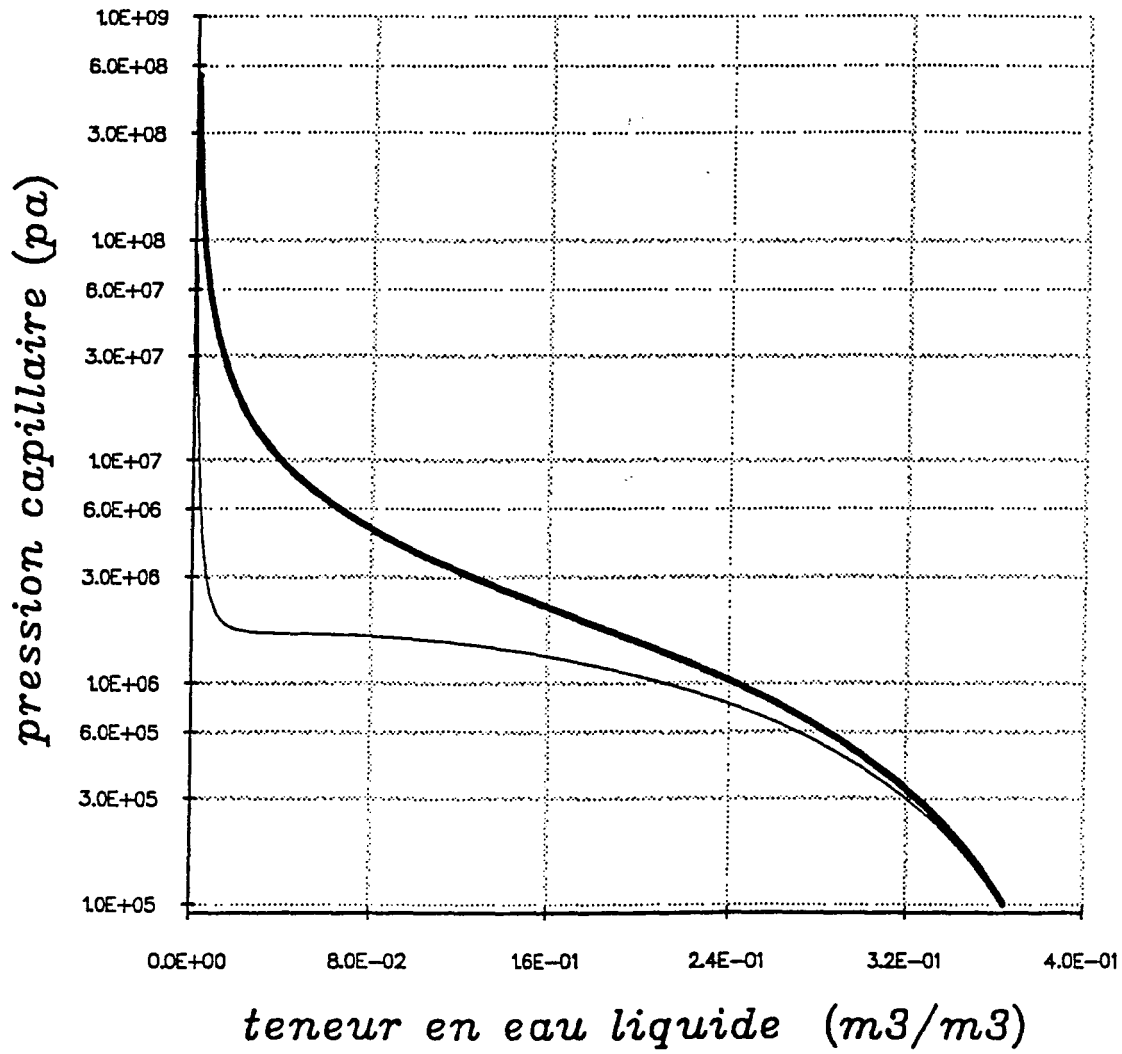


Figure 13 : Pression capillaire P_c (139) en trait fort et pression P_k (142) en trait fin du type sable à $T = 293K$ (courbes analytiques).

Dans ce paragraphe, nous avons montré comment la fonction d'interaction h , donnée essentielle de ce modèle, est accessible à l'expérience. Avant de clore le chapitre sur la modélisation, résumons les lois de comportement du modèle.

2.9. Forme finale des lois de comportement

D'après le choix des fonctions d'interaction h du paragraphe 2.8, i.e. h tend vers l'infini en $\beta_l = 0$ ou $\beta_l = \varepsilon$, la loi (104) se réduit à

$$0 < \beta_l < \varepsilon. \quad (164)$$

Les lois de comportement calculées au §2.6. se simplifient alors légèrement.

Les lois d'état relatives aux pressions des différents constituants (114) et (105) sont toujours

$$P_a = \frac{\rho_a RT}{M_a}, \quad (165)$$

$$P_v = \frac{\rho_v RT}{M_v}, \quad (166)$$

$$P_l = P_a + P_v + \frac{\rho_l RT}{M_v} \beta_l \frac{dh(\beta_l)}{d\beta_l}. \quad (167)$$

La loi de comportement (106) s'écrit en utilisant la définition de la pression P_{vs} (133) sous la forme (156) :

$$\frac{\partial \rho_l \beta_l}{\partial t} + \text{div}(\rho_l \beta_l \vec{u}_l) = \frac{RT}{k M_v} \text{Log} \frac{P_v}{P_{vs}} \quad (168)$$

avec

$$\text{Log} \frac{P_{vs}}{P_{vs}^o} = \frac{d(\beta_l h(\beta_l))}{d\beta_l}. \quad (169)$$

Ici, P_{vs}^o et h sont des fonctions données ; P_{vs}^o s'obtient par la formule de Dupré et h par la procédure du paragraphe 2.8.

Nous appellerons cette équation l'équation de dissipation sur le taux de changement de phase d'après son origine.

Le vecteur courant de chaleur \vec{q} est donné par la loi de Fourier (90)

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T. \quad (170)$$

Les vitesses d'air et de vapeur sont elles calculées par l'intermédiaire des lois de Darcy pour la phase gazeuse (143) et de Fick (146) :

$$\beta_a \vec{u}_a = -(K_g + \frac{P_v}{P_a} K_{av}) \nabla P_a - (K_g - K_{av}) \nabla P_v. \quad (171)$$

$$\beta_v \vec{u}_v = -(K_g - K_{av}) \nabla P_a - (K_g + \frac{P_a}{P_v} K_{av}) \nabla P_v, \quad (172)$$

la vitesse moyenne molaire du gaz étant définie par (7), c'est-à-dire par

$$\vec{u}_g = \frac{P_a}{P_a + P_v} \vec{u}_a + \frac{P_v}{P_a + P_v} \vec{u}_v. \quad (173)$$

Enfin, après élimination de la pression capillaire, la vitesse du liquide est donnée par la loi de Darcy classique (144)

$$\beta_l \vec{u}_l = -K_l \nabla (P_l + \frac{\rho_l RT}{M_v} h + \rho_l g z). \quad (174)$$

L'ensemble (165)-(174) constitue l'ensemble des lois de comportement indépendantes nécessaire à la modélisation mathématique des évolutions du milieu poreux considéré.

DEUXIEME PARTIE

APPROCHE NUMERIQUE

Chapitre 3 :

PROBLEME AUX LIMITES

3.1. Le problème

Le problème consiste à calculer l'évolution d'un milieu poreux dont on connaît (fig. 14)

- (i) la géométrie Ω ($\Omega \subset \mathbb{R}^N$, $N = 2$ ou 3),
- (ii) l'état initial,
- (iii) l'environnement thermodynamique.

Cet environnement thermodynamique agit sur le milieu de deux manières.

A travers la partie Γ_1 de la frontière Γ de Ω , les variables d'état sont connues (conditions de Dirichlet).

A travers la partie Γ_2 , les flux de masse et de chaleur sont des fonctions linéaires données de l'écart entre l'état thermodynamique (connu) du milieu extérieur et l'état du milieu poreux (conditions de Fourier-Robin).

Ce type de problème se rencontre par exemple quand on veut prédire l'évolution des teneurs en eau d'un ouvrage d'art en béton et en déduire l'état de fissuration du matériau. Il se rencontre aussi au niveau de l'interprétation expérimentale d'essais de sorption dans lesquels l'état du milieu poreux n'est pas uniforme en espace.

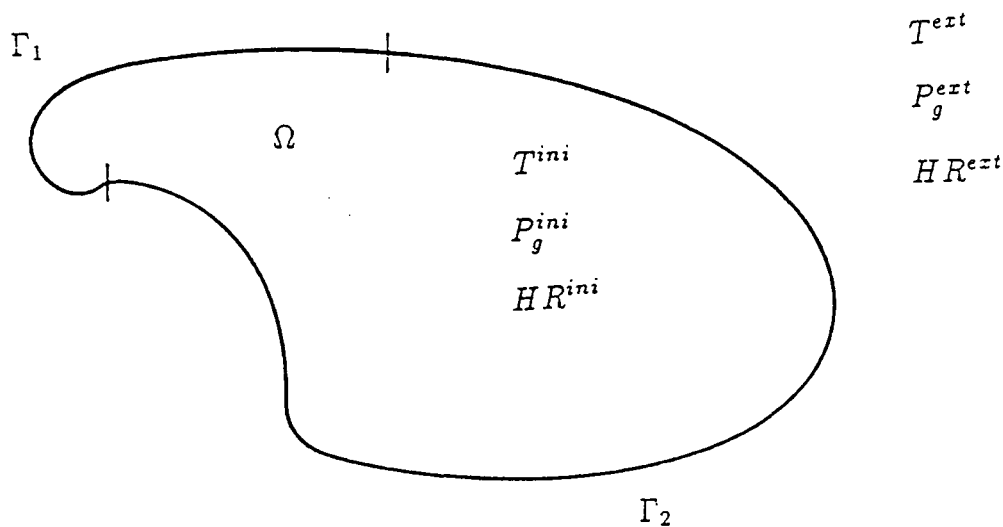


Figure 14 : Le problème physique

3.2. Les inconnues

Dans la modélisation mathématique présentée au chapitre 2, les variables d'état sont la température T , la teneur en eau β_l et les masses volumiques ρ_a et ρ_v de l'air et de la vapeur d'eau. Pour traiter de façon analogue les équations de conservation de l'air et de l'eau, nous choisissons comme inconnues de calcul la température T et les masses volumiques apparentes $\beta_a \rho_a$, $\beta_v \rho_v$ et $\beta_l \rho_l$ respectivement de l'air, de la vapeur d'eau et de l'eau

liquide. Nous rappelons que la masse volumique de l'eau liquide est supposée constante et que les teneurs β_i sont reliées par les formules

$$\beta_a = \beta_v \quad \text{et} \quad \beta_a + \beta_l = \beta_v + \beta_l = \varepsilon(x). \quad (175)$$

La porosité ε ne dépend pas du temps : le milieu poreux est supposé indéformable.

Les variables d'état distinctes de la température s'écrivent alors en fonction de nos inconnues :

$$\begin{aligned} \beta_l &= \frac{\beta_l \rho_l}{\rho_l}, \\ \rho_a &= \frac{\beta_a \rho_a}{\varepsilon - \beta_l \rho_l / \rho_l}, \\ \rho_v &= \frac{\beta_v \rho_v}{\varepsilon - \beta_l \rho_l / \rho_l}. \end{aligned}$$

Les autres variables thermodynamiques se déduisent de celles-ci à l'aide des lois de comportement introduites au chapitre 2. Nous renvoyons à ce chapitre pour leur définition.

3.3. Equations

Pour décrire l'évolution des quatre inconnues $T, \beta_a \rho_a, \beta_v \rho_v$ et $\beta_l \rho_l$, nous choisissons le système formé des quatre équations aux dérivées partielles suivantes :

(i) la conservation de l'énergie (59)

$$\sum_{i=a,v,l,s} \frac{\partial}{\partial t} (\beta_i \rho_i \varepsilon_i) + \text{div}(\beta_i \rho_i \varepsilon_i \vec{u}_i) = -\text{div} \vec{q} + r + \sum_{i=a,v,l} \sigma_i \cdot \mathbf{D}(\vec{u}_i), \quad (176)$$

(ii) la conservation de la masse d'air

$$\frac{\partial \beta_a \rho_a}{\partial t} + \text{div}(\beta_a \rho_a \vec{u}_a) = 0, \quad (177)$$

(iii) la conservation de la masse d'eau

$$\sum_{i=v,l} \left(\frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t} + \text{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i) \right) = 0, \quad (178)$$

(iv) l'équation de dissipation sur le taux de changement de phase

$$\frac{\partial \beta_l \rho_l}{\partial t} + \text{div}(\beta_l \rho_l \vec{u}_l) = \frac{RT}{kM_v} \text{Log} \frac{P_v}{P_{vs}}. \quad (179)$$

Nous simplifions l'équation de conservation de l'énergie (176) tout d'abord en supposant que la puissance des efforts intérieurs

$$\sum_{i=a,v,l} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{D}(\vec{u}_i) = - \sum_{i=a,v,l} P_i \operatorname{div} \vec{u}_i$$

est négligeable devant les termes de convection-diffusion et que le taux volumique de production de chaleur r est nul. Ensuite nous faisons apparaître les termes intervenant dans les équations de conservation de la masse en remarquant que la vitesse du squelette est nulle et que la masse volumique $\beta_s \rho_s$ est constante en temps (le squelette est supposé indéformable et immobile). Donc l'équation (176) devient

$$\begin{aligned} \sum_{i=a,v,l,s} \beta_i \rho_i \frac{\partial e_i}{\partial t} + \sum_{i=a,v,l} \left\{ e_i \left(\frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i) \right) + \beta_i \rho_i \vec{u}_i \cdot \nabla e_i \right\} \\ = - \operatorname{div} \vec{q}. \end{aligned} \quad (180)$$

Nous remplaçons les termes $\frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)$ à l'aide des équations (177), (178) et (179) et ainsi nous obtenons

$$\begin{aligned} \sum_{i=a,v,l,s} \beta_i \rho_i \frac{\partial e_i}{\partial t} + (e_l - e_v) \frac{RT}{kM_v} \operatorname{Log} \frac{P_v}{P_{vs}} + \sum_{i=a,v,l} \beta_i \rho_i \vec{u}_i \cdot \nabla e_i \\ = - \operatorname{div} \vec{q}. \end{aligned} \quad (181)$$

Finalement, en utilisant les expressions des énergies internes e_i ((83), (130))

$$e_i = c_i T, \quad i = a, l, s, \quad (182)$$

$$e_v = c_v T + L_o, \quad (183)$$

et celle du vecteur courant de chaleur \vec{q} donné par la loi de Fourier (170)

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T, \quad (184)$$

l'équation de conservation de l'énergie se met sous la forme

$$\begin{aligned} \left(\sum_{i=a,v,l,s} \beta_i \rho_i c_i \right) \frac{\partial T}{\partial t} + \left(\sum_{i=a,v,l} \beta_i \rho_i c_i \vec{u}_i \right) \cdot \nabla T - \operatorname{div} \lambda \nabla T \\ = -((c_l - c_v)T - L_o) \frac{RT}{kM_v} \operatorname{Log} \frac{P_v}{P_{vs}}. \end{aligned} \quad (185)$$

Les coefficients c_i et L_o sont constants en espace et en temps.

Le système que nous devons résoudre est ainsi modifié et prend la forme finale :

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u}_T \cdot \nabla T - \text{div} \lambda \nabla T = G(T, \beta_i \rho_i) \quad (186)$$

$$\frac{\partial \beta_a \rho_a}{\partial t} + \text{div}(\beta_a \rho_a \vec{u}_a) = 0 \quad (187)$$

$$\frac{\partial \beta_v \rho_v}{\partial t} + \text{div}(\beta_v \rho_v \vec{u}_v) + \frac{\partial \beta_l \rho_l}{\partial t} + \text{div}(\beta_l \rho_l \vec{u}_l) = 0 \quad (188)$$

$$\frac{\partial \beta_l \rho_l}{\partial t} + \text{div}(\beta_l \rho_l \vec{u}_l) = F(T, \beta_i \rho_i) \quad (189)$$

où on a posé

$$\rho c = \sum_{i=a,v,l,s} \beta_i \rho_i c_i, \quad (190)$$

$$\vec{u}_T = \sum_{i=a,v,l} \beta_i \rho_i c_i \vec{u}_i, \quad (191)$$

$$G(T, \beta_i \rho_i) = -((c_l - c_v)T - L_o) \frac{RT}{kM_v} \text{Log} \frac{P_v}{P_{vs}}, \quad (192)$$

$$F(T, \beta_i \rho_i) = \frac{RT}{kM_v} \text{Log} \frac{P_v}{P_{vs}}. \quad (193)$$

Dans ces équations, les fonctions pressions ou vitesses sont données par les lois de comportement du paragraphe 2.9., à savoir

$$\beta_a \vec{u}_a = -(K_g + \frac{P_v}{P_a} K_{av}) \nabla P_a - (K_g - K_{av}) \nabla P_v, \quad (194)$$

$$\beta_v \vec{u}_v = -(K_g - K_{av}) \nabla P_a - (K_g + \frac{P_a}{P_v} K_{av}) \nabla P_v, \quad (195)$$

$$\beta_l \vec{u}_l = -K_l \nabla (P_l + \frac{\rho_l RT}{M_v} h(\beta_l) + \rho_l g z), \quad (196)$$

$$P_a = \frac{\rho_a RT}{M_a}, \quad (197)$$

$$P_v = \frac{\rho_v RT}{M_v}, \quad (198)$$

$$P_l = P_a + P_v + \frac{\rho_l RT}{M_v} \beta_l \frac{dh(\beta_l)}{d\beta_l}. \quad (199)$$

La pression P_{vs} est enfin reliée à la pression de vapeur saturante en milieu libre $P_{vs}^o(T)$ par (169), c'est-à-dire

$$\text{Log} \frac{P_{vs}}{P_{vs}^o} = \frac{d(\beta_l h(\beta_l))}{d\beta_l}. \quad (200)$$

3.4. Données physiques

Nous énumérons ici toutes les quantités intervenant dans les équations du paragraphe précédent et déterminées a priori par une expérience physique :

- 1) la porosité ε ($0 < \varepsilon < 1$) d'où l'on déduit la teneur en squelette

$$\beta_s = 1 - \varepsilon,$$

- 2) la masse volumique du squelette ρ_s ,
3) la masse volumique de l'eau liquide

$$\rho_l = 1000 \text{ kg/m}^3,$$

- 4) les capacités calorifiques à volume constant du squelette c_s , de l'air c_a , de la vapeur d'eau c_v et de l'eau liquide c_l ,

$$c_a = 719.82 \text{ J/kg.K},$$

$$c_v = 1523.34 \text{ J/kg.K},$$

$$c_l = 4185 \text{ J/kg.K},$$

- 5) la constante des gaz parfaits

$$R = 8.314 \text{ J/mol.K},$$

- 6) les masses molaires de l'air et de l'eau

$$M_a = 29.10^{-3} \text{ kg/mol},$$

$$M_v = 18.10^{-3} \text{ kg/mol}.$$

- 7) la chaleur latente de vaporisation de l'eau

$$L_o = 3.3313 \cdot 10^6 \text{ J/kg},$$

- 8) la pression de vapeur saturante de l'eau "libre"

$$\text{Log} P_{vs}^o(T) = 68.10959 - \frac{7212.254}{T} - 6.297131 \text{ Log} T$$

avec T exprimé en degré Kelvin et P_{vs}^o en pascal.

- 9) le module de l'accélération de la pesanteur

$$g = 9.81 \text{ m/s}^2,$$

10) la fonction d'interaction $h(\beta_l)$ obtenue via l'isotherme de sorption du milieu considéré (cf. 2.8.),

11) la conductivité thermique λ du milieu poreux ($\lambda \geq 0$) qui dépend essentiellement de la teneur en eau β_l ,

12) les perméabilités de la phase gazeuse K_g ($K_g \geq 0$) et de la phase liquide K_l ($K_l \geq 0$) qui dépendent essentiellement de β_l ,

13) le coefficient de diffusion de la vapeur d'eau dans l'air K_{av} qui dépend de toutes les variables d'état,

14) le coefficient de dissipation sur le taux de changement de phase k ($k \geq 0$).

Nous avons mentionné uniquement les valeurs des quantités qui sont connues a priori. Les autres seront précisées pour les différents calculs numériques présentés dans ce document.

3.5. Conditions aux limites

Les conditions aux limites sont différentes suivant la partie Γ_1 ou Γ_2 formant la frontière Γ de Ω (fig. 14).

Sur la frontière Γ_1 , nous imposons les conditions de Dirichlet sur les variables T et $\beta_i \rho_i$:

$$\text{sur } \Gamma_1 \begin{cases} T = T^{ext}, \\ \beta_i \rho_i = (\beta_i \rho_i)^{ext}, i = a, v, l. \end{cases} \quad (201)$$

Remarque : Les valeurs $(\beta_i \rho_i)^{ext}$ peuvent être déterminées par la donnée de la température T^{ext} , de la pression de la phase gazeuse P_g^{ext} et de l'humidité relative HR^{ext} régnant à l'extérieur du milieu poreux. Pour cela, nous supposons que les points de la frontière Γ_1 correspondent à des points de la courbe de sorption à l'équilibre $HR(\beta_l)$. Cette courbe étant strictement croissante, à HR^{ext} donné correspond une unique valeur notée β_l^{ext} de la teneur en eau. La pression de vapeur est donc $P_{vs}(T^{ext}, \beta_l^{ext})$ sur Γ_1 . En reprenant la loi des gaz parfaits, nous pouvons alors calculer les variables $(\beta_i \rho_i)^{ext}$ via les formules

$$(\beta_l \rho_l)^{ext} = \beta_l^{ext} \rho_l,$$

$$(\beta_v \rho_v)^{ext} = (\varepsilon - \beta_l^{ext}) \frac{M_v}{RT^{ext}} P_{vs}(T^{ext}, \beta_l^{ext}),$$

$$(\beta_a \rho_a)^{ext} = (\varepsilon - \beta_l^{ext}) \frac{M_a}{RT^{ext}} (P_g^{ext} - P_{vs}(T^{ext}, \beta_l^{ext})).$$

Sur la frontière Γ_2 , nous imposons les conditions de Fourier-Robin, i.e. nous fixons les flux thermique et massiques par :

$$\text{sur } \Gamma_2 \begin{cases} \lambda \frac{\partial T}{\partial n} = -\alpha_T(T - T^{imp}) - q_T & (202) \\ \beta_i \rho_i \vec{u}_i \cdot \vec{n} = -\alpha_i(\beta_i \rho_i - (\beta_i \rho_i)^{imp}) - q_i, \quad i = a, v, l. & (203) \end{cases}$$

Le vecteur \vec{n} est la normale extérieure à Ω . Les coefficients α_T et α_i sont donnés ainsi que les flux q_T et q_i et les valeurs imposées T^{imp} et $(\beta_i \rho_i)^{imp}$.

3.6. Conditions initiales

A l'état initial, les variables T et $\beta_i \rho_i$ en tout point de Ω sont connues et égales respectivement aux valeurs

$$T^{ini}, (\beta_i \rho_i)^{ini}, i = a, v, l.$$

Remarque : Dans les calculs numériques effectués, nous avons supposé que le milieu poreux était initialement en équilibre thermodynamique. Les valeurs $(\beta_i \rho_i)^{ini}$ ont été calculées à partir de T^{ini} , P_g^{ini} et HR^{ini} d'une façon similaire à celle décrite dans la remarque du paragraphe 3.5. Ce type d'état initial correspond en effet à la plupart des situations expérimentales rencontrées en pratique.

Chapitre 4 :

APPROXIMATION EN ESPACE

4.1. Définition du maillage

Pour obtenir les solutions numériques du système décrit en 3.3., nous introduisons

- (i) $T_h = \cup_j T_j$ une triangulation régulière (au sens défini par P.G. CIARLET [12]) de $\Omega \subset \mathbb{R}^2$,
- (ii) l'espace des fonctions test V_h de dimension finie

$$V_h = \{v \in C^0(\Omega), v|_{T_j} \in P_1, v|_{\Gamma_1} = 0\}. \quad (204)$$

A tout sommet P_i de la triangulation T_h , on associe aussi une cellule \mathcal{C}_i définie par les médianes, non issues de P_i , des triangles dont P_i est sommet (fig. 15 et fig. 16).

On effectue une construction similaire si $\Omega \subset \mathbb{R}^3$.

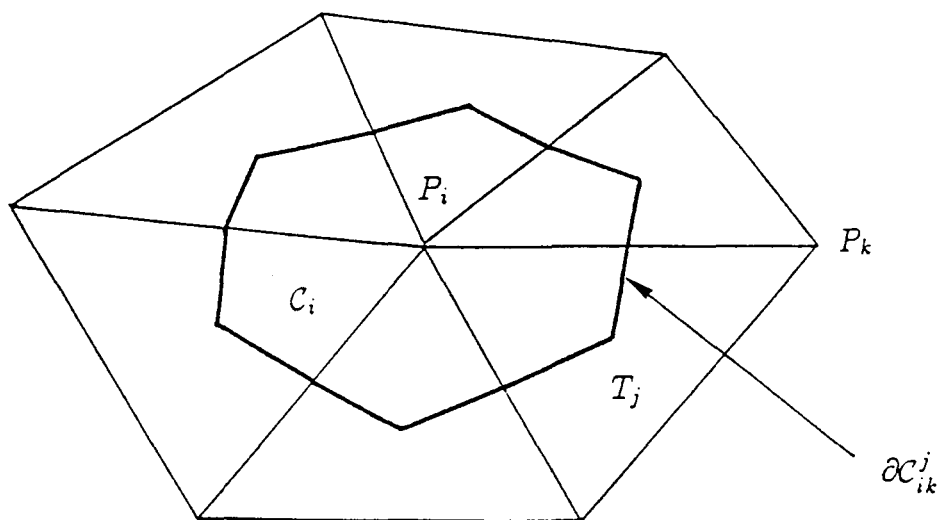


Figure 15 : La cellule \mathcal{C}_i associée au sommet P_i interne à Ω .

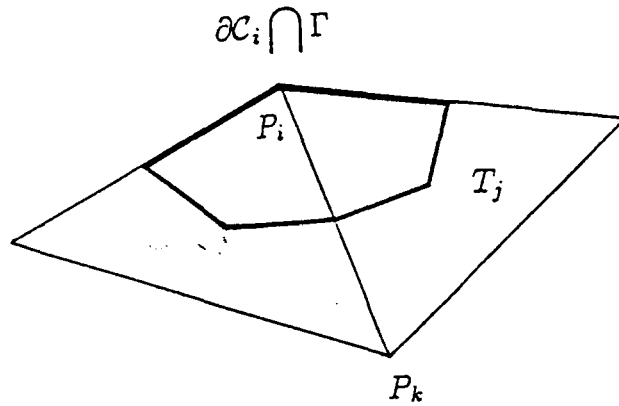


Figure 16 : La cellule C_i associée au sommet P_i de la frontière de Ω .

4.2. Approximation de l'équation en température

Après multiplication par une fonction test v et intégration par parties, l'équation en température (186) s'écrit sous la forme variationnelle classique

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} v + \int_{\Omega} \vec{u}_T \cdot \nabla T v + \int_{\Omega} \lambda \nabla T \cdot \nabla v - \int_{\Gamma_2} \lambda \nabla T \cdot \vec{n} v \\ & = \int_{\Omega} G(T, \beta_i \rho_i) v, \quad \forall v \in V_h. \end{aligned} \quad (205)$$

Cette équation va être discrétisée en espace par éléments finis pour les termes de convection et de diffusion et par volumes finis pour les termes d'évolution et de chaleur latente G . La discrétisation par éléments finis est classique pour ce type d'équation. La discrétisation par volumes finis a été introduite pour les autres équations (cf. §4.3.). Nous l'avons adoptée pour la température pour garder une certaine homogénéité vis-à-vis des autres variables. Ainsi, en règle générale, les variables sont constantes par cellule tandis que leur gradient et aussi les vitesses des constituants, eux, sont constants par triangle T_j . Cette approche utilise donc en parallèle deux maillages duaux l'un de l'autre au sens de Voronoï. Elle est à rapprocher des techniques de discrétisation à "staggered grid" utilisées par Sanders ou par Stoufflet-Rostand [43].

4.2.1. Terme de convection

Sachant que la vitesse \vec{u}_T et le gradient ∇T sont constants par triangle,

calculons le terme de convection pour $v \in V_h$

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \vec{u}_T \cdot \nabla T v &= \sum_{T_j} \int_{T_j} \vec{u}_T \cdot \nabla T v \\
&= \sum_{T_j} \vec{u}_T(T_j) \cdot \nabla T(T_j) \int_{T_j} v \\
&= \sum_{T_j} \vec{u}_T(T_j) \cdot \nabla T(T_j) \left(\sum_{P_i \in T_j} \frac{1}{3} \mathcal{A}(T_j) v(P_i) \right) \\
&= \sum_{P_i} v(P_i) \left(\sum_{T_j \ni P_i} \frac{1}{3} \mathcal{A}(T_j) \vec{u}_T(T_j) \cdot \nabla T(T_j) \right).
\end{aligned} \tag{206}$$

Le terme $\mathcal{A}(T_j)$ dénote l'aire du triangle T_j . Le gradient $\nabla T(T_j)$ s'exprime à l'aide des fonctions de base φ_m , fonction affine par triangle ayant pour valeur 1 au noeud P_m et 0 à tous les autres noeuds. Ainsi nous obtenons finalement

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \vec{u}_T \cdot \nabla T v &= \sum_{P_i} v(P_i) \left[\sum_{T_j \ni P_i} \frac{1}{3} \mathcal{A}(T_j) \vec{u}_T(T_j) \cdot \left(\sum_{P_m} T(P_m) \nabla \varphi_m(T_j) \right) \right] \\
&= \sum_{P_i} v(P_i) \\
&\quad \left[\sum_{T_j \ni P_i} \left(\sum_{P_m \in T_j} \frac{1}{3} \mathcal{A}(T_j) \vec{u}_T(T_j) \cdot \nabla \varphi_m(T_j) T(P_m) \right) \right].
\end{aligned} \tag{207}$$

4.2.2. Terme de diffusion

Ici, nous considérons λ constant par triangle et le terme de diffusion devient donc tout simplement

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \lambda \nabla T \cdot \nabla v &= \int_{\Omega} \sum_{P_i} \lambda(P_i) T(P_i) \nabla \varphi_i \cdot \nabla v \\
&= \sum_{P_i} \lambda(P_i) T(P_i) \left(\sum_{T_j \ni P_i} \int_{T_j} \nabla \varphi_i \cdot \nabla v \right).
\end{aligned} \tag{208}$$

4.2.3. Terme d'évolution et de chaleur latente

Pour la discrétisation par volumes finis, à toute cellule \mathcal{C}_i , on associe sa fonction caractéristique χ_i ($\chi_i = 1$ sur \mathcal{C}_i et 0 ailleurs) et on définit l'opérateur L_h par

$$L_h(v) = \sum_{P_i} v(P_i) \chi_i, \forall v \in V_h. \tag{209}$$

Nous posons alors

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} v - \int_{\Omega} G(T, \beta_i \rho_i) v &\simeq \int_{\Omega} (L_h(\rho c \frac{\partial T}{\partial t}) - L_h(G)) L_h(v) \\ &= \sum_{C_i} \mathcal{A}(C_i) (\rho c(P_i) \frac{\partial T}{\partial t}(P_i) - G(P_i)) v(P_i). \end{aligned} \quad (210)$$

La capacité calorifique ρc est prise constante par cellule.

4.2.4. Terme de bord

Le terme de bord se calcule à l'aide de la condition de Fourier-Robin appliquée à Γ_2 (202) :

$$- \int_{\Gamma_2} \lambda \nabla T \cdot \vec{n} v = \int_{\Gamma_2} \alpha_T (T - T^{imp}) v + q_T v. \quad (211)$$

L'étude de la convergence de ce schéma sera traitée directement au paragraphe 6.2., sous des hypothèses simplificatrices.

4.3. Approximation des autres équations

Les équations de "l'air" (187), de "l'eau" (188) et de "dissipation" (189) sont discrétisées par volumes finis de manière à rester conservatif au niveau des flux. La modélisation des transferts d'humidité nécessite une grande précision pour le calcul des flux de masse. Avec les volumes finis, la conservation de la masse est parfaitement satisfaite sur chaque cellule C_i .

Nous reprenons le traitement précédent pour les termes d'évolution et le second membre F ; par contre nous introduisons un décentrage paramétré au niveau du terme de transport [3]. Ce décentrage assure une meilleure stabilité de diffusion de ce schéma dans le cas de grandes vitesses.

4.3.1. Equations discrétisées par volumes finis

Nous intégrons les trois équations (187), (188) et (189) sur chaque cellule C_i et nous remplaçons les intégrales volumiques par des intégrales de surface en appliquant le théorème d'Ostrogradski. Après cette transformation, ces équations deviennent

$$\begin{cases} \int_{C_i} \frac{\partial \beta_a \rho_a}{\partial t} + \int_{\partial C_i} \beta_a \rho_a \vec{u}_a \cdot \vec{n} = 0, \\ \int_{C_i} \frac{\partial \beta_v \rho_v}{\partial t} + \int_{\partial C_i} \beta_v \rho_v \vec{u}_v \cdot \vec{n} + \int_{\partial C_i} \frac{\partial \beta_l \rho_l}{\partial t} + \int_{\partial C_i} \beta_l \rho_l \vec{u}_l \cdot \vec{n} = 0, \\ \int_{C_i} \frac{\partial \beta_l \rho_l}{\partial t} + \int_{\partial C_i} \beta_l \rho_l \vec{u}_l \cdot \vec{n} = \int_{C_i} F(T, \beta_r \rho_r). \end{cases} \quad (212)$$

Le bord de la cellule, notée $\partial\mathcal{C}_i$, se décompose en union de segments $\partial\mathcal{C}_{ik}^j$ intérieurs à Ω , inclus dans les éléments T_j séparant le sommet P_i du sommet P_k (voir fig. 15) et en une partie $\partial\mathcal{C}_i \cap \Gamma$ de la frontière de Ω (si elle est non vide !) (voir fig. 16) :

$$\partial\mathcal{C}_i = \left(\bigcup_{T_j \ni P_i} \bigcup_k \partial\mathcal{C}_{ik}^j \right) \cup (\partial\mathcal{C}_i \cap \Gamma). \quad (213)$$

Toujours en utilisant l'opérateur L_h (209), nous approximons les intégrales de volume du système (212) par

$$\int_{\mathcal{C}_i} X \simeq \int_{\mathcal{C}_i} L_h(X) = \mathcal{A}(\mathcal{C}_i)X(P_i). \quad (214)$$

Le décentrage paramétré s'applique aux différents termes de flux du type

$$\int_{\partial\mathcal{C}_i} \beta\rho\vec{u}\cdot\vec{n} = \int_{\partial\mathcal{C}_i} (\beta\rho)^*\vec{u}\cdot\vec{n} = \sum_{T_j \ni P_i} \sum_k \int_{\partial\mathcal{C}_{ik}^j} (\beta\rho)^*\vec{u}\cdot\vec{n} + \int_{\partial\mathcal{C}_i \cap \Gamma} (\beta\rho)^*\vec{u}\cdot\vec{n} \quad (215)$$

avec

$$\begin{aligned} (\beta\rho)^* &= \left[\frac{1}{2} + \alpha_c \text{sg} \left(\int_{\partial\mathcal{C}_{ik}^j} \vec{u}\cdot\vec{n} \right) \right] (\beta\rho)(P_i) \\ &+ \left[\frac{1}{2} - \alpha_c \text{sg} \left(\int_{\partial\mathcal{C}_{ik}^j} \vec{u}\cdot\vec{n} \right) \right] (\beta\rho)(P_k) \quad \text{sur } \partial\mathcal{C}_{ik}^j, \end{aligned} \quad (216)$$

$$(\beta\rho)^*\vec{u}\cdot\vec{n} = -\alpha [(\beta\rho)(P_i) - (\beta\rho)^{imp}] - q \quad \text{sur } \partial\mathcal{C}_i \cap \Gamma_2, \quad (217)$$

où sg désigne la fonction signe. Le coefficient α_c est le paramètre de décentrage ($0 \leq \alpha_c \leq 0.5$). Si α_c est nul, le schéma est centré : la valeur de la variable sur l'arête $\partial\mathcal{C}_{ik}^j$ est la moyenne de celles aux deux sommets P_i et P_k . Si α_c est égal à 0.5, le schéma est totalement décentré : la valeur de la variable sur l'arête est celle du sommet P_i ou P_k d'où provient le flux de masse, la valeur amont.

La variable $(\beta\rho)^*$ n'est pas à définir sur la frontière Γ_1 puisque le système (212) n'apporte rien si $P_i \in \Gamma_1$, les variables étant connues en ce point (201). La condition sur Γ_2 (217) est naturelle par rapport à la condition de Fourier-Robin qui lui est imposée (203).

En remplaçant les intégrales par leur expression ((214), (215)), le système discrétisé en espace est finalement :

$$\mathcal{A}(\mathcal{C}_i) \frac{\partial \beta_a \rho_a}{\partial t}(P_i) + \sum_{T_j \ni P_i} \sum_k \int_{\partial\mathcal{C}_{ik}^j} (\beta_a \rho_a)^* \vec{u}_a \cdot \vec{n} + \int_{\partial\mathcal{C}_i \cap \Gamma} (\beta_a \rho_a)^* \vec{u}_a \cdot \vec{n} = 0, \quad (218)$$

$$\begin{aligned}
& \mathcal{A}(\mathcal{C}_i) \frac{\partial \beta_v \rho_v}{\partial t}(P_i) + \sum_{T_j \ni P_i} \sum_k \int_{\partial \mathcal{C}_{ik}^j} (\beta_v \rho_v)^* \vec{u}_v \cdot \vec{n} + \int_{\partial \mathcal{C}_i \cap \Gamma} (\beta_v \rho_v)^* \vec{u}_v \cdot \vec{n} \\
& + \mathcal{A}(\mathcal{C}_i) \frac{\partial \beta_l \rho_l}{\partial t}(P_i) + \sum_{T_j \ni P_i} \sum_k \int_{\partial \mathcal{C}_{ik}^j} (\beta_l \rho_l)^* \vec{u}_l \cdot \vec{n} + \int_{\partial \mathcal{C}_i \cap \Gamma} (\beta_l \rho_l)^* \vec{u}_l \cdot \vec{n} = 0,
\end{aligned} \tag{219}$$

$$\mathcal{A}(\mathcal{C}_i) \frac{\partial \beta_l \rho_l}{\partial t}(P_i) + \sum_{T_j \ni P_i} \sum_k \int_{\partial \mathcal{C}_{ik}^j} (\beta_l \rho_l)^* \vec{u}_v \cdot \vec{n} + \int_{\partial \mathcal{C}_i \cap \Gamma} (\beta_l \rho_l)^* \vec{u}_v \cdot \vec{n} \tag{220}$$

$$= \mathcal{A}(\mathcal{C}_i) F(P_i).$$

4.3.2. Schéma conservatif

Montrons que ce schéma est conservatif, c'est-à-dire pour tout sous-ensemble $\Omega_1 = \bigcup_{i \in I} \mathcal{C}_i \subset \Omega$ et pour tous temps t_o, t_1 ($t_o < t_1$), on a

$$\left[\int_{\Omega_1} L_h(\beta_a \rho_a) \right]_{t_o}^{t_1} = - \int_{t_o}^{t_1} \int_{\partial \Omega_1} (\beta_a \rho_a)^* \vec{u}_a \cdot \vec{n} \tag{221}$$

et

$$\left[\int_{\Omega_1} L_h(\beta_v \rho_v + \beta_l \rho_l) \right]_{t_o}^{t_1} = - \int_{t_o}^{t_1} \int_{\partial \Omega_1} (\beta_v \rho_v)^* \vec{u}_v \cdot \vec{n} + (\beta_l \rho_l)^* \vec{u}_l \cdot \vec{n}. \tag{222}$$

Autrement dit, montrons que la conservation de la masse d'air et d'eau est satisfaite dans Ω_1 .

Preuve : Il suffit d'additionner les équations de conservation de la masse d'air (218) (resp. de la masse d'eau (219)) pour chaque cellule $i \in I$ et d'intégrer en temps. Les termes de flux internes à Ω_1 s'annulent alors deux à deux par construction puisque le calcul $\int_{\partial \mathcal{C}_{ik}^j} (\beta \rho)^* |\vec{u} \cdot \vec{n}|$ ne dépend pas de la cellule \mathcal{C}_i ou \mathcal{C}_k considérée ($\int_{\partial \mathcal{C}_{ik}^j} (\beta \rho)^* \vec{u} \cdot \vec{n} = - \int_{\partial \mathcal{C}_{ki}^j} (\beta \rho)^* \vec{u} \cdot \vec{n}$ par construction).

4.3.3. Analyse du schéma par volumes finis

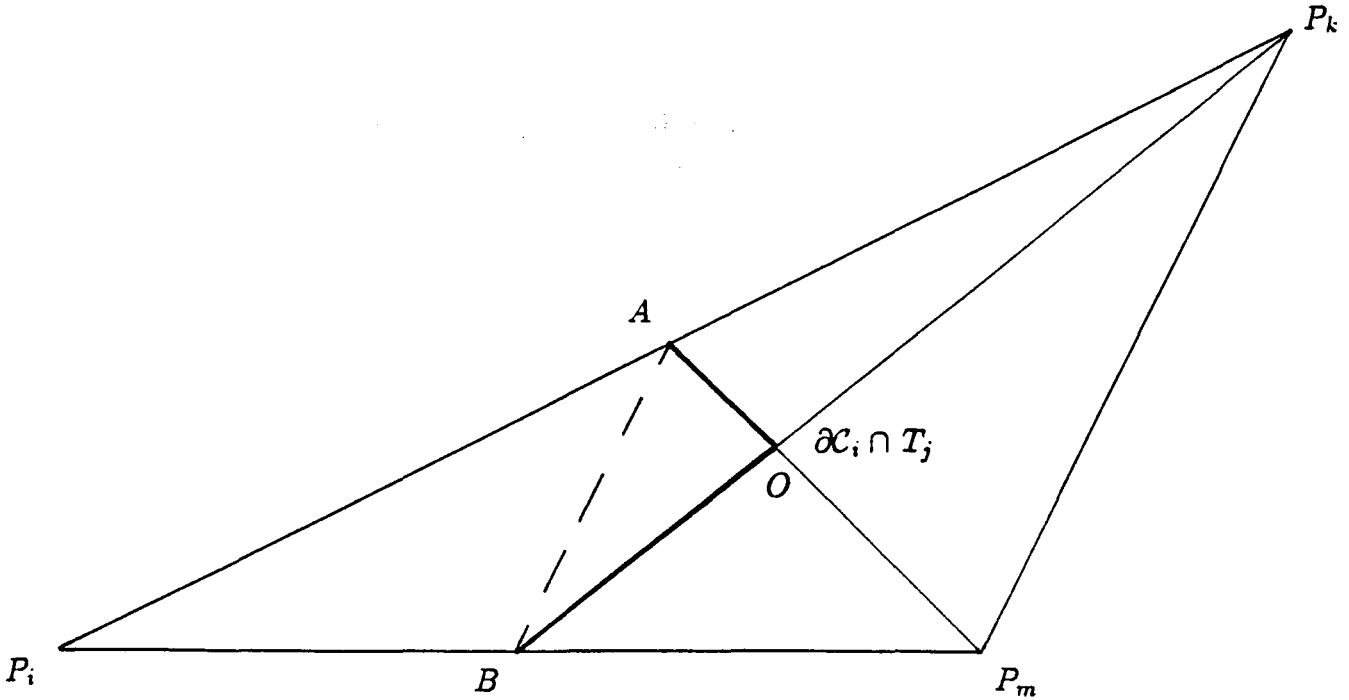
Dans ce paragraphe, nous comparons les deux discrétisations volumes finis et éléments finis appliquées aux termes de flux. Pour cela, démontrons tout d'abord les deux lemmes suivants qui sont le fruit de communications personnelles de A. DERVIEUX et M.H. LALLEMAND.

Lemme 1 : Soit T_j un triangle dont P_i est un sommet, soit φ_i la fonction de base affine associée au noeud P_i , alors on a l'égalité

$$\int_{T_j} \nabla \varphi_i ds = - \int_{\partial \mathcal{C}_i \cap T_j} \vec{n} dl$$

où $\partial\mathcal{C}_i$ est le bord de la cellule \mathcal{C}_i et \vec{n} la normale extérieure à \mathcal{C}_i .

Preuve : Considérons les notations de la figure représentant le triangle T_j :



Les points A et B sont respectivement les milieux des segments $P_i P_k$ et $P_i P_m$. On obtient alors

$$\begin{aligned} \int_{T_j} \nabla\varphi_i ds &= \mathcal{A}(T_j) \nabla\varphi_i(T_j) \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{L}(P_k P_m) \mathcal{H}_i \nabla\varphi_i(T_j) \end{aligned}$$

où $\mathcal{L}(P_k P_m)$ désigne la longueur du segment $P_k P_m$ et \mathcal{H}_i est la longueur de la hauteur du triangle T_j issue de P_i . D'après le théorème de Thalès l'intégrale du gradient de φ_i devient

$$\begin{aligned} \int_{T_j} \nabla\varphi_i ds &= \mathcal{L}(AB) \mathcal{H}_i \nabla\varphi_i(T_j) \\ &= \mathcal{L}(AB) \vec{n}_{AB} \end{aligned}$$

où \vec{n}_{AB} est la normale à AB extérieure au triangle AOB .

Finalement, la formule du gradient nous permet de conclure :

$$\int_{T_j} \nabla\varphi_i ds = \int_{AB} \vec{n}_{AB} dl = - \int_{\partial\mathcal{C}_i \cap T_j} \vec{n} dl$$

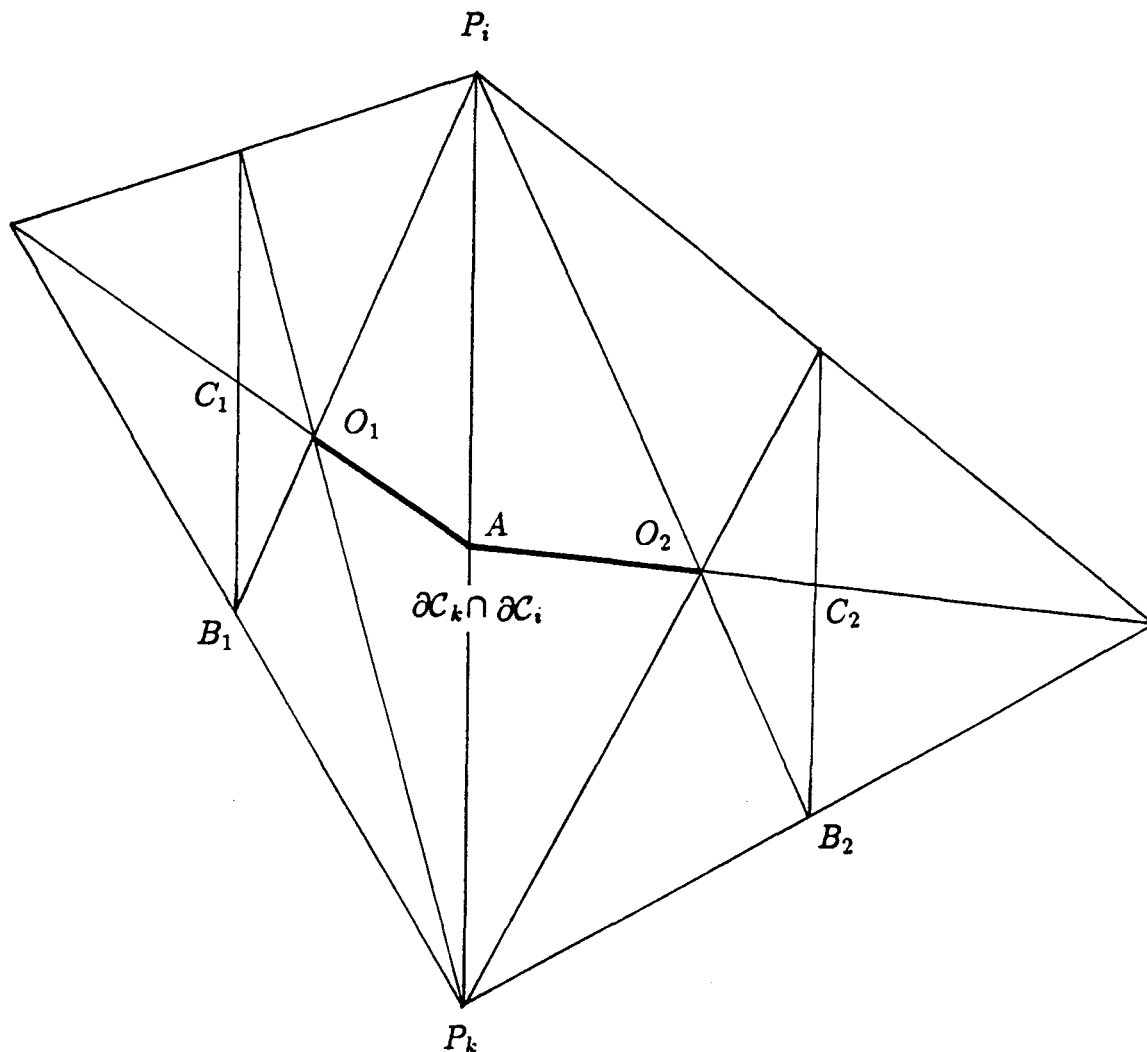
si l'on note \vec{n} la normale extérieure au triangle AOB , c'est-à-dire la normale à $\partial C_i \cap T_j$ extérieure à la cellule C_i .

Lemme 2 : Soient φ_i et φ_k les fonctions de base affines associées à deux points voisins intérieurs P_i et P_k de la triangulation de géométrie Ω , alors on a :

$$2 \int \varphi_i \nabla \varphi_k ds = - \int_{\partial C_k \cap \partial C_i} \vec{n}_k dl$$

où \vec{n}_k est la normale extérieure à C_k .

Preuve : Considérons les notations de la figure représentant les deux triangles T_1 et T_2 ayant chacun pour sommet P_i et P_k



Les points O_1 et O_2 sont les centres de gravité des triangles T_1 et T_2 .

On obtient alors

$$\begin{aligned}
2 \int_{\Omega} \varphi_i \nabla \varphi_k ds &= 2 \int_{T_1} \varphi_i \nabla \varphi_k ds + 2 \int_{T_2} \varphi_i \nabla \varphi_k ds \\
&= 2 \nabla \varphi_k(T_1) \int_{T_1} \varphi_i ds + 2 \nabla \varphi_k(T_2) \int_{T_2} \varphi_i ds \\
&= 2 \nabla \varphi_k(T_1) \frac{\mathcal{A}(T_1)}{3} + 2 \nabla \varphi_k(T_2) \frac{\mathcal{A}(T_2)}{3} \\
&= \frac{2}{3} \int_{T_1} \nabla \varphi_k ds + \frac{2}{3} \int_{T_2} \nabla \varphi_k ds.
\end{aligned}$$

En utilisant le lemme 1, nous avons

$$\begin{aligned}
2 \int_{\Omega} \varphi_i \nabla \varphi_k ds &= -\frac{2}{3} \int_{\partial \mathcal{C}_k \cap T_1} \vec{n}_k dl - \frac{2}{3} \int_{\partial \mathcal{C}_k \cap T_2} \vec{n}_k dl \\
&= -\frac{2}{3} \int_{\partial \mathcal{C}_k \cap \partial \mathcal{C}_i} \vec{n}_k dl - \frac{2}{3} \int_{B_1 O_1} \vec{n}_k dl - \frac{2}{3} \int_{O_2 B_2} \vec{n}_k dl.
\end{aligned}$$

La formule du gradient appliquée aux triangles $O_1 C_1 B_1$ et $O_2 C_2 B_2$ de normales extérieures \vec{n}_1 et \vec{n}_2 nous permet d'écrire

$$\begin{aligned}
2 \int_{\Omega} \varphi_i \nabla \varphi_k ds &= \\
&= -\frac{2}{3} \int_{\partial \mathcal{C}_k \cap \partial \mathcal{C}_i} \vec{n}_k dl - \frac{2}{3} \int_{(O_1 C_1) \cup (C_1 B_1)} \vec{n}_1 dl - \frac{2}{3} \int_{(B_2 C_2) \cup (C_2 O_2)} \vec{n}_2 dl.
\end{aligned}$$

Remarquons par un simple raisonnement géométrique que

$$\overrightarrow{C_1 B_1} = \frac{1}{2} \overrightarrow{A P_k} = \overrightarrow{C_2 B_2},$$

$$\overrightarrow{C_1 O_1} = \frac{1}{2} \overrightarrow{O_1 A},$$

$$\overrightarrow{C_2 O_2} = \frac{1}{2} \overrightarrow{O_2 A}.$$

D'où nous déduisons

$$\begin{aligned}
2 \int_{\Omega} \varphi_i \nabla \varphi_k ds &= -\frac{2}{3} \int_{\partial \mathcal{C}_k \cap \partial \mathcal{C}_i} \vec{n}_k dl - \frac{1}{3} \int_{O_1 A} \vec{n}_1 dl - \frac{1}{3} \int_{O_2 A} \vec{n}_2 dl \\
&= - \int_{\partial \mathcal{C}_k \cap \partial \mathcal{C}_i} \vec{n}_k dl.
\end{aligned}$$

Proposition 1 : Si le vecteur \vec{u} est constant par triangle, les approximations éléments finis $P1$ et volumes finis duaux du terme en $\text{div} \vec{u}$ sont identiques.

Preuve : Pour un sommet P_i intérieur de Ω , l'approximation de $div\vec{u}$ par éléments finis devient par intégration par parties

$$\begin{aligned}\int_{\Omega} \varphi_i div\vec{u} ds &= - \int_{\Omega} \nabla\varphi_i \cdot \vec{u} ds \\ &= - \sum_{T_j} \int_{T_j} \nabla\varphi_i \cdot \vec{u} ds \\ &= - \sum_{T_j} \vec{u}(T_j) \int_{T_j} \nabla\varphi_i ds.\end{aligned}$$

D'après le lemme 1, nous avons

$$\begin{aligned}\int_{\Omega} \varphi_i div\vec{u} ds &= \sum_{T_j} \vec{u}(T_j) \int_{\partial c_i \cap T_j} \vec{n} dl \\ &= \sum_{T_j} \int_{\partial c_i \cap T_j} \vec{u} \cdot \vec{n} dl \\ &= \int_{\partial c_i} \vec{u} \cdot \vec{n} dl \\ &= \int_{c_i} div\vec{u} dl.\end{aligned}$$

Cette dernière expression est bien celle utilisée par l'approximation volumes finis de $div\vec{u}$.

Proposition 2 : Si le vecteur \vec{u} est linéaire par triangle, les approximations éléments finis P1 et volumes finis duaux du terme en $div\vec{u}$ sont identiques.

Preuve : Pour un sommet P_i intérieur de Ω , l'approximation de $div\vec{u}$ par éléments finis devient après intégration par parties

$$\int_{\Omega} \varphi_i div\vec{u} ds = - \int_{\Omega} \nabla\varphi_i \cdot \vec{u} ds.$$

Les vecteur \vec{u} étant linéaire par triangle, il s'écrit à l'aide des fonctions de base φ_k de la façon suivante :

$$\vec{u} = \sum_k \vec{u}(P_k) \varphi_k.$$

Ainsi nous obtenons

$$\begin{aligned}\int_{\Omega} \varphi_i div\vec{u} ds &= - \sum_k \int_{\Omega} \vec{u}(P_k) \varphi_k \nabla\varphi_i ds \\ &= -\vec{u}(P_i) \int_{\Omega} \varphi_i \nabla\varphi_i ds - \sum_{k \neq i} \vec{u}(P_k) \int_{\Omega} \varphi_k \nabla\varphi_i ds.\end{aligned}$$

En remarquant que, si P_i est un sommet intérieur,

$$\int_{\Omega} \varphi_k \nabla \varphi_i ds + \int_{\Omega} \varphi_i \nabla \varphi_k ds = \int_{\Omega} \nabla(\varphi_i \varphi_k) ds = 0,$$

nous avons

$$\int_{\Omega} \varphi_i \operatorname{div} \vec{u} ds = -\vec{u}(P_i) \int_{\Omega} \varphi_i \nabla \varphi_i ds + \sum_{k \neq i} \vec{u}(P_k) \int_{\Omega} \varphi_i \nabla \varphi_k ds.$$

La propriété des fonctions de base,

$$\sum_k \varphi_k = 1,$$

permet d'écrire

$$\int_{\Omega} \varphi_i \operatorname{div} \vec{u} ds = \sum_{k \neq i} (\vec{u}(P_i) + \vec{u}(P_k)) \int_{\Omega} \varphi_i \nabla \varphi_k ds.$$

Nous concluons à l'aide du lemme 2

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \varphi_i \operatorname{div} \vec{u} ds &= - \sum_{k \neq i} \frac{\vec{u}(P_i) + \vec{u}(P_k)}{2} \int_{\partial \mathcal{C}_k \cap \partial \mathcal{C}_i} \vec{n}_k dl \\ &= \sum_{k \neq i} \frac{\vec{u}(P_i) + \vec{u}(P_k)}{2} \int_{\partial \mathcal{C}_k \cap \partial \mathcal{C}_i} \vec{n}_i dl, \end{aligned}$$

où \vec{n}_i est la normale extérieure à la cellule \mathcal{C}_i . Cette dernière expression est celle obtenue par le schéma des volumes finis centrés.

Proposition 3 : Si le vecteur \vec{u} est constant par triangle et si le scalaire c est constant par cellule, les approximations éléments finis $P1$ et volumes finis duaux du terme en $\operatorname{div}(c\vec{u})$ sont différentes.

Preuve : Pour un sommet P_i intérieur de Ω , l'approximation de $div(c\vec{u})$ par éléments finis devient après intégration par parties

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \varphi_i div(c\vec{u}) ds &= - \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \cdot c\vec{u} ds \\
&= - \sum_{T_j \ni P_i} \int_{T_j} \nabla \varphi_i \cdot c\vec{u} ds \\
&= - \sum_{T_j \ni P_i} \vec{u}(T_j) \int_{T_j} c \nabla \varphi_i ds \\
&= - \sum_{T_j \ni P_i} \vec{u}(T_j) \sum_{P_k \in T_j} c(\mathcal{C}_k) \mathcal{A}(T_j \cap \mathcal{C}_k) \nabla \varphi_i(T_j) \\
&= - \sum_{T_j \ni P_i} \vec{u}(T_j) \sum_{P_k \in T_j} c(\mathcal{C}_k) \frac{\mathcal{A}(T_j)}{3} \nabla \varphi_i(T_j) \\
&= - \sum_{T_j \ni P_i} \vec{u}(T_j) \sum_{P_k \in T_j} \frac{1}{3} c(\mathcal{C}_k) \int_{T_j} \nabla \varphi_i ds.
\end{aligned}$$

D'après le lemme 1, nous obtenons

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} \varphi_i div(c\vec{u}) ds &= \sum_{T_j \ni P_i} \vec{u}(T_j) \sum_{P_k \in T_j} \frac{1}{3} c(\mathcal{C}_k) \int_{\partial \mathcal{C}_k \cap T_j} \vec{n} dl \\
&= \sum_{T_j \ni P_i} \vec{u}(T_j) \left\{ \frac{1}{3} \sum_{P_k \in T_j} c(\mathcal{C}_k) \right\} \int_{\partial \mathcal{C}_i \cap T_j} \vec{n} dl.
\end{aligned}$$

Or la discrétisation par volumes finis transforme le terme $div(c\vec{u})$ (cf. (215)) en

$$\begin{aligned}
&\sum_{T_j \ni P_i} \sum_{\substack{P_k \in T_j \\ k \neq i}} \int_{\partial \mathcal{C}_{ik}^j} c^* \vec{u} \cdot \vec{n} dl = \\
&\sum_{T_j \ni P_i} \vec{u}(T_j) \left\{ \sum_{\substack{P_k \in T_j \\ k \neq i}} c^*(\partial \mathcal{C}_{ik}^j) \int_{\partial \mathcal{C}_{ik}^j} \vec{n} \cdot dl \right.
\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
c^*(\partial \mathcal{C}_{ik}^j) &= \left[\frac{1}{2} + \alpha_c \operatorname{sg} \left(\int_{\partial \mathcal{C}_{ik}^j} \vec{u} \cdot \vec{n} dl \right) \right] c(P_i) \\
&\quad + \left[\frac{1}{2} - \alpha_c \operatorname{sg} \left(\int_{\partial \mathcal{C}_{ik}^j} \vec{u} \cdot \vec{n} dl \right) \right] c(P_j)
\end{aligned}$$

et

$$0 \leq \alpha_c \leq 1.$$

Pour que les expressions des deux schémas coïncident, il aurait fallu poser

$$c^*(\partial\mathcal{C}_{ik}^j) = \frac{1}{3} \sum_{P_k \in T_j} c(\mathcal{C}_k).$$

En fait ceci reviendrait à prendre c constant par triangle et le résultat est alors donné par la proposition 1.

Conclusions

A partir de cette étude, nous nous apercevons que, sur les cas stationnaires simples, le schéma volumes finis proposé redonne les schémas classiques de calcul par éléments finis dont les propriétés de convergence et de stabilité sont bien connues. Les avantages de l'approche volumes finis apparaissent, dans les cas d'évolution plus compliqués avec forte convection :

1) pour le problème d'évolution, la matrice de masse du schéma volumes finis est automatiquement diagonale ;

2) pour le cas non homogène couplé etc..., la formulation volumes finis reste automatiquement conservative et est toujours simple à interpréter en termes de lois de conservation. Ceci est important à la fois dans des situations à changement de phase où les lois de conservation sont complexes et dans les problèmes hyperboliques non linéaires en présence de chocs ;

3) pour les problèmes à forte convection, la formulation en volumes finis permet un décentrage immédiat des termes de transport ; selon toute vraisemblance, on retrouve après décentrage les schémas à volumes finis pondérés étudiés par EYMARD et GALLOUET.

Chapitre 5 :

APPROXIMATION EN TEMPS PAR PEACEMAN-RACHFORD

5.1. Schéma de base

Les expériences sur le séchage ou l'imbibition de milieux poreux ont mis en évidence un faible couplage entre les effets thermiques et les mouvements hydriques. Le traitement que nous imposons à l'équation en température (186)

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u}_T \cdot \nabla T - \text{div} \lambda \nabla T = G(T, \beta_i \rho_i) \quad (223)$$

et aux trois autres équations de transferts hydriques (187), (188), (189) est donc différent et peut être effectué de manière indépendante.

L'équation en température (223) est discrétisée en temps de manière implicite en linéarisant le terme de chaleur latente G et en se plaçant à $\beta_i \rho_i$ fixés :

$$\begin{aligned} (\rho c)^{n+1} \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + \vec{u}_T^{n+1} \cdot \nabla T^{n+1} - \text{div} \lambda^{n+1} \nabla T^{n+1} \\ = G(T^{n+1}, (\beta_i \rho_i)^{n+1}). \end{aligned} \quad (224)$$

Les exposants n ou $n + 1$ sur certaines quantités signifient qu'elles sont considérées à l'instant t_n ou à l'instant suivant $t_{n+1} = t_n + \Delta t$.

Les trois équations de transferts hydriques se mettent sous la forme condensée suivante :

$$\frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t} + \text{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i) = F_i(T, \beta_j \rho_j), \quad i = a, v, l. \quad (225)$$

Il suffit pour cela de retrancher l'équation (189) à (188) et de poser

$$F_a(T, \beta_j \rho_j) = 0, \quad (226)$$

$$F_v(T, \beta_j \rho_j) = -F_l(T, \beta_j \rho_j) = -F(T, \beta_j \rho_j). \quad (227)$$

Les équations (225) comportent deux non linéarités

- une locale sur le terme source F_i (193),
- une globale sur le terme de transport $\text{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)$ au vu des expressions des vitesses \vec{u}_i ((194) à (196)).

On peut craindre a priori que ces deux non linéarités conduisent à des comportements numériques très différents. En particulier le terme de dissipation $F(T, \beta_j \rho_j) = \frac{RT}{kM_v} \text{Log} \frac{P_v}{P_v^s}$ présente de forts changements de gradient. Pour éviter tout problème de convergence numérique, on va dans un premier temps séparer le traitement de ces deux non linéarités. Pour ce faire, nous choisissons de discrétiser en temps les équations de transferts hydriques suivant le schéma de directions alternées de Peaceman-Rachford.

L'algorithme global proposé est donc :

boucle en temps

* résolution de l'équation en température (224), à $\beta_i \rho_i$ fixés et en linéarisant le terme source G ,

$$(\rho c)^{n+1} \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + \bar{u}_T^{n+1} \cdot \nabla T^{n+1} - \text{div} \lambda^{n+1} \nabla T^{n+1} = G(T^{n+1}, (\beta_j \rho_j)^{n+1}), \quad (228)$$

* 1ère étape de Peaceman-Rachford : résolution des équations (225) entre t^n et $t^{n+\frac{1}{2}}$, à T fixée, où les termes de transport sont pris explicites tandis que les termes sources sont implicites,

$$\frac{(\beta_i \rho_i)^{n+\frac{1}{2}} - (\beta_i \rho_i)^n}{\frac{\Delta t}{2}} + \text{div}(\beta_i \rho_i \bar{u}_i)^n = F_i(T^{n+1}, (\beta_j \rho_j)^{n+\frac{1}{2}}), i = a, v, l. \quad (229)$$

* 2ème étape de Peaceman-Rachford : résolution des équations (225) entre $t^{n+\frac{1}{2}}$ et t^{n+1} , à T fixée, où les termes de transport sont pris implicites tandis que les termes sources sont gardés sous forme explicite,

$$\begin{aligned} & \frac{(\beta_i \rho_i)^{n+1} - (\beta_i \rho_i)^{n+\frac{1}{2}}}{\frac{\Delta t}{2}} + \text{div}(\beta_i \rho_i \bar{u}_i)^{n+1} \\ & = F_i(T^{n+1}, (\beta_j \rho_j)^{n+\frac{1}{2}}), i = a, v, l. \end{aligned} \quad (230)$$

Remarques

(i) Dans l'équation (228), le terme source est linéarisé:

$$G(T^{n+1}, \beta_j \rho_j) = G(T^n, \beta_j \rho_j) + (T^{n+1} - T^n) \frac{\partial G}{\partial T}(T^n, \beta_j \rho_j).$$

Nous devons donc calculer la dérivée de G en température à partir de son expression (192)

$$G(T, \beta_j \rho_j) = -((c_l - c_v)T - L_o) \frac{RT}{kM_v} \text{Log} \frac{P_v}{P_{vs}}.$$

Pour mettre en évidence cette dépendance en température, nous utilisons la loi des gaz parfaits et nous introduisons la pression P_{vs}^o :

$$G(T, \beta_j \rho_j) = -((c_l - c_v)T - L_o) \frac{RT}{kM_v} \left(\text{Log} \frac{\rho_v RT}{M_v} - \text{Log} \frac{P_{vs}}{P_{vs}^o} - \text{Log} P_{vs}^o \right).$$

Les quantités ρ_v et $\text{Log} \frac{P_{vs}}{P_{vs}^o}$ sont indépendantes de la température (cf. (135)). Par contre, la formule de Clapeyron nous précise la variation de P_{vs}^o (126)

$$\frac{d\text{Log}P_{vs}^o}{dT} = \frac{M_v L}{RT^2}.$$

Ainsi la dérivée recherchée est

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial T}(T, \beta_j \rho_j) = & - (2(c_l - c_v)T - L_o) \frac{R}{kM_v} \left(\text{Log} \frac{\rho_v RT}{M_v} - \text{Log} \frac{P_{vs}}{P_{vs}^o} - \text{Log} P_{vs}^o \right) \\ & - (c_l - c_v)T - L_o) \frac{RT}{kM_v} \left(\frac{1}{T} - \frac{M_v L}{RT^2} \right). \end{aligned}$$

(ii) Chacune des deux étapes de Peaceman-Rachford est résolue par un algorithme de Newton appliqué soit aux seconds membres F_i soit aux termes de flux $\text{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)$. Les seconds membres ne font intervenir que la fonction F (193) qui s'écrit après développement du terme en Log :

$$F(T, \beta_j \rho_j) = \frac{RT}{kM_v} \text{Log} \frac{P_v}{P_{vs}} = \frac{RT}{kM_v} \left[\text{Log}(\beta_v P_v) - \text{Log} \frac{\beta_v P_{vs}}{P_{vs}^o} - \text{Log} P_{vs}^o \right],$$

ou bien encore en utilisant la loi des gaz parfaits et les relations (135) et (175).

$$F(T, \beta_j \rho_j) = \frac{RT}{kM_v} \left[\text{Log} \frac{\beta_v \rho_v RT}{M_v} - \frac{d(\beta_l h(\beta_l))}{d\beta_l} - \text{Log}(\varepsilon - \beta_l) - \text{Log} P_{vs}^o(T) \right].$$

Ainsi le second membre F ne dépend que de la température T et des masses volumiques $\beta_v \rho_v$ et $\beta_l \rho_l$ (ρ_l est une constante). Les gradients de F par rapport à $\beta_v \rho_v$ et $\beta_l \rho_l$ sont respectivement

$$\partial_v F(T, \beta_v \rho_v, \beta_l \rho_l) = \frac{RT}{kM_v} \frac{1}{\beta_v \rho_v},$$

$$\partial_l F(T, \beta_v \rho_v, \beta_l \rho_l) = \frac{1}{\rho_l} \frac{RT}{kM_v} \left[- \frac{d^2(\beta_l h(\beta_l))}{d\beta_l^2} + \frac{1}{\varepsilon - \beta_l} \right].$$

Les calculs des gradients des termes de flux sont assez longs et pénibles. Ils sont regroupés dans l'annexe 3.

Remarque : Dans ce chapitre, si nous avons choisi de garder la forme continue des équations et non pas de travailler sur leur forme discrétisée obtenue au chapitre 4, c'est seulement pour des raisons de simplicité d'écriture et donc de lisibilité. Il est bien évident que le schéma numérique travaille en fait sur les formes discrètes du chapitre 4.

5.2. Ordre du schéma

Par addition des équations de la 1ère étape (229), celles de la seconde sont équivalentes à

$$\begin{aligned} & \frac{(\beta_i \rho_i)^{n+1} - (\beta_i \rho_i)^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} [\operatorname{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)^{n+1} + \operatorname{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)^n] \\ & = F_i(T^{n+1}, (\beta_j \rho_j)^{n+\frac{1}{2}}). \end{aligned} \quad (231)$$

A température fixée, le schéma en temps proposé est donc un schéma de Crank-Nicolson mais avec un calcul non standard des opérateurs à l'instant $t^{n+\frac{1}{2}}$. Le terme source en $n + \frac{1}{2}$ est calculé par un schéma semi-implicite, le terme de transport par le biais d'une moyenne entre sa valeur à l'instant t^n et sa valeur à l'instant t^{n+1} . Le schéma proposé reste cependant d'ordre 2 en temps. En effet, si on suppose que l'on connaît exactement la solution $(\beta_i \rho_i)(t^n) = (\beta_i \rho_i)^n$ à l'instant t^n et que la solution, les termes sources et les termes de transport sont réguliers en temps, on peut écrire :

$$(\beta_i \rho_i)(t^{n+\frac{1}{2}}) = (\beta_i \rho_i)^n + \frac{\Delta t}{2} (H_1((\beta_i \rho_i)^*) + H_2((\beta_i \rho_i)^*)),$$

$$(\beta_i \rho_i)^{n+\frac{1}{2}} = (\beta_i \rho_i)^n + \frac{\Delta t}{2} (H_1((\beta_i \rho_i)^n) + H_2((\beta_i \rho_i)^{n+\frac{1}{2}})).$$

Ci-dessus, H_1 (resp. H_2) désigne les termes de transport (resp. sources) et $(\beta_i \rho_i)^*$ une valeur de $\beta_i \rho_i$ à un temps intermédiaire t^* . Par un développement à l'ordre 1, on a

$$H_1((\beta_i \rho_i)^*) = H_1((\beta_i \rho_i)(t^n)) + \frac{\Delta t}{2} r_1,$$

$$H_2((\beta_i \rho_i)^*) = H_2((\beta_i \rho_i)(t^{n+\frac{1}{2}})) + \frac{\Delta t}{2} r_2.$$

avec

$$|r_\alpha| \leq \sup_{t \in [t^n, t^{n+\frac{1}{2}}]} |H'_\alpha| = C_\alpha, \quad \alpha = 1, 2.$$

On en déduit

$$\| (Id - \frac{\Delta t}{2} H_2)((\beta_i \rho_i)^{n+\frac{1}{2}}) - (Id - \frac{\Delta t}{2} H_2)((\beta_i \rho_i)(t^{n+\frac{1}{2}})) \| \leq C \frac{\Delta t^2}{4},$$

avec $C = \max(C_1, C_2)$. Mais pour Δt suffisamment petit, par le théorème du point fixe, $(Id - \frac{\Delta t}{2} H_2)$ est inversible, d'inverse Lipschitz continu avec une constante de Lipschitz de la forme $1 + k\Delta t$ et donc l'égalité précédente implique que nous avons

$$\| (\beta_i \rho_i)^{n+\frac{1}{2}} - (\beta_i \rho_i)(t^{n+\frac{1}{2}}) \| \leq C' \Delta t^2.$$

En reportant dans (231), il vient

$$\begin{aligned} (\beta_i \rho_i)^{n+1} &= (\beta_i \rho_i)^n + \frac{\Delta t}{2} H_1((\beta_i \rho_i)^n) + \frac{\Delta t}{2} H_1((\beta_i \rho_i)^{n+1}) \\ &\quad + \Delta t H_2((\beta_i \rho_i)(t^{n+\frac{1}{2}})) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \end{aligned}$$

Par un développement de Taylor autour de $t^{n+\frac{1}{2}}$, on a par ailleurs

$$H_1((\beta_i \rho_i)(t^n)) = H_1((\beta_i \rho_i)(t^{n+\frac{1}{2}})) - \frac{\Delta t}{2} \frac{d}{dt} H_1((\beta_i \rho_i)(t^{n+\frac{1}{2}})) + \mathcal{O}(\Delta t^2),$$

$$H_1((\beta_i \rho_i)(t^{n+1})) = H_1((\beta_i \rho_i)(t^{n+\frac{1}{2}})) + \frac{\Delta t}{2} \frac{d}{dt} H_1((\beta_i \rho_i)(t^{n+\frac{1}{2}})) + \mathcal{O}(\Delta t^2),$$

$$(\beta_i \rho_i)(t^{n+1}) = (\beta_i \rho_i)(t^n) + \Delta t \frac{d}{dt} ((\beta_i \rho_i)(t^{n+\frac{1}{2}})) + \mathcal{O}(\Delta t^3).$$

En multipliant les deux premières équations par $-\frac{\Delta t}{2}$ et en additionnant, nous avons, compte tenu de l'équation différentielle satisfaite par $\beta_i \rho_i$,

$$\begin{aligned} (\beta_i \rho_i)(t^{n+1}) &= (\beta_i \rho_i)(t^n) + \frac{\Delta t}{2} H_1((\beta_i \rho_i)(t^n)) + \frac{\Delta t}{2} H_1((\beta_i \rho_i)(t^{n+1})) \\ &\quad + \Delta t H_2((\beta_i \rho_i)(t^{n+\frac{1}{2}})) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \end{aligned}$$

Par différence et d'après l'hypothèse $(\beta_i \rho_i)(t^n) = (\beta_i \rho_i)^n$, on en déduit

$$(Id - \frac{\Delta t}{2} H_1)((\beta_i \rho_i))^{n+1} - (Id - \frac{\Delta t}{2} H_1)((\beta_i \rho_i)(t^{n+1})) = \mathcal{O}(\Delta t^3).$$

Comme précédemment, nous en déduisons d'après la Lipschitz continuité de $Id - \frac{\Delta t}{2} H_1$

$$\|(\beta_i \rho_i)^{n+1} - (\beta_i \rho_i)(t^{n+1})\| \leq \mathcal{O}(\Delta t^3).$$

Ce qui veut dire par définition que le schéma est d'ordre 2 en temps.

Remarque : Comme pour le schéma initial de Crank-Nicolson, la précision du schéma de Peaceman-Rachford se paie au niveau de la stabilité. Le schéma est ~~inconditionnellement stable~~ (du fait de son caractère implicite) et donc, a priori, on peut prendre des pas de temps aussi grands que l'on veut. Cependant, il n'est pas stiff A stable (cf. §5.5.), ce qui veut dire que les erreurs générées, à un pas de temps donné, par l'utilisation d'un trop grand pas de temps ne s'amortissent quasiment pas au cours du temps. Ce manque de stiff A stabilité limite en pratique la taille des pas de temps. La question est de savoir si, pour le problème pratique considéré, cette limite est acceptable ou pas. Les essais numériques qui suivent ont pour objet de répondre à cette question.

5.3. Transformation de la 2ème étape

Les équations de la 2ème étape de Peaceman-Rachford (230) ne sont pas résolues sous cette forme là.

En pratique, il est plus simple de soustraire (229) à (230) pour calculer $(\beta_i \rho_i)^{n+1}$; ceci conduit à

$$\begin{aligned} & \frac{(\beta_i \rho_i)^{n+1} - (\beta_i \rho_i)^n}{\Delta t} + \text{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)^{n+1} - \text{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)^n \\ & = 2 \frac{(\beta_i \rho_i)^{n+\frac{1}{2}} - (\beta_i \rho_i)^n}{\frac{\Delta t}{2}}. \end{aligned} \quad (232)$$

En effet dans cette expression, il n'y a plus de terme source.

5.4. Test numérique

Le schéma numérique présenté ci-dessus a été testé dans plusieurs cas. Nous présentons ici un calcul qui permet de mettre en évidence le défaut de cette méthode appliquée à la modélisation des transferts thermiques et hydriques dans les milieux poreux.

5.4.1. Problème test

N'ayant pas rencontré de difficulté au niveau de l'équation en température, nous nous sommes concentrés sur le schéma de Peaceman-Rachford décentré ($\alpha_c = 0.5$). Pour simplifier davantage nous avons supposé la pression de la phase gazeuse P_g constante et le coefficient de dissipation sur le taux de changement de phase k très petit. Ces simplifications sont souvent faites dans les différentes modélisations concernant notre problème physique et ont un caractère relativement réaliste. Ainsi nous avons résolu le système composé des deux équations (225) ($i = a, v$) pour trouver l'évolution en temps de la teneur en eau β_l et de la pression de vapeur P_v .

Le domaine Ω choisi est un carré de 30 cm de côté. Le maillage est régulier et contient 1800 triangles élémentaires isocèles (cf. fig. 37 du §7). Le pas en espace est 1cm. Ce maillage comporte 961 noeuds.

Le milieu poreux considéré est un milieu fictif défini par la porosité

$$\varepsilon = 0.077 \text{ m}^3/\text{m}^3$$

et par la fonction d'interaction h ((161),(162)) de coefficients

$$\beta_1 = 0.024 \text{ m}^3/\text{m}^3$$

a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7
$5.13 \cdot 10^{-13}$	-1.	-0.34	$7.83 \cdot 10^{-2}$	$-3.55 \cdot 10^{-3}$	$-5.76 \cdot 10^{-2}$	$8.17 \cdot 10^{-4}$

b_1	b_2	b_3
$3.21 \cdot 10^{-4}$	$1.94 \cdot 10^1$	$-8.45 \cdot 10^{-1}$

Cette fonction d'interaction h conduit à une isotherme de sorption (160) ayant la même allure que celle du type sable présentée au paragraphe 2.8.6. (cf. fig. 12). Le palier $HR = 1$ est très prononcé.

Les caractéristiques du squelette sont

$$\rho_s = 2070 \text{ kg/m}^3,$$

$$c_s = 837 \text{ J/kg.K.}$$

Il reste à préciser les caractéristiques physiques non définies en 3.4., à savoir:

1) la conductivité thermique :

$$\lambda = 1 \text{ W/m.K,}$$

2) la perméabilité de la phase liquide :

$$K_l = 5 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2/\text{sPa},$$

3) la perméabilité de la phase gazeuse est linéaire en β_l et est définie par les deux points :

$$K_g(\beta_l = 0.074) = 10^{-13} \text{ m}^2/\text{sPa},$$

$$K_g(\beta_l = 0.077) = 10^{-14} \text{ m}^2/\text{sPa},$$

4) le coefficient de diffusion de vapeur dans l'air :

$$K_{av} = 2 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{sPa},$$

5) le coefficient de dissipation sur le taux de changement de phase :

$$k = 1. \quad \text{Jm}^3/\text{kg}^2.$$

Le coefficient k intervenant au dénominateur dans la programmation de l'équation (230) pour $i = l$ doit être non nul. Cependant la valeur $k = 1$ est faible et donc la dissipation sur le taux de changement de phase est négligeable. Nous avons vérifié, lors des différents calculs, que la pression P_v est bien égale à la pression d'équilibre $P_{v,s}$ dans ce cas.

Dans ce calcul, la température et la pression de la phase gazeuse sont uniformes et constantes en espace et en temps. Elles ont pour valeurs :

$$T = 20^\circ C,$$

$$P_g = 1.013 \cdot 10^5 N/m^2.$$

Les conditions initiales sont uniformes en espace :

$$\beta_l = 0.070 m^3/m^3,$$

$$HR(\beta_l = 0.070) = 0.9958.$$

Les conditions aux limites sont :

1) Sur deux côtés opposés du carré, nous imposons une condition de Neumann (conditions de Fourier-Robin (203) avec $\alpha_i = q_i = 0$) sur $\beta_l \rho_l$ et $\beta_v \rho_v$:

2) Sur les deux autres côtés restants, nous imposons une condition de Dirichlet (201) variant linéairement entre l'instant 0 et l'instant 60s où l'on obtient

$$\beta_l^{ext} = 0.074 m^3/m^3,$$

$$HR^{ext}(\beta_l = 0.074) = 0.99865.$$

La durée totale pour cet essai numérique est :

$$t_{max} = 2700s.$$

5.4.2. Résultats

Les résultats numériques du calcul précédent ont démontré que

1) la méthode de Newton appliquée aux termes de flux converge quadratiquement. Pour un pas de temps Δt de 300s, les normes L^∞ des incréments des variables $\beta_v \rho_v$ et $\beta_l \rho_l$ réduites par rapport à une valeur de référence sont représentées dans le tableau suivant :

Itération Newton	$\frac{\ \Delta\beta_v\rho_v\ _\infty}{(\beta_v\rho_v)_{ref}}$	$\frac{\ \Delta\beta_l\rho_l\ _\infty}{(\beta_l\rho_l)_{ref}}$
1 ^{ère}	2.10^{-1}	$1.7.10^{-2}$
2 ^{ème}	$1.2.10^{-2}$	$7.1.10^{-4}$
3 ^{ème}	1.10^{-5}	$1.4.10^{-6}$
4 ^{ème}	$2.3.10^{-10}$	$5.7.10^{-12}$

Le pas de temps pris dans cet exemple est très grand. En général, pour des pas de temps plus raisonnables, une ou deux itérations du schéma de Newton sont suffisantes. Donc ce schéma converge rapidement.

2) Ce schéma est stable. Il converge pour des pas de temps a priori raisonnables.

Pour estimer un pas de temps caractéristique, nous procédons de la façon suivante. Nous reprenons les équations sous la forme (225) :

$$\frac{\partial\beta_i\rho_i}{\partial t} + \text{div}(\beta_i\rho_i\vec{u}_i) = F(T, \beta_j\rho_j), \quad i = v, l.$$

Pour simplifier nous supposons que ces équations sont découplées et que les vitesses sont données par

$$\vec{u}_i = -K_i\nabla\beta_i\rho_i.$$

Ainsi nous nous sommes ramenés à des équations du type

$$\frac{\partial\beta\rho}{\partial t} - \text{div}(K\beta\rho\nabla\beta\rho) = F(\beta\rho).$$

Pour obtenir un ordre de grandeur du pas de temps caractéristique, nous posons

$$c = K\beta\rho$$

et nous écrivons le problème de Laplacien associé

$$\frac{\partial\beta\rho}{\partial t} - \text{div}(c\nabla\beta\rho) = F(\beta\rho).$$

Pour ce problème classique on connaît la condition de stabilité sur un maillage régulier de pas d'espace Δx ([18], [32])

$$\frac{c\Delta t}{\Delta x^2} \leq 1.$$

On prend donc comme pas de temps caractéristique la limite de stabilité du schéma explicite

$$\Delta t_c = \frac{\Delta x^2}{c}$$

et on compare nos pas de temps utilisés à cette valeur de référence.

Dans le calcul numérique précédent, nous avons au temps $t = 400s$:
 $\Delta x = 0.01m$,

- pour la vapeur $c = 0.56 \cdot 10^{-4} m^2/s$ d'où $\Delta t_c = 1.8s$,

- pour l'eau liquide $c = 0.45 \cdot 10^{-7} m^2/s$ d'où $\Delta t_c = 2222s$

Le pas de temps Δt est de $100s$, ce qui est de l'ordre de 55 fois le pas de temps caractéristique minimal.

Remarque : On peut aussi comparer le pas de temps de nos essais au temps de remplissage d'une cellule :

$$\Delta t_r = \frac{\Delta x}{\|\vec{u}\|}$$

On trouve au même temps que ci-dessus

- pour la vapeur $\Delta t_r = \frac{0.01}{2 \cdot 10^{-4}} = 50s$,

- pour l'eau liquide $\Delta t_r = \frac{0.01}{10^{-6}} = 10000s$.

Le pas de temps utilisé ($100s$) est deux fois plus grand que le temps minimal de remplissage d'une cellule.

Le schéma de Peaceman-Rachford est bien stable numériquement puisqu'il converge pour des pas de temps très supérieurs au pas de temps caractéristique.

3) Ce schéma est peu précis. En effet, sur les premiers pas de temps et à chaque changement de pas de temps, apparaît une erreur significative sur les pressions. Pour une courbe de pas de temps donnée (fig. 17) et a priori raisonnable par rapport à la durée totale de l'expérience (77 pas de temps pour cette expérience), l'évolution de la pression de vapeur (fig. 18) présente des sauts puis se stabilise si le pas de temps reste constant. Par contre l'évolution de la teneur en eau reste régulière (fig. 20).

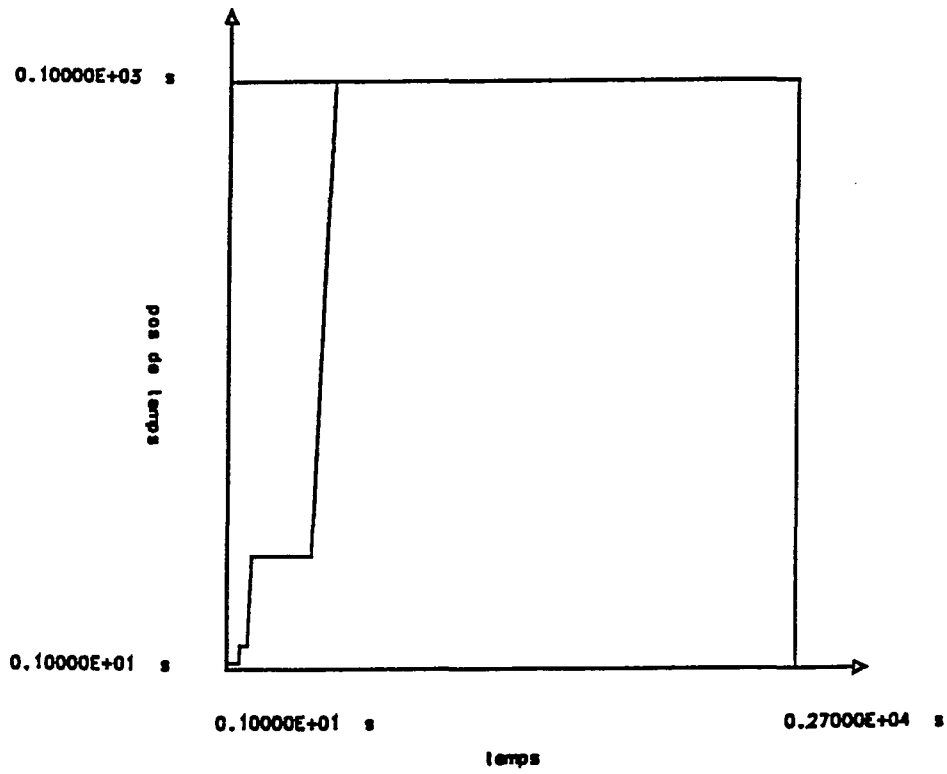


Figure 17 : Evolution du pas de temps.

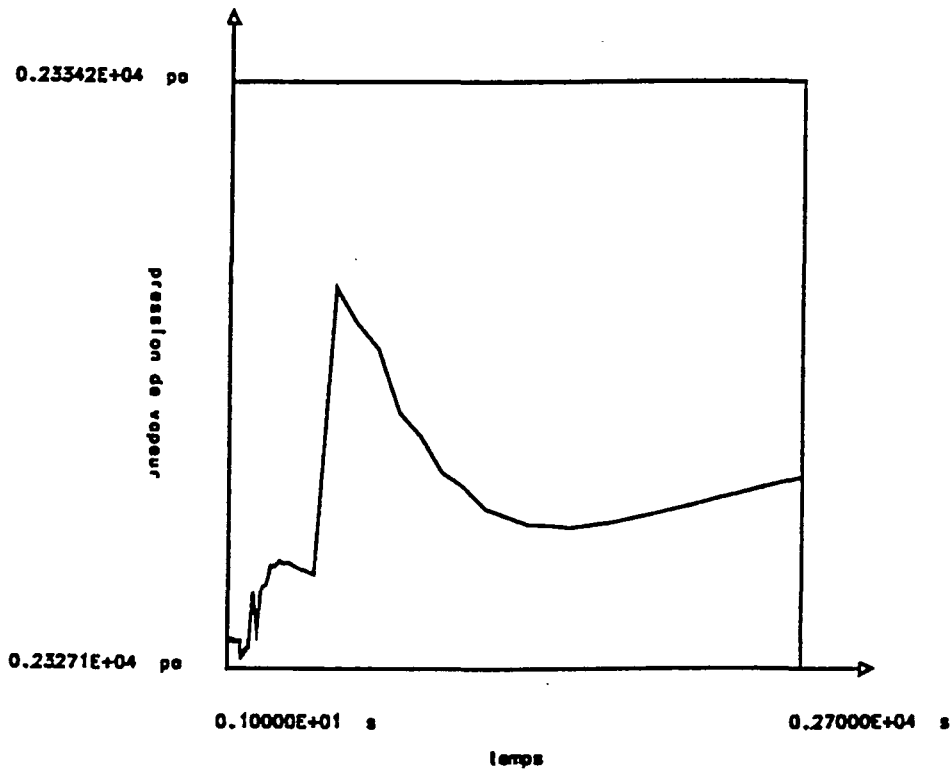


Figure 18 : Evolution de la pression de vapeur en un point situé à 5cm du bord.

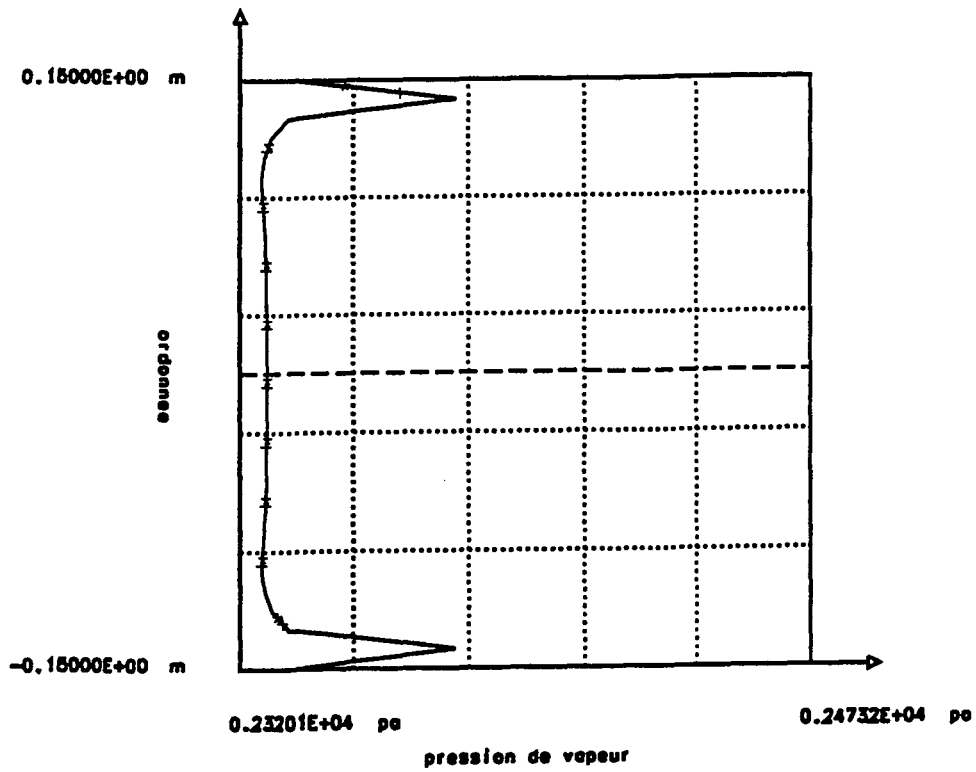


Figure 19 : Profils verticaux de la pression de vapeur au temps $t = 400s$.

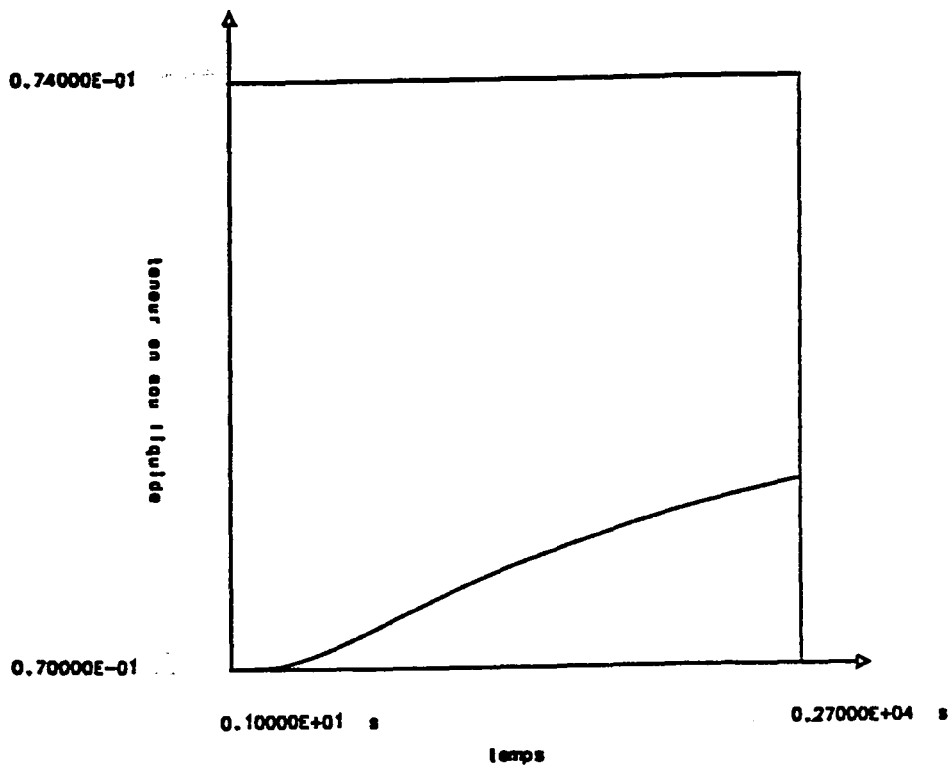


Figure 20 : Evolution de la teneur en eau en un point situé à 5cm du bord.

En conclusion, le schéma de Peaceman-Rachford ne s'avère pas assez précis pour notre problème vu l'ordre de grandeur des pas de temps que l'on souhaite utiliser. En analysant de très près l'évolution des résultats numériques, on s'aperçoit que d'importantes erreurs apparaissent durant la première demi-étape après l'initialisation ou après tout changement de pas de temps. A ces endroits, le calcul explicite des flux n'est visiblement pas assez précis, ce qui induit une erreur importante sur $\beta_i \rho_i^{n+\frac{1}{2}}$. Le schéma n'a pas ensuite les propriétés de stabilité suffisantes pour effacer rapidement ces erreurs. Ceci nous amène à considérer un schéma totalement implicite en temps.

Remarque :

(i) L'étude de la variation de α_c (centrage-décentrage des termes de flux) n'a décelé aucune influence sur les irrégularités signalées ci-dessus ni sur la stabilité du schéma.

(ii) Dans le cas où la pression du gaz n'est pas supposée constante, même si l'évolution de la pression d'air a montré quelques irrégularités, elles n'étaient pas du même ordre de grandeur que celles concernant la vapeur. Le couplage entre l'équation de conservation de la masse d'air et des deux autres équations couplées relatives à l'eau n'est pas très fort.

5.5. Analyse simplifiée des irrégularités observées

Pour expliquer le phénomène observé en §5.4., nous allons faire une analyse simplifiée du schéma de Peaceman-Rachford dans le cas où les deux opérateurs H_1 et H_2 (définis en §5.2.) sont linéaires affines et sont diagonalisables dans une même base $(\epsilon_i)_i$. Les deux étapes du schéma de Peaceman-Rachford (229) et (230) deviennent alors

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{(\beta\rho)^{n+\frac{1}{2}} - (\beta\rho)^n}{\frac{\Delta t}{2}} = H_1((\beta\rho)^n) + H_2((\beta\rho)^{n+\frac{1}{2}}), \\ \frac{(\beta\rho)^{n+1} - (\beta\rho)^{n+\frac{1}{2}}}{\frac{\Delta t}{2}} = H_1((\beta\rho)^{n+\frac{1}{2}}) + H_2((\beta\rho)^{n+1}), \end{array} \right. \quad (233)$$

Prenons comme nouvelle inconnue $X = \beta\rho - (\beta\rho)(t^\infty)$ où $(\beta\rho)(t^\infty)$ est la solution du problème stationnaire. Par rapport à cette nouvelle variable, le problème considéré est homogène et, pour chaque composante X_i de X dans la base $(\epsilon_i)_i$, le problème continu et le schéma de Peaceman-Rachford s'écrivent

$$X_i(t) = X_i(0)e^{(\delta_{1i} + \delta_{2i})t}, \quad (234)$$

$$\begin{cases} \frac{X_i^{n+\frac{1}{2}} - X_i^n}{\frac{\Delta t}{2}} = \delta_{1i}X_i^n + \delta_{2i}X_i^{n+\frac{1}{2}}, \\ \frac{X_i^{n+1} - X_i^{n+\frac{1}{2}}}{\frac{\Delta t}{2}} = \delta_{1i}X_i^{n+1} + \delta_{2i}X_i^{n+\frac{1}{2}}. \end{cases} \quad (235)$$

Ci-dessus, le scalaire δ_{1i} (resp. δ_{2i}) est la i ème valeur propre de H_1 (resp. H_2).

Nous supposons maintenant que l'on a affaire à un problème dissipatif dont la solution en temps converge vers la solution stationnaire. Ceci implique que les valeurs $(\delta_{1i} + \delta_{2i})$ sont strictement négatives.

Du système (235), nous déduisons les formules itératives

$$X_i^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1 + \frac{\delta_{1i}\Delta t}{2}}{1 - \frac{\delta_{2i}\Delta t}{2}} X_i^n, \quad (236)$$

$$\begin{aligned} X_i^{n+1} &= \frac{1 + \frac{\delta_{2i}\Delta t}{2}}{1 - \frac{\delta_{1i}\Delta t}{2}} X_i^{n+\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1 + \frac{\delta_{1i}\Delta t}{2}}{1 - \frac{\delta_{2i}\Delta t}{2}} \cdot \frac{1 + \frac{\delta_{2i}\Delta t}{2}}{1 - \frac{\delta_{1i}\Delta t}{2}} X_i^n. \end{aligned} \quad (237)$$

On peut alors faire les remarques suivantes :

(i) Si $\frac{\delta_{\alpha i}\Delta t}{2}$, $\alpha = 1, 2$, est suffisamment petit, on a

$$X_i^{n+1} \simeq (1 + (\delta_{1i} + \delta_{2i})\Delta t + \frac{(\delta_{1i} + \delta_{2i})^2}{2}\Delta t^2) X_i^n. \quad (238)$$

Nous retrouvons que le schéma est d'ordre 2 et nous observons une décroissance régulière de la solution numérique vers la solution finale, suivant à l'ordre 2 près l'évolution de la solution exacte ($X_i(t) \simeq X_i(0)(1 + (\delta_{1i} + \delta_{2i})t)$).

(ii) Si nous supposons que chaque opérateur H_α , $\alpha = 1, 2$, est dissipatif ($\delta_{\alpha i} < 0$) alors nous déduisons aisément de (237)

$$|X_i^{n+1}| < |X_i^n|.$$

Cette stabilité a été confirmée numériquement pour notre problème.

(iii) Si l'on a

$$|\delta_{\alpha i}\Delta t| \gg 1 \quad \text{pour } \alpha = 1, 2,$$

on obtient une faible atténuation de X_i qui reste néanmoins de signe constant. On retrouve ici l'absence de stiff A stabilité du schéma. Ce phénomène n'existe pas en schéma totalement implicite, on aurait dans ce cas

$$X_i^{n+1} = \frac{1}{1 - (\delta_{1i} + \delta_{2i})\Delta t} X_i^n \quad (239)$$

et donc

$$|X_i^{n+1}| \ll |X_i^n|.$$

(iv) Si l'on a

$$\left| \frac{\delta_{1i}\Delta t}{2} \right| < 1 \quad \text{et} \quad \left| \frac{\delta_{2i}\Delta t}{2} \right| > 1,$$

alors la solution numérique oscille autour de la valeur d'équilibre car

$$X_i^{n+1} X_i^n < 0.$$

En général, ces hypothèses impliquent que le mode i est grand. Cette oscillation n'apparaît pas dans un schéma implicite total (239).

Dans le cas non linéaire, cette oscillation en temps du mode i ou toute erreur importante et persistante du mode i peuvent, par couplage de modes, polluer un mode j pour lequel $|(\delta_{1j} + \delta_{2j})\Delta t|$ sera petit. Cela crée un X_j^{n+1} grand qui s'amortira ensuite très lentement suivant la loi (238). C'est ce qui semble se passer à chaque initialisation ou à chaque changement de pas de temps (cf. figures 18-19).

On remarque en effet sur la distribution en X de la solution que l'erreur importante observée est régulière en espace, ce qui veut dire que c'est bien un mode j d'énergie $(\delta_{1j} + \delta_{2j})$ basse qui a été pollué.

En conclusion, le schéma de Peaceman-Rachford s'est avéré mal adapté à notre problème à cause de la prise en compte des termes de flux de manière explicite. Ceci nous a conduit à considérer un schéma totalement implicite en temps.

Chapitre 6 :

APPROXIMATION EN TEMPS IMPLICITE

6.1. Schéma implicite

Nous reprenons l'équation en température (223) et les équations de transfert liquide et gazeux sous forme condensée (225) :

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u}_T \cdot \nabla T - \operatorname{div} \lambda \nabla T = G(T, \beta_j \rho_j), \quad (240)$$

$$\frac{\partial \beta_i \rho_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i) = F_i(T, \beta_j \rho_j), \quad i = a, v, l. \quad (241)$$

Après discrétisation par un schéma implicite en temps, elles s'écrivent

$$\begin{aligned} (\rho c)^{n+1} \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + \vec{u}_T^{n+1} \cdot \nabla T^{n+1} - \operatorname{div} \lambda^{n+1} \nabla T^{n+1} \\ = G(T^{n+1}, (\beta_j \rho_j)^{n+1}), \end{aligned} \quad (242)$$

$$\begin{aligned} \frac{(\beta_i \rho_i)^{n+1} - (\beta_i \rho_i)^n}{\Delta t} + \operatorname{div}(\beta_i \rho_i \vec{u}_i)^{n+1} \\ = F_i(T^{n+1}, (\beta_j \rho_j)^{n+1}), \quad i = a, v, l. \end{aligned} \quad (243)$$

L'équation en température (240) discrétisée en temps est la même que celle obtenue au chapitre 5 (224).

Un tel schéma implicite a d'excellentes propriétés de convergence à long terme pour des problèmes dissipatifs [33]. De manière précise, ce schéma implicite est inconditionnellement stable. De plus, il est aussi stiff A stable. On peut donc s'attendre à ce que les oscillations observées pour des grands pas de temps dans le schéma de Peaceman-Rachford disparaissent dans ce schéma implicite.

La convergence de ce schéma implicite nous est fourni par Pironneau ([40], p. 80-82) pour le problème simplifié suivant :

On cherche $X \in V_h$ tel que

$$\begin{aligned} \frac{X^{n+1} - X^n}{\Delta t} + \vec{u} \cdot \nabla X^{n+1} - \operatorname{div} K \nabla X^{n+1} = F(t^{n+1}), \\ X^{n+1} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma \times]0, t_{max}[, \end{aligned} \quad (244)$$

avec V_h un espace d'éléments finis d'ordre 1, \vec{u} et K fixés tels que

$$\vec{u} \in L^\infty(\Omega \times]0, t_{max}[), \operatorname{div} \vec{u} = 0, \vec{u} \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma \times]0, t_{max}[\quad \text{et} \quad K > 0.$$

Proposition : Soit $X(t, x)$ la solution du problème continu :

$$\begin{aligned} \frac{\partial X}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla X - \operatorname{div} K \nabla X = F(X) \quad \text{dans} \quad \Omega \times]0, t_{max}[, \\ X(0, x) = X^o(x) \quad \text{dans} \quad \Omega, \\ X = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma \times]0, t_{max}[. \end{aligned} \quad (245)$$

Si l'on suppose

$$X \in L^2(0, t_{max}, H^2(\Omega)) \quad \text{et} \quad \frac{\partial X}{\partial t} \in L^2(0, t_{max}, H^1(\Omega)),$$

alors on a

$$(\|X^n - X(t^n, \cdot)\|_0^2 + K\Delta t \|\nabla(X^n - X(t^n, \cdot))\|_0^2)^{\frac{1}{2}} \leq C(\Delta x + \Delta t). \quad (246)$$

Ci-dessus, le maillage est supposé régulier avec un pas en espace Δx .

Cette proposition a été démontrée avec un pas de temps Δt constant.

Les commentaires relatifs à cette proposition ([40], p. 82) sont :

”On note que l'estimation d'erreur (246) est valable même avec $K = 0$. Ainsi on n'a pas besoin de décentrage en espace ; ceci est dû au schéma totalement implicite. Il reste que, comme avec les schémas d'Euler et de Crank-Nicolson, la constante C dans (246) dépend de $\|X\|_{H^2(\Omega)}$ et que, si K est très petit, le problème continu (245) a une couche limite et $\|X\|_{H^2(\Omega)}$ tend vers l'infini (si $X|_{\Gamma}$ est quelconque) comme $K^{-\frac{3}{2}}$. Ceci oblige donc soit à modifier $X|_{\Gamma}$ soit à prendre dans (244) $\Delta x \ll K^{-\frac{3}{2}}$ ”.

Pour éviter ce type de limitation sur le pas d'espace Δx , nous avons choisi a priori un schéma décentré pour la discrétisation en espace du terme de transport (cf. §4.3.).

Avec ce choix, nous avons donc affaire à un schéma stable pour tout pas de temps et toute constante de viscosité. Le prix à payer est la résolution algébrique à chaque pas de temps du système non linéaire couplé (242)-(243).

6.2. Résolution du problème non linéaire par Jacobi

Dans un premier temps, pour des raisons d'évidente simplicité, nous avons résolu les équations de transferts de masse par une méthode de Jacobi non linéaire, la résolution de l'équation en température étant identique à celle employée au paragraphe 5.1. Cette méthode est explicite pour les termes de transport et implicite pour les termes sources.

6.2.1. Algorithme de résolution

L'algorithme global proposé est donc :

boucle en temps

- * résolution de l'équation en température (242) à $\beta_i \rho_i$ fixés et en linéarisant le terme source G ,
- * calcul de $\beta_i \rho_i$ par une méthode de Jacobi à T fixé,
 - boucle sur la k ème itération de Jacobi,
- * résolution des équations (243) qui sont alors découplées cellule par cellule,

$$\frac{(\beta\rho)_{k+1}^{n+1} - (\beta\rho)^n}{\Delta t} + \text{div}(\beta\rho\vec{u})_k^{n+1} = F((\beta\rho)_{k+1}^{n+1}). \quad (247)$$

Pour ne pas alourdir les notations dans l'équation (247), ne figurent pas les indices des cellules et ceux des constituants a, v, l . De plus, l'équation (247) est traitée par un algorithme de Newton local opérant sur l'équation scalaire non linéaire en $\beta_l \rho_l$ obtenue par élimination de $\beta_v \rho_v$. Un tel algorithme peut alors prendre en compte des comportements locaux très raides de l'équation (247) du type de ceux observés dans les problèmes de Stefan non linéaires [6].

6.2.2. Convergence de l'algorithme

Démontrons que la convergence de l'algorithme précédent est linéaire. Nous reprenons les notations H_1 et H_2 pour désigner respectivement le terme de transport et le terme source.

Les équations (243) et (247) s'écrivent alors :

$$\frac{(\beta\rho)^{n+1} - (\beta\rho)^n}{\Delta t} = H_1((\beta\rho)^{n+1}) + H_2((\beta\rho)^{n+1}), \quad (248)$$

$$\frac{(\beta\rho)_{k+1}^{n+1} - (\beta\rho)^n}{\Delta t} = H_1((\beta\rho)_k^{n+1}) + H_2((\beta\rho)_{k+1}^{n+1}). \quad (249)$$

Si $(\beta\rho)^{n+1}$ est la solution du problème (248), par différence entre (248) et (249), on obtient :

$$\begin{aligned} (Id - \Delta t H_2)((\beta\rho)_{k+1}^{n+1}) - (Id - \Delta t H_2)((\beta\rho)^{n+1}) \\ = \Delta t H_1((\beta\rho)_k^{n+1}) - \Delta t H_1((\beta\rho)^{n+1}), \end{aligned} \quad (250)$$

L'opérateur H_2 est défini cellule par cellule et n'introduit pas de couplage intercellulaire. Il s'agit d'une fonction définie par

$$H_2 : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$$

$$\begin{pmatrix} \beta_a \rho_a \\ \beta_v \rho_v \\ \beta_l \rho_l \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{RT}{kM_v} \text{Log} \frac{\beta_v \rho_v RT}{M_v P_{v,s}(\beta_l \rho_l)} \\ \frac{RT}{kM_v} \text{Log} \frac{\beta_v \rho_v RT}{M_v P_{v,s}(\beta_l \rho_l)} \end{pmatrix}.$$

Cette fonction est localement Lipschitz continue. Par application du théorème du point fixe à l'application $\beta_i \rho_i \rightarrow \Delta t H_2(\beta_i \rho_i) + y$, si Δt est suffisamment petit et si $(\beta \rho)_k^{n+1}$ est dans un voisinage donné de $(\beta \rho)^{n+1}$, on démontre que pour tout y dans un voisinage donné de $(Id - \Delta t H_2)((\beta_i \rho_i)^{n+1})$, il existe un $\beta_i \rho_i$ unique tel que

$$(Id - \Delta t H_2)(\beta_i \rho_i) = y.$$

L'application inverse $(Id - \Delta t H_2)^{-1}$ ainsi définie est par construction localement Lipschitz continue, avec une constante de Lipschitz bornée par

$$\|(Id - \Delta t H_2)^{-1}\| \leq (1 - \Delta t \|H_2\|)^{-1}.$$

Posons alors

$$Y^{n+1} = (Id - \Delta t H_2)((\beta \rho)^{n+1}),$$

$$Y_{k+1}^{n+1} = (Id - \Delta t H_2)((\beta \rho)_{k+1}^{n+1}).$$

D'après la Lipschitz continuité de $(Id - \Delta t H_2)^{-1}$ et (250), on a

$$\begin{aligned} \|(\beta \rho)^{n+1} - (\beta \rho)_{k+1}^{n+1}\|_{\mathbb{R}^3} &\leq (1 - \Delta t \|H_2\|)^{-1} \|Y^{n+1} - Y_{k+1}^{n+1}\|_{\mathbb{R}^3} \\ &\leq (1 - \Delta t \|H_2\|)^{-1} \Delta t \|H_1\| \|(\beta \rho)_k^{n+1} - (\beta \rho)^{n+1}\|. \end{aligned} \quad (251)$$

La norme de H_1 est par exemple la norme de Lipschitz considérée comme une application de $\mathbb{R}^{3 \times N_c}$ dans lui-même où N_c est le nombre de cellules.

L'inégalité (251) étant vérifiée au niveau de chaque cellule, si nous prenons la norme "sup" pour le vecteur $\beta \rho$, nous avons la même inégalité de contraction

$$\|(\beta \rho)_{k+1}^{n+1} - (\beta \rho)^{n+1}\| \leq C \|(\beta \rho)_k^{n+1} - (\beta \rho)^{n+1}\|,$$

avec la constante

$$C = \Delta t \sup_{\text{cellules}} ((1 - \Delta t \|H_2\|)^{-1} \|H_1\|).$$

Ainsi la convergence est bien linéaire. Si Δt est petit, cette convergence est proportionnelle à Δt : elle sera d'autant plus rapide que Δt sera petit.

6.2.3. Stratégie du choix du pas de temps

Numériquement, nous observons ce phénomène : si le pas de temps Δt augmente le nombre d'itérations k de la méthode de Jacobi augmente très rapidement. De plus, à partir d'une certaine valeur, ce schéma diverge. Par exemple les résultats, pour un calcul test identique à celui du paragraphe 5.4.1. à l'exception des perméabilités : $K_g = K_{av} = 0$ et $K_l = 10^{-15} \text{m}^2/\text{sPa}$, sont, au temps $t = 176\text{s}$ et avec $\Delta t = 4\text{s}$,

Itération Jacobi	$\frac{\ \Delta\beta_l\rho_l\ _\infty}{(\beta_l\rho_l)_{ref}}$
1 ^{ère}	$3.9 \cdot 10^{-4}$
2 ^{ème}	$1.3 \cdot 10^{-5}$
3 ^{ème}	$1.9 \cdot 10^{-6}$
4 ^{ème}	$1.4 \cdot 10^{-6}$
5 ^{ème}	$1.7 \cdot 10^{-6}$
6 ^{ème}	$2.2 \cdot 10^{-6}$
7 ^{ème}	$2.7 \cdot 10^{-6}$
8 ^{ème}	$3.4 \cdot 10^{-6}$
9 ^{ème}	$4.4 \cdot 10^{-6}$
10 ^{ème}	$5.5 \cdot 10^{-6}$

La précision demandée était de 10^{-6} . On observe ici une divergence de la méthode de Jacobi. Par contre, pour ce temps là, la méthode de Jacobi a convergé en 3 itérations pour $\Delta t = 2s$.

Ainsi pour pallier cet inconvénient, notre stratégie du choix du pas de temps est la suivante :

- * le pas de temps initial est très petit ;
- * si le schéma de Jacobi converge en une itération, on augmente légèrement le pas de temps en le multipliant par 1.1 ;
- * si le schéma de Jacobi converge en plus de 30 itérations ou s'il diverge, on diminue le pas de temps de 25 % et on le fige pour les dix calculs des temps suivants ;
- * dans les autres cas, le pas de temps est inchangé.

6.2.4. Test numérique

Le problème test est identique à celui présenté au paragraphe 5.4.

L'évolution des teneurs en eau β_l en différents points du maillage est identique à celle trouvée par le schéma de Peaceman-Rachford. Par exemple, on retrouve l'évolution présentée par la figure 20.

Par contre, l'évolution de la pression de vapeur ne présente aucune irrégularité (fig. 21).

Ce calcul a nécessité 180 pas de temps et un temps c.p.u. de 46 minutes. L'évolution du pas de temps (fig. 22) est régulière à l'exception de pics très

marqués où le pas de temps a été déterminé de façon à faire coïncider un temps de calcul avec un temps de stockage des résultats fixé a priori. On observe aussi trois diminutions de Δt lors d'une convergence trop lente du schéma de Jacobi. Les paliers, eux, sont dus soit au blocage du pas de temps après qu'il ait diminué, soit à l'attente d'une convergence de Jacobi en une itération.

Même si cette méthode nous fournit des solutions a priori correctes de notre problème, le temps de calcul nous paraît prohibitif. En effet le calcul ci-dessus ne prend en compte que deux équations sur quatre (eau liquide et vapeur) ; la durée de l'expérience (2700 s) est très courte et les variations des conditions aux limites sont faibles par rapport aux conditions initiales.

En conclusion, au vu du temps de calcul, nous cherchons une autre méthode de résolution pour laquelle nous ne serons pas pénalisés par de petits pas de temps. Nous allons montrer que la méthode de Newton donne des résultats satisfaisants.

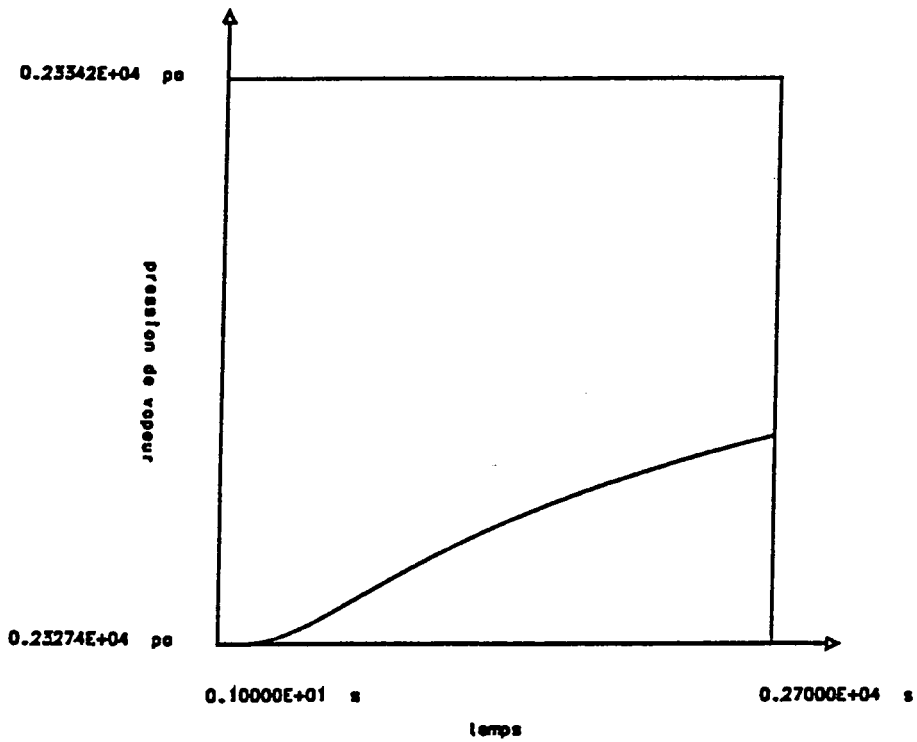


Figure 21 : Evolution de la pression de vapeur en un point situé à 5 cm du bord.

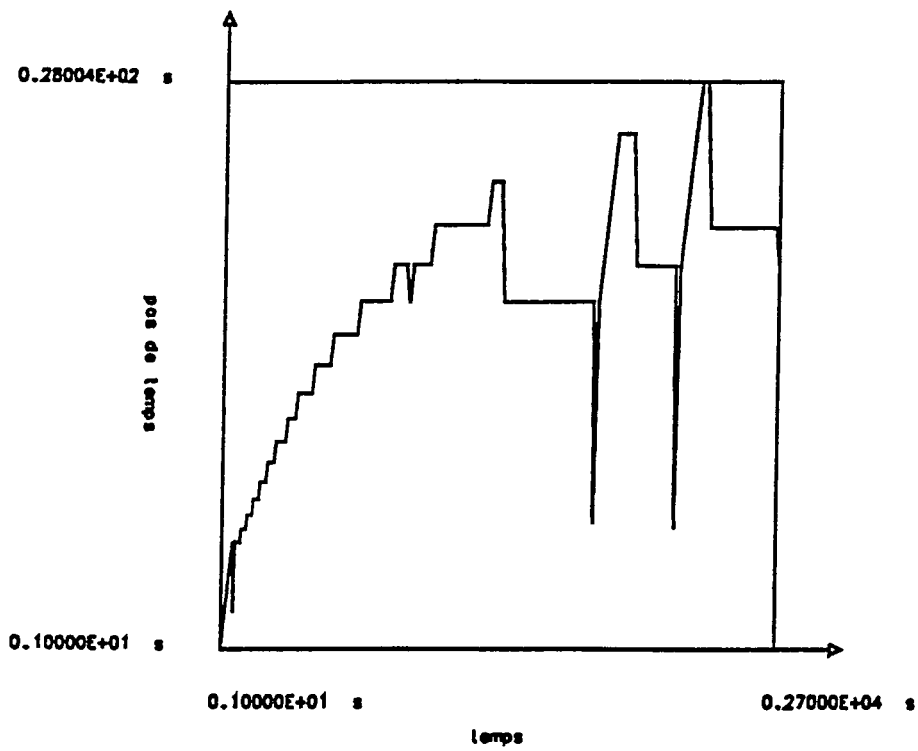


Figure 22 : Evolution du pas de temps.

6.3. Résolution du problème non linéaire par Newton

Nous écrivons les équations (243) sous la forme (248) :

$$\frac{(\beta\rho)^{n+1} - (\beta\rho)^n}{\Delta t} = H_1((\beta\rho)^{n+1}) + H_2((\beta\rho)^{n+1}), \quad (252)$$

au niveau de chaque cellule et pour chaque constituant $i = a, v, l$.

L'algorithme de Newton est le suivant :

- * boucle sur la k ème itération de Newton
 - résolution du système linéaire non symétrique

$$\begin{aligned} \frac{(\beta\rho)_{k+1}^{n+1} - (\beta\rho)_k^n}{\Delta t} &= H_1((\beta\rho)_k^{n+1}) + DH_1((\beta\rho)_k^{n+1})((\beta\rho)_{k+1}^{n+1} - (\beta\rho)_k^{n+1}) \\ &\quad + H_2((\beta\rho)_k^{n+1}) + DH_2((\beta\rho)_k^{n+1})((\beta\rho)_{k+1}^{n+1} - (\beta\rho)_k^{n+1}), \end{aligned} \quad (253)$$

- test de convergence.

Dans l'équation (253), DH_1 et DH_2 sont les dérivées respectivement des termes de transport et des termes sources par rapport aux variables $\beta_a\rho_a, \beta_v\rho_v, \beta_l\rho_l$, prises en chaque noeud. Le calcul de DH_2 a été effectué dans la remarque (ii) du paragraphe 5.1. Le calcul de DH_1 a été regroupé dans l'annexe 3.

Ces calculs sont très longs. Ils nécessitent l'expression analytique des lois de comportement utilisées ; en particulier, ils utilisent la forme analytique de la fonction h introduite en §2.8. On trouvera ces calculs en annexe 3.

Après calcul des dérivées, (253) est un système linéaire par rapport aux inconnues $(\beta_i\rho_i)$ prises en chaque noeud. La matrice du système linéaire a la structure creuse classique d'une matrice d'éléments finis. Les seuls éléments non nuls correspondent à des noeuds qui appartiennent au même triangle. Elle est non symétrique et a de forts termes sur la diagonale (les termes en $1/\Delta t$).

Le système linéaire est résolu par une méthode de Gauss sans pivot.

Nous avons vérifié la convergence quadratique de notre algorithme de Newton. Par exemple, dans le test décrit ci-dessous, nous avons obtenu, au temps $t = 2200s$ et pour un pas de temps de $100s$,

Itération Newton	$\frac{\ \Delta\beta_a\rho_a\ _\infty}{(\beta_a\rho_a)_{ref}}$	$\frac{\ \Delta\beta_v\rho_v\ _\infty}{(\beta_v\rho_v)_{ref}}$	$\frac{\ \Delta\beta_l\rho_l\ _\infty}{(\beta_l\rho_l)_{ref}}$
1 ^{ère}	$5.3 \cdot 10^{-4}$	$3.4 \cdot 10^{-4}$	$5.0 \cdot 10^{-4}$
2 ^{ème}	$7.3 \cdot 10^{-6}$	$7.0 \cdot 10^{-8}$	$8.4 \cdot 10^{-8}$
3 ^{ème}	$2.0 \cdot 10^{-13}$	$1.3 \cdot 10^{-14}$	$1.1 \cdot 10^{-14}$

6.3.1. Tests numériques

Nous présentons les résultats du test 6.2.4. où la pression du gaz est supposée constante et du même test où cette hypothèse a été supprimée. Dans ce dernier cas, la variable $\beta_a\rho_a$ doit être calculée.

Les pas de temps sont donnés. Ils varient de 1s à 600 s (fig. 23 et fig. 24). Sur une durée déterminée, le nombre de pas de temps est lié à la précision des évolutions des variables que l'on recherche. Par exemple, dans le deuxième test, les pas de temps sont petits au début des calculs pour obtenir une évolution de la pression d'air très régulière (fig. 25). Dans les deux cas, le schéma de Newton converge en 3 ou 4 itérations.

Les évolutions correspondantes à ces deux tests sont les mêmes qu'elles soient obtenues par le schéma de Jacobi ou de Newton (fig. 20, fig. 21, fig. 25). Simplement, les pas de temps dans Newton sont beaucoup plus grands.

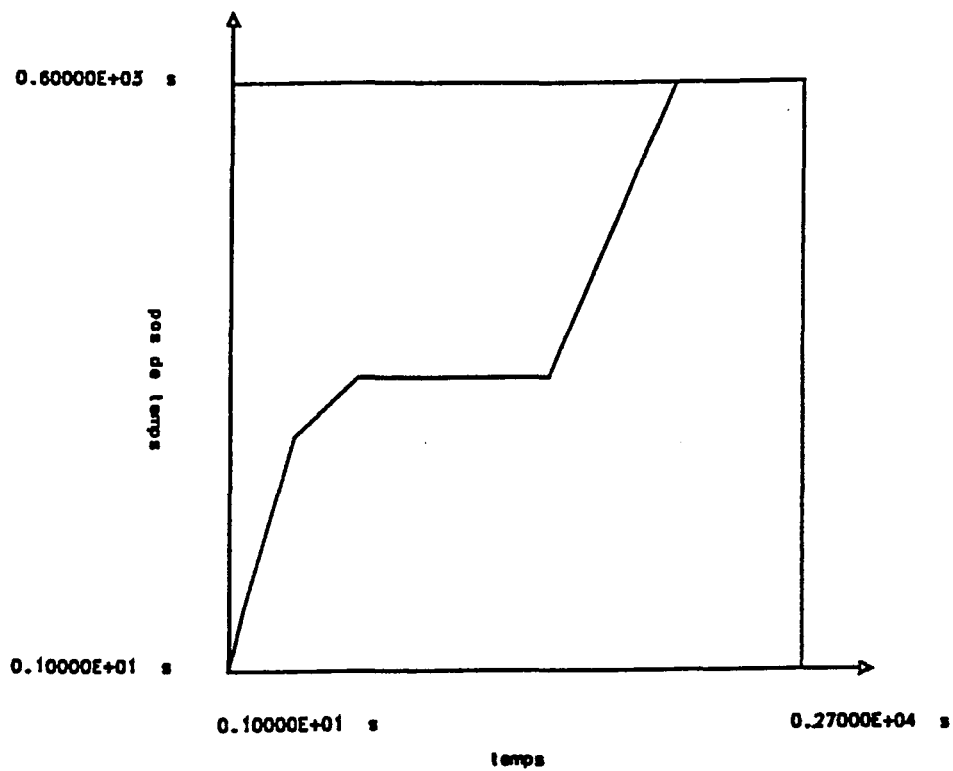


Figure 23 : Evolution du pas de temps (pression du gaz constante).

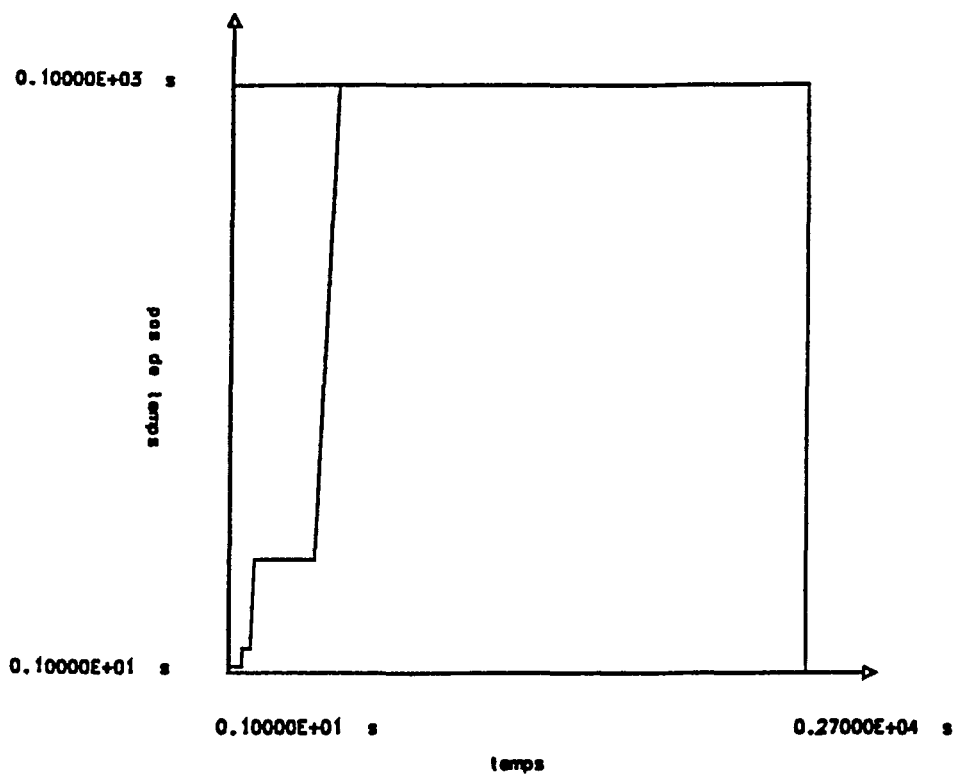


Figure 24 : Evolution du pas de temps (pression du gaz variable).

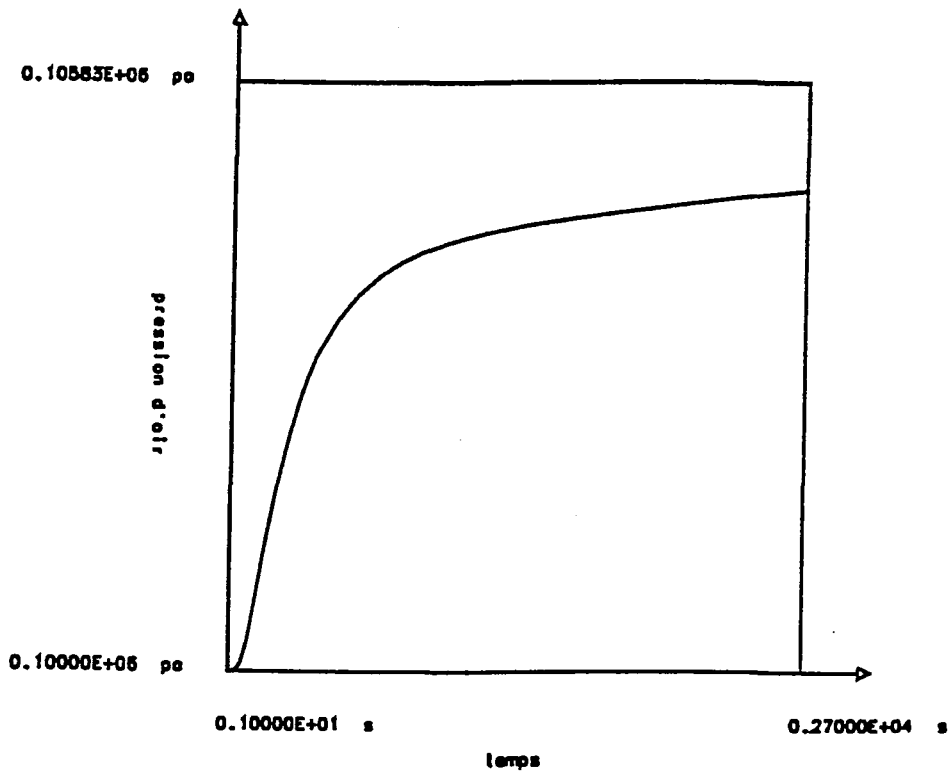


Figure 25 : Evolution de la pression d'air en un point situé à 5 cm du bord.

6.3.2. Comparaison des méthodes Jacobi-Newton

Les résultats numériques étant identiques, nous allons comparer le nombre de pas de temps et le temps c.p.u. pour les deux tests précédents :

	Pression du gaz constante		Pression du gaz variable	
	Pas de temps	Temps c.p.u.	Pas de temps	Temps c.p.u.
Jacobi	180	46'	1324	10h21'
Newton	9	14'	77	5h18'

En règle générale, la méthode de Newton s'avère plus rapide.

Dans le deuxième test, la constante de temps de l'équation de conservation de l'air est plus faible que celle de l'eau et on introduit des nouveaux couplages ; les calculs sont ainsi beaucoup plus longs par rapport au premier test. On aurait pu affiner le calcul avec Newton en diminuant le nombre de pas de temps.

Au niveau de chaque pas de calcul en temps, la méthode de Jacobi est plus économique. Cela s'explique par le fait que, contrairement à la méthode de Newton, il n'y a pas d'inversion de matrice.

Par contre, la convergence de Jacobi est très limitée par la valeur du pas de temps comme nous l'avons remarqué au paragraphe 6.2.4. Le pas de temps maximal, dans les deux tests, est voisin de 30 s alors que, pour Newton, cette valeur est de l'ordre de 500 s.

Finalement, nous adopterons le schéma de Newton pour les calculs numériques présentés au chapitre suivant.

En résumé, la méthode numérique finale est donc

- * discrétisation en espace par volumes finis non structurés définis sur la grille duale.

- * calcul éventuellement décentré des termes de transport.

- * schéma implicite en temps,

- * découplage de l'équation en température,

- * résolution du problème en $(\beta_i \rho_i)^{n+1}$ par un algorithme de Newton complet.

Chapitre 7 :

SIMULATIONS NUMERIQUES

7.1. Deux milieux modèles

Les calculs présentés dans ce chapitre ont été effectués suivant le schéma de Newton (cf. §6.3.). Pour mettre en valeur certains comportements physiques, nous avons choisi de prendre des cas simples de séchage ou d'imbibition de deux milieux poreux modèles : le mortier et le sable. Ces deux matériaux ont des isothermes de sorption différentes : l'isotherme du sable comporte un fort palier $HR = 1$ (cf. figures 9 et 12). Les fonctions d'interaction h déterminant ces isothermes sont décrites dans les paragraphes 2.8.5 et 2.8.6. Nous allons préciser les autres caractéristiques physiques, pour les deux milieux choisis, nécessaires aux différentes simulations numériques. Elles s'ajoutent à celles déjà définies en 3.4.

7.1.1. Paramètres physiques du mortier

Les caractéristiques du mortier de ciment sont tirées des travaux de J.F. DAIAN [16] :

1) la porosité :

$$\varepsilon = 0.17 \text{ m}^3/\text{m}^3,$$

2) la masse volumique du squelette :

$$\rho_s = 2070. \text{ kg}/\text{m}^3,$$

3) la capacité calorifique du squelette :

$$c_s = 800. \text{ J}/\text{kg.K},$$

4) la conductivité thermique :

$$\lambda = 1. \text{ W}/\text{m.K},$$

5) la perméabilité de la phase liquide est définie par un spline cubique à partir des valeurs suivantes :

$\beta_l(\text{m}^3/\text{m}^3)$	0.	0.06	0.08	0.10	0.17
$K_l(\text{m}^2/\text{s.P}_a)$	0.	$2. 10^{-19}$	$2. 10^{-18}$	$2. 10^{-17}$	$2. 10^{-16}$

6) la perméabilité de la phase gazeuse est définie par un spline cubique à partir des valeurs suivantes :

$\beta_l(\text{m}^3/\text{m}^3)$	0.	0.07	0.09	0.11	0.17
$K_g(\text{m}^2/\text{s.P}_a)$	10^{-14}	10^{-15}	10^{-16}	10^{-17}	0.

7) le coefficient de diffusion de vapeur d'eau dans l'air est défini par un spline cubique à partir des valeurs suivantes :

$\beta_l(m^3/m^3)$	0.	0.022	0.037	0.05	0.06	0.17
$K_{av}(m^2/s.P_a)$	2.10^{-12}	$3.7 \cdot 10^{-12}$	$6.7 \cdot 10^{-12}$	$1.1 \cdot 10^{-12}$	$1.5 \cdot 10^{-11}$	$3.5 \cdot 10^{-11}$

7.1.2. Paramètres physiques du sable

Les caractéristiques du sable sont tirées des travaux de P. CRAUSSE [15] :

1) la porosité :

$$\varepsilon = 0.40 \text{ m}^3/\text{m}^3$$

2) la masse volumique du squelette :

$$\rho_s = 2900. \text{ kg}/\text{m}^3,$$

3) la capacité calorifique du squelette :

$$c_s = 1250. \text{ J}/\text{kg.K},$$

4) la conductivité thermique est définie par un spline cubique à partir des valeurs suivantes :

$\beta_l(m^3/m^3)$	0.	0.0435	0.087	0.40
$\lambda(W/m.K)$	0.32	0.60	1.50	2.

5) la perméabilité de la phase liquide est définie par un spline cubique à partir des valeurs suivantes :

$\beta_l(m^3/m^3)$	0.	0.195	0.26	0.40
$K_l(m^2/s.P_a)$	0.	$2. \cdot 10^{-10}$	$5. \cdot 10^{-10}$	$5. \cdot 10^{-9}$

6) la perméabilité de la phase gazeuse est définie par un spline cubique à partir des valeurs suivantes :

$\beta_l(m^3/m^3)$	0.	0.140	0.205	0.40
$K_g(m^2/s.P_a)$	10^{-6}	10^{-7}	$4. \cdot 10^{-8}$	0.

7) le coefficient de diffusion de vapeur d'eau dans l'air est défini par un spline cubique à partir des valeurs suivantes :

$\beta_l(m^3/m^3)$	0.	0.017	0.041	0.047	0.087	0.17	0.26	0.40
$K_{av}(m^2/s.P_a)$	$3. 10^{-9}$	$2. 10^{-9}$	$5. 10^{-10}$	$2.5 10^{-11}$	$1.4 10^{-11}$	$1.4 10^{-11}$	$1.7 10^{-10}$	$3. 10^{-10}$

7.1.3. Les coefficients K_{av} et K_g

L'estimation des perméabilités des milieux poreux non saturés pose de nombreux problèmes. Diverses approches ont été menées tant au niveau théorique [30] qu'expérimental [1]. Cet aspect n'est pas au centre de notre recherche. Toutefois, il nous est apparu nécessaire d'insister sur l'obtention de la perméabilité du gaz K_g .

En effet, ce paramètre n'est pas utilisé dans les modélisations macroscopiques qui supposent, dans la plupart des cas, la pression totale du gaz constante.

En l'absence de valeurs expérimentales, nous avons dans un premier temps estimé la valeur de K_g dans les tableaux précédents de la manière suivante :

$$K_g(\beta_l) = \frac{\mu_e}{\mu_a} K_l(\varepsilon - \beta_l)$$

où le rapport des viscosités de l'eau μ_e et de l'air μ_a est voisin de 55. Cela revient en fait à prendre les perméabilités relatives de l'air K_{ra} et de l'eau K_{rl} symétriques l'une de l'autre par rapport à $\beta_l = \varepsilon/2$ [34] :

$$K_{ra}(\beta_l) = K_{rl}(\varepsilon - \beta_l).$$

Dans un deuxième temps nous proposons une expérimentation pour accéder à ce paramètre. Elle est basée sur l'essai dit "essai de la coupelle" [31] qui permet usuellement de déterminer le coefficient de diffusion K_{av} à une température T donnée. Il consiste à obturer une coupelle par un échantillon de milieu poreux où l'on a placé une solution saline saturée fixant ainsi la pression de vapeur (figure 26).

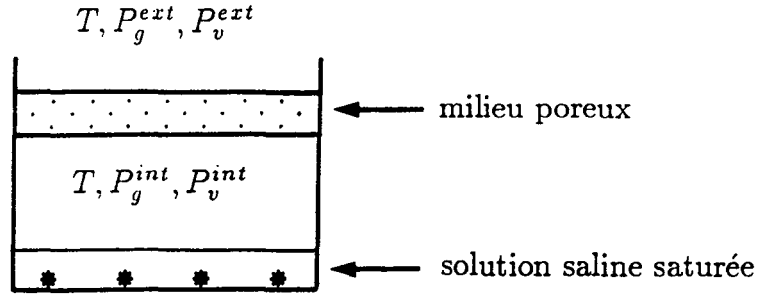


Figure 26 : Essai de la coupelle.

Lorsque le régime permanent est atteint, une pesée de la coupelle permet d'obtenir le flux massique de vapeur d'eau la traversant $\vec{J} = \beta_v \rho_v \vec{u}_v$.

Les lois de transfert régissant cette expérience sont la loi de Darcy de la phase gazeuse (143) et la loi de Fick (146). Si le régime est permanent, le flux \vec{J} est constant, la vitesse d'air est nulle à travers l'échantillon et ces deux lois s'écrivent alors

$$\beta_g \vec{u}_g = \beta_v \frac{P_v}{P_g} \vec{u}_v = -K_g \nabla P_g, \quad (254)$$

$$\beta_v \vec{u}_v - \beta_a \vec{u}_a = \beta_v \vec{u}_v = -K_{av} \frac{P_g^3}{P_a P_v} \nabla \frac{P_v}{P_g} = K_{av} \frac{P_g^3}{P_a P_v} \nabla \frac{P_a}{P_g}. \quad (255)$$

En utilisant la loi des gaz parfaits (198) pour la vapeur, le flux \vec{J} s'exprime à l'aide de (254) et (255) par :

$$\vec{J} = -\frac{M_v}{RT} K_g P_g \nabla P_g, \quad (256)$$

$$\vec{J} = \frac{M_v}{RT} K_{av} P_g^2 \frac{P_g}{P_a} \nabla \frac{P_a}{P_g}. \quad (257)$$

Notons avec l'exposant ext (resp. int) les quantités relatives à l'extérieur (resp. intérieur) de la coupelle. En supposant les coefficients K_g et $K'_{av} = K_{av} P_g^2$ constants et le régime permanent, nous pouvons intégrer les équations (256) et (257) sur toute l'épaisseur de l'échantillon e :

$$eJ = -\frac{1}{2} \frac{M_v}{RT} K_g ((P_g^{ext})^2 - (P_g^{int})^2), \quad (258)$$

$$eJ = \frac{M_v}{RT} K'_{av} \text{Log} \left(\frac{P_a^{ext} P_g^{int}}{P_g^{ext} P_a^{int}} \right), \quad (259)$$

le flux J étant la valeur algébrique de \vec{J} comptée positivement lorsque le flux de vapeur sort de la coupelle.

D'où l'on déduit

$$P_g^{int} = P_g^{ext} \sqrt{1+a}, \quad (260)$$

$$P_a^{int} = P_a^{ext} e^{-b} \sqrt{1+a}, \quad (261)$$

en posant

$$a = 2 \frac{RT}{M_v} \frac{e}{K_g (P_g^{ext})^2} J \quad (262)$$

et

$$b = \frac{RT}{M_v} \frac{e}{K'_{av}} J. \quad (263)$$

Si l'on fixe les pressions P_g^{ext} et P_v^{ext} on peut tracer une courbe $P_v^{int} = P_v^{int}(J)$ donnée par (260) à (263) :

$$\begin{aligned} P_v^{int} &= P_g^{int} - P_a^{int} \\ &= P_g^{ext} (1 - e^{-b}) \sqrt{1+a} + P_v^{ext} e^{-b} \sqrt{1+a}. \end{aligned} \quad (264)$$

La dérivée θ de cette courbe en $J = 0$ se calcule à partir des expressions de a et b (262)-(263) :

$$\theta = \frac{RT}{M_v} \frac{e P_a^{ext}}{K'_{av}} \left(1 + \frac{K'_{av}}{K_g (P_g^{ext})^2} \frac{P_v^{ext}}{P_a^{ext}} \right). \quad (265)$$

Expérimentalement, on détermine plusieurs points de la courbe $P_v^{int} = P_v^{int}(J)$ qui permettent d'estimer la pente θ de cette courbe au point $P_v^{int}(0) = P_v^{ext}$.

En général, ces expériences sont effectuées sous la pression atmosphérique et, dans ce cas, la variation de la pression P_g est négligeable

$$a \simeq 0.$$

La pente θ est alors donnée par

$$\theta = \frac{RT}{M_v} \frac{e P_a^{ext}}{K'_{av}}. \quad (266)$$

C'est de cette manière que l'on obtient expérimentalement $K_{av} = K'_{av}/P_g^2$.

La modification de l'essai consiste à l'effectuer sous une pression P_g^{ext} faible (voisine de P_v^{ext}). Nous pensons qu'alors la variation de pression totale P_g n'est plus négligeable et que l'on peut, via l'équation (265), déterminer K_g .

Ces nouveaux essais, en cours au C.S.T.B. de Champ-sur-Marne, confirmeront ou infirmeront cette analyse.

Remarque : Les coefficients K_g et K_{av} ont été pris constants car la pente θ n'intéresse qu'un voisinage de P_v^{ext} . En fait les deux valeurs sont affectées à la teneur en eau β_l correspondante à l'humidité relative $P_v^{ext}/P_{vs}^o(T)$ de l'isotherme de sorption. Ainsi nous obtenons des valeurs expérimentales des courbes $K_g(\beta_l)$ et $K_{av}(\beta_l)$.

7.2. Remontée capillaire

7.2.1. Description du problème traité

Nous considérons une éprouvette de mortier de hauteur 16 cm et de base 4 cm, sa partie latérale étant imperméabilisée. A l'instant $t = 0$, la base est mise en contact avec de l'eau liquide et nous analysons la remontée capillaire.

Le maillage utilisé (fig. 27) est régulier et formé de triangles isocèles. Il comporte 512 éléments et 297 noeuds. Le pas d'espace h est de l'ordre du demi centimètre.

La remontée capillaire est observée sur une durée de 1 jour. Le pas de temps croît de 0.05 s à 1000 s (fig. 28). Les pas de temps initiaux sont petits pour mieux prendre en compte les conditions limites.

Dans ce calcul nous avons choisi

- de prendre la température uniforme et constante en espace et en temps ($T = 20^\circ C$),
- de négliger les effets dissipatifs sur le changement de phase ($k = 1$),
- de négliger la gravité.

Les conditions initiales sont uniformes en espace :

$$\beta_l = 0.11,$$

$$HR(\beta_l = 0.11) = 0.97,$$

$$P_g = 1.013 \cdot 10^5 N/m^2.$$

L'éprouvette est soumise aux conditions aux limites suivantes :

- sur la surface latérale, une condition de Neumann (condition de Fourier-Robin (203) avec $\alpha_i = q_i = 0$) est imposée sur les trois inconnues $\beta_a \rho_a$, $\beta_v \rho_v$ et $\beta_l \rho_l$.

- sur la base, nous imposons une condition de Dirichlet (201) variant linéairement entre l'instant 0 et l'instant 60s où l'on obtient

$$\beta_l^{ext} = 0.16983,$$

$$HR^{ext}(\beta_i^{ext}) = 1.,$$
$$P_g^{ext} = 1.013 \cdot 10^5 N/m^2,$$

- sur la dernière extrémité, nous imposons une condition de Dirichlet qui permet de maintenir les conditions initiales.

Notons que la valeur de β_i^{ext} concernant la base de l'éprouvette a été fixée de telle sorte que la pression d'eau liquide sur cette surface vaut une atmosphère. C'est bien la valeur de la pression de l'eau qui affleure l'éprouvette.

Le temps de calcul c.p.u. a été de 3h46mn.

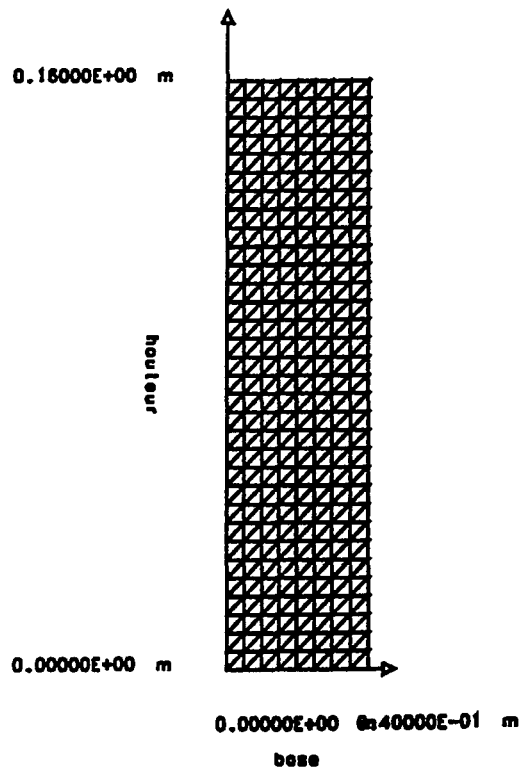


Figure 27 : Maillage.
Remontée capillaire dans un mortier.

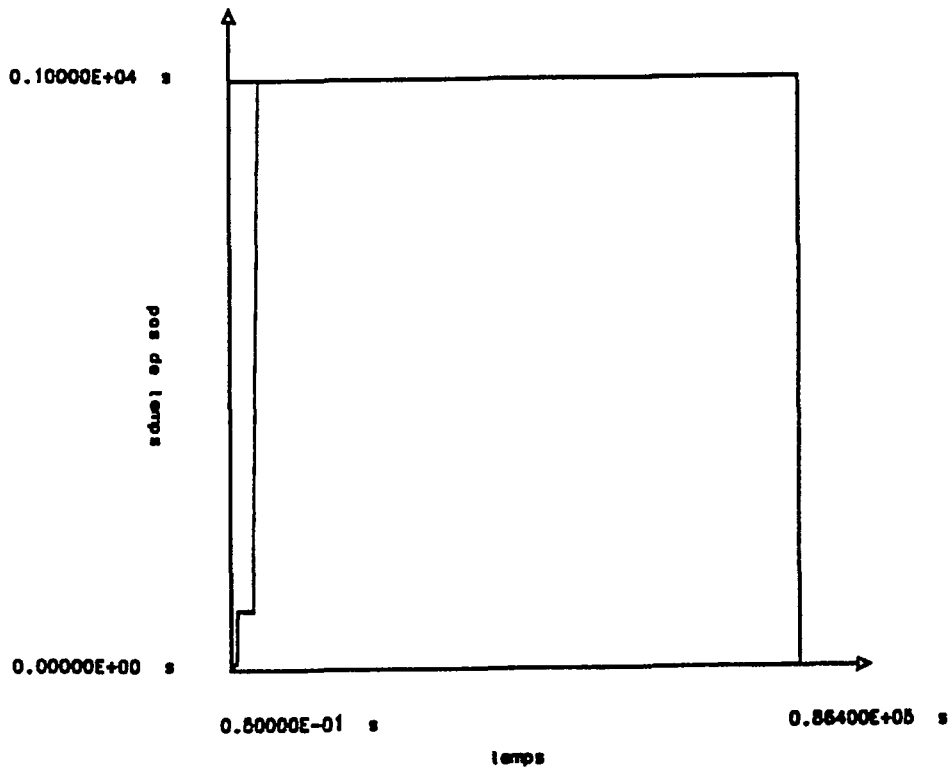


Figure 28 : Evolution du pas de temps.
Remontée capillaire dans un mortier.

7.2.2. Présentation et analyse des résultats numériques

La remontée capillaire est générée par un gradient de pression d'eau qui a tendance à s'atténuer au cours du temps. Au bout de 3 heures le profil de la pression d'eau est représentée figure 29.

Ainsi le liquide monte dans l'éprouvette à partir de sa base. Les vitesses d'eau sont maximales à la fin de la prise en compte des conditions aux limites ($t = 60s$) et de l'ordre de $10^{-5}m/s$. Ensuite, elles diminuent en module mais les mouvements d'eau concernent une plus grande partie de l'éprouvette (fig. 30).

En un point donné, la teneur en eau β_l et la pression de vapeur augmentent régulièrement au cours du temps (fig. 31 et fig. 32). Par contre, la pression du gaz P_g évolue de manière différente (fig. 33) ; elle passe par un maximum. En fait l'eau qui remonte dans l'éprouvette comprime la phase gazeuse. Une surpression est donc créée et le gaz a tendance à s'échapper soit par le haut de l'éprouvette soit par sa base (fig. 34). Expérimentalement nous observons la formation de bulle d'air dans l'eau liquide affleurant cette paroi. Cette surpression s'amortie pour laisser la place à un champ de pression de gaz uniforme (fig. 35).

Le même calcul a été lancé en remplaçant le mortier par le sable. Les phénomènes de remontées capillaires sont beaucoup plus rapides, les perméabilités étant plus grandes (fig. 36).

Pour les deux milieux étudiés, nous avons comparé les résultats numériques obtenus en supposant la pression du gaz constante en temps et en espace : nous n'avons remarqué aucun effet du changement de la pression du gaz sur la cinétique de remontée capillaire.

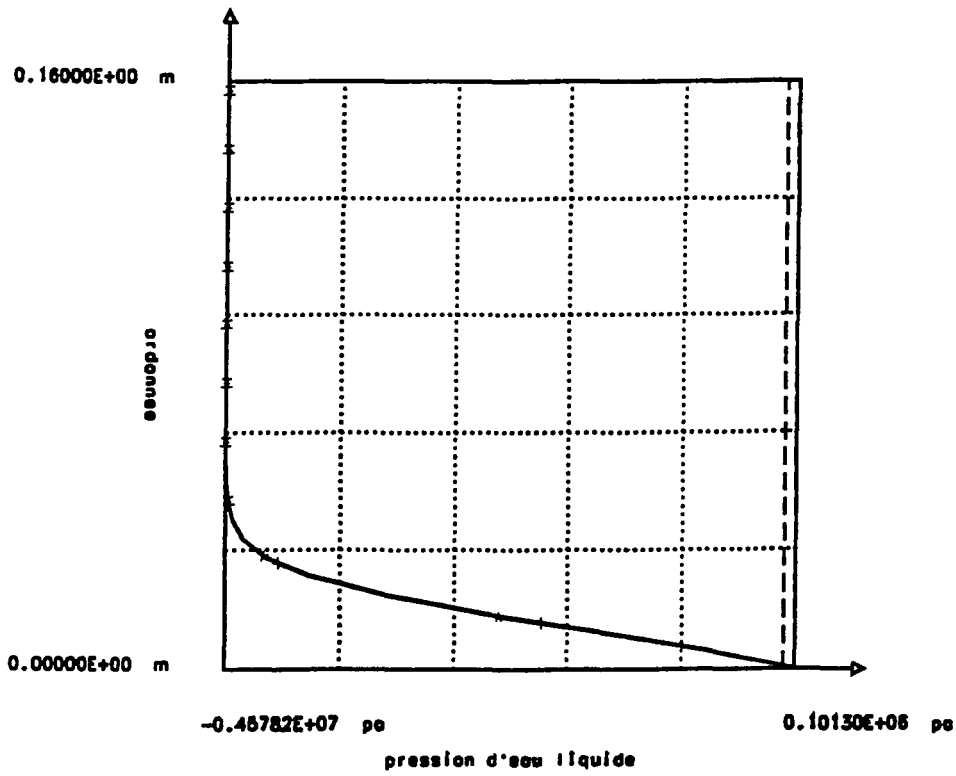


Figure 29 : Profil vertical de la pression d'eau liquide au temps $t = 3h$.
Remontée capillaire dans un mortier.

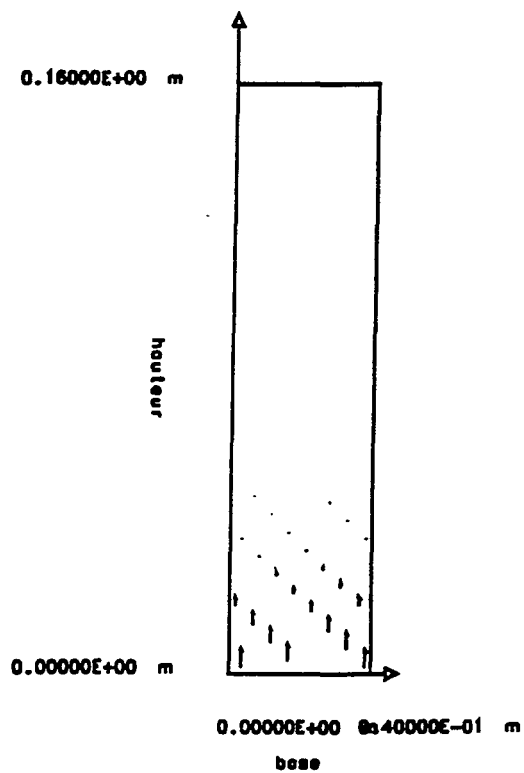


Figure 30 : Vitesses d'eau liquide au temps $t = 3h$.
Remontée capillaire dans un mortier.

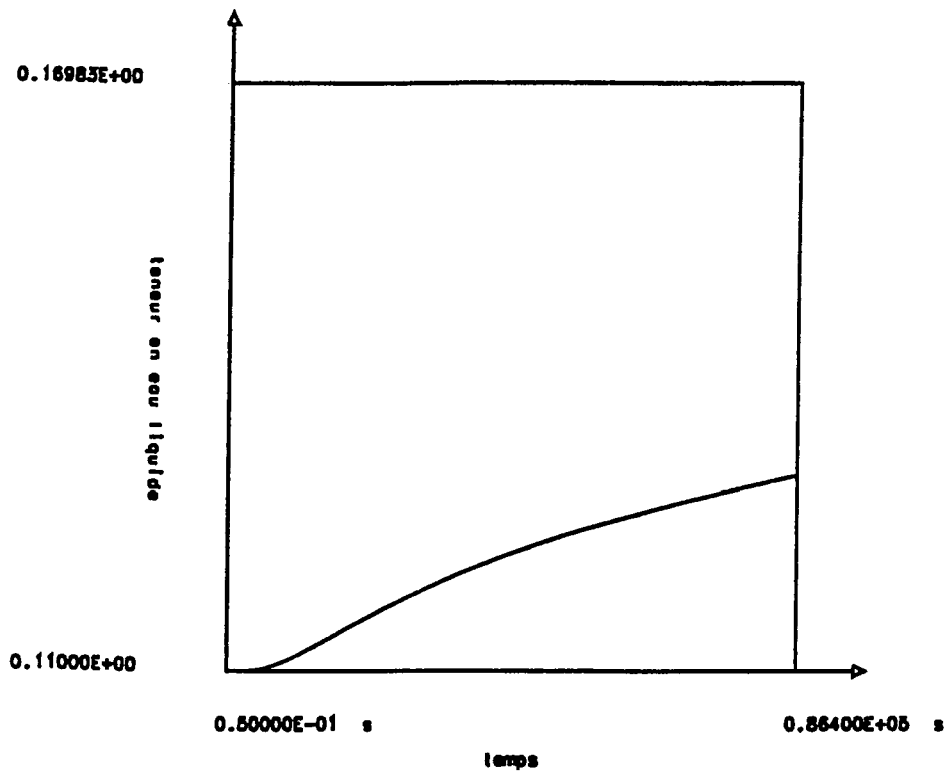


Figure 31 : Evolution de la teneur en eau à 3cm de la base de l'éprouvette.
Remontée capillaire dans un mortier.

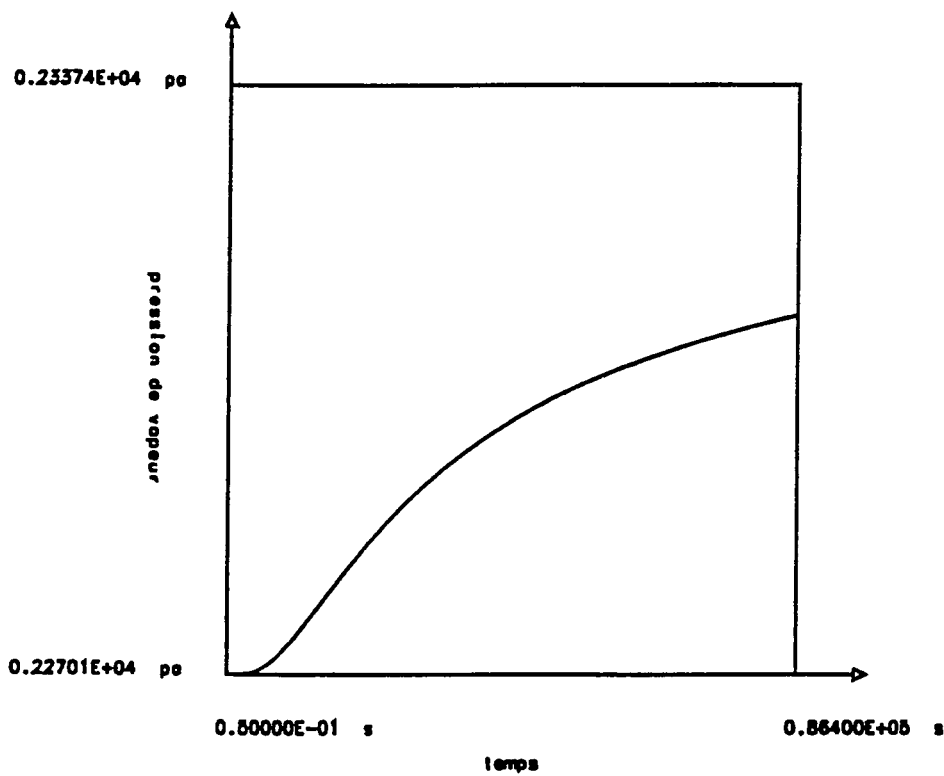


Figure 32 : Evolution de la pression de vapeur à 3cm de la base de l'éprouvette.
Remontée capillaire dans un mortier.

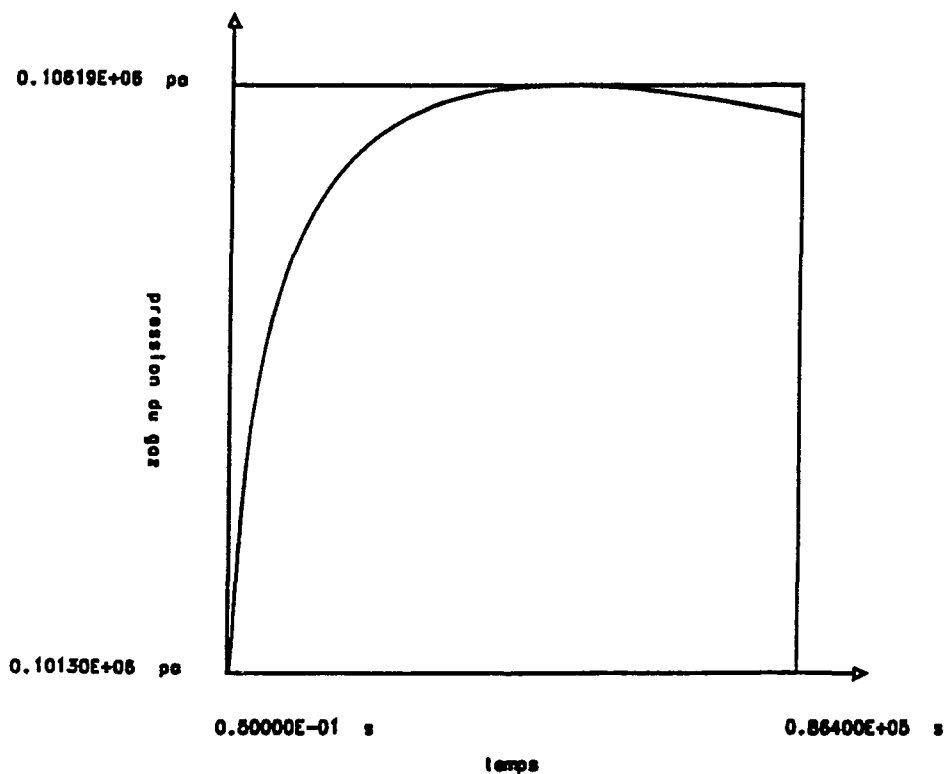


Figure 33 : Evolution de la pression du gaz à 3cm de la base de l'éprouvette.
Remontée capillaire dans un mortier.

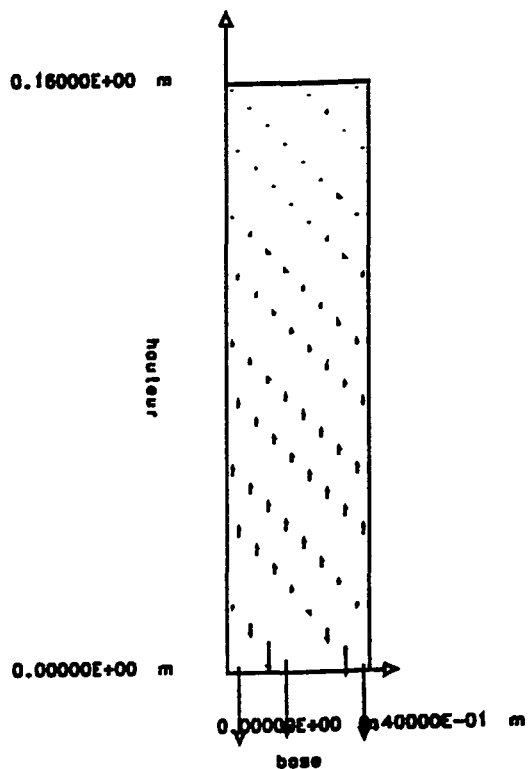


Figure 34 : Vitesses d'air au temps $t = 3h$.
Remontée capillaire dans un mortier.

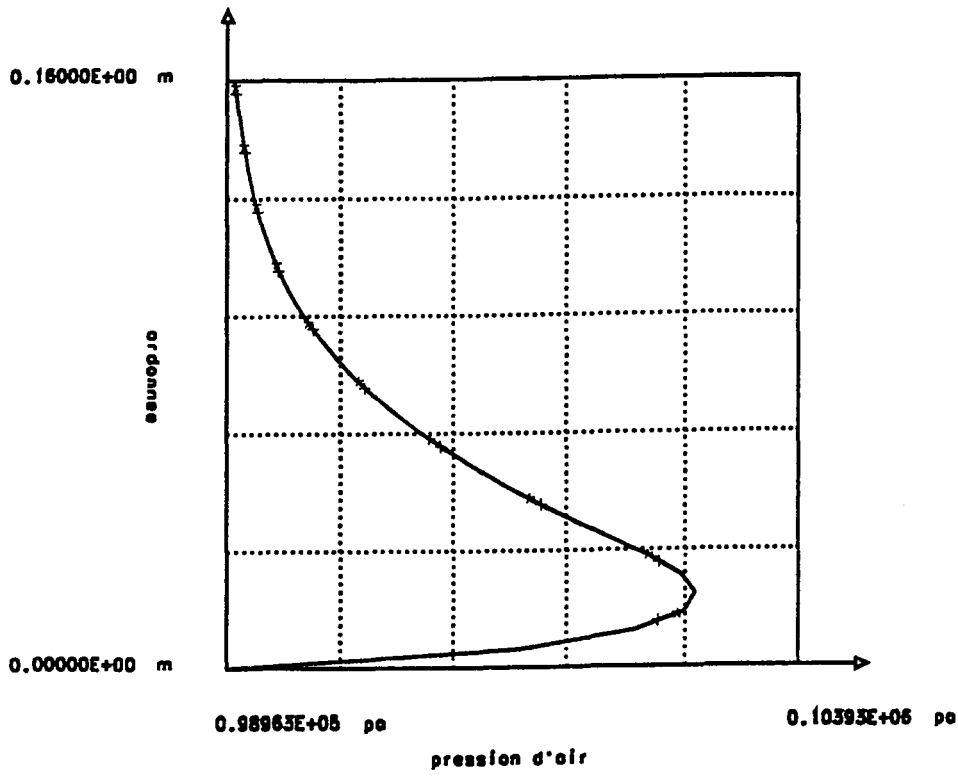


Figure 35 : Profil vertical de la pression d'air au temps $t = 3h$.
Remontée capillaire dans un mortier.

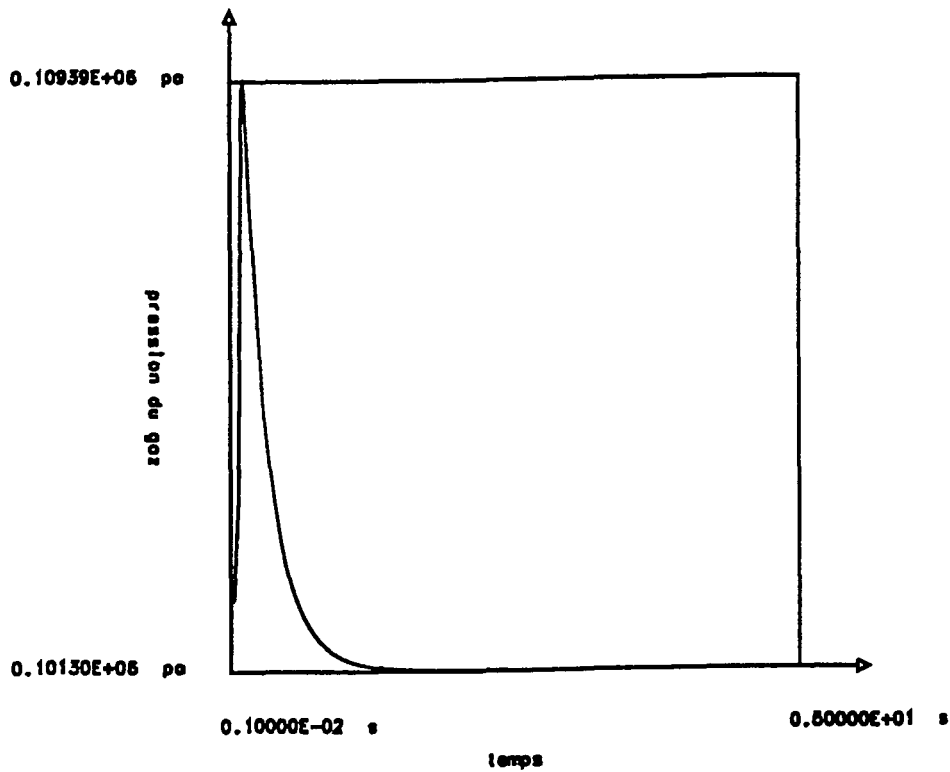


Figure 36 : Evolution de la pression du gaz à 3cm de la base de l'éprouvette.
Remontée capillaire dans un sable.

7.3. Influence des variations de la pression totale du gaz

7.3.1. Description du problème traité

Nous considérons un récipient carré de 30 cm de côté rempli par du sable. A l'instant initial sa partie supérieure est mouillée par de l'eau liquide à la pression atmosphérique. Nous analysons donc une imbibition du sable.

Le maillage utilisé (fig. 37) est régulier et formé de triangles isocèles. Il comporte 1800 éléments et 961 noeuds. Le pas d'espace h est de l'ordre du centimètre.

L'imbibition est observée sur une durée de 5 s. Le pas de temps croît de 0.005 s à 0.1s d'une manière similaire à celle de la figure 28.

Dans le calcul, nous avons choisi

- de prendre la température uniforme et constante en espace et en temps ($T = 20^\circ C$),
- de négliger les effets dissipatifs sur le taux de changement de phase ($k = 1$),
- de prendre en compte la gravité.

Les conditions initiales sont uniformes en espace :

$$\beta_l = 0.35,$$

$$HR(\beta_l = 0.35) = 0.998,$$

$$P_g = 1.013 \cdot 10^5 N/m^2.$$

Pour décrire ce phénomène d'imbibition, le milieu est soumis aux conditions limites suivantes :

- sur la surface libre du récipient, nous imposons une condition de Dirichlet variant linéairement entre l'instant 0 et l'instant 0.1 s où l'on obtient

$$\beta_l^{ext} = 0.3998,$$

$$HR^{ext}(\beta_l^{ext}) = 1.,$$

$$P_g^{ext} = 1.013 \cdot 10^5 N/m^2,$$

- sur les trois autres côtés (les parois du récipient) une condition de Neumann est imposée sur les trois inconnues $\beta_a \rho_a, \beta_v \rho_v, \beta_l \rho_l$.

Ainsi nous nous sommes ramenés à un problème unidimensionnel. La valeur de β_l^{ext} correspond à une pression d'eau égale à la pression atmosphérique.

Le temps de calcul c.p.u. a été de 6h20mn pour 80 pas de temps.

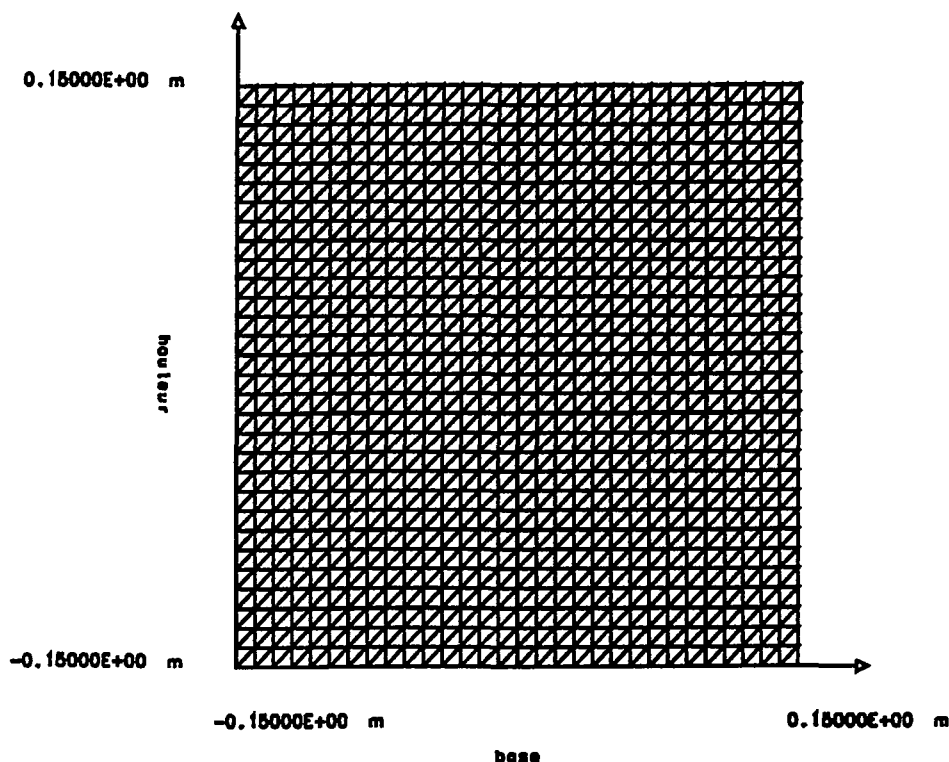


Figure 37 : Maillage.
Effets de la pression du gaz.

7.3.2. Présentation et analyse des résultats numériques

Par gravité et par un mouvement capillaire (la pression d'eau initiale est de $-0.6 \cdot 10^5 \text{ N/m}^2$), l'eau pénètre dans le sable par le haut du récipient et génère, comme pour le cas de la remontée capillaire, une surpression de la phase gazeuse. Ainsi une partie de l'air est chassée par le haut du récipient tandis qu'une autre est poussée vers le fond (fig. 38).

A la fin de la prise en compte des conditions limites ($t = 0.1 \text{ s}$), le profil de la pression du gaz est représenté figure 39. La surpression se propage vers le fond du récipient tout en augmentant. Une fois qu'elle a atteint le fond, la pression du gaz tend à s'uniformiser et à redevenir égale à la pression atmosphérique (figures 40, 41, 42). L'évolution de cette pression à 5cm de la surface libre présente deux maxima : le premier est dû à la surpression expliquée ci-dessus, le second au fait que la surpression ne pouvant s'échapper par le fond revient vers le haut du récipient (fig. 41).

Les évolutions de la teneur en eau sont beaucoup plus régulières ainsi que celles de la pression de vapeur et de la pression d'eau liquide (figures 43, 44, 45, 47).

Si l'on effectue le même calcul en supposant la pression totale de la phase gazeuse constante, nous remarquons des différences sur l'évolution des teneurs en eau : la surpression du gaz ralentit les mouvements d'eau (figures 45-46 et figures 47-48). Pour observer cette influence de variations de pression du gaz sur la cinétique d'imbibition, il a fallu se placer dans une zone de teneur en eau où la pression d'eau a un ordre de grandeur proche de la pression atmosphérique -sinon les mouvements capillaires prédominent-. C'est pour cela que ce type d'effet pourra être rencontré dans le cas d'un sable mais sera négligeable dans le cas d'un mortier.

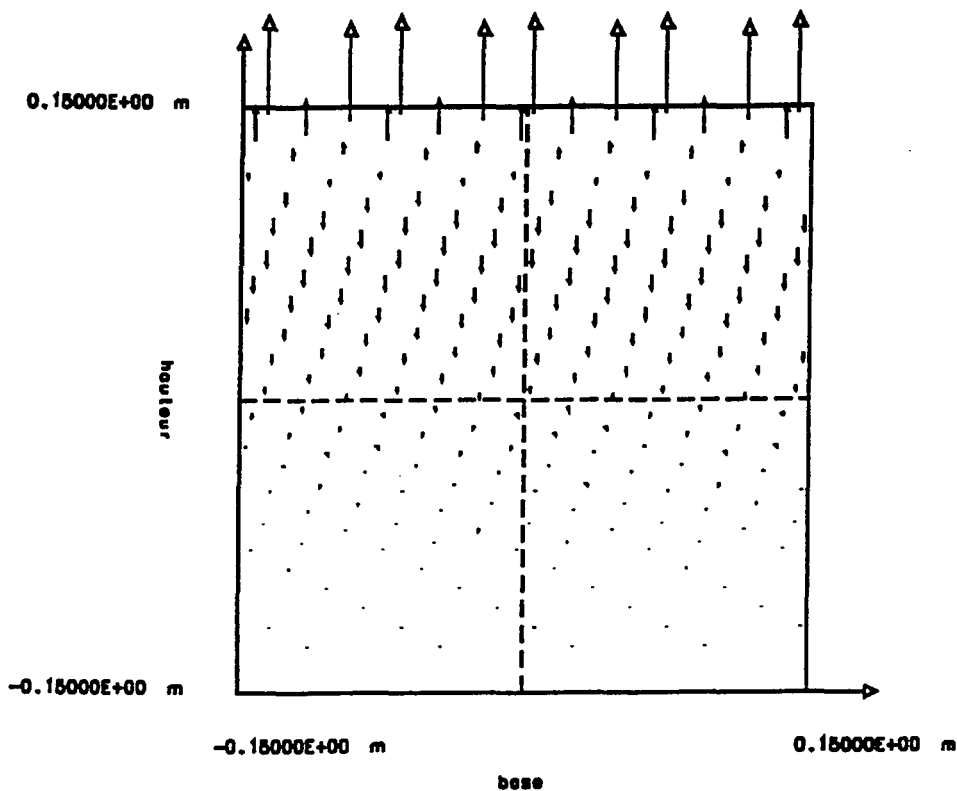


Figure 38 : Vitesses d'air au temps $t = 0.1s$.
Effets de la pression du gaz.

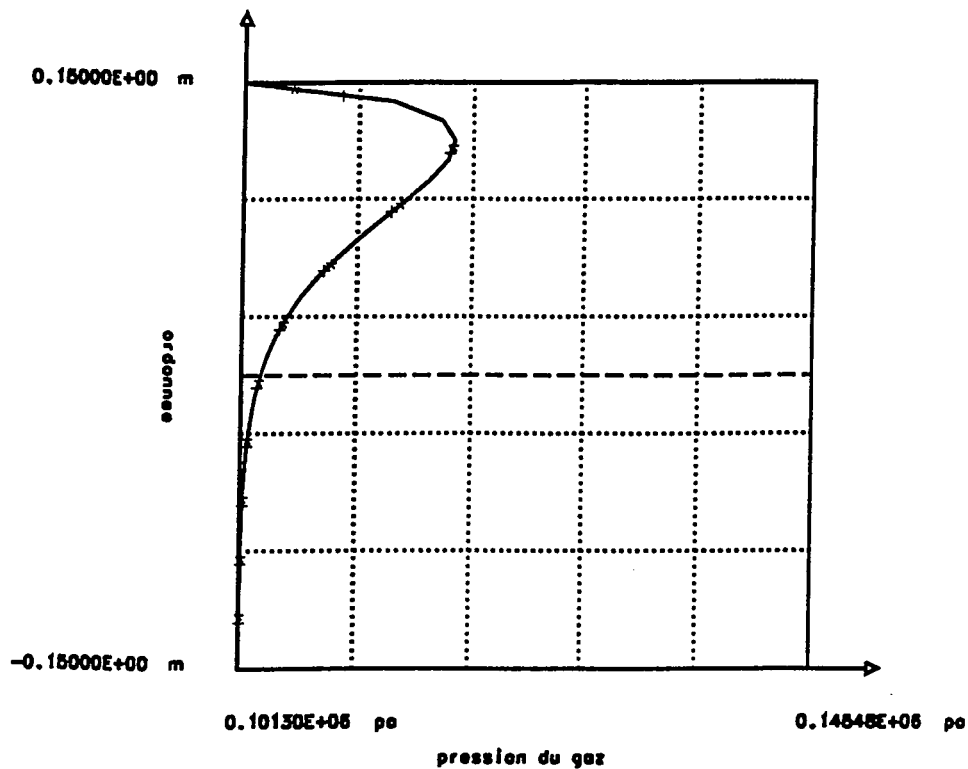


Figure 39 : Profil vertical de la pression du gaz au temps $t = 0.1\text{s}$.
Effets de la pression du gaz.

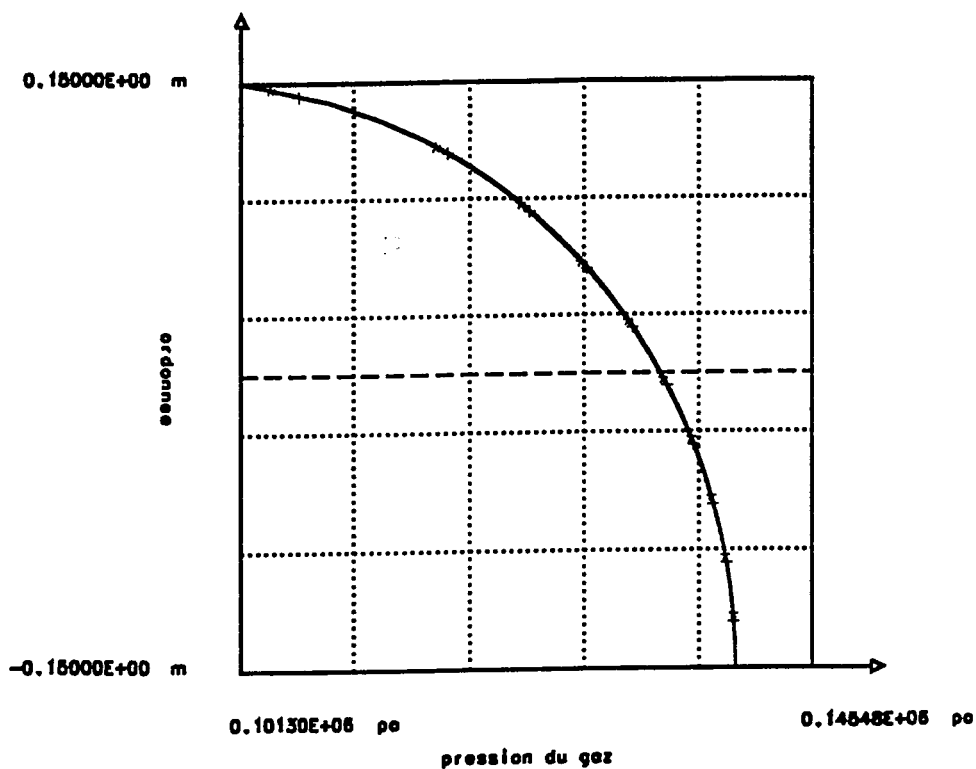


Figure 40 : Profil vertical de la pression du gaz au temps $t = 5\text{s}$.
Effets de la pression du gaz.

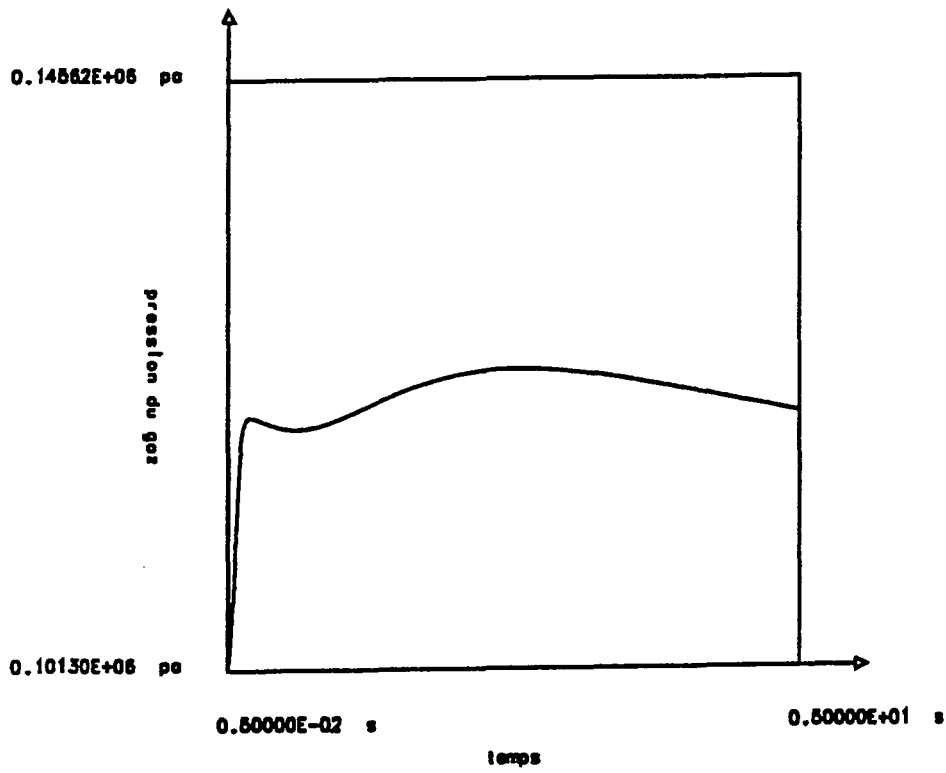


Figure 41: Evolution de la pression du gaz à 5cm de la surface du récipient.
Effets de la pression du gaz.

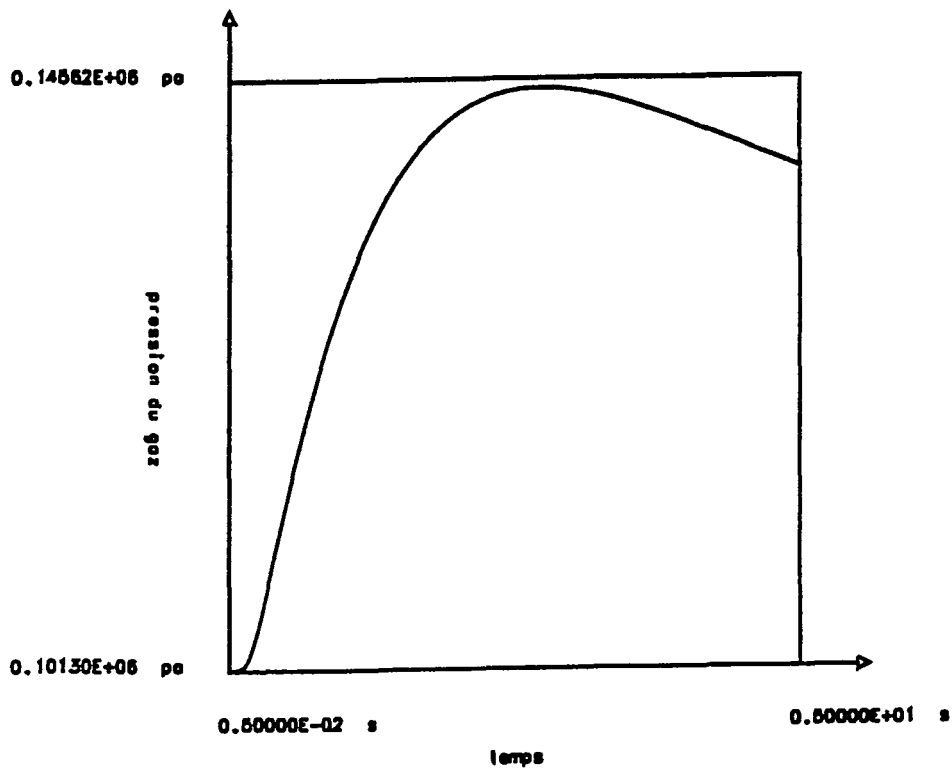
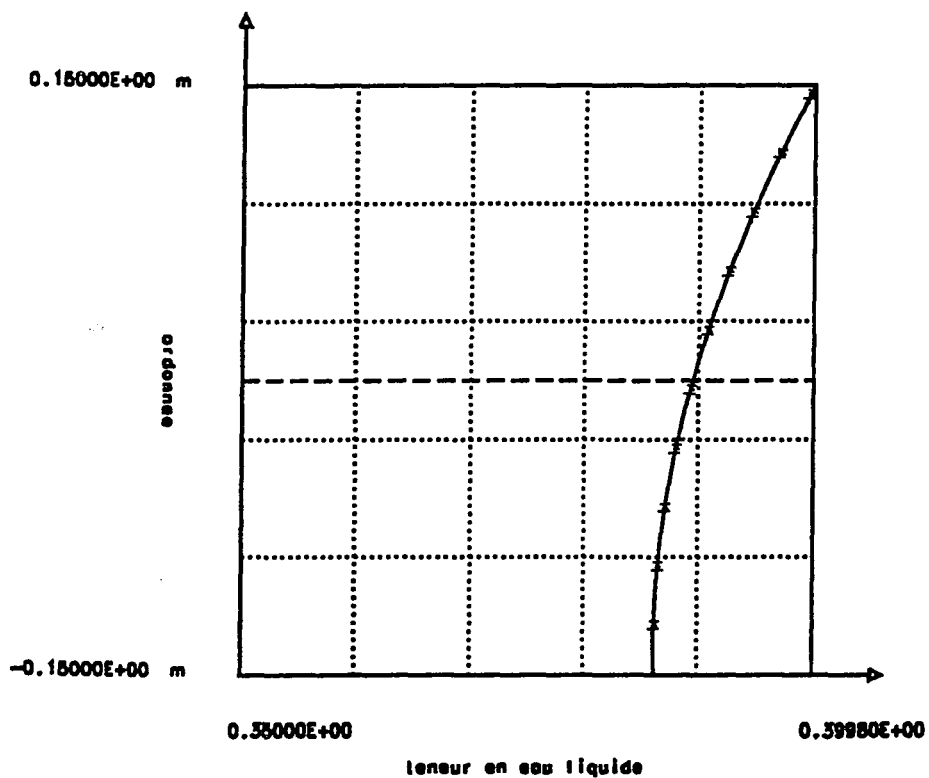
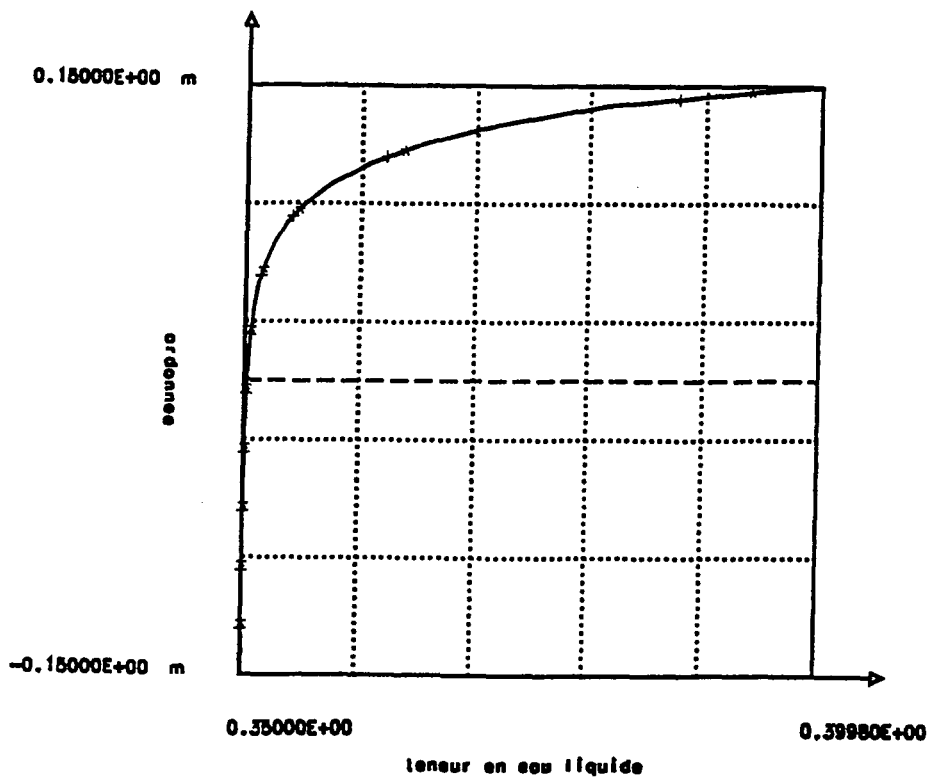


Figure 42 : Evolution de la pression du gaz au fond du récipient.
Effets de la pression du gaz.



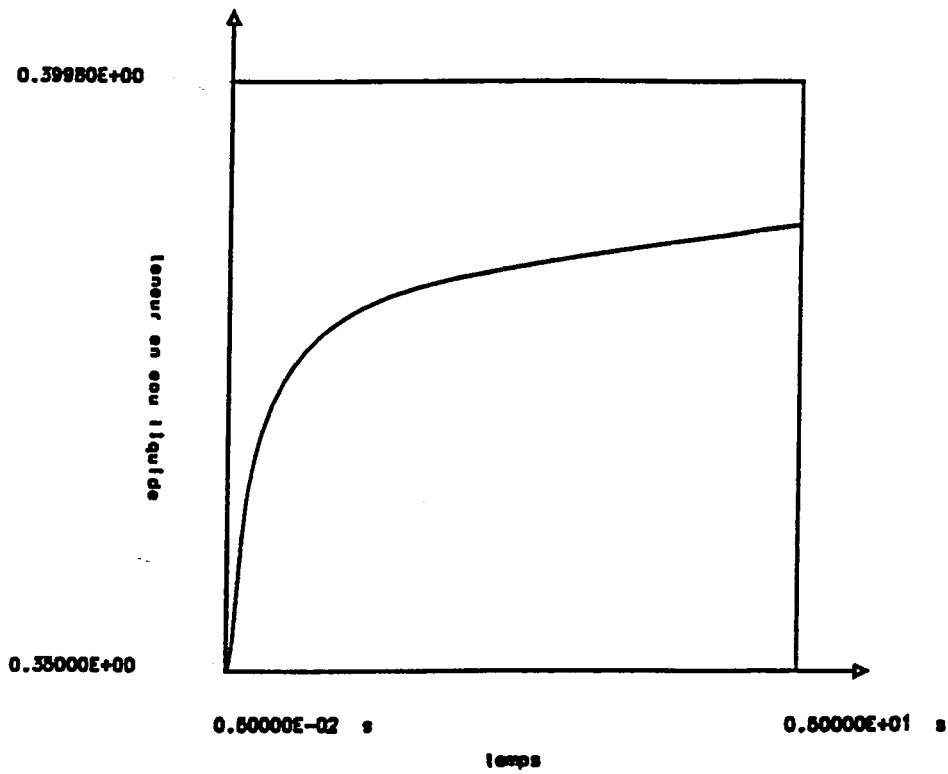


Figure 45 : Evolution de la teneur en eau liquide à 5cm de la surface du récipient .
Effets de la pression du gaz.

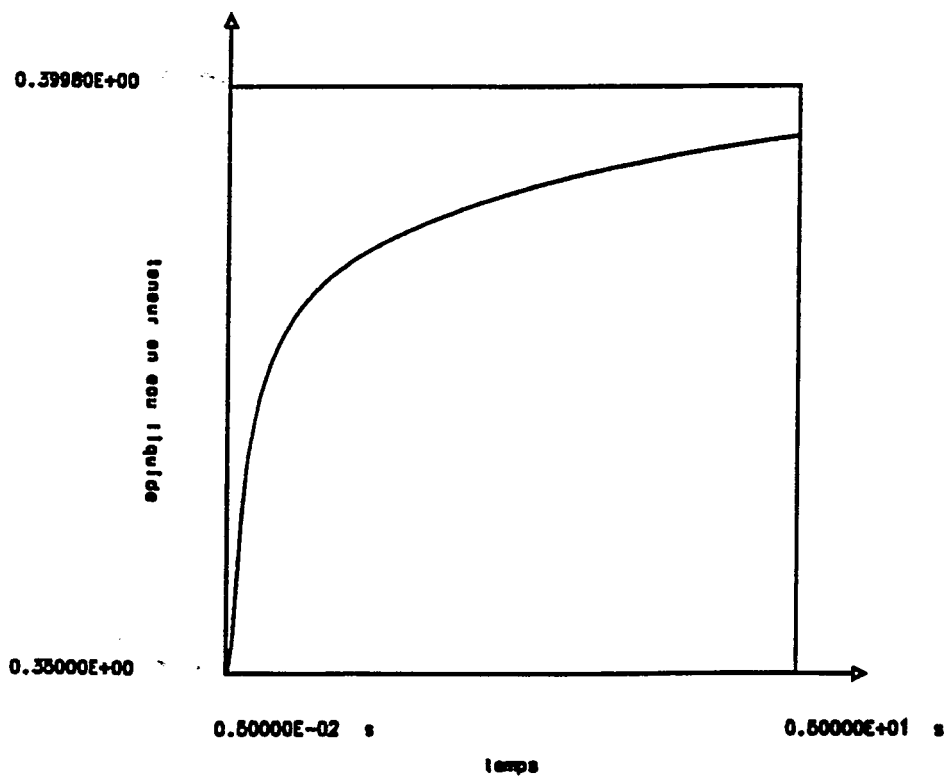


Figure 46 : Evolution de la teneur en eau liquide à 5cm de la surface du récipient
 si P_g est constant.
Effets de la pression du gaz.

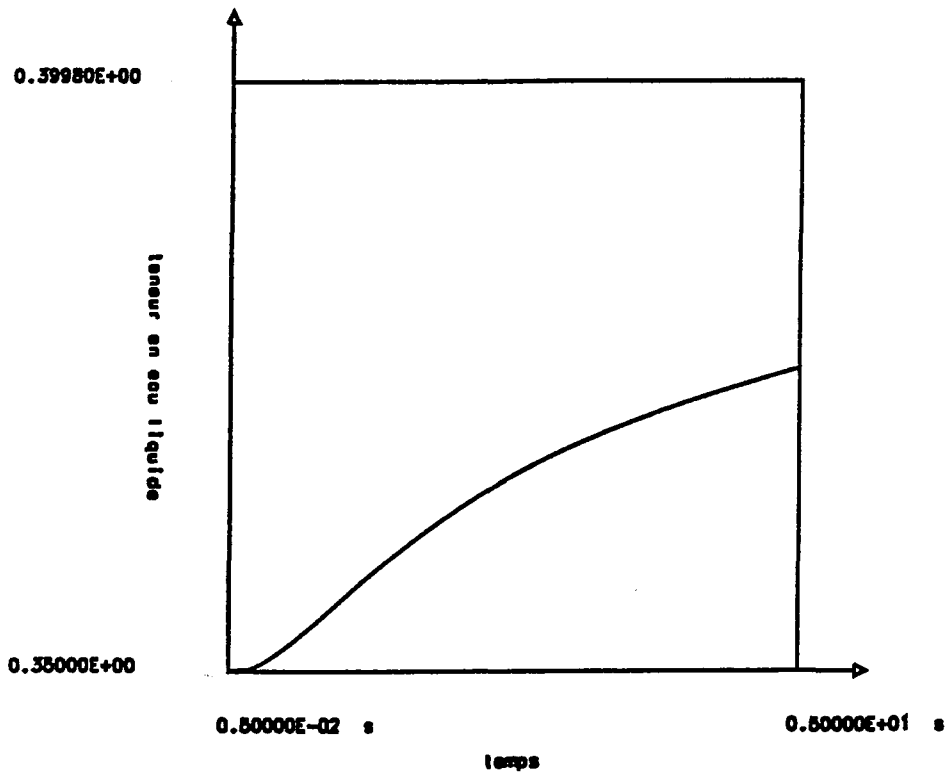


Figure 47 : Evolution de la teneur en eau liquide au fond du récipient.
Effets de la pression du gaz.

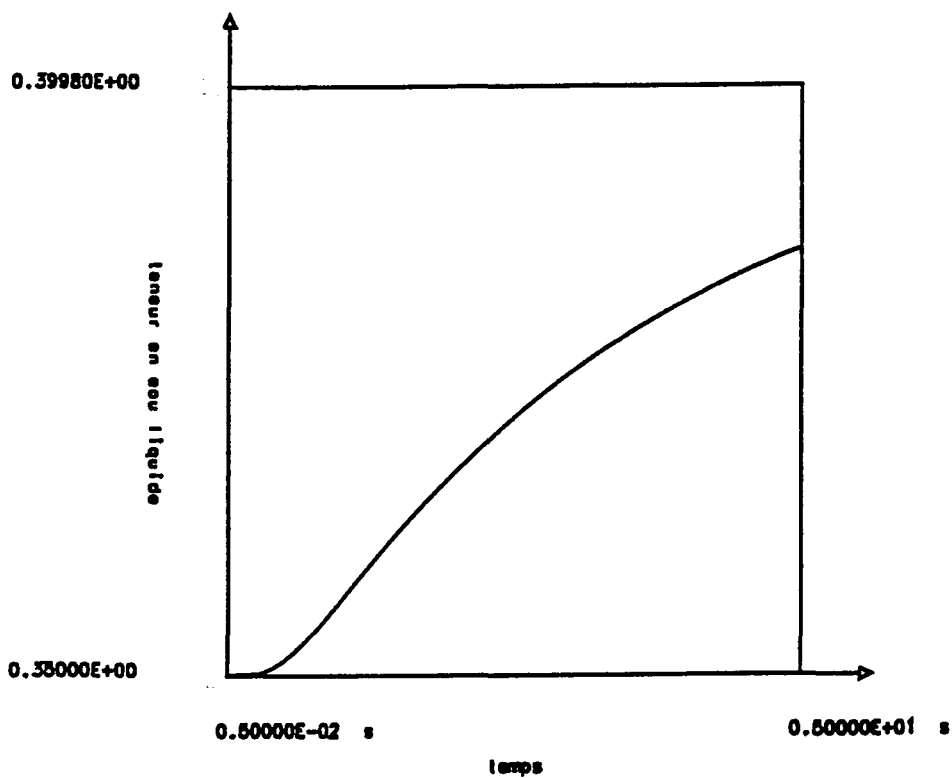


Figure 48 : Evolution de la teneur en eau liquide au fond du récipient
 si P_g est constant.
Effets de la pression du gaz.

7.4. Effets hystérétiques

7.4.1. Description du problème traité

Nous voulons étudier ici les effets hystérétiques sur un cycle de sorption-désorption. Pour cela nous considérons une paroi en mortier de 15cm d'épaisseur dont les deux surfaces seront en contact avec une ambiance humide puis une ambiance sèche.

Le maillage utilisé est identique à celui du cas 7.3. (fig. 37). On se ramène au cas unidimensionnel par des conditions limites adéquates.

La durée de l'expérience est de 60 jours. Le pas de temps croît de 10 s à 86400 s pour la prise en compte de nouvelles conditions limites et reste constant à 86400 s sinon.

Dans ce calcul, nous avons choisi

- de prendre la température et la pression du gaz uniformes et constantes en espace et en temps ($T = 20^\circ C, P_g = 1.013 \cdot 10^5 N/m^2$)
- de prendre en compte les effets dissipatifs sur le taux de changement de phase

$$k = 10^{10}.$$

- de négliger la gravité.

Les conditions initiales sont uniformes en espace :

$$\beta_l = 0.02,$$

$$HR(\beta_l = 0.02) = 0.096.$$

Les conditions limites sont les suivantes :

- sur deux côtés opposés du carré, nous imposons une condition de Neumann sur les inconnues $\beta_v \rho_v$ et $\beta_l \rho_l$,
- sur les deux autres côtés, nous imposons des conditions de Dirichlet variant linéairement entre l'instant 0 s et l'instant 60 s où l'on obtient

$$\beta_l^{ext} = 0.1,$$

$$HR(\beta_l^{ext}) = 0.95,$$

puis ces valeurs restent constantes jusqu'au temps 864000 s (10 jours) à partir duquel elles varient à nouveau linéairement pour aboutir au temps 1728000s aux valeurs initiales

$$\beta_l = 0.02,$$

$$HR(\beta_l = 0.02) = 0.096.$$

Le temps de calcul c.p.u. a été de 2h42mn pour 106 pas de temps.

7.4.2. Présentation et analyse des résultats numériques

En un point donné de la paroi, la teneur en eau liquide et l'humidité relative sont croissantes puis décroissantes en temps (figures 49 à 52). Le maximum de ces évolutions apparaît d'autant plus tardivement que le point se situe loin des bords de la paroi.

Dans le plan teneur en eau liquide β_l - humidité relative HR , nous obtenons des boucles d'hystérésis telles que celles représentées dans les figures 53 et 54. Nous remarquons que les points (β_l, HR) ont très rapidement tendance à revenir sur la courbe de sorption à l'équilibre $HR = \text{Log} \frac{P_v}{P_{vs}}(\beta_l)$. On aurait pu penser qu'à travers l'équation de dissipation

$$\frac{\partial \rho_l \beta_l}{\partial t} + \text{div}(\rho_l \beta_l \vec{u}_l) = \frac{RT}{kM_v} \text{Log} \frac{P_v}{P_{vs}},$$

en régime permanent, la pression de vapeur P_v serait différente de P_{vs} . En effet, le terme de divergence n'est, a priori, pas nul. Il s'avère que, pour notre cycle de sorption-désorption, ce ne soit pas le cas.

Expérimentalement, après un cycle de sorption-désorption, pour les milieux poreux présentant des phénomènes hystérétiques, l'état d'équilibre obtenu ne vérifie pas $P_v = P_{vs}(\beta_l)$.

Donc la dissipation sur le taux de changement de phase [10], même si on obtient des boucles d'hystérésis, ne permet pas de décrire des phénomènes hystérétiques dans différents états d'équilibre. Nous avons, en fait, une hystérésis "dynamique".

A titre indicatif, les figures 55 et 56 nous montrent comment évolue le profil de l'humidité relative d'un type "2 maxima" au type "1 maximum".

Remarque : Pour une modélisation de transferts d'humidité couplés à la déformation du milieu poreux, on ne peut imposer une porosité ε et donc une teneur en eau sur la frontière du milieu considéré. Les conditions limites ne vérifient pas obligatoirement l'équilibre $P_v = P_{vs}(\beta_l)$. A ce moment là, il pourrait être utile d'utiliser une dissipation sur le taux de changement de phase afin d'éviter des chocs numériques pour ramener la vapeur en équilibre avec l'eau liquide.

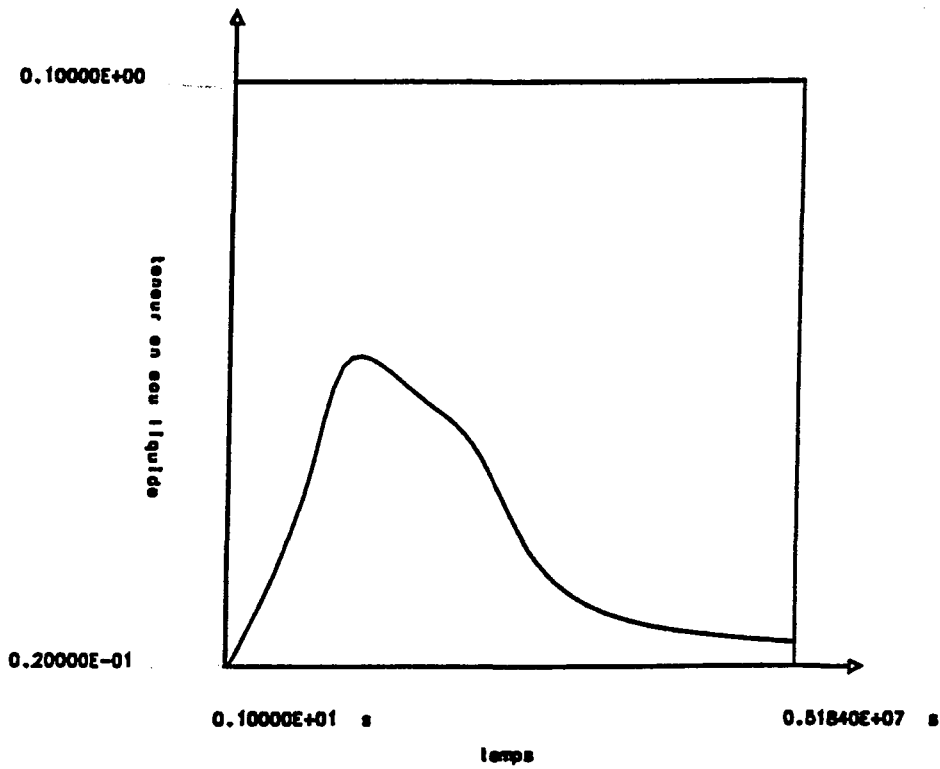


Figure 49 : Evolution de la teneur en eau liquide à 5cm du bord de la paroi.
Effets hystérétiques.

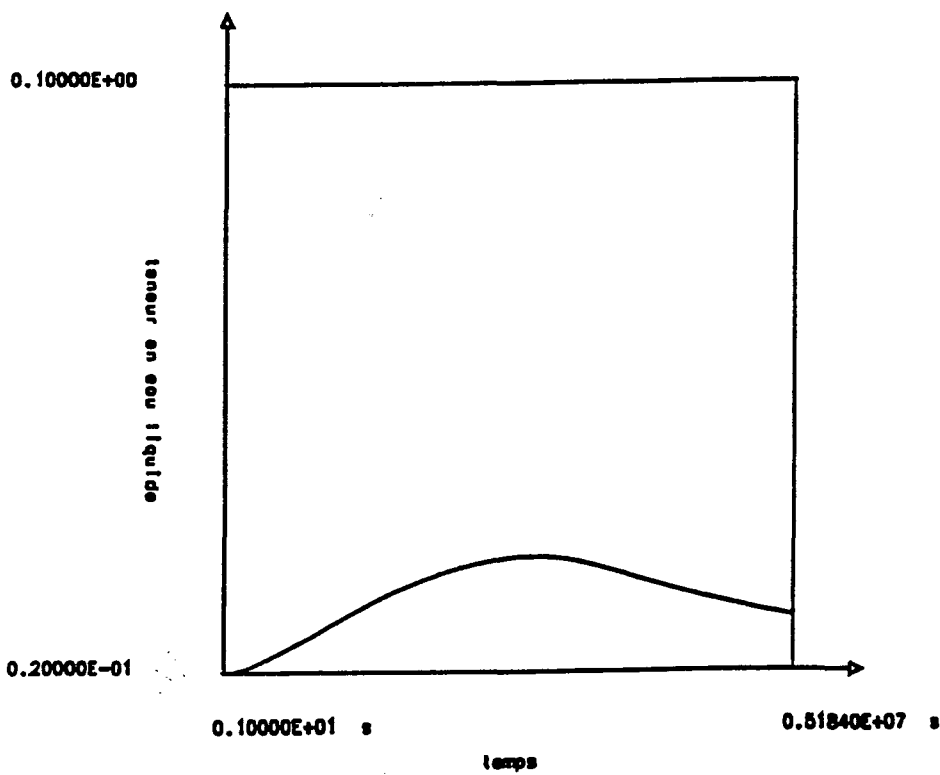


Figure 50 : Evolution de la teneur en eau liquide à 10cm du bord de la paroi.
Effets hystérétiques.

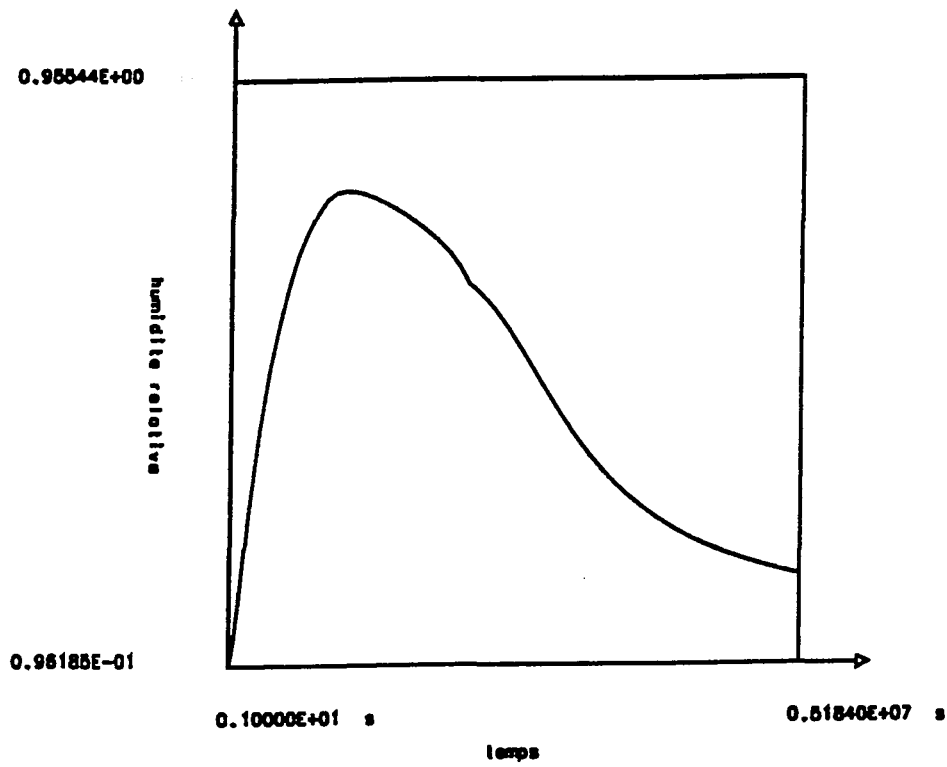


Figure 51: Evolution de l'humidité relative à 5cm du bord de la paroi.
Effets hystériques.

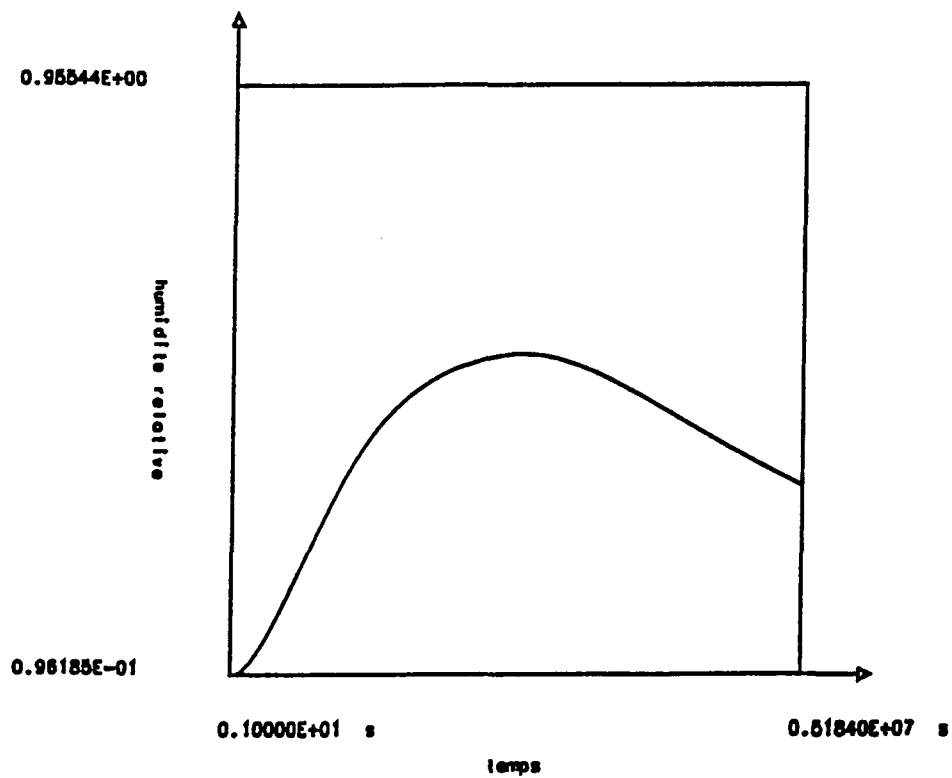


Figure 52 : Evolution de l'humidité relative à 10cm du bord de la paroi.
Effets hystériques.

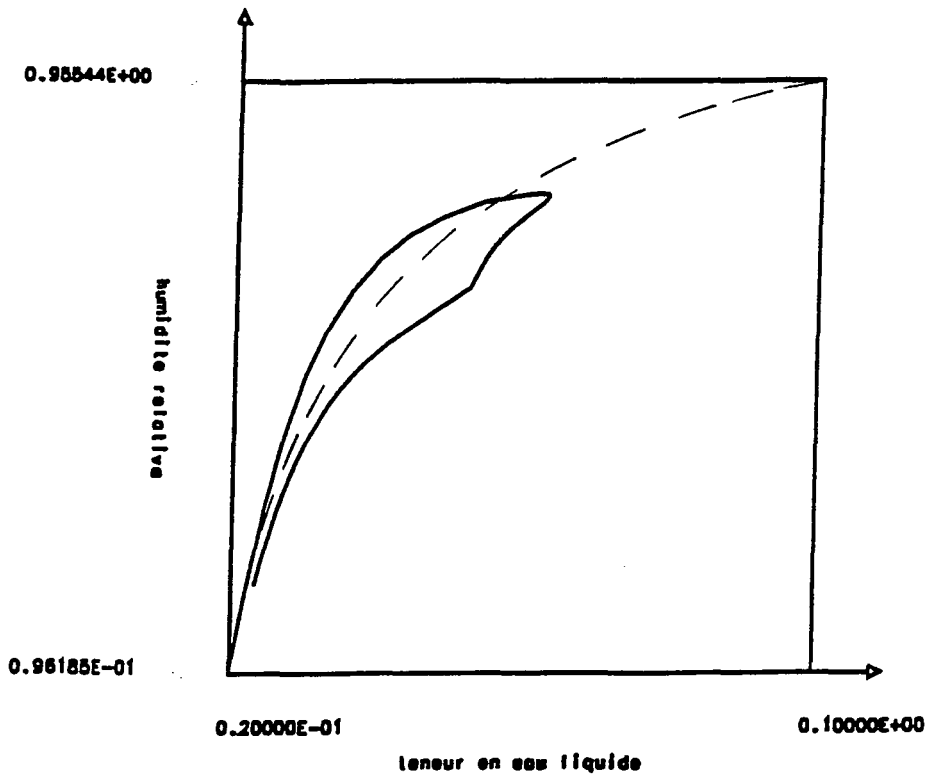


Figure 53 : Evolution de l'humidité relative en fonction de la teneur en eau à 5cm du bord de la paroi. Isotherme de sorption à l'équilibre (en pointillés). *Effets hystérétiques.*

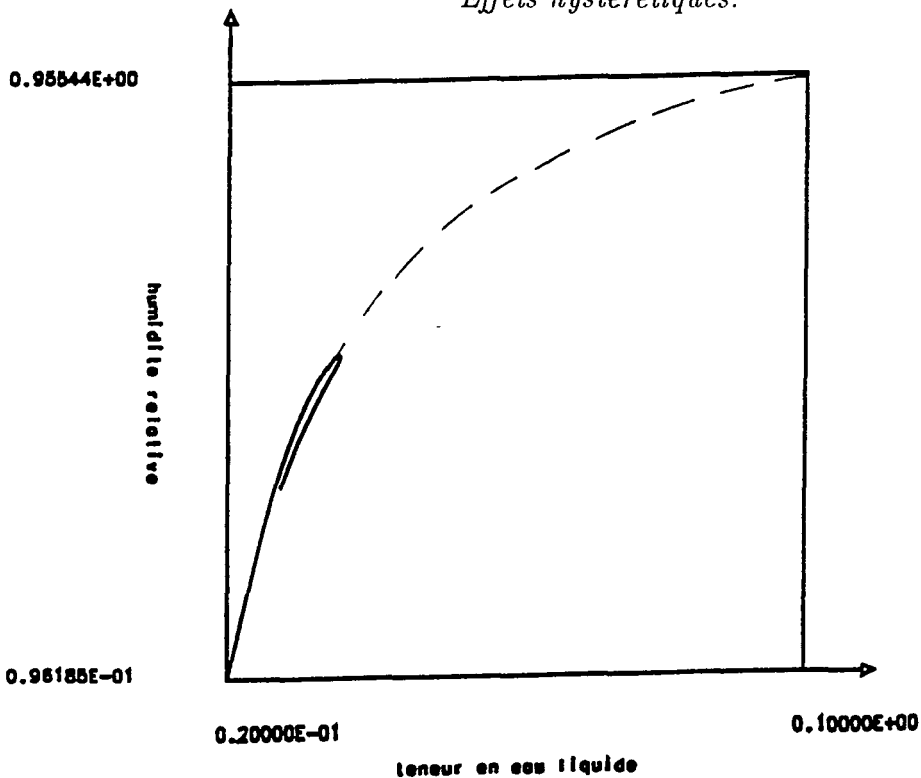


Figure 54 : Evolution de l'humidité relative en fonction de la teneur en eau à 10cm du bord de la paroi. Isotherme de sorption à l'équilibre (en pointillés). *Effets hystérétiques.*

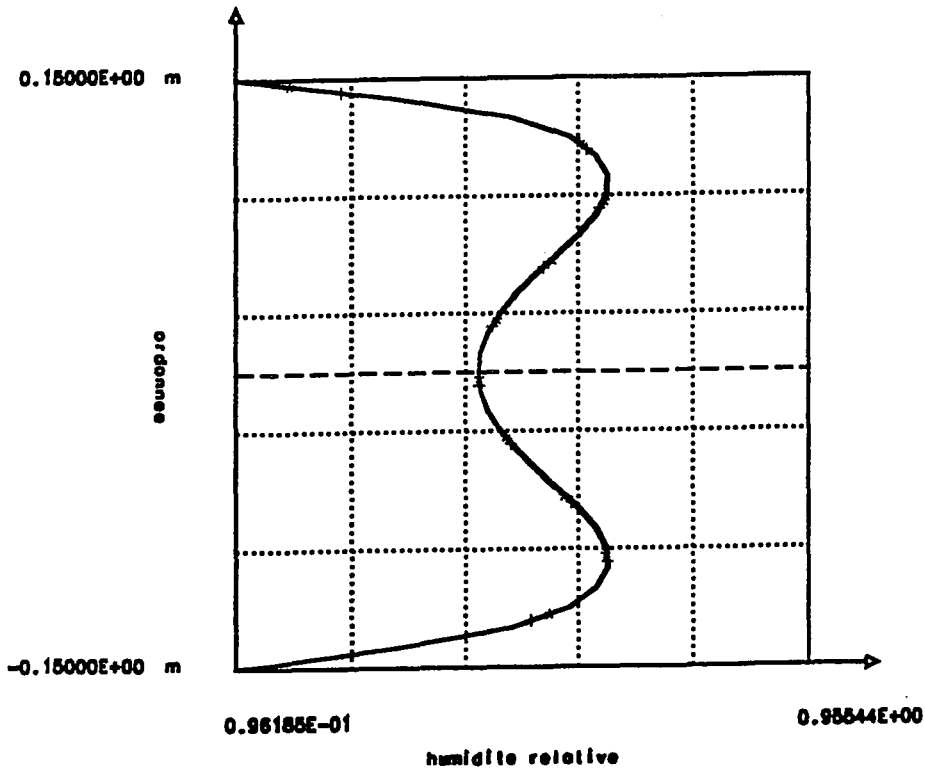


Figure 55 : Profil vertical d'humidité relative au temps $t = 25$ jours.
Effets hystérétiques.

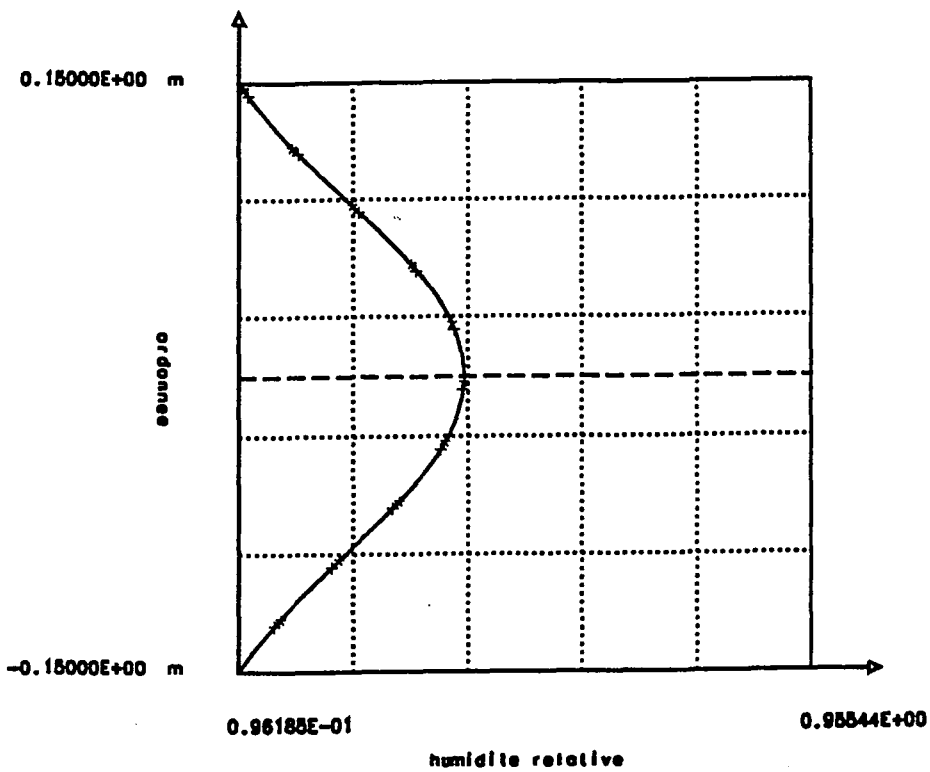


Figure 56 : Profil vertical d'humidité relative au temps $t = 60$ jours.
Effets hystérétiques.

7.5. Effets thermiques

7.5.1. Description du problème traité

Il s'agit d'un calcul sur la paroi de mortier décrite en 7.4. Nous allons sécher cette paroi en diminuant l'humidité relative ambiante et en imposant un gradient de température.

Le maillage est identique à celui utilisé au paragraphe 7.3. (fig. 37).

La durée de l'expérience est de 60 jours. Le pas de temps croît de 10s à 86400s pour la prise en compte des conditions limites et reste constant ensuite.

Dans ce calcul, nous avons choisi

- de prendre la pression du gaz uniforme et constante en espace et en temps ($P_g = 1.013 \cdot 10^5 N/m^2$),
- de négliger les effets dissipatifs sur le taux de changement de phase ($k = 1$),
- de négliger la gravité.

Les conditions initiales sont uniformes en espace :

$$\beta_l = 0.10,$$

$$HR(\beta_l = 0.10) = 0.95,$$

$$T = 20^\circ C.$$

La paroi est soumise aux conditions aux limites suivantes :

- sur deux côtés opposés du carré, nous imposons une condition de Neumann sur les inconnues $T, \beta_v \rho_v, \beta_l \rho_l$,
- sur les deux autres côtés, nous imposons des conditions de Dirichlet variant linéairement entre l'instant 0 et l'instant 60 s où l'on obtient

$$\beta_l^{ext} = 0.02,$$

$$HR(\beta_l^{ext}) = 0.096,$$

$$T = 20^\circ C \text{ sur une face,}$$

$$T = 23^\circ C \text{ sur l'autre.}$$

Le problème est ainsi unidimensionnel.

7.5.2. Présentation et analyse des résultats numériques

Nous nous intéressons ici à l'évolution du champ de température et nous la comparons à celle d'un calcul similaire où le couplage du changement de

phase liquide vapeur de l'eau a été négligé dans l'équation de la température ; c'est-à-dire nous avons posé dans ce calcul la fonction G correspondante à la chaleur latente identiquement nulle (192).

Le profil des températures devient très vite linéaire si le changement de phase est négligé (figures 58 et 60). Par contre, dans l'autre cas, il fait apparaître un fort gradient même à 60 j (figures 57, 59, 61). Cela signifie que l'apport de chaleur au bas de la paroi sert à vaporiser l'eau.

Ainsi les calculs d'évolution de la température nécessitent la prise en compte du changement de phase via la chaleur latente de vaporisation.

Par contre, vu la faible différence de température, l'effet thermique sur l'évolution de la teneur en eau est négligeable. Le profil de la figure 62 est bien symétrique par rapport à l'axe central de la paroi.

On remarque une légère dissymétrie des profils de pression de vapeur qui correspond bien aux profils de température selon que le changement de phase est négligé ou non (figures 63 et 64).

Il est inutile d'augmenter le gradient de température appliqué à la paroi car le modèle suppose que l'isotherme de sorption est indépendante par rapport à cette variable. En fait si l'on augmentait ce gradient, on obtiendrait un séchage dissymétrique.

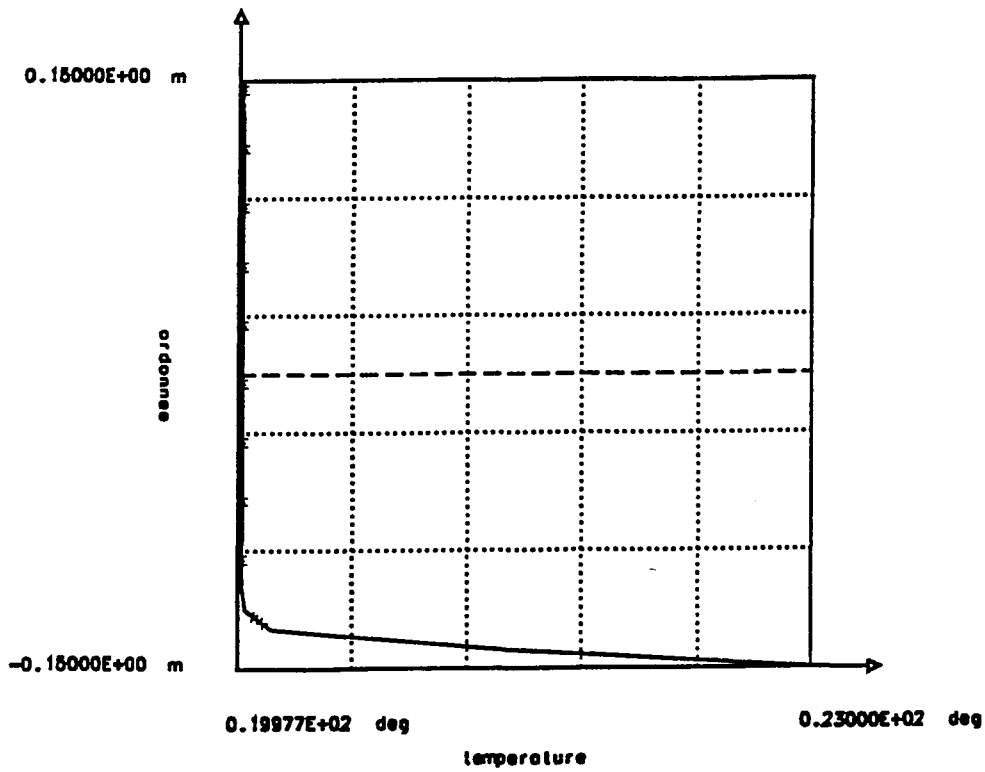


Figure 57 : Profil vertical de la température au temps $t = 60s$,
le changement de phase étant pris en compte.
Effets thermiques.

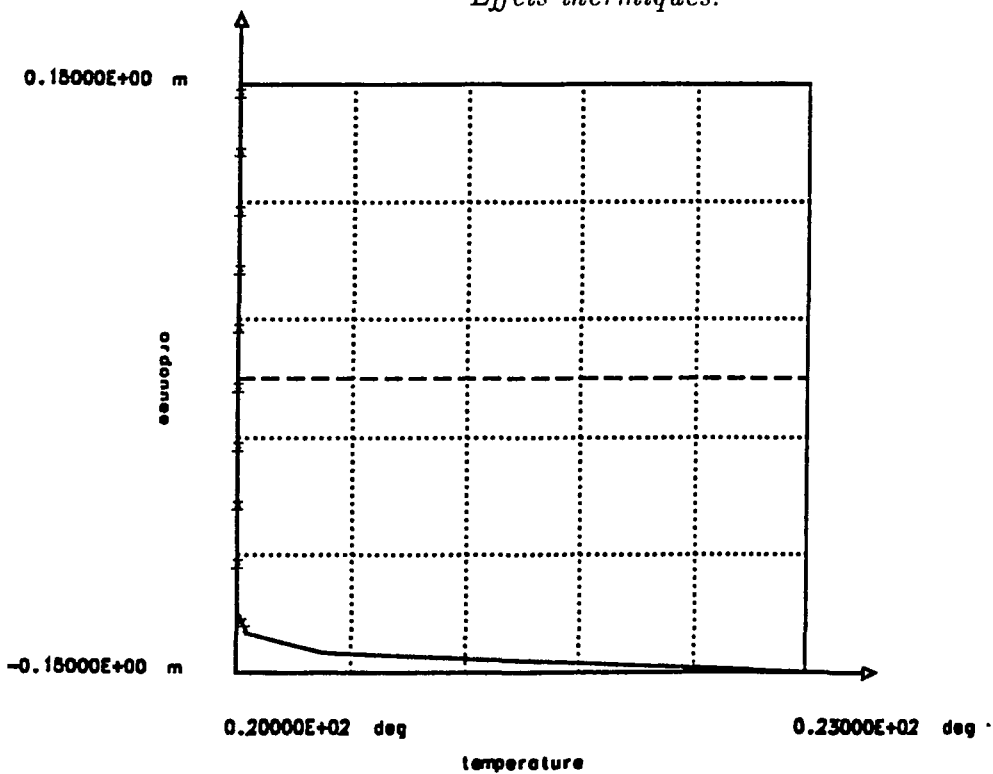


Figure 58 : Profil vertical de la température au temps $t = 60s$,
le changement de phase étant négligé.
Effets thermiques.

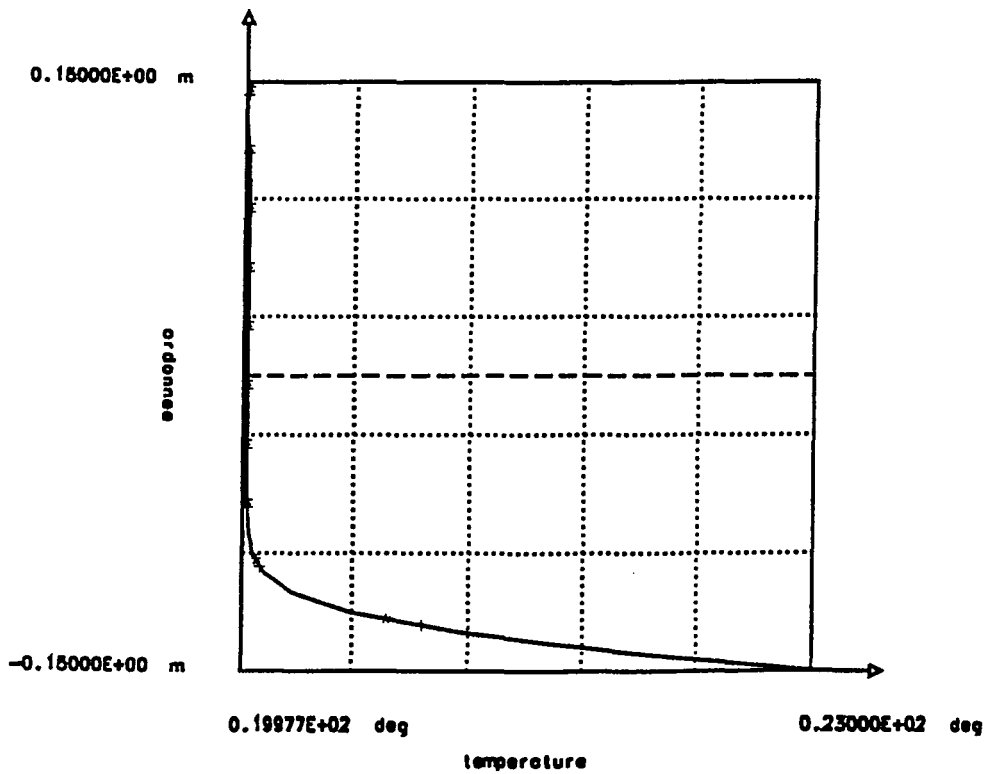


Figure 59 : Profil vertical de la température au temps $t = 1$ jour,
le changement de phase étant pris en compte.
Effets thermiques.

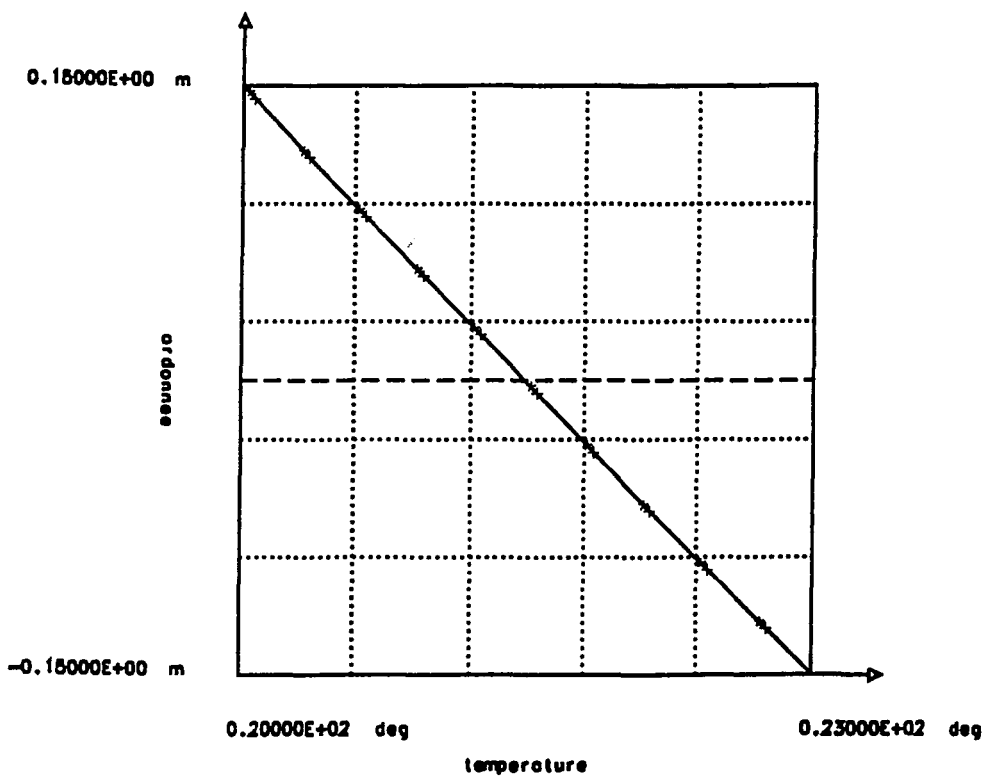


Figure 60 : Profil vertical de la température au temps $t = 1$ jour,
le changement de phase étant négligé.
Effets thermiques.

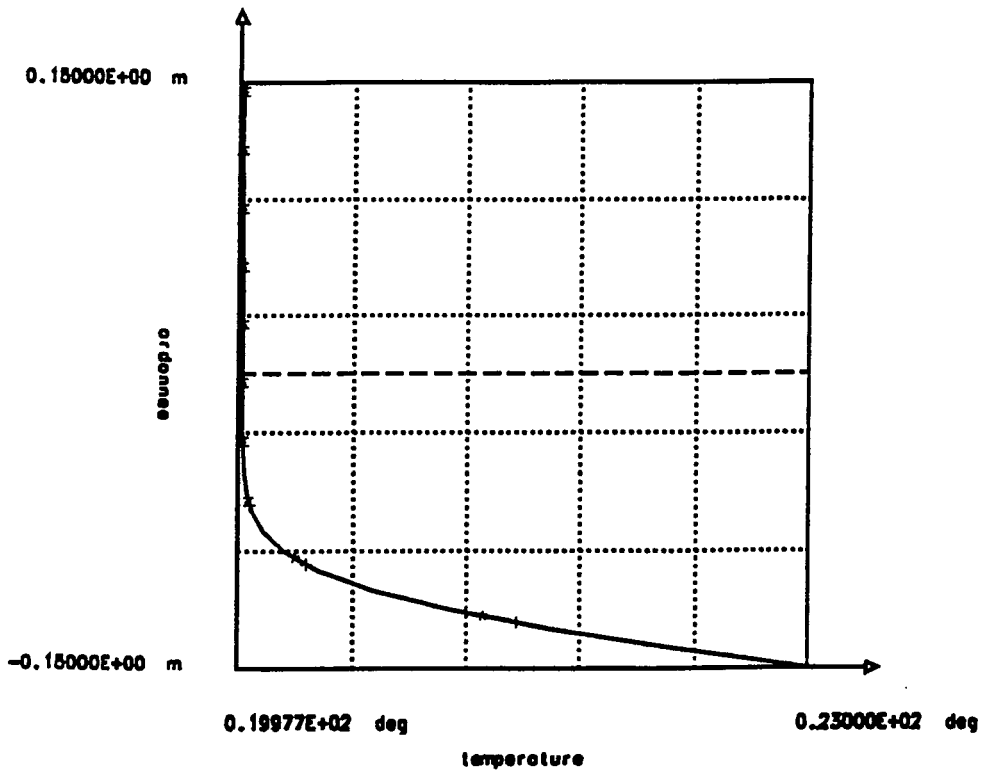


Figure 61 : Profil vertical de la température au temps $t = 60$ jours,
le changement de phase étant pris en compte.
Effets thermiques.

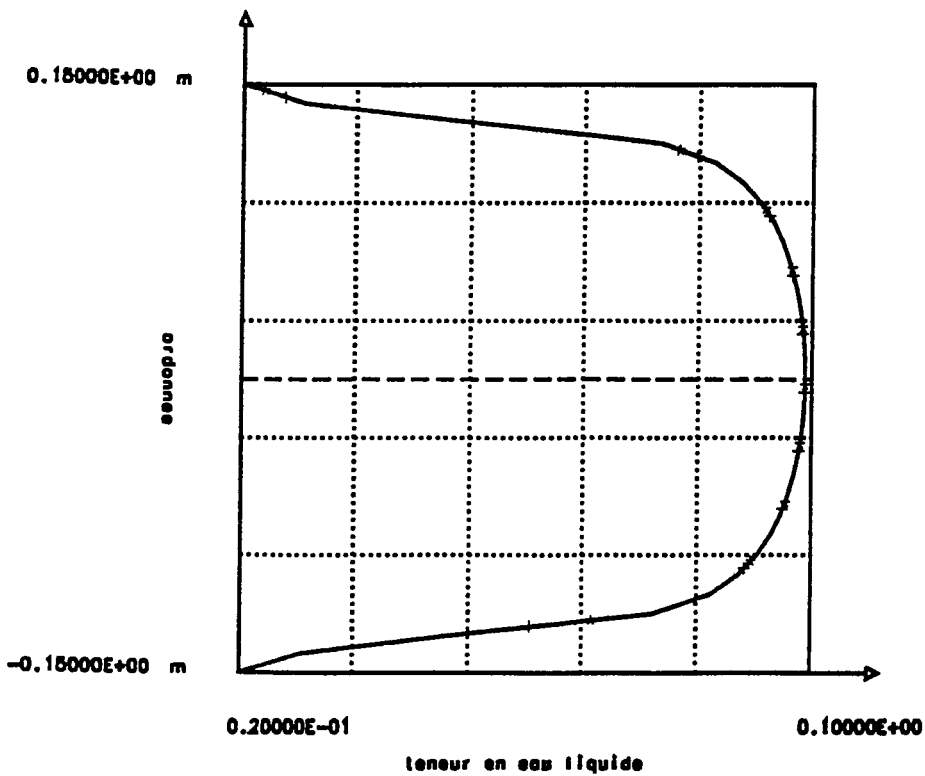


Figure 62 : Profil vertical de la teneur en eau liquide au temps $t = 3$ jours,
Effets thermiques.

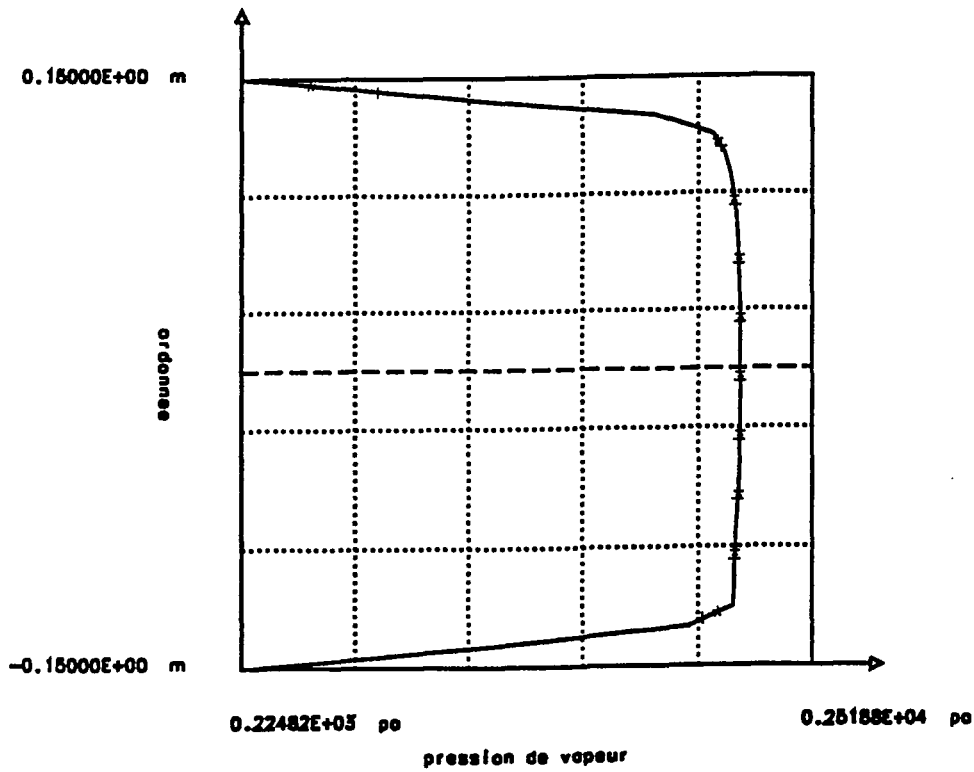


Figure 63 : Profil vertical de la pression de vapeur au temps $t = 3$ jours, le changement de phase étant pris en compte.
Effets thermiques.

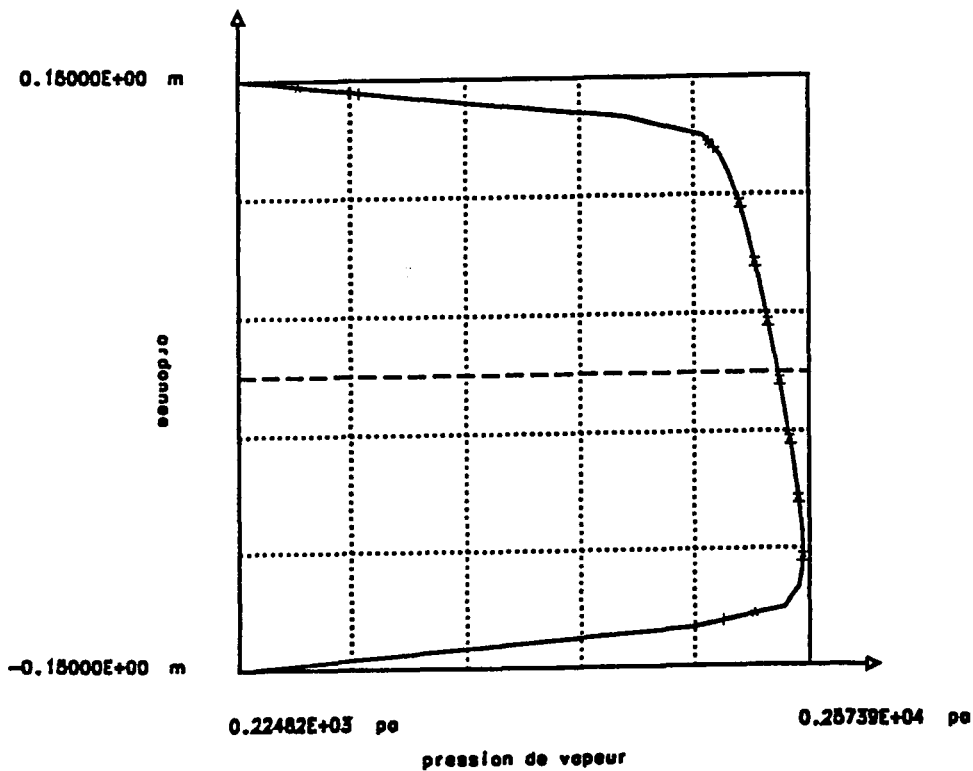


Figure 64 : Profil vertical de la pression de vapeur au temps $t = 3$ jours, le changement de phase étant négligé.
Effets thermiques.

7.6. Séchage bidimensionnel

7.6.1. Description du problème traité

Nous considérons une poutre de mortier de 30 cm d'épaisseur qui sèche sur trois de ses faces.

Le maillage utilisé est celui de la figure 27.

Le séchage est observé sur une période de 6 mois. Le pas de temps croît de 10 s à 86400 s.

Dans les calculs, nous avons choisi

- de prendre la température et la pression du gaz constante et uniforme en espace et en temps ($T = 20^{\circ}C$, $P_g = 1.013 \cdot 10^5 N/m^2$),
- de négliger les effets dissipatifs sur le changement de phase ($k = 1$),
- de négliger la gravité.

Les conditions initiales sont uniformes en espace :

$$\beta_l = 0.1,$$

$$HR(\beta_l = 0.01) = 0.95.$$

Les conditions de séchage sont données par :

- sur un côté, une condition de Neumann sur $\beta_v \rho_v$ et $\beta_l \rho_l$,
- sur les trois autres côtés, nous imposons une condition de Dirichlet variant linéairement entre l'instant 0 et l'instant 60 s où l'on obtient

$$\beta_l^{ext} = 0.02,$$

$$HR(\beta_l^{ext}) = 0.096.$$

Le temps de calcul c.p.u. a été de 5h32mn pour 233 pas de temps.

7.6.2. Présentation et analyse des résultats numériques

Au bout des six mois le séchage est presque total : les profils des différentes variables sont relativement plats.

Les isovaleurs au temps $t = 10$ jours et $t = 60$ jours sont représentées figures 65-66 pour la teneur en eau, figures 67-68 pour l'humidité relative. On observe de forts gradients au temps $t = 10$ jours.

L'évolution du séchage est mis en évidence dans la figure 69 où sont représentés les profils verticaux de la teneur en eau aux instants 60s, 1j, 10j, 60j, 100j et 140j à 15cm du côté imperméable (celui où l'on a appliqué la condition de Neumann).

Ces courbes semblent physiquement acceptables. Le même calcul avec la température prise comme inconnue montre qu'elle reste constante et égale à $20^{\circ}C$. Ceci est dû à la lenteur du séchage du mortier.

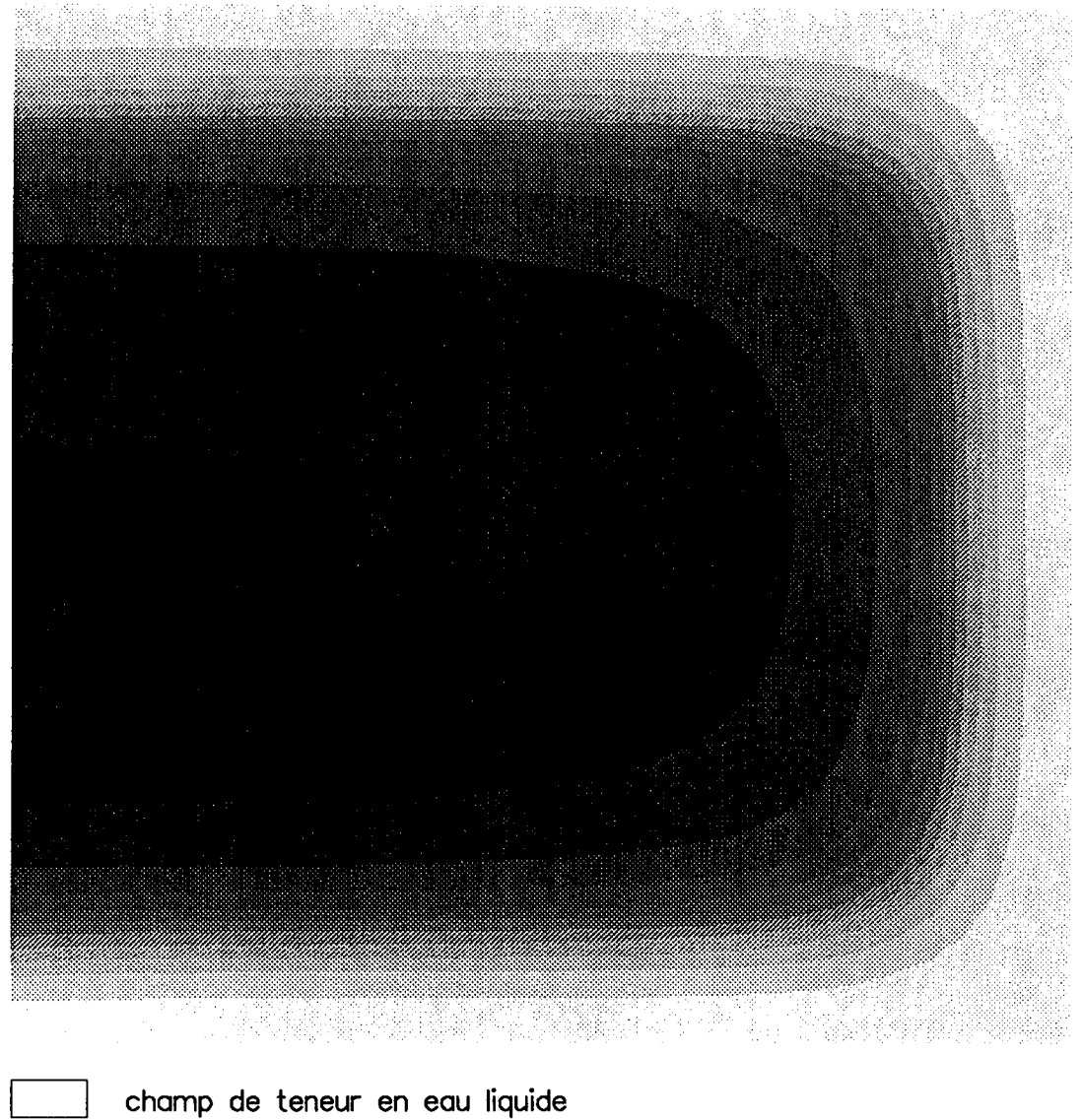
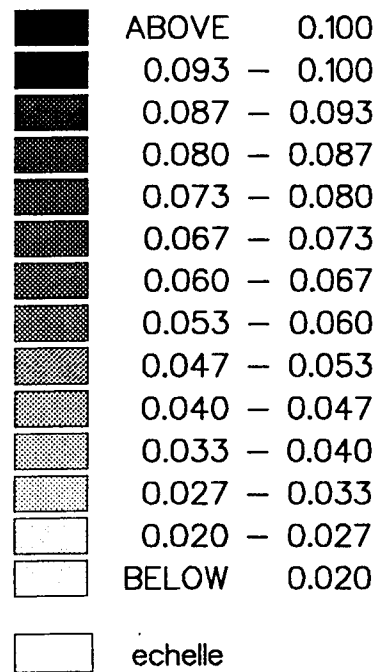
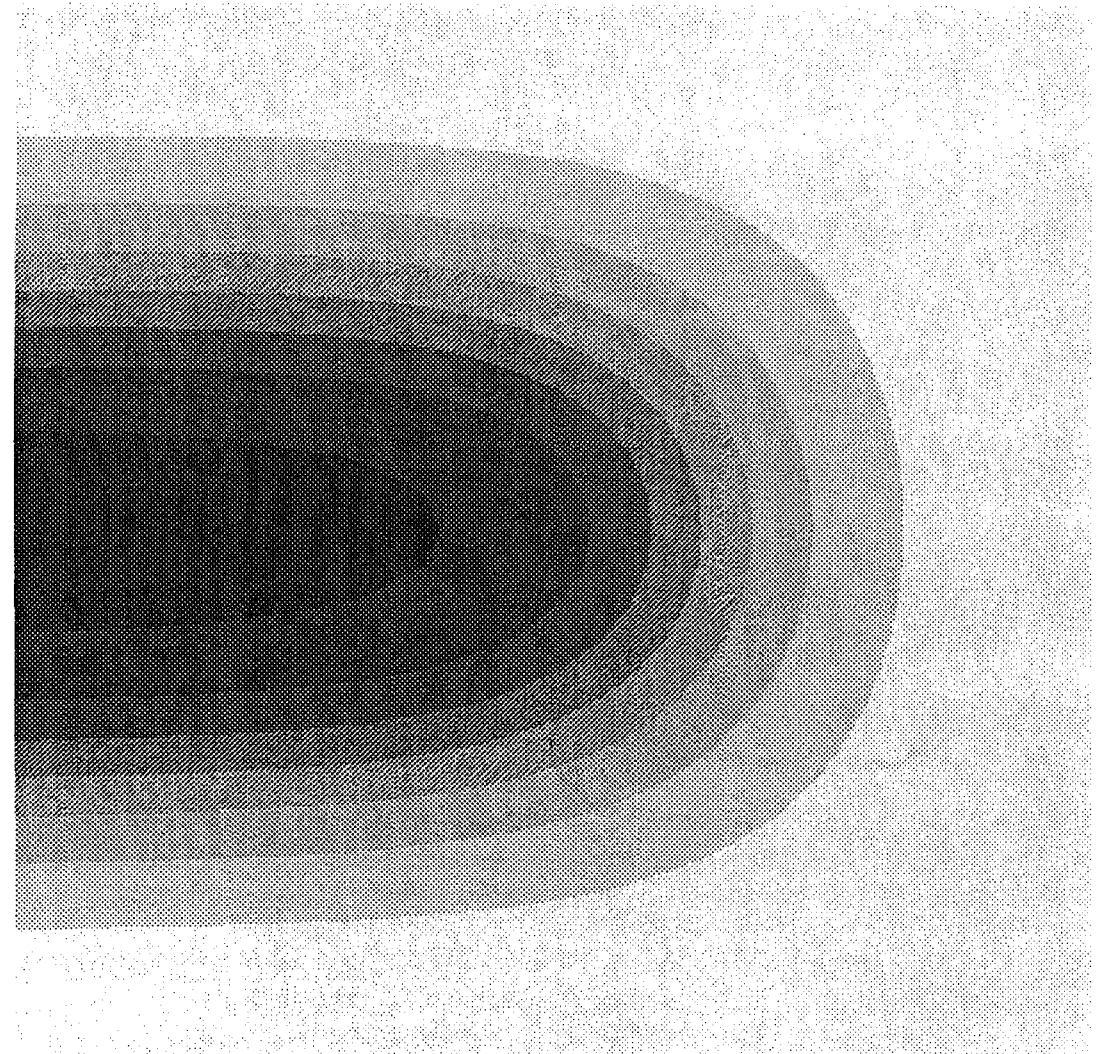
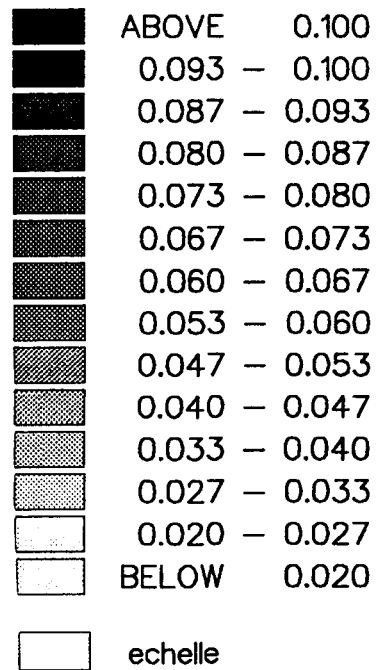


Figure 65 : Champ de la teneur en eau liquide au temps $t = 10j$.
Séchage bidimensionnel.




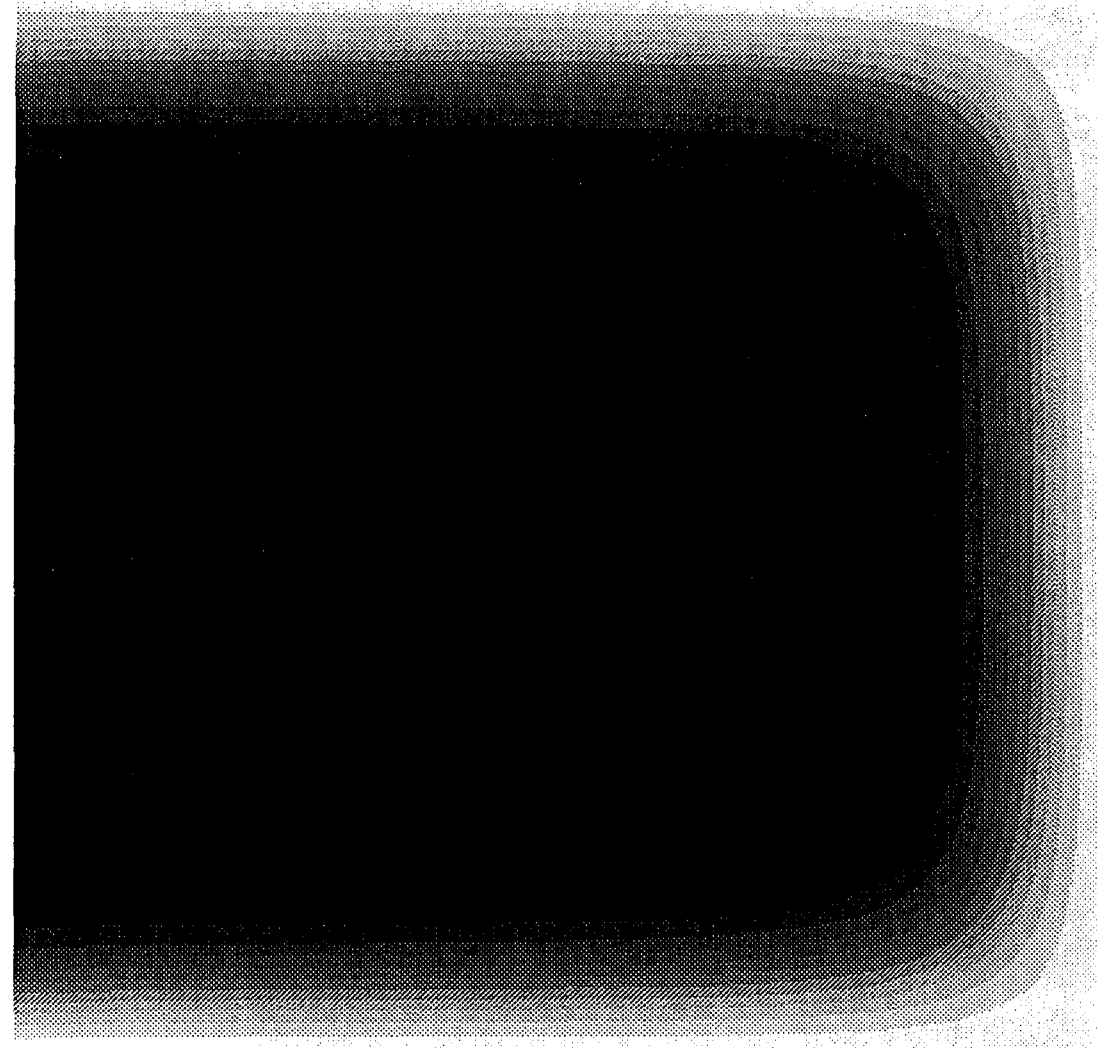
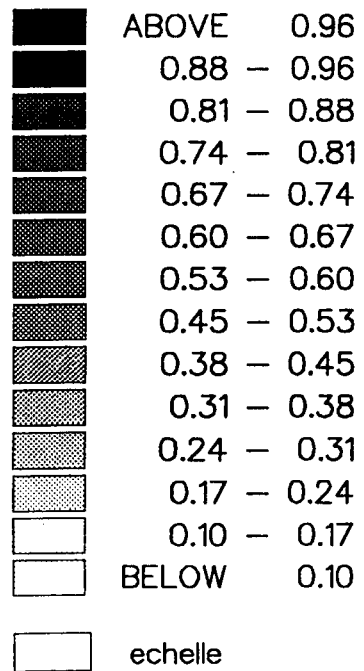
 champ de teneur en eau liquide

Figure 66 : Champ de la teneur en eau liquide au temps $t = 60j$.
Séchage bidimensionnel.




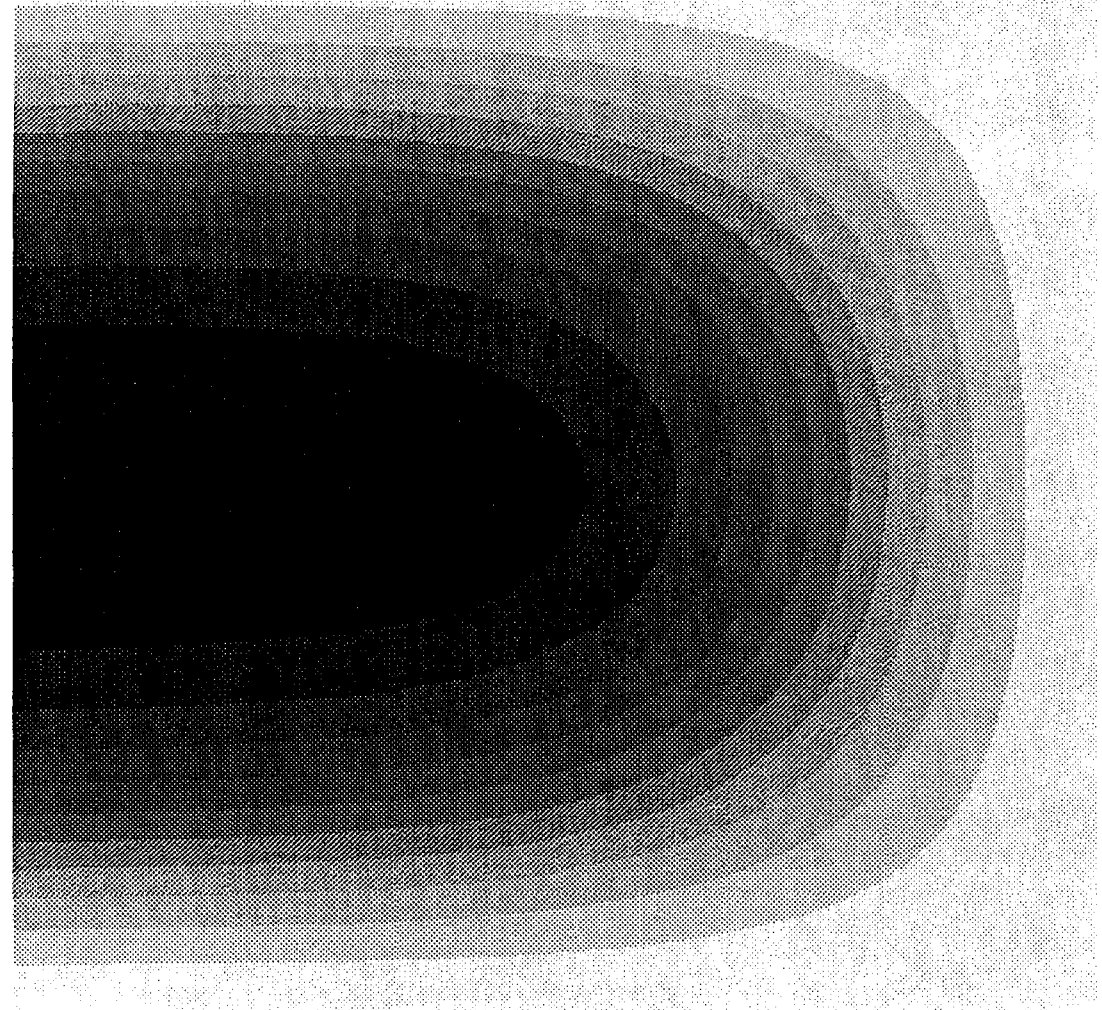
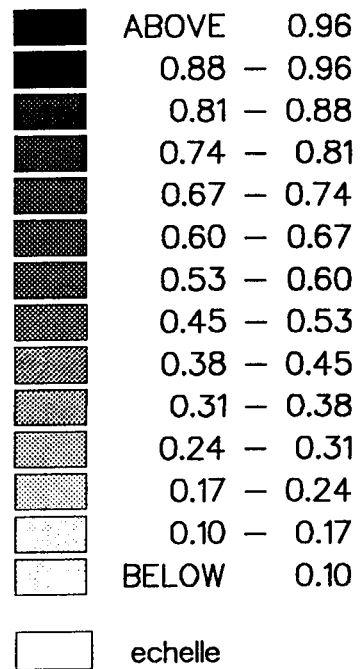
 champ d humidite relative

Figure 67 : Champ d'humidité relative au temps $t = 10j$.
Séchage bidimensionnel.

173



□ champ d humidite relative

Figure 68 : Champ d'humidité relative au temps $t = 60j$.
Séchage bidimensionnel.

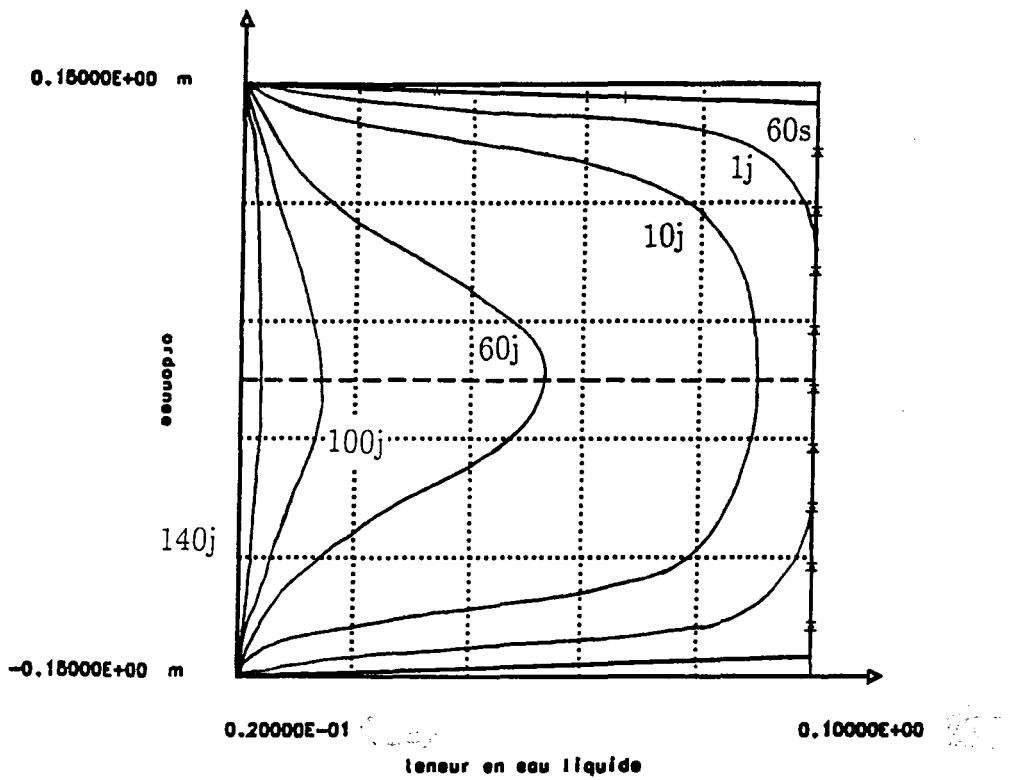


Figure 69 : Profils verticaux de la teneur en eau à différents temps, situés à 15 cm du côté imperméable. Séchage bidimensionnel.

CONCLUSION

Nous concluons ce travail en analysant sa contribution à l'étude des transferts d'humidité dans les milieux poreux et en suggérant de nouvelles directions de recherche.

Notre modèle mathématique (modèle continu) est original : l'interaction du milieu poreux sur l'eau est prise en compte en modifiant l'énergie libre de l'eau. De plus, les lois phénoménologiques classiques de Fourier, Darcy et Fick apparaissent comme des lois de comportement. En outre, nous retrouvons l'égalité des enthalpies libres de l'eau liquide et de sa vapeur en équilibre. La loi de Kelvin qui en découle est modifiée par un terme non classique. Il en est de même pour la pression capillaire. Cependant la loi de Darcy pour la phase liquide, après élimination de la pression capillaire par la loi de Kelvin, reste celle habituellement retenue.

Le modèle numérique (modèle discret) souligne les principaux phénomènes physiques rencontrés lors des transferts d'humidité au niveau macroscopique. Nous avons pu ainsi mettre en évidence leur influence respective. Par exemple si les mouvements d'eau ont une incidence sur la pression totale du gaz, en général il semble que la réciproque soit fautive. Au niveau de la température, les profils peuvent être modifiés par la prise en compte du changement de phase liquide-vapeur de l'eau. L'introduction d'une dissipation sur le taux de changement de phase permet d'obtenir des boucles d'hystérésis dynamiques. Cependant, ces dernières ne traduisent pas fidèlement la réalité : les milieux poreux présentent des phénomènes hystériques dans différents états d'équilibre.

Du point de vue numérique, l'approche retenue privilégie

- le caractère conservatif de l'approximation.
- la stabilité.

Ceci nous a conduit à introduire une approche mixte volumes finis éléments finis quelque peu originale dans le cadre des milieux poreux et à utiliser un schéma implicite en temps. La résolution du système non linéaire par un algorithme de Newton est compliquée à programmer (lourdeur des expressions analytiques) mais efficace d'emploi.

A titre anecdotique, le décentrage paramétré des termes de transport n'a que très peu d'incidence sur les résultats.

De nombreuses directions de recherche subsistent. Il va sans dire que des expériences variées sont indispensables pour confirmer et approfondir le modèle proposé. Certaines sont déjà engagées tant au Laboratoire Central des Ponts et Chaussées qu'au Centre Scientifique et Technique du Bâtiment.

Au vu de la durée de ces expériences, les résultats ne peuvent en être, à ce jour, exploités.

Il convient également de modéliser au niveau macroscopique les effets hystérétiques physiques rencontrés dans les milieux poreux.

Les phénomènes de transferts d'humidité étant couplés à la déformation du milieu poreux, il serait intéressant de modéliser ces transferts en tenant compte de cette déformation.

Citons pour finir, un autre thème de recherche qui constitue un des prolongements directs de notre travail : l'analyse numérique théorique des équations aux dérivées partielles de notre modèle, et du schéma aux volumes finis retenu.

ANNEXES

Annexe 1 :

MACROSCOPIC THERMODYNAMICS
OF POROUS MEDIA

Macroscopic thermodynamics of porous media

M. Fremond and P. Nicolas

A macroscopic thermodynamical theory of unsaturated porous media is studied. The porous media under consideration contain air, liquid water and its vapour encountering phase changes. To the classical state quantities, viz. temperature and densities, we add the volume fractions. These fractions are submitted to constraints, for instance their values lie between 0 and 1. The constraints are taken into account by the free energies which become non-smooth functions. The constitutive laws are obtained by classical thermodynamics and a careful treatment of the non-smooth functions. The constitutive laws account for experimental properties of unsaturated porous media: hysteresis of the sorption and desorption, capillary suction ...

1 Introduction

There exist many descriptions of unsaturated porous media at the macroscopic or engineering scale. Most of them use the capillary pressure which is not derived from macroscopic thermodynamics and often appears as a phenomenological relationship [3], [8], [18], [20], [21], [27], [28].

Our description is based only on macroscopic thermodynamics. The porous medium is a mixture of skeleton assumed rigid for the sake of simplicity, of air, of liquid water and of vapour. By introducing the volume fractions β_g of gas and β_l of liquid, we are able to derive the liquid water pressure without introducing the capillary pressure. Instead, we use the Kelvin relation to define this capillary pressure. We also exhibit the important suction at low water content [31].

The use of volume fractions introduces a difficulty because they are not independent. For instance $\beta_g + \beta_l = \varepsilon$ where ε is the porosity. We recognize this equality as a physical property: if $\beta_g + \beta_l < \varepsilon$ holds, voids appear and if $\beta_g + \beta_l > \varepsilon$ holds, interpenetration occurs. Thus the equality means that in the

liquidgas mixture no voids appear and no interpenetration occurs. This is a physical property and it must be taken into account by the constitutive equations, specifically by the constitutive equations for the free energy ψ . Our idea is to define ψ for any values of β_g and β_l : we give ψ the value $+\infty$ when the internal constraint is not satisfied and its physical value when it is satisfied. Thus the free energy is a non-smooth function. The difficulties due to this non-smoothness can be overcome because ψ is a convex function. An appendix contains basic results for convex functions and the Clausius-Duhem inequality for non-smooth free energies.

For the unsaturated porous medium which we are describing, we are able to exhibit the behaviour upon complete drying or saturating. As a consequence of the non-smoothness of ψ , we show, for instance, that in a liquid, limit of a mixture of vapour and liquid, the pressure is undetermined but bounded below, because vaporisation can occur. The results have been briefly presented in [12].

2 State variables

In our model we assume the temperature to be the same for all the components. For the sake of simplicity, we assume the liquid water to be incompressible and the skeleton to be rigid, so that the porosity ε and the densities of the liquid water and skeleton are constant.

In the following the quantities have subscripts a, v, g, ℓ, s which stand for air (a), water vapour (v), gas (mixture of air and vapour) (g), liquid water (ℓ) and solid skeleton of the porous medium (s). The densities ρ_j of the j material are defined by

$$\rho_j = \frac{\text{mass of the } j \text{ material}}{\text{volume occupied by this mass}}, \quad j \in \{a, v, \ell, s\}.$$

The first state variables we choose are the classical ones: the absolute temperature T , the densities ρ_a and ρ_v . It is obvious that these quantities are not sufficient to describe the state of the porous medium at the macroscopic level. For instance, experiments show that, given T , ρ_a and ρ_v , there exist several equilibrium states: indeed they show that the weight of the porous medium is not fixed because the amount of liquid water inside the porous medium is undetermined. It turns out that we need additional quantities to define the state.

The choice of additional state variables is based on simplicity and on the necessity to account for well-known experimental results. To make the set of state variables complete, we add the proportions per unit volume β_g and β_l of gas and liquid water

$$\beta_j = \frac{\text{volume occupied by the phase } j \text{ in the total volume element}}{\text{total volume of the element of porous medium}}.$$

With these we have 5 state variables, viz. T , ρ_a , ρ_v , β_g and β_l .

3 Balance equations

We need mass and energy balance equations. To write them the following notations are useful:

$$\frac{d^{(j)}\mathcal{A}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial t} + \bar{U}_j \overline{\text{grad}} \mathcal{A},$$

$$\delta^{(j)}\mathcal{A} = \frac{d^{(j)}\mathcal{A}}{dt} + \mathcal{A} \text{div} \bar{U}_j,$$

where j lies in $\{a, v, \ell, s\}$ and \bar{U}_j is the absolute velocity of the j material.

The air mass balance equation is

$$\delta^{(a)}(\beta_g \varrho_a) = 0. \quad (1)$$

The water mass balance equation is

$$\delta^{(v)}(\beta_g \varrho_v) - \varrho_v \delta^{(\ell)}(\beta_\ell) = 0. \quad (2)$$

The total energy balance equation for the porous medium is

$$\delta^{(a)}e_a + \delta^{(v)}e_v + \delta^{(\ell)}e_\ell - \delta^{(s)}e_s + \text{div} \bar{q} = r + \sum_j \sigma_j D(\bar{U}_j), \quad (3)$$

where e_j is the internal energy of the j material per total unit volume, \bar{q} the total heat flux vector and r a possible rate of heat supply. The internal forces σ_j due to the j material are define by their power

$$- \int_{\mathcal{D}} \sigma_j D(\bar{U}_j) d\mathcal{D}$$

where $D(\bar{U}_j)$ is the j material strain rate and \mathcal{D} any subset of the domain occupied by the porous medium.

4 Free energies

The quantities β_g and β_ℓ are not independent. They satisfy the internal constraints

$$0 \leq \beta_g \leq \varepsilon, \quad (4a)$$

$$0 \leq \beta_\ell \leq \varepsilon, \quad (4b)$$

$$\beta_g + \beta_\ell = \varepsilon. \quad (4c)$$

These relations result from physical properties. For instance, relation (4c) expresses that neither void nor interpenetration occurs. The internal constraints (4) are material properties. Being so they are taken into account by the free energies. For this purpose two ways can be used. The first one is to consider the free energies only on the manifold defined by the internal constraints. The second one is to define the free energies everywhere in the underlying linear space and to use

a device such that the actual values of the state quantities satisfy the internal constraints. From this point of view the internal constraints are material properties which are part of the constitutive laws. We have chosen this latter way to deal with the internal constraints. This is the point of view of non-smooth mechanics [24].

Let us note that the values of the free energies outside the actual manifold have no effect on the values of the material derivatives because the actual evolutions are always on the actual manifold. Thus we are free to choose these values without changing any mechanical result. Our choice is to say that the free energy is $+\infty$ outside the actual manifold. It will result that the actual evolutions satisfy the internal constraints. This idea has already been used in other physical situations [4], [5], [13].

We choose as free energies of the different materials per total unit volume:

$$\psi_a(T, \varrho_a, \beta_g, \beta_l) = -\varrho_a \beta_g C_a T \text{Log } T + \varrho_a \beta_g \frac{RT}{M_a} \text{Log } \varrho_a \beta_g + I(\beta_g, \beta_l),$$

$$\psi_v(T, \varrho_v, \beta_g, \beta_l) = -\varrho_v \beta_g C_v T \text{Log } T + \varrho_v \beta_g \frac{RT}{M_v} \text{Log } \varrho_v \beta_g + \varrho_v \beta_g f(T) + I(\beta_g, \beta_l),$$

$$\psi_l(T, \beta_l, \beta_g) = -\varrho_l \beta_l C_l T \text{Log } T + \varrho_l \beta_l \frac{RT}{M_v} h(\beta_l) + I(\beta_l, \beta_g),$$

$$\psi_s(T) = -\varrho_s \beta_s C_s T \text{Log } T,$$

where C_j is the specific heat at constant volume, M_j the molecular weight and R the universal gas constant. The function I is an indicator function, see below and Appendix 1. The skeleton volume fraction β_s is the constant $1 - \varepsilon$. The function $f(T)$ is related to the phase change latent heat. In the paragraph 7.1 we show how this function can be derived from experiments.

Inside the porous medium, at the macroscopic level we consider, the state of the liquid water depends not only on the temperature but also on the volume fractions. Experiments show this dependence on the liquid volume fraction which describes the effects of the microscopic structure, viz. geometry and distribution of the pores. It is known that, at the microscopic level, there are actions of the skeleton on the water, e.g. there exists adsorbed water [9]. To take these actions into account at the macroscopic level, the only quantity we have is the liquid volume fraction. Thus we assume the free energy ψ_l to depend on β_l . We choose a function of the type $\varrho_l \beta_l (RT/M_v) h(\beta_l)$ because in this manner the energy balance equation is not affected and h has no dimension. Furthermore we shall show that this choice account for experimental facts.

The function I in the expressions for the free energies is unusual. It ensures that the free energies equal $+\infty$ if the internal constraints are not satisfied. It is the indicator function of the convex set (Figure 2 of the Appendix 1)

$$\mathcal{C} = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x + y = \varepsilon, 0 \leq x \leq \varepsilon\}.$$

Note. The smooth part of the free energies for the air and the vapour are the ideal gas free energies if we consider the densities to be the apparent densities.

Note. The specific free energies $\psi/\rho\beta$ are determined up to an affine function of the temperature. When phase change occurs this affine function is the same for the free energies of the two phases. If it is not the same one the free energy of the mixture is determined up to a function of β , which is not possible.

5 Second principle and Dissipation

Let us write the Clausius-Duhem inequality within the Helmholtz principle [15]

$$\sum_j \left(\frac{d^{(j)}\psi_j}{dt} - \frac{\partial\psi_j}{\partial T} \frac{d^{(j)}T}{dt} + \psi_j \operatorname{div} \bar{U}_j \right) \leq \sum_j \sigma_j D(\bar{U}_j) - \bar{q} \frac{\overline{\operatorname{grad} T}}{T}. \quad (5)$$

Let us recall that the temperature is assumed to be the same for all the components. Following the computation given in Appendix 2, we get the thermal dissipation

$$d_2 = -\bar{q} \frac{\overline{\operatorname{grad} T}}{T},$$

and the intrinsic dissipation

$$\begin{aligned} \hat{d}_1 = & \sum_j (\sigma_j D(\bar{U}_j) - \psi_j \operatorname{div} \bar{U}_j) - \hat{B}_a \frac{d^{(a)}\rho_a}{dt} - \hat{B}_{ag} \frac{d^{(a)}\beta_g}{dt} - \hat{B}_{a\ell} \frac{d^{(a)}\beta_\ell}{dt} \\ & - \hat{B}_v \frac{d^{(v)}\rho_v}{dt} - \hat{B}_{vg} \frac{d^{(v)}\beta_g}{dt} - \hat{B}_{v\ell} \frac{d^{(v)}\beta_\ell}{dt} - \hat{B}_{\ell\ell} \frac{d^{(\ell)}\beta_\ell}{dt} - \hat{B}_{\ell g} \frac{d^{(\ell)}\beta_g}{dt}, \end{aligned}$$

where

$$(\hat{B}_a, \hat{B}_{ag}, \hat{B}_{a\ell}) \in \partial\psi_a(\rho_a, \beta_g, \beta_\ell),$$

$$(\hat{B}_v, \hat{B}_{vg}, \hat{B}_{v\ell}) \in \partial\psi_v(\rho_v, \beta_g, \beta_\ell),$$

$$(\hat{B}_{\ell\ell}, \hat{B}_{\ell g}) \in \partial\psi_\ell(\beta_\ell, \beta_g).$$

The $\partial\psi$'s are the subdifferentials of the functions ψ 's (see Appendix 1). With the ψ_j 's given in Paragraph 4, we have

$$\hat{B}_a = \frac{\partial\psi_a}{\partial\rho_a} = \frac{\psi_a}{\rho_a} + \beta_g \frac{RT}{M_a}, \quad (6a)$$

$$(\hat{B}_{ag}, \hat{B}_{a\ell}) = \left(\frac{\psi_a}{\beta_g} + \rho_a \frac{RT}{M_a}, 0 \right) + \partial I(\beta_g, \beta_\ell), \quad (6b)$$

$$\hat{B}_v = \frac{\partial\psi_v}{\partial\rho_v} = \frac{\psi_v}{\rho_v} + \beta_g \frac{RT}{M_v}, \quad (6c)$$

$$(\hat{B}_{vg}, \hat{B}_{v\ell}) = \left(\frac{\psi_v}{\beta_g} + \rho_v \frac{RT}{M_v}, 0 \right) + \partial I(\beta_g, \beta_\ell), \quad (6d)$$

$$(\hat{B}_{\ell\ell}, \hat{B}_{\ell g}) = \left(\frac{\psi_\ell}{\beta_\ell} + \rho_\ell \beta_\ell \frac{RT}{M_v} \frac{dh}{d\beta_\ell}(\beta_\ell), 0 \right) + \partial I(\beta_\ell, \beta_g). \quad (6e)$$

Note. The formulae (6) suppose h is smooth. If that is not the case one must go back to the definition of the subdifferentials $\partial\psi$'s.

The second principle is satisfied if

$$\hat{d}_1 \geq 0, \quad (7)$$

$$d_2 \geq 0, \quad (8)$$

for any actual evolution.

It is classical to assume the Fourier law so as to satisfy (8)

$$\bar{q} = -\lambda \overline{\text{grad}} T,$$

where λ is the global thermal conductivity which can depend on the variables.

The experiments exhibit a dissipative behaviour. Indeed, they show an important time dependence and hysteresis. So our major assumption is that the pseudo-potential of dissipation Φ (see Appendix 2) depends on the liquid-vapour phase change rate $q_l \delta^{(l)}\beta_l = -\delta^{(v)}(\beta_g q_v)$. For the sake of simplicity we take a quadratic pseudo-potential:

$$\Phi = \frac{k}{2} (q_l \delta^{(l)}\beta_l)^2, \quad k \geq 0.$$

Following the Appendix 2.4 we have

$$\hat{d}_1 = k q_l^2 (\delta^{(l)}\beta_l) \left(\frac{d^{(l)}\beta_l}{dt} + \beta_l \text{div } \bar{U}_l \right).$$

6 Constitutive laws

The constitutive laws result from the foregoing equation which must be valid for any evolution such that the mass balance Eqs. (1) and (2) are satisfied. Following the computations of the Appendix 2, we get (see Eqs. (9), (10), (14), (15), (19) in the Appendix 2)

$$\sigma_a = -p_a \mathbb{1}, \quad \sigma_v = -p_v \mathbb{1}, \quad \sigma_l = -p_l \mathbb{1}, \quad (9)$$

$$\hat{B}_{al} = 0, \quad \hat{B}_{vl} = 0, \quad \hat{B}_{lg} = 0, \quad (10)$$

$$q_a \hat{B}_a = \beta_g \hat{B}_{ag}, \quad q_v \hat{B}_v = \beta_g \hat{B}_{vg}, \quad (11)$$

$$p_a = q_a \hat{B}_a - \psi_a, \quad p_v = q_v \hat{B}_v - \psi_v, \quad p_l = \beta_l \hat{B}_{ll} - \psi_l, \quad (12)$$

$$q_l \hat{B}_{lg} - q_v \hat{B}_{vl} = k q_l^2 q_v \delta^{(l)}(\beta_l). \quad (13)$$

The constitutive laws (9) to (13) or the relations (6) describe the properties of the porous medium.

Note. With the definition of σ_j the force \vec{F} which is applied on a unit surface with normal vector \vec{N} by the porous medium is

$$\vec{F} = \sum_{j \in \{a,r,l\}} \sigma_j \vec{N} = -p_a \vec{N} - p_r \vec{N} - p_l \vec{N}.$$

The quantities p_j are pressures applied to the whole unit surface. This result is consistent with the purely macroscopic porous medium theories, for instance with soil mechanics.

6.1 Internal constraints on the β 's

From (10), (11) and (12), the terms $(\hat{B}_{ag}, \hat{B}_{al})$, $(\hat{B}_{rg}, \hat{B}_{rl})$ and $(\hat{B}_{rl}, \hat{B}_{rg})$ are elements of \mathbb{R}^2 . Thus relations (6) imply that the subdifferential $\hat{\epsilon}I(\beta_g, \beta_l)$ is not empty and (see Appendix 1.2)

$$(\beta_g, \beta_l) \in \mathcal{C}.$$

It results that the internal constraints (4) are satisfied. They are parts of the constitutive laws.

6.2 Air and vapour pressures

From (21), (6a) and (6c) we get

$$\frac{p_a}{\beta_g} = \alpha_a \frac{RT}{M_a}, \quad \frac{p_r}{\beta_g} = \alpha_r \frac{RT}{M_r}. \quad (14)$$

The quantity $p_i \beta$ represents the ideal gas pressure within the fluid [2], [25].

6.3 Water pressure

Up to now, we have not chosen the porous medium under consideration so the function h is not yet specified. In the sequel we study the water pressure depending on h . From (10), (12) and (6e) we get

- for $0 < \beta_l < \varepsilon$,

$$p_l = \beta_l \hat{B}_{ll} - \psi_l = \alpha_l \beta_l^2 \frac{RT}{M_l} \frac{dh}{d\beta_l}(\beta_l). \quad (15)$$

It appears that the water pressure depends on the water volume fraction as shown by experiments:

- for $\beta_l = 0$,

If $\lim_{\beta_l \rightarrow 0} h(\beta_l) = +\infty$, the value $\beta_l = 0$ is not an actual one. The function ψ_l being equal to $+\infty$, it is not subdifferentiable and relation (6e) cannot hold

because the subdifferential is empty. If $\lim_{\beta_l \rightarrow 0} h(\beta_l)$ is finite, since h is convex the water pressure p_l is zero:

- for $\beta_l = \varepsilon$.

If $\lim_{\beta_l \rightarrow \varepsilon} h(\beta_l) = +\infty$, the value $\beta_l = \varepsilon$ is not an actual one. The function ψ_l being equal to $+\infty$, it is not subdifferentiable and relation (6e) cannot hold because the subdifferential is empty. If $\lim_{\beta_l \rightarrow \varepsilon} h(\beta_l)$ is finite, saturation is possible and with the computation of $\mathcal{E}I(\varepsilon, 0)$ given in Appendix 1.2 we have

$$p_l \geq \varrho_l \varepsilon^2 \frac{RT}{M_r} \frac{dh}{d\beta_l}(\varepsilon).$$

The water pressure is undetermined but bounded below as one knows for an incompressible fluid. This is a direct consequence of the use of non-smooth ψ 's. When p_l equals its bound vaporisation can occur.

6.4 Dissipation equation

From (13) and (6e) we get

$$\varrho_l \left(\frac{\psi_r}{\beta_g} + \varrho_r \frac{RT}{M_r} \right) - \varrho_l \left(\frac{\psi_l}{\beta_l} + \varrho_l \beta_l \frac{RT}{M_r} \frac{dh}{d\beta_l}(\beta_l) \right) = k \varrho_l^2 \varrho_r \delta^{(l)}(\beta_l), \quad \text{for } 0 < \beta_l < \varepsilon.$$

Using Eqs. (14), (15) and the specific free energies g_j defined by

$$g_r = \frac{\psi_r + p_r}{\varrho_r \beta_g}, \quad g_l = \frac{\psi_l - p_l}{\varrho_l \beta_l}.$$

we obtain

$$g_r - g_l = k \varrho_l \delta^{(l)} \beta_l \quad \text{for } 0 < \beta_l < \varepsilon. \quad (16)$$

This constitutive equation is the only one involving a dissipation ($k > 0$). Let us focus on the equilibrium $\delta^{(l)} \beta_l = 0$ or on the non dissipative case ($k = 0$).

- for $0 < \beta_l < \varepsilon$.

We have the classical equality of the free enthalpies for a liquid-vapour equilibrium ($g_r = g_l$)

$$-C_r T \text{Log } T + \frac{RT}{M_v} \text{Log } \beta_g \varrho_r + f(T) + \frac{RT}{M_r} = -C_l T \text{Log } T + \frac{RT}{M_r} \frac{d(\beta, h)}{d\beta_l}. \quad (17)$$

This is the equation of a surface in the space (T, β_l, ϱ_r) . Every equilibrium position of the mixture is represented by a point of this surface:

- for $\beta_l = 0$ or ε .

The shape of the surface depends on the subdifferential $\mathcal{E}\psi_l$. If h is infinite for $\beta_l = 0$, $\mathcal{E}\psi_l(\beta_l = 0)$ is empty and so $\beta_l = 0$ is not an actual value. If h is finite

for $\beta_l = 0$ and since h is convex, it is possible to compute the subdifferential $\hat{c}\psi_l$ and then \hat{B}_{ll} :

$$\hat{B}_{ll} = -\rho_l C_l T \text{Log } T \div \rho_l \frac{RT}{M_r} h(0) \div \nu$$

where $(\nu, \hat{B}_{lg}) = (\nu, 0) \in \hat{c}I(0, \varepsilon)$, so ν is any negative real number (see Appendix 1.2). From (11) and (6c) we have

$$\hat{B}_{vg} = \frac{1}{\varepsilon} \rho_l \hat{B}_v = \rho_l g_v(\beta_g = \varepsilon).$$

Eliminating ν , the equality $\rho_l \hat{B}_{vg} = \rho_l \hat{B}_{ll}$ becomes the inequality

$$g_v(\beta_g = \varepsilon) \leq -C_l T \text{Log } T + \frac{RT}{M_r} h(0),$$

which can be written $\rho_v \leq \rho_{vs}(T)$. This result is perfectly in accordance with experiments. The density of the vapour admits an upper bound: $\rho_{vs}(T)$, the saturated vapour density.

Since ψ_l contains the term $\beta_g \text{Log } \beta_g$, the value ε is not an actual one for β_l because $\beta_g \text{Log } \beta_g$ does not admit a derivative at $\beta_g = 0$.

7 Consequences of the constitutive laws

The above constitutive laws are sufficient to account for the important features of drying and wetting of a porous medium, viz. the hysteresis and the capillary pressure.

7.1 Kelvin relation and capillary pressure

The Kelvin relation compares two situations for a mixture of water and vapour: mixtures outside and inside a porous medium. Let us consider a liquid-vapour mixture outside a porous medium. In this situation there is, of course, no action of the porous medium on the mixture. This description by our model can be achieved by letting $h \equiv 0$. Assuming the mixture to be at equilibrium we have:

$$g_l = g_v, \quad \text{for } 0 < \beta_l < \varepsilon.$$

or with (14) and (17),

$$-C_l T \text{Log } T \div \frac{RT}{M_r} \text{Log } \frac{M_r p_{vs}^0}{RT} \div f(T) \div \frac{RT}{M_r} = -C_l T \text{Log } T. \quad (18)$$

The pressure p_{vs}^0 is the saturated vapour pressure. This result can be used to derive $f(T)$. For instance Dupré's formula [6] for $p_{vs}^0(T)$ gives $f(T) = -aT + b$, $a > 0$, which is a decreasing affine function of T .

Let us now consider a mixture of water and vapour inside a porous medium ($h \equiv 0$). If this mixture is at equilibrium, from (14) and (17) we have:

$$-C_v T \text{Log } T + \frac{RT}{M_v} \text{Log } \frac{M_v p_{vs}}{RT} + f(T) + \frac{RT}{M_v} = -C_v T \text{Log } T + \frac{RT}{M_v} \frac{d(\beta_l/h)}{d\beta_l}. \quad (19)$$

This equation defines the "saturated vapour pressure inside the porous medium" $p_{vs} = p_{vs}(T, \beta_l)$. Subtracting (18) to (19), the equilibrium equations considered at the same temperature, we have

$$\text{Log } \frac{p_{vs}}{p_{vs}^0} = \frac{d(\beta_l/h)}{d\beta_l}.$$

With this Kelvin type Eq. (9), [11], we define the capillary pressure p_c by

$$p_c = -Q_l \frac{RT}{M_v} \text{Log } \frac{p_{vs}}{p_{vs}^0}.$$

By sorption-desorption experiments, we obtain the values of the quotient p_{vs}/p_{vs}^0 . Thus the function h can be derived from experiments. As usual only the derivatives of the functions appearing in the free energy can be obtained by experiments.

7.2 Hysteresis

Combining Eqs. (14), (17) and (19), we have

$$k_{Q_l} \delta^{(1)} \beta_l = \frac{RT}{M_v} \text{Log } \frac{p_v}{p_{vs}}, \quad \text{for } 0 < \beta_l < \varepsilon.$$

Let us consider a sorption-desorption experiment where the water velocity is negligible compared to the humidity rate $\dot{\beta}_l/\dot{\varepsilon}t$. We get

$$k_{Q_l} \frac{\dot{\beta}_l}{\dot{\varepsilon}t} = \frac{RT}{M_v} \text{Log } \frac{p_v}{p_{vs}^0} \frac{p_{vs}^0}{p_{vs}}.$$

So

$$\frac{\dot{\beta}_l}{\dot{\varepsilon}t} \geq 0 \Leftrightarrow \frac{p_v}{p_{vs}^0} \geq \frac{p_{vs}}{p_{vs}^0}.$$

$$\frac{\dot{\beta}_l}{\dot{\varepsilon}t} \leq 0 \Leftrightarrow \frac{p_v}{p_{vs}^0} \leq \frac{p_{vs}}{p_{vs}^0}.$$

Thus this equation or (16) describes the large hysteresis loops characteristic of the drying-wetting experimental curves [8], [10], [17], [19], (Fig. 1).

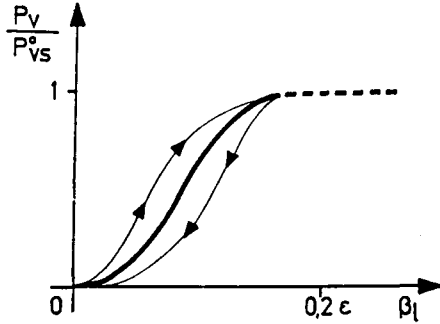


Fig. 1. Sorption-desorption hysteresis p_v/p_{vs}^0 [10] (standard line). The heavy line curve represents p_{vs}/p_{vs}^0 ($T = 293$ K)

8 A model

A model is a set of equations such that the state quantities T , ρ_a , ρ_r , β_g , β_l and the velocities \bar{U}_a , \bar{U}_r and \bar{U}_l can be computed. The equations are the air and water mass balance Eqs. (1), (2), the energy balance Eq. (3), the constitutive laws (6) to (16).

These equations are not sufficient to compute an evolution of the system, i.e. the evolution of the state quantities and the velocities. For the sake of simplicity we choose not to use the momentum balance equation. Instead we give formulae for the mass flux vectors [16].

8.1. Other constitutive laws

We choose two Darcy laws for the liquid phase and the gas phase [7] and one Fick law for the air-vapour relative velocity [26], [30].

The Darcy laws are:

$$\beta_g \left(\frac{p_r}{\beta_g} \bar{U}_r + \frac{p_a}{\beta_g} \bar{U}_a \right) = - \frac{p_a + p_r}{\beta_g} m_g \text{grad} \left(\frac{p_a + p_r}{\beta_g} - \rho_g g z \right), \quad (20)$$

$$\beta_l \bar{U}_l = - m_l \text{grad} \left(\frac{p_l}{\beta_l} + \rho_l g z \right), \quad (21)$$

where m_l and m_g are the liquid and gas mobilities, $\rho_g = \rho_a + \rho_r$ the mass of gas by unit volume, g the gravity, z the vertical position.

The Fick law is

$$\beta_g (\bar{U}_v - \bar{U}_a) = \frac{\beta_g^2}{m_D (p_a + p_r)} \left(- \frac{1}{p_r} \text{grad} \frac{p_r}{\beta_g} + \frac{1}{p_a} \text{grad} \frac{p_a}{\beta_g} \right) \quad (22)$$

or

$$\beta_g (\bar{U}_v - \bar{U}_a) = - \frac{\beta_g}{m_D} \frac{p_a - p_r}{p_a p_r} \text{grad} \left(\frac{p_r}{p_a + p_r} \right),$$

where m_D is the diffusivity. These Darcy and Fick laws together with the balance Esq. (1)–(3) and the constitutive laws (4) to (17) completed by suitable boundary and initial conditions are sufficient to compute the evolution of a porous medium.

8.2 An example

We give here a quantitative example which shows the different possibilities of the model. To obtain the classical shape of the curve p_{vs}/p_{vs}^0 versus β_t , we choose the simple convex function h (Fig. 2)

$$h(\beta_t) = \frac{a}{\beta_t^2} + \frac{b}{\varepsilon - \beta_t} + c,$$

where $a = 0.19 \times 10^{-5}$, $b = 0.11 \times 10^{-6}$, $c = -0.34 \times 10^{-3}$, $\varepsilon = 10^{-1}$.

With this choice it is impossible to wholly dry or saturate the medium because $h(0) = h(\varepsilon) = -\infty$; such a choice of h at the extreme values of β_t permits to deal with the drying process in concrete which is an important technical problem [1], [14].

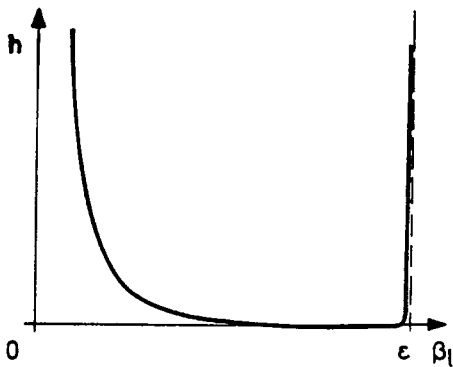


Fig. 2. The function $h(\beta_t)$

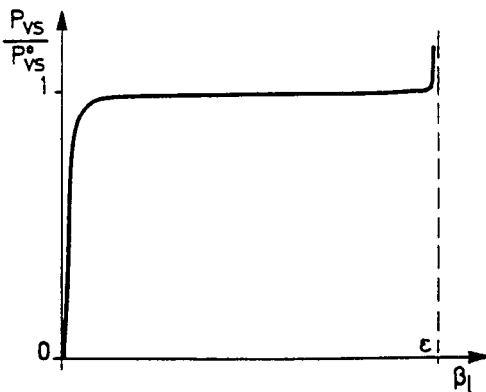


Fig. 3. The saturated vapour pressure inside the porous medium at constant temperature

At equilibrium we obtain:

a) saturated vapour pressure (Fig. 3).

$$\frac{p_{vs}}{p_{vs}^0} = \exp\left(-\frac{a}{\beta_l^2} + \frac{\epsilon b}{(\epsilon - \beta_l)^2} + c\right):$$

The pressure p_{vs} is zero for $\beta_l = 0$ in accordance to the experiments. If there exist very small gas bubbles, it can be the case that p_{vs} is larger than p_{vs}^0 when β_l is close to ϵ [9], [29].

b) water pressure (Fig. 4).

$$p_l = \rho_l \frac{RT}{M_l} \left(-\frac{2a}{\beta_l} + \frac{b\beta_l^2}{(\epsilon - \beta_l)^2}\right):$$

Let us emphasize the large suction which occur at small values of β_l , with magnitude of several atmospheres [31]. It appears that to try to saturate the medium a very large water pressure must be applied.

c) Capillary pressure (Fig. 5).

$$p_c = \rho_l \frac{RT}{M_v} \left(\frac{a}{\beta_l^2} - \frac{\epsilon b}{(\epsilon - \beta_l)^2} - c\right).$$

Its shape is usual except for β_l close to ϵ where the capillary pressure is negative. This can result from the shape of menisci at the microscopic level [9].

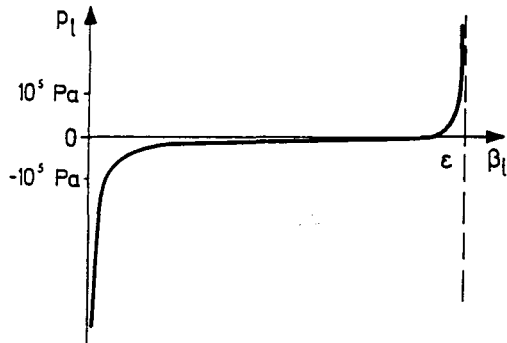


Fig. 4. The water pressure at constant temperature

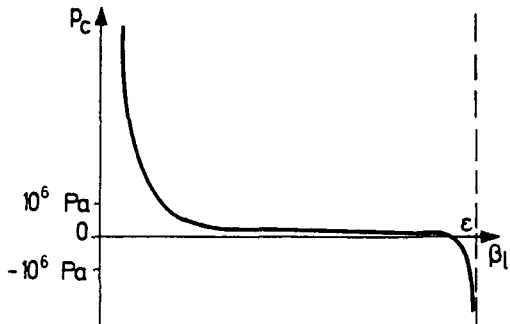


Fig. 5. The capillary pressure at constant temperature

Appendix

1 Convex functions [22]

Let us consider functions from the linear space X into $\bar{\mathbb{R}} = \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, i.e. functions which can have the value $+\infty$. We assume the following rules for adding and multiplying,

$$a \div (+\infty) = +\infty, \quad +\infty \div (+\infty) = +\infty \quad \text{and, for } a > 0, \quad a(+\infty) = +\infty.$$

A convex function is a function from X into $\bar{\mathbb{R}}$ such that (Figure 1(A))

$$\forall (x, y) \in X, \forall \alpha \in]0, 1[, \quad f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y). \quad (1)$$

1.1 Examples of convex functions

Let us choose $X = \mathbb{R}$. The functions $|x|$, $\frac{1}{2}x^2$ are convex.

Let there be a convex set C in X , i.e. a set such that

$$\forall (x, y) \in C, \forall \theta \in]0, 1[, \quad \theta x + (1 - \theta)y \in C.$$

The indicator function I_c of C is a function from X into $\bar{\mathbb{R}}$ defined by

$$I_c(x) = 0, \quad \text{if } x \in C.$$

$$I_c(x) = +\infty, \quad \text{if } x \notin C.$$

It is obvious that the indicator function I_c of a convex set C is a convex function.

1.2 Subdifferential of a convex function

It is useful to generalize the notion of derivative of a function. Let there be X^* a linear space in duality with X by the duality pairing $\langle x^*, x \rangle$. One says that x^* is a subgradient of the convex function f at the point x if (Figure 1(A))

$$\forall y \in X, \quad f(y) \geq f(x) + \langle x^*, y - x \rangle. \quad (2)$$

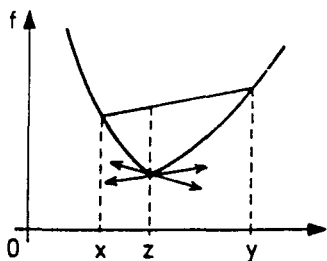


Fig. 1(A). A convex function. $z = \alpha x + (1 - \alpha)y$, $0 < \alpha < 1$. At the point z the subgradients are the slopes of the lines passing through the point $(z, f(z))$ which are under the curve $f(z)$

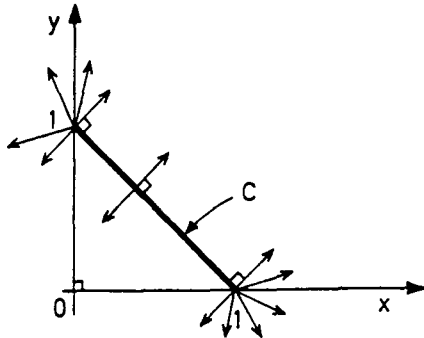


Fig. 2(A). The set \mathcal{C} . A subgradient of the indicator function I of \mathcal{C} at a point $(x, y) \in \mathcal{C}$ is a vector normal to \mathcal{C}

The set of all the subgradients x^* at point x is the subdifferential $\partial f(x)$. It is clear that, if f has a gradient at the point x , $\partial f(x)$ is $\{\text{grad } f(x)\}$.

Let us choose $X = X^* = \mathbb{R}^2$, $\langle \bar{x}^*, \bar{x} \rangle = \bar{x}^* \cdot \bar{x}$ and

$$\mathcal{C} = \{(x, y) \mid x \in \mathbb{R}; y \in \mathbb{R}; x + y = \varepsilon; 0 \leq x \leq \varepsilon\}, (\varepsilon > 0),$$

a convex set of X .

The subgradient of the indicator function I of \mathcal{C} is (Fig. 2(A))

$$\partial I(x, y) = \emptyset, \text{ if } (x, y) \notin \mathcal{C},$$

$$\partial I(x, y) = \{(x^*, y^*) \mid x^* = -y^*\}, \text{ if } 0 < x < \varepsilon,$$

$$\partial I(x, y) = \{(x^*, y^*) \mid x^* - y^* \leq 0\}, \text{ if } x = 0, y = \varepsilon,$$

$$\partial I(x, y) = \{(x^*, y^*) \mid x^* - y^* \geq 0\}, \text{ if } x = \varepsilon, y = 0.$$

Note. If f is a function of T and x , and is convex with respect to x , the set $\partial f(x)$ is the subdifferential of the function $x \rightarrow f(T, x)$. This subdifferential can depend on T .

Let us remark that if f is not always equal to $+\infty$, the subdifferential is empty when $f(x) = +\infty$ (write relation (2) with $f(y)$ finite). Thus the relation $x^* \in \partial f(x)$ implies that f is finite ($f(x) < +\infty$) because the subdifferential is not empty. When $f = I$ holds, this relation means that $x \in \mathcal{C}$. This property is widely used to ensure that some mechanical quantity x satisfies an internal constraint described by $x \in \mathcal{C}$.

2 Second principle of thermodynamics

2.1 Derivative of the free energy

In the formula (5) of Paragraph 5 we have to compute quantities like

$$\mathcal{H} = \frac{d\psi}{dt} - \frac{\partial \psi}{\partial T} \frac{dT}{dt}.$$

The free energies ψ depend on T , on the ϱ 's and the β 's. Those functions ψ are smooth with respect to T but they can be non-smooth with respect to the ϱ 's and the β 's: they can jump from a finite value up to $+\infty$. Thus we must try to relate \mathcal{H} and the derivatives $d\varrho/dt$ and $d\beta/dt$.

To show simply how to proceed, we assume for a while ψ to depend on T and on only one other quantity χ . We assume ψ to be smooth with respect to T and non-smooth with respect to χ . We have

$$\mathcal{H} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\psi(T(t), \chi(t + \Delta t)) - \psi(T(t), \chi(t))}{\Delta t}. \quad (1)$$

The limit (1) is to be computed at time t with the information which is available, i.e. with the values of χ before the time t . Thus Δt must be taken negative and the derivatives with respect to the time are left derivatives.

The function ψ is assumed to be convex and subdifferentiable with respect to χ (see Appendix 1).

Let $B \in \partial\psi(\chi(t))$, where $\partial\psi$ is the subdifferential of the function $\chi \rightarrow \psi(T, \chi)$. From the definition (see Appendix 1), we have

$$\forall \Delta t < 0 \quad \psi(T(t), \chi(t + \Delta t)) - \psi(T(t), \chi(t)) \geq B(\chi(t + \Delta t) - \chi(t)).$$

Dividing this relation by $\Delta t < 0$, we get

$$\frac{\psi(T(t), \chi(t + \Delta t)) - \psi(T(t), \chi(t))}{\Delta t} \leq B \frac{\chi(t + \Delta t) - \chi(t)}{\Delta t}.$$

And by letting $\Delta t \rightarrow 0$,

$$\forall B \in \partial\psi(\chi(t)), \quad \mathcal{H} \leq B \frac{d\chi}{dt}. \quad (2)$$

2.2 The Clausius-Duhem inequality

Let us go back to the formula (5) of Paragraph 5.

$$\sum_j \left(\frac{d^{(j)}\psi_j}{dt} - \frac{\bar{c}\psi_j}{\bar{c}T} \frac{d^{(j)}T}{dt} + \psi_j \operatorname{div} \bar{U}_j \right) \leq \sum_j \sigma_j D(\bar{U}_j) - \bar{q} \frac{\overline{\operatorname{grad} T}}{T}. \quad (3)$$

We split the inequality (3) into two parts:

- the intrinsic dissipation d_1 ,

$$d_1 = \sum_j \left(\sigma_j D(\bar{U}_j) - \frac{d^{(j)}\psi_j}{dt} - \psi_j \operatorname{div} \bar{U}_j + \frac{\partial\psi_j}{\partial T} \frac{d^{(j)}T}{dt} \right) \geq 0, \quad (4)$$

- the thermal dissipation d_2 ,

$$d_2 = -\bar{q} \frac{\overline{\operatorname{grad} T}}{T} \geq 0. \quad (5)$$

The inequalities (4) and (5) have to be satisfied for any actual evolution. In order to satisfy the inequality (5) the Fourier law is chosen.

Generalizing formula (2), we have

$$\begin{aligned} \frac{d^{(a)}\psi_a}{dt} - \frac{\partial\psi_a}{\partial T} \frac{d^{(a)}T}{dt} &\leq B_a \frac{d^{(a)}\varrho_a}{dt} + B_{ag} \frac{d^{(a)}\beta_g}{dt} + B_{a\ell} \frac{d^{(a)}\beta_\ell}{dt} = H_a, \\ \frac{d^{(v)}\psi_v}{dt} - \frac{\partial\psi_v}{\partial T} \frac{d^{(v)}T}{dt} &\leq B_v \frac{d^{(v)}\varrho_v}{dt} + B_{vg} \frac{d^{(v)}\beta_g}{dt} + B_{v\ell} \frac{d^{(v)}\beta_\ell}{dt} = H_v, \\ \frac{d^{(\ell)}\psi_\ell}{dt} - \frac{\partial\psi_\ell}{\partial T} \frac{d^{(\ell)}T}{dt} &\leq B_{\ell\ell} \frac{d^{(\ell)}\beta_\ell}{dt} + B_{\ell g} \frac{d^{(\ell)}\beta_g}{dt} = H_\ell \end{aligned} \quad (6)$$

with

$$\begin{aligned} A_a &= (B_a, B_{ag}, B_{a\ell}) \in \partial\psi_a(\varrho_a, \beta_g, \beta_\ell), \\ A_v &= (B_v, B_{vg}, B_{v\ell}) \in \partial\psi_v(\varrho_v, \beta_g, \beta_\ell), \\ A_\ell &= (B_{\ell\ell}, B_{\ell g}) \in \partial\psi_\ell(\beta_\ell, \beta_g). \end{aligned}$$

With the inequalities (6), we can bound d_1 from below

$$d_1 \geq \hat{d}_1 = \sum_j (\sigma_j D(\bar{U}_j) - \psi_j \operatorname{div} \bar{U}_j - H_j).$$

In order to satisfy the Clausius-Duhem inequality (5), i.e. in order to ensure the positivity of the intrinsic dissipation d_1 for any actual evolution we assume that at least one of the subgradients (A_a, A_v, A_ℓ) of the subdifferential sets $\partial\psi_a \times \partial\psi_v \times \partial\psi_\ell$, denoted by $(\hat{A}_a, \hat{A}_v, \hat{A}_\ell)$, is such that

$$\hat{d}_1 \geq 0 \quad (7)$$

for any actual evolution.

The elements of the subgradients $(\hat{A}_a, \hat{A}_v, \hat{A}_\ell)$ are the thermodynamical forces. Their values depend on the history. We choose them to depend on the past via a pseudo-potential of dissipation Φ [23]. Thus the thermodynamical forces depend on the past via the variable rates.

Let us focus on two interesting situations. The first one is the simplest: $\hat{d}_1 \equiv 0$ for any actual evolution, which is said to be “without intrinsic dissipation”. In this situation the thermodynamical forces depend only on the values of the state variables. In the second situation, the intrinsic dissipation is non zero ($\hat{d}_1 \geq 0$). To be specific we assume the dissipation to depend only on the liquid-vapour phase change rate.

2.3 Constitutive laws for a non dissipative behaviour

The behaviour is without intrinsic dissipation or shortly non dissipative if (7) is an equality. Thus the linear form \hat{d}_1 is zero for any velocities $\bar{U}_j, d^{(a)}\varrho_a/dt, d^{(v)}\varrho_v/dt,$

$$\begin{aligned}
& d^{(j)}\beta_k/dt, \text{ for } j \in \{a, v, \ell\} \text{ and } k \in \{g, \ell\}, \text{ satisfying the mass balance equations} \\
& \delta^{(a)}(\varrho_a \beta_g) = 0, \\
& \delta^{(v)}(\varrho_v \beta_g) + \varrho_v \delta^{(\ell)}\beta_\ell = 0.
\end{aligned} \tag{8}$$

The mass balance equations define a subspace of the linear space spanned by the velocities. The linear form \hat{d}_1 being zero on this subspace, it results easily that

$$\hat{d}_1 = \eta_a \delta^{(a)}(\varrho_a \beta_g) + \eta_w (\delta^{(v)}(\varrho_v \beta_g) + \varrho_v \delta^{(\ell)}\beta_\ell)$$

for any velocities \vec{U}_j , $d^{(a)}\varrho_a/dt$, $d^{(v)}\varrho_v/dt$, $d^{(j)}\beta_k/dt$, $j \in \{a, v, \ell\}$, $k \in \{g, \ell\}$. The quantities η_a and η_w are Lagrange parameters. Thus we have

$$\begin{aligned}
& \sum_j (\sigma_j D(\vec{U}_j) - \psi_j \operatorname{div} \vec{U}_j) - \hat{B}_a \frac{d^{(a)}\varrho_a}{dt} - \hat{B}_{ag} \frac{d^{(a)}\beta_g}{dt} - \hat{B}_{a\ell} \frac{d^{(a)}\beta_\ell}{dt} \\
& - \hat{B}_v \frac{d^{(v)}\varrho_v}{dt} - \hat{B}_{vg} \frac{d^{(v)}\beta_g}{dt} - \hat{B}_{v\ell} \frac{d^{(v)}\beta_\ell}{dt} - \hat{B}_{\ell g} \frac{d^{(\ell)}\beta_g}{dt} - \hat{B}_{\ell\ell} \frac{d^{(\ell)}\beta_\ell}{dt} \\
& = \eta_a \left(\varrho_a \frac{d^{(a)}\beta_g}{dt} + \beta_g \frac{d^{(a)}\varrho_a}{dt} + \varrho_a \beta_g \operatorname{div} \vec{U}_a \right) \\
& + \eta_w \left(\varrho_v \frac{d^{(v)}\beta_g}{dt} + \beta_g \frac{d^{(v)}\varrho_v}{dt} + \varrho_v \beta_g \operatorname{div} \vec{U}_v + \varrho_v \frac{d^{(\ell)}\beta_\ell}{dt} + \varrho_v \beta_\ell \operatorname{div} \vec{U}_\ell \right)
\end{aligned}$$

for any velocities. It results easily that

$$\sigma_a = -p_a \mathbb{1}, \quad \sigma_v = -p_v \mathbb{1}, \quad \sigma_\ell = -p_\ell \mathbb{1}, \tag{9}$$

$$\hat{B}_{a\ell} = 0, \quad \hat{B}_{v\ell} = 0, \quad \hat{B}_{\ell g} = 0, \tag{10}$$

$$\eta_a \varrho_a + \hat{B}_{ag} = 0, \quad \eta_w \varrho_v + \hat{B}_{vg} = 0, \quad \eta_w \varrho_\ell + \hat{B}_{\ell\ell} = 0, \tag{11}$$

$$\eta_a \beta_g + \hat{B}_a = 0, \quad \eta_w \beta_g + \hat{B}_v = 0, \tag{12}$$

$$\eta_a \varrho_a \beta_g + \psi_a + p_a = 0, \quad \eta_w \varrho_v \beta_g + \psi_v + p_v = 0, \quad \eta_w \varrho_\ell \beta_\ell + \psi_\ell + p_\ell = 0. \tag{13}$$

The relation (9) is classical. Let us assume that the ϱ 's are never equal to 0. Thus we can eliminate η_a and η_w and we obtain equivalent relations to (11), (12) and (13),

$$\varrho_a \hat{B}_a = \beta_g \hat{B}_{ag}, \quad \varrho_v \hat{B}_v = \beta_g \hat{B}_{vg}, \tag{14}$$

$$p_a = \varrho_a \hat{B}_a - \psi_a, \quad p_v = \varrho_v \hat{B}_v - \psi_v, \quad p_\ell = \beta_\ell \hat{B}_{\ell\ell} - \psi_\ell, \tag{15}$$

$$\varrho_v \hat{B}_{\ell\ell} = \varrho_\ell \hat{B}_{vg}. \tag{16}$$

The complete interpretation of these constitutive laws is achieved in the article.

Note. The case where the ϱ 's are equal to 0 is easily handled by the basic equations (9) to (13).

2.4 Constitutive laws for a dissipative behaviour

We assume the dissipation to depend on the liquid-vapour phase change rate

$$\delta = \delta^{(\ell)}(\varrho_\ell \beta_\ell) = \varrho_\ell \frac{d^{(\ell)}\beta_\ell}{dt} + \varrho_\ell \beta_\ell \operatorname{div} \bar{U}_\ell.$$

The pseudo-potential of dissipation Φ is a function of δ and the intrinsic dissipation \hat{d}_1 is

$$\hat{d}_1 = \frac{d\Phi}{d\delta} \delta = \frac{d\Phi}{d\delta} \left(\varrho_\ell \frac{d^{(\ell)}\beta_\ell}{dt} + \varrho_\ell \beta_\ell \operatorname{div} \bar{U}_\ell \right), \quad (17)$$

for any actual evolution.

Let us recall that a pseudo-potential of dissipation Φ , [23], is a convex positive function with $\Phi(0) = 0$. Because (see Appendix I.1)

$$0 = \Phi(0) \geq \Phi(\delta) + (0 - \delta) \frac{d\Phi}{d\delta}(\delta),$$

we have

$$\hat{d}_1 = \delta \frac{d\Phi}{d\delta}(\delta) \geq \Phi(\delta) \geq 0,$$

for any actual evolution. Thus the intrinsic dissipation is positive for any actual evolution and relation (7) is satisfied.

From (8) and (17) it results that

$$\hat{d}_1 = \frac{d\Phi}{d\delta} \left(\varrho_\ell \frac{d^{(\ell)}\beta_\ell}{dt} + \varrho_\ell \beta_\ell \operatorname{div} \bar{U}_\ell \right) + \eta_a \delta^{(a)}(\varrho_a \beta_g) + \eta_w (\delta^{(v)}(\varrho_v \beta_g) + \varrho_\ell \delta^{(\ell)}\beta_\ell), \quad (18)$$

for any velocities \bar{U}_j , $d^{(a)}\varrho_a/dt$, $d^{(v)}\varrho_v/dt$, $d^{(\ell)}\beta_k/dt$, $j \in \{a, v, \ell\}$, $k \in \{g, \ell\}$. The quantities η_a and η_w are Lagrange parameters.

Following the computation of Paragraph 2.3, we get easily that the relations (9), (10), (14) and (15) are still satisfied. The relation (16), the only one modified, is replaced by

$$\varrho_\ell \hat{B}_{vg} - \varrho_v \hat{B}_{\ell\ell} = \varrho_\ell \varrho_v \frac{d\Phi}{d\delta}.$$

To be specific let us assume Φ to be quadratic

$$\Phi(\delta) = \frac{k}{2} \delta^2, \quad k \geq 0.$$

With the expression of δ , we have

$$\varrho_\ell \hat{B}_{vg} - \varrho_v \hat{B}_{\ell\ell} = k \varrho_\ell^2 \varrho_v \left(\frac{d^{(\ell)}\beta_\ell}{dt} + \beta_\ell \operatorname{div} \bar{U}_\ell \right). \quad (19)$$

This relation means, for instance, that if $\varrho_\ell \hat{B}_{vg}$ is larger than $\varrho_v \hat{B}_{\ell\ell}$ there is an increase of the liquid water amount.

The development and interpretation of these constitutive laws is achieved in the article. Nevertheless let us note that the internal constraints

$$\beta_\ell + \beta_g = \varepsilon \quad \text{and} \quad 0 \leq \beta_j \leq \varepsilon, \quad j \in \{\ell, g\}, \quad (20)$$

results from the relations (10), (14) and (15) and the expressions of the ψ 's. For instance, if we choose

$$\psi_\ell(T, \beta_\ell, \beta_g) = \tilde{\psi}_\ell(T) + I(\beta_\ell, \beta_g)$$

where $\tilde{\psi}_\ell$ is a smooth function, the constitutive laws (10) and (15) give

$$\left(\frac{p_\ell + \psi_\ell}{\beta_\ell}, 0 \right) = (\hat{B}_{\ell\ell}, \hat{B}_{\ell g}) \in \partial \psi_\ell(\beta_\ell, \beta_g) = \partial I(\beta_\ell, \beta_g).$$

This relation implies that the internal constraints (20) are satisfied because the subdifferential of I , containing $((p_\ell + \psi_\ell)/\beta_\ell, 0)$, is not empty (see Appendix 1.2). Let us emphasize that the internal constraints being physical properties are taken into account by the constitutive laws.

From our standpoint a material is defined by the two functions ψ and Φ , the free energy and the pseudo-potential of dissipation. Thus it is natural that all properties, including the internal constraints, be taken into account by these two functions. The internal constraints are taken into account by the free energy because they are state properties and not dissipative properties.

References

1. Acker, P.; Abiar, G.; Malier, Y.: Delayed behaviour of concrete: model taking into account local humidity, R.I.L.E.M. Symposium: Creep and shrinkage of concrete. Mathematical modelling, Z. P. Bazant ed., (1986) 815–824
2. Atkin, R. J.; Craine, R. E.: Continuum theories of mixtures: Applications. J. Inst. Math. Appl. 17 (1976) 153–207
3. Benet, J. C.: Contribution à l'étude thermodynamique des milieux poreux non saturés avec changement de phase. Thèse, Université des Sciences et Techniques du Languedoc. Montpellier 1981
4. Blanchard, D.: Etude de problèmes d'évolution en mécanique des milieux dissipatifs Thèse, Université Pierre et Marie Curie, Paris 1986
5. Blanchard, D.; Fremond, M.; Visintin, A.: Phase change with dissipation in thermo-mechanical coupling in solids. H. D. Bui, Q. S. Nguyen ed., p. 411–418. North-Holland 1987
6. Bruhat, G.: Thermodynamique. Paris: Masson 1962
7. Coulaud, O.; Morel, P.; Caltagirone, J. P.: Effets non-linéaires dans les écoulements en milieux poreux. CRAS, t 302, Série II, n° 6. Paris 1984
8. Daïan, J. F.: Processus de condensation et de transfert d'eau dans un matériau meso et macroporeux. Etude expérimentale du mortier de ciment. Thèse: Université Scientifique Technologique et Médicale. Grenoble 1986
9. Defay, R.; Prigogine, I.; Bellemans, I. A.; Everett, D. H.: Surface tension and adsorption. Longmans, Greens and Co. Ltd. 1966
10. Feldman, R. F.; Sereda, P. J.: A model for hydrated portland cement paste as deduced from sorption-length change and mechanical properties. Matériaux et Constructions 1 (1968) n° 6
11. Fisher, L. R.; Israelachvili, J. N.: Direct experimental verification of the Kelvin equation for capillary condensation. Nature 277 (1979)

12. Fremond, M.; Nicolas, P.: Hysteresis dans les milieux poreux non saturés. CRAS, t 305, Série II, 741-746. Paris 1987
13. Fremond, M.: Matériaux à mémoire de forme. CRAS, t 301, Série II, 1265-1268. Paris 1987
14. Friaa, A.; Mensi, R.; Acker, P.: Etude du transfert simultané de la teneur en eau et de la chaleur dans le béton. Congrès International de la R.I.L.E.M. Paris 1987
15. Germain, P.: Mécanique des Milieux Continus. Paris: Masson 1973
16. Hassanizadeh, S. M.: Derivation of basic equation of mass transport in porous media. Part 1: Macroscopic balance laws. Part 2: Generalized Darcy's and Fick's laws. Water Resources Vol. 9 (1986)
17. Kool, J. B.; Parker, J. C.: Development and evaluation of closed-form expression for hysteretic soil hydraulic properties. Water Resources Res. 23, n° 1 (1987) 105-114
18. Luikov, M.: Heat and mass transfer in capillary bodies. New York: Pergamon Press 1966
19. Marle, C. M.: Cours de Production: les écoulements polyphasiques en milieux poreux, 4. Paris: Technip 1972
20. Marle, C. M.: Les écoulements polyphasiques en milieux poreux: de l'échelle des pores à l'échelle macroscopique. Ann. des Mines. Paris, Mai-Juin 1984
21. Menot, J. M.: Drainage et gel des milieux poreux partiellement saturés. Thèse, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées. Paris 1979
22. Moreau, J. J.: Fonctionnelles convexes, Séminaire sur les équations aux dérivées partielles. Collège de France. Paris 1966
23. Moreau, J. J.: Fonctions de résistance et fonctions de dissipation. Séminaire d'analyse convexe. Montpellier 1971
24. Moreau, J. J.; Panagiotopoulos, P. D.; Strang, G.: Topics in non-smooth mechanics Basel: Birkhäuser 1988
25. Müller, I.: A thermodynamic theory of mixtures of fluids. Arch. Ration. Mech. Anal. 28, n° 1 (1968)
26. Müller, I.: Thermodynamics. London: Pitman 1985
27. Perrin, B.: Etude des transferts couplés de chaleur et de masse dans des matériaux poreux consolidés non saturés, utilisés en Génie Civil. Thèse, Université Paul Sabatier. Toulouse 1985
28. Philip, J. R.; de Vries, D. A.: Mixtures movements in porous materials under temperature gradients. Trans. Am. Geoph. Union. 38, n° 2. (1957)
29. Prud'homme, R.: Fluides hétérogènes et réactifs: écoulements et transferts. Ecole Polytechnique, mars-juillet 1985
30. Sissom, L.; Pitts, D.: Elements of transport phenomena. 1972
31. Verbrugge, J. C.: Equilibre et mouvement de l'eau dans les sols. Université Libre de Bruxelles. Rapport de Recherche n° 159, 1972

M. Fremond
P. Nicolas
Service de Mathématiques
Laboratoire Central des Ponts et Chaussées
Laboratoire Mixte LCPC/CNRS
Laboratoire des Matériaux
et Structures du Génie Civil
58, Boulevard Lefebvre
75732 Paris Cédex 15
France

Received April 27, 1989

Annexe 2 :

DISSIPATION DANS LES MATERIAUX
A VARIABLES INTERNES
ATTIREES PAR UN CONVEXE

Dissipation dans les matériaux à variables internes attirées par un convexe

Dominique BLANCHARD, Giuseppe GEYMONAT et Pierre NICOLAS

Résumé – Nous proposons une classe de potentiels de force associés à un convexe fermé C dans l'espace des variables d'état d'un matériau standard généralisé tels que la distance de ces variables au convexe soit décroissante en temps. En particulier, cette méthode permet d'assurer que si la liaison « ces variables sont dans C » est satisfaite à l'instant initial, alors elle l'est pour tout instant ultérieur. De ce fait cette méthode permet de prendre en compte des liaisons convexes sur des variables internes par l'intermédiaire d'un potentiel de force.

Dissipation in materials with internal variables trapped in a convex set

Abstract – In the context of standard materials we introduce a class of potentials such that the distance from a specific set of state variables to a given closed convex set C decreases with time. As a consequence, if these variables belong to C at some time t_0 , they remain in C for any time t larger than t_0 . Therefore our technique permits us to satisfy convex constraints on several internal variables through the use of potentials for the thermodynamical forces.

Abridged English Version – 1. Many papers attempt to model the behaviour of standard materials in which several state variables or their time derivative are constrained (see [1], [4], [5], [6], [8]). When several state variables β are constrained to belong to a closed convex set C , the indicator function I_C of C is added to the usual free energy $\Psi(T, \varepsilon, \alpha, \beta)$ (a regular function of the temperature T , the linearized deformation ε and the internal variables α, β). This technique leads to difficulties in the derivation of the dissipation because it involves the evaluation of the time-derivative of the non-smooth free energy in such materials. In [7] the use of left sided time-derivatives has been proposed to overcome this problem.

In this note, we investigate a different and more general technique relying on the introduction of an adequate potential for the thermodynamical forces and which allows us to take into account the constraints both on the variables and on their time-derivative. By contrast to the above mentioned approach the free energy $\Psi(T, \varepsilon, \alpha, \beta)$ is regular and no difficulty occurs in the derivation of the dissipation.

Let C be a closed convex set in the Euclidean space of a specific set of internal variables β ; the evolution of the medium must be such that the distance between these variables and C decreases with time: (1). Thus if at some time t_0 the convex constraint is satisfied, *i. e.*, the variables lie in C at time t_0 , then this constraint holds at any time larger than t_0 . The volumic entropy, the reversible stress σ^r and the thermodynamical forces A, B respectively related to α, β are given by (2). For standard materials the Clausius-Duhem inequality is insured through the introduction of a convex potential of the forces. A decoupling assumption suggests we should seek a class of potentials $\Phi(B; \varepsilon, \alpha, \beta)$ for which (4) implies (1).

2. We establish a few properties of the type of function which will be used in the definition of the potential $\Phi(B; \beta)$. Let K be a closed convex cone with vertex 0 contained in the finite dimensional space F of the forces B . Let $\psi: F \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ be a convex, non-negative, lower semicontinuous function with $\psi(0)=0$ and define for $B \in F$ the

function Φ by

$$(5) \quad \Phi(\mathbf{B}) = \inf_{\mathbf{w} \in \mathbf{K}} \psi(\mathbf{B} - \mathbf{w}).$$

Proposition 1 shows that Φ satisfies the properties that define a potential for the force \mathbf{B} ; it also connects the subdifferential $\partial_{\mathbf{B}} \Phi$ to the polar cone \mathbf{K}^0 of \mathbf{K} . The characterization (7) of the subdifferential $\partial_{\mathbf{B}} \Phi$ is given in proposition 2 under the compatibility condition (6) between ψ and \mathbf{K} .

3. The potential $\Phi(\mathbf{B}; \beta)$ associated to the constraint (1) is defined by specifying the convex cone $\mathbf{K}(\beta)$ for each β in F . We denote by $\hat{\beta}$ the projection of β onto C , by $\mathbf{K}(\beta)$ a closed convex cone with vertex 0 such that $\beta - \hat{\beta} \in \mathbf{K}(\beta)$ holds and by $\mathbf{K}_0(\beta)$ its polar cone. The potential $\Phi(\mathbf{B}; \beta)$ is then defined by (9). With the help of proposition 3 it is shown that the constitutive law (4) insures the validity of Clausius-Duhem inequality and the desired constraint (1). Moreover this constitutive law gives a more precise formulation than that usually derived through the non-smooth free energy approach for this kind of problem.

The proposed method can also be applied to any kind of state variables which appear in the expression (3) of the intrinsic dissipation.

3. *Examples.* — We give two examples to illustrate this new method.

Example 1. — Several phase change models are in particular recovered by setting $\mathbf{K}(\beta) = \partial I_C(\hat{\beta})$ and $\psi(\mathbf{B}) = (1/2) \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$ where β is the volume fractions vector and \mathbf{B} is the thermodynamical forces vector associated to β (e.g. the temperature) (see [5], [8]).

Example 2. — An irreversible phase change model in a two-phase medium is obtained by setting $F = \mathbb{R}$, $C = \{1\}$, $\psi(\mathbf{B}) = (1/2) \mathbf{B}^2$ and $\mathbf{K}(\beta) = \{w \in \partial I_C(\hat{\beta}) \mid w \cdot (\beta - \hat{\beta}) \geq 0\}$ where β is the volume fraction of the phase which the medium wants to change into. Let us point out that (12) gives a very precise formulation of the constitutive law for β .

1. INTRODUCTION. — 1.1. Dans le cadre des matériaux standard généralisés de nombreux articles ont été consacrés à la modélisation des matériaux à variables d'état indépendantes soumises à des liaisons. Ces liaisons sont en général de deux types : elles portent soit sur les vitesses de certaines variables, soit sur ces variables elles-mêmes (cf. par exemple [1], [4], [5], [6], [8]). Dans ce dernier cas, les liaisons internes sont prises en compte en modifiant l'énergie libre spécifique classique par addition d'un terme non régulier : la fonction indicatrice de l'ensemble des liaisons. Cette approche est confrontée à des difficultés concernant le calcul de la dérivée par rapport au temps de l'énergie libre du milieu, en particulier du terme non régulier. Ceci a conduit, pour contourner ce problème, à se limiter à la prise en compte de la dérivée à gauche par rapport au temps de l'énergie libre dans le calcul de la dissipation [7].

La méthode que nous proposons pour s'affranchir de ces difficultés consiste à assurer les liaisons convexes via l'introduction d'un potentiel de force tout en ne conservant que l'expression régulière de l'énergie libre. Elle permet de prendre en compte les contraintes sur les variables d'état ou sur leur vitesse. Le calcul de la dissipation est alors classique et les lois de comportement ainsi obtenues sont formulées de façon plus précise, en particulier dans le cas de non linéarités sur les vitesses [2].

Nous considérons les liaisons du type : « les évolutions de certaines variables d'état β sont telles que la distance de $\beta(t)$ à un convexe fermé C est une fonction décroissante du

temps ». Bien sûr, si à un instant donné les variables β satisfont la liaison convexe (i.e. elles appartiennent à C à cet instant), alors la liaison est satisfaite pour tout instant ultérieur. L'objet principal de cette Note est de dégager une classe de potentiels de force associées à C qui permettent d'assurer cette liaison (plus générale que « $\beta \in C$ ») et de retrouver dans cette situation les lois doublement non linéaires décrivant l'évolution des variables internes.

1.2. Nous considérons une classe de matériaux pour lesquels, dans l'hypothèse des petites perturbations, le comportement réversible est déterminé par la connaissance de l'énergie libre spécifique $\Psi(T, \varepsilon, \alpha, \beta)$, fonction régulière de la température T , de la déformation ε et de variables internes α et β ⁽¹⁾. Les variables internes β sont soumises à la condition :

(1) la distance de $\beta(t)$ au convexe C est une fonction décroissante du temps t .

L'entropie volumique s , la contrainte réversible σ^r , les forces thermodynamiques A et B associées respectivement à α et β sont obtenues par les lois d'état :

$$(2) \quad s = -\rho \partial\Psi/\partial T, \quad \sigma^r = \rho \partial\Psi/\partial \varepsilon, \quad A = -\rho \partial\Psi/\partial \alpha, \quad B = -\rho \partial\Psi/\partial \beta.$$

Avec l'hypothèse classique de découplage entre la dissipation intrinsèque d_1 et la dissipation thermique, l'inégalité de Clausius-Duhem entraîne

$$(3) \quad d_1 = (\sigma - \sigma^r) : \dot{\varepsilon} + A \cdot \dot{\alpha} + B \cdot \dot{\beta} \geq 0$$

où σ désigne le tenseur des contraintes de Cauchy.

Par souci de simplicité et puisque nous nous intéressons à modéliser l'évolution des variables internes β , le potentiel de force utilisé dans le cadre des matériaux standard généralisés [9] est ici supposé découplé en $(\sigma - \sigma^r, A)$ et B . Les complémentaires pour $(\sigma - \sigma^r, A)$ sont alors classiques et nous introduisons un potentiel de force $\Phi(B; \varepsilon, \alpha, \beta)$, fonction de B , la loi complémentaire pour B s'écrivant

$$(4) \quad \dot{\beta} \in \partial_B \Phi(B; \varepsilon, \alpha, \beta).$$

Nous allons définir une classe de potentiels de force Φ tels que la loi complémentaire (4) entraîne la réalisation de la condition (1).

2. POTENTIELS DE FORCE ASSOCIES A UN CONE CONVEXE. — Nous établissons ici des propriétés sur le type de fonctions que nous utiliserons dans le paragraphe 3. Soit K un cône (dans F) convexe fermé de sommet 0 dont nous noterons I_K la fonction indicatrice et K^0 le cône polaire. Soit $\psi : F \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ une fonction convexe, positive et nulle à l'origine et Φ l'inf-convoluée de ψ et de I_K :

$$(5) \quad \Phi(B) = \inf_{w \in K} \psi(B - w).$$

La proposition suivante découle des propriétés de ψ et de K .

PROPOSITION 1. — La fonction Φ est convexe et vérifie : $\Phi(B) \geq 0$, $\Phi(B) = 0$ pour tout $B \in K$, $\partial\Phi(B) \subset K^0$ pour tout $B \in F$ et $\partial\Phi(B) \subset \partial(\psi^* + I_{K^0})^*(B)$, où ψ^* désigne la fonction duale de ψ .

En général Φ n'est pas sousdifférentialbe. La proposition 2 donne une condition suffisante de sousdifférentiabilité de Φ et, dans ce cas, une caractérisation de son sousdifférentiel.

PROPOSITION 2. — (i) Si $B \in F$ vérifie :

$$(6) \quad \text{il existe } b \in K \text{ tel que } \partial\psi(B - b) \cap \partial I_K(b) \neq \emptyset$$

alors Φ est sousdifférentiable en \mathbf{B} et, pour tout \mathbf{b}' tel que $\partial\psi(\mathbf{B}-\mathbf{b}') \cap \partial I_{\mathbf{K}}(\mathbf{b}') = \emptyset$, on a :

$$(7) \quad \partial\Phi(\mathbf{B}) = \partial\psi(\mathbf{B}-\mathbf{b}') \cap \partial I_{\mathbf{K}}(\mathbf{b}')$$

(ii) Supposons de plus ψ semi-continue inférieurement, alors l'écriture

$$\mathbf{B} \in \partial\psi^*(\lambda) + \partial I_{\mathbf{K}^0}(\lambda)$$

est équivalente à $\lambda \in \partial\Phi(\mathbf{B})$ et (6).

Remarque. — La condition (6) est une condition de compatibilité entre la fonction ψ et le cône convexe \mathbf{K} . Elle implique $\Phi(\mathbf{B}) = \psi(\mathbf{B}-\mathbf{b})$ pour les \mathbf{b} vérifiant (6), ce qui permet dans les applications la détermination explicite de $\Phi(\mathbf{B})$ et de son sousdifférentiel par (7). La condition (6) est satisfaite par exemple si ψ est continue en un point de $\mathbf{B}-\mathbf{K}$ et si le inf de (5) est atteint.

La démonstration de la proposition 2 est une conséquence des théorèmes classiques d'analyse convexe.

3. POTENTIELS DE FORCE ASSOCIES A LA LIAISON (1). — Nous appliquons les résultats du paragraphe 2 à un cône convexe fermé de sommet 0 dépendant de β , $\mathbf{K}(\beta)$, choisi dans la suite de telle sorte que la liaison (1) soit satisfaite. Une condition naturelle sur les vitesses $\dot{\beta}$ qui s'avère être nécessaire et suffisante pour assurer (1) est la suivante :

$$(8) \quad (\beta - \hat{\beta}) \cdot \dot{\beta} \leq 0,$$

où $\hat{\beta}$ est la projection de β sur le convexe fermé C . Dans le cas où β présente une régularité faible ⁽²⁾, nous verrons que cette condition est nécessaire et suffisante pour assurer (1). De plus, bien que (8) ne semble rien imposer sur $\dot{\beta}$ quand β appartient à la frontière de C , la discrétisation implicite en temps de (8) montre que, si les solutions discrétisées convergent dans un sens raisonnable vers une fonction β dérivable à droite, la liaison (1) est satisfaite pour cette fonction β . Compte tenu de la proposition 1 nous sommes conduit à imposer pour le choix de $\mathbf{K}(\beta)$ la restriction $\beta - \hat{\beta} \in \mathbf{K}(\beta)$.

Suivant l'approche du paragraphe 2 nous définissons le potentiel de force $\Phi(\mathbf{B}; \beta)$ par

$$(9) \quad \Phi(\mathbf{B}; \beta) = \inf_{\mathbf{w} \in \mathbf{K}(\beta)} \psi(\mathbf{B}-\mathbf{w})$$

où $\psi: F \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est une fonction convexe, semi-continue inférieurement, positive et nulle à l'origine ⁽³⁾. Dans ce cas la proposition 1 donne :

PROPOSITION 3. — Si la loi complémentaire (4) est satisfaite avec $\Phi(\mathbf{B}; \beta)$ donné par (9), alors :

$$(i) \quad \mathbf{B} \cdot \dot{\beta} \geq \Phi(\mathbf{B}; \beta) \geq 0; \quad (ii) \quad \dot{\beta} \in \mathbf{K}^0(\beta); \quad (iii) \quad \mathbf{B} \in \partial(\psi^* + I_{\mathbf{K}^0(\beta)})(\dot{\beta}).$$

Les propriétés (i) et (ii) montrent que les potentiels de force définis par (9) assurent à la fois l'inégalité de Clausius-Duhem et la propriété fondamentale visée (1). En effet, sous des hypothèses faibles de régularité ⁽²⁾ sur $\beta(t)$, on a $(\beta - \hat{\beta}) \cdot \dot{\beta} = dI_C(\hat{\beta})/dt = 0$ (cf. [3]). On en déduit à l'aide de (ii) et de l'hypothèse $\beta - \hat{\beta} \in \mathbf{K}(\beta)$

$$\frac{d}{dt} \|\beta - \hat{\beta}\|^2 = (\beta - \hat{\beta}) \cdot (\dot{\beta} - \dot{\hat{\beta}}) = (\beta - \hat{\beta}) \cdot \dot{\beta} \leq 0$$

Il est clair que cette propriété est vraie dès que $\beta - \hat{\beta} \in \mathbf{K}(\beta)$. Le choix de $\mathbf{K}(\beta)$ laissé libre, cette condition étant satisfaite, permet de restreindre à notre gré les vitesses $\dot{\beta}$ des évolutions. Par exemple le choix licite ⁽⁴⁾ $\mathbf{K}(\beta) = \partial I_C(\hat{\beta})$ [puisque $\beta - \hat{\beta} \in \partial I_C(\hat{\beta})$] laisse toute latitude à $\dot{\beta}$ compatible avec la contrainte $\beta \in C$. En effet, si l'on considère une évolution à partir de $\beta(t=0) \in C$, les vitesses autorisées (vues comme des dérivées à droite pour $t=0$) doivent uniquement satisfaire $\dot{\beta} \cdot \partial I_C(\beta) \leq 0$.

La propriété (iii) qui est une forme duale de la dernière relation de la proposition 1, montre qu'une alternative à la méthode proposée est d'introduire un pseudopotentiel de dissipation pour les vitesses $\dot{\beta}$ sous la forme $\psi^* + I_{\mathbf{K}^0(\beta)}$. La démarche que nous avons choisie d'adopter via la définition directe d'un potentiel de force s'est avérée plus directement exploitable dans les applications au vu de la caractérisation explicite du sousdifférentiel $\partial\Phi$ donnée en (7).

Remarque 1. – Compte tenu de (7) et (9) la propriété (ii) de la proposition 2 montre que la loi

$$(10) \quad \mathbf{B} \in \partial I_{\mathbf{K}^0(\beta)}(\dot{\beta}) + \partial\psi^*(\dot{\beta})$$

est équivalente à (4) et (6). De plus si $\beta(t=0) \in C$ et si $\mathbf{K}(\beta) \subset \partial I_C(\beta)$, en utilisant l'inclusion éventuellement stricte $\partial I_{\mathbf{K}^0(\beta)}(\dot{\beta}) \subset \partial I_C(\dot{\beta})$, on obtient en général une formulation plus précise des lois utilisées pour ce type de problèmes dans [5], [8], cf. aussi l'exemple 2. Notons que cette précision de la section de $\partial I_C(\beta)$ choisie dans (10) permet de formuler un principe en vitesse pour $\dot{\beta}$ (cf. [11]) directement sans utiliser la relation $\dot{\beta} \cdot \partial I_C(\beta) = 0$ qui n'est vérifiée que pour presque tout t .

Remarque 2. – La méthode que nous proposons peut évidemment s'appliquer à toutes les variables d'état indépendantes apparaissant dans l'expression (3) de la dissipation intrinsèque.

4. EXEMPLES. – Nous appliquons la méthode développée ci-dessus à la modélisation de changements de phase. D'autres applications sont possibles par exemple pour les matériaux à blocage (cf. [4]), l'endommagement...

Exemple 1. – Choisissons $\mathbf{K}(\beta) = \partial I_C(\hat{\beta})$ et $\psi(\mathbf{B}) = (1/2) \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$. Alors (6) est toujours satisfaite avec $\mathbf{b} = \text{proj}_{\mathbf{K}(\beta)}(\mathbf{B})$ et $\partial\psi(\mathbf{B} - \mathbf{b}) \cap \partial I_{\mathbf{K}^0(\beta)}(\mathbf{b}) = \text{proj}_{\mathbf{K}^0(\beta)}(\mathbf{B})$. La relation (4) s'écrit (cf. [10]) :

$$(11) \quad \dot{\beta} = \text{proj}_{\mathbf{K}^0(\beta)}(\mathbf{B}) = \mathbf{B} - \text{proj}_{\partial I_C(\hat{\beta})}(\mathbf{B}).$$

Pour $\mathbf{B} = \mathbf{B}(t)$ donné assez régulier et $\beta(t=0) \in C$, l'équation (11) a une solution unique (cf. [3]).

Ces particuliers. (a) Si $F = \mathbb{R}$ et $C = [0, 1]$ alors (11) décrit l'évolution d'une proportion de phase β dans un milieu diphasique en fonction de la température \mathbf{B} (cf. [8]).

(b) Si $F = \mathbb{R}^2$ et $C = \{\beta = (\beta_1, \beta_2) \mid 0 \leq \beta_1, \beta_2, \beta_1 + \beta_2 \leq 1\}$ alors (11) décrit l'évolution d'un matériau à mémoire de forme constitué de 3 phases de proportions β_1, β_2 et $1 - \beta_1 - \beta_2$ (cf. [5]).

Remarque. – Si $\beta(t=0) \in C$, on retrouve la loi non dissipative $\mathbf{B} \in \partial I_C(\beta)$ soit comme cas limite pour ε tendant vers 0 de la loi dissipative (11) lorsque $\psi(\mathbf{B}) = (1/2\varepsilon) \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$, soit en considérant la forme duale (iii) de la proposition 3 avec $\psi^* = 0$.

Exemple 2. – *Changement de phase irréversible.* Cet exemple illustre la variété de comportement possible issue de la souplesse autorisée pour le choix de $\mathbf{K}(\beta)$.

Pour $F = \mathbb{R}$, $C = \{1\}$, $\psi(\mathbf{B}) = (1/2) \mathbf{B}^2$ et $\mathbf{K}(\beta) = \{w \in \partial I_C(\hat{\beta}) \mid w \cdot (\beta - \hat{\beta}) \geq 0\}$, la condition (6) est satisfaite et la loi (4) s'explique facilement grâce à (7) :

$$(12) \quad \dot{\beta} = \mathbf{B}^+ \quad \text{si } \beta < 1, \quad \dot{\beta} = 0 \quad \text{si } \beta = 1 \quad \text{et} \quad \dot{\beta} = -\mathbf{B}^- \quad \text{si } \beta > 1 \quad (5);$$

où β est la proportion de la phase vers laquelle le matériau tend à se transformer et \mathbf{B} est la température. Cette situation correspond à la liaison générale (1) sur β sans toutefois imposer *a priori* la liaison $\beta(t) \in C$. Pour $\beta_0 = \beta(t_0) \in [0, 1]$ les évolutions de β restent

dans l'intervalle $[\beta_0, 1]$. On obtient ainsi une forme plus précise de celle obtenue pour les changements de phase irréversibles dans [8] (cf. [2]) : $B \in \hat{\beta} + \partial I_{[0, 1]}(\beta) + \partial I_{\mathbb{R}^+}(\hat{\beta})$.

5. CONCLUSION. — Le choix (9) pour Φ permet de transformer le potentiel de force ψ en un potentiel qui tient compte de la liaison (1) cherchée. La généralité de l'approche proposée est liée à la souplesse du choix de $\mathbf{K}(\beta)$.

(¹) α et β sont des quantités scalaires, vectorielles ou tensorielles, respectivement éléments d'un espace euclidien de dimension finie E , resp. F , dont les produits scalaires sont notés « . ».

(²) Par exemple, si $\beta(t) \in W^{1,2}(0, L; F)$.

(³) Plus généralement, ψ pourrait dépendre de ε , α et β .

(⁴) Si β est sur le bord de C alors $\partial I_C(\beta)$ est le cône normal à C en β .

(⁵) Si $B \in \mathbb{R}$, $B^+ = \max(0, B)$, $B^- = \max(0, -B)$.

Note remise le 22 janvier 1990, acceptée après révision le 11 mai 1990.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] D. BLANCHARD, Étude de problèmes d'évolution en mécanique des milieux dissipatifs, *Thèse d'État*, Université Pierre-et-Marie-Curie, Paris, 1986.
- [2] D. BLANCHARD, *Irreversible phase changes*, Mathematical Models for Phase Change Problems. International Series of Numerical Mathematics, 88, J. F. RODRIGUES éd., Birkhäuser Verlag, Basel, 1989.
- [3] H. BREZIS, *Opérateurs maximaux monotones et semigroupes de contraction dans les espaces de Hilbert*, North-Holland, Amsterdam, 1973.
- [4] F. DEMENGEL et P. SUQUET, On Locking Materials, *Acta Applicandae Mathematicae*, 6, 1986, p. 185-211.
- [5] M. FREMOND, Matériaux à mémoire de forme, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 304, série II, 1987, p. 239-244.
- [6] M. FREMOND et P. NICOLAS, Hystérésis dans les milieux poreux humides non saturés, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 305, série II, 1987, p. 741-746.
- [7] M. FREMOND et P. NICOLAS, Macroscopic thermodynamics of porous media, *Continuum Mech. and Thermodyn.*, 4, 1990, Springer-Verlag (à paraître).
- [8] M. FREMOND et A. VISINTIN, Dissipation dans le changement de phase. Surfusion. Changement de phase irréversible, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 301, série II, 1985, p. 1265-1268.
- [9] B. HALPHEN et NGUYEN QUOC SON, Sur les matériaux standard généralisés, *J. de Mécanique*, 14, 1975, p. 39-63.
- [10] J. J. MOREAU, Décomposition orthogonale d'un espace hilbertien selon deux cônes mutuellement polaires, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 255, 1962, p. 238-240.
- [11] P. SUQUET, Local and global aspects in the mathematical theory of plasticity, *Symposium Plasticity Today*, 1983, éd. Bianchi, Sawczuk, Elsevier, London and New York, 1985.

D. B. et P. N. : *Service de Mathématiques, Laboratoire central des Ponts et Chaussées.*
Unité mixte de Recherche L.C.P.C.-C.N.R.S.,
Laboratoire des Matériaux et des Structures du Génie Civil,
58, boulevard Lefebvre, 75732 Paris Cedex 15 ;

G. G. : *L.M.T., E.N.S. de Cachan, C.N.R.S., Université Paris-VI,*
61, avenue du Président Wilson, 94235 Cachan Cedex.

Annexe 3 :

CALCUL DES DERIVEES DU TERME DE TRANSPORT

1. Termes de transport

Les termes de transport que nous allons dériver sont de la forme

$$\operatorname{div}(\beta \rho \vec{u}) = -H_1(\beta \rho) \quad (1)$$

avec les notations employées aux chapitres 5 et 6. Après discrétisation en espace (cf §4.3.1.) par volumes finis, le terme de transport est le flux sur le bord de la cellule $\partial \mathcal{C}_i$ suivant

$$\int_{\partial \mathcal{C}_i} \beta \rho \vec{u} \cdot \vec{n} = \sum_{T_j \ni P_i} \sum_k \int_{\partial \mathcal{C}_{ik}^j} (\beta \rho)^* \vec{u} \cdot \vec{n} + \int_{\partial \mathcal{C}_i \cap \Gamma_2} (\beta \rho)^* \vec{u} \cdot \vec{n} \quad (2)$$

avec

$$\begin{aligned} (\beta \rho)^* &= \left[\frac{1}{2} + \alpha_c \operatorname{sg} \left(\int_{\partial \mathcal{C}_{ik}^j} \vec{u} \cdot \vec{n} \right) \right] (\beta \rho)_i \\ &+ \left[\frac{1}{2} - \alpha_c \operatorname{sg} \left(\int_{\partial \mathcal{C}_{ik}^j} \vec{u} \cdot \vec{n} \right) \right] (\beta \rho)_k \quad \text{sur } \partial \mathcal{C}_{ik}^j, \end{aligned} \quad (3)$$

$$(\beta \rho)^* \vec{u} \cdot \vec{n} = -\alpha [(\beta \rho)_i - (\beta \rho)^{imp}] - q \quad \text{sur } \partial \mathcal{C}_i \cap \Gamma_2. \quad (4)$$

L'indice i (resp. k) précise que la valeur $(\beta \rho)$ est prise au noeud P_i (resp. P_k).

Ces calculs sont nécessaires uniquement aux noeuds n'appartenant pas à la frontière Γ_1 où des conditions de Dirichlet sont appliquées. C'est pour cela que l'on ne considère que le terme $\partial \mathcal{C}_i \cap \Gamma_2$ si le noeud est sur la frontière Γ_2 .

Les différentes valeurs de $(\beta \rho)^*$ ((3) et (4)) nous obligent à distinguer deux cas : calcul des dérivées de flux à travers un segment frontière et calcul des dérivées de flux à travers un segment interne à Ω .

2. Dérivées des flux frontières

Le flux s'écrit à l'aide de (4) :

$$\begin{aligned} f_{i2} &= - \int_{\partial \mathcal{C}_i \cap \Gamma_2} \alpha [(\beta \rho)_i - (\beta \rho)^{imp}] - q \\ &= -\alpha \mathcal{L}_{i2} [(\beta \rho)_i - (\beta \rho)^{imp}] - \mathcal{L}_{i2} q \end{aligned} \quad (5)$$

en supposant α et q constant sur $\partial \mathcal{C}_i \cap \Gamma_2$ et en notant \mathcal{L}_{i2} la longueur de $\partial \mathcal{C}_i \cap \Gamma_2$.

Pour chaque constituant a, v, l , le flux f_{i2} ne dépend que de la variable $(\beta \rho)$ de ce constituant au noeud P_i . Une seule dérivée est non nulle dans ce cas :

$$\frac{df_{i2}}{d(\beta \rho)_i} = -\alpha \mathcal{L}_{i2}.$$

3. Dérivées de flux internes

Le flux élémentaire s'écrit à l'aide de (3)

$$\begin{aligned} f_{ik}^j &= \int_{\partial C_{ik}^j} [\alpha_i(\beta\rho)_i + \alpha_k(\beta\rho)_k] \vec{u} \cdot \vec{n}, \\ &= \mathcal{L}_{ik}^j [\alpha_i(\beta\rho)_i + \alpha_k(\beta\rho)_k] \vec{u} \cdot \vec{n} \end{aligned} \quad (7)$$

en posant

$$\alpha_i = \frac{1}{2} + \alpha_c \operatorname{sg} \left(\int_{\partial C_{ik}^j} \vec{u} \cdot \vec{n} \right), \quad (8)$$

$$\alpha_k = 1 - \alpha_i, \quad (9)$$

et où \mathcal{L}_{ik}^j désigne la longueur du segment ∂C_{ik}^j .

Les vitesses \vec{u} de chaque constituant a, v, l sont données au chapitre 3 ((194), (195), (196))

$$\beta_a \vec{u}_a = -(K_g + \frac{P_v}{P_a} K_{av}) \nabla P_a - (K_g - K_{av}) \nabla P_v, \quad (10)$$

$$\beta_v \vec{u}_v = -(K_g - K_{av}) \nabla P_a - (K_g + \frac{P_a}{P_v} K_{av}) \nabla P_v, \quad (11)$$

$$\beta_l \vec{u}_l = -K_l \nabla (P_l + \frac{\rho_l RT}{M_v} h(\beta_l) + \rho_l g z). \quad (12)$$

Le flux f_{ik}^j est donc une somme de terme de la forme

$$\tilde{f}_{ik}^j = -\mathcal{L}_{ik}^j [\alpha_i(\beta\rho)_i + \alpha_k(\beta\rho)_k] K \nabla P \cdot \vec{n} \quad (13)$$

où K et P sont des fonctions des variables $\beta_a \rho_a, \beta_v \rho_v$ et $\beta_l \rho_l$.

Notons que les vitesses \vec{u} sont constantes par triangle et donc la valeur du coefficient K est la moyenne de sa valeur K_i, K_k, K_m aux trois noeuds P_i, P_k, P_m du triangle considéré T_j :

$$K = \frac{1}{3} (K_i + K_k + K_m). \quad (14)$$

Pour simplifier les calculs, nous ne dérivons que la forme de flux (13) ; elle dépend des trois variables $\beta_a \rho_a, \beta_v \rho_v$ et $\beta_l \rho_l$ prises aux trois noeuds P_i, P_k, P_m . Ainsi nous obtenons pour la dérivée des flux \tilde{f}_{ik}^j du constituant r

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{f}_{ik}^j}{\partial (\beta_s \rho_s)_i} &= -\mathcal{L}_{ik}^j \alpha_i \delta_{sr} K \nabla P \cdot \vec{n} \\ &\quad - \mathcal{L}_{ik}^j [\alpha_i(\beta_r \rho_r)_i + \alpha_k(\beta_r \rho_r)_k] \frac{1}{3} \frac{\partial K_i}{\partial (\beta_s \rho_s)_i} \nabla P \cdot \vec{n} \\ &\quad - \mathcal{L}_{ik}^j [\alpha_i(\beta_r \rho_r)_i + \alpha_k(\beta_r \rho_r)_k] K \frac{\partial P}{\partial (\beta_s \rho_s)_i} \nabla \varphi_i \cdot \vec{n}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{f}_{ik}^j}{\partial (\beta_s \rho_s)_k} &= - \mathcal{L}_{ik}^j \alpha_k \delta_{rs} K \nabla P \cdot \vec{n} \\
&- \mathcal{L}_{ik}^j [\alpha_i (\beta_r \rho_r)_i + \alpha_k (\beta_r \rho_r)_k] \frac{1}{3} \frac{\partial K_k}{\partial (\beta_s \rho_s)_k} \nabla P \cdot \vec{n} \\
&- \mathcal{L}_{ik}^j [\alpha_i (\beta_r \rho_r)_i + \alpha_k (\beta_r \rho_r)_k] K \frac{\partial P}{\partial (\beta_s \rho_s)_k} \nabla \varphi_k \cdot \vec{n},
\end{aligned} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{f}_{ik}^j}{\partial (\beta_s \rho_s)_m} &= - \mathcal{L}_{ik}^j [\alpha_i (\beta_r \rho_r)_i + \alpha_k (\beta_r \rho_r)_k] \frac{1}{3} \frac{\partial K_m}{\partial (\beta_s \rho_s)_m} \nabla P \cdot \vec{n} \\
&- \mathcal{L}_{ik}^j [\alpha_i (\beta_r \rho_r)_i + \alpha_k (\beta_r \rho_r)_k] K \frac{\partial P}{\partial (\beta_s \rho_s)_m} \nabla \varphi_m \cdot \vec{n},
\end{aligned} \tag{17}$$

pour $s = a, v, l$.

Le symbole δ_{sr} est le symbole de Kronecker ($\delta_{sr} = 1$ si $s = r$, $\delta_{sr} = 0$ sinon) et φ_i est la fonction de base du noeud P_i .

Nous arrivons donc à 9 dérivées par flux de chaque constituant a, v, l . Au total, cela fait 27.

Les dérivées de K_i, K_k, K_m et P sont reliées à celles des pressions P_a, P_v, P_l , de la fonction $h(\beta_l)$ et des coefficients K_g, K_{av}, K_l . Pour cela, on utilise les expressions suivantes :

$$\text{flux d'air} \left\{ \begin{array}{l} \text{terme 1 : } P = P_a \quad \text{et} \quad K = \frac{1}{\beta_a} (K_g + \frac{P_v}{P_a} K_{av}), \\ \text{terme 2 : } P = P_v \quad \text{et} \quad K = \frac{1}{\beta_a} (K_g - K_{av}), \end{array} \right.$$

$$\text{flux de vapeur} \left\{ \begin{array}{l} \text{terme 1 : } P = P_a \quad \text{et} \quad K = \frac{1}{\beta_v} (K_g - K_{av}), \\ \text{terme 2 : } P = P_v \quad \text{et} \quad K = \frac{1}{\beta_v} (K_g + \frac{P_a}{P_v} K_{av}), \end{array} \right.$$

$$\text{flux d'eau liquide : } P = P_l + \frac{\rho_l RT}{M_v} h(\beta_l) + \rho_l g z \quad \text{et} \quad K = \frac{1}{\beta_l} K_l.$$

Les dérivées des pressions P_a, P_v, P_l et de la fonction $h(\beta_l)$ sont déduites de leur expression analytique

$$P_a = \frac{\rho_a RT}{M_a} = \frac{\rho_l RT}{M_a} \frac{\beta_a \rho_a}{\varepsilon \rho_l - \beta_l \rho_l}.$$

$$P_v = \frac{\rho_v RT}{M_v} = \frac{\rho_l RT}{M_v} \frac{\beta_v \rho_v}{\varepsilon \rho_l - \beta_l \rho_l},$$

$$P_l = P_a + P_v + \frac{\rho_l RT}{M_v} \beta_l \frac{dh(\beta_l)}{d\beta_l},$$

$$h(\beta_l) = \frac{b_1}{\beta_l^2} + b_2 \beta_l + b_3 \quad \text{si } \beta_l \in]0, \beta_1],$$

$$h(\beta_l) = \frac{a_1}{\varepsilon - \beta_l} + \frac{(\varepsilon - \beta_l)(a_2 \beta_l^3 + a_3 \beta_l^2 + a_4 \beta_l + a_5)}{a_6 \beta_l + a_7} \quad \text{si } \beta_l \in [\beta_1, \varepsilon[.$$

Par exemple, on trouve

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_l}{\partial(\beta_l \rho_l)} &= \frac{\rho_l RT}{M_a} \frac{\beta_a \rho_a}{(\varepsilon \rho_l - \beta_l \rho_l)^2} + \frac{\rho_l RT}{M_v} \frac{\beta_v \rho_v}{(\varepsilon \rho_l - \beta_l \rho_l)^2} \\ &+ \frac{RT}{M_v} \frac{dh(\beta_l)}{d\beta_l} + \frac{RT}{M_v} \beta_l \frac{d^2 h(\beta_l)}{d\beta_l^2}, \end{aligned}$$

avec des expressions de complexité similaire pour les autres termes.

Les coefficients K_g , K_{av} et K_l sont des fonctions uniquement de β_l ; ils sont donnés sous forme discrète et les courbes sont obtenues par un spline cubique qui permet d'estimer leur dérivée.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] R. ANGULO, J.P. GAUDET, J.L. THONY, M. VAUCLIN, "Conductivité hydraulique d'un milieu poreux partiellement saturé déformable. II. Résultats expérimentaux", Note aux C.R. Acad. Sci. Paris, t. 310, série II, p. 341-345, 1990.
- [2] J.L. AURIAULT, E. SANCHEZ-PALENCIA, "Remarques sur la loi de Darcy pour les écoulements biphasiques en milieu poreux", Journal de Mécanique Théorique et Appliquée, Numéro spécial, p. 141-156, 1986.
- [3] K. BABA, M. TABATA, "On a conservative upwind finite element scheme for convection diffusion equations". RAIRO Numerical Analysis. vol. 15. 1. p. 3-25, 1981.
- [4] J.C. BENET, "Contribution à l'étude thermodynamique des milieux poreux non saturés avec changement de phase", thèse de doctorat ès sciences, Université des Sciences et Techniques du Languedoc, 1981.
- [5] J.C. BENET, E. MIGNARD, "Sur l'hydrodynamique d'une solution idéale dans un milieu poreux non saturé. Analyse de la loi de Darcy et de la loi de Fick pour la thermodynamique des processus irréversibles. Note aux C.R. Acad. Sci. Paris, t. 301, Série II, n° 20, p. 1439-1442, 1985.
- [6] D. BLANCHARD, "Etude de problèmes d'évolution en mécanique des milieux dissipatifs", thèse de doctorat ès sciences, Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1986.
- [7] D. BLANCHARD, G. GEYMONAT, P. NICOLAS, "Dissipation dans les matériaux à variables internes attirées par un convexe", Note aux C.R. Acad. Sci., t. 311, série II, p. 1-6, 1990.
- [8] D. BLANCHARD, "Irreversible phase changes", Mathematical Models for Phase Change Problems, International Series of Numerical Mathematics, 88. J.F. Rodrigues ed., Birkhäuser Verlag, Basel, 1989.
- [9] H. BREZIS, "Opérateurs maximaux monotones et semigroupes de contraction dans les espaces de Hilbert", North-Holland, Amsterdam, 1973.
- [10] G. BRUHAT, "Thermodynamique", Masson, Paris, 1962.

- [11] I. CHATZIS, F.A.L. DULLIEN, "Mise en oeuvre de la théorie de la percolation pour modéliser le drainage des milieux poreux et la perméabilité relative au liquide non mouillant injecté", *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, vol. 37, n° 2, p. 183-205, 1982.
- [12] P.G. CIARLET, "The finite element method for elliptic problems", North-Holland, Amsterdam, 1978.
- [13] O. COUSSY, "Mécanique des milieux poreux", éd. Technip, Paris, 1991.
- [14] P. CRAUSSE, G. BACON, S. BORIES, "Etude fondamentale des transferts couplés de chaleur-masse en milieu poreux". *Int. Jour. of Heat and Mass Transfert*, vol. 24, n° 6, p. 991-1004, 1981.
- [15] P. CRAUSSE, "Etude fondamentale des transferts couplés de chaleur et d'humidité en milieu poreux non saturé", thèse de doctorat ès sciences de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, 1983.
- [16] J.F. DAIAN, "Processus de condensation et de transfert d'eau dans un matériau méso et macroporeux. Etude expérimentale du mortier de ciment". thèse de doctorat ès sciences, Institut National Polytechnique de Grenoble. 1986.
- [17] J.F. DAIAN, "Condensation and isothermal water transfer in cement mortar. Part I : pore size distribution, equilibrium water condensation and imbibition. Part II : transient condensation of water vapour", *Transport in Porous Media*, vol. 3, p. 563-589, 1988, vol. 4, p. 1-16, 1989.
- [18] R. DAUTRAY, J.L. LIONS, "Analyse Mathématique et Calcul Numérique pour les Sciences et les Technologies", t.1, Masson.
- [19] S. DE GROOT, P. MAZUR, "Non-Equilibrium Thermodynamics", North-Holland, Amsterdam, 1969.
- [20] F. DEMENGEL, P. SUQUET, "On locking materials, *Acta Applicandae Mathematicae*, 6, p. 185-211, 1986.
- [21] R.F. FELDMAN, *Proceedings of the 5th International Symposium on the Chemistry of Cement*, vol. 3, Japan, 1969.
- [22] M. FREMOND, "Matériaux à mémoire de forme". *Note aux C.R. Acad. Sci. Paris*, t. 304, série II, p. 239-244, 1987.

- [23] M. FREMOND, P. NICOLAS, "Hystérésis dans les milieux poreux humides non saturés", Note aux C.R. Acad. Sci. Paris, t. 305, série II, p. 741-746, 1987.
- [24] M. FREMOND, P. NICOLAS, "Macroscopic thermodynamics of porous media", Continuum Mech. and Thermodyn., vol. 2, p. 119-139, 1990.
- [25] M. FREMOND, A. VISINTIN, "Dissipation dans le changement de phase. Surfusion. Changement de phase irréversible", Note aux C.R. Acad. Sci. Paris, t. 301, série II, p. 1265-1268, 1985.
- [26] P.G. de GENNES, E. GUYON, "Lois générales pour l'injection d'un fluide dans un milieu poreux aléatoire", Journal de Mécanique, vol. 17, n° 3, p. 403-432, 1978.
- [27] P. GERMAIN, "Cours de Mécanique des Milieux Continus", tome 1 : théorie générale, Masson et Cie, Paris, 1973.
- [28] E. GUYON, J.P. HULIN, R. LENORMAND, "Application de la percolation à la physique des milieux poreux, Annales des Mines, vol. 5-6, p. 17-40, 1984.
- [29] B. HALPHEN, NGUYEN QUOC SON, "Sur les matériaux standard généralisés", Journal de Mécanique, 14, p. 39-63, 1975.
- [30] F. KALAYDJIAN, B. LEGAIT, "Perméabilités relatives couplées dans des écoulements en capillaire et en milieu poreux", Note aux C.R. Acad. Sci. Paris, t. 304, série II, 17, p. 1035-1038, 1987.
- [31] B. KARI, B. PERRIN, J.C. FOURES, "Perméabilité à la vapeur d'eau de matériaux de construction : calcul numérique", Matériaux et Constructions, vol. 24, p. 227-233, 1991.
- [32] P. LASCAUX, A. THEODOR, "Calcul matriciel appliqué à l'art de l'ingénieur", Masson.
- [33] P. LE TALLEC, "Numerical Analysis of Viscoelastic Problems", Masson et Springer Verlag, 1990.
- [34] J.M. MENOT, "Drainage et gel des milieux poreux partiellement saturés", thèse de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1979.
- [35] J.J. MOREAU, "Fonctionnelles convexes", Séminaire sur les équations aux dérivées partielles, Collège de France, Paris, 1966.

- [36] I. MULLER, "A thermodynamic theory of mixtures of fluids", A.R.M.A., 28, n° 1, 1968.
- [37] I. MULLER, "Thermodynamics", Pitman, London, 1985.
- [38] B. PERRIN, "Etude des transferts couplés de chaleur et de masse dans les matériaux poreux consolidés non-saturés utilisés en génie civil", Thèse de doctorat ès sciences, Université de Toulouse, 1985.
- [39] J.R. PHILIP, D.A. DE VRIES, "Moisture movement in porous materials under temperature gradients", Trans. Am. Geo. Union, vol. 38, n° 2, p. 222-232, 1957.
- [40] O. PIRONNEAU, "Méthode des éléments finis pour les fluides", Masson, 1988.
- [41] D. QUENARD, "Adsorption et transfert d'humidité dans les matériaux hygroscopiques", thèse de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, 1989.
- [42] M. QUINTARD, S. WHITAKER, "Ecoulement monophasique en milieu poreux : effet des hétérogénéités locales", Journal de Mécanique Théorique et Appliquée, vol. 6, n° 5, p. 691-726, 1987.
- [43] P. ROSTAND, B. STOUFFLET, "Finite volume Galerkin methods for viscous gas dynamics", Proceedings of the 2nd International Conference on Hyperbolic Problems, Aachen Vieweg et rapport de recherche INRIA 863, 1988.
- [44] E. SANCHEZ-PALENCIA, "Non homogeneous media and vibration theory", Springer-Verlag Berlin-Heidelberg, n° 127, New-York, 1980.
- [45] L.E. SISSOM, D.R. PITTS, "Elements of transport phenomena", Mc Graw-Hill Book Company, New-York, 1972.
- [46] P. SUQUET, "Plasticité et homogénéisation", thèse de doctorat ès sciences, Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1982.
- [47] S. WHITAKER, "Flow in porous media I : a theoretical derivation of Darcy's law", Transport in Porous Media, vol. 1, p. 3-25, 1986.
- [48] S. WHITAKER, "Flow in porous media II : the governing equations for immiscible, two-phase flow", Transport in porous media vol.1, p. 105-125, 1986.
- [49] J.C. WODIE, T. LEVY, "Correction non linéaire de la loi de Darcy", Note aux C.R. Acad. Sci. Paris, t. 312, série II, p. 157-161, 1991.

Ouvrages parus depuis 1991 dans la collection
Études et recherches des laboratoires des Ponts et Chaussées

série chaussées (CR)

- CR 14 *Incidence de la variation de la valeur de bleu sur certaines caractéristiques des fines et des enrobés* Monique HUET
- CR 15 *Liants bitumes-polymères* Anne DONY
- CR 16 *Pouvoir prédictif de l'essai RTFOT – Compte rendu de synthèse de l'expérimentation* Groupe national Qualité des bitumes

série ouvrages d'art (OA)

- OA 8 *Étude des coulis hydrauliques pour la réparation et le renforcement des structures et des monuments historiques en maçonnerie* Androniki E. MILTIADOU
- OA 9 *Étude de la dépassivation et de la repassivation des armatures métalliques dans les bétons* Juan J. CARPIO PÉREZ
- OA 10 *Étude de la microstructure du béton sous l'influence de variations hygrométriques importantes* Moëma RIBAS SILVA

série géotechnique (GT)

- GT 44 *The Pneusol* Nguyen THAN LONG
- GT 45 *Études expérimentales sur le bétonnage des pieux forés* Jean-Paul BRU
Pierre DELUDE
Philippe LAPERNA
- GT 46 *Dosage des granulats : étude des phénomènes d'écoulement et de voûte – Application à la conception des trémies doseuses* Daudet RANAÏVOSON
- GT 47 *Étude et prévision de l'évolution des versants naturels en mouvement* Éric GERVREAU
- GT 48 *Étude sur modèles réduits centrifugés – Application aux tunnels à faible profondeur en terrain meuble pulvérulent* Pierre CHAMBON
Jean-François CORTÉ
- GT 49 *Modélisation numérique des écoulements et des déformations dans les barrages de terre construits sur des sols mous* Mahfoud OULD AMY
Jean-Pierre MAGNAN
- GT 50 *Les remblais d'essai sur argiles molles de Muar Flats (Malaisie)* Jean-Pierre MAGNAN

série environnement et génie urbain (EG)

- EG 6 *Réhabilitation des réseaux d'assainissement – Méthodes disponibles, critères de choix, exemples* Michel BISEAU
François BOURGES
Yves RUPERD
- EG 7 *Interactions des métaux lourds avec des boues d'épuration et les sols* Jean BARON

série sciences de l'ingénieur (SI)

- SI 1 *Méthodes de résolution numérique en thermo-poro-anélasticité* Patrick DANGLA
Olivier COUSSY

Pour les collections antérieures, se reporter au *Catalogue des Publications des LPC* et à sa *Mise à jour*.

