

Ecole Nationale d'Ingénieurs de Monastir

MEMOIRE
PRESENTE POUR OBTENIR LE
DIPLÔME DE DOCTEUR
Spécialité : GENIE ENERGETIQUE

Par

Oumayma FEKIH

Née le : 08/06/1992 à Tunis

**Titre : ETUDE DE L'EVAPORATION EN PRESENCE D'UN SEL,
L'AVANT ET L'APRES CRISTALLISATION : VOLET NUMERIQUE.**

Soutenu le 16/07/2024, devant le jury d'examen :

M. Fayçal BEN NEJMA	Professeur	IPEIM, Monastir	Président
M. Noureddine BOUKADIDA	Professeur	ESSTHS, Sousse	Membre
M. Mourad BOUTERAA	Professeur	FST, Tunis	Rapporteur
M. AmenAllah GUIZANI	Professeur	CRTEn, Tunis	Rapporteur
Mme Nour SGHAIER	Maitre de Conférences	ISBM, Monastir	Encadrant



Laboratoire d'Etudes des Systèmes Thermiques et Energétiques
LR99ES31

2023-2024

Mon désir était de partager avec toi cet instant de joie et de bonheur. Je n'oublierai jamais ton soutien, tes sacrifices et ton amour inconditionnel.

Une personne unique, au cœur d'or.

Je te dois ce que je suis aujourd'hui et ce que je serai demain et je ferai toujours de mon mieux pour rester ta fierté.

Mon exemple éternel, l'homme de ma vie, je t'aime et je te remercie pour tout ce que tu as fait pour moi.

Repose en paix papa chéri.

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail à :

Ma très chère maman Latifa, à qui je dois la vie. Autant de phrases ne sauraient montrer le degré d'amour et d'affection que j'éprouve pour toi. Patiente, sereine et infatigable, ce travail est le tien. La bonne éducation dont j'ai bénéficié de toi, ton soutien inestimable, morale, financier, tes bénédictions, ont fait ce que je suis aujourd'hui. Puisse Allah le tout puissant te donner santé, bonheur et longue vie.

Ma sœur chérie Mayssa et mon frère bien-aimé Youssef, en témoignage de l'attachement, de l'amour et de l'affection que je porte pour vous, je vous dédie ce travail avec tous mes vœux de bonheur, de santé et de réussite. Puisse dieu le tout puissant exaucer tous vos vœux.

Mon très cher mari Houssem, merci infiniment pour ta grande patience et ton soutien inestimable dont tu as fait preuve durant ces cinq ans, ton accompagnement et tes sacrifices, retrouve ici ma profonde gratitude et mon grand amour. Merci d'être un super ami et adorable mari.

Ma belle-famille puisse dieu vous préserver du mal, vous combler de santé, de bonheur et vous procurer une longue vie.

Ma chère Meriem que j'aime, pour une sincérité si merveilleuse jamais oubliable, je te souhaite tous le succès et le bonheur.

A la mémoire de mon beau père, qui n'a jamais cessé de prier pour moi et de m'encourager que dieu le miséricordieux l'accueille dans son éternel paradis.

A ma coquette Bayouta, Fatouma ma puce, je vous aime.

Remerciement

Je tiens tout d'abord à remercier "Dieu" le tout puissant.

Mes plus sincères remerciements vont à mon encadrante Madame Ben Chiekh Sghaier Nour maitre de conférence à l'ISBM de m'avoir fait confiance, pour sa disponibilité, sa patience et ses conseils avisés. Qu'elle trouve ici l'expression de ma profonde gratitude et admiration.

Je souhaite remercier Monsieur Marc Prat pour toute l'aide qu'il m'a apporté, de sa confiance de son accueil aussi chaleureux en tant que stagiaire à l'IMFt de Toulouse et ses conseils pertinents et sa disponibilité. ce fut un grand plaisir de travailler avec lui.

Je tiens à témoigner ma profonde reconnaissance à Monsieur Ben Chiekh Maher pour ses efforts et son temps précieux qu'il m'a accordé. Il m'a fait profiter de son expérience et de sa rigueur.

Je tiens à remercier sincèrement les membres du jury qui me font le grand honneur d'évaluer ce travail.

Un grand merci à ma famille et mes amis, pour leur soutien inconditionnel.

Finalement, je tiens à remercier chaleureusement mes enseignants à l'ENIM et aux établissements par lesquels je suis passée tout le long de mon cursus.

Nomenclature

Indices

MP	Milieu poreux
PNM	Modèle de réseau de pore
PSD	Distribution des tailles des pores
RTV	Rhodorsil (un élastomère de silicone)
REV	Volume élémentaire représentatif
CRP	Période à taux de séchage constant
FRP	Période à taux de séchage décroissant
RFP	Période à front récessif
PTFE	Polytétrafluoroéthylène
PEMFC	Pile à combustible à membrane échangeuse de protons
CCs	Les couches catalytiques
GDls	Les couches de diffusion

Symboles

a	Épaisseur de l'ouverture du micromodèle	m
a_v	Surface d'un pore	m^2
A_s	Surface de la section transversale du micromodèle	m^2
A_{cr}	Surface de la subflorescence	m^2
A_{ech}	Surface d'échange	m^2
A	Matrice des conductances	-
b	Vecteur des conditions aux limites	-
Bo	Nombre de Bond	-
c	Fraction massique	-
c_{sat}	La solubilité	-
c_0	La fraction massique initiale	-
c_{cr}	La fraction massique des ions	-
C	Concentration de la solution	$g/g_{solution}$
C_{sat}	Concentration de saturation	$g/g_{solution}$
Ca	Le nombre capillaire	-
d	diamètre	m
dt	Pas de temps	s
D_s	Coefficient de diffusion du sel dans l'eau	m^2s^{-1}
$D_{s,eff}$	Coefficient de diffusion effectif de sel	m^2s^{-1}
D_v	Coefficient de diffusion moléculaire de vapeur d'eau	m^2s^{-1}
DIL	Diamètres des liens de l'exemple de réseau de pores	m
DILV	Diamètre d'une liaison verticale du réseau	m
DILH	Diamètre d'une liaison horizontale du réseau	m
g	Accélération gravitationnelle	$m.s^{-2}$
g_c	Taux de croissance	$Kg.s^{-1}$
h	Épaisseur de la couche limite	m
h_p	Profondeur d'un pore	m
h_{tz}	Hauteur de la zone de transition	m
h_t	Profondeur	m
h_2	Hauteur de la zone liquide saturée	m
H	Hauteur de la région liquide du micro-modèle	m

HR	Humidité relative	%
y_{fevap}	Position du front d'évaporation dans le micro-modèle	-
J	Taux d'évaporation	Kg/s
k_r	Coefficient de la réaction de dissolution-précipitation	-
lv	Longueur des liaisons verticales	m
lh	Longueur des liaisons horizontales	m
l	Distance entre deux nœuds	m
L	Pas de réseau	m
$m(0)$	Masse initiale du liquide dans le micro-modèle	g
m_{NaCl}	Masse totale de sel dans la région liquide saturée	g
$m(t)$	Masse de la masse du liquide	g
$\delta m(t)$	Variation de la masse évaporée	g
M	Nombre de ligne du réseau	-
M_c	Concentration molaire	$mol. dm^{-3}$
M_m	Masse molaire de NaCl	$g. mol^{-1}$
M_v	Masse molaire de la vapeur	$g. mol^{-1}$
M_s	Masse de sel dans l'amas	g
$M_{wat-free}$	Masse d'eau hors de la structure de sel	g
M_{w-cr}	Masse d'eau dans la subflorescence à la fin de la nucléation	g
M_{wat}	Masse d'eau dans l'amas liquide	g
M_{s-ex}	Masse de la subflorescence	g
N	Nombre de colonne du réseau	-
$N_{voisins}$	Nombre de liens voisins envahis	-
P_{vsat}	Pression de vapeur saturante	Pa
P_{veq}	Pression partielle d'équilibre de la vapeur	Pa
P_{vf}	Pression partielle de vapeur d'eau du front	Pa
P_{vi}	Pression partielle de vapeur d'un pore i	Pa
$P_{v\infty}$	Pression partielle de vapeur	Pa
P_l	Pression du liquide	Pa
Pe	Nombre de Peclet	-
R	Constante des gaz parfaits	$Jmol^{-1}K^{-1}$
S_{el}	Saturation	-
S_x	Séction d'une liaison	m^2
S	Séction d'une liaison	m^2
t_{r-ac}	Temps de remplissage de l'amas de cristal	s
t_{v-al}	Temps de vidange d'un élément de l'amas liquide	s
t	Le temps	s
t^*	Temps d'évacuation d'un élément i du réseau	s
T	température	$^{\circ}C$
r_p	Rayon de pore	m
V	Vitesse moyenne du fluide dans le milieu poreux	$m. s^{-1}$
V_{ci}	Volume de l'élément i occupé par la subflorescence	m^3
V_{cr}	Volume occupé par la subflorescence	m^3
V_s	Volume de sel à placer	m^3
$V_{pore-nuclea}$	Volume du pore de nucléation	m^3
V_{s-ex}	Volume de sel à placer	m^3
$V_{wat-free}$	Volume du réseau occupé par la solution à la fin de la nucléation	g
V_l	Volume occupé par le liquide	m^3
V_t	Volume total du liquide	m^3
V_{il}	Volume de l'amas liquide i	m^3
V_{il1}	Volume de l'amas liquide i1	m^3

V_{il2}	Volume de l'amas liquide i2	m^3
V_{ik}	Volume d'un élément i de l'amas k	m^3
v	Volume molaire du cristal	$m^3 mol^{-1}$
w_t	Largeur d'une liaison	m
w_p	Largeur d'un pore	m
w	Largeur du domaine liquide du micromodèle	m
y_f	Position du front de séchage	-
z	hauteur	m
z_i	Coordonnée verticale	-
z_t	Position d'un point à la frontière de la subflorescence	-
ρ_l	Masse volumique de la solution/liquide	$Kg.m^{-3}$
ρ_{cr}	Masse volumique de l'halite	$Kg.m^{-3}$
ρ_e	Masse volumique de l'eau	$Kg.m^{-3}$
ρ_a	Masse volumique de l'air	$Kg.m^{-3}$
ρ_s	Masse volumique de la solution	$Kg.m^{-3}$
ε	Porosité du milieu poreux	-
ε_{cr}	Porosité de la subflorescence	-
\vec{u}	Vitesse de la solution	$m.s^{-1}$
μ	Viscosité dynamique	$Kg.m.s^{-1}$
φ	La pression capillaire=le potentiel	Pa
φ_c	Potentiel d'invasion	Pa
σ	Tension de surface	$N.m^{-1}$
θ	Angle de contact	degrés

Table des matières

INTRODUCTION GENERALE	13
REFERENCES	16
PARTIE1	18
LE SECHAGE D'UN MILIEU POREUX SATURE EN EAU PURE	18
CONTEXTE DE L'ETUDE	19
CHAPITRE 1: CONTEXTE DE L'ETUDE	20
1.1 QUELQUES CARACTERISTIQUES DU MILIEU POREUX	22
1.1.1 La tension de surface :	22
1.1.2 L'angle de contact	22
1.2 LA PERCOLATION D'INVASION :	23
1.3 MODELE DE RESEAU DE PORES (PNM) :	23
1.4 LE TRANSPORT D'EAU DANS LES MILIEUX POREUX :	24
1.5 LE SECHAGE :	26
1.6 FACTEURS INFLUENÇANT L'EVAPORATION ET LE TRANSPORT D'EAU :	27
CONCLUSION :	29
REFERENCES	30
CHAPITRE 2 : SIMULATION NUMERIQUE DU SECHAGE D'UN RESEAU DE PORES BIDIMENSIONNEL SANS EFFETS DE GRAVITE	35
2.1 LES CARACTERISTIQUES GEOMETRIQUES DU RESEAU :	35
2.2 LA SATURATION :	36
2.3 LA PRESSION :	37
2.3.1 Réseau-Milieu extérieur	38
2.3.2 Le réseau	40
2.4 ALGORITHME DE HOSHAN KOPELMAN :	42
2.5 ORGANIGRAMME DE SECHAGE	44
2.6 HYPOTHESES :	47
2.7 RESULTATS DE SIMULATIONS :	47
2.7.1 La fonction graine :	47
2.7.2 Résultats :	47
CONCLUSION	54
RÉFÉRENCES	55
CHAPITRE 3 : EFFET DE LA MOUILLABILITE ET LA GRAVITE	57
3.1 LE POTENTIEL	57
3.2 SIMULATIONS	58
3.3 LA GRAVITE	61
3.4 ETUDE SELON L'ETAT DES VOISINAGES	66
3.4.2 En absence de gravité :	66
3.4.3 En présence de gravité :	66
3.4.4 Simulations :	67
3.4.5 La distribution de phase dans un PNM de mouillabilité mixte	70
CONCLUSION	71
REFERENCES	72
PARTIE2	73
CHAPITRE 4 : ETAT DE L'ART DE L'ETUDE DE LA CRISTALLISATION ET MISE EN EXPERIENCE	75
4.1 LE TRANSPORT D'EAU EN MILIEU POREUX EN PRESENCE DES IONS DE SELS :	79
4.2 LA CRISTALLISATION :	79
4.3 LE SEL	80

4.4 LES EFFLORESCENCES	80
4.5 LES SUBFLORESCENCES	81
4.6 L'EXPERIENCE	82
4.7 CONTEXTE DE TRAVAIL :	84
CONCLUSION	84
REFERENCES	85
CHAPITRE 5 : CRISTALLISATION DU NaCl DANS LE MODELE DE MILIEU POREUX LORS DU SECHAGE A FRONT RECESSIF NET	89
5.1 FRONT DE SECHAGE NET REGRESSANT : MISE EN MODELE :	89
5.2 LA CRISTALLISATION : LES DIFFERENTS TYPES DE SUBFLORESCENCES :	91
5.3 LA CINETIQUE DU FRONT D'EVAPORATION :	96
5.4 LE REGIME DE CROISSANCE LINEAIRE DE DES SUBFLORESCENCES DE TYPE 2 :	101
5.5 LA SUPERSATURATION, LA CROISSANCE PRES DE L'EQUILIBRE DE LA STRUCTURE DE SEL :	102
CONCLUSION	103
REFERENCES	103
CHAPITRE 6 : SIMULATION NUMERIQUE DE LA CROISSANCE D'UN SUBFLORESCENCE DE TYPE 1 DANS UN MILIEU POREUX DANS LE CADRE DE L'APPROCHE DES RESEAUX DE PORES	107
6.1 HYPOTHESES :	107
6.2 LES PROPRIETES PHYSIQUES :	107
6.3 LE NOMBRE DE PECLET :	108
6.4 ALGORITHME :	109
6.4.1 Variation volumique de la concentration :	109
6.4.2 Variation de la concentration dans les amas :	110
6.5 POROSITE DE LA SUBFLORESCENCE :	114
6.6 MODELISATION DE LA VARIATION DES VOLUMES DU SEL ET DE L'EAU LIBRE:	115
6.7 MODELISATION DE LA NUCLEATION :	119
6.7.1 La partie liquide :	119
6.7.2 La structure de sel :	119
6.7.3 Résultats de simulation de l'étape de nucléation pour différentes sursaturations:	119
6.8 CROISSANCE DE LA STRUCTURE DE SEL :	121
6.8.1 Modélisation de la croissance de la subflorescence:	122
6.8.2 Représentation des résultats de la croissance de la subflorescence :	123
CONCLUSION	131
REFERENCES	132
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES	135
ANNEXE A : LA DIFFUSION DE VAPEUR DANS LA PHASE GAZEUSE.	138
ANNEXE B : TRAITEMENT DES IMAGES	143
ANNEXE C : MODELE D'UN FRONT DE SECHAGE NET REGRESSANT AVEC UN MODELE DE FIL CAPILLAIRE SIMPLIFIE.	145
ANNEXE D : LE CODE COULEUR DE LA CROISSANCE DE LA SUBFLORESCENCE TYPE1 DANS LE MODELE DE RESEAU DE PORE	147

Liste des figures

Figure 1- 1 : Angle de contact et mouillabilité.....	22
Figure 1- 2 ; Modélisation de l'espace poral par un réseau de pores ou sites (pore body) en orange et de liens ou liaisons (pore throat) en jaune. (a) réseau de pore (b) modèle carré ou bidimensionnel ([46] modifiée).	23
Figure 1- 3 ; Types de transport d'eau, sans changement de phase [25].....	24
Figure 1- 4 : Transports d'eau par l'évaporation. Bleu clair : transport de vapeur, bleu foncé : l'écoulement et en noir : mouvement de l'interface [25].	25
Figure 1- 5 ! Situation de séchage ([29] modifiée).....	26
Figure 1- 6 : Représentation de la zone sèche, zone liquide saturée et la zone de transition dans le micromodèle au cours du séchage d'un milieu hydrophile initialement saturé par un liquide mouillant ([19] modifiée).	28
Figure 2- 1 : Exemple de réseau de pore de taille 4*4	35
Figure 2- 2 : :(a) Longueur d'une liaison verticale (b) Longueur d'une liaison horizontale (c) Pas du réseau.....	36
Figure 2- 3 : Représentation de l'état des pores et des liens au cours du processus de séchage.	36
Figure 2- 4 : Répartition de la pression dans la couche limite de diffusion	37
Figure 2- 5 : Représentation des voisinage d'un élément (i,j) de la couche limite.....	38
Figure 2- 6 : Répartition des voisins d'un pore gazeux (i,j).....	40
Figure 2- 7 : Représentation d'un Réseau 2D de taille 8*8 au cours du séchage à différents instants..	42
Figure 2- 8 : Organigramme de séchage.....	46
Figure 2- 9 : Représentation de la déconnection de l'amas principal d'un réseau de pores 36*41, de porosité $\epsilon = 0.8899$ à une saturation $S_{el}=0.7522$	48
Figure 2- 10 : Représentation d'un réseau 36*41 de porosité $\epsilon = 0.8899$ à la percée, à une saturation $S_{el}=0.5985$	48
Figure 2- 11 : Les isobares de pressions partielles de vapeur à une saturation de réseau $S_{el}=0.7$	51
Figure 2- 12 : Les isobares0 de pressions partielles de vapeur à une saturation $S_{el}=0.1$	51
Figure 2- 13 : Courbe de séchage du réseau 36*41 avec une couche limite $h=15\text{mm}$	52
Figure 3- 1 : Courbe de séchage du réseau 36*41 de porosité $\epsilon = 0.8899$ a) réseau parfaitement mouillant $\theta = 0$ b) réseau hydrophile $\theta = 30$ c) réseau hydrophobe $\theta = 160$	61
Figure 3- 2 : Schéma d'un réseau 36*41 en présence de forces de gravité.....	62
Figure 3- 3 : La courbe de séchage du réseau 36*41 de porosité 0.8899 en fonction de la saturation d'un réseau hydrophobe $\theta = 160^\circ$ et en présence de gravité.....	64
Figure 6-1 : Exemple de réseau de pores rectangulaire de taille 41*36, avant la fragmentation et de saturation égale à 0.2208.	111
Figure 6-2: Evolution de la concentration en fonction du volume du réseau adimensionné par le volume initial.....	111
Figure 6-3 : Fragmentation de l'amas liquide principal en amas secondaires	112
Figure 6-4 : L'évolution du nombre des amas liquides formés en fonction de la saturation en liquide du réseau jusqu'à la percolation.	113
Figure 6-5 : Les valeurs de la concentration des différents amas présents dans le PNM à la saturation (lorsque la concentration atteint la solubilité dans l'un des amas).....	114

Figure 6- 6 : La variation de la fraction du volume d'eau libre dans l'amas par rapport au volume de l'amas en fonction de la supersaturation	116
Figure 6- 7 : La variation de la fraction du volume d'eau libre dans l'amas par rapport au volume de l'amas en fonction de la porosité du cristal	117
Figure 6-8 : Volume du sel en excès par rapport au volume de l'amas en fonction de la sursaturation ccrcsat pour différentes porosités du cristal	118
Figure 6-9 : Volume du sel en excès par rapport au volume de l'amas en fonction de la porosité du cristal pour différentes sursaturation ccrcsat	118
Figure 6-10 : Différents points de nucléations dans un réseau de taille 36*41 de porosité égale à 0.8899 pour différentes sursaturations.	120
Figure 6- 11: (a) le volume d'eau libre par rapport au volume de l'amas en fonction de la sursaturation. (b) Volume du sel en excès par rapport au volume de l'amas en fonction de la sursaturation.	121
Figure 6-12 : Image d'un amas de cristaux se développant dans la phase gazeuse et connecté à un amas liquide supposé à la solubilité.	122
Figure 6-13 : Quelques étapes expérimentales de croissance de la subflorescence principale [17]....	125
Figure 6-14 : Des structures de sel développées en haut du réseau avant l'apparition de la subflorescence principale étudiée.....	126
Figure 6-15 : Croissance de la subflorescence principale d'une nouvelle distribution aléatoire des rayons des pores et des liens du réseau 36*41.	127
Figure 6-16: La distribution des lignes de pression du même réseau 36*41	127
Figure 6-17: Distribution de flux à la frontière vapeur-crist du réseau 36*41	128
Figure 6-18 : croissance de la subflorescence en modifiant la porosité de la structure de sel $\epsilon = 0.6$	131
Figure A-1 : Différents types de pores et liaisons rencontrées dans le PNM lors de la simulation. ...	138
Figure A-2 : Représentation d'une partie de la couche limite.....	139
Figure A-3 : Représentation du PNM de taille 2*2 avec la couche de diffusion h=2.	140
Figure A-4 : Représentation du voisinage du point de pression P(2,2) à déterminer.....	140
Figure A-5 : Représentation d'u réseau au cours du séchage.....	141
Figure C- 1 : Le front de séchage net régressif dans le micromodèle avec zone de transition.....	145
Figure D-1 : Le code couleu représentant la croissance de la sbflorescence de type1	147

Liste des tableaux

Tableau 2- 1 : La distribution des phases pour l'exemple d'un réseau 36*41 avec une couche de diffusion $h = 15$ (r_p :0.4-0.5/DIL :0.133-0.166) de porosité 0.8899 pour différentes saturations.....	50
Tableau 2- 2 : La distribution des phases pour du réseau 36*41 avec une couche de diffusion de 15mm (r_p :0.2-0.25/DIL :0.6-0.7) de porosité $\epsilon = 0.0506$ pour différentes saturations.....	53
Tableau 2- 3 : : La distribution des phases pour l'exemple du 36*41 avec une couche de diffusion de 15mm (r_p :0.2-0.4/DIL :0.2-0.8) de porosité $\epsilon = 0.1367$ pour différentes saturations.	54
Tableau 3- 1 : La distribution des phases d'un réseau hydrophile $\theta = 30^\circ$ de taille 36*41 et de porosité égale à $\epsilon = 0.8899$, pour différentes saturations.....	59
Tableau 3- 2 : La distribution des phases d'un réseau hydrophile $\theta = 160^\circ$ de taille 36*41 et de porosité égale à $\epsilon = 0.8899$, pour différentes saturations.....	60
Tableau 3- 3 : : La distribution des phases du réseau hydrophobe $\theta=160$ de taille 36*41 et de porosité $\epsilon=0.8899$, en présence d'un gradient, en fonction des saturations.	63
Tableau 3- 4: les lignes de pression du réseau hydrophobe 36*41 avec $\epsilon=0.8899$, $\theta=160^\circ$ et en présence d'un gradient en fonction des saturations.	65
Tableau 3- 5 : Distribution de phase du réseau hydrophobe 36*41, avec $\theta = 160$ et $\epsilon = 0.8899$ pour différentes saturations en absence de gravité.et en tenant compte du voisinage.....	68
Tableau 3- 6 : Distribution de phase du réseau hydrophobe 36*41, avec $\theta = 160$ et $\epsilon = 0.8899$ pour différentes saturations en présence de gravité.et en tenant compte du voisinage.....	69
Tableau 3- 7 : Etapes de séchage du réseau 36*41 de porosité $\epsilon = 0.8899$ de mouillabilité mixte...	70
Tableau 6- 1 : Tableaux comparatifs des résultats calculés par le simulateur et les résultats théoriques	121
Tableau 6-2 : Etapes de formation de la subflorescence dans un exemple de réseau 36*41 de porosité $\epsilon_{cr} = 0.8899$	124
Tableau 6- 3 : Etapes de formation de la subflorescence dans un exemple de réseau 36*41 tels que les rayons des pores : 0.2-0.25 et les rayons des liens : 0.3-0.35.....	129
Tableau 6- 4 : Etapes de la croissance de la subflorescence dans un exemple de réseau36*41 tels que la taille des pores=la taille des liens : 0.2-0.4.....	130

Introduction générale

Différents sont les processus environnementaux et les procédés industriels qui se basent sur le phénomène du séchage des milieux poreux tels que par exemple la récupération du pétrole, la production pharmaceutique et autres. Notre principal intérêt concerne les problèmes de séchage de deux fluides non miscibles: l'eau (la phase mouillante) et le gaz (la phase non mouillante). Pour assurer l'efficacité du processus de séchage il faut absolument combiner l'expérience avec le modèle mathématique puisque le phénomène de séchage implique des transferts de chaleur et de masse simultanément.

Le séchage peut être envisagé à plusieurs échelles ou approches. On distingue de ce fait, l'approche continue (ou conventionnelle) et l'approche discrète. La méthode continue classique [1] se base sur la représentation du milieu poreux comme un milieu continu fictif [2] s'appuyant sur la notion du volume élémentaire représentatif (VER). Ce modèle s'appuie sur la résolution des équations de Navier-stocks ou les approches de type Treillis de Boltzmann [3].

En effet, pour un milieu poreux donné, le modèle classique touche ses propriétés spécifiques qui décrivent le transport macroscopique des fluides (perméabilité intrinsèque, perméabilité relative, diffusivité des vapeurs) et les propriétés d'équilibre local tel que la pression capillaire. A l'interface milieu poreux-air, le transfert de masse est réalisé en introduisant un coefficient de transfert de masse vers l'extérieur. L'utilisation des expressions de ce coefficient de transfert connus [4] mène rarement à des résultats satisfaisants. Et ce à cause des variations de la distribution de pression partielle de vapeur sur la surface, conséquent du couplage entre le transfert de masse externe et interne [5].

Ce coefficient est donc souvent utilisé comme un paramètre d'ajustement insuffisant pour une bonne conjecture lors de la reproduction des données expérimentales [6]. Par ailleurs, l'introduction des phénomènes d'adsorption-désorption pour relier la pression partielle de vapeur et la saturation [7], est acceptable pour les matériaux hygroscopiques, où l'eau est fixée à l'intérieure des pores par adsorption et la taille de ses pores est inférieurs à $1\mu m$. Cependant, elle peut être remise en cause pour les milieux poreux capillaires où l'eau est fixée principalement par capillarité [8] avec une taille des pores supérieures à $1\mu m$.

Compte tenu de ces lacunes, le développement d'une autre alternative conduisant à l'amélioration des modèles continus et la bonne caractérisation des phénomènes de transport effectif est désormais impératif. Une approche discrète est ainsi mise en place [9] basée sur la méthode des réseaux de pores (PNM) [8]. L'idée est de représenter le milieu poreux par une grille (carré en 2D ou cubique en 3D) ou un réseau structuré de sites ou de cavités (pores), connectés par des canaux appelés liens. Cette représentation permet un calcul du processus de séchage relativement simples permettant l'accès aux grandeurs difficiles à obtenir expérimentalement (la distribution de pression de vapeur à la surface du milieu poreux) et la prise en compte des hétérogénéités à petite échelle du milieu et à l'interface.

Les milieux poreux sont rarement saturés par de l'eau pure. Généralement l'évaporation en milieux poreux est associée à la présence des sels en solution. Le séchage d'une solution saline est également un domaine de recherche actif [8], les problèmes relatifs aux sels ont un

impact économique, environnemental et culturel qui se manifeste par la dégradation des constructions, la stérilisation des sols, la détérioration des monuments etc. En effet, à la suite de l'évaporation et les changements de température, le sel présent sous sa forme dissoute dans le milieu s'y recristallise ce qui engendre des contraintes sur la matrice solide. La situation est rendue plus complexe que pour un liquide pur non seulement parce que la présence du sel peut avoir un impact sur les propriétés physiques de la solution, mais aussi en raison de sa précipitation. D'ailleurs les phénomènes de cristallisation du sel dans les milieux poreux induits par l'évaporation, interviennent dans des applications importantes telles que la salinisation des sols, le stockage souterrain de CO₂ dans les aquifères salins ou la préservation et la conservation du patrimoine bâti [8]. En s'évaporant, la concentration du sel dans l'eau présente dans le milieu augmente au fur et mesure jusqu'à atteindre, localement, ou dépasser la concentration critique de saturation. Cette cristallisation conduit à la formation d'une structure saline soit à la surface du milieu poreux appelée efflorescence [10-12], soit à l'intérieur du milieu poreux [13], la subflorescence.

Les objectifs de recherche sont nombreux : l'analyse de l'origine du processus de transport des sels dissous dans le milieu [10], la modélisation de la génération des cristaux de sel et les mécanismes de détérioration du milieu et le développement des techniques de restauration et le contrôle de l'apport du sel dissous. Notre apport se situe dans la continuité des travaux sur la méthode de réseaux de pores, dont l'objectif principal est la réalisation et l'exploitation des outils de simulation numériques, afin de comprendre les phénomènes mis en jeu du séchage en milieux capillaro-poreux.

L'étude des paternes qui se forment lors de séchage à travers les PNM et leur impact sur les taux de séchage a commencé avec le modèle de séchage proposé au début par Prat [14-19] et développé dès lors par l'équipe de l'IMFT auquel s'est associé Yortsos et ses collègues [20]. Le travail présenté dans ce manuscrit s'inscrit dans le cadre de l'étude numérique du séchage dans les milieux poreux par le développement de notre propre code de séchage sous le langage de programmation MATLAB. Développé par la société Mathworks, il permet d'exprimer directement les mathématiques sous forme de tableaux et matrices et analyser les données efficacement. MATLAB peut s'interfacer avec d'autres langages de programmation comme le c++ et le fortran. Notre laboratoire LESTE dispose désormais, à la suite de ce travail de recherche, le code de séchage avec lequel on a pu valider, en premier lieu, les résultats déjà obtenus, et l'exploiter plus largement ensuite par la modélisation de la croissance de la structure de sel au sein du milieu poreux. L'amélioration et l'enrichissement de l'algorithme de séchage en présence de sel et le code correspondant nous a permis non seulement de calculer la concentration en sel mais aussi de prédire et contrôler la croissance de la subflorescence.

Ce document se compose de deux parties. La première est allouée à l'évaporation dans un milieu poreux saturé en eau pure seulement, par le développement d'un code de séchage d'un réseau bidimensionnel classique dans le cadre de l'approche discrète (chapitre2). Par la suite à l'introduction de la notion de mouillabilité et angle de contact pour modéliser l'avancement du front de séchage avec et sans forces de gravité compte tenu de l'état du voisinage des pores formant notre réseau (chapitre3).

La deuxième partie porte sur la présence de sel, d'abord à partir des visualisations, une étude sera menée sur une situation d'évaporation s'intéressant à la dynamique du front de séchage, la cristallisation du chlorure de sodium et l'interaction entre les deux processus (chapitre 5). Le dernier chapitre (chapitre 6), concerne la simulation numérique de la croissance de la principale subflorescence visualisée à partir de l'expérience toujours dans le cadre de l'approche des réseaux de pores. Le manuscrit se termine par la présentation des principaux résultats obtenus et les maintes perspectives issues de ce travail.

Références

- [1] S. Whitaker (1977). Simultaneous heat, mass, and momentum transfer in porous media. A theory of drying, *Advances in Heat Transfer*, vol. 13, Academic Press, New York, pp.119-203
- [2] J. Bear, and Y. Bachmat, (2012). Introduction to modeling of transport phenomena in porous media, volume 4. Springer Science & Business Media.
- [3] M. Talbi (2021). Evaporation dans les milieux poreux : simulations sur les réseaux de pores et approche continue. These INP Toulouse.
- [4] R. B. Bird, W. E., Stewart, E. N. Lightfoot, (1960). Transport phenomena. New York, NY: Wiley.
- [5] M. Prat, (1991). 2D Modelling of drying of porous media: Influence of edge effects at the interface. *Drying Technology*, 9(5), 1181–1208.
- [6] P. Crausse, G. Bacon, & S. Bories, (1981). Etude fondamentale des transferts couples chaleur-masse en milieu poreux. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 24(6), 991–1004.
- [7] A. A. Moghaddam, M. Prat, E. Tsotsas, and A. Kharaghani (2017). Evaporation in Capillary Porous Media at the Perfect Piston-Like Invasion Limit: Evidence of Nonlocal Equilibrium Effects. *Water Resources Research*
- [8] M. Prat, (2002). Recent advances in pore-scale models for drying of porous media. *Chemical Engineering Journal*, 86, 153–164.
- [9] M. Sahimi (1995). Flow and transport in porous media and fractured rock. From Classical methods to Modern Approaches. John Wiley & Sons.
- [10] S.Veran-Tissoires, M.Marcoux, and M.Prat. (2012). Discrete salt crystallization at the surface of a porous medium,. *Phys. Rev. Letters* 108, 054502.
- [11] H. Eloukabi, N. S. (2013). Experimental study of the effect of sodium chloride on drying of porous media: The crusty-patchy efflorescence transition. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 56, 80.
- [12] U. Nachshon, N. Weisbrod, R. Katzir, (2018). NaCl Crust Architecture and Its Impact on Evaporation: Three-Dimensional Insights. *Geophys. Res. Lett.*, 45, 6100.
- [13] N. Sghaier, S. Geoffroy, M. Prat, H. Eloukabi. (2014). Evaporation driven growth of large, crystallized salt structures in a porous medium. *Phys. Rev. E* 90, 042402.
- [14] M. Prat (1993). Percolation model of drying under isothermal conditions in porous media, *Int. J. Mult. Flow* 19. 691–704.
- [15] M. Prat (1995). Isothermal drying of non-hygroscopic capillary porous materials as an invasion percolation process, *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 21, N° 5, pp. 875-892.

- [16] J. Laurindo. (1996). Evaporation en milieu poreux. Etude expérimentale sur milieux modèles et modélisation de type percolation. Thèse INP Toulouse.
- [17] LeBray.Y, Prat.M. (1999). Three-dimensional pore network simulation of drying in capillary porous media. *Int. J. Heat Mass Transfer* 42. 4207–4224.
- [18] Metzger.T, Tsotsas.E, et Prat.M. (2007). Pore network models: A powerful tool to study drying at the pore level and understand the influence of structure on drying kinetics. Chapter 2, in *Modern Drying Technology*. Vol 1, p. 57-102.
- [19] Maalel.O.,Prat.M.,Lassaux.D. (2023). Pore network simulations of thin porous medium characterization by evapoporometry. *International Journal of Multiphase Flow*, Volume 167, 104547
- [20] I.N. Tsimpanogiannis, Y.C. Yortsos, S. Poulou, N. Kanellopoulos, A.K. Stubos, (1999). Scaling theory of drying in porous media, *Phys. Rev. E* 59 .4353–4365

PARTIE1

Le séchage d'un milieu poreux
saturé en eau pure

CHAPITRE 1

Contexte de l'étude

Chapitre 1: Contexte de l'étude

Dans les milieux poreux, Les phénomènes de changement de phases liquide-vapeur peuvent être classés comme résultat d'un transport de masse, d'un transfert de chaleur ou comme conséquence de transfert combiné de chaleur et de masse [1]. Prenons un exemple dans le domaine pétrolier, pour la première catégorie, les techniques de récupération secondaires par la vaporisation interne [2-3], où Le transfert de masse est causé par le contact d'un hydrocarbure léger (en phase liquide) avec un gaz, avec lequel il n'est pas en équilibre thermodynamique. Par rapport au transfert de chaleur, on peut citer l'exemple des systèmes de contrôle thermique comme les caloducs [1], en génie pétrolier les techniques d'injection de vapeur [1] etc... Quant à la troisième catégorie, le séchage des milieux poreux est l'exemple central.

Définissons d'abord le milieu poreux. Dans la nature, la matière est essentiellement une structure poreuse. Le milieu poreux peut donc être défini comme étant une matrice solide renfermant des cavités de petite taille ou des pores par lesquelles un ou plusieurs fluides peuvent s'écouler. Ces structures poreuses sont omniprésentes dans la nature et jouent un rôle crucial dans divers processus naturels et industriels. Le séchage dans les milieux poreux est un problème d'intérêt scientifique majeur dont beaucoup de chercheurs s'y intéressent et apportent leurs méthodologies et leurs perceptions. Le caractère interdisciplinaire de ce domaine de recherche est une caractéristique importante et c'est la raison pour laquelle différentes lignes de force se sont développées au fil des années.

Le séchage est l'un des processus les plus énergivores de l'industrie, présent dans divers applications tels que le séchage des matériaux granulaires (les sols, les roches, les matériaux de construction...), le bois [4-5], l'industrie du papier et du textile, les produits pharmaceutique, le séchage des produits alimentaires [6] etc.

Le développement d'un cadre mathématique général pour modéliser le séchage dans les milieux poreux est un sujet de recherche depuis des décennies. Bien que les concepteurs industriels soient confrontés à la demande de concevoir des processus complexes concernant des problèmes réels, il reste encore beaucoup de questions non résolues.

L'eau saturant généralement le milieu poreux n'est fixée qu'à l'intérieur des pores. On envisage deux modes de fixation : l'adsorption et la capillarité [7]. Les matériaux dans lesquels une grande quantité d'eau peut être fixée par adsorption sont appelés matériaux hygroscopiques, tandis que les matériaux où l'eau est essentiellement fixée par la capillarité forment le milieu capillaire poreux. Dans ce travail, nous nous occupons d'un matériau capillaire rigide (billes de verre). En plus de la capillarité, le transport dans la phase liquide est affecté par la gravité et les forces visqueuses. Cependant, dans la phase gazeuse, la diffusion est le principal mécanisme de transport suffisamment en dessous de la température d'ébullition. Le transport d'énergie joue un rôle très important dans le processus de séchage qui peut être négligé lorsqu'on cherche une compréhension fondamentale du processus. On envisagera donc des situations où les taux de séchage sont suffisamment faibles (éviter les gradients de température à l'intérieur du milieu), c'est le « séchage lent ».

On distingue deux approches pour modéliser ces phénomènes [12-13]: l'approche continue (conventionnel) et l'approche discrète [23].

Les premiers modèles comprenant les effets capillaires et le transport de vapeur ont été développés dans les années 1950 [8-9]. Bien que de nombreux documents étaient publiés par la suite (voir par exemple [10-11]), Ces modèles ont été développés selon des approches phénoménologiques qui considèrent le milieu poreux comme un milieu continu fictif. L'approche continue est associée au concept de volume élémentaire représentatif (VER).

Dans le cas de séchage, les phénomènes physiques sont cumulés en coefficients de transport macroscopiques (la perméabilité relative par exemple) qui doivent être déterminés par des expériences spécifiques [14]. Ces dernières sont souvent directement importées de la littérature sur les déplacements poly-phasiques isothermes. Toutefois, cela n'est pas satisfaisant, car la reproduction de données expérimentales en utilisant des paramètres d'adaptation ne constitue pas une prédiction. En conséquence il n'est pas évident a priori que cette approche soit tout à fait correct, compte tenu des différences fondamentales qui existent entre des écoulements résultants d'un changement de phase et ceux purement mécaniques observés dans les déplacements de fluides non miscibles.

Cette approche repose sur des hypothèses relatives à la répartition des phases dans le volume moyen qui ne sont en fait pas vérifiées dans certaines situations de séchage. La technique de volume moyenné développée par [15] donne la possibilité de déterminer les paramètres efficaces par la solution de problèmes de fermeture définis sur les régions représentatives de la microstructure poreuse. Ce qui permettra l'analyse de l'aspect fondamental du problème qui est la nature désordonnée de la microstructure poreuse. L'élaboration des modèles d'analyse de l'influence de la microstructure poreuse permet non seulement de calculer les paramètres efficaces à l'échelle d'un volume représentatif de la microstructure, mais aussi d'analyser le phénomène de séchage sans supposer l'existence d'un VER.

Par conséquent, si les modèles macroscopiques permettent souvent de décrire qualitativement les phénomènes observés, ils échouent souvent en termes quantitatifs. Il faut donc poursuivre les recherches et développer une approche alternative donnant une meilleure compréhension de ces phénomènes et conduisant à une bonne caractérisation des propriétés des transports macroscopiques [16].

Ainsi, pour faire évoluer cette approche, on a considéré un modèle numérique de milieux poreux, à savoir un réseau de pores discret, où on effectue des simulations numériques jouant le rôle des expériences. Bien entendu, on ne prétend pas que le modèle de réseaux de pores (PN) reproduise parfaitement le processus d'évaporation dans les milieux poreux. Cependant, sur la base de comparaisons avec des expériences de micromodèles présentées dans des ouvrages précédents, par exemple [17-19], on pense que le modèle de réseaux de pores (PNM) reflète suffisamment les éléments clés du processus (il tient compte des caractéristiques importantes de la microstructure) pour rendre la comparaison avec le modèle continu (CM) intéressante et instructive et permettre une meilleure compréhension du comportement des paramètres de transport effectifs en fonction de la saturation liquide.

1.1 Quelques caractéristiques du milieu poreux

1.1.1 La tension de surface :

Lorsqu'une goutte d'eau est déposée sur une surface solide en contact avec l'air environnant, la surface qui sépare les deux fluides est comme une membrane élastique uniformément tendue. La tension de surface ou interfaciale est par la suite la tension qui s'applique sur l'interface [47]. Elle est affectée principalement par la pression et la température. La tension superficielle c'est la tension de surface par rapport à l'air.

1.1.2 L'angle de contact

La mouillabilité définit la tendance d'un fluide à se répandre sur une surface solide en présence d'un autre. La compréhension de l'effet de la mouillabilité sur la distribution des fluides dans un milieu poreux est importante pour tout phénomène impliquant un écoulement polyphasique. La mouillabilité est caractérisée par l'angle de contact θ à l'équilibre [48]. Elle est mesurée entre le support solide et l'interface fluide-fluide, voir la figure 1-1, lorsque une goutte de liquide est posée sur la surface solide sèche et s'étalant jusqu'à une certaine limite.

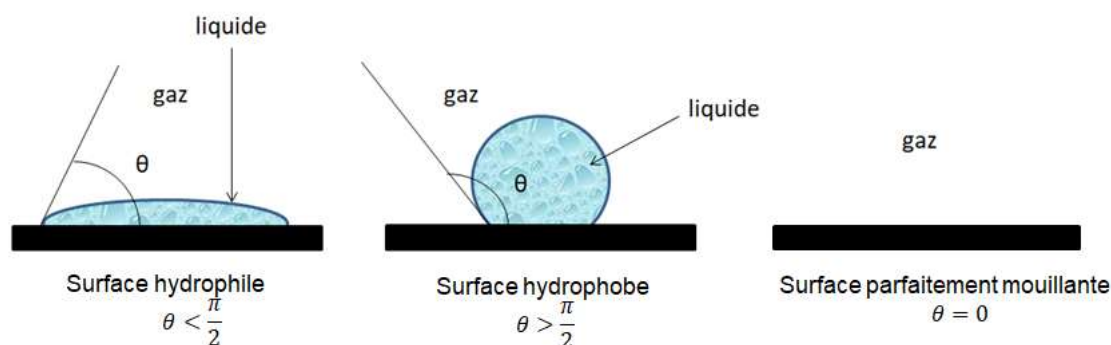


Figure 1- 1 : Angle de contact et mouillabilité

Cet angle θ dépend de la nature du liquide, de celle de la surface et de l'affinité de cette surface au liquide par rapport au gaz. L'expression de l'angle de contact est donnée en fonction de la tension superficielle par la loi de Young :

$$(1-1) \cos \theta = \frac{\sigma_{SV} - \sigma_{SL}}{\sigma_{LV}}$$

Où σ_{SV} , σ_{SL} et σ_{LV} les tensions superficielles de, respectivement, l'interface solide-vapeur, solide-liquide et liquide-vapeur.

Dans le cas de l'eau et l'air, la surface est dite hydrophobe quand θ mesuré dans la phase dense est supérieure à $\frac{\pi}{2}$, hydrophile si $\theta < \frac{\pi}{2}$ et parfaitement mouillante si $\theta = 0$.

La caractérisation de la mouillabilité par l'angle de contact est difficile vu l'impossibilité de la mesurer à l'intérieur du milieu poreux. La rugosité des parois des pores et leur composition minéralogique peuvent varier ce qui fait modifier la mouillabilité à l'intérieur de l'espace poral [32].

1.2 La percolation d'invasion :

La notion de percolation apparaît dans plusieurs ouvrages tels que [21] et [25-26]. La technique de percolation d'invasion [24] est l'une des approches utilisées pour la modélisation. Introduite par [27], c'est un modèle statique traitant des propriétés de milieux aléatoires qu'on représente par des sites connectés. La percolation d'invasion, présentée par [24] et [28], est un modèle dynamique décrivant le déplacement (l'invasion progressive) d'un fluide 1 par un fluide 2 avec lequel le milieu poreux est saturé. Le processus est dominé par les forces capillaires (gravités et viscosité négligées) et les deux fluides sont non miscibles. L'invasion de percolation permet de modéliser les phénomènes de transport d'eau (le drainage et le séchage (voir les paragraphes 1.3 et 1.4)), dans une limite quasi statique, dans des réseaux de pores (voir le paragraphe 1.2) bi et tridimensionnels. Une bonne étude explicative a été menée par [7] et [1] détaillant les notions de base de la percolation (également la percolation d'invasion) et les algorithmes correspondants.

1.3 Modèle de réseau de pores (PNM) :

La structure complexe d'un milieu poreux, à l'échelle microscopique, peut être vue comme un ensemble de pores aléatoirement interconnectés. L'espace poral est simplifié et modélisé par un réseau, illustrée par la figure 1-2, où les pores (porebody) sont connectés par des liens ou liaisons (pore throat) de géométries fixes.

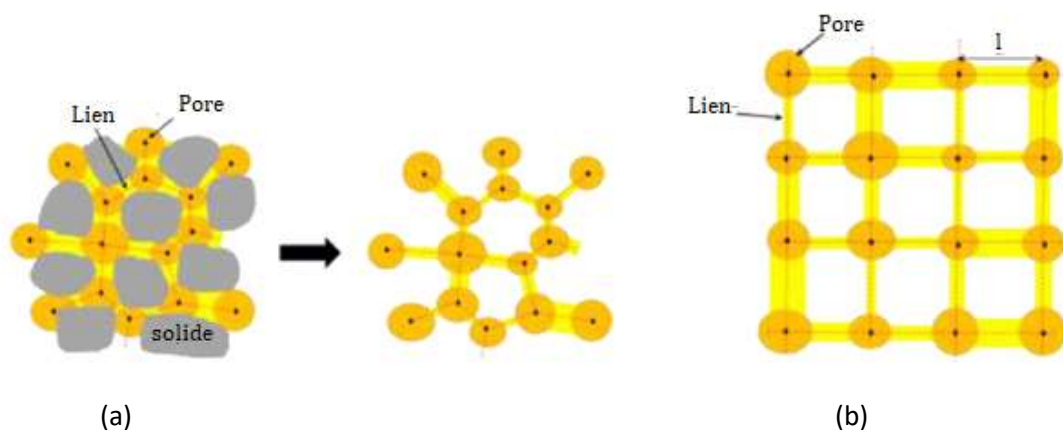


Figure 1- 2 ; Modélisation de l'espace poral par un réseau de pores ou sites (pore body) en orange et de liens ou liaisons (pore throat) en jaune. (a) réseau de pore (b) modèle carré ou bidimensionnel ([46] modifiée).

Les pores sont les vides d'une section relativement grande et les liens sont des segments avec un minimum d'intersection entre deux pores. Comme montré sur la figure 1-2(a), un réseau irrégulier est obtenu en connectant chaque pore à ses pores voisins. Chacun est caractérisé par sa coordination (c'est-à-dire le nombre de pores voisins auxquels il est connecté).

Etant donné que les études sur ce type de réseau sont rares, une alternative consiste à utiliser un réseau régulier (voir la figure 1-2(b)) qui présente la même coordination moyenne que le réseau irrégulier. La majorité des recherches qui reposent sur des simulations numériques de séchage dans des réseaux poreux, ont été réalisées sur des réseaux réguliers simples, tels que

des grilles cubiques simples en trois dimensions. Ces réseaux sont composés de liens en forme de tubes cylindriques qui connectent des pores sphériques, avec des rayons choisis aléatoirement selon une distribution spécifique. Cette approche de modélisation est étroitement associée à l'utilisation des concepts de la théorie de percolation, ce qui la rend particulièrement adaptée à cette application. La forme, les dimensions et l'arrangement des pores jouent un rôle important dans la modélisation du réseau (évidemment du micromodèle). Il est essentiel d'introduire un paramètre caractéristique, appelé porosité, qui est définie comme étant le rapport entre le volume des pores et le volume total du réseau. Cette technique de réseaux de pores est validée dans différents régimes par les comparaisons avec les résultats expérimentaux. L'intérêt d'une étude numérique réside dans la possibilité de créer de multiples réseaux aléatoires pour obtenir des informations statistiques sur le déplacement des fluides. En effet, c'est difficile de mener une étude statistique expérimentale sur ces phénomènes de transport, tant sur le plan temporel que technique. Le but de l'expérience est donc essentiellement la validation des modèles numériques effectués sur les réseaux de pores puisque la réalisation d'un grand nombre de réseaux expérimentaux est coûteuse et prendrait des années pour obtenir un résultat approximatif.

Une fois la géométrie du milieu générée, il est nécessaire de modéliser la diffusion de la vapeur. Chaque pore du réseau discret constitue une cellule de calcul. Les équations de transport doivent être discrétisées à l'échelle microscopique afin de calculer la valeur de chaque variable en tout point du réseau.

Dans cette thèse, nous avons utilisé cette méthode pour modéliser différentes situations. Un code de séchage en 2D, décrit dans le chapitre suivant, a été développé pour simuler la diffusion de vapeur, l'écoulement dans la phase liquide et le déplacement de l'interface liquide-gaz.

1.4 Le transport d'eau dans les milieux poreux :

Le déplacement d'eau (solution saturant le milieu poreux) peut être dû à un gradient de pression sans changement de phase, c'est le cas de drainage, imbibition, écoulement ... ou un transport d'eau induit par un changement de phase tel que le cas de séchage classique ou situation de mèche.

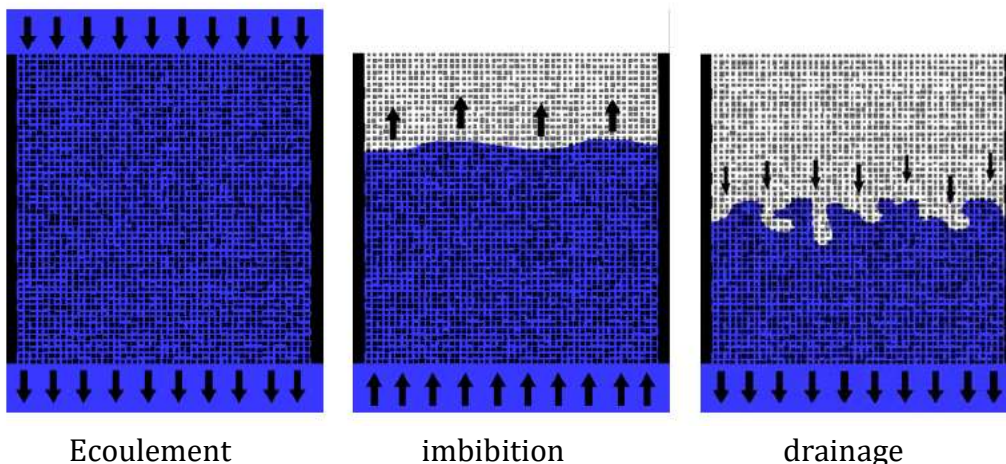


Figure 1- 3 ; Types de transport d'eau, sans changement de phase [25]

En milieux poreux, l'imbibition et le drainage font partie des phénomènes de transport multiphasiques, voir la figure 1-3. La modélisation de drainage est considérablement étudiée pour ses applications dans le secteur pétrolier et les écoulements souterrains multiphasiques.

L'analyse approfondie du drainage de matériaux capillaro-poreux a été abordé et bien traité expérimentalement, sur des réseaux carrés gravés bidimensionnels par [22] puis en second lieu par les simulations numériques [23]. Le drainage consiste à faire déplacer un fluide mouillant par un fluide non mouillant (le processus est bien développé dans [1]). L'imbibition qui est le phénomène inverse, est plus complexe particulièrement à cause des films minces (liquide mouillant) qui prend le relais en avant du front principal [1]. Néanmoins, les modèles continus sont inappropriés aux modélisations de drainage et imbibition [23]. Leurs limites sont dues au fait que l'interface entre les différentes phases peut avoir de fortes hétérogénéités et la définition d'un VER devient ainsi impossible.

Quant au séchage, il faut prendre en compte le transport de l'eau sous ses diverses formes. Au cours de ce processus, par exemple, l'eau passe de l'état liquide à l'état vapeur. Le déplacement de l'eau liquide et le transport de la vapeur dans l'air (diffusion ou advection) doivent être analysés simultanément.

Deux configurations sont à distinguer lors de l'évaporation de l'eau dans les milieux poreux, voir la figure 1-4. La situation de mèche est la première configuration, où la perte du liquide par évaporation est compensée par la source de liquide qui est en contact avec le milieu poreux. L'interface liquide-gaz reste donc stable au cours du processus. Contrairement au séchage où le volume du liquide présent dans le milieu diminue peu à peu jusqu'à son épuisement total et l'interface liquide-gaz est mobile.

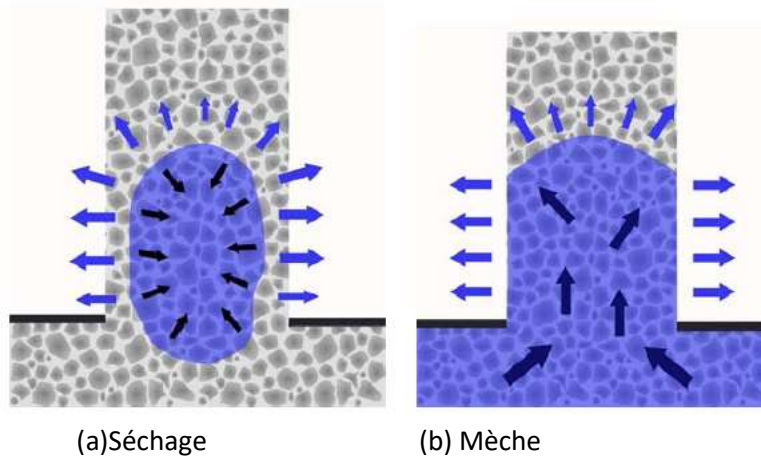


Figure 1- 4 : Transports d'eau par l'évaporation. Bleu clair : transport de vapeur, bleu foncé : l'écoulement et en noir : mouvement de l'interface [25].

On se retrouve dans l'une des configurations selon l'équilibre entre l'apport et la perte d'eau par évaporation. Dans le cas de séchage le volume d'eau est fini et la phase liquide se réduit progressivement et l'interface se déplace et s'éloigne de la surface en contact avec l'air du milieu poreux. Puisque les hétérogénéités entre les phases liquides et vapeur sont importantes, les modèles continus ne sont pas nécessairement adaptés aux situations de séchage et ne permettent pas d'avoir un VER adéquat. Le recours à la méthode discrète (réseau de pores) est désormais crucial.

On s'intéresse dans ce présent travail à l'étude de transport d'eau dans le cas de séchage.

1.5 Le séchage :

Le séchage, illustré par la figure 1-5, est un envahissement d'un milieu initialement saturé en liquide par une phase gazeuse [29].

Soit un milieu poreux saturé en liquide et en contact avec une atmosphère sèche. Lorsque l'eau s'évapore, le milieu poreux va être envahi par l'air. Une connexion hydraulique est assurée entre la surface d'évaporation et la zone saturée par des films liquides qui vont rester piégés par capillarité dans les anfractuosités. L'évaporation provoque un écoulement dans les films qui va être régi par le pompage capillaire. Une zone sèche apparaît donc au sommet du milieu poreux avec une diminution du taux d'évaporation. Puisqu'il n'y a pas d'apport extérieur d'eau et le volume d'eau présent dans le milieu poreux est fini, la phase liquide se réduit jusqu'à disparaître. L'interface liquide/gaz s'éloigne de la surface extérieure.

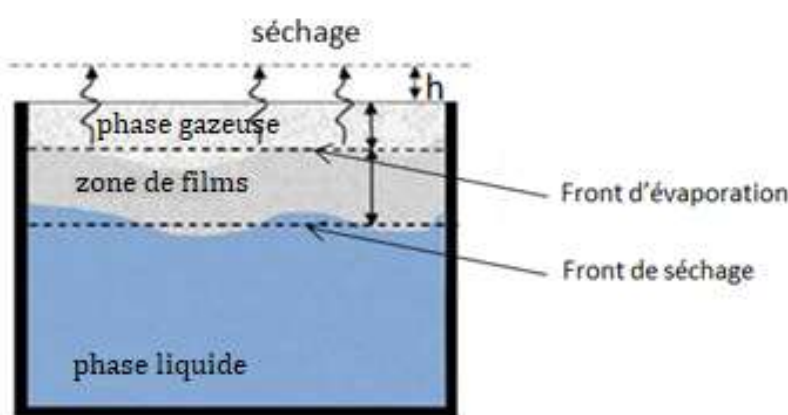


Figure 1- 5 : Situation de séchage ([29] modifiée)

Le séchage est un processus de transferts couplés de quantité de mouvement, de masse et de chaleur dans un système multiphasique. Plusieurs techniques sont à distinguer selon le mode de transfert et la nature des interactions entre la matrice solide et le solvant [25].

De ce fait, les matériaux à sécher peuvent être classés en :

- Matériaux non poreux : par exemple le gel. L'eau et les molécules constituant le gel sont chimiquement liées et il n'y a pas d'espace de pores.
- Matériaux poreux : dans ce cas on parle des matériaux hygroscopiques tel que le bois, et dans lesquels les mécanismes d'adsorption permettent de fixer une proportion importante de solvant. Tandis que pour les matériaux non hygroscopiques (qui soit notre cas d'étude), comme les sables et les empilements de billes de verres, le solvant est principalement fixé par capillarité

La théorie du séchage utilisée se base essentiellement sur celle développée par [31] et sur les études de séchage, utilisant la théorie de percolation et les simulations de réseaux de pores, [32]. Le modèle repose sur la supposition que la saturation est uniforme et constante dans la zone liquide. Une hypothèse qui correspond parfaitement aux simulations 3D et 2D sur le réseau de pores exposées dans [1] et [33], respectivement. L'évolution du taux d'évaporation, en fonction de la saturation du liquide, est caractérisée par trois périodes [30-31].

- **Période à taux de séchage constant (Constant rate period (CRP)) :**

Un taux de séchage constant contrôlé par les conditions extérieures (vitesse, humidité relative). La surface est hydrauliquement connectée au liquide et donc aucune contrainte à l'évaporation à cause des phénomènes de transport dans le milieu poreux. Une distribution intérieure du liquide dominée par les effets capillaires.

- **Période à taux de séchage décroissant (Falling rate period (FRP)):**

C'est une période de transition caractérisée par une décroissance rapide et significative du taux de séchage.

- **Période à front récessif (The receding front period (RFP)):**

Un taux de séchage qui décroît lentement par rapport à la FRP à cause du recul du front d'évaporation dans le milieu poreux et le développement d'une zone sèche depuis le milieu poreux.

Par ailleurs, des étapes clés peuvent aussi être distinguées lors du séchage, caractérisant la connectivité de la phase liquide :

- **Le point terminal** est l'étape où le liquide est déconnecté de la phase de sortie c'est le moment où l'échantillon est complètement sec ou presque.
- **La déconnection** de l'amas principal, correspond au moment où aucun amas liquide n'est connecté à la face d'entrée et de sortie au même temps
- **la percée** (ou breakthrough) c'est l'étape où la phase gazeuse atteint la face de sortie (la face opposée à celle ouverte) pour la première fois.

1.6 Facteurs influençant l'évaporation et le transport d'eau :

Au cours de séchage (ou une situation de mèche), Le transport de vapeur dans un milieu poreux est impacté principalement par les conditions environnantes en particulier la température, l'humidité relative et le mouvement de l'air extérieur. L'augmentation de la température, au cours du séchage industriel, permet d'augmenter la cinétique de séchage du milieu qu'à la température ambiante ce qui explique le caractère énergivore des procédés industriels. Cependant, dans une première approche, on se place dans une situation d'évaporation lente où on peut supposer un transport de vapeur, dans le milieu poreux, par diffusion massique uniquement.

Dans le cas de séchage, drainage ou imbibition, les forces de capillarité, gravité et de viscosité jouent tous un rôle dans le déplacement de l'eau et modifient la structure de l'interface liquide-gaz. Ces forces vont avoir, dans certaines configurations, un effet stabilisant ou un effet déstabilisant sur l'interface [1].

Le nombre capillaire caractérise la compétition entre les forces de viscosité et la tension superficielle et peut être défini par [27] :

$$(1-2)Ca = \frac{v\mu}{\sigma}$$

Où v est la vitesse du liquide, μ la viscosité dynamique et σ la tension de surface. Dans la phase liquide, si le nombre capillaire est faible, le transfert est considéré dominer par

capillarité. Quand seules les forces capillaires sont en action, dans le cas de drainage par exemple, l'interface liquide-gaz prendra une structure fractale appelée digitation capillaire, voir l'étude de [42]. Cette situation sert en général, comme référence pour les cas où on ajoute les forces de viscosité et de capillarité. On prend dans [43] aussi la situation de séchage d'un milieu poreux où seules les forces capillaires sont prises en compte. Quand le milieu est vertical ou incliné, pour les trois situations : drainage, imbibition et séchage, les forces de gravité vont être appliquées sur le liquide avec un effet stabilisant. On introduit dans ce cas la notion de front stabilisé. C'est la situation qu'on va étudier par la suite dans les chapitres suivants. Dans le cas de séchage, [20] ont mis une loi de puissance entre la largeur du front et le nombre de bond (un nombre adimensionnel comparant la capillarité et la gravité (voir le chapitre 3 de la partie 1)). La largeur de l'interface (son hétérogénéité) diminue quand le nombre de bond croît, et inversement c'est le cas de la gravité déstabilisante. [1] [17-18] ont étudiés expérimentalement et numériquement les effets stabilisant et déstabilisant dans les milieux poreux capillaires de la gravité.

Les cinétiques de séchage expérimentales sont plus rapides que celles obtenues par les modèles numériques [25] à cause des films liquides qui sont dus à la rugosité des surfaces des micromodèles (expériences) et la géométrie des liaisons. Ces films liquides, retrouvés d'ailleurs dans les milieux réels, accélèrent donc le séchage [44-45].

Autres que la gravité, la capillarité ou la viscosité, il existe des facteurs qui interviennent lors de déplacement du liquide dans le milieu poreux. La géométrie interne du milieu et ses caractéristiques de surface affectent la structure de l'interface et la structure des pores et l'angle de contact (voir le chapitre 3) vont stimuler ou inhiber le développement des films de coins. La présence de ces derniers permet de diviser le milieu poreux au cours du séchage en trois zones. Illustré par la figure 1-6, on distingue une zone sèche (dry zone) à proximité de l'interface, une zone de transition (région de films) et une zone totalement saturée en liquide (zone liquide).

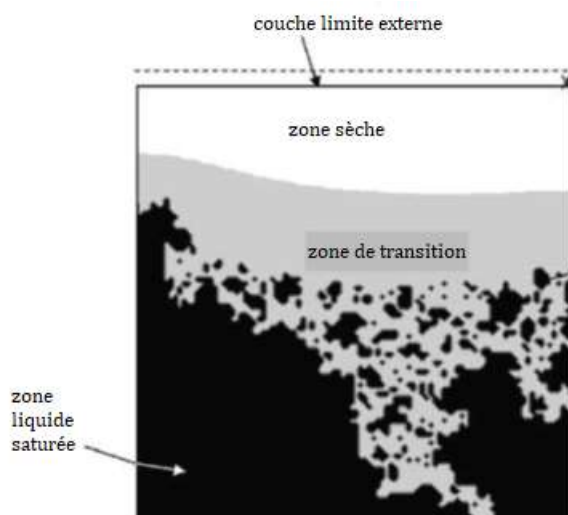


Figure 1- 6 : Représentation de la zone sèche, zone liquide saturée et la zone de transition dans le micromodèle au cours du séchage d'un milieu hydrophile initialement saturé par un liquide mouillant ([19] modifiée).

Comme on a déjà discuté, différents régimes de séchage peuvent être distingués en fonction de la concurrence entre les forces capillaires, visqueuses et gravitationnelles. La situation considérée dans [34] et [11] correspond au régime capillaro-visqueux où les effets de la gravité sont négligeables, et les effets visqueux dans la phase liquide et les effets capillaires contrôlent la dynamique du front de séchage. Une situation tout à fait différente est examinée dans [34] et les références qui y figurent. Dans ces travaux, la zone humide doit rester complètement saturée. Le front de séchage est tranché et correspond à l'interface mobile entre une région sèche en expansion où le transfert de l'eau se fait par diffusion de vapeur et une région humide complètement saturée qui se rétrécit où aucun mouvement de fluide n'est censé se produire. Dans d'autres cas, comme indiqué par exemple dans [35][20], une région liquide complètement saturée peut exister mais le front de séchage n'est pas tranché et une zone de transition en deux phases existe entre la zone liquide entièrement saturée et la zone qui est complètement sèche. Dans ce cas, le front de séchage peut être défini comme l'interface entre les zones saturées et les zones non saturées [36] et il faut distinguer le front de séchage de celui de l'évaporation. Ce dernier est le lieu du changement de phase, et est défini comme l'interface entre les zones sèche et humide [36]. Dans les situations considérées à [35] et [20], par exemple, le front d'évaporation est moins avancé dans le milieu poreux que le front de séchage. Toutefois, dans le cas de la situation considérée dans [34], le front de séchage, c'est-à-dire l'interface entre la zone saturée liquide et la zone sèche, est tranché et correspond également au front d'évaporation. Selon [34], une situation telle que celle examinée dans [34] peut être attendue lorsque les effets de la gravité sont suffisamment dominants par rapport aux effets capillaires. Comme étudié dans [37-38], cela peut également être attendu lorsque le milieu est hydrophobe (étudier explicitement dans le chapitre 3) en raison de mécanismes locaux d'invasion coopérative entre les ménisques adjacents dans ce cas. Nous allons considérer, dans le présent travail, une situation où les effets de la gravité combinés à l'hydrophobie conduisent à la formation d'un front de séchage récessif qui se retire dans le milieu poreux (chapitre 3 et 5). Ce front tranchant correspond à la limite supérieure de la région saturée de liquide. Toutefois, contrairement à la situation considérée dans [34], nous allons montrer que le front d'évaporation ne coïncide pas avec le front de séchage. Le retard spatial entre le front de séchage et le front d'évaporation est attribué aux flux capillaires secondaires [39-41][19].

Conclusion :

Après avoir introduit les notions sur lesquelles se de base de notre thèse en terme de notions et phénomènes clés et paramètres d'études, nous allons dans ce qui suit présenter notre modèle de réseau de pores. On expose en premier lieu le code de séchage simple qu'on a développé, et les principaux résultats obtenus. Nous allons, par la suite, voir l'effet de la modification de l'angle de contact sur l'avancement de l'interface liquide-gaz dans le réseau.

Références

- [1] Lebray.Y. (1997). contributions a l'étude du changement de phase liquide-vapeur en milieux poreux. Simulations numériques sur réseaux de pores. These. Université de Toulouse.
- [2] Morel D.D., Bourbiaux B., Latil M. et Thiebot B (1990). Diffusion effects in gas flooded light oil fractured reservoirs, SPE paper 20516, pp. 433-446.
- [3] JF. Le Romancer, D. Defives, F. Kalaydjian et G. Fernandes (1994). Influence of diffusing gas on the mechanism of oil recovery by gas diffusion in fractured reservoir, Paper IFP presented at IEA Collaborative Project on Enhanced Oil Recovery Workshop and Symposium, Bergen, Norway, 28-31.
- [4] W. T. Simpson (1983). *Drying Technology* 2, 235.
- [5] W. T. Simpson (1984). *Drying Technology* 3, 353.
- [6] M. Fortes and M. R. Okos (1980). *Advances in Drying* ~Hemisphere Publishing, New York, Vol. 1, pp. 119–154.
- [7] M.Prat (2002). Recent advances in pore-scale models for drying of porous media. *Chemical Engineering Journal* 86 153–164.
- [8] J.R. Philip, D.A. de Vries, (1957). Moisture movement in porous materials under temperature gradients, *Trans. Am. Geophys. Un.* 38 222–232.
- [9] A.V. Luikov, (1958). *Experimentelle und Theoretische der Trocknung*, VEB, Berlin.
- [10] S. Bories, (1988). Recent advances in modelisation of coupled heat and mass transfer in capillary-porous bodies, in: *Proceedings of the Sixth International Drying Symposium*, pp. KL.47–KL.61.
- [11] L. Pel, K. A. Landman, and E. F. Kaasschierter, (2002).. Analytic solution for the non-linear drying problem, *Int. J. Heat Mass Transfer* 45, 3173.
- [12] S. Whitaker,(1977). Simultaneous heat, mass and momentum transfer in porous media. A theory of drying, in *Advances in Heat Transfer* (Academic, New York), Vol. 13, pp. 119–203.
- [13] H. T. Vu and E. Tsotsas, (2018).Mass and heat transport models for analysis of the drying process in porous media: A review and numerical implementation, *Int. J. Chem. Eng.* 2018, 9456418
- [14] P. Crausse, G. Bacon, S. Bones, (1981). Etude fondamentale des transferts couplés chaleur-masse en milieu poreux, *Int. J. Heat Mass Transf.* 24 (6) 991–1004.
- [15] S. Whitaker, (1998). *Coupled Transport in Multiphase Systems: A Theory of Drying*, *Advances in Heat Transfer*, Vol. 31, Academic Press, New York,, pp. 1–103.

- [16] J.F. Daian et J. Saliba, (1991). Détermination d'un réseau aléatoire de pores pour modéliser la sorption et la migration d'humidité dans un mortier de ciment, *Int. J. Heat and Mass Transfert*, Vol. 34, N° 8, pp. 2081-2096.
- [17] J. B. Laurindo, & M. Prat, (1996). Numerical and experimental network study of evaporation in capillary porous media. Phase distributions. *Chemical Engineering Science*, 51(23), 5171–5185.
- [18] J. B., Laurindo, & M. Prat, (1998). Numerical and experimental network study of evaporation in capillary porous media. Drying rates. *Chemical Engineering Science*, 53(12), 2257–2269.
- [19] M. Prat, (2007). On the influence of pore shape, contact angle and film flows on drying of capillary porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50, 1455–1468.
- [20] M. Prat, F. Bouleux (1999). Drying of capillary porous media with stabilized front in two-dimensions, *Phys. Rev. E* 60 (5 PTB) 5647–5656.
- [21] Sahimi M., (1995). *Flow and transport in porous media and fractured rock. From Classical methods to Modern Approaches* VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim.
- [22] R., Lenormand (1981), Déplacements polyphasiques en milieux poreux sous l'influence des forces capillaires. Etude expérimentale et modélisation de type percolation, Thèse d'Etat, INP Toulouse.
- [23] R Lenormand., E Touboul. et C. Zarcone (1988). Numerical models and experiments on immiscible displacements in porous media, *J. Fluid Mech.*, Vol. 189, pp. 165-167.
- [24] D. Wilkinson et J.F. Willemsen (1983) Invasion percolation: a new form of percolation theory, *J. Phys. A : Math. gen.*, Vol. 16.
- [25] S. Veran-Tissoires (2011). Sur le phénomène de cristallisation discrète à la surface ou à l'intérieur d'un milieu poreux. PhD thesis, Université de Toulouse.
- [26] D. Stauffer et A. Aharony (1992). *Introduction to percolation theory*, 2ed., Taylor & Francis.
- [27] S.R Broadbent. et J.M Hammersley., (1957), *Proc. Cambridge Philos. Soc.* 53, 629.
- [28] R. Lenormand, et S. Bories, (1980). Description d'un mécanisme de connexion de liaison destiné à l'étude du drainage avec piégeage en milieu poreux, *C. R. Acad. Sc., Série B*, pp. 279-282.
- [29] M. mauricio duenas velasco (2016). Evaporation en milieu poreux en présence de sel dissous. Structure et lois de croissance des efflorescences. Thèse. Université de Toulouse.

- [30] N. Sghaier (2006). Evaporation en milieu poreux en présence de sel dissous. Influence des films liquides et conditions de mouillabilité. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- [31] P Coussot, (2000). Scaling approach to the convective drying of a porous medium, Eur. Phys. J.B., 15, p. 557-566.
- [32] Prat, M (2002). Recent advances in pore-scale models for drying of porous media, Chem. Eng.J., 86 (1-2), p.153-164.
- [33] T.Metzger, E. Tsotsas, and M. Prat (2007). Modern drying technology, chapter 2 pore network models : A powerful tool to study drying at the pore level and understand the influence of structure on drying kinetics. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. pp 57–102
- [34] G.R. Hadley (1982). Theoretical treatment of evaporation front drying,” Int. J. Heat Mass Transfer. 25(10), 1511.
- [35] N. Shokri, P. Lehmann, P. Vontobel, and D. Or (2008). Drying front and water content dynamics during evaporation from sand delineated by neutron radiography,. Water Resources Research, 44, W06418.
- [36] J.Mls, Evaporation front and its motion (2022). Hydrol. Earth Syst. Sci., 26, 397 .
- [37] O.Chapuis, and M.Prat (2007) Influence of wettability conditions on slow evaporation in two dimensional porous media. Phys. Rev. E, 75, 046311.
- [38] H.Chraibi, M.Prat, and O.Chapuis (2009).Influence of contact angle on slow evaporation in two dimensional porous media,” Phys. Rev. E, 79, 026313 .
- [39] G. Yiotis, A. G. Boudouvis, A. K. Stubos, I. N. Tsimpanogiannis, and Y. C. Yortsos (2004). Effect of liquid films on the drying of porous media. AiChE J. 50 (11), 2721.
- [40] F. Chauvet, P. Duru, S. Geoffroy, and M. Prat (2009). Three periods of drying of a single square capillary tube,” Phys. Rev. Lett. 103, 124502.
- [41] A.G. Yiotis, D. Salin, E.S. Tajar, and Y.C. Yortsos (2012). Drying in porous media with gravity-stabilized fronts: Experimental results,” Physical Review E 86, 026310.
- [42] R. Lenormand and C. Zarcone (1989). Capillary Fingering: Percolation and Fractal Dimension. Transport in Porous Media, 4 :599–612.
- [43] A. G. Yiotis, A. K. Stubos, A. G. Boudouvis, and Y. C. Yortsos (2001). A 2-D pore network model of the drying of single-component liquids in porous media. Advances in Water Resources, 24 :439–460.

[44] B. Camassel, N. Sghaier, N., M. Prat, and S. Ben Nasrallah (2005). Evaporation in capillary tube of square cross-section: application to ion transport. *Chemical Engineering Science*, 60 :815–826.

[45] F. Chauvet, Effet des films liquides en évaporation (2009). Thèse. Institut National Polytechnique de Toulouse.

[46] O. Maalal (2020). Porométrie liquide-liquide, évaporométrie et simulations sur réseau de pores. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse.

[47] R. Defay et I. Prigogine (1966). Surface tension and adsorption. Longmans, Green & Co Ltd Ed., London, P 432.

[48] P.G. de Gennes, F. Brochard-Wyart, M. Lagues and D. Quéré, (2002). Gouttes, Bulles, Perles et Ondes, Editions Belin,

CHAPITRE 2

Simulation numérique du séchage d'un
réseau de pores bidimensionnel sans effets
de gravité

Chapitre 2 : Simulation numérique du séchage d'un réseau de pores bidimensionnel sans effets de gravité

L'objectif de ce chapitre est d'étudier le séchage des milieux poreux saturés en liquide (eau pure) en développant une modélisation des phénomènes d'évaporation dans le cadre de l'approche de réseau de pores.

La méthode de réseau de pores permet de restituer les hétérogénéités du milieu poreux à petite échelle. Le code numérique, développé sous MATLAB, permettra la simulation de l'écoulement et du transport de l'eau dans l'espace poral. Il s'agit d'analyser l'évolution du front de séchage et la fragmentation de la structure liquide au cours du processus de séchage.

2.1 Les caractéristiques géométriques du réseau :

Le milieu poreux comme illustré dans la figure 2-1, est représenté par une grille contenant des pores (des nœuds) reliés par des liaisons (ou liens) de forme cylindrique. Le réseau est considéré fermé ou imperméable sur trois de ces faces et ouvert seulement sur la face supérieure.

Le rôle des liaisons est important puisqu'elles servent de conducteurs pour le transport de vapeur. Elles définissent avec les pores, par la distribution aléatoire des rayons, le champ de pression, l'ordre d'invasion pendant le séchage et l'échelle de temps correspondant. Autre que les rayons des pores et les diamètres des liens, il est impératif de préciser les longueurs des liaisons, la taille et le pas du réseau.

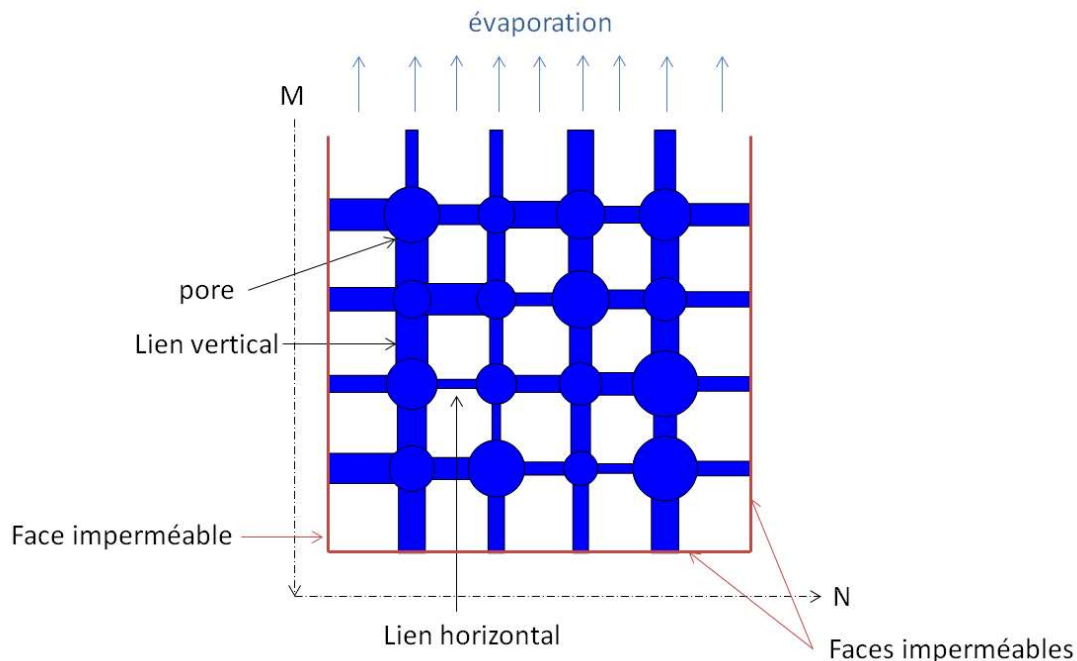


Figure 2- 1 : Exemple de réseau de pore de taille 4*4

Le pas de réseau L (la distance entre deux centres de nœuds voisins) étant constant tout le long du programme, les longueurs des liaisons sont variables en fonction des rayons des pores (figure 2-2).

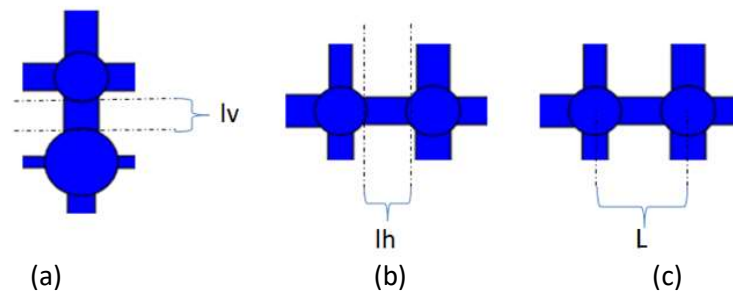


Figure 2- 2 : (a) Longueur d'une liaison verticale (b) Longueur d'une liaison horizontale (c) Pas du réseau.

Les deux matrices sont déterminées à partir de la formule suivante :

$$(2-1)lh = lv = L - 2r_p$$

Cette dernière subit une exception sur les frontières du réseau où les liaisons sont en contact avec un seul pore.

$$(2-2)lh = lv = L - r_p$$

2.2 La saturation :

La saturation est la quantité de fluide mouillant présente dans le milieu poreux. Initialement, le réseau est complètement saturé en eau. Au cours du séchage, comme illustré sur la figure 2-3, l'interface liquide vapeur avance progressivement ce qui diminue la saturation du réseau. Les pores et les liens se vident progressivement et leur saturation évolue au cours du temps.

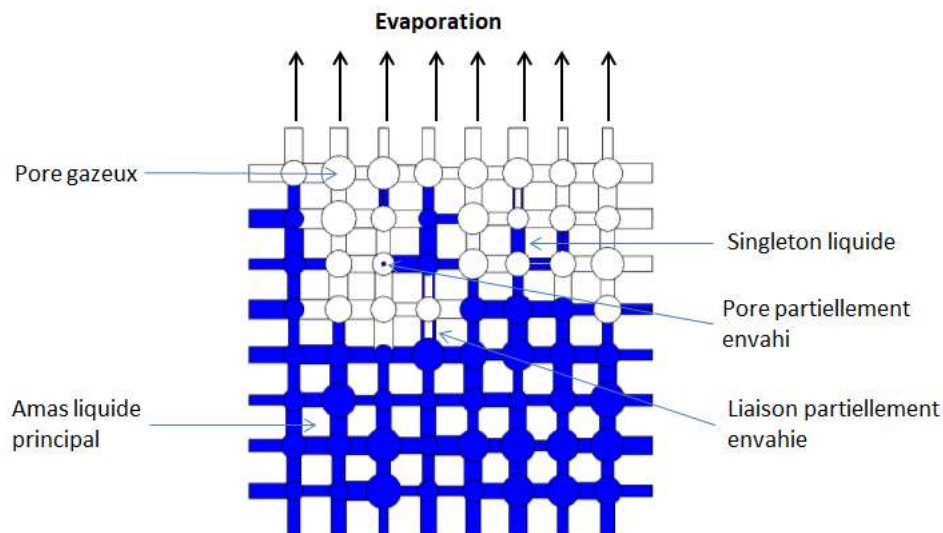


Figure 2- 3 : Représentation de l'état des pores et des liens au cours du processus de séchage.

En effet, la saturation est la proportion de volume de l'élément (pore ou lien) occupé. Elle est estimée de la manière suivante :

$$(2-3) \text{Saturation} = \frac{\text{Volume total du réseau} - \text{Volume de l'élément envahi}}{\text{Volume total du réseau}}$$

Un élément du réseau (lien ou pore) peut être :

- Complètement saturée si sa saturation $S_{el}=1$
- Partiellement remplie (ou partiellement envahi) si sa saturation $0 < S_{el} < 1$
- Vide si sa saturation $S_{el}=0$

2.3 La pression :

Initialement, le réseau est supposé saturé en eau pure à la température ambiante T et à une pression de vapeur saturante $P_{v,sat}$. Le processus de séchage est contrôlé par la diffusion à l'interface réseau-milieu extérieur, l'évaporation à l'interface liquide-vapeur et la diffusion de vapeur. Une couche limite de diffusion h est imposée sur la phase face supérieure du réseau comme illustré sur la figure 2-4. En effet, chaque liaison inter-faciale (réseau-milieu extérieur) est prolongée par une liaison gazeuse dont la pression à l'extrémité est maintenue à la pression partielle de vapeur $P_v = P_{v,\infty}$ et telle que :

$$(2-4) P_{v,\infty} = RH * P_{v,sat}$$

Avec RH : l'humidité relative

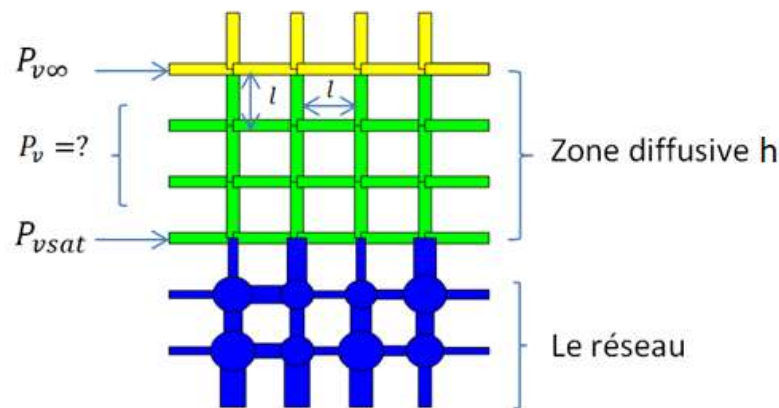


Figure 2- 4 : Répartition de la pression dans la couche limite de diffusion

Le transport dans la phase vapeur étant purement diffusif, le champ de pression partielle peut être déterminé par la résolution des équations de diffusion et la loi de conservation de la masse :

$$(2-5) J = \sum \text{flux diffusif arrivant à un noeud} = 0$$

Le taux d'évaporation est exprimé par la loi de Fick comme suit

$$(2-6) j_i = -\frac{D \cdot M_v}{R \cdot T} \frac{S_x}{l_x} (P_{v,j} - P_{v,x})$$

On trouve alors en combinant (2-5) et (2-6) :

$$J = \sum \text{flux diffusif} = \sum_{x=1}^4 \left(-\frac{D \cdot M_v}{R \cdot T} \frac{S_x}{l_x} (P_{v,j} - P_{v,x}) \right) = 0 \quad (2-7)$$

Avec $P_{v,j}$ et $P_{v,x}$, les pressions partielles de vapeur, respectivement, du pore j et des pores voisins x (voir les figures 2-5 et 2-6), S_x est la section de la liaison et l_x est la distance entre les deux nœuds.

A la température $T=22^\circ\text{C}$, $D = 2.5 \cdot 10^{-5} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ est le coefficient de diffusion moléculaire de la vapeur d'eau dans l'air, $M_v = 18.01 \cdot 10^{-3} \text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ est la masse molaire de la vapeur et $R = 8.31 \text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ la constante des gaz parfaits.

2.3.1 Réseau-Milieu extérieur

Une couche de diffusion d'épaisseur h est supposée être imposée sur la face supérieure du réseau comme indiqué sur la figure 2-5. La pression partielle à l'entrée du réseau est égale à la pression de vapeur saturante. Le simulateur permet de calculer la distribution de la pression dans la zone diffusible en imposant la pression à l'extrémité la plus éloignée de la couche limite égale à $P_v = P_{v,\infty}$

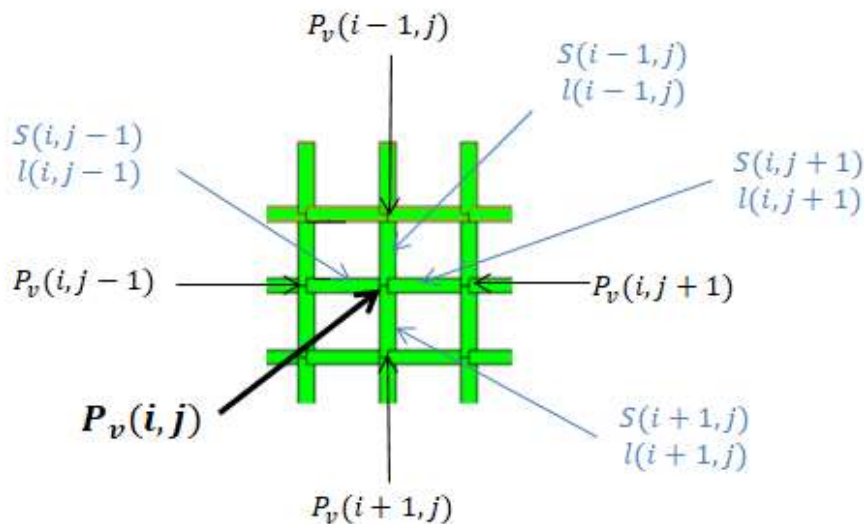


Figure 2- 5 : Représentation des voisinage d'un élément (i,j) de la couche limite.

En appliquant les équations (2-5) et (2-6) sur la figure 2-4 :

$$(2-8) \left(\frac{-D*M_v}{R*T} * \frac{P_{v(i,j)} - P_{v(i,j-1)}}{l(i,j-1)} * S(i,j-1) \right) + \left(\frac{-D*M_v}{R*T} * \frac{P_{v(i,j)} - P_{v(i-1,j)}}{l(i-1,j)} * S(i-1,j) \right) + \left(\frac{-D*M_v}{R*T} * \frac{P_{v(i,j)} - P_{v(i,j+1)}}{l(i,j+1)} * S(i,j+1) \right) + \left(\frac{-D*M_v}{R*T} * \frac{P_{v(i,j)} - P_{v(i+1,j)}}{l(i+1,j)} * S(i+1,j) \right) = 0$$

Les sections des liaisons étant cylindriques, elles s'écrivent sous la forme :

$$(2-9) S(i-1,j) = S(i+1,j) = S(i,j-1) = S(i,j+1) = \frac{\pi}{4} l^2$$

En remplaçant (2-8) dans l'équation (2-7), on trouve :

$$(2-10) \left(\frac{-D*M_v}{R*T} (P_{v(i,j)} - P_{v(i-1,j)}) \frac{\frac{\pi}{4} l^2}{l} \right) + \left(\frac{-D*M_v}{R*T} (P_{v(i,j)} - P_{v(i,j-1)}) \frac{\frac{\pi}{4} l^2}{l} \right) + \left(\frac{-D*M_v}{R*T} (P_{v(i,j)} - P_{v(i,j+1)}) \frac{\frac{\pi}{4} l^2}{l} \right) + \left(\frac{-D*M_v}{R*T} (P_{v(i,j)} - P_{v(i+1,j)}) \frac{\frac{\pi}{4} l^2}{l} \right) = 0$$

L'équation (2-9 sous la forme) peut être écrite sous la forme :

$$(2-11) Cte * [(a_{lim}(i,j) * P_{v,j}) + (-\alpha_{limB}(i,j) * P_{v(i+1,j)}) + (-\alpha_{limD}(i,j) * P_{v(i,j+1)}) + (-\alpha_{limG}(i,j) * P_{v(i,j-1)}) + (-\alpha_{limH}(i,j) * P_{v(i-1,j)})] = 0$$

Avec :

$$(2-12) \alpha_{limB}(i,j) = \alpha_{limB}(i,j) = \alpha_{limB}(i,j) = \alpha_{limB}(i,j) = \frac{l^2}{l} = l$$

$$(2-13) Cte = \frac{-\pi * D * M_v}{4 * R * T}$$

$$(2-14) \text{Et } \alpha(i,j) = \alpha_{limH}(i,j) + \alpha_{limG}(i,j) + \alpha_{limD}(i,j) + \alpha_{limB}(i,j)$$

L'équation discrétisée (2-10) peut être remplacée par un système linéaire qui s'écrit sous la forme :

$$(2-15) AP = b$$

Avec : **P** : vecteur des pressions inconnues du système.

b : vecteur des conditions aux limites

A : la matrice des conductances

En développant (2-14), on trouve :

$$AP = \begin{pmatrix} \sum\alpha & -\alpha_D & 0 & \dots & -\alpha_B & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -\alpha_G & \sum\alpha & -\alpha_D & \dots & -\alpha_B & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha_G & \sum\alpha & 0 & \dots & 0 & -\alpha_B & \dots & 0 & 0 & 0 \\ & & & \vdots & & & & & & & \\ -\alpha_H & 0 & \dots & 0 & \sum\alpha & -\alpha_D & 0 & \dots & -\alpha_B & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha_H & 0 & \dots & -\alpha_G & \sum\alpha & -\alpha_D & \dots & 0 & -\alpha_B & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha_H & \dots & 0 & -\alpha_G & \sum\alpha & 0 & \dots & 0 & -\alpha_B \\ & & & \vdots & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\alpha_H & 0 & \dots & 0 & \sum\alpha & -\alpha_D & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -\alpha_H & 0 & \dots & 0 & -\alpha_G & \sum\alpha & -\alpha_D \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -\alpha_H & \dots & 0 & -\alpha_G & \sum\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{i-1,j-1} \\ P_{i-1,j} \\ P_{i-1,j+1} \\ \vdots \\ P_{i,j-1} \\ P_{i,j} \\ P_{i,j+1} \\ \vdots \\ P_{i+1,j-1} \\ P_{i+1,j} \\ P_{i+1,j+1} \end{pmatrix} = b = \begin{pmatrix} \alpha_H P_{v\infty} \\ \alpha_H P_{v\infty} \\ \alpha_H P_{v\infty} \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \alpha_B P_{vsat} \\ \alpha_B P_{vsat} \\ \alpha_B P_{vsat} \end{pmatrix} \quad (2-16)$$

2.3.2 Le réseau

Le déplacement du front de séchage dans la phase gazeuse est dominé par le processus de diffusion moléculaire monodimensionnel. Sur une interface liquide-gaz, on suppose que la pression de vapeur est égale à la pression de vapeur saturante. A chaque instant, l'équilibre thermodynamique à l'interface est atteint.

Le taux d'évaporation n'est calculé que sur l'interface et il est considéré égal au flux diffusif local dans la phase gazeuse.

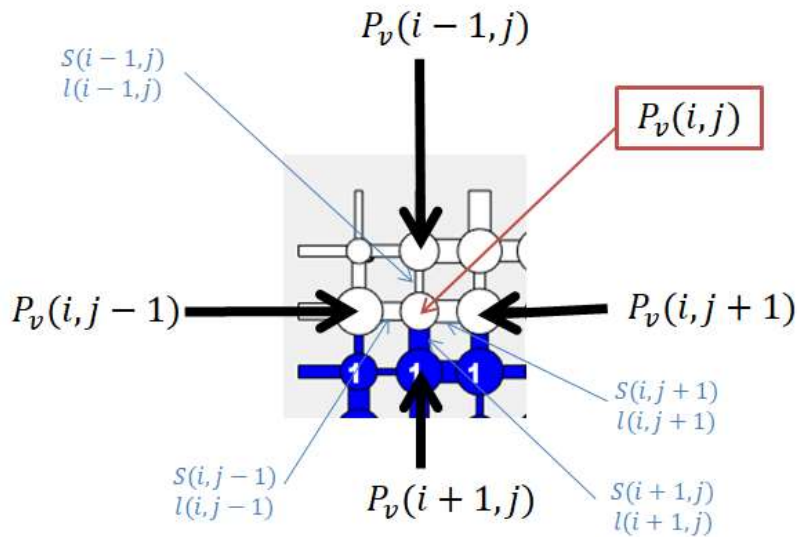


Figure 2- 6 : Répartition des voisins d'un pore gazeux (i,j) .

L'application de l'équation (2-7) selon la figure 2-6 donne :

$$\left(\frac{-D*M_v}{R*T}(P_{v,(i,j)} - P_{v,(i,j-1)})\frac{S(i,j-1)}{l(i,j-1)}\right) + \left(\frac{-D*M_v}{R*T}(P_{v,(i,j)} - P_{v,(i-1,j)})\frac{S(i-1,j)}{l(i-1,j)}\right) + \left(\frac{-D*M_v}{R*T}(P_{v,(i,j)} - P_{v,(i,j+1)})\frac{S(i,j+1)}{l(i,j+1)}\right) + \left(\frac{-D*M_v}{R*T}(P_{v,(i,j)} - P_{v,(i+1,j)})\frac{S(i+1,j)}{l(i+1,j)}\right) = 0 \quad (2-17)$$

On peut réécrire l'équation (2-17) de la façon suivante :

$$Cte * [(a(i,j) * P_{v,(i,j)}) + (-\alpha_H(i,j) * P_{v,(i-1,j)}) + (-\alpha_G(i,j) * P_{v,(i,j-1)}) + (-\alpha_D(i,j) * P_{v,(i,j+1)}) + (-\alpha_B(i,j) * P_{v,(i+1,j)})] = 0 \quad (2-18)$$

Avec :

$$(2-19) Cte = \frac{-\pi*D*M_v}{4*R*T}$$

Et les conductances :

$$(2-20) \alpha_H(i,j) = \frac{S(i-1,j)}{l(i-1,j)}$$

$$(2-21) \alpha_G(i,j) = \frac{S(i,j-1)}{l(i,j-1)}$$

$$(2-22) \alpha_D(i,j) = \frac{S(i,j+1)}{l(i,j+1)}$$

$$(2-23) \alpha_B(i,j) = \frac{S(i+1,j)}{l(i+1,j)}$$

$$(2-24) a(i,j) = \alpha_H(i,j) + \alpha_G(i,j) + \alpha_D(i,j) + \alpha_B(i,j)$$

Un système linéaire de n équations à n inconnus peut être défini à partir de l'équation (2-18)

où n est le nombre des pores gazeux comme suit :

$$(2-25) AP = b$$

Tel que :

A : la matrice des conductances de vapeur

P : le vecteur des pressions partielles inconnues des pores gazeux

b : le vecteur des conditions aux limites

Le système matriciel s'écrit donc :

$$AP = \begin{pmatrix} \sum\alpha & -\alpha_D & 0 & \dots & -\alpha_B & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -\alpha_G & \sum\alpha & -\alpha_D & \dots & -\alpha_B & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha_G & \sum\alpha & 0 & \dots & 0 & -\alpha_B & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -\alpha_H & 0 & \dots & 0 & \sum\alpha & -\alpha_D & 0 & \dots & -\alpha_B & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha_H & 0 & \dots & -\alpha_G & \sum\alpha & -\alpha_D & \dots & 0 & -\alpha_B & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha_H & \dots & 0 & -\alpha_G & \sum\alpha & 0 & \dots & 0 & -\alpha_B \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\alpha_H & 0 & \dots & 0 & \sum\alpha & -\alpha_D & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -\alpha_H & 0 & \dots & 0 & -\alpha_G & \sum\alpha & -\alpha_D \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -\alpha_H & \dots & 0 & -\alpha_G & \sum\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{i-1,j-1} \\ P_{i-1,j} \\ P_{i-1,j+1} \\ \vdots \\ P_{i,j-1} \\ P_{i,j} \\ P_{i,j+1} \\ \vdots \\ P_{i+1,j-1} \\ P_{i+1,j} \\ P_{i+1,j+1} \end{pmatrix} = b = \begin{pmatrix} \vdots \\ \sum\alpha_k P_{kl} \\ \vdots \\ \sum\alpha_k P_{kl} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2-26)$$

Remarque :

- Les éléments de la matrice A peuvent être déterminés en analysant la saturation des pores et des liaisons voisins (voir l'annexe A)
- P est le vecteur des pressions partielles de vapeur.
- Le vecteur b des conditions aux limites reçoit les contributions des pores voisins ayant une pression connue.

2.4 Algorithme de Hoshan Kopelman :

Lors de la résolution numérique, il est indispensable de caractériser les liaisons liquides et les pores par rapport à leur appartenance à un amas. L'algorithme de Hoshan-Kopelman [1] est utilisé pour les identifier, les labéliser en analysant les pores un par un et finalement donner le nombre total des amas formés.

Au cours de chaque pas de temps, un seul élément est vidé complètement. Si un pore est totalement envahi (complètement vide), le label de l'amas correspondant est modifié.

La méthode peut être décrite comme suit :

Soit un réseau de pores, illustré par exemple dans la figure 2-7 ci-dessous, représenté par une matrice « Pore » de taille M*N (8*8 dans cet exemple), rempli aléatoirement par le liquide et renfermant des amas piégés.

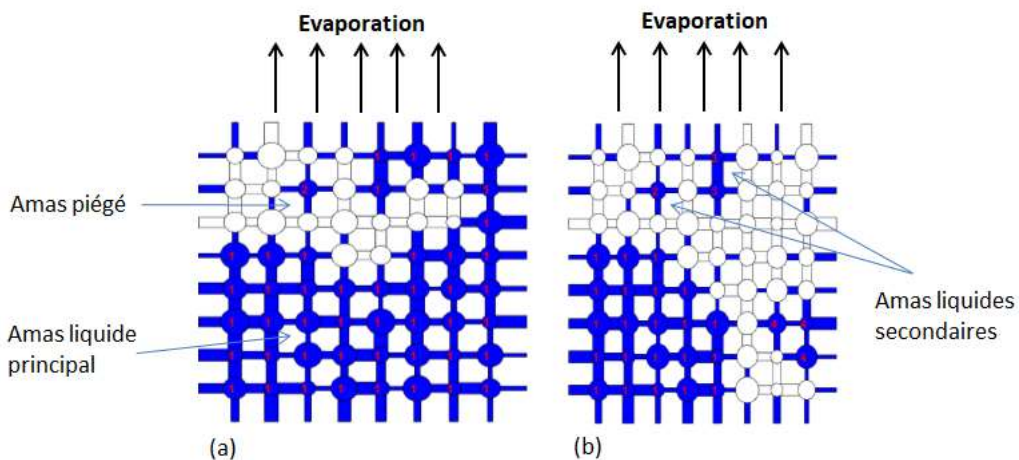


Figure 2- 7 : Représentation d'un Réseau 2D de taille 8*8 au cours du séchage à différents instants

L'idée est de parcourir chaque site ou pore du réseau et caractériser son appartenance à un amas c.à.d. vérifié si le pore est occupé par le liquide ou qu'il est non occupé donc à l'état vapeur (gazeux).

Une matrice de transition est créée contenant les indices des pores occupés dans la matrice Pore. Lorsqu'un pore occupé est repéré, on examine les nœuds voisins à gauche et en haut. Quatre cas se présentent :

1/ les deux voisins sont non occupés : création d'un nouvel amas pour la cellule en question avec une labellisation non déjà utilisée. Cet indice est celui de la position du site dans le réseau.

2/ l'un des voisins est occupé : affecter la même labellisation que le voisin à la cellule en question.

3/ les deux voisins sont occupés et appartenant au même amas : la même labélisation est affectée à la cellule en question.

4/ les deux voisins sont occupés et ayant deux indices différents : le site courant reçoit la labellisation la plus petite entre les deux voisins. Il peut y avoir des sites adjacents qui appartiennent au même amas mais avec des indices différents, dans ce cas la matrice doit être parcourue une autre fois pour l'homogénéiser et l'indice le plus petit va être affecté aux deux cellules

Prenons un exemple d'application de l'algorithme Hoshan-Kopelman sur le réseau représenté par la figure 2-7(b). la matrice PORE est la matrice qui caractérise l'état des pores formant le réseau. On affecte l'indice 1 si le pore est occupé (rempli de liquide) et 0 s'il est envahi (non occupé ou gazeux).

PORE =

0	0	0	0	1	0	0	0
0	0	1	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
1	1	1	0	0	0	0	0
1	1	1	1	0	0	0	0
1	1	1	1	1	0	1	1
1	1	1	1	1	0	0	1
1	1	1	1	1	0	0	0

On commence par la création d'une matrice contenant les indices attribués à chaque pore du réseau.

Aind =

1	9	17	25	33	41	49	57
2	10	18	26	34	42	50	58
3	11	19	27	35	43	51	59
4	12	20	28	36	44	52	60
5	13	21	29	37	45	53	61
6	14	22	30	38	46	54	62
7	15	23	31	39	47	55	63
8	16	24	32	40	48	56	64

B est la matrice contenant les indices des pores liquides qui forment le réseau. Le zéro est accordé à chaque pore gazeux.

B =

0	0	0	0	33	0	0	0
0	0	18	0	34	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
4	12	20	0	0	0	0	0
5	13	21	29	0	0	0	0
6	14	22	30	38	0	54	62
7	15	23	31	39	0	0	63
8	16	24	32	40	0	0	0

Amas est la matrice résultante de l'algorithme. Elle caractérise l'ensemble des pores liquides appartenant à chaque amas. Le même indice est attribué à chaque pore liquide appartenant au même groupe. Dans l'exemple considéré, le réseau, à l'instant t du séchage, est composé de quatre amas liquides.

amas =

0	0	0	0	33	0	0	0
0	0	18	0	33	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0
4	4	4	0	0	0	0	0
4	4	4	4	0	0	0	0
4	4	4	4	4	0	54	54
4	4	4	4	4	0	0	54
4	4	4	4	4	0	0	0

2.5 Organigramme de séchage

Pour bien construire le modèle de réseau de pores, un organigramme de séchage est établi, représenté par la figure 2-8, en se basant sur les règles de percolation d'invasion [2]. Le système à étudier étant mis dans son cadre environnemental, on génère aléatoirement les largeurs des pores (géométrie sphérique) et des liens (géométrie cylindrique) selon une loi de distribution donnée. Seul le bord supérieur du réseau est ouvert et les autres sont fermés. Etant initialement saturé en liquide, un test est effectué sur la première rangée du réseau pour récupérer la liaison la plus large. Une fois envahi, le reste est considéré comme amas liquide principal. Ce dernier se fragmente au cours du processus de séchage donnant naissance à des amas isolés de différentes tailles étiquetés selon l'algorithme de Hoshan-Kopelman. On identifie pour chaque amas formé l'élément, (pore ou lien) de plus grand diamètre. Le champ de pression partielle de vapeur est calculé dans la phase gazeuse formée, en résolvant numériquement le système linéaire développé précédemment (équations 2-15 et 2-26). On détermine, par la suite, le taux d'évaporation aux frontières de chaque amas liquide à travers la loi de Fick exprimé par l'équation (2-16). Un taux d'évaporation J_k (voir l'équation ci-dessous) est ainsi attribué à chaque amas k :

$$(2-27) J_k = \sum_i j_{ki}$$

Chapitre2 : Simulation numérique du séchage d'un réseau de pores bidimensionnel sans effets de gravité

On détermine désormais, pour chaque amas le temps nécessaire pour vider son élément le plus large de volume V_{ik} sélectionné auparavant comme suit :

$$(2- 28)t_k = \frac{\rho_l V_{ik}}{J_k}$$

Avec ρ_l la masse volumique du liquide saturant le milieu (l'eau dans notre cas).

Par conséquent, l'amas dont le temps de vidange est le plus faible voit son élément totalement envahi. Les autres amas subissent une invasion partielle proportionnellement au pas du temps du réseau tel que :

$$(2- 29)\Delta t = \min (t_k)$$

La distribution des phases dans le réseau est finalement actualisée et le processus s'arrête lorsque tout le réseau est complètement vidé ou envahi.

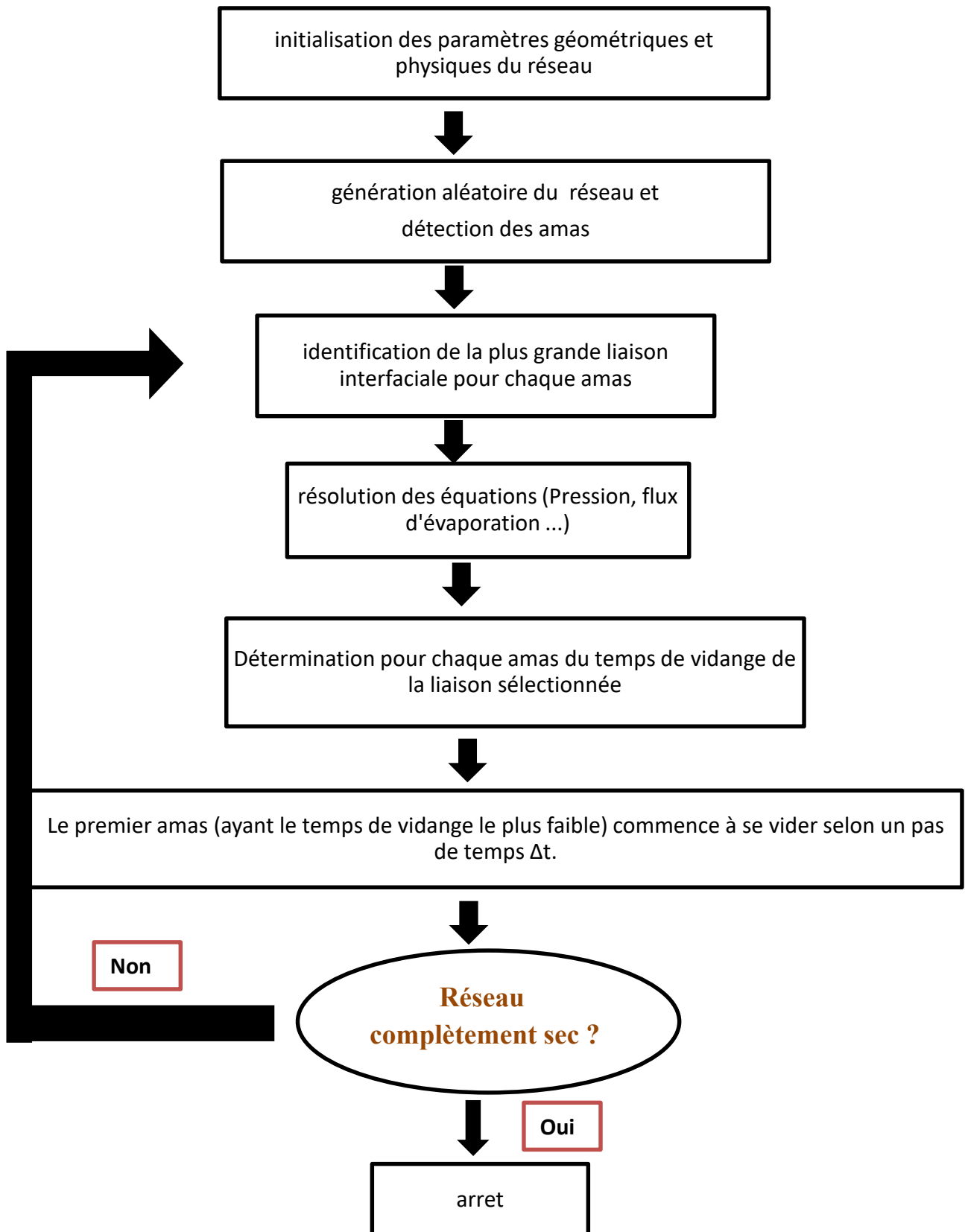


Figure 2- 8 : Organigramme de séchage

2.6 Hypothèses :

- Température uniforme dans le réseau (Transferts isothermes).
- Le séchage est contrôlé par : l'évaporation et la diffusion respectivement à l'interface liquide-gaz et dans la phase gazeuse.
- Une phase liquide parfaitement mouillante
- Les forces capillaires sont dominants et les films liquides sont négligées.
- Effet de gravité négligé.

2.7 Résultats de simulations :

2.7.1 La fonction graine :

Etant donné que la distribution des rayons des liaisons formant le réseau est aléatoire, la création d'une structure de stockage est indispensable.

La fonction graine permet de conserver la même génération aléatoire et d'enregistrer les résultats des différentes matrices caractérisant la résolution afin de les récupérer ultérieurement.

2.7.2 Résultats :

Nous allons considérer, comme exemple de simulation de séchage, un réseau rectangulaire bidimensionnel de taille 36×41 avec une couche de diffusion monodimensionnelle (15mm de hauteur discrétisée par 15 nœuds) $h=15$.

Les rayons des pores sphériques sont distribués aléatoirement dans l'intervalle $[0.4-0.5]$, les liens cylindriques sont caractérisés par leur diamètre généré aussi au hasard entre $[0.133-0.1667]$. La porosité du réseau est estimée, de ce fait, égale à $\varepsilon=0.8899$. Le pas de réseau est pris égale à $L=1\text{mm}$. La pression de réseau est maintenue initialement à $P = P_{vsat} = 2700\text{Pa}$, l'humidité relative est de 12%, en appliquant l'équation (2-4), la pression partielle de vapeur est donc égale à $P_{v\infty} = 324\text{Pa}$.

Tenant compte seulement de la capillarité comme force agissant sur le liquide, le séchage peut être défini par l'envahissement progressif de la vapeur qui fait développer l'interface liquide-gaz dans le milieu. En termes d'évolution de la distribution de phase, l'amas liquide principal se fragmente au fur et à mesure en plusieurs amas isolés, voir les figures 2-9 et 2-10. Ces amas se vident progressivement, comme discuté auparavant, selon le pas de temps trouvé à chaque itération. En effet, Les éléments du réseau (pore ou lien), à un instant t , sont soit totalement, soit partiellement envahi (voir l'Annexe A) modifiant ainsi graduellement la saturation du milieu.

La figure 2-9 illustre l'étape de déconnexion (définie dans le chapitre précédent). Détecté à une saturation égale à $S=0.7522$, aucun amas liquide du réseau n'est connecté à la fois à la face d'entrée et la face de sortie. Quant à la figure 2-10, elle illustre le moment où la phase vapeur atteint pour la première fois la face de sortie à une saturation égale à $S=0.5985$, c'est l'étape de la percée.

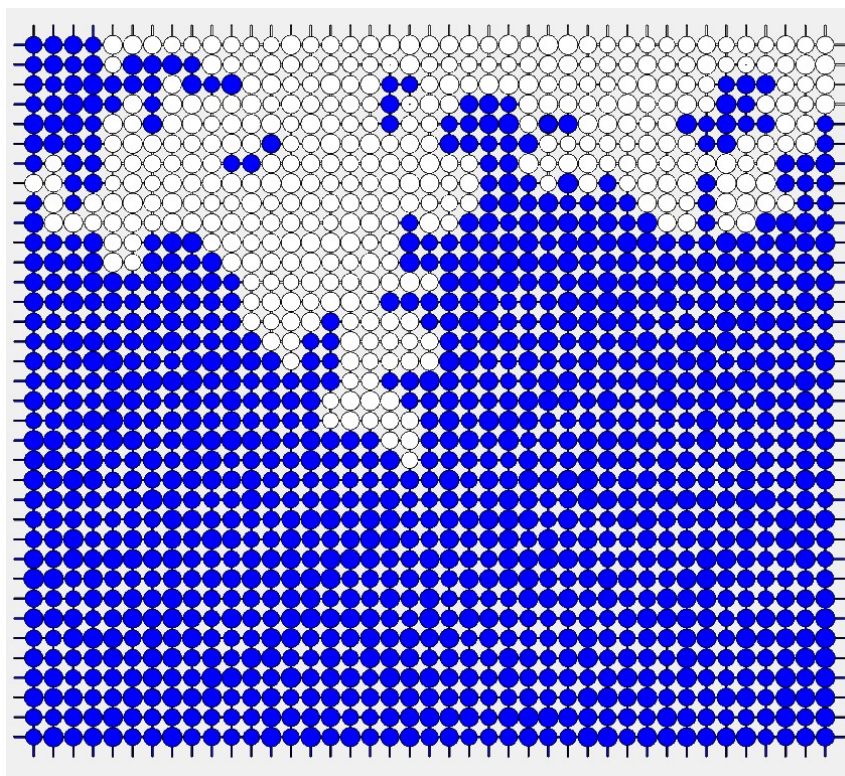


Figure 2- 9 : Représentation de la déconnection de l'amas principal d'un réseau de pores $36*41$, de porosité $\varepsilon = 0.8899$ à une saturation $S_{el}=0.7522$.

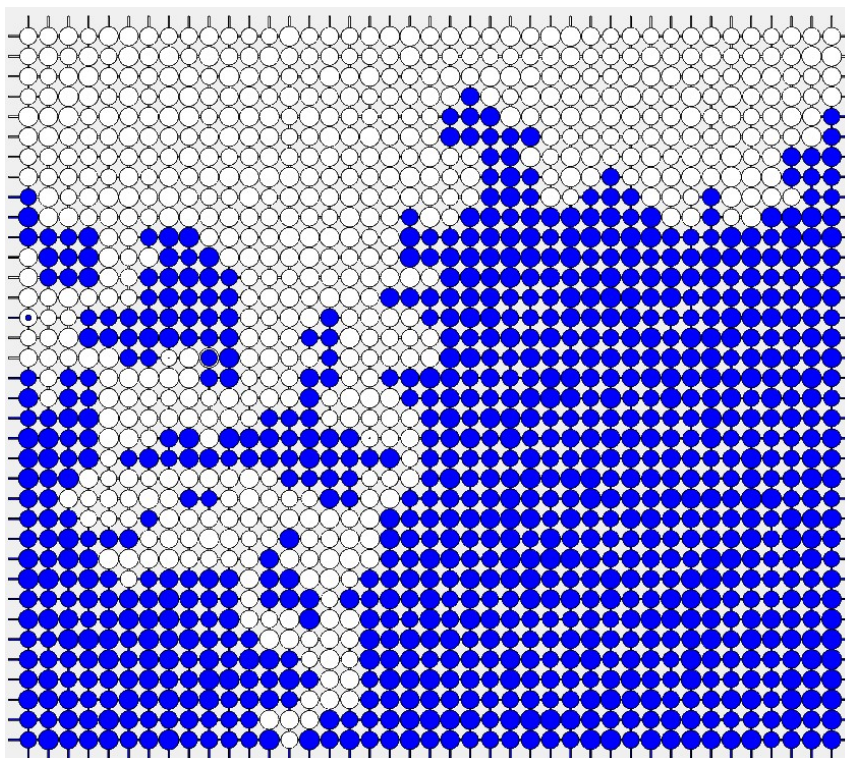
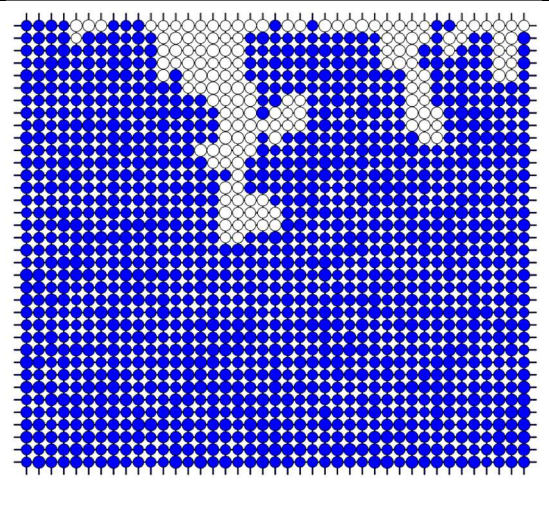
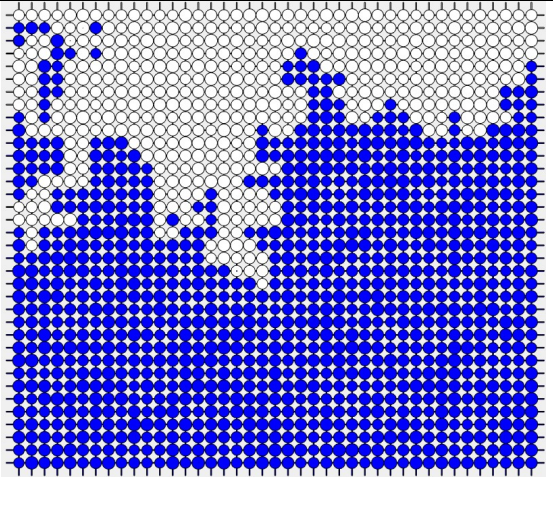
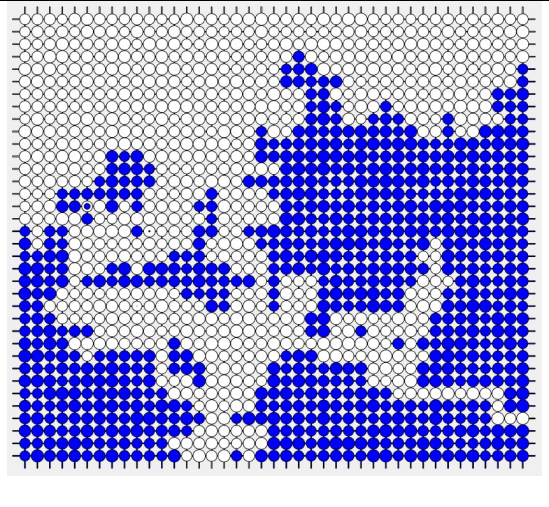
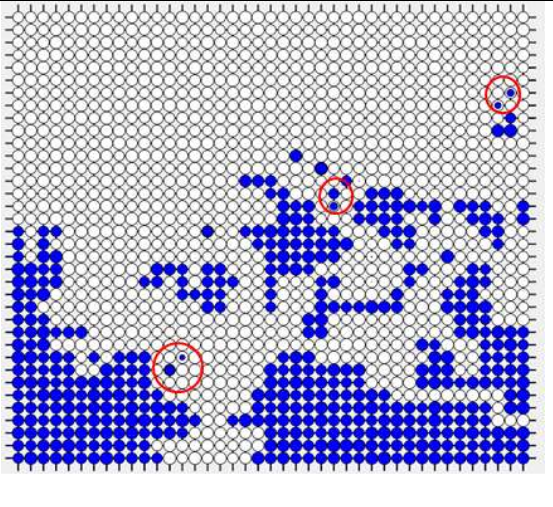
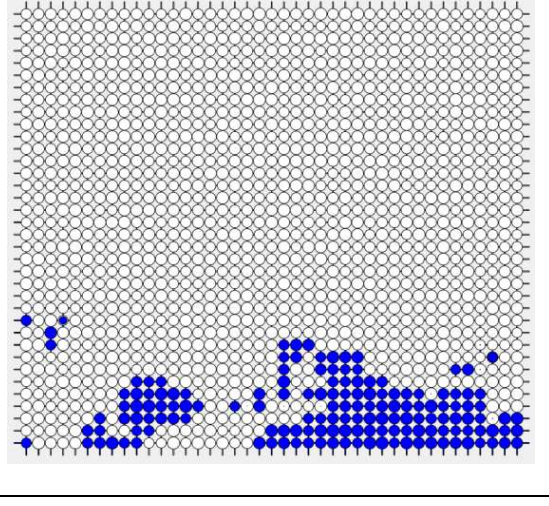
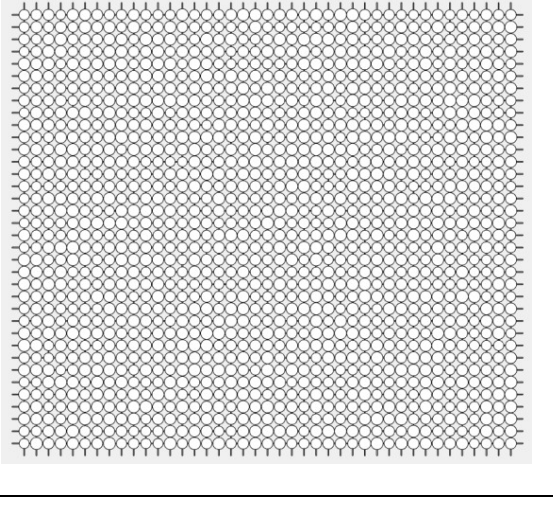


Figure 2- 10 : Représentation d'un réseau $36*41$ de porosité $\varepsilon = 0.8899$ à la percée, à une saturation $S_{el}=0.5985$

Le tableau 2-1 permet de suivre l'évolution de l'interface liquide-gaz de l'exemple de réseau de pore de taille 36×41 et de porosité $\varepsilon=0.8899$. Initialement, les règles de percolation d'invasion sont appliquées à ce processus d'évaporation. Cela signifie que les éléments de plus grande taille sont envahis en premier. La zone sèche s'installe progressivement dans le réseau une fois l'étape de déconnection de l'amas principal (figure 2-9) est atteinte. En effet l'amas liquide principal couvrant le réseau (figure a du tableau 2-1) se fragmente au fur et à mesure en plusieurs amas liquides isolés (les figures (b) et (d) du tableau 2-1 par exemple). Ils se vident soit complètement soit partiellement, comme indiqué sur la figure (d) du tableau 2-1 (voir les états possibles des éléments du réseau dans l'annexe A), en fonction du temps de vidange calculé à chaque itération ce qui fait développer la phase gazeuse au sein du milieu et diminuer sa saturation.

Tableau 2- 1 : La distribution des phases pour l'exemple d'un réseau 36*41 avec une couche de diffusion $h = 15$ ($r_{ps}:0.4-0.5/DIL:0.133-0.166$) de porosité 0.8899 pour différentes saturations.

(a)		(b)	
S_{el}	0.9	S_{el}	0.7
(c)		(d)	
S_{el}	0.5	S_{el}	0.3
(e)		(f)	
S_{el}	0.1	S_{el}	0

Les isobares de pressions partielles illustrées par les figures 2-11 et 2-12 marquent le front d'évaporation qui enveloppe la région liquide et la répartition de la pression de vapeur dans la région sèche pour des exemples de saturation $S_{el}=0.7$ et $S_{el}=0.1$.

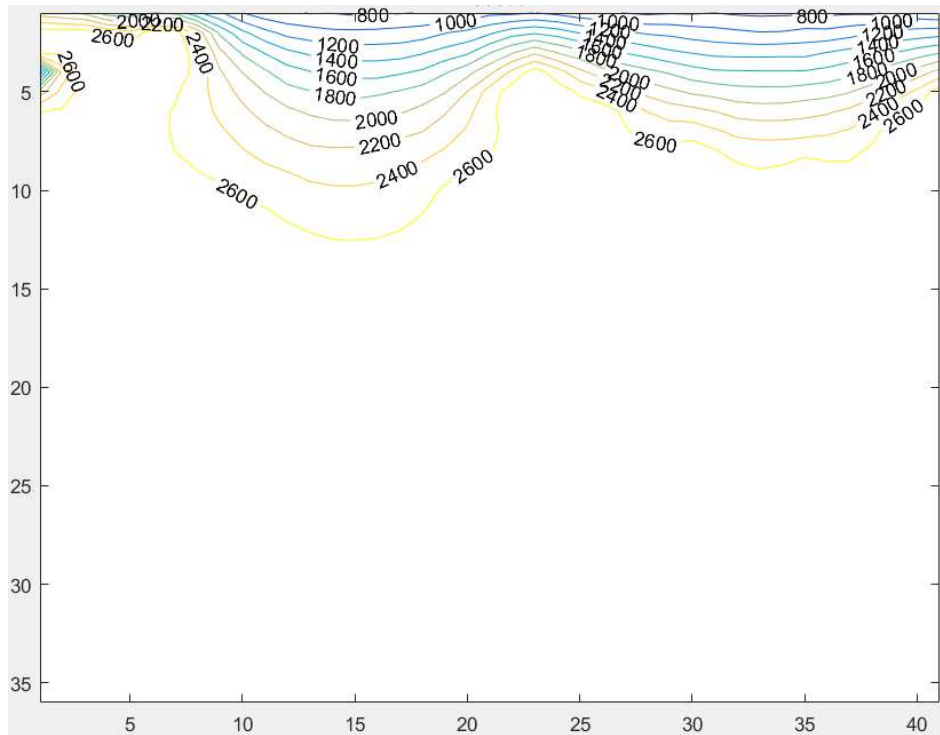


Figure 2- 11 : Les isobares de pressions partielles de vapeur à une saturation de réseau $S_{el}=0.7$

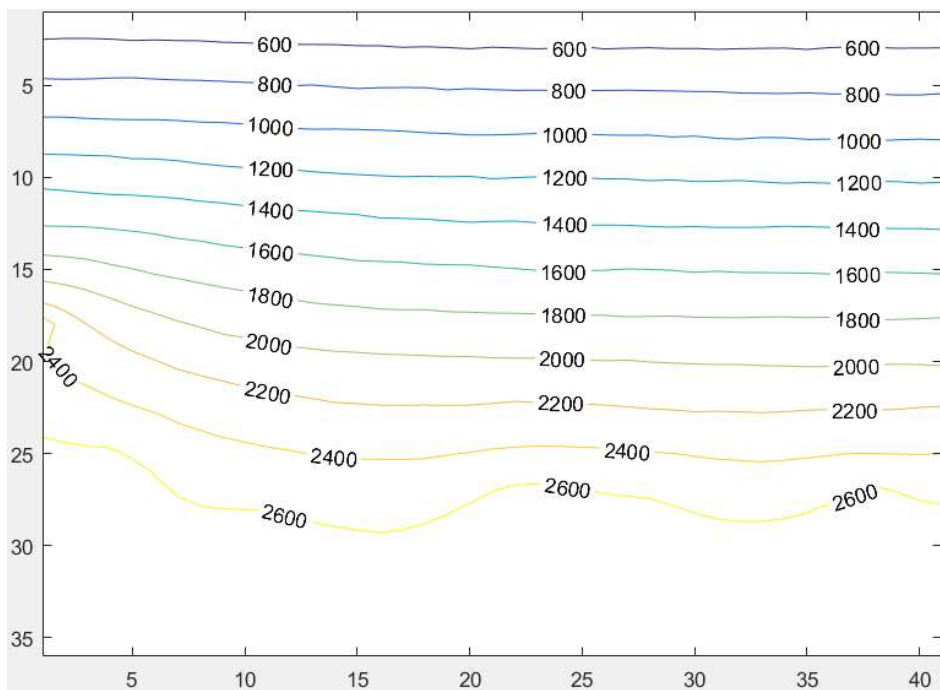


Figure 2- 12 : Les isobares de pressions partielles de vapeur à une saturation $S_{el}=0.1$

La figure 2-13 illustre la courbe de séchage de notre réseau représentant le flux de séchage adimensionné par le flux initial en fonction de la saturation du réseau. En effet, trois phases sont observées : une décroissance rapide et importante est constatée pour des saturations élevées jusqu'à la déconnexion de l'amas principal à une saturation égale à 0.7522. La déconnexion de l'amas principale et l'installation du front de séchage. Une deuxième phase marquée par une décroissance lente du taux de séchage qui se termine à la percée ($S_{el}=0.5985$). Et finalement une dernière phase où le taux est faible et presque constant jusqu'au séchage complet du réseau.

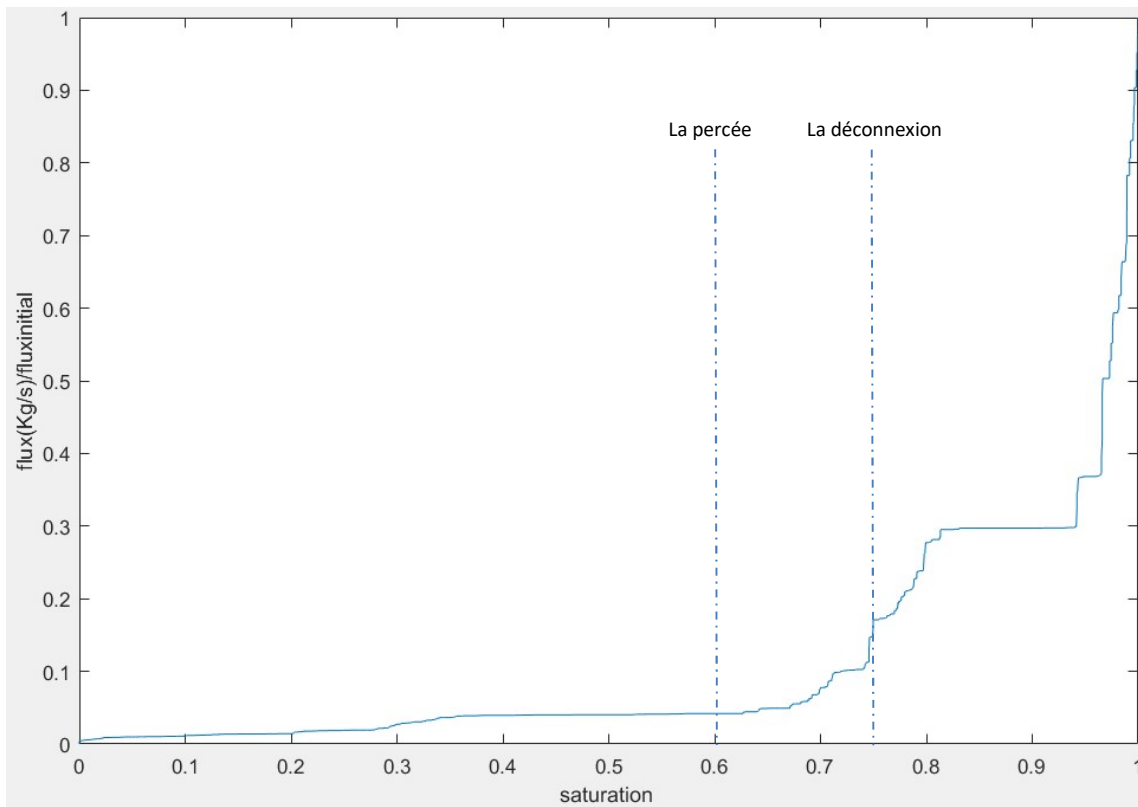


Figure 2- 13 : Courbe de séchage du réseau 36*41 avec une couche limite $h=15\text{mm}$

Les figures des tableaux suivants sont des exemples de réseau de taille 36*41 en gardant la même distribution aléatoire que l'exemple précédent et modifiant les tailles des pores et liens. Quoique qu'on garde la même distribution aléatoire du réseau, le comportement de la diffusion de la vapeur dans le milieu n'est pas le même. Le chemin d'invasion de la phase liquide varie selon la porosité du réseau. Quand elle est très faible la percolation est très rapide à une saturation de 0.7, contrairement aux deux autres exemples où on percole à $S_{el}<0.7$. On peut donc dire que la distribution des tailles des éléments constituant le réseau de pores joue un rôle important dans le transport de la vapeur, la diffusion, dans le milieu.

Tableau 2- 2 : La distribution des phases pour du réseau 36*41 avec une couche de diffusion de 15mm (r_p :0.2-0.25/DIL :0.6-0.7) de porosité $\varepsilon = 0.0506$ pour différentes saturations.

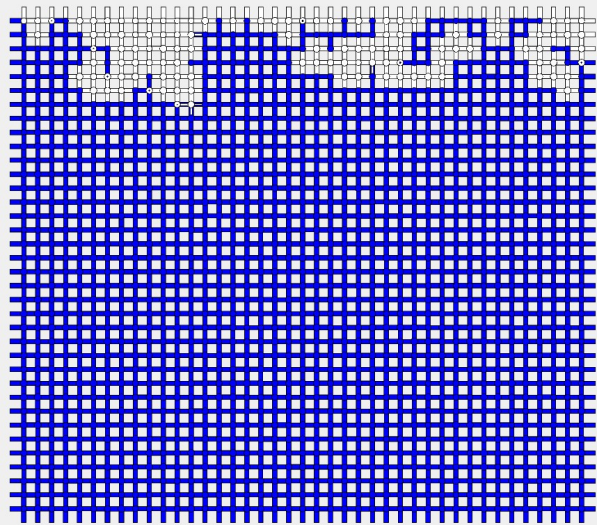
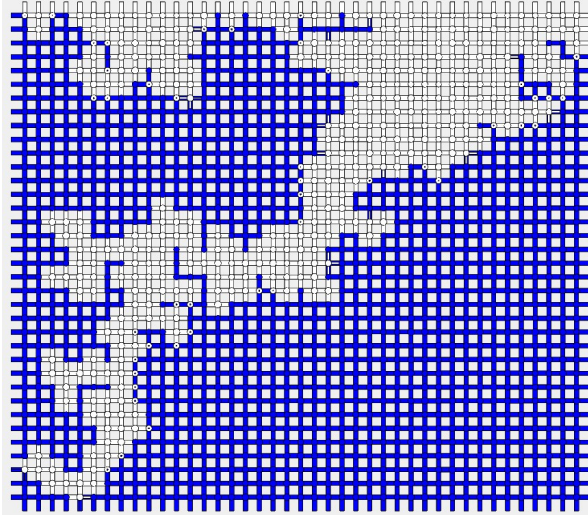
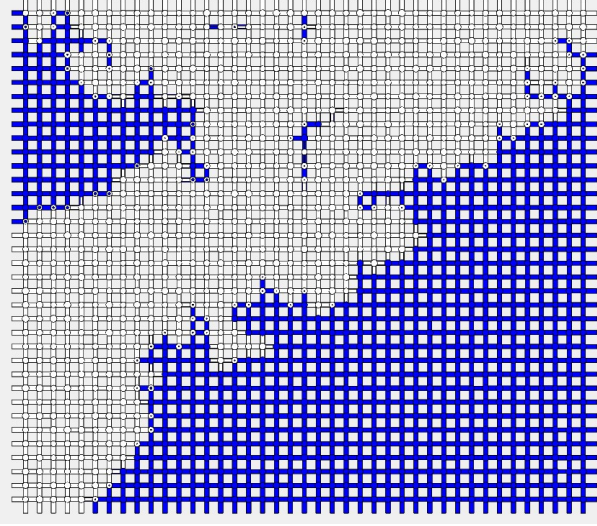
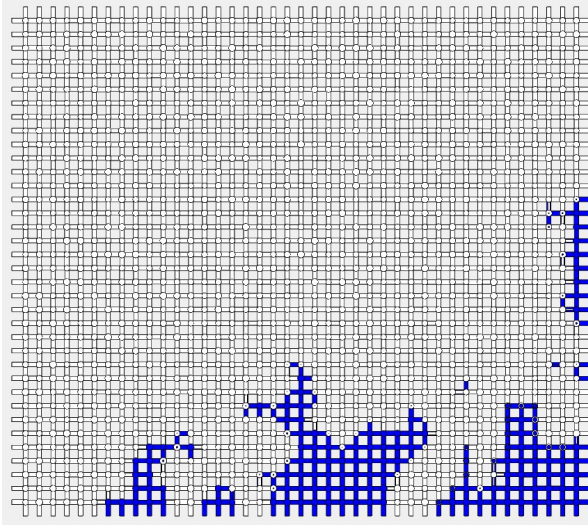
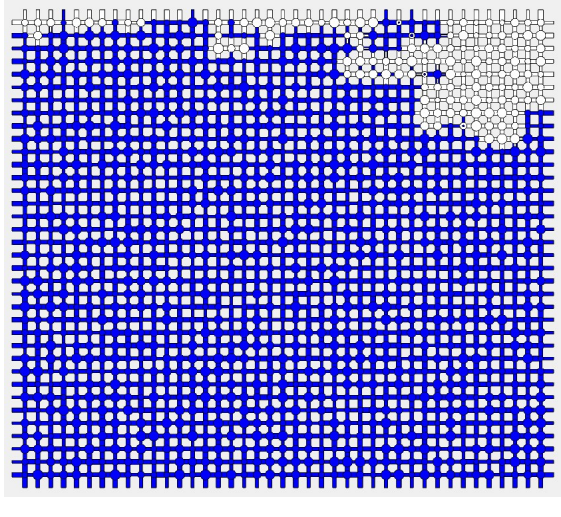
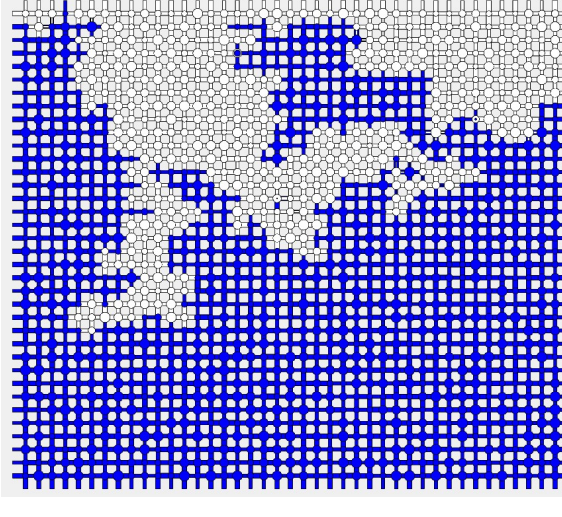
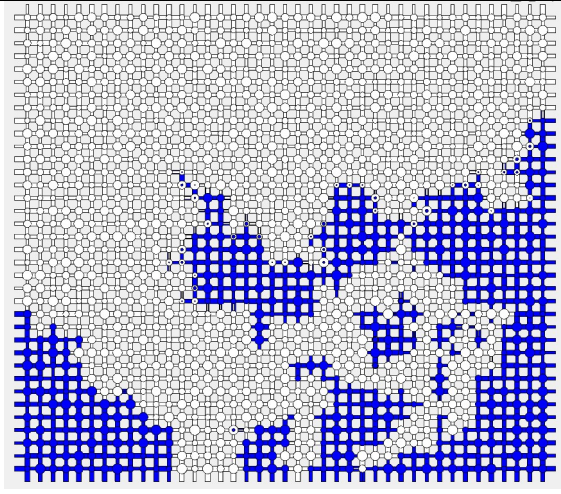
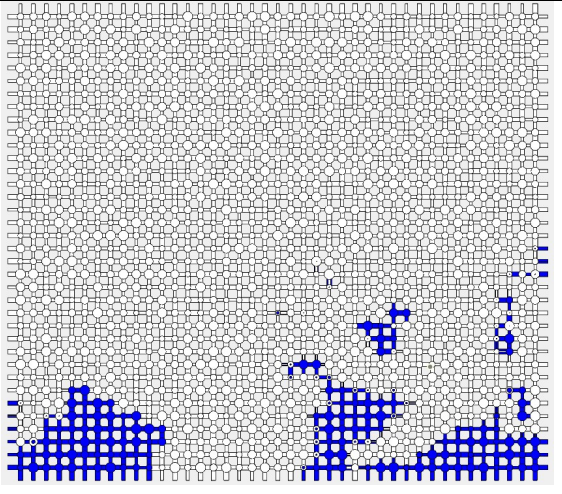
(a)		(b)	
S_{el}	0.9	S_{el}	0.7
(c)		(d)	
S_{el}	0.5	S_{el}	0.1

Tableau 2- 3 : : La distribution des phases pour l'exemple du 36*41 avec une couche de diffusion de 15mm (r_p :0.2-0.4/DIL :0.2-0.8) de porosité $\varepsilon = 0.1367$ pour différentes saturations.

(a)		(b)	
S _{el}	0.9	S _{el}	0.7
(c)		(d)	
S _{el}	0.5	S _{el}	0.1

Conclusion

On a présenté dans ce chapitre notre simulateur bidimensionnel de type réseau de pores, permettant l'étude du processus de séchage d'un milieu poreux initialement saturé en liquide. Le code élaboré permet de générer aléatoirement des réseaux et analyser l'évolution de la structure des phases au sein du milieu. Cette évolution des interfaces liquide-gaz suit sensiblement les lois de la théorie de percolation d'invasion .

Nous allons par la suite étendre l'étude du séchage en analysant les effets de gravité sur la répartition des phases et l'avancement de l'interface liquide-gaz. Une étude de la mouillabilité sera aussi menée afin de voir l'effet de l'angle de contact en absence et présence de gravité.

Références

[1] J. Hoshen, R. Kopelman. (1976). Percolation and cluster distribution. I. cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. Phys. Rev. B 14, 3438.

[2] T. Metzger, E. Tsotsas, M. Prat, (2007). Pore-network models: A powerful tool to study drying at the pore level and understand the influence of structure on drying kinetics, In: E. Tsotsas, A.S. Mujumdar (Eds.) Modern Drying Technology, Vol. 1: Computational Tools at Different Scales, Wiley-VCH: Weinheim, 57-102.

CHAPITRE 3

Effet de la mouillabilité
et de la gravité

Chapitre 3 : Effet de la mouillabilité et de la gravité

La mouillabilité joue un rôle crucial dans la distribution des phases fluides dans les milieux poreux. Lorsqu'on injecte un fluide pour déplacer un autre, les phénomènes qui peuvent être observés varient selon les caractéristiques de ces deux fluides. La gravité est aussi un paramètre important de l'étude de l'évolution de la zone sèche dans le réseau de pores. La phase liquide (l'eau) étant supposée parfaitement mouillante dans le chapitre précédent, dans ce qui suit, nous allons mener une étude comparative de séchage dans des réseaux hydrophiles et hydrophobes basée sur des simulations de réseaux de pores pour différentes tailles de pores et liens (différentes porosités). Une hétérogénéité de la mouillabilité peut être observée dans un milieu poreux avec un angle de contact différent d'une zone à une autre, on étudiera ultérieurement le comportement du front de séchage dans un tel cas. Nous commençons dans ce chapitre par l'étude de la distribution des phases liquide et vapeur dans le réseau en fonction de la mouillabilité, en utilisant deux algorithmes différents, et allons, par ailleurs, voir l'impact de la présence des forces de gravité sur l'avancement du front de séchage au sein du milieu poreux.

3.1 Le potentiel

A chaque élément du réseau, on définit un potentiel φ (appelé aussi pression capillaire) qui s'exprime par la loi de Laplace [1] et tient compte de la matrice solide et de la mouillabilité via l'angle de contact :

$$(3-1)\varphi = \frac{-4 \sigma \cos(\theta)}{d}$$

Avec σ la tension de surface Nm^{-1} , θ l'angle de contact et d le diamètre de l'élément en question (pore ou lien) en m .

Dans le chapitre précédent, l'invasion est dirigée par la distribution des tailles des éléments (pores ou liens) formant le PNM. En absence de gravité et en considérant que le fluide est parfaitement mouillant, l'élément le plus large est susceptible d'être vidangé en premier. A partir de l'équation (3-1), la relation entre le diamètre de l'élément du réseau de pores et son potentiel, permet de diriger l'invasion par la pression capillaire.

Le choix de la liaison à vidanger se fait en sélectionnant l'élément ayant le plus grand potentiel selon l'équation (3-1). Dans le cas hydrophobe par exemple, étant donné que $\cos\theta$ est négatif, envahir l'élément ayant le potentiel le plus élevé revient à sélectionner celui de plus petit diamètre. On a montré que la distribution des tailles des pores PSD (Pore size distribution) joue un rôle important dans le comportement de l'interface liquide vapeur dans le PNM au cours du processus de séchage. Des simulations avec différentes PSD seront présentées afin de voir l'influence de la mouillabilité sur le front d'évaporation. Le code développé dans cette partie suit quasiment le même algorithme de séchage décrit dans le

chapitre 2, les mêmes systèmes linéaires sont à résoudre avec un principe d'invasion dépendant cette fois des potentiels des éléments formant le réseau.

3.2 Simulations

Pour faire une étude comparative adéquate, le même réseau généré dans le chapitre précédent est réalisé dans cette partie grâce à la fonction graine.

On considère le même réseau saturé en eau pure à la température 20°C de taille 36*41 avec une couche de diffusion externe de 15 nœuds. On commence par une distribution de rayon de pores entre 0.4 et 0.5, les diamètres des liens verticaux et horizontaux varient de 0.133 à 0.166 et la porosité du milieu est $\varepsilon = 0.8899$. La pression de vapeur saturante est $P_{vsat} = 2700 Pa$ et la pression partielle de vapeur est $P_{v\infty} = 324 Pa$.

Pour un réseau hydrophile avec un angle de contact choisi = 30°. Le tableau3-1 ci-dessous illustre l'évolution de l'interface liquide vapeur à différentes saturations. La distribution des phases du même réseau en changeant uniquement l'angle de contact qui devient égale à 160° (pour avoir un réseau hydrophobe) est présenté dans le tableau 3-2.

En faisant la comparaison entre le tableau 3-1 et celui du chapitre2 (tableau 2-1), l'avancement du front de séchage dans le cas parfaitement mouillant et le cas hydrophile est le même puisque en choisissant le potentiel le plus grand (équation 3-1) avec un angle $\theta = 30^\circ$ revient à choisir le rayon le plus grand de l'élément à envahir.

Tableau 3- 1 : La distribution des phases d'un réseau hydrophile $\theta = 30^\circ$ de taille 36×41 et de porosité égale à $\varepsilon = 0.8899$, pour différentes saturations.

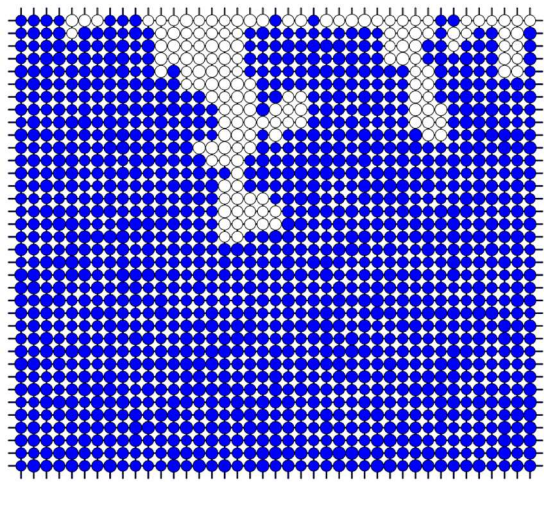
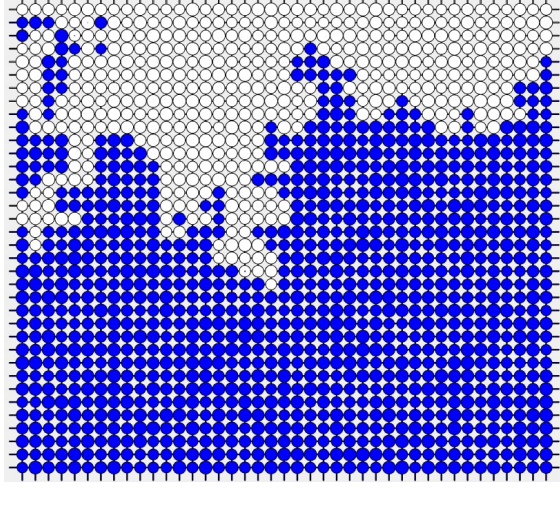
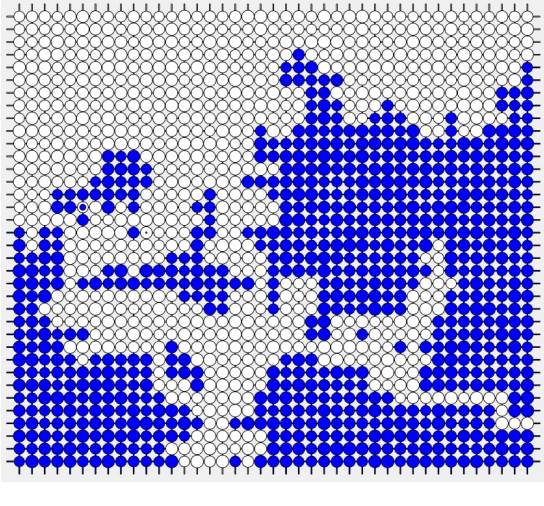
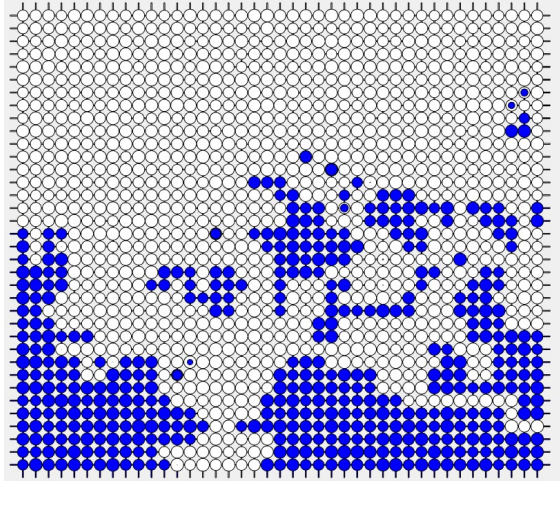
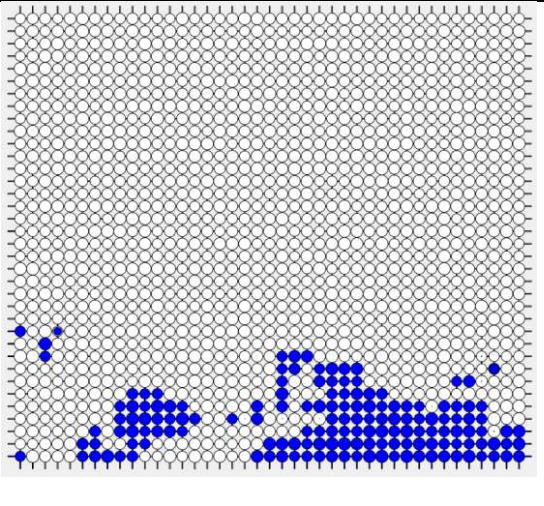
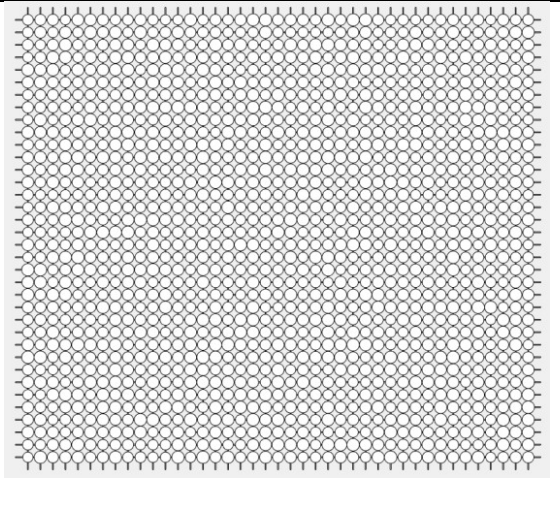
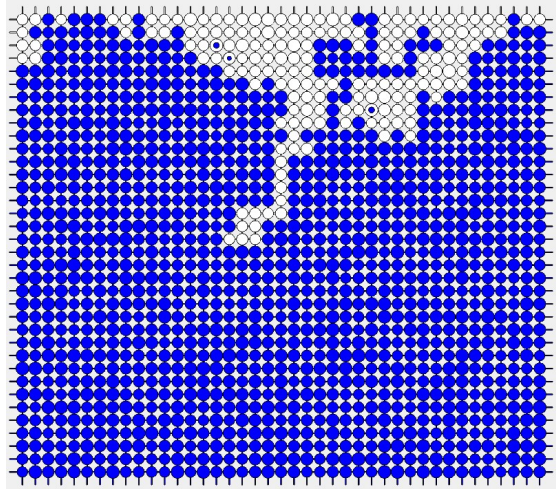
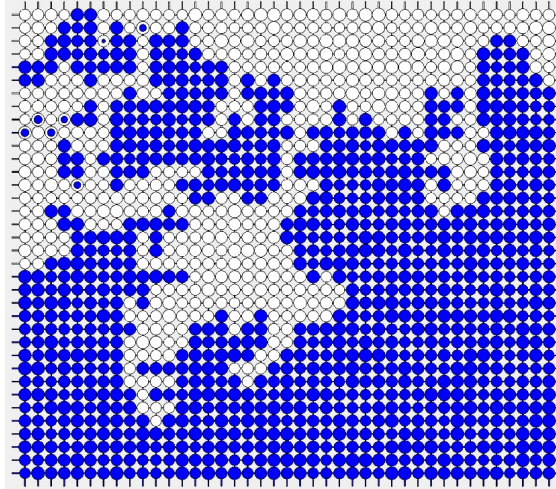
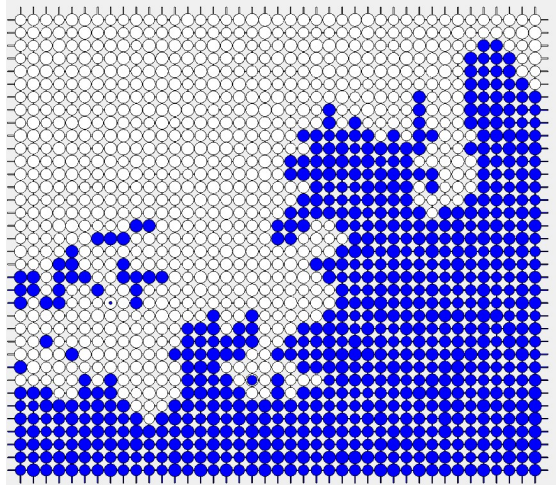
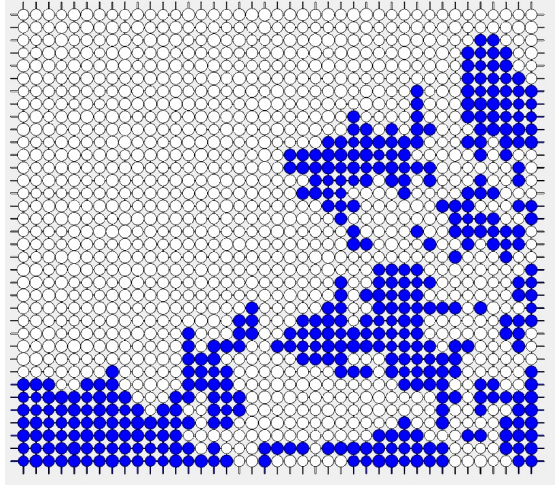
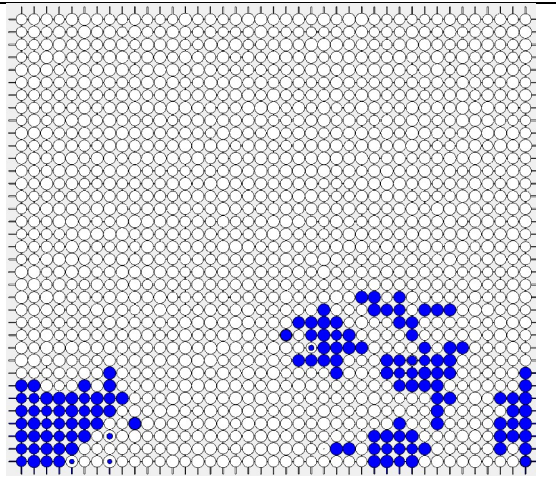
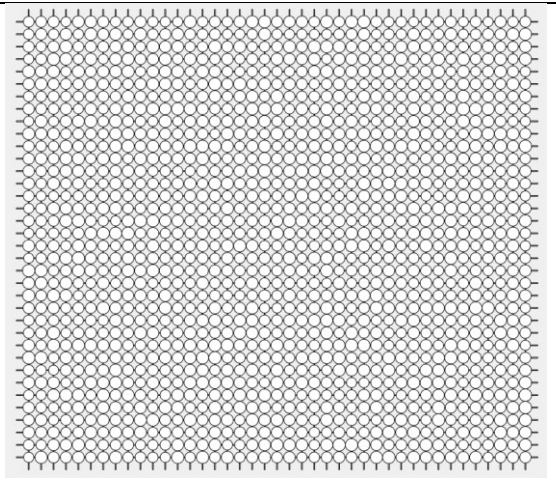
(a)		(b)	
S_{el}	0.9	S_{el}	0.7
(c)		(d)	
S_{el}	0.5	S_{el}	0.3
(e)		(f)	
S_{el}	0.1	S_{el}	0

Tableau 3- 2 : La distribution des phases d'un réseau hydrophobe $\theta = 160^\circ$ de taille $36*41$ et de porosité égale à $\varepsilon = 0.8899$, pour différentes saturations.

(a)		(b)	
S_{el}	0.9	S_{el}	0.7
(c)		(d)	
S_{el}	0.5	S_{el}	0.3
(e)		(f)	
S_{el}	0.1	S_{el}	0

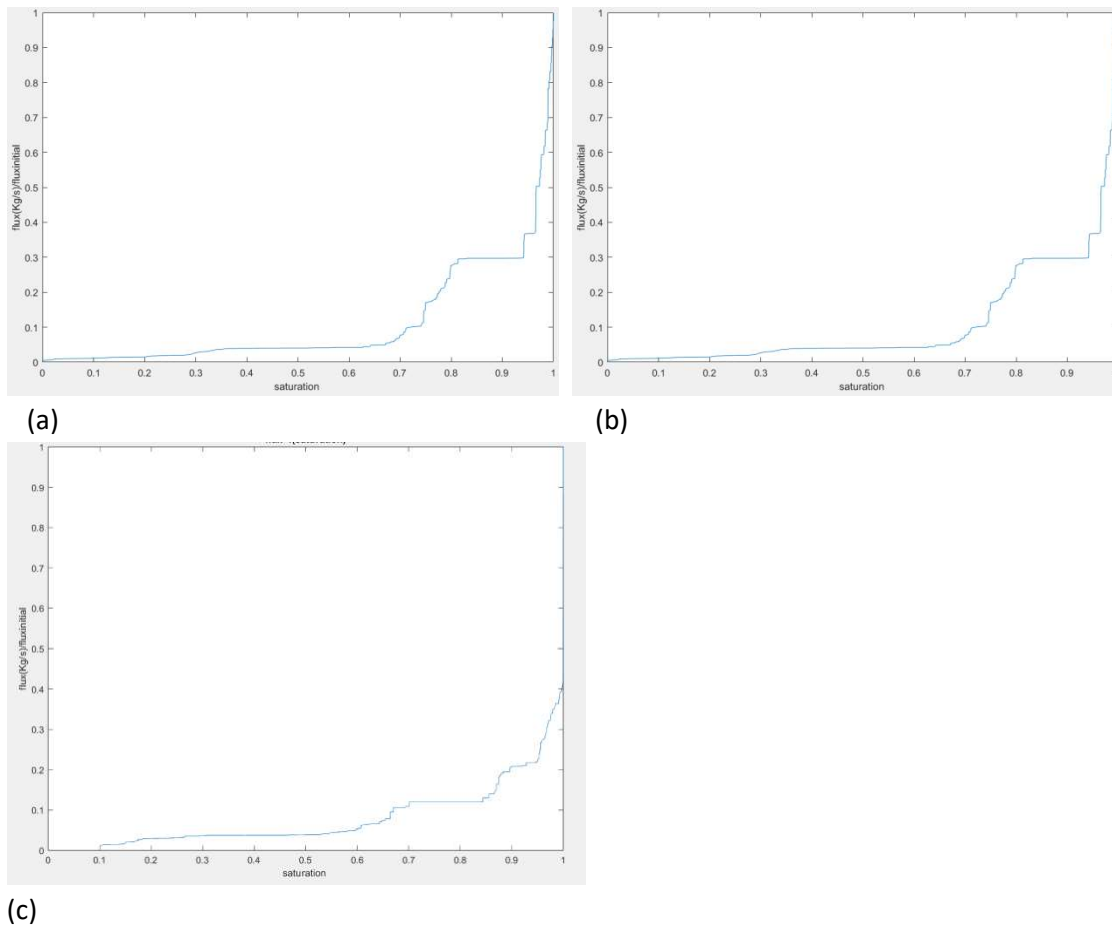


Figure 3- 1 : Courbe de séchage du réseau 36*41 de porosité $\varepsilon = 0.8899$ a) réseau parfaitement mouillant $\theta = 0$ b) réseau hydrophile $\theta = 30$ c) réseau hydrophobe $\theta = 160$.

Les cinétiques de séchage (ou courbes de séchage), représentée par la figure 3-1, portent en abscisse la saturation du réseau en liquide et en ordonnées le taux d'évaporation des nœuds (Kg/s) adimensionné par le flux initial maximal. L'évolution de la courbe de séchage varie selon la mouillabilité du réseau. En effet, pour les cas parfaitement mouillant et hydrophile les courbes de séchage se coïncident comme le chemin d'invasion alors que dans le cas hydrophobe on voit que la décroissance dans la première partie est très rapide.

3.3 La gravité

Dans cette partie on va effectuer une analyse dans le cadre de la percolation d'invasion en gradient. L'étude de l'effet de gravité était présentée dans plusieurs ouvrages (de [1-3] à titre d'exemple). Le réseau étant représenté par la figure 3-2 nous mettons dans cette section l'accent sur l'influence des forces de gravité lors de l'évaporation. La pression du liquide P_l est affectée par la gravité et elle est fonction de la position de l'élément du réseau [1] :

$$(3-2)P_l(z) = (\rho_l - \rho_a)gz$$

Avec ρ_l, ρ_a Sont respectivement les masses volumiques du liquide (eau) et de l'air Kgm^{-3} , g L'accélération gravitationnelle ms^{-2} et z la hauteur (m)

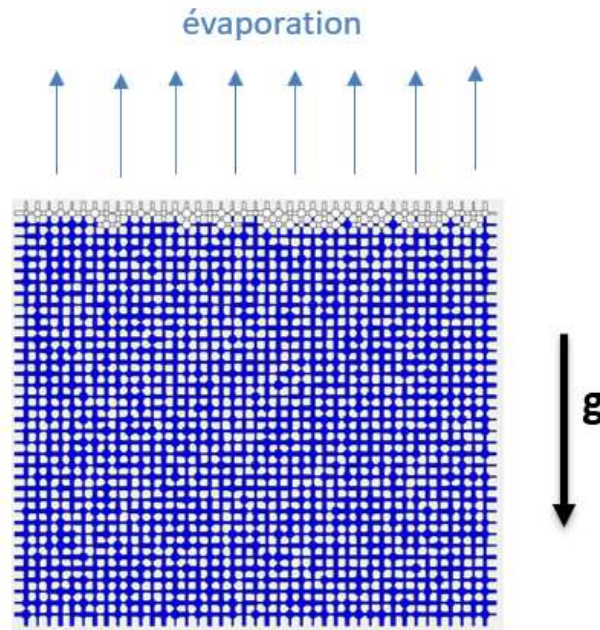


Figure 3- 2 : Schéma d'un réseau 36*41 en présence de forces de gravité

En combinat les équations 3-1 et 3-2, le potentiel φ s'écrit :

$$(3- 3)\varphi = \frac{-4 \sigma \cos(\theta)}{d} + (\rho_l - \rho_a)g$$

Dans ce cas, les éléments (pores ou liens) ayant le potentiel le plus élevé et donc situé plus haut sont envahis en premier.

Dans notre code, z est égale à 0 en haut du réseau et z est dirigé vers le bas. Considérons deux liens de diamètre d identique l'un situé à la distance z_1 du haut du réseau et l'autre à une distance $z_2 > z_1$. Dans ce cas $\varphi_{z_2} > \varphi_{z_1}$, ce qui est l'inverse du résultat recherché. Donc le potentiel doit être écrit :

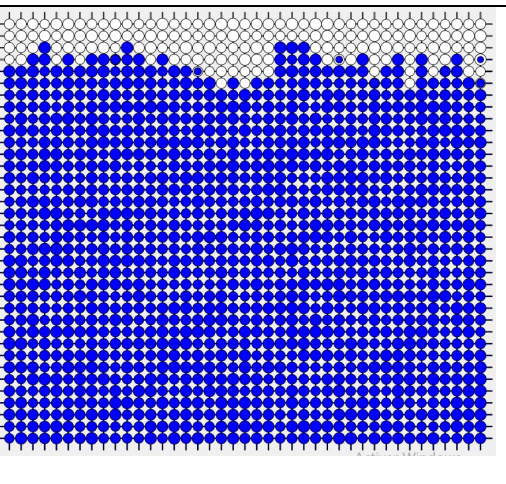
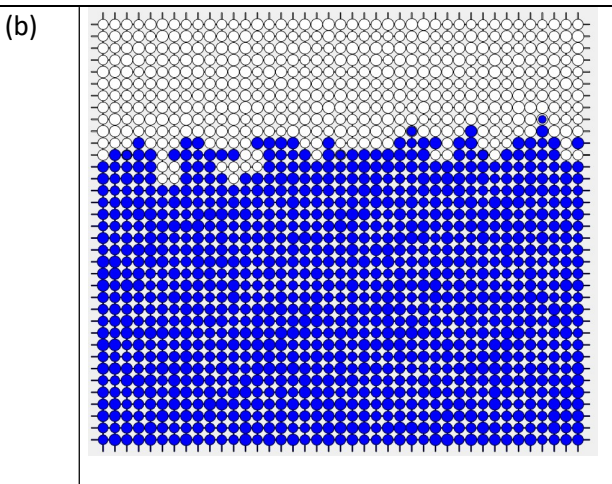
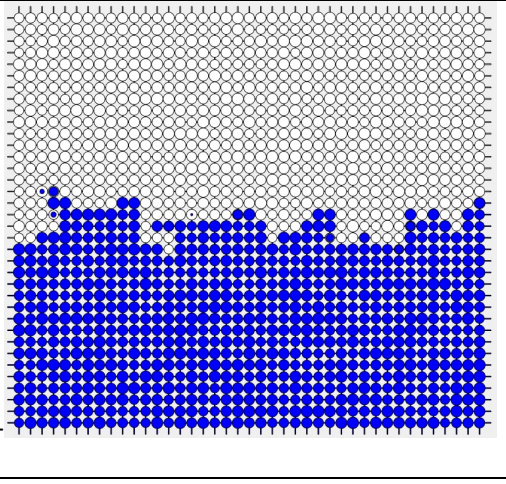
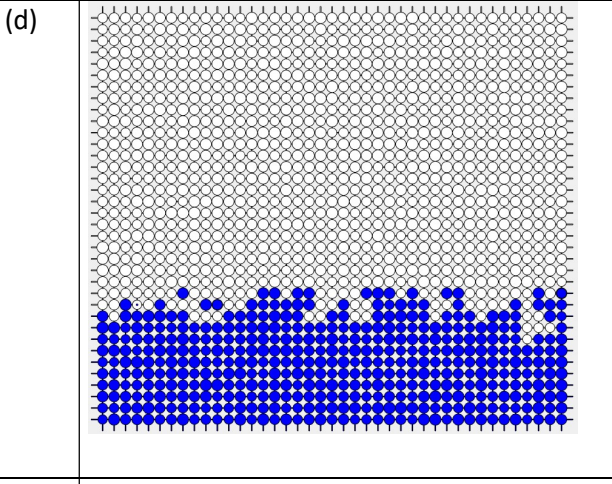
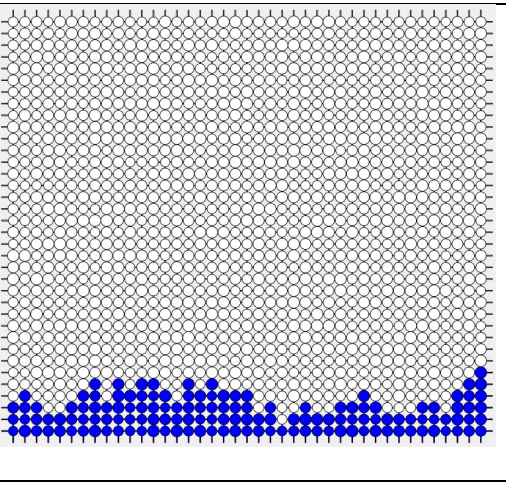
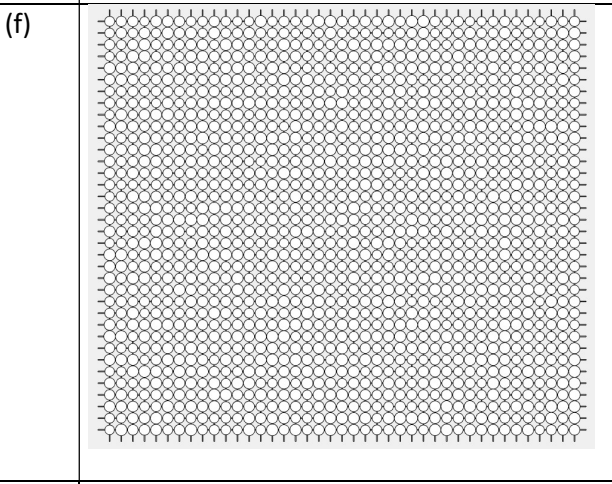
$$(3- 4)\varphi = \frac{-4 \sigma \cos(\theta)}{d} - (\rho_l - \rho_a)gz$$

L'effet de la gravité n'est pas marquant en appliquant directement l'équation 3-4 dans le code.

Afin de voir l'effet de la gravité sur l'avancement de l'interface liquide-vapeur, on a généré le même réseau étudié précédemment et avec les mêmes conditions. L'invasion suit les lois de percolation d'invasion en gradient et donc l'élément ayant le potentiel le plus grand est envahi en premier. Le comportement du front de séchage est étudié dans le cas hydrophobe du réseau de porosité $\varepsilon = 0.8899$ décrit dans la section précédente. La présence d'un gradient permet l'obtention d'un front de séchage presque plat permettant d'obtenir deux zones claires dans le réseau et fait disparaître le grand nombre d'amas piégés qui se forment lors du processus de séchage. On distingue donc du côté de la face de sortie (celle d'évaporation), une zone totalement saturée en liquide contrairement à la région supérieure du réseau (face d'entrée) qui est complètement sèche. La courbe de séchage en fonction de la saturation en liquide du

réseau est portée sur la figure 3-3. Le flux d'évaporation décroît plus rapidement en présence de la gravité ce qui favorise la mise en place de la zone sèche.

Tableau 3- 3 : : La distribution des phases du réseau hydrophobe $\theta=160$ de taille $36*41$ et de porosité $\epsilon=0.8899$, en présence d'un gradient, en fonction des saturations.

(a)		(b)	
S_{el}	0.9	S_{el}	0.7
(c)		(d)	
S_{el}	0.5	S_{el}	0.3
(e)		(f)	
S_{el}	0.1	S_{el}	0

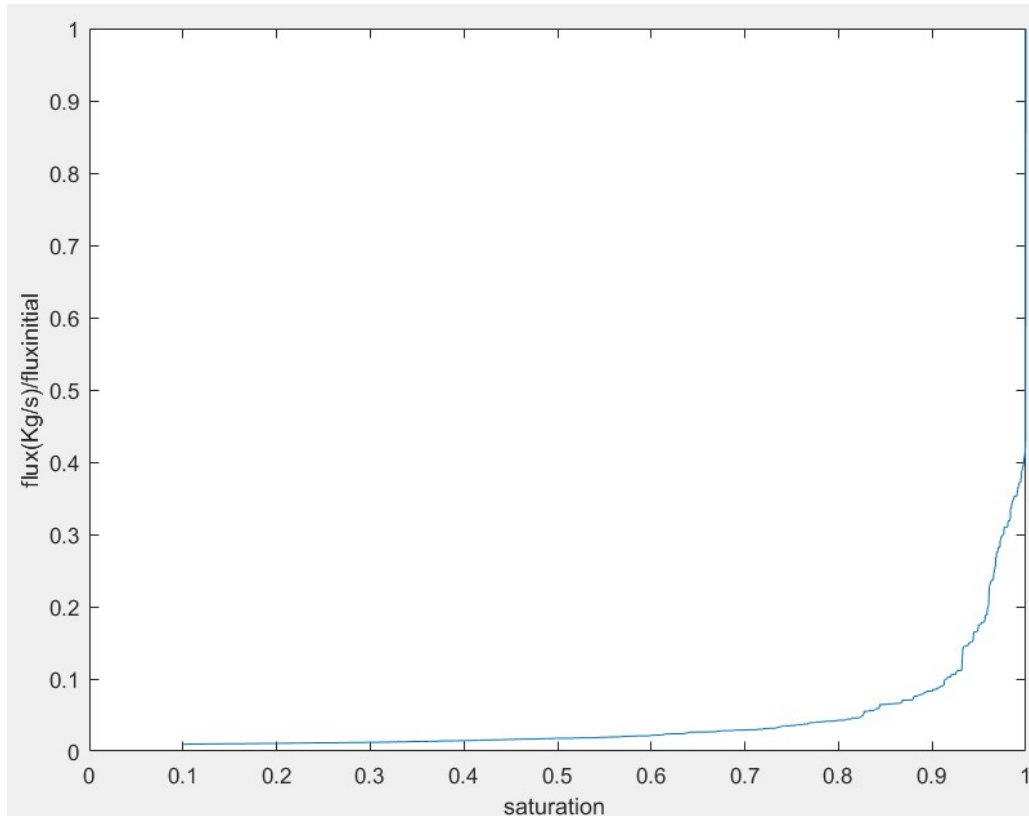
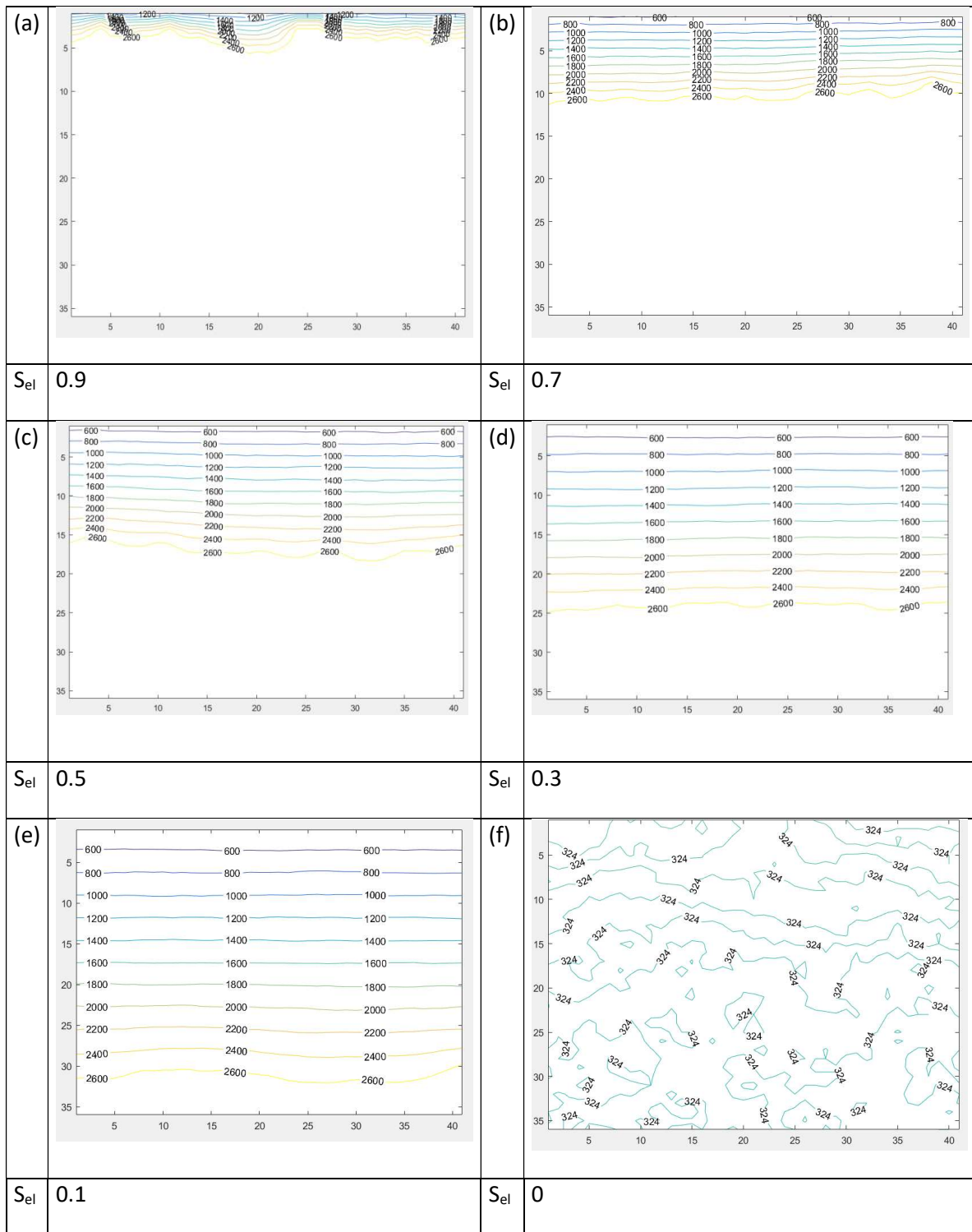


Figure 3- 3 : La courbe de séchage du réseau 36*41 de porosité 0.8899 en fonction de la saturation d'un réseau hydrophobe $\theta = 160^\circ$ et en présence de gravité.

Les lignes de pression de ce réseau hydrophobe sont présentées dans le tableau 3-4 ci-dessous où on peut clairement voir les isobares bien alignées suivant le front de séchage. Plus le front de séchage est stable et plat plus les isobares sont alignés, par conséquent le front de séchage est stabilisé par la gravité en plus de l'hydrophobicité.

Tableau 3- 4: les lignes de pression du réseau hydrophobe 36*41 avec $\epsilon=0.8899$, $\theta=160^\circ$ et en présence d'un gradient en fonction des saturations.



3.4 Etude selon l'état des voisinages

3.4.2 En absence de gravité :

L'étude de l'invasion suivant le potentiel ou la pression capillaire peut être aussi réalisée en examinant l'état des liens voisins de chaque pore du réseau. En se référant à [5-6], on a développé pour ce fait un code de séchage bidimensionnel suivant l'algorithme présenté dans ce qui suit :

- 1) Déterminer les caractéristiques géométriques et physiques du réseau et préciser la mouillabilité du réseau
- 2) Identifier les éléments (liens ou pores) contenant un ménisque (ce sont les éléments interfaciaux)
- 3) Un potentiel d'invasion φ_c est calculé pour chaque élément interfacial :
 - Une liaison interfaciale :

$$(3-5)\varphi_c = -\sigma \cos\theta \left(\frac{2}{w_t} + \frac{2}{h_t} \right)$$

Avec w_t la largeur de la liaison et h_t sa profondeur. Dans notre cas, la liaison est cylindrique d'où $w_t = h_t = d$ le diamètre de la liaison.

- Un pore :

L'invasion des pores dépend du nombre des éléments adjacents déjà envahis :

$$(3-6)\varphi_c = -\sigma \cos\theta \left(1 + 0.25(N_{voisins} - 1) \left(\frac{2}{w_p} + \frac{2}{h_p} \right) \right)$$

Avec $N_{voisins}$ est le nombre de liens voisins contenant du gaz (liens envahis) allant de 0 à 4. w_p est la largeur du pore et h_p sa profondeur. Le pore étant sphérique dans notre cas, l'équation (3-6) devient :

$$(3-7)\varphi_c = -\sigma \cos\theta \left(1 + 0.25(N_{voisins} - 1) \left(\frac{2}{r} \right) \right)$$

- 4) L'élément interfacial avec le potentiel le plus grand est identifié et le volume du liquide dans l'élément est V_l .
- 5) Résolution du système de pression et les équations des flux d'évaporation
- 6) Calculer le temps t^* nécessaire pour évacuer tout le volume V_l .
- 7) Envahir totalement l'élément identifié dans (4). Et ajuster le pas de temps total qui est $t = t + t^*$
- 8) Actualisation de la distribution des phases
- 9) Retour à (2)

3.4.3 En présence de gravité :

Dans le cadre de la théorie de percolation d'invasion, les effets de gravité ont été étudiés initialement par [4] et confirmés ensuite par la théorie de la percolation en gradient. Dans ce qui suit, nous mettons l'accent sur l'influence des forces de gravité pendant le séchage pour différentes tailles des pores et liens du réseau. Dans les milieux poreux, l'introduction des

forces de gravité est impérativement liée au nombre adimensionnel appelé nombre de Bond qui caractérise la compétition entre les forces capillaires et gravitationnelles :

$$(3- 8)B = \frac{\rho_l g L^2}{|\sigma \cos \theta|}$$

Où L est le pas de réseau. On applique le même algorithme décrit dans la section 3.4.1, ne faisant changer que la troisième instruction par l'introduction du terme gravité comme suit :

$$(3- 9)\varphi = \varphi_c \left(1 + B \frac{|\sigma \cos \theta|}{l \varphi_c} \frac{z}{l}\right)$$

Avec z la coordonnée verticale dirigée vers le haut et $z = 0$ en bas de réseau.

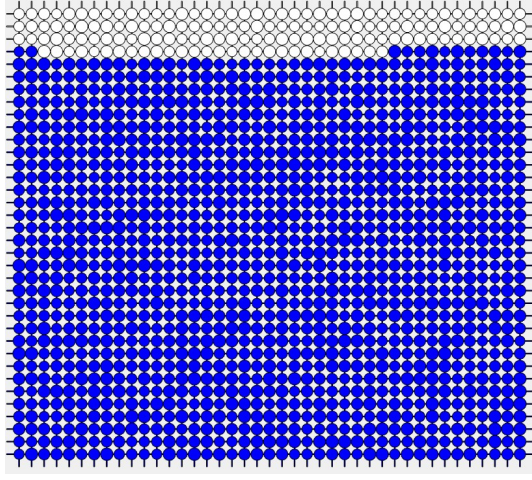
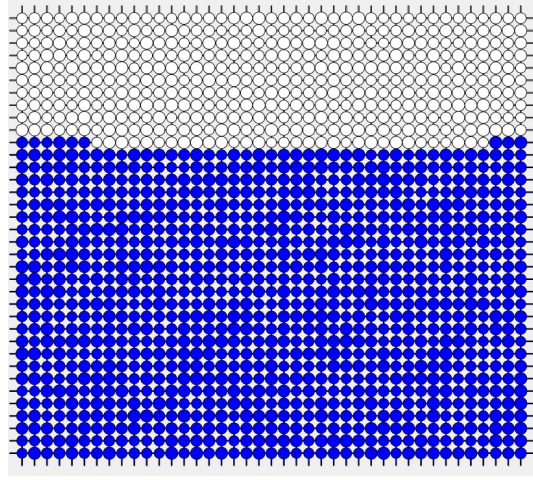
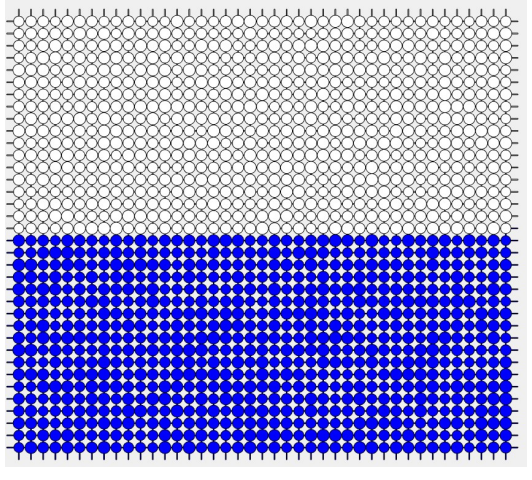
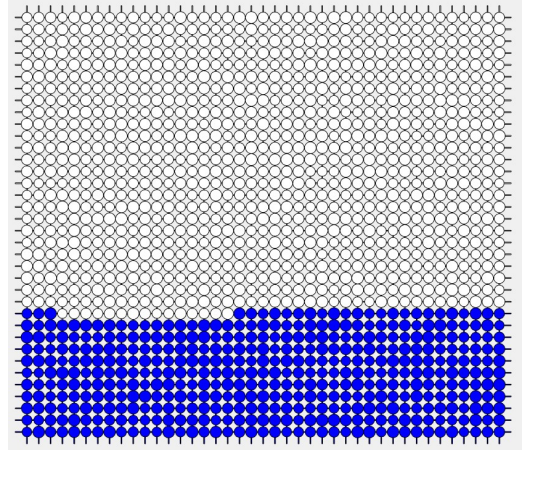
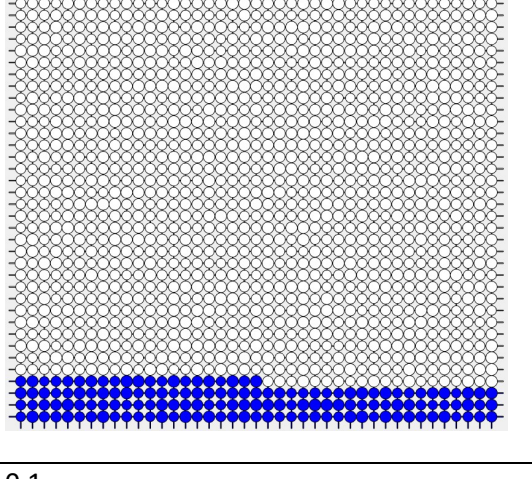
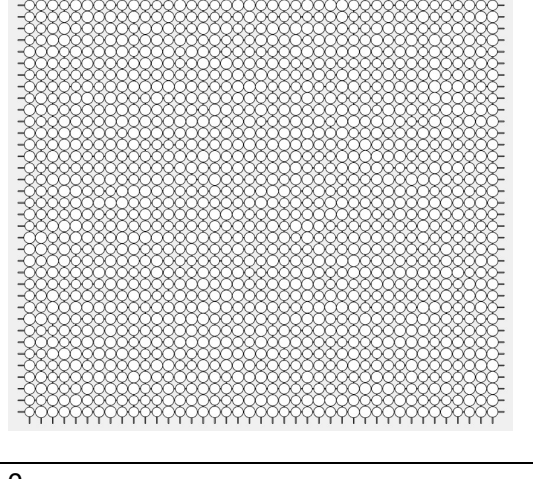
3.4.4 Simulations :

Les rayons des pores étant choisis entre 0.4 et 0.5, les diamètres des liens entre 0.13 et 0.16 et la porosité du PNM est égale à 0.8899. Les figures des tableaux 3-5 et 3-6, illustrent le développement de la zone sèche au sein du réseau avec et sans forces de gravité. La prise en compte de l'état des voisins des pores affecte considérablement l'avancement du processus d'invasion ce qui a permis d'obtenir un front de séchage plat dans les deux cas étudiés hydrophobe avec et sans gravité. Il est donc clair que tenir compte des états des voisins permet de mieux illustrer l'effet de l'hydrophobicité et le maintien du front plat par rapport aux cas hydrophobe sans et avec gravité présentés respectivement sur les figures des tableaux 3-2 et 3-3.

Tableau 3- 5 : Distribution de phase du réseau hydrophobe 36*41, avec $\theta = 160$ et $\varepsilon = 0.8899$ pour différentes saturations en absence de gravité.et en tenant compte du voisinage

(a)		(b)	
S_{el}	0.9	S_{el}	0.7
(c)		(d)	
S_{el}	0.5	S_{el}	0.3
(e)		(f)	
S_{el}	0.1	S_{el}	0

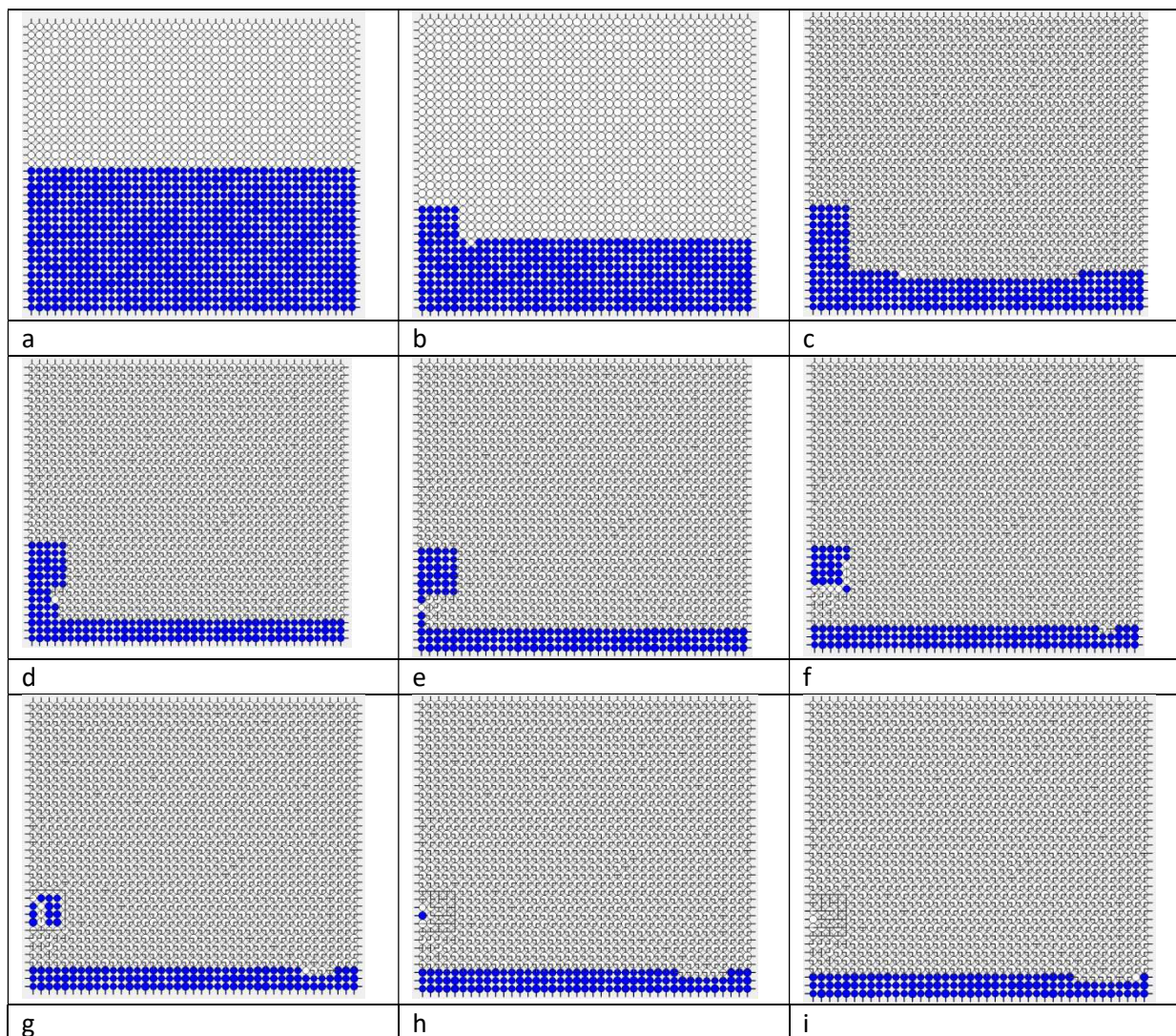
Tableau 3- 6 : Distribution de phase du réseau hydrophobe 36*41, avec $\theta = 160$ et $\varepsilon = 0.8899$ pour différentes saturations en présence de gravité.et en tenant compte du voisinage

(a)		(b)	
S_{el}	0.9	S_{el}	0.7
(c)		(d)	
S_{el}	0.5	S_{el}	0.3
(e)		(f)	
S_{el}	0.1	S_{el}	0

3.4.5 La distribution de phase dans un PNM de mouillabilité mixte

La mouillabilité d'un milieu poreux peut être uniforme (hydrophobe ou hydrophile en chaque point) ou mixte (non uniforme), où l'angle de contact est variable d'une région à l'autre. Considérons notre exemple de réseau de pores en présence de forces de gravité. On crée une zone hydrophile ($\theta = 30^\circ$) dans le réseau initialement supposé hydrophobe ($\theta = 160^\circ$). En examinant les étapes de séchage représentées par les figures du tableau 3-7, aucun élément de la zone hydrophile située presque au milieu du réseau n'est envahi avant le séchage complet de la région hydrophobe du réseau. Les potentiels de la zone modifiée, selon les équations 3-5 et 3-7 sont négatifs ($\cos(\theta = 30^\circ) > 0$) ils sont donc plus petit que les potentiels de n'importe quel élément hydrophobe. Les éléments correspondants sont donc envahis après les éléments hydrophobes. Ce cas est bien illustré sur les planches d'invasion du tableau 3-7 ci-dessous qui montre que cette zone reste piégée et est envahie vers la fin du séchage.

Tableau 3- 7 : Etapes de séchage du réseau 36*41 de porosité $\varepsilon = 0.8899$ de mouillabilité mixte



Conclusion

Ce chapitre a été consacré à la présentation des résultats de simulations des codes de séchage d'un réseau de pores suivant le potentiel en présence et en absence des forces de gravité pour les deux types de réseaux hydrophile et hydrophobe. Il a été montré que dans le cas hydrophile on a obtenu des fronts digités avec piégeage d'amas ce qui concorde avec le cas d'invasion du chapitre 2 basé sur l'invasion par rapport au rayon le plus grand. Dans le cas hydrophobe et toujours en absence de gravité, il a été démontré que le front présente encore des digitations. En l'intégrant (la gravité), le front devient plus plat et les amas piégés sont éliminés. La deuxième partie de ce chapitre est dédiée à l'étude de l'invasion en tenant compte de l'état des voisins des pores formant le réseau. Dans ce cas, avec ou sans forces de gravité, le front devient plat et lisse pour le cas hydrophobe. A la fin de ce chapitre, un cas de réseau mixte a été étudié. Il a été montré que la partie hydrophile du milieu n'est envahie que vers la fin du processus de séchage du réseau. Ces modélisations sont réalisées afin de balayer le maximum de configuration qu'on peut rencontrer expérimentalement.

Références

- [1] Y. Le Bray (1997). Contributions à l'étude du changement de phase liquide-vapeur en milieux poreux. Simulations numériques sur réseaux de pores. Thèse. Institut National Polytechnique de Toulouse.
- [2] A. G. Yiotis, I. N. Tsimpanogiannis , A. K. Stubos, Y. C. Yortsos (2006). Pore network study of the characteristic periods in the drying of porous materials. *Journal of Colloid and Interface Science* 297.
- [3] J. B. Laurindo, M. Prat (1998). Numerical and experimental network study of evaporation in capillary porous media. Drying rates. *Chemical Engineering Science*, Vol.53 No.12. pp 2257-2269.
- [4] D. Wilkinson (1984). Percolation model of immiscible displacement in the presence of buoyancy forces, *Physical Review A.*, Vol. 30, N° 1, pp. 520-531
- [5] R. Lenormand, C. Zarcone (1984), Role of roughness and edges during imbibition in square capillaries, *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*,
- [6] V. Mani, K. Mohanty (1999), Effect of pore-space spatial correlations on two-phase flow in porous media, *J. Pet. Sci. Eng.* 23 (3,4) 173

PARTIE2

Séchage en milieux poreux en
présence de sel

CHAPITRE 4

Etat de l'art de l'étude de la cristallisation et
mise en expérience

Chapitre 4 : Etat de l'art de l'étude de la cristallisation et mise en expérience

Sous l'action du sel présent en solution dans le milieu poreux, et sa cristallisation à la suite de l'évaporation, des désagréments sur le matériau sont clairement observés en visitant les monuments et les sites historiques ou encore sur les roches. L'haloclastie est le terme utilisé pour définir le processus de dégradation de la roche poreuse par la cristallisation particulièrement rencontrée dans les zones côtières, (figure 4-1(a)) et les déserts marqués par le climat aride (figure 4-1(b)). A l'échelle macroscopique, l'altération du matériau peut être effrité (flaking) ou réduit en poudre. Les alvéoles, créés à la surface du matériau, sont aussi appelés tafonias (figure 4-1) correspondant aux cavités formées dans la roche. Ces altérations sont décrites dans [2] où des théories sont exposées sur les différents mécanismes menant à leur formation.



(a)



(b)

Figure 4- 1 : (a) Les tafonias du Cap de Creus (Espagne) (photos de Pierre thomas 2010). (b) Vallée de la lune, San Pedro, Chili où il ne pleut quasiment jamais. Les dépôts de sel sont représentés par les traces blanches. Photo de Bruno Gubian.

La fissuration, l'écaillage, l'alvéolisation (représentés par la figure 4-2) et la pulvérisation sont des types d'altération issus de la présence des sels dans les matériaux [1]. Les dégradations provoquées ont un impact non seulement économique mais aussi culturel en étant à l'origine des pertes des sites historiques datant de plusieurs millénaires.



(a)



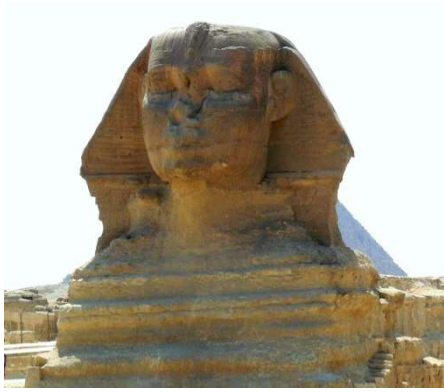
(b)



(c)

Figure 4- 2 : (a) fissuration (@B. Leclère (Leclère 2021)),(b) écaillage (Motomachi Buddha, Oita, Japon) (@H. Derluyn)et (c) alvéolisation (cathédrale de Santander, Espagne) (@B. Leclère (Leclère 2021)) [1].

L'action des sels est aussi manifestée sur les constructions, les monuments historiques, les sculptures et les fresques en proies [8] citons par exemple le sphinx de Giza sur la figure 4-3 et le site de Pétra en Jordanie [2]. En effet, la géométrie des monuments, les conditions environnementales (température et humidité) et l'apport externe d'eau ou de sel rendent l'analyse des désagréments plus complexe. Aucune mesure de prévention ou de conservation ne peut malheureusement être prise pour ralentir ou éviter la détérioration de ces sites.



(a)



(b)

Figure 4- 3 : (a) le sphinx de Giza (@ wikipedia) (b) le site de Pétra en Jordanie (<https://lumieresdelaville.net/>).

Ces phénomènes sont étudiés depuis des années citons par exemple l'ouvrage de référence de Goodie et Viles [2], Scherer [3-4], Steiger[5-6], Gagliardi et Pierre-Louis[7] etc. Le processus, d'une manière générale, peut être divisé en quatre parties [8] partant de la contamination du milieu, le transport des sels dissous, la cristallisation des sels et les contraintes et l'altération exercé sur le milieu.

Les sources des sels présents dans le milieu poreux peuvent être internes et externes [2][8]. Ils peuvent naturellement se trouver dans le milieu. L'insertion de l'eau va dissoudre les sels qui vont se déplacer puis se recristalliser sous certaines conditions et endommager donc la matrice poreuse, citons l'exemple classique de la brique mal cuite.

Des taches blanches comme illustrée par la figure 4-4, sont fréquemment observés sur les façades en briques. Ce sont des cristaux de sel formés à la surface du matériau appelés efflorescences.



Figure 4- 4 : L'efflorescence sur la façade d'un bâtiment (site : <https://www.avantage-plus.com/>).

Quant aux sources externes des sels, certaines sont naturelles tel que l'air marin [8] (transportant les gouttelettes de l'eau de mer, les poussières des déserts et les sels provenant du sol). En effet, lorsque les gouttelettes d'eau salée sont déposées sur le milieu poreux, elles y pénètrent et les sels vont se dissoudre et y entrent. Ils vont par la suite se recristalliser en profondeur sous l'effet de l'évaporation ce qui va éventuellement endommager le milieu.

L'activité humaine est aussi une source externe des sels [2], citons par exemple l'irrigation de la terre. Le sol, humidifié en profondeur, instaure une continuité hydraulique qui permet aux sels de remonter à la surface [1]. L'évaporation, qui peut avoir lieu, favorise le transport des sels et augmente progressivement la salinité du sol. Cette dernière est l'une des principales causes de contaminations et de stérilisation des sols provoquant leur érosion et désertification (voir la figure 4-5). En relation avec le réchauffement climatique [1][9], ce phénomène s'accélère et s'étend sur des plus grandes surfaces.



(a)



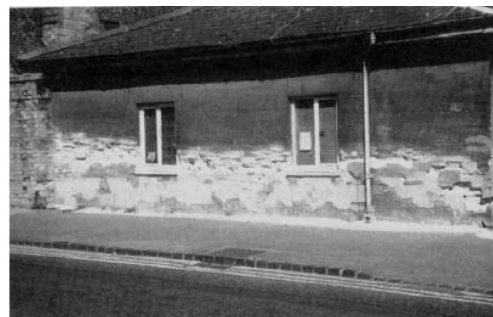
(b)

Figure 4- 5 : La désertification du bassin Murray-Darling en Australie (photo de CC: squigglycircle). (b) salinité du sol des champs, vallée de la californie, USA (photo de scott Bauer , <https://www.encyclopedie-environnement.org>).

Le salage des routes est aussi une origine externe des sels dans le sol et les constructions. Au contact avec la pluie (ou la neige), le sel va se dissoudre et pénétrer dans le sol (ou les matériaux de voisins de ces zones). En général, les effets du salage hivernal se manifestent par la détérioration des parties inférieures des bâtiments. En général, les effets du salage hivernal se manifestent par la détérioration des parties inférieures des bâtiments et le vieillissement de la végétation avoisinante par une concentration excessive de sel dans le sol. Cet impact est illustré par la figure 4-6 ci-dessous.



(a)



(b)

Figure 4- 6 : Dommages causés par le salage hivernal des routes et des trottoirs sur la végétation [8].

L'existence des sels dissous dans un milieu poreux présentent un risque majeur illustré en partie par les exemples, évoqués précédemment, de sources de contamination. Cette dernière est un sujet de recherche en soi et amplement abordé dans la littérature. L'analyse et la compréhension de ses processus permet éventuellement de proposer des mesures de prévention afin de réduire les attaques des sels.

L'évaporation en présence de sel dans les milieux poreux et sa cristallisation pose aussi d'autres problèmes tel que par exemple le stockage de CO₂ dans un aquifère. C'est une technique avec laquelle on souhaite limiter, dans l'atmosphère, l'accumulation des gaz à effet de serre. Les conditions d'injectivité des puits est l'une des enjeux liés à cette technique [10]. En effet, l'injection du CO₂ (figure 4-7) provoque l'évaporation de l'eau saline présente dans le sol donc une éventuelle précipitation des ions initialement dissous dans l'eau perturbera le fonctionnement des puits d'injection par l'obstruction des pores et la baisse de la perméabilité.

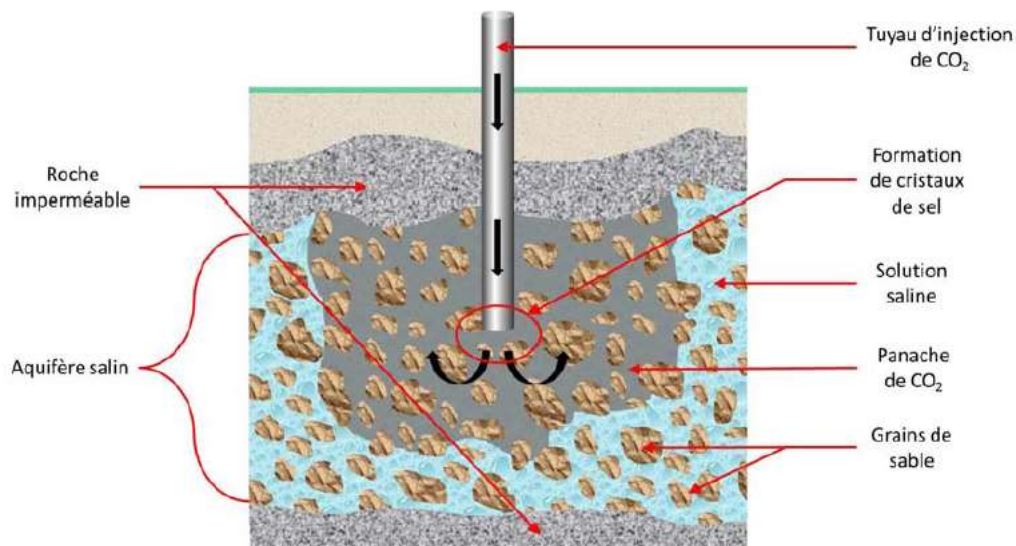


Figure 4- 7 : Schéma d'injection de CO₂ dans un aquifère salin. Lors de l'injection [11].

Un milieu poreux peut également se détériorer sous l'action combinée de plusieurs mécanismes. Prenons l'exemple de l'érosion costale conséquence de l'action des sels et l'érosion mécanique en même temps les dégradations hivernales résultent aussi de l'action des sels et du gel.

Néanmoins, l'évaporation dans les milieux poreux riche en sels peut être utile dans différentes applications parmi lesquelles la récupération des métaux en utilisant la cristallisation. Elle consiste à imbiber les métaux dans les résidus miniers avec une solution saline et les évaporer par la suite [12]. En effet, un écoulement est conduit vers la surface du milieu poreux et par lequel les espèces en solution sont transportées et les sels qui y sont présents se cristallisent sur la surface et les métaux étant piégés dans l'efflorescence (la structure de sel formée à la surface), pour les récupérer il suffit de les extraire et les dissoudre [1].

Le dessalement solaire thermique de l'eau est aussi une application faisant intervenir l'évaporation d'une solution saline dans les milieux (nano) poreux [13] [1]. Il est crucial de générer de l'eau propre indépendamment des énergies fossiles par le dessalement de l'eau de

mer non seulement afin de répondre à la demande ascendante et excessive en eau potable, mais aussi à la transition énergétique et la production d'hydrogène par électrolyse.

4.1 Le transport d'eau en milieu poreux en présence des ions de sels :

Discuté déjà dans la première partie de ce manuscrit, l'eau dans un milieu poreux se transporte soit sans changement de phase (drainage/imbibition...) soit avec changement de phase (séchage). En effet, l'intervention des écoulements sans changement de phase est généralement avant les problèmes de dégradation liés aux sels (situés au niveau souterrain). Le pompage des eaux des nappes phréatiques peut conduire à une baisse considérable de leur niveau compensée probablement par l'arrivée d'une eau salée qui augmentera lentement la concentration des sels dans la nappe et la contaminer. Utilisée ultérieurement pour l'irrigation, cette eau va altérer la qualité du sol et augmenter sa teneur en sel (prenons comme exemple la nappe sénégal-mauritanienne qui est latéralement contaminée [14]). L'imbibition par remontée capillaire de l'eau à partir du sol et son drainage (déplacement inverse) par la suite quand le niveau d'eau s'abaisse, est un exemple classique de la dégradation du matériau par les sels [8]. En ce qui concerne le transport avec changement de phase et en présence des sels dissous, les principaux changements d'états liquide-vapeur à intervenir sont : évaporation-condensation, adsorption et absorption. Les cristaux de sel sont formés à la suite de l'évaporation, bien que la condensation, le phénomène inverse, entrainera la déliquescence de ces cristaux. C'est la dissolution d'un cristal par absorption des molécules de vapeur d'eau dans l'air à sa surface. La solidification peut aussi être couplée à la cristallisation des sels provoquant ainsi des dégâts sur la matrice solide [15-16]. Dans le présent travail on ne s'intéresse qu'à l'évaporation d'eau en présence de sels dissous.

Dans un milieu poreux le sel ne se déplace que sous sa forme dissoute. Au cours de séchage le transport des ions se fait par advection et diffusion massique en régime transitoire [17]. L'évaporation induit un écoulement du liquide vers la surface. Au niveau du front de séchage, sous l'effet advectif de l'écoulement, les ions vont s'y accumuler et se cristallisent (formation des efflorescences). L'effet diffusif des ions va s'opposer à l'advection dans le but d'homogénéiser la distribution des ions dans le milieu et mener à la formation des cristaux à l'intérieur du milieu (subflorescence).

4.2 La cristallisation :

L'analyse de la croissance des structures de sel au sein des milieux poreux sur le plan mécanique est généralement traitée dans le cadre de 'la poromécanique macroscopique' (voir les chapitres 4 et 6 de [1]) à l'échelle des pores. Cette croissance est aussi couplée à différents processus comme :

- Le transport des sels dissous.
- Les aspects physicochimiques (les équilibres thermodynamiques complexes caractérisant les solutions, (voir les chapitres 1,7 et 8 de [1]))
- Les phénomènes de précipitation-dissolution.
- Les relations de dépendances entre les propriétés (tension de surface, mouillabilité, etc...) et la concentration en sel [19].

La cristallisation et les phénomènes associés peuvent être étudiés à différentes échelles commençant par l'échelle de pore, l'échelle de réseau de pore, l'échelle de Darcy et l'échelle des formations souterraines [1]. Cependant, on n'a pas encore réussi à développer rigoureusement un modèle à une échelle donnée (l'échelle de Darcy par exemple) par l'utilisation des techniques de changement d'échelle de modèles à une échelle inférieure (échelle des pores). Actuellement, les travaux se développent séparément à chaque échelle.

A l'échelle porale, on n'arrive pas encore à comprendre complètement les processus conduisant à l'altération des milieux poreux. En effet, lorsque les contraintes générées par la croissance des cristaux de sel sur la matrice solide deviennent supérieures à ce que celle-ci peut supporter, elle se dégrade. Quand ces détériorations s'installent sur une grande zone [20], elles engendrent progressivement les dégradations précédemment évoquées à l'échelle macroscopique (voir les figures de 4-1 à 4-6). L'importance des dégâts occasionnés dépendent du milieu poreux et de la nature des sels dissous.

Les changements de température ou l'évaporation fait accumuler les sels dissous à l'interface déclenchant sa cristallisation.

L'évaporation provoque l'augmentation de la concentration des sels dans le milieu poreux par advection ou/et rétrécissement de volume jusqu'à atteindre une valeur seuil de concentration appelée concentration de saturation et la cristallisation se déclenche ainsi.

4.3 Le sel

La mise en évidence de la cristallisation se fait généralement expérimentalement sur des milieux poreux initialement saturés par une solution saline dont le sel choisi est le chlorure de sodium NaCl utilisé dans la majorité des applications se rapportant à notre étude. Le NaCl est choisi principalement pour son caractère anhydre et sa solubilité faiblement dépendante de la température (voir le chapitre 5). La solubilité de ce sel [19] correspond à la fraction massique (grammes de NaCl pure par 100g de solution) égale à 0.26.4 à $T=20^{\circ}\text{C}$. Le chlorure de sodium est également présent dans plusieurs situations réelles de détériorations simultanément avec d'autres sels, d'où vient la complexité des phénomènes de transport. Par ailleurs, les travaux de [30] ont mis en évidence le potentiel destructeur du chlorure de sodium résultant de la cristallisation à l'intérieur du milieu contrairement à ce qui était prouvé, au niveau du laboratoire, par d'autres études qui limitent les dégâts générés par le NaCl [28] malgré sa présence dans les processus de dégradation réels [29].

4.4 Les efflorescences

La cristallisation peut se produire à la surface de l'espace poral sous la forme d'efflorescences dont les détériorations provoquées ne sont pas remarquables [18] mais elles sont nettement observables sur les matériaux comme sur la figure 4-4. Cependant, l'effet des efflorescences est désastreux si la surface du milieu en question est une fresque provoquant ainsi sa détérioration [21]. La compréhension des éléments favorisant la cristallisation et affectant la localisation de ces structures cristallines est nettement essentielle et parfaitement étudiés dans [8] [21-24].

La croissance de ces structures poreuses isolées et saturées [23] est contrôlée par le flux d'évaporation [22], se fait par dépositions successives des couches de sel sur leurs parties supérieures. L'efflorescence se forme d'abord à la périphérie de la surface de l'échantillon (où le flux d'évaporation est plus élevé) [22-24] puis au centre (faible porosité de la région centrale) [24]. Etant poreuse, elle pompe par capillarité la solution aqueuse et forme une surface d'échange entre le MP et l'air environnant [25]. Les conditions expérimentales font varier la morphologie des efflorescences. Il existe deux types d'efflorescences : chou-fleur ou croute [22].

Les efflorescences de types chou-fleur sont des structures individualisées entre lesquelles la surface du milieu poreux est visible, illustrées par la figure 4-8 (a). Elles sont contrôlées par un flux d'évaporation relativement faible et la taille assez grande des pores formant l'espace poral. La structure de l'efflorescence croute couvre toute la surface du milieu, (voir la figure 4-8(b)). Sa formation est contrôlée par le flux d'évaporation élevé et la petite taille des pores. Les croûtes salines limitent, voire bloquent le processus d'évaporation. Elles présentent une barrière à la diffusion. En augmentant le flux d'évaporation par la température, l'efflorescence peut devenir croute même avec des billes de grande taille. Celle-ci peut devenir également chou-fleur avec des billes de petite taille en limitant le flux d'évaporation et ce en augmentant l'humidité relative [23].



Figure 4- 8 : (a) Efflorescence chou-fleur. (b) Efflorescence croute [27].

4.5 Les subflorescences

En revanche, la structure cristalline est susceptible aussi de se développer à l'intérieur du milieu, on parle dans ce cas de la formation des subflorescences ou crypto-florescences. Nettement plus destructives, les cristaux de sel formés au sein des pores exercent des contraintes sur la matrice solide ce qui provoque incontestablement la détérioration du milieu. La notion de pression de cristallisation est l'une des théories par laquelle on a expliqué la dégradation de la matrice solide quand la subflorescence croit. Thermodynamiquement, la pression de cristallisation P est définie par [26] :

$$(4-1) P = \frac{RT}{v} \ln \left(\frac{c}{c_{sat}} \right)$$

Où v est le volume molaire du cristal, c est la fraction massique de la solution saturant le milieu et c_{sat} est la solubilité

L'étude de la pression de cristallisation et par la suite le coté thermodynamique de la cristallisation a été développé par plusieurs auteurs comme [26] [5-6] [3] et [1].

4.6 L'expérience

On considère un milieu poreux bidimensionnel constitué d'une monocouche de billes de verre de 1 mm de diamètre, comme illustré dans la figure 4-9 réparties aléatoirement entre deux plaques de verre. Ce type de micromodèle est initialement introduit par [27] et développé ensuite par [31].

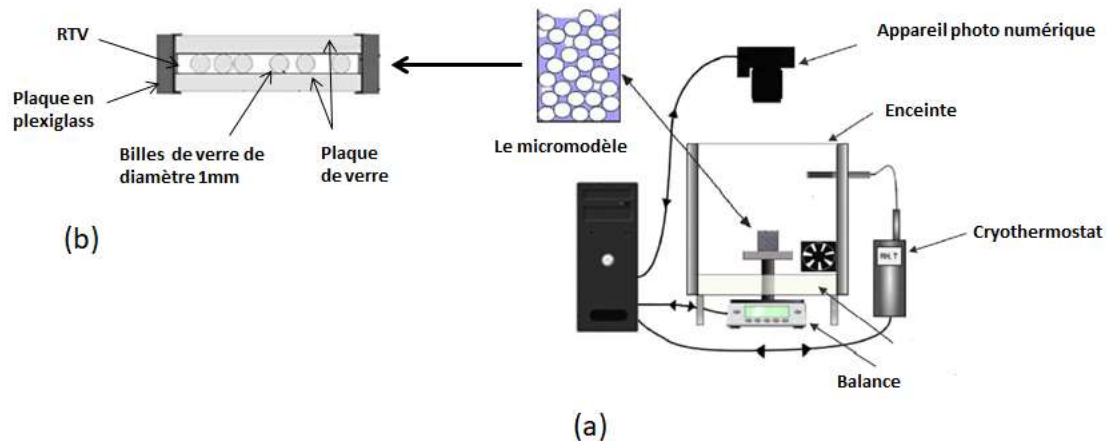


Figure 4- 9 : (a) Banc expérimental conditionné en température et humidité relative [31]. (b) Coupe transversal du micromodèle [27].

La plaque de verre supérieure et les billes de verre sont rendues hydrophobes par silanisation, un processus qui conduit à un angle de contact de l'ordre de $107-110^\circ$, quelle que soit la concentration en NaCl [35]. La plaque inférieure est recouverte d'un film d'élastomère de silicone (RTV). Ce revêtement permet l'adhérence des billes sur la plaque de fond. La RTV fraîche est hydrophobe mais la RTV perd son hydrophobicité après immersion dans l'eau et devient hydrophile [36]. Trois bords latéraux sont scellés avec du RTV et le quatrième bord, la face supérieure, est laissé ouvert permettant ainsi l'évaporation. Comme illustré sur la figure 4-10, le RTV, assurant l'étanchéité, envahit le micromodèle sur une bonne distance à partir des bords. Il en résulte que la largeur (W) et la hauteur (H) du domaine poreux sont inférieures aux dimensions latérales du micromodèle. D'après l'analyse des images, la valeur moyenne de W sur la largeur du micromodèle est de 7,3 cm alors que sa hauteur $H \approx 6$ cm. L'ouverture a du micromodèle est inférieure au diamètre des billes puisque les billes sont partiellement noyées dans le RTV enrobant la plaque de fond. Les calculs sont effectués pour $a = 900 \mu\text{m}$, ce qui correspond à une épaisseur de revêtement RTV de $100 \mu\text{m}$.

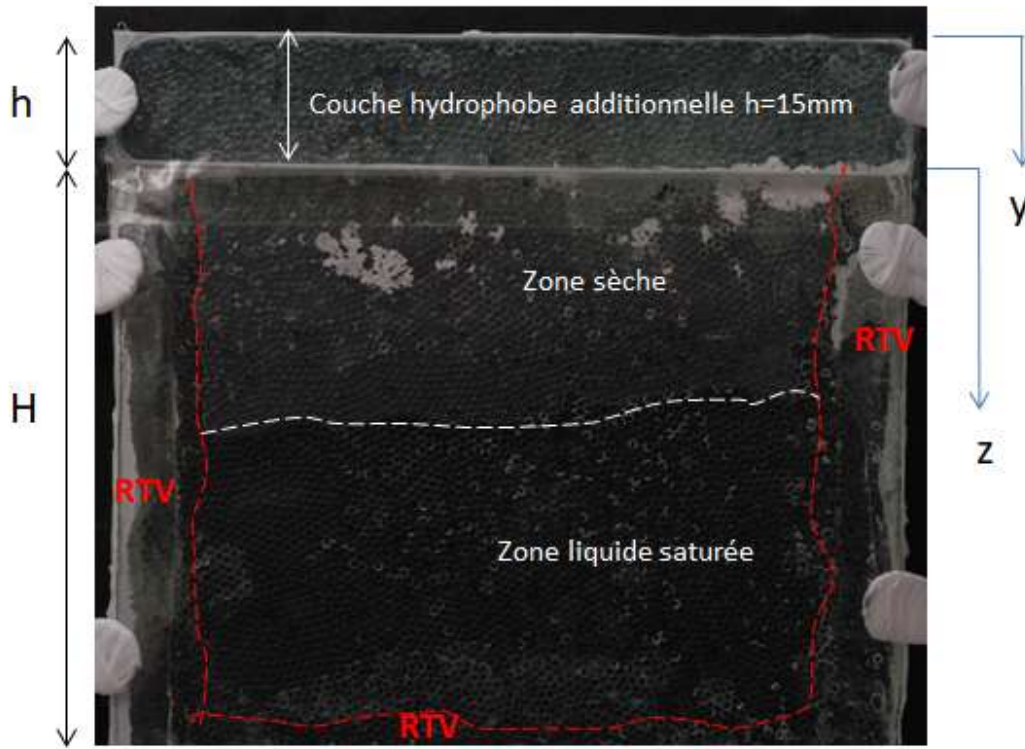


Figure 4- 10 : Micromodèle étudiée.

Dans cette étude, le micromodèle se réfère au domaine correspondant à $z \geq 0$. Comme illustré sur la figure 4-10, le système considéré dans l'expérience est l'ensemble du micromodèle et d'une couche hydrophobe supplémentaire par-dessus. Cette couche est similaire au micromodèle (billes de verre hydrophobes de 1 mm prises en sandwich entre deux plaques, l'une des plaques étant revêtue de RTV). Elle est de 15 mm de haut et non saturée en solution lorsque le séchage commence. Ainsi, le front de séchage est positionné à $z = 0$ à $t = 0$ c'est-à-dire à l'interface micromodèle-couche additionnelle. Le but de la couche supplémentaire ajoutée est d'éviter la formation d'efflorescence. Le micromodèle est initialement entièrement saturé par une solution aqueuse de chlorure de sodium. La fraction massique initiale de la solution est égale à 0,25 (proche de la solubilité (0,264)). L'ensemble est maintenu verticalement. Il est placé dans une chambre transparente en plexiglas à température contrôlée $T = 22 \pm 1^\circ\text{C}$. L'humidité relative HR dans la chambre est stabilisée à l'aide d'une solution saturée en $LiCl$ ($HR = 12\%$). L'humidité relative et la température près de la face ouverte de l'ensemble sont enregistrées lors des expériences à l'aide d'un capteur (Kimo VT300) connecté à un PC et aucune évolution notable n'est observée. L'évolution du poids du modèle pendant le séchage est mesurée avec une balance de précision $0.01g$, connectée au PC, tandis que l'évolution de la répartition des phases dans le milieu poreux est enregistrée à l'aide d'une caméra CCD Nikon D100 (3008×2000 pixels) fixée sur le côté de la chambre. Cet appareil photo est utilisé avec le logiciel d'acquisition Nikon Capture control (version 3) et synchronisé avec un flash Elinchrom 300s. Les images ont été nominalement prises toutes les 15 minutes, mais en raison de problèmes techniques, des interruptions se sont produites, de sorte que le temps écoulé entre deux images était parfois beaucoup plus long.

4.7 Contexte de travail :

Comme dans plusieurs ouvrages précédents [27] [31-34], l'expérience est réalisée dans un modèle de milieu poreux quasi bidimensionnel. Le principal avantage bien connu de ce type de micromodèle, est la visualisation optique directe des phénomènes se produisant dans l'espace des pores. Les connaissances tirées de ces observations peuvent aider à élaborer des modèles et/ou servir de guide pour les enquêtes sur des milieux véritablement poreux. Le micromodèle, décrit dans le chapitre suivant, est similaire à celui utilisé dans [27] et [31]. Dans [27], l'accent a été mis sur l'analyse du développement de la principale subflorescence (une subflorescence développée presque sur toute la hauteur du micromodèle).

Dans le chapitre 5¹, on a étudié l'interaction entre le déplacement de l'interface liquide gaz lors de l'évaporation pour une situation de séchage, caractérisée par un front de séchage récessif, et la précipitation de sel par la formation de différents types de subflorescence. Dans le chapitre 6, nous allons poursuivre le travail de [27] en s'intéressant numériquement à la croissance de la subflorescence principale. L'expérience a révélé un développement de la subflorescence dans la région sèche du milieu poreux. La combinaison des analyses des images et des calculs numériques a montré que la croissance est directement liée à la distribution du flux d'évaporation le long de la frontière de la structure de sel. Notre contribution intervient justement dans la simulation numérique de cette croissance par le biais d'un algorithme spécifique développé.

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté les phénomènes dégradants de la cristallisation du sel. et les mots techniques relatifs aux structures des sels. Nous avons présenté une expérience antérieurement réalisée par notre équipe et sur laquelle nous allons baser notre étude en tant que modèle de validation

¹ Article publié : sodium chloride crystallization in a model porous medium during drying with a receding sharp front. Oumayma Fekih, Nour Sghaier, Mohamed El Amine Ben Amara, Marc Prat. *Physics of fluids*. (2024)

Références

- [1] H. Derluyn, M. Prat. (2023). *Cristallisation de sels en milieu poreux*. ISTE Editions.
- [2] A. Goudie, H. Viles, (1997). *Salt weathering hazards*. Wiley, New York.
- [3] G. W. Scherer (1999). Crystallization in pores. *Cement and Concrete Research* 29 : 1347–1358.
- [4] G.W. Scherer, R.J. Flatt, F. Caruso, A.M.A. Sanchez, (2014). Chemo mechanics of salt damage in stone, *Nature Com.*, 5, 1–16.
- [5] M. Steiger. Crystal growth in porous materials I: The crystallization pressure of large crystals. (2005). *Journal of Crystal Growth*, 282 :455–469.
- [6] M. Steiger. Crystal growth in porous materials II: Influence of crystal size on the crystallization pressure. (2005). *Journal of Crystal Growth*, 282 :470–4481.
- [7] L. Gagliardi, O. Pierre-Louis. (2019). The nonequilibrium crystallization force. *Europhysics Letters*, 127(5), 59002.
- [8] S. Veran-Tissoires. Sur le phénomène de cristallisation discrète à la surface ou à l'intérieur d'un milieu poreux. (2011.) Thèse. Université de Toulouse.
- [9] A. Litalien, B. Zeeb, (2020). Curing the earth: A review of anthropogenic soil salinization and plant-based strategies for sustainable mitigation. *Science of the Total Environment*, 698(1), 134235.
- [10] Y. Peysson, L. André., M. (2014). Well injectivity during CO₂ storage operations in deep saline aquifers—Part 1: Experimental investigation of drying effects, salt precipitation and capillary forces. *Int. J. of Greenhouse Gas Control*, 22,291–300.
- [11] M. Mauricio Duenas Velasco. Evaporation en milieu poreux en presence de sel dissous. *Structure et lois de croissance des efflorescences* (2016). Thèse, Université de Toulouse.
- [12] V. Cala-Rivera, J.C. Arranz-González, V. Rodríguez-Gómez, F.J. Fernández-Naranjo, (2018). A preliminary study of the formation of efflorescent sulfate salts in abandoned mining areas with a view to their harvesting and subsequent recovery of copper. *Minerals Engineering*, 129, 37–40.
- [13] X. Wang, M.L Hsieh, , J.A Bur, S.Y Lin, , S. Narayanan (2020). Capillary-driven solar-thermal water desalination using a porous selective absorber. *Mater. Today Energy*, 17, 100453.

- [14] J.Y. Loyer (1991). Salinité des eaux d'irrigation. Problèmes et solutions. In Conférence I.A.M, Bari, Italie, 25-26 Juillet.
- [15] Z. Sun and G. W. Scherer (2010). Measurement and simulation of dendritic growth of ice in cement paste. *Cement and Concrete Research*, 40 :1393–1402.
- [16] A. S. Goudie.(1999). A Comparison of the Relative Resistance of Limestones to Frost and Salt Weathering. *Permafrost and Periglacial Processes*, 10 :309–316.
- [17] N. Sghaier, M. Prat, and S. Nasrallah (2007). On ions transport during drying in a porous medium. *Transport in Porous Media*, 67(2) :243–274.
- [18] C. Rodriguez and E. Doehne (1999). Salt weathering: influence of evaporation rate, supersaturation and crystallization pattern. *Earth Surface Processes and Landforms*, 24 :191–209.
- [19] N. Sghaier (2006). Evaporation en milieu poreux en présence de sel dissous. Influence des films liquides et conditions de mouillabilité. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- [20] G. W. Scherer (1999). Crystallization in pores. *Cement and Concrete Research*, 29 :1347–1358.
- [21] K. Zehnder and A. Arnold (1989). Crystal growth in salt efflorescence. *Journal of Crystal Growth*, 97 :513–521.
- [22] F. Hidri, N. Sghaier, H. Eloukabi, M. Prat, and S. B. Nasrallah (2013). Porous medium coffee ring effect and other factors affecting the first crystallisation time of sodium chloride at the surface of a drying porous medium. *Physics of Fluids*, 25(12): 127101.
- [23] H. Eloukabi, N. Sghaier, S. Ben Nasrallah, and M. Prat (2013). Experimental study of the effect of sodium chloride on drying of porous media : The crusty–patchy efflorescence transition. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 56(1–2) :80 –93.
- [24] S. Veran-Tissoires, M. Marcoux, M. Prat (2012). Salt crystallization at the surface of a heterogeneous porous medium, *Europhysics. Letters*, 98, 34005.
- [25] Veran-Tissoires S., Marcoux M., Prat M. (2012). Discrete salt crystallization at the surface of a porous medium, *Phys. Rev. Letters* 108, 054502.
- [26] R. J. Flatt, M. Steiger, and G.W. Scherer (2007). A commented translation of the paper by C.W. Correns and W. Steinborn on crystallization pressure. *Environmental Geology*, 52 :187–203.

- [27] N. Sghaier, S. Geoffroy, M. Prat, H. Eloukabi and S. Ben Nasrallah (2014). Evaporation-driven growth of large, crystallized salt structures in a porous medium. *PHYSICAL REVIEW E* 90, 042402.
- [28] D. Benavente, M.A. Garcia del Cura, J. Garcia-Guinea, S. Sanchez-Moral, and S. Ordonez (2004). Role of pore structure in salt crystallization in unsaturated porous stone. *Journal of Crystal Growth*, 260 :532–544.
- [29] P. Theoulakis and A. Moropoulou (1999). Salt Crystal Growth as Weathering Mechanism of Porous Stone on Historic Masonry. *Journal of Porous Materials*, 6 :345– 358.
- [30] C. Noiriél, F. Renard, M-L. Doan, and J-P Gratier (2010). Intense fracturing and fracture sealing induced by mineral growth in porous rocks. *Chemical Geology*, 269 :197–209.
- [31] H. Eloukabi, N. Sghaier, M. Prat, and S. Ben Nassrallah (2011). Drying experiments in a hydrophobic model porous medium in the presence of a dissolved salt. *Chem. Eng. Technol.* 34 (7), 1085
- [32] A. Rufai, and J. Crawshaw. (2017). Micromodel observations of evaporative drying and salt deposition in porous media. *Phys. Fluids* 29, 126603
- [33] R.W. Lieffererink, A. Naillon, D. Bonn, M. Prat, and N. Shahidzadeh (2018). Single layer porous media with entrapped minerals for microscale studies of multiphase flow. *Lab on a Chip*, 18 (7), 1094.
- [34] R. Wu, and F. Chen (2023). Interplay between salt precipitation, corner liquid film flow, and gas–liquid displacement during evaporation in microfluidic pore networks. *J. Appl. Phys.* 133, 074701.
- [35] N. Sghaier, M. Prat, and S. Ben Nasrallah (2006). On the influence of sodium chlorid concentration on equilibrium contact angle. *Chem. Eng. J.* 122, 47.
- [36] S.M. Gubanski, and M.A. Mbwana (1994). Recovery of hydrophobicity on RTV coatings in vacuum. *Proceedings of the 4th International Conf. on properties and applications of Dielectric Materials*, July 3-8, Brisbane, Australia.

CHAPITRE 5

Cristallisation du NaCl dans le modèle de milieu poreux lors du séchage à front récessif net

Chapitre 5 : Cristallisation du NaCl dans le modèle de milieu poreux lors du séchage à front récessif net

Dans le chapitre 3 de la première partie de ce travail, on a montré l'effet de la gravité et la mouillabilité sur l'obtention d'un front de séchage plat dans un modèle de réseau de pore saturé en eau pure en supposant qu'il n'existe que deux zones dans le micromodèle : zone complètement sèche (dry zone) et une autre totalement saturée (liquid saturated zone). Dans ce chapitre nous analysons une expérience présentée dans [8] et établissons des modèles simples pour ce qu'on qualifie par front de séchage net régressif séparant le milieu saturé de la zone vapeur. Nous mettons en exergue un front d'évaporation qui est le front séparant la zone vapeur d'une zone humide piégée entre le front de séchage et ce front qualifié de front d'évaporation. Nous notons à partir de la manipulation l'existence de différents types de subflorescences que nous étudier (voir la figure 5-1).

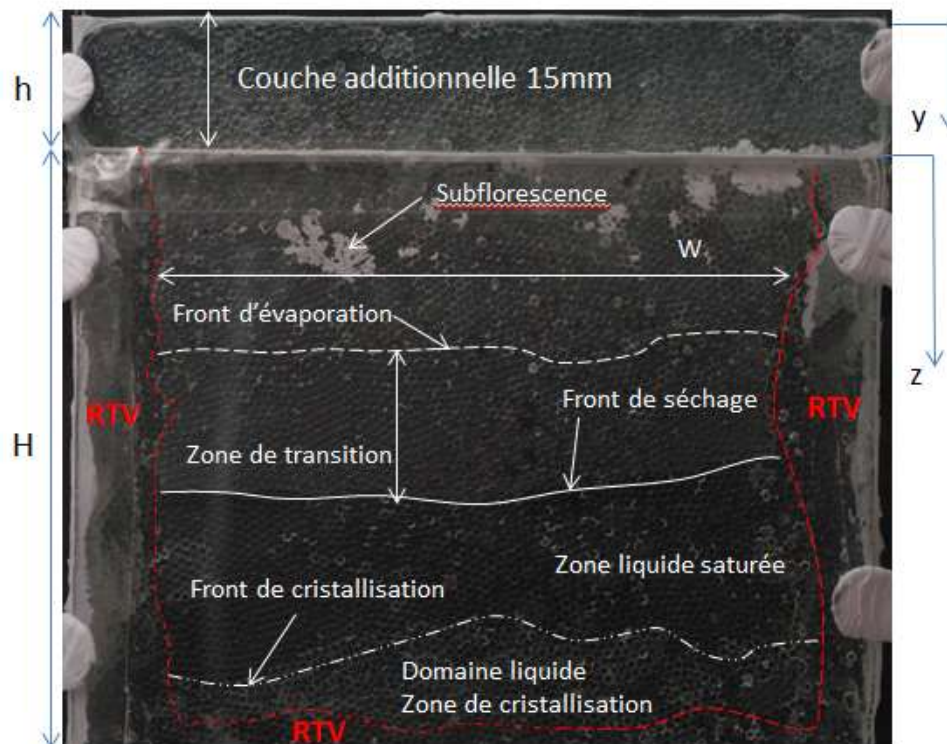


Figure 5- 1 : Représentation du micromodèle étudié avec ses principales caractéristiques

5.1 Front de séchage net régressant : Mise en modèle :

Dans cette partie, nous estimons la variation de masse en fonction de la variation de la position du front au cours de la période à front récessif (RFP) (voir la section 1-5 du chapitre 1). On présente la solution au problème de séchage dans le cas de front de séchage net régressif à l'intérieur du milieu poreux. La situation est portée sur la figure 5-2 avec la position du front de séchage mesurée soit du sommet de l'ensemble y_f soit du haut du micromodèle z_f .

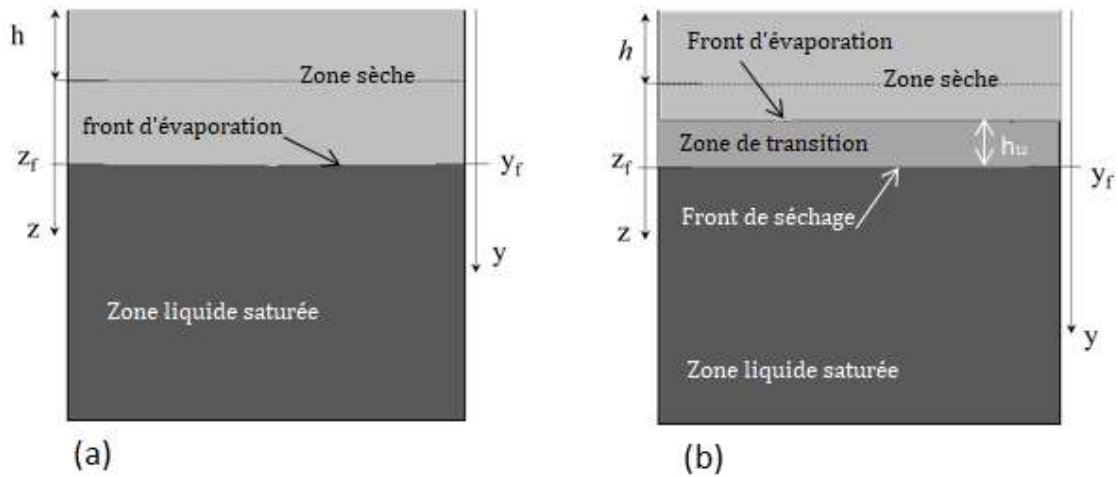


Figure 5- 2 : Le front de séchage net régressif dans le micromodèle (a) cas standard (b) cas avec zone de transition.

Initialement, à $t = 0$, le front de séchage est à la position $y_f = h$. En négligeant la résistance de transfert de masse externe, c'est-à-dire en supposant $P_v = P_{v\infty}$ à $y=0$, le taux d'évaporation est exprimé à partir de la loi de Fick comme :

$$(5- 1) J = A_s \varepsilon D_{eff} \frac{M_v}{RT} \left(\frac{P_{vf} - P_{v\infty}}{y_f} \right)$$

Où A_s est la surface de la section transversale du micromodèle ($A=W a$ avec W est la largeur du domaine liquide dans le micromodèle (figure 5-1), P_{vf} est la pression partielle de vapeur d'eau du front et a l'épaisseur de l'ouverture du micromodèle), et ε est la porosité de la région poreuse du micromodèle ($\varepsilon=0,64$ de la masse totale de liquide saturant le micromodèle). L'équilibre massique du liquide est donné par :

$$(5- 2) \rho_l \frac{d}{dt} \left(\varepsilon A (H + h - y_f) \right) = -J = -A \varepsilon D_{eff} \frac{M_v}{RT} \left(\frac{P_{vf} - P_{v\infty}}{y_f} \right)$$

Où H est la hauteur de la région liquide du micromodèle (figure 5-1). Ce qui donne :

$$(5- 3) \rho_l \frac{dy_f}{dt} = D_{eff} \frac{M_v}{RT} \left(\frac{P_{vf} - P_{v\infty}}{y_f} \right)$$

L'équation 5-3 est analytiquement résolue, et sa solution est :

$$(5- 4) y_f = z_f + h = \sqrt{h^2 + 2D_{eff} \frac{M_v}{\rho_l RT} (P_{vf} - P_{v\infty}) t}$$

Cette solution prédit que la position du front de séchage devrait évoluer linéairement avec la racine carrée du temps. Or la variation de masse liquide correspondante s'écrit :

$$(5- 5) m(t) = \rho_l \varepsilon A (H + h - y_f(t)) = \rho_l \varepsilon A (H + h) - \rho_l \varepsilon A y_f(t)$$

D'où la variation de la masse évaporée est alors donnée par :

$$(5-6) \delta m(t) = m(0) - m(t) = \rho_l \varepsilon A (y_f(t) - h)$$

Avec $m(0) = \rho_l \varepsilon A H$ est la masse initiale du liquide dans le micromodèle. La combinaison des équations 5-4 et 5-6 donne :

$$(5-7) \delta m(t) = \rho_l \varepsilon A H \left(\sqrt{h^2 + 2D_{eff} \frac{M_v}{\rho_l RT} (P_{vf} - P_{v\infty}) t} - h \right)$$

Le micromodèle étant vertical, nous allons considérer une situation d'étude où les effets de la gravité combinés à l'hydrophobie conduisent à la formation d'un front de séchage net régressant (sharp drying front receding) dans le micromodèle. Ce front correspond à la limite supérieure de la région saturée de liquide. Toutefois, contrairement à la situation considérée dans [1], nous verrons que le front d'évaporation (c'est-à-dire le plan de vaporisation) ne coïncide pas avec le front de séchage (voir la figure 5-1). Le retard spatial entre le front de séchage et le front d'évaporation est attribué aux flux capillaires secondaires [2-5]. Malgré sa simplicité apparente, la situation considérée conduit à plusieurs observations intéressantes tant en ce qui concerne la dynamique de séchage que la cristallisation du sel. Comme étudié dans [1], l'évolution de la position du front de séchage devrait s'accroître avec la racine carrée du temps dans le cas considéré de séchage. Cependant, une évolution différente est observée. Pendant une période considérable dans le processus de séchage, la position du front de séchage évolue de façon linéaire avec le temps et non pas avec la racine carrée du temps. Cette évolution anormale du front est liée à l'impact des films liquides capillaires [2-5]. Ces films ont également un impact sur le lieu de développement des structures salines précipitées. En outre, plusieurs modèles de sels précipités sont identifiés dépendant des pores complètement ou partiellement remplis de sel précipités et de la région de l'espace poral où la précipitation peut se produire (l'amas liquide ou l'espace gazeux du milieu). En d'autres termes, malgré sa simplicité, la situation envisagée va mettre d'avantage l'accent sur l'interaction complexe entre le séchage, le transport de sel dissous et le processus de précipitation de sel.

5.2 La cristallisation : les différents types de subflorescences :

Grace à la manipulation, nous distinguons trois types de subflorescences qu'on a qualifié respectivement de subflorescences de type 1 développés dans la phase gazeuse, subflorescences de type 2 piégés entre les billes dans la région liquide et finalement des subflorescences de type 3 formés entre les billes dans la zone de transition piégée entre le front net de séchage et celui d'évaporation (voir la figure 5-5).

La cristallisation est rapidement visible dans le micromodèle seulement quelques jours après le début de l'expérience (très rapide comparant à la durée de l'expérience de 30 jours). La cristallisation la plus visible prend la forme de plusieurs structures de subflorescence dans la région supérieure du micromodèle comme illustré sur la figure 5-3 (comme illustré dans les ellipses rouges à $t = 5, 7, 9$ et 11 jours).

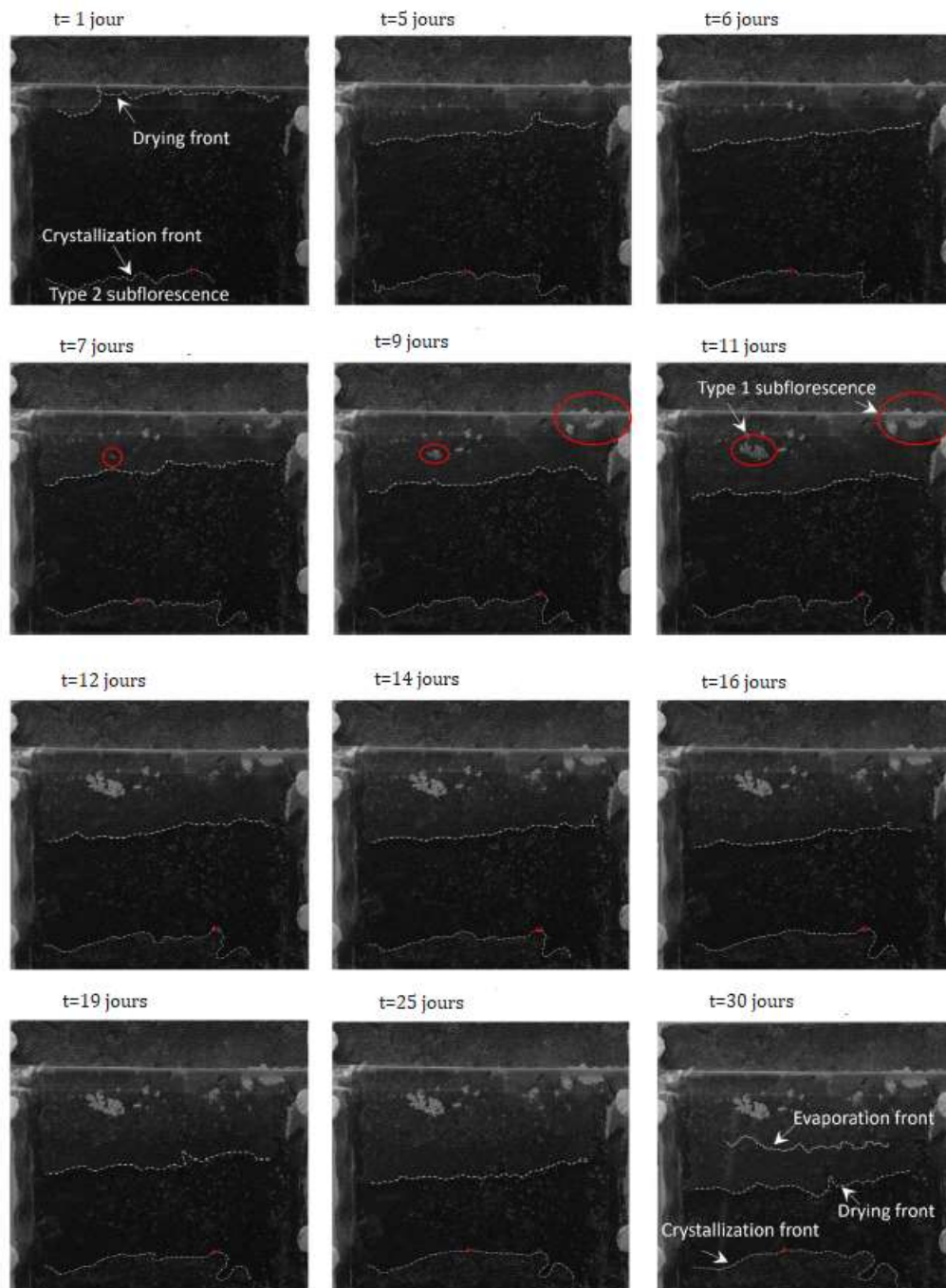


Figure 5- 3 : Images de l'ensemble micromodèle +couche additionnelle à différents instants durant l'expérience. Les subfloreescences de type 1 sont entourées par les cercles rouges. Le point rouges en bas du micromodèle représente le point le plus avancé du front de cristallisation développé dans la zone liquide saturée.

On peut également noter que certaines structures de subfloreescence peuvent fusionner au cours de leur développement, comme l'expliquent les structures subfloreescences dans les cercles rouges à droite dans les images pendant $t = 9$ jours et $t = 11$ jours dans la figure 5-3. Ce type de subfloreescence, appelé subfloreescence de type 1, se développe dans les régions du milieu poreux principalement occupé par la phase gazeuse.

L'expérience (une vidéo de l'expérience est fournie avec ce manuscrit), montre que la cristallisation se produit également dans la région liquide inférieure saturée (comme illustré sur les figures 5-1 et 5-3). La subfloreescence correspondante, appelée subfloreescence de type 2, est beaucoup moins visible que dans la région supérieure. La limite supérieure de la région inférieure de cristallisation se déplace vers le haut dans la mesure où le front de séchage (disponible plus en détail dans la section 5-3) se retire dans le micromodèle.

Le développement des deux types de subfloreescences est caractérisé par la cinétique de surface du type de subfloreescence considéré dans l'image, c'est-à-dire le nombre de pixels des images correspondant au type de subfloreescence considéré multiplié par la surface d'un pixel. La façon dont les zones correspondantes sont mesurées par traitement d'image est indiquée à l'annexe B et leur variation est montrée sur la figure 5-4.

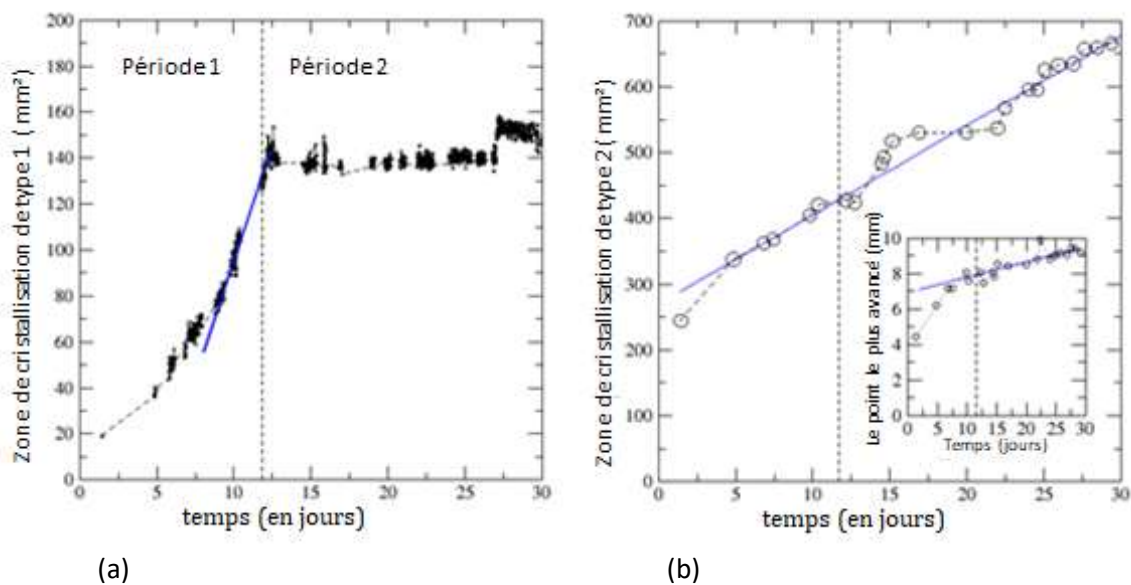


Figure 5- 4: (a) La cinétique de croissance des subfloreescences de type 1 dans le micromodèle. (b) La cinétique de croissance des subfloreescences de type 2 dans le micromodèle , La figure imbriquée montre la variation de la position du point le plus avancé de la zone de cristallisation de type 2 vers le haut (mesurée à partir du fond du domaine poreux, voir également figure 5-3 où ce point est illustré en rouge). Les lignes bleues indiquent des variations linéaires.

Comme on peut le voir à partir de la figure 5-4, on peut distinguer une première période, jusqu'à environ le jour 12, où les précipitations se produisent sous la forme de subfloreescence de type 1, clairement visibles dans la région supérieure du micromodèle, contrairement aux subfloreescences de type 2 dans la zone inférieure. Ensuite, dans la deuxième période, après le jour 12, aucun changement significatif dans la subfloreescence de type 1 dans la région supérieure n'est visible. Aucune nouvelle subfloreescence relativement grande, c'est-à-dire comparable en taille à celle des cercles rouges de la figure 5-3, les subfloreescence de type 1 se forment à proximité du front de séchage en retrait. Toutefois, le front de cristallisation dans la région liquide saturée du micromodèle continue de se déplacer vers le haut ce qui provoque l'élargissement de la région de subfloreescence inférieure de type 2 et le retrait du front de séchage plus loin dans le micromodèle. Comme évoqué par exemple dans [6], le rétrécissement de la région liquide tend à augmenter la concentration de sel dissous en

l'absence de cristallisation due à la conservation de la masse saline puisque la même masse de sel est dans un volume de solution plus petit. Lorsque les cristaux sont déjà présents, le rétrécissement de la région liquide conduit à une plus grande cristallisation, ce qui conduit ici au déplacement vers le haut du front de cristallisation (définie comme la limite supérieure de la zone de subflorescence de type 2) dans la région liquide saturée du micromodèle.

Comme on peut le voir sur la figure 5-4, la surface de subflorescence de type 2 varie approximativement linéairement au cours des périodes 1 et 2, tandis que la superficie de subflorescence de type 1 varie d'abord d'une façon non-linéaire et ensuite linéairement au cours de la période 1. Comme mentionné précédemment, le développement de la subflorescence de type 1 ne se produit que dans la période 1. Aucune croissance supplémentaire n'est perceptible dans la période 2 (plateau dans la figure 5-4 (a)). Les périodes 1 et 2 ne peuvent pas être identifiées à partir de l'évolution de la zone de cristallisation de type 2 (voir la figure 5-4(b)).

Toutefois, la situation est différente en ce qui concerne l'évolution du point le plus avancé de la zone de cristallisation de type indiquée dans la figure imbriquée de 5-4(b). Ce point est illustré sur la figure 5-3 et est défini comme le point à la périphérie de la zone de cristallisation de type 2 le plus proche de l'extrémité supérieure du micromodèle. La figure imbriquée de 5-4(b) montre que ce point se déplace plus rapidement dans la période 1 que dans la période 2 et que son évolution est quasi-linéaire au cours de cette période. Cette variation est discutée plus loin dans la section 5-3. Même si elles sont moins visibles que la grande subflorescence, certaines cristallisations entre les billes sont néanmoins visibles dans l'expérience pendant la période 1 dans la région qui a été balayée par le front de séchage, c'est-à-dire quelque temps après le passage du front de séchage. Cette cristallisation est illustrée sur la figure 5-5(c) et la subflorescence correspondante est appelée subflorescence de type 3.

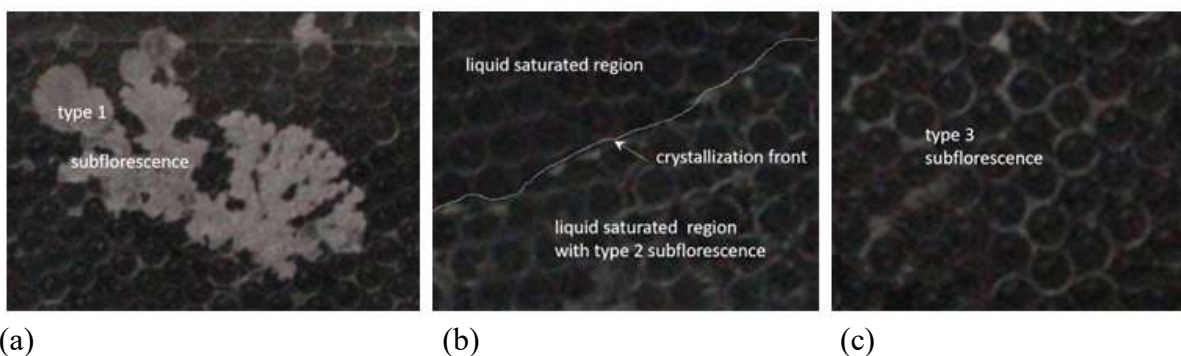


Figure 5- 5 : (a) Subflorescence de type 1 développée dans la partie gazeuse, (b) Subflorescence de type 2 entre les billes dans la région liquide. Les zones les plus claires correspondent à la subflorescence, (c) Subflorescence de type 3 entre les billes (région au-dessus de la zone de transition illustré dans la figure 5-1).

Ce type de cristallisation (type 3) se produit également dans la période 2 en dessous de la région supérieure avec les structures de subflorescence les plus grandes alors que le front de séchage se retire dans le micro-modèle et que la zone sèche s'élargit. Étant donné que les billes sont visibles sur la figure 5-5(c), ce type de cristallisation entre les billes correspond à

une invasion partielle de l'espace entre les billes par les cristaux. Les images suggèrent également que cette cristallisation se produit sur la surface RTV, qui est hydrophile [7], et non pas sur les surfaces hydrophobes (plaque de verre supérieure et paroi des billes). Ceci est différent des structures de subflorescence de type 1 (voir la figure 5-5(a)), qui envahissent complètement l'espace entre les billes et les englobent.

Sur la base de ces observations, on peut distinguer le développement de la subflorescence dans le domaine gazeux et le développement des subflorescences dans la région liquide.

Il est fréquemment rapporté que les structures d'efflorescence et de subflorescence du chlorure de sodium se développent à partir de l'interface liquide-gaz dans la région gazeuse [8-13]. C'est le cas ici pour les structures de subflorescence de type 1 se développant dans la région supérieure du micromodèle. Le mécanisme de croissance a été décrit dans [8] et [14]. La subflorescence est poreuse. La solution, à une concentration proche de la solubilité, est transportée à travers l'espace des pores de la subflorescence jusqu'à sa limite extérieure où se produit la cristallisation. Plus le taux d'évaporation local est élevé à la périphérie de la structure cristalline, plus sa croissance de la structure cristalline locale est élevée, voir [15] pour une expression mathématique du taux de croissance locale en fonction du flux d'évaporation.

Toutefois, comme indiqué précédemment et également souligné dans [16], la cristallisation du chlorure de sodium peut également se développer dans la phase liquide à l'écart de l'interface gaz-liquide. Dans le cas de l'expérience actuelle, cette cristallisation dans l'amas liquide qualifiée type 2 se produit en même temps que la croissance de la structure de sel de type 1 dans la région gazeuse au cours de la période 1 et aussi après la fin de la croissance de la subflorescence de type 1 soit dans la période 2.



Figure 5- 6 : Croissance de la subflorescence de type 1 à une distance du front de séchage.

Comme illustré sur la figure 5-6, l'expérience montre également un phénomène intéressant en ce qui concerne les structures de subflorescence de type 1. La structure saline de type 1 plus particulièrement considérée sur la figure 5-6 se forme et se développe loin du front de séchage et donc loin de la région liquide saturée. Cependant, la structure de la subflorescence doit être en contact avec la solution pour que la croissance se produise. Cela signifie que la solution est transportée sur une certaine distance au-dessus du front de séchage pour alimenter

l'efflorescence en croissance. Cette observation confirme l'existence d'une zone de transition (esquissée sur la figure 5-1) entre le front de séchage, la limite supérieure de la région saturée en liquide, et la zone sèche du micromodèle. Aucune cristallisation n'est visible dans la zone de transition. Ainsi, la cristallisation se produit à la limite supérieure de la zone de transition (cristallisation de type 1 et de type 3) et à l'intérieur de la zone liquide saturée (cristallisation de type 2). La zone de transition est discutée plus en détail dans la section suivante en relation avec la dynamique du front de séchage. Puisque la croissance de la subflorescence de type 1 s'arrête à la période 2, on suppose que la zone de transition se déconnecte de la subflorescence de type 1 au début de la période 2. Les structures de subflorescence de type 1 sont donc dans une région complètement sèche du micromodèle en période 2. Ce scénario est confirmé dans la section suivante. La distance entre le fond de la subflorescence de type 1 (voir la figure 5-6) et le front de séchage lorsque la structure de la subflorescence cesse de croître et devient plus blanche (interprété comme étant le résultat du séchage de la structure de la subflorescence) est d'environ 11 mm (11 diamètres de billes). La hauteur de la zone de transition est donc de l'ordre de 11 mm. La zone de transition est discutée plus en détail dans la section suivante en relation avec la dynamique du front de séchage.

5.3 La cinétique du front d'évaporation :

Comme on peut le voir sur la figure 5-3, le front de séchage est net sauf au tout début. La position avant de séchage z_f est définie comme la position moyenne du front mesurée à partir de sa position initiale (correspondent à la jonction entre le micromodèle et la couche supérieure supplémentaire voir la figure 5-1). Cette position, mesurée à partir de l'analyse d'image comme expliqué en Annexe B, est tracée en fonction du temps sur la figure 5-7.

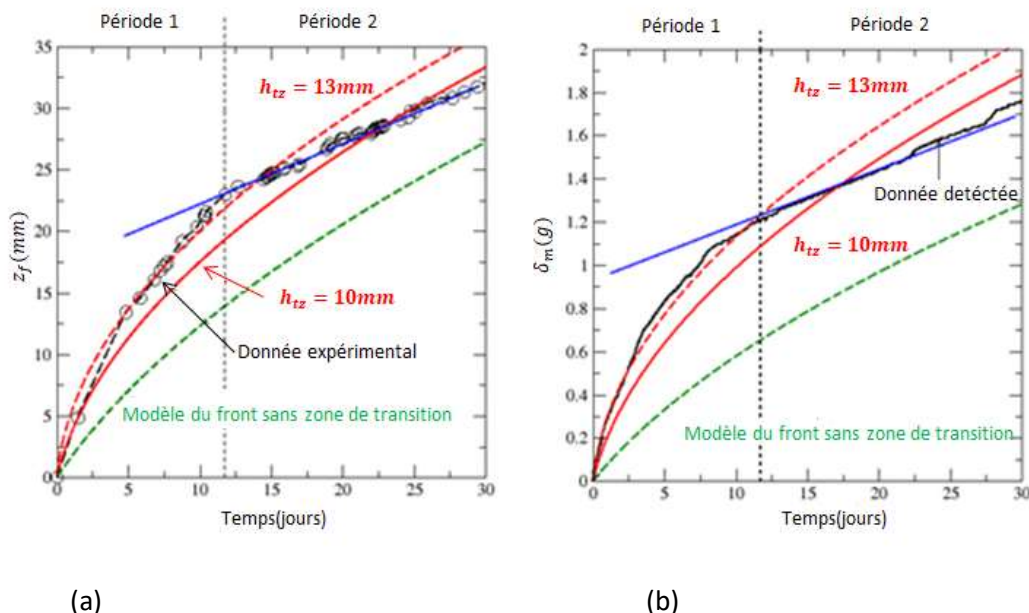


Figure 5- 7 : (a) Position du front de séchage dans le micromodèle (en noir avec cercles à partir du traitement d'image, en rouge et vert à partir des modèles de séchage), (b) La masse évaporée en fonction du temps les lignes bleues traduisent la tendance linéaire.

Le front de séchage recule continuellement pendant l'expérience. Deux périodes sont à nouveau clairement distinguées: une première période jusqu'au jour 12 où le front se déplace plus rapidement et de manière non linéaire avec le temps et une deuxième période après le jour 12 où la vitesse de déplacement du front est significativement plus petite et où le front se déplace linéairement en fonction du temps. Ces deux périodes coïncident avec les deux périodes identifiées dans la section 5-2. Ce comportement linéaire, qui correspond à une vitesse de déplacement du front constante, n'est pas en accord avec le modèle du front de séchage (équation 5-3), qui prédit que la vitesse frontale devrait diminuer avec le temps. Des observations similaires peuvent être vues à partir de l'évolution de la masse évaporée mesurée à partir du bilan tracé sur la figure 5-7(b).

Ainsi, contrairement à l'échelle avec la racine carrée du temps attendue de l'équation 5-7, on peut voir qu'il se produit une période où la masse évaporée varie linéairement avec le temps. Cette période survient après la formation et le développement des subflorescences de type 1 puisque, comme on peut le noter sur la figure 5-3 ou 5-7(b), ce type de subflorescence cesse de se développer après le jour 12. La prédiction de l'équation (5-7) est également dessinée à la figure.5-7(b) (en supposant $D_{eff} = D_v$, où D_v est le coefficient de diffusion moléculaire de vapeur d'eau, c'est-à-dire en négligeant l'effet de tortuosité, et en considérant que la pression d'équilibre des vapeurs au front est celle d'une solution saturée de NaCl, à savoir $P_{vf} = 0.75P_{vsat}$ où P_{vsat} est la tension de vapeur saturante

Comme discuté précédemment, la fraction massique d'ions dans le domaine liquide devrait être très proche de la solubilité).

Comme on peut le voir à partir de la figure.5-7(b), le modèle frontal de séchage correspondant à l'équation (5-7) sous-estime considérablement l'évolution de la masse évaporée. Ainsi, il manque quelque chose dans le modèle front de séchage conduisant à l'équation (5-7). Cela pourrait être considéré comme évident puisque le phénomène de précipitation saline n'est pas pris en compte dans ce modèle.

Cependant, dans la toute première période de séchage (jusqu'au jour 3 ou 4), la formation de subflorescence dans la région supérieure du micromodèle est assez faible, voire inexistante. Ainsi, on peut s'attendre à ce que l'impact de la précipitation de sel soit négligeable au cours de cette période. À partir de la perte de masse évaporée mesurée au début du séchage, on peut estimer le taux d'évaporation J comme suit :

$$(5-8) J = \frac{d(\delta m)}{dt} \approx \frac{\delta m(t)}{t}$$

La perte de masse mesurée après 3,54 jours est de 0,7 g. En utilisant l'équation 5-8 on estime $J \approx 2.3 * 10^{-9} kg/s$. Ensuite, on peut déterminer la position moyenne δ du front d'évaporation (mesurée à partir du sommet du micromodèle avec l'extension, c'est-à-dire à partir de la ligne $y = 0$) correspondant à cette valeur :

$$(5-9) \delta = A \varepsilon D_{eff} \frac{M_v}{RT} \left(\frac{P_{vf} - P_{v\infty}}{J} \right)$$

L'utilisation de la valeur calculée du taux d'évaporation et de la largeur dans la couche supérieure supplémentaire (largeur de 91 mm au lieu de 73 mm dans le micromodèle car il n'y a pas d'invasion RTV sur les côtés dans la couche supplémentaire) donne $\delta \approx 7$ mm, ce qui est environ deux fois plus petit que la hauteur de la couche diffusive au-dessus du micromodèle

(15 mm). En d'autres termes, le front d'évaporation est beaucoup plus proche du sommet de l'ensemble que le front de séchage, qui est situé à 15 mm de l'ouverture (micromodèle+extension) lorsque le séchage débute. Ceci indique la présence de mécanismes de transport entre le front de séchage et le front d'évaporation. Étant donné que les billes de verre et la plaque de verre supérieure du micromodèle sont hydrophobes, les mécanismes de transport en question doivent se produire à l'intérieur de la couche de l'élastomère RTV ou à sa surface. Comme indiqué dans [17], une possibilité est la pervaporation puisqu'il est connu que les molécules d'eau peuvent migrer au sein de l'RTV. Une deuxième possibilité est le développement de films liquides capillaires [2-5] à la surface d l'RTV et dans les zones de contact entre l'RTV et les billes, car l'élastomère est connu pour être hydrophile après immersion dans l'eau [7]. Pour le moment, appelons la zone entre le front de séchage et le front d'évaporation la zone de transition sans chercher à étudier l'importance relative des deux mécanismes. La situation est esquissée sur la figure 5-1 et la figure 5-2(b).

Pour simplifier, considérons que l'étendue verticale de la zone de transition (notée par h_{tz} dans la figure 5-2(b)) ne change pas de manière significative pendant le séchage. En d'autres termes, nous supposons ici que la zone de transition et les deux fronts reculent dans l'ensemble au même rythme. Tel que présenté à l'annexe C, le modèle du front peut alors être facilement modifié de manière à prendre en compte la zone de transition. Selon ces modifications, la position du front de séchage et la masse évaporée sont exprimées comme :

$$(5-10) z_f = y_f - h = \sqrt{(h-h_{tz})^2 + 2D_{eff} \frac{M_v}{\rho_l RT} (P_{vf} - P_{v\infty})t} - (h-h_{tz})$$

$$(5-11) \delta m(t) = m(0) - m(t) = \rho_l \varepsilon A z_f$$

Où h est la hauteur de la couche supplémentaire (figure 5-1) et $h_{tz} \approx 8mm$ sur la base de l'estimation de la zone de transition δ (équation 5-9) de 7mm. Comme expliqué précédemment, cette estimation est basée sur la perte de masse sur 3,5 jours. Au tout début, on peut s'attendre à ce que le front d'évaporation soit plus proche de l'ouverture du micromodèle+extension (puisque la zone de transition recule au cours des trois premiers jours). Pour cette raison, nous avons testé deux valeurs légèrement supérieures, à savoir $h_{tz} \approx 10mm$ et $h_{tz} \approx 13mm$. Application des équations 5-10 et 5-11 conduisent ensuite aux résultats illustrés à la figure 5-7 (courbes rouges). Comme on peut le voir sur la figure 5-7, l'introduction de la zone de transition conduit à un bien meilleur accord avec les données expérimentales, au moins dans la première période jusqu'à $t = 12$ jours. Il est établi des travaux précédents [8] [14], que le développement de structures cristallines de type 1 augmente la vitesse d'évaporation lors de la croissance ascendante de ces structures car elles sont humides et rapprochent donc le front d'évaporation de l'ouverture de l'échantillon. Ceci peut expliquer pourquoi la courbe obtenue avec $h_{tz} \approx 13mm$ conduit à un meilleur accord avec les données expérimentales que la courbe pour $h_{tz} \approx 10mm$ après un temps écoulé de 3-4 jours sur la figure 5-7(a). Comme discuté dans [18], les ions ne peuvent pas être transportés à l'intérieur de la matrice polymère par pervaporation. On conclut donc à partir de la figure 5-7 que les films liquides capillaires se développant à la surface de l'RTV au-dessus de la zone de transition sont la voie du transport des ions du front de séchage jusqu'à la

subflorescence en croissance. L'effet d'évaporation accru dû à la zone de transition est également cohérent avec l'impact des films liquides capillaires sur l'évaporation [2-5] et [25].

Comme indiqué dans [4] et [19], l'évaporation se produit à la frontière des films. Ainsi, le sommet de la zone de transition correspond à la frontière des films. Au fond de la zone de transition, les films liquides sont connectés à la région liquide saturée. La croissance de la subflorescence de type 1 illustrée à la figure 5-5(a) se termine au jour 12. Ceci correspond au début du régime linéaire (indiqué par des traits pointillés bleus sur la figure 5-7. Dans cette période, dite période 2, la cinétique d'évaporation et le déplacement du front de séchage sont plus lents que dans la période précédente et plus lents que prévu par le modèle de front de séchage avec zone de transition comme illustré par la figure 5-7. Comme on peut le voir sur les figures 5-3 et 5-4, aucun changement significatif n'est visible dans la zone au-dessus du front de séchage en recul (pas de changement significatif dans la distribution de la subflorescence de type 1, pas de croissance significative de la nouvelle subflorescence de type 1). D'après l'estimation de la hauteur de la zone de transition, la subflorescence de type 1 est censée être sèche pendant cette période. Même si la subflorescence NaCl est de type 1, elle devrait être poreuse [8] et [14], la présence de subflorescence de type 1 augmente la résistance au transport de vapeur dans la zone au-dessus du front par rapport à la situation sans subflorescence. Cela implique que le coefficient de diffusion effectif D_{eff} est plus petit dans la subflorescence de type 1 que dans sa région libre. Ceci explique le ralentissement séchage par rapport à la prédiction basée sur l'équation 5-10, qui néglige l'impact de la subflorescence sec, de type 1 sur le transport de la vapeur d'eau. Néanmoins, l'utilisation de l'RTV pour enduire l'une des plaques en sandwich des billes, et pour sceller le micromodèle sur les côtés pose la question de l'impact possible de la pervaporation sur la cinétique de séchage. Selon [20], Le taux d'évaporation à travers la couche de l'RTV d'épaisseur l peut être exprimé par :

$$(5- 12) J_{per} = D_{RTV} \frac{c_w}{l}$$

Avec $c_w = 0.72 Kg/m^3$ et $D_{RTV} = 8 \cdot 10^{-10} m^2/s$. L'échelle de l'RTV est d'épaisseur $l = 1cm$. Comme exemple, considérons que le front d'évaporation est à la position $z = z_{fe}$. En supposant que l'RTV est humide également lorsqu'il est en contact avec la zone de transition, c'est-à-dire la région capillaire du film, le taux d'évaporation peut être exprimé comme suit :

$$(5- 13) J_{per} \approx a \left(W + 2(H - z_{fe}) \right) D_{RTV} \frac{c_w}{l}$$

Considérons une valeur représentative de z_{fe} dans la faible période à taux de séchage constant, c'est-à-dire après le jour 12 (figure 5-7), par exemple, $z_{fe} = 20mm$. Puis l'application de l'équation 5-13 donne $\frac{J_{per}}{J} = 0.03$, où J est le taux d'évaporation déterminé à partir des mesures du poids $J = 3 \cdot 10^{-10} Kg/s$. Par conséquent, l'impact de la pervaporation peut être négligé et le mécanisme dominant de perte de masse est l'évaporation contrôlée par le transport par diffusion de vapeur d'eau dans la région sèche de l'ensemble.

Pour expliquer le comportement linéaire de la figure 5-7 après le jour 12, nous examinons l'expression du taux d'évaporation, donnée par l'équation 5-14 :

$$(5-14) J = A \varepsilon D_{eff} \frac{M_v}{RT} \left(\frac{P_{vf} - P_{v\infty}}{y_f - h_{tz}} \right)$$

Les comportements linéaires de la figure 5-7 correspondent à un taux d'évaporation constant (CRP). Comme mentionné précédemment, il n'y a pas de changement notable en ce qui concerne la subflorescence de type 1 au cours de la période considérée. Ainsi, on peut considérer que le coefficient de diffusion D_{eff} et la porosité ε ne varient pas au cours de la période (ces coefficients doivent être prises comme des équivalents puisque la distribution de la subflorescence de type 1 est hétérogène dans la zone sec). En outre, si des précipitations se produisaient, cela contribuerait à réduire le taux d'évaporation. Étant donné qu'une zone de cristallisation (cristallisation de type 2) est visible dans la région liquide, on peut s'attendre à ce que la pression de vapeur P_{vf} au front de l'évaporation demeure très proche de celle d'une solution saturée de NaCl ($P_{vf} \sim 0.75 P_{vsat}$). Basée sur l'équation 5-14 et des considérations ci-dessus, la conclusion est que $y_f - h_{tz}$ reste à peu près constante au cours de la période considérée, c'est-à-dire $y_f - h_{tz} = y_{f\ evap}$, où $y_{f\ evap}$ est la position du front d'évaporation quasi immobile dans le micromodèle. Puisque, comme indiqué à la figure 5-7(a), le front de séchage est en recul, cela implique que $h_{tz} = y_f - h_{tz}$, c'est-à-dire l'épaisseur de la zone de transition, s'élargit pendant la période considérée. Bien que le contraste entre la zone de transition et la zone sèche dans les images est faible, ce phénomène d'expansion de la zone, c'est-à-dire la stabilisation du front d'évaporation pendant un certain temps, semble visible à l'œil nu au cours de l'expérience. Malgré le faible contraste, qui rend la détection de la zone de transition assez difficile, le traitement d'image conduit aux résultats indicatifs décrits sur la figure 5-8, qui correspondent à l'examen de la pincée (pinning) du front d'évaporation.

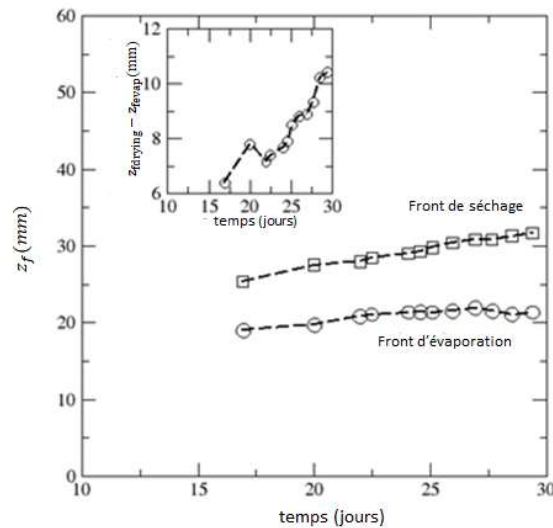


Figure 5- 8 : Variation du front de séchage et du front d'évaporation moyenné en fonction du temps. La figure imbriquée montre l'évolution de la différence des positions du front de séchage et du front d'évaporation moyenné.

Comme discuté dans de précédents ouvrages, [2-5] et [19], l'étendue verticale des films capillaires résulte de la compétition entre la gravité, les forces visqueuses et les forces capillaires. Si l'on suppose que la pression capillaire en bas de la région du film (où les films se connectent au front de séchage) ne varie pas sensiblement au fur et à mesure que le front de

séchage se déplace vers le bas, on peut supposer que l'augmentation de la pression capillaire maximale à la pointe de la zone du film est due à un changement local de la microgéométrie de l'interface entre les billes et le revêtement RTV. Par exemple, il est montré dans [19] que le degré d'arrondissement des coins d'un tube carré a un impact sur l'étendue du film de coins.

Ainsi, une variation géométrique relativement mineure peut avoir un impact. En bref, il est considéré que la pointe du film capillaire, qui correspond à l'emplacement du front d'évaporation, se pince en raison d'un changement de géométrie locale. On peut également noter que la hauteur de la zone de transition obtenue par le traitement de l'image de la figure imbriquée de 5-8, est cohérente avec les estimations précédentes ($h_{tz} \sim 10mm$). Dans ce qui suit, nous affirmons que la variation linéaire de la position du front de séchage dans la période 2 avec le temps induit également la croissance linéaire de la zone de subflorescence de type 2 illustrée à la figure 5-3.

5.4 Le régime de croissance linéaire de des subflorescences de type 2 :

La position du front de séchage et la taille de la zone de subflorescence de type 2 varient de façon linéaire avec le temps dans la période 2. Le lien entre la cinétique du front de séchage et celle de la zone de subflorescence de type 2 peut être établi comme suit.

En supposant que la fraction massique de sel dissous dans le liquide est la solubilité ($c = c_{sat}$), la masse totale de sel dans la région liquide saturée peut être exprimée par :

$$(5-15) m_{NaCl} = \rho_l \varepsilon a (h_2 W - A_{cr}) c_{sat} + \varepsilon a A_{cr} (1 - \varepsilon_{cr}) \rho_l c_{sat} + \varepsilon a A_{cr} \varepsilon_{cr} \rho_{cr}$$

Avec A_{cr} la surface de la subflorescence de type 2 sur l'image, $h_2 = H - z_f$ est l'hauteur de la région liquide saturée, ρ_{cr} est la masse volumique de l'halite ($\rho_{cr} = 2160 \text{ Kg.m}^3$, et ε_{cr} est la porosité de la structure de sel. Le premier terme du côté droit (r.h.s) de l'équation 5-15, représente la masse de sel dans la région cristalline de la région liquide saturée. Le deuxième terme représente la masse du sel dissous dans la région liquide saturée où les cristaux de sel sont présents. Le troisième terme représente la masse du sel cristallisé. En négligeant la perte de sel de la région liquide saturée en même temps que le front de séchage recule dans la période 2 (cette perte peut entraîner une subflorescence de type 3), la conservation de la masse saline implique $\frac{dm_{NaCl}}{dt} = 0$.

La dérivée de la r.h.s de l'équation 5-15, en respectant qu'à l'instant $t=0$ s rien ne s'est produit $\frac{dh_2}{dt} = -\frac{dz_f}{dt}$ donne alors :

$$(5-16) \frac{dA_{cr}}{dy} = \frac{\rho_l W c_{sat}}{\varepsilon_{cr} (\rho_{cr} - \rho_l c_{sat})} \frac{dz_f}{dt}$$

Conformément aux observations, l'équation 5-16 indique que La mise à l'échelle avec le temps de la croissance de la subflorescence de type 2 suit la mise à l'échelle de la cinétique du front de séchage. Ceci est également valable pour la cinétique de la position du front de la cristallisation puisque cette cinétique est approximativement donnée par $\frac{1}{w} \frac{dA_{cr}}{dy}$.

A partir de la figure 5-3(b) on obtient $\frac{dA_{cr}}{dt} \approx 13 \text{ mm}^2/\text{jour}$ au 2^{ème} jour alors que $\frac{dz_f}{dt} \approx 0.5 \text{ mm}/\text{jour}$ pour la période 2 à partir des résultats sur la figure 5-6(a) et en utilisant

l'équation 5-9, on obtient alors $\varepsilon_{cr} \approx 0.48$, ce qui indique donc que les cristaux de subflorescence de type 2 occupent environ la moitié du volume de l'espace poral dans la région de cristallisation de type 2. Alors qu'il y a peu de doute que la fraction de masse de sel dans la solution est très proche de la solubilité lorsque les cristaux sont présents dans la solution, la situation peut être différente lorsque les premiers cristaux se forment. Cette question est examinée dans ce qui suit.

5.5 La supersaturation, la croissance près de l'équilibre de la structure de sel :

Il est rapporté dans [21][22] que la sursaturation (supersturation) qui marque le début de la cristallisation du NaCl peut être assez élevée ($\sim 1,7 - 1,8$, c'est-à-dire presque deux fois la solubilité) dans des systèmes de modèle comme les tubes capillaires ou les canaux simples. Toutefois, les estimations des profils de concentration de sel dans des échantillons de calcaire, par exemple [23], indiquent une sursaturation négligeable au début de la cristallisation. Il est donc intéressant d'obtenir des informations sur le niveau de sursaturation dans notre expérience. Finalement, on peut d'abord noter que le nombre de Péclet (voir le chapitre suivant) est égal à zéro dans le cas de la situation de front de séchage en retrait considérée ici car aucune vitesse n'est induite dans le domaine liquide saturée. En conséquence, la fraction de masse ionique dans le domaine liquide est spatialement uniforme [24] et la fraction massique des ions dans la région liquide avant la cristallisation est simplement donnée par l'équation de conservation de masse :

$$(5-17) c(t) = c_0 \frac{H}{(H-z_f(t))}$$

Avec c_0 est la fraction massique initiale ($c = 0.25$). La position du front de séchage, quand la solubilité $c_{sat} = 0.264$ est atteinte, est donc donné par

$$(5-18) z_f(t) = H \left(1 - \frac{c_0}{c_{sat}}\right)$$

Cela conduit à $\frac{z_f(t)}{H} = 0.053$, qui correspond à 3.18mm.

Malheureusement, les images manquent pendant la période où les cristaux deviennent visibles pour la première fois en raison d'une interruption de l'acquisition d'image entre le jour 2 et le jour 5. La position moyenne du front de séchage dans la dernière image avant l'interruption est de 4,8 mm. Ainsi, selon l'équation 5-8, $c > 0,27$, où c_{cr} désigne la fraction massique des ions au début de la cristallisation. D'autre part, la position moyenne du front de séchage dans la première image après l'interruption est de 13,3 mm. Ceci correspond à $c = 0,32$ selon l'équation 5-10, et une sursaturation ($\sim c/c_{sat}$) de 1.2. Toutefois, une subflorescence de type 1 est visible sur l'image, ce qui indique que le début de la cristallisation s'est produit pour une position moins avancée du front de séchage. Par conséquent, $0.27 < c_{cr} < 0.32$ ou en termes de sursaturation (exprimée une fois de plus par rapport à la fraction massique) $1.02 < \frac{c_{cr}}{c_{sat}} < 1.2$.

Ces résultats indiquent que la sursaturation au début de la cristallisation dans notre micromodèle est plus petite que dans les systèmes de modèle considérés dans [17][22] et beaucoup plus proche de la solubilité. Après l'apparition, la solution reste essentiellement à la solubilité (comme l'indique le développement de la subflorescence de type 2) et le système entre dans une longue période ou une croissance subflorescente proche de l'équilibre.

Conclusion

Une situation d'évaporation avec un front de séchage net récessif, une zone de transition développée et une cristallisation du chlorure de sodium dans un milieu poreux ont été étudiées dans ce chapitre à partir de visualisations et de mesures de masse évaporée. On a également étudié la dynamique du front de séchage et les modèles de précipitation du sel ainsi que l'interaction entre les deux processus. En effet, on a démontré que le déplacement du front de séchage suit une évolution linéaire avec le temps sur une période significative contrairement au modèle standard. La zone de transition, formée entre la région liquide saturée et la région sèche, est le siège des films liquides capillaires qui empêche la coïncidence entre le front d'évaporation qui est sa limite supérieure c.à.d. la frontière supérieure des films, et le front de séchage. Quant à la cristallisation, trois types de subflorescences ont été distingués. Le type 1 correspond aux structures de sel relativement grandes se développant dans la phase gazeuse et envahissant complètement la fraction de l'espace poral où elle se développe. Le type 3 correspond à la formation des cristaux à proximité du front d'évaporation où ils occupent partiellement les pores gazeux mais nettement observables. Le type 2, correspond à la cristallisation dans le domaine liquide observée loin du front de séchage dans notre expérience. Contrairement aux plupart des études précédentes, on a montré que les précipitations de chlorure de sodium peuvent se produire à la fois dans le domaine gazeux et liquide dans l'espace poral. Finalement, l'existence des films capillaires conduit au développement de la subflorescence à partir du front d'évaporation et non du front de séchage. Dans ce qui suit, nous allons nous intéresser, numériquement, à la deuxième partie de l'expérience ou une grande subflorescence de type 1 va se former à l'intérieure de la phase gazeuse bien développée dans le milieu poreux.

Références

[1] G.R.Hadley. (1982). Theoretical treatment of evaporation front drying. Int. J. Heat Mass Transfer. 25(10), 1511.

- [2] G.Yiotis, A.G.Boudouvis, A.K.Stubos, I.N.Tsimpanogiannis, and Y.C.Yortsos. (2004). Effect of liquid films on the drying of porous media. *AiChE J.* 50 (11), 2721.
- [3] M.Prat. (2007). On the influence of pore shape, contact angle and film flows on drying of capillary porous media. *Int. J. of Heat and Mass Tr.*, 50,1455.
- [4] F.Chauvet, P.Duru, S.Geoffroy, and M.Prat. (2009). Three periods of drying of a single square capillary tube. *Phys. Rev. Lett.* 103, 124502.
- [5] A.G. Yiotis, D.Salin, E.S.Tajer, and Y.C.Yortsos. (2012). Drying in porous media with gravity-stabilized fronts: Experimental results. *Physical Review E* 86, 026310.
- [6] B.Diouf, S.Geoffroy, A.Abou-Chakra, and M.Prat. (2018). Locus of first crystals on the evaporative surface of a vertically textured porous medium. *Eur. Phys. J. Appl. Phys.*, 81 (1), 11102.
- [7] S.M.Gubanski, and M.A.Mbwana. (1994). Recovery of hydrophobicity on RTV coatings in vacuum. *Proceedings of the 4th International Conf. on properties and applications of Dielectric Materials*, July 3-8, Brisbane, Australia.
- [8] N.Sghaier, S.Geoffroy, M.Prat, H.Eloukabi, and S. Ben Nasrallah. (2014). Evaporation driven growth of large crystallized salt structures in a porous medium,” *Phys. Rev. E* 90, 042402.
- [9]S.Veran-Tissoires, M.Marcoux, and M.Prat. (2012). Discrete salt crystallization at the surface of a porous medium,” *Phys. Rev. Letters* 108, 054502.
- [10] H.Eloukabi, N.Sghaier, S.Ben Nasrallah, and M.Prat. (2013). Experimental study of the effect of sodium chloride on drying of porous media: The crusty-patchy efflorescence transition. *Int. J. Heat Mass Transfer* 56, 80.
- [11] J. Desarnaud, H. Derluyn, L. Molari, S. De Miranda, V. Cnudde, and N. Shahidzadeh. (2015). Drying of salt contaminated porous media: Effect of primary and secondary nucleation,” *J. Appl. Phys.* 118(11), 114901.
- [12]. S.M.S. Shokri-Kuehni, T. Vetter, C.Webb, and N. Shokri. (2017). New insights into saline water evaporation from porous media: Complex interaction between evaporation rates, precipitation, and surface temperature,” *Geophysical Research Letters*, 44, 5504–5510
- [13] U.Nachshon, N.Weisbrod, R.Katzir, and A.Nasser. (2018). NaCl Crust Architecture and Its Impact on Evaporation: Three-Dimensional Insights, ” *Geophys. Res. Lett.*, 45, 6100.
- [14] N.Sghaier, and M.Prat. (2009). Effect of efflorescence formation on drying kinetics of porous media,” *Transport in Porous Media*, 80 (3), 441.
- [15] G.Licsandru, C.Noiriel, P.Duru, S.Geoffroy, A.Abou-Chakra, and M.Prat. (2019). Dissolution-precipitation-driven upward migration of a salt crust,” *Physical Review E* 100 (3), 032802.

- [16] R.Wu, and F.Chen. (2023).Interplay between salt precipitation, corner liquid film flow, and gas–liquid displacement during evaporation in microfluidic pore networks,” J. Appl. Phys. 133, 074701.
- [17] P.Peng, Y.Lan, L.Liang, and K.Jia. (2021). Membranes for bioethanol production by pervaporation. *Biotechnol Biofuels* 14:10.
- [18] C.Zuo, S. Xu, X. Ding, W. Jin, W. Xing, and X. Ke. (2022). Transmission of sodium chloride in PDMS membrane during pervaporation based on polymer relaxation,” *Journal of Membrane Science* 659, 120812..
- [19] F.Chauvet, P.Duru, and M.Prat. (2010). Depinning of evaporating liquid films in square capillary tubes: Influence of corners' roundedness. *Physics of Fluids* 22, 112113.
- [20] P. G. C. Randall, and P. S. Doyle (2005). Permeation-driven flow in poly(dimethylsiloxane) microfluidic devices. *PNAS* 102 (31): 10813.
- [21] A.Naillon, P.Joseph, and M.Prat. (2017). Sodium chloride precipitation reaction coefficient from crystallization experiment in a microfluidic device. *J. of Crystal Growth* 463, 201.
- [22] A. Naillon, P. Joseph, and M. Prat (2018). Ion transport and precipitation kinetics as key aspects of the stress generation on pore walls induced by salt crystallization. *Phys. Rev. Letters* 120, 034502.
- [23] L. Pel, R. Pishkari, and M. Casti (2018). A simplified model for the combined wicking and evaporation of a NaCl solution in limestone. *Materials and Structures* 51 (3), 66.
- [24] H. P. Huinink, L. Pel, and M. A. J. Michels (2002). How ions distribute in a drying porous medium: A simple model,” *Phys. Fluids* 14(4), 1389.
- [25] B Camassel, N Sghaier, M Prat, and S. Ben Nasrallah (2005).Evaporation in a capillary tube of square cross-section: application to ion transport,” *Chem. Eng. Sci.* 60 (3), 815.

CHAPITRE 6

Simulation numérique de la croissance d'un
subflorescence de type 1 dans un milieu
poreux dans le cadre de l'approche des
réseaux de pores

Chapitre 6 : Simulation numérique de la croissance d'un subflorescence de type 1 dans un milieu poreux dans le cadre de l'approche des réseaux de pores

Le processus de séchage dans les milieux poreux est habituellement modélisé par une équation de diffusion non linéaire dans le cadre de l'approche continue des milieux poreux. Cependant, cette approche ne prend pas en considération le phénomène de fragmentation de la phase liquide en amas secondaires [1] issu du processus de percolation d'invasion pendant le séchage. La présence du sel dissous dans un milieu poreux et sa précipitation, peuvent avoir un impact sur les propriétés physiques de la solution ce qui conduira à la formation des structures cristalline soit à la surface, soit à l'intérieur du milieu poreux. Durant le séchage, il est intéressant de suivre l'évolution de la concentration de sel afin de prévoir le moment auquel la cristallisation se déclenche. Plusieurs méthodes expérimentales permettent d'obtenir la concentration moyenne mais uniquement quelques techniques permettent le suivi ponctuel de la concentration à savoir les techniques conductimétriques [16] ou des méthodes optiques [15]. Cependant, ces techniques ne permettent pas de donner un accès instantané aux champs de concentration locale qu'il soit un milieu poreux bidimensionnel ou tridimensionnel (pour plus de détails voir [7]). Vu la complexité de ces modèles, il est utile d'utiliser les méthodes numériques dans le but d'analyser les transports à l'échelle poral.

Dans ce chapitre nous modélisons, d'abord, la variation volumique de la concentration selon les amas. Ensuite, la nucléation du sel (première apparition du cristal) pour différentes situations de sursaturation allant jusqu'à 2 fois la solubilité. L'effet de la porosité de sel est aussi étudié. Dans la dernière partie de ce chapitre nous étudions la croissance de la subflorescence principal de type 1 pour différentes générations du réseau en faisant varier la porosité du réseau aussi bien que la porosité de la structure saline.

6.1 Hypothèses :

- Séchage isotherme [2-4].
- Les effets capillaires dominant les effets visqueux.
- Zone de transition négligée (front de séchage et front d'évaporation confondus).
- La gravité est négligée (raisonnable pour les réseaux de petites tailles).
- Le milieu est hydrophobe (angles de contact supérieurs à 90 °C).

6.2 Les propriétés physiques :

Le sel ne peut se déplacer dans le liquide que sous sa forme dissoute. Au cours du séchage, le transport des ions à l'échelle porale se traduit, en régime transitoire [5-7], par une équation de diffusion-advection (6-1) :

Chapitre6 : Simulation numérique de la croissance d'un subflorescence de type1 dans un milieu poreux dans le cadre de l'approche des réseaux de pores

$$(6-1) \frac{\partial(\rho_s C)}{\partial t} + \underbrace{\nabla(\vec{u} \rho_s C)}_{\text{advection}} - \underbrace{\nabla(D_s \rho_s \nabla C)}_{\text{diffusion}} = 0$$

C : La concentration du sel dissous(g/g de solution).

\vec{u} : La vitesse de la solution(ms^{-1}).

ρ_s : La masse volumique de la solution(Kgm^{-3}).

D_s : Le coefficient de diffusion de sel dans l'eau(m^2s^{-1}).

Les propriétés physiques de la solution peuvent être modifiées par la concentration en sel [8]. L'influence est notable sur la pression de vapeur saturante, la masse volumique, la tension de surface et l'angle de contact. A l'interface liquide-gaz, la pression partielle d'équilibre de la vapeur diminue de 25% par rapport à celle de l'eau pure P_{vsat} [8] :

$$(6-2) P_{veq}(C_{sat}) = 0.75 P_{sat}$$

Avec C_{sat} la concentration de saturation ($C_{sat} = 26.4((g/g \text{ de solution}).)$). La masse volumique de la solution saline ρ_l en $Kg.m^{-3}$, peut être estimée par la formule suivante [8] :

$$(6-3) \rho_l = \frac{100 * \rho_e}{100 - 0.7C}$$

Où ρ_e : la masse volumique de l'eau pure en $Kg.m^{-3}$ et C la concentration de la solution en (g/g de solution).

La tension de surface σ est donnée par la corrélation suivante à $T=20^\circ C$ [8] :

$$(6-4) \sigma = \sigma(H_2O) + M \Delta \sigma$$

Où $\Delta \sigma = 1.64 \cdot 10^{-3} Nm^{-1}$ et $\sigma(H_2O) = 72.6 \cdot 10^{-3} Nm^{-1}$.

M est la concentration molaire ($mol.dm^{-3}$) donnée par :

$$(6-5) M = \frac{\rho_l C}{(1-C)M_m}$$

Avec : $M_m = 58.44 g.mol^{-1}$, la masse molaire de NaCl.

Pour les modèles de réseaux de pores, l'angle de contact est un paramètre important. Une étude bien détaillée était menée dans [8] et elle a montré que pour les milieux hydrophiles, l'angle de contact augmente avec la concentration. Contrairement aux milieux hydrophobes, qui est le cas de notre modèle, cet angle n'est pas significativement affecté par la variation de la concentration du sel.

6.3 Le nombre de Peclet :

On définit le nombre de Peclet (équation 6-6), sans dimension, qui caractérise la compétitivité entre le transport par diffusion et celui par advection [9] comme suit :

Chapitre6 : Simulation numérique de la croissance d'un subflorescence de type1 dans un milieu poreux dans le cadre de l'approche des réseaux de pores

$$(6-6) P_e = \frac{LV}{\varepsilon D_{s,eff}}$$

Où ε est la porosité du milieu poreux. L la longueur caractéristique du réseau (m) et $D_{s,eff}$ est le coefficient de diffusion effectif du sel définit selon [10] par :

$$(6-7) D_{s,eff} = \varepsilon^{0.4} D_s$$

Avec D_s le coefficient de diffusion des ions de sel dans l'eau (m^2s^{-1}). Et V (ms^{-1}) est la vitesse moyenne du fluide dans l'espace poral

$$(6-8) V = \frac{J}{\rho_l A_{ech}}$$

Tel que A_{ech} est la surface d'échange (m^2), ρ_l la masse volumique de la solution ($Kg.m^{-3}$) et J le taux d'évaporation à l'interface (Kg/s).

En regroupant les équations (6-6) et (6-8), le nombre de Peclet, exprimé en fonction du flux d'évaporation, est donné par :

$$(6-9) P_e = \frac{LJ}{\rho_l A_{ech} \varepsilon D_{s,eff}}$$

Le nombre de Peclet est un paramètre clé lors de l'analyse du transport de sel. Lorsque $Pe < 1$, c'est la diffusion qui domine l'effet advectif et inversement si $Pe > 1$. Dans ce cas, les ions s'accumulent au niveau du front d'évaporation et la diffusion moléculaire en s'opposant à l'effet convectif, tend à homogénéiser de nouveau la concentration au sein du milieu. Cependant, si le Peclet est inférieur à 1 la concentration des ions a tendance à évoluer linéairement sur la hauteur du milieu à cause de la diffusion.

6.4 Algorithme :

6.4.1 Variation volumique de la concentration :

Durant le séchage, l'évolution de la concentration en sel dans un milieu poreux résulte de deux effets [11-12] :

- i. Le transport convectif dans la phase liquide conduisant à l'accumulation des ions sur l'interface.
- ii. La contraction du volume du liquide lors du séchage bien que la quantité du soluté reste inchangée (les phénomènes de précipitation sont négligés).

Dans ce qui suit, nous nous concentrons sur le deuxième aspect qui concerne la variation de la concentration en fonction du volume de la solution. On se place dans la situation limite où on choisit un nombre de Peclet très faible [7], ce qui correspond à des taux d'évaporation très faibles d'après l'équation (6-9) et donc un effet convectif négligé. Cette situation limite est appelée régime « hyperdiffusive » puisque la concentration et donc la fraction massique est supposée spatialement quasi-uniforme dans un amas liquide. Il est possible dès lors, de négliger l'impact du soluté sur la densité du liquide, la tension superficielle et la pression de vapeur au niveau des ménisques.

Chapitre 6 : Simulation numérique de la croissance d'un subflorescence de type 1 dans un milieu poreux dans le cadre de l'approche des réseaux de pores

Toujours en appliquant le même algorithme de séchage présenté dans le chapitre 2 de la première partie de ce manuscrit, et selon l'équation de conservation de la masse, la concentration est calculée à chaque invasion comme suit :

$$(6-10) C_i(t + dt)V_i(t + dt) = C_i(t)V_i(t)$$

Où C_i est la concentration de l'amas i , V_i le volume de l'amas liquide i (m^3), et dt est le pas de temps de l'algorithme (s) de séchage. La fragmentation de l'amas liquide principale donne naissance à de petits amas de concentrations différentes.

L'amas principal se divise en premier lieu en deux amas i_1 et i_2 telle que $C_{i_1} = C_{i_2}$, calculées à partir de l'équation (6-10) :

$$(6-11) C_{i_1/i_2}(t + dt)[V_{i_1}(t + dt) + V_{i_2}(t + dt)] = C_i(t)V_i(t)$$

Où V_i , V_{i_1} et V_{i_2} sont les volumes de, respectivement, l'amas i , i_1 et i_2 (m^3).

La réduction du volume occupé par le liquide dans le milieu fait augmenter la concentration en sel d'où vient l'appellation de l'effet de rétrécissement de la phase liquide. Notons par ailleurs que la concentration (ou la fraction massique) est supposée uniforme sur tout l'amas.

6.4.2 Variation de la concentration dans les amas :

On considère un simple réseau bidimensionnel de taille 41×36 illustré par la figure 6-1. Les pores situés sur les nœuds de la grille formant le réseau sont de rayon r_p variant entre $[0.2-0.4]$. Les diamètres des liaisons reliant ces pores sont aléatoirement distribués (les rayons des pores également) et répartie sur un intervalle $[0.2-0.8]$. La porosité de ce réseau est égale à $\varepsilon = 0.2208$ et Comme discuté dans le chapitre 2, on applique le même algorithme de séchage.

Initialement la solution saturant le milieu est de concentration initiale égale à $C_0 = 15\%$ (on peut aussi travailler avec la fraction massique initiale égale à $c_0 = 0.15$)

Le nombre de Peclet est calculé à partir de l'équation (6-9), et comme prévu sa valeur est inférieure à 1 et positive : $Pe_{init} = 0.0190$.

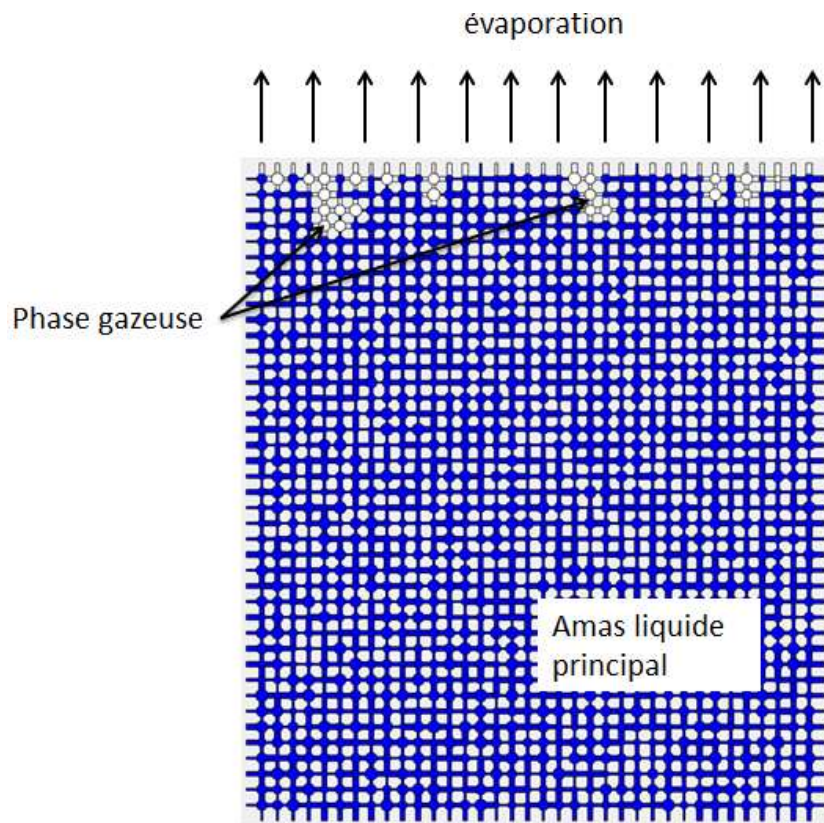


Figure 6-1 : Exemple de réseau de pores rectangulaire de taille 41*36, avant la fragmentation et de saturation égale à 0.2208.

Avant la fragmentation de l'amas liquide principale, la concentration en sel du milieu croit linéairement au fur et à mesure que le volume de cet amas se réduit à chaque invasion, voir la courbe sur la figure 6-2. La concentration étant uniforme spatialement sur l'ensemble du réseau, sa valeur augmente en raison du rétrécissement de l'amas liquide.

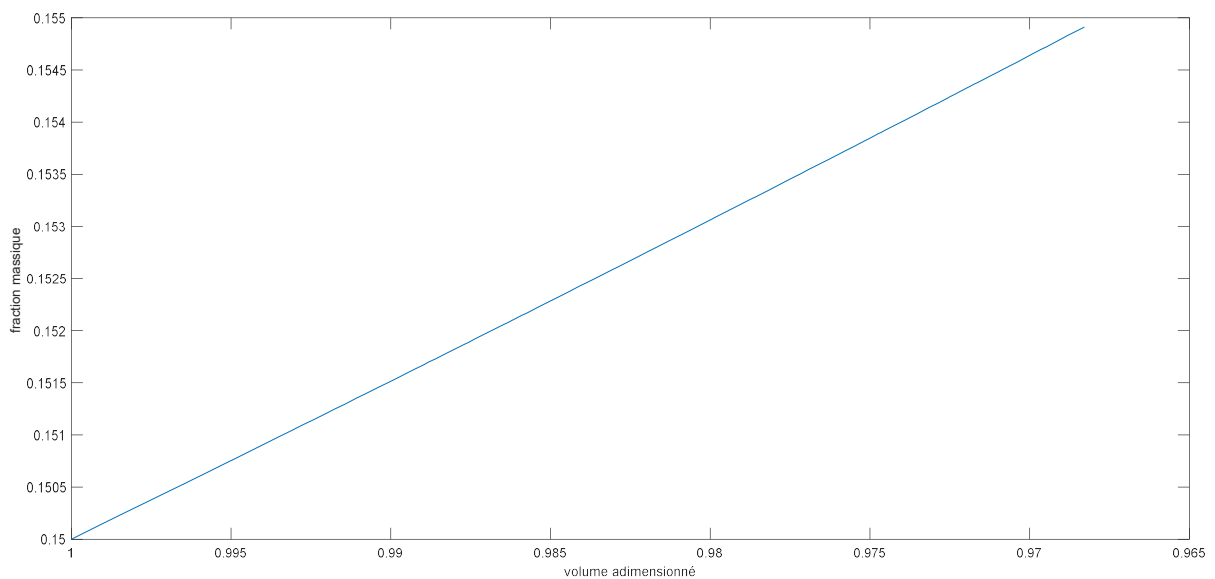


Figure 6-2: Evolution de la concentration en fonction du volume du réseau adimensionné par le volume initial.

La fragmentation de l'amas liquide principal qu'on appelle phase liquide microscopiquement percolante (percolating liquid phase) donne naissance à plusieurs amas secondaires isolés appelés phase liquide microscopiquement non percolante [13] (non percolating liquid phase) comme indiqué sur la figure 6-3.

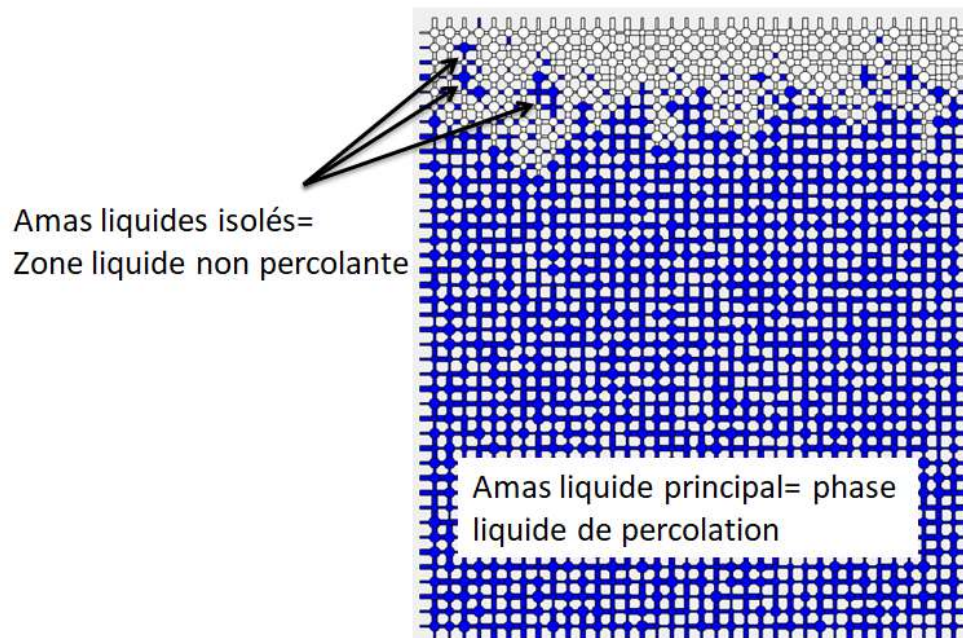


Figure 6-3 : Fragmentation de l'amas liquide principal en amas secondaires

Lorsque l'amas principal est fragmenté, la concentration n'est pas la même dans toute la phase liquide du milieu et elle varie d'un amas à un autre. Les amas isolés se forment essentiellement à partir de l'amas principal. La concentration initiale dans un amas isolé est la concentration en sel de l'amas principal au moment de la fragmentation et donc plus un amas isolé se forme tardivement plus sa concentration est importante. Les amas isolés se forment et disparaissent (la figure 6-4) au fur et à mesure dans le réseau. Le développement de la zone sèche résulte de l'évaporation progressive de ces amas. Le nombre maximal d'amas isolés formé jusqu'à la percolation pour cet exemple de simulation est égale à 14 à une saturation presque égale à 0.56. La diminution de la saturation et par la suite le rétrécissement du volume du liquide dans l'amas fait augmenter sa concentration en sel jusqu'à la valeur seuil de saturation qui est égale à 26.4%.

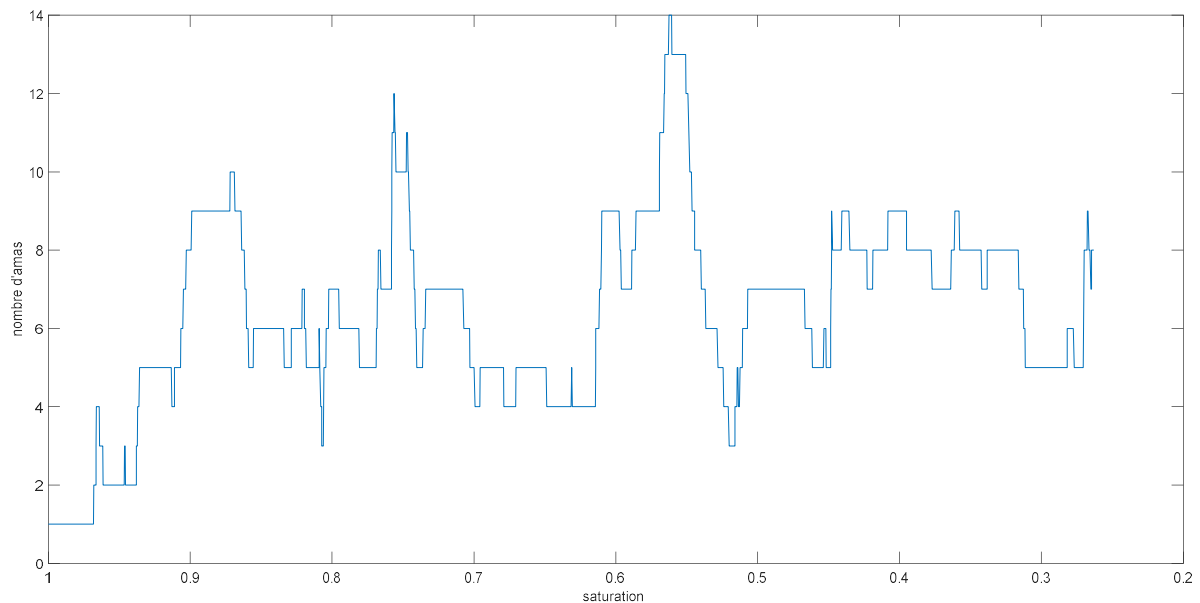


Figure 6-4 : L'évolution du nombre des amas liquides formés en fonction de la saturation en liquide du réseau jusqu'à la percolation.

Le modèle présenté dans [13] permet de prédire l'évolution de la concentration dans la phase liquide du réseau (percolante et non percolante). Une comparaison y était faite entre le modèle continu de séchage à cinq équations dans les milieux poreux capillaires en présence de sel, et les données obtenues à partir des simulations des réseaux de pores.

Dans un régime où la diffusion est le mécanisme de transport dominant, et en accord avec les simulations PNM, il a été montré dans [13] que la concentration en sel dans la phase percolante ou l'amas liquide principal, est plus élevée que dans les amas isolés dans la limite d'un faible nombre de Peclet. Une grande similitude est observée entre les résultats obtenus par notre code de simulation et le modèle présenté dans [13] puisqu'on a montré que le processus de fragmentation joue un rôle clé sur l'évolution de la concentration du sel dans le réseau. Par conséquent, bien que la diffusion soit dominante, la concentration de la solution varie dans la phase liquide à cause de la fragmentation. Le modèle continu prédit aussi que la concentration est plus importante dans l'amas principal que dans les amas isolés.

La figure 6-5 illustre les valeurs des concentrations des différents amas isolés au moment où on atteint la saturation en sel (la solubilité) pour la première fois, pour l'exemple de réseau qu'on a choisi. La concentration varie d'un amas à un autre selon son emplacement. Les amas ne diffèrent pas seulement par la valeur de la concentration mais aussi par le nombre d'éléments qui les forment. La concentration des amas 1,3,4,5 et 6 est susceptible d'augmenter et atteindre la saturation. On voit clairement que la distribution de concentration n'est pas uniforme sur toute la zone liquide et que la saturation et par la suite la cristallisation peut se produire dans un amas avant les autres.

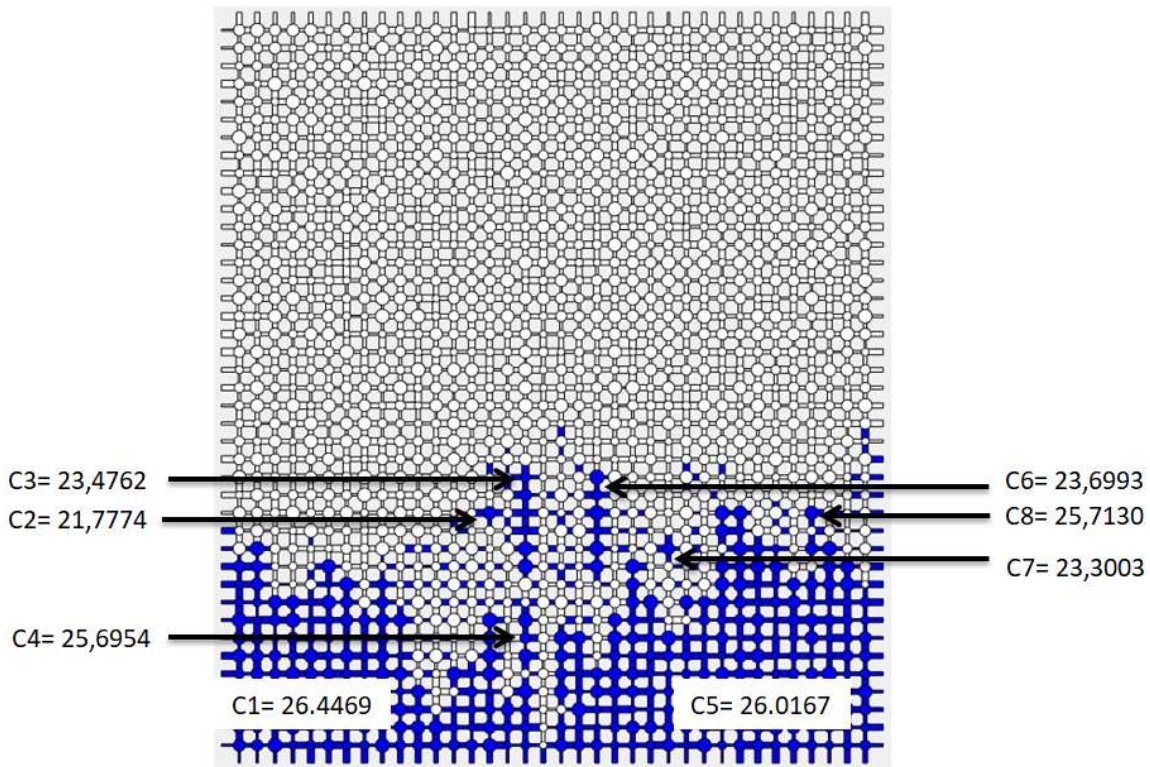


Figure 6-5 : Les valeurs de la concentration des différents amas présents dans le PNM à la saturation (lorsque la concentration atteint la solubilité dans l'un des amas)

6.5 Porosité de la subflorescence :

Commençant d'abord par la définition de quelques notions de bases. On se place dans le régime « hyperdiffusif » (fraction massique quasi-uniforme spatialement dans un amas). En considérant un réseau de pores initialement saturé en solution saline, la solubilité de ce sel correspond à la fraction massique $c_{sat} = 0.264$ et la masse volumique de la halite est égale à $\rho_{cr} = 2160 \text{ kg.m}^{-3}$. L'évolution de la concentration de sel dans le réseau suit la loi représentée par l'équation (6-10). Au fur et à mesure que l'évaporation progresse, l'interface liquide vapeur se développe dans le milieu et la concentration (ou la fraction massique) de sel augmente jusqu'à atteindre la saturation C_{sat} (la solubilité). La cristallisation se produit pour une valeur de concentration supérieure à la solubilité qu'on note C_{cr} , ce phénomène est qualifié de supersaturation. La subflorescence formée est considérée comme une structure poreuse de porosité ε_{cr} [17] occupant un volume V_{cr} .

La masse de sel dans l'amas quand la cristallisation se déclenche est :

$$(6-12) M_s = \rho_l(C_{cr})c_{cr}$$

Avec ρ_l : La masse volumique de la solution en (Kg.m^{-3}), C_{cr} : La fraction massique de sel supérieure à la solubilité.

En considérant que la subflorescence formée comme une structure poreuse de porosité ε_{cr} Cette structure occupera le volume V_{cr} au sein de l'espace des pores donné par :

$$(6-13) V_{cr} = \frac{M_s V}{\rho_{cr}(1-\varepsilon_{cr})} = \frac{\rho_l(c_{cr})c_{cr}V_t}{\rho_{cr}(1-\varepsilon_{cr})}$$

Avec V le volume de l'amas liquide (m^3), ρ_{cr} la masse volumique de l'halite.

Si la fraction massique est égale à la saturation $c_{cr} = C_{sat}$ on a :

$$(6-14) V_{cr} = \frac{\rho_l(c_{sat})c_{sat}V}{\rho_{cr}(1-\varepsilon_{cr})} \approx \frac{0.15}{(1-\varepsilon_{cr})} V_t$$

Par conséquent, si $\varepsilon_{cr} > 0.85$ le volume final de la structure de sel est plus grand que le volume de l'amas liquide au déclenchement de la cristallisation. Si $\varepsilon_{cr} < 0.85$ ce volume est plus petit (cet argument sur les volumes peut permettre d'estimer la porosité de la structure de sel dans d'éventuelles manipulations expérimentales). A priori $\varepsilon_{cr} < 0.85$ et donc la structure de sel devrait occuper un volume final moindre que le volume de l'amas à la nucléation. Dans nos simulations, on supposera que la porosité de la structure est uniforme et égale à 0.25. Cette hypothèse est acceptable puisqu'on se place dans un régime où le taux d'évaporation est suffisamment faible (logique pour un P_e suffisamment faible), pour qu'on puisse considérer que la porosité de la structure de sel ne varie pas (ni dans le temps, ni spatialement).

6.6 Modélisation de la variation des volumes du sel et de l'eau libre:

On suppose qu'il y a un seul site de nucléation (hypothèse discutable mais raisonnable dans la limite des faibles taux d'évaporation). Il faut commencer par placer le premier cristal c'est l'étape de nucléation. Plusieurs hypothèses peuvent être testées. Par exemple: on peut tirer sa position aléatoirement dans l'amas liquide. On adopte la règle suivante. Le site de nucléation est le pore gazeux premier voisin du lien interfacial où le taux d'évaporation est le plus grand à la frontière de l'amas liquide. Par ailleurs, on peut tout simplement choisir un emplacement, un pore gazeux sur la frontière liquide-vapeur.

Le volume de la subflorescence dans l'espace des pores est V_{s_ex} :

$$(6-15) V_{s_ex} = \frac{M_{s_ex}}{\rho_{cr}(1-\varepsilon_{cr})} = \frac{\rho_l(c_{cr})c_{cr} - \rho_l(c_{sat})c_{sat}}{\rho_{cr}(1-\varepsilon_{cr})} V_t$$

A la fin de la croissance, l'eau est répartie entre la porosité de l'amas de cristal et le milieu poreux (substrat). Au moment de la nucléation, la masse d'eau dans l'amas liquide est :

$$(6-16) M_{wat} = \rho_{cr}(c_{cr})(1 - c_{cr})V_t$$

La masse d'eau dans la structure de sel à la fin de la nucléation est :

$$(6-17) M_{wat-cr} = \rho_l(c_{sat})(1 - c_{sat})\varepsilon_{cr}V_{s-ex}$$

A la fin de la nucléation, et à partir des équations 6-16 et 6-17, la masse d'eau hors la structure de sel est donnée par :

Chapitre6 : Simulation numérique de la croissance d'un subflorescence de type1 dans un milieu poreux dans le cadre de l'approche des réseaux de pores

$$M_{wat_free} = M_{wat} - M_{wat_{cr}} = (\rho_l(c_{cr})(1 - c_{cr}) - \frac{\rho_l(c_{sat})(1 - c_{sat})(\rho_l(c_{cr})c_{cr} - \rho_l(c_{sat})c_{sat})}{\rho_{cr}} \frac{\varepsilon_{cr}}{1 - \varepsilon_{cr}}) V_t \quad (6- 18)$$

Par conséquent, Le volume de l'espace des pores occupé par la solution à la fin de la nucléation est :

$$V_{wat_free} = \frac{M_{wa_free}}{\rho_l(c_{sat})(1 - c_{sat})} = \left(\frac{\rho_l(c_{cr})(1 - c_{cr})}{\rho_l(c_{sat})(1 - c_{sat})} - \frac{\rho_l(c_{cr})c_{cr} - \rho_l(c_{sat})c_{sat}}{\rho_{cr}} \frac{\varepsilon_{cr}}{1 - \varepsilon_{cr}} \right) V_t \quad (6- 19)$$

Cette équation (6-19) dépend de deux paramètres : la porosité ε_{cr} et le niveau de sursaturation c_{cr}/c_{sat} . On peut donc étudier l'évolution de $\frac{V_{wat_free}}{V_t}$ en fonction de ε_{cr} et c_{cr}/c_{sat} .

La figure 6-6, ci-dessous, montre que pour différentes valeurs de la porosité de la structure de sel ε_{cr} , le volume V_{wat_free} est inférieur au volume de l'amas liquide en sursaturation sauf si $c_{cr} = c_{sat}$, ils sont égaux. De même, à partir de la figure 6-7, on remarque qu'en variant les fractions massiques en supersaturation, V_{wat_free} diminue quand la porosité ε_{cr} augmente sauf pour $c_{cr} = c_{sat}$ où il reste constant et égal au volume de l'amas liquide du réseau V_t .

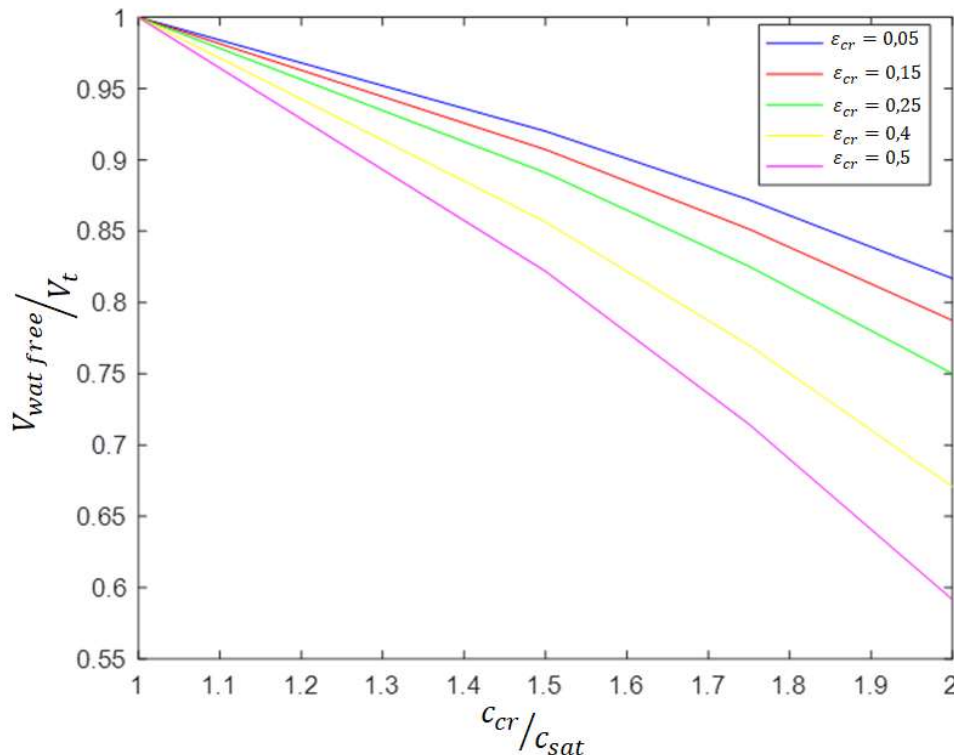


Figure 6- 6 : La variation de la fraction du volume d'eau libre dans l'amas par rapport au volume de l'amas en fonction de la supersaturation

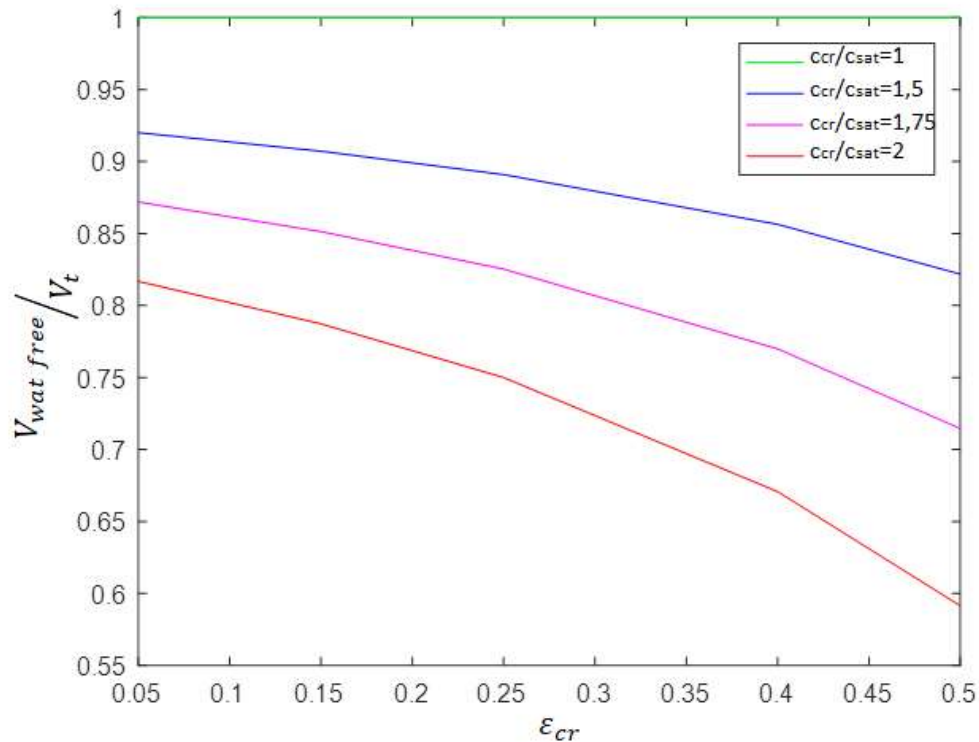


Figure 6- 7 : La variation de la fraction du volume d'eau libre dans l'amas par rapport au volume de l'amas en fonction de la porosité du cristal

On peut aussi tracer la variation du volume du sel en excès en fonction de la sursaturation pour différentes valeurs de la porosité ϵ_{cr} , voir la figure 6-8. Lorsque $c_{cr} = c_{sat}$, on n'a évidemment pas de sel en excès mais au fur et à mesure que le rapport de concentration augmente, le volume occupé par la structure de sel devient important. La figure 6-9 illustre la variation du volume du sel en excès en fonction de la porosité, en faisant augmenter la porosité ϵ_{cr} le volume du sel en excès augmente par rapport au volume de l'amas liquide pour une saturation supérieure à 1. Ce volume n'est invariant et nul que lorsque $c = c_{sat}$.

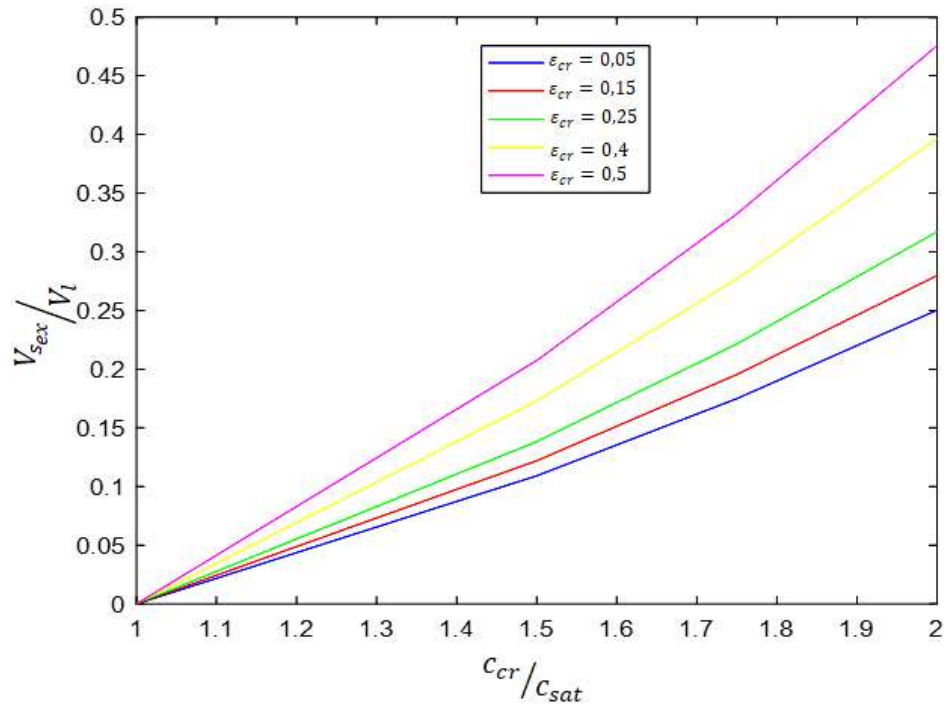


Figure 6-8 : Volume du sel en excès par rapport au volume de l'amas en fonction de la sursaturation c_{cr}/c_{sat} pour différentes porosités du cristal

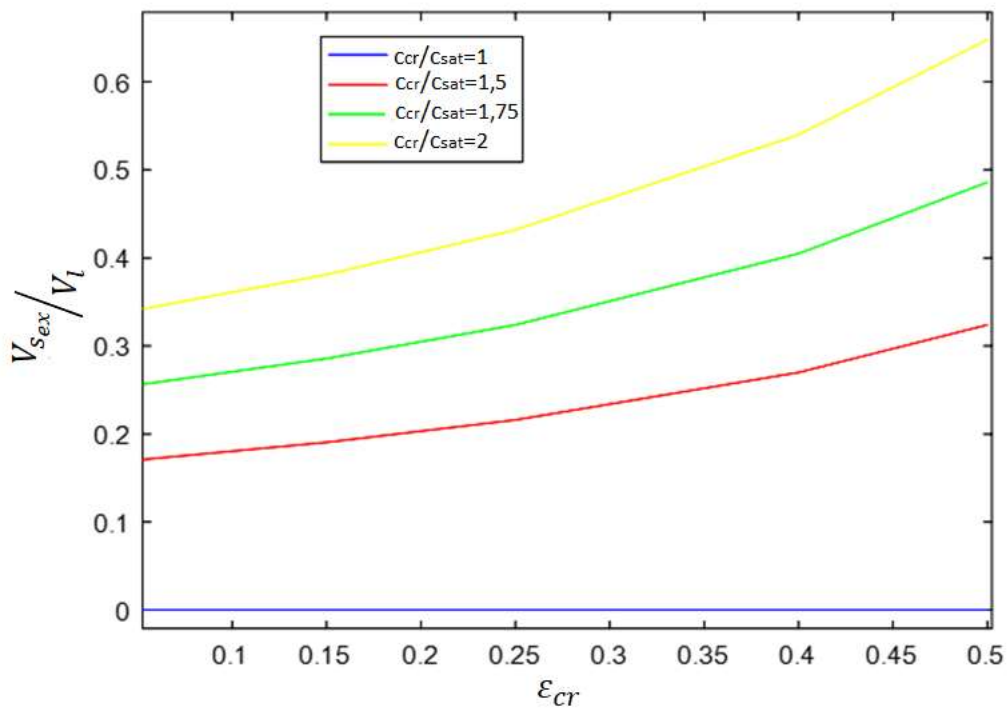


Figure 6-9 : Volume du sel en excès par rapport au volume de l'amas en fonction de la porosité du cristal pour différentes sursaturation c_{cr}/c_{sat}

6.7 Modélisation de la nucléation :

6.7.1 La partie liquide :

Pour simuler la contraction de l'amas liquide, on applique les règles de la percolation d'invasion jusqu'à ce que son volume soit égale à V_{wat_free} .

6.7.2 La structure de sel :

Pour générer la nucléation du sel, nous développons l'algorithme suivant, en supposant que la croissance de la structure de sel à cette étape est pilotée par la taille des éléments du réseau donc un effet négligeable de l'évaporation (une première approximation à considérer).

- 1) Sur la frontière liquide-vapeur, on cherche le pore de plus grand taux d'évaporation. C'est le premier point de l'amas de cristal.
- 2) On remplit le pore tel que le volume du sel à placer est :

$$(6-20) V_s = V_{s_ex} - V_{pore_nucleation}$$

Avec $V_{pore_nucleation}$ (m^3) le volume du pore où on place le premier cristal et V_{s_ex} (m^3) le volume, calculé selon l'équation 6-15, que doit occuper la structure de sel à la nucléation. Actualisation du volume du sel en excès restant tel que :

$$(6-21) V_s = V_{s_ex} - V_s$$

- 3) Si $V_s > 0$, On identifie la frontière de l'amas cristallin formé et on calcule le temps de remplissage des éléments de cette frontière tel que :

$$(6-22) t_{el} = \frac{\rho_{cr}(1-\varepsilon_{cr})}{g} V_{el}$$

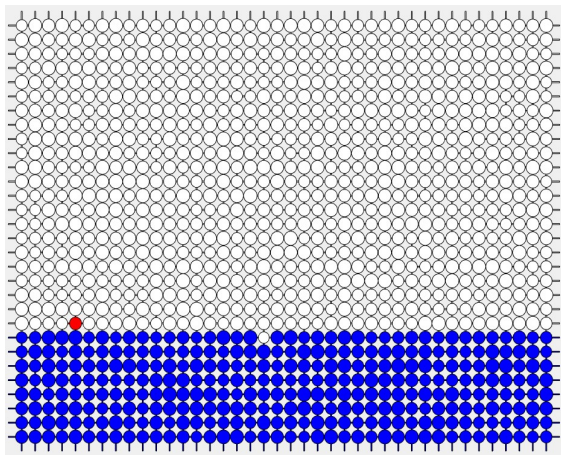
g est le taux de croissance exprimé en ($Kg.s^{-1}$) puisqu'on a supposé que l'impact de l'évaporation est négligé

- 4) On remplit complètement l'élément associé au temps le plus court par le volume calculé en 3) et les autres proportionnellement à ce temps
- 5) Actualisation du système jusqu'à $V_{s_ex} = 0$, sinon retour à l'étape 3.

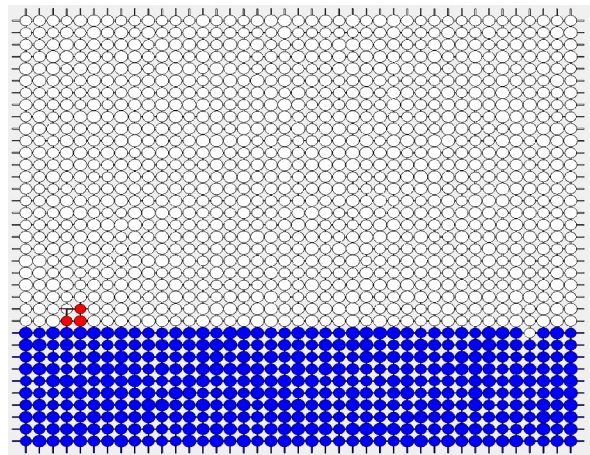
6.7.3 Résultats de simulation de l'étape de nucléation pour différentes sursaturations:

Considérons le même exemple de réseau étudié dans la première partie (chapitre2 et 3). Le réseau est de taille 36*41 avec une couche additionnelle de 15 nœuds. Les rayons des pores sont compris entre 04 et 0.5 et les diamètres des liens sont entre 0.13 et 0.16. La porosité est donc égale à 0.8899. Notre milieu est initialement saturé en solution riche en NaCl. On fixe la porosité de la structure de sel formée à $\varepsilon_{cr} = 0.25$. En utilisant les équations définies précédemment, on peut placer le point de nucléation dans le réseau. Le tableau 3-1 illustre un exemple de structure de sel développée à la nucléation pour différentes valeurs de sursaturation allant de $c_{cr} = c_{sat}$ à $c_{cr} = 2c_{sat}$. Plus la quantité de sel (calculée par l'équation

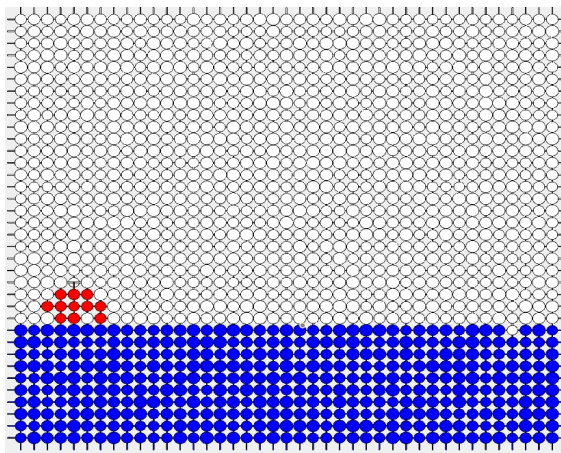
6-15) est grande plus la structure de sel à la nucléation est importante et sa croissance est développée.



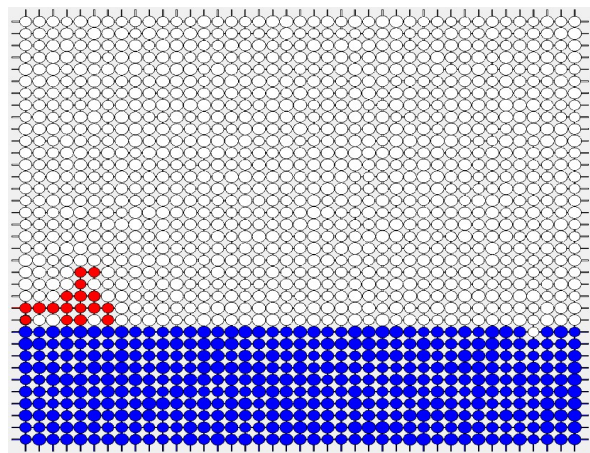
$$C_{cr} = C_{sat}$$



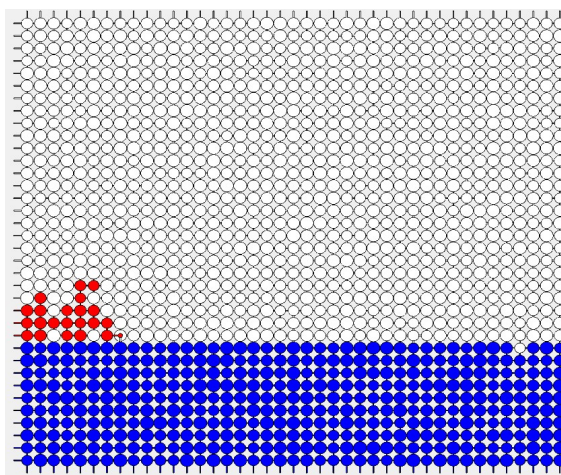
$$C_{cr} = 1.02C_{sat}$$



$$C_{cr} = 1.2C_{sat}$$



$$C_{cr} = 1.5C_{sat}$$



$$C_{cr} = 2C_{sat}$$

Figure 6-10 : Différents points de nucléations dans un réseau de taille 36*41 de porosité égale à 0.8899 pour différentes sursaturations.

Chapitre6 : Simulation numérique de la croissance d'un subflorescence de type1 dans un milieu poreux dans le cadre de l'approche des réseaux de pores

A partir des tableaux comparatifs 6-1 , qui regroupent les résultats théoriques et ceux calculés par le code, on peut tracer et comparer les variations du volume de sel en excès et le volume de l'espace des pores occupé par la solution en fonction de la concentration après la saturation.

Tableau 6- 1 : Tableaux comparatifs des résultats calculés par le simulateur et les résultats théoriques

théoriquement					
C	$a=C_{cr}/C_{sat}$	$V_{cr}/V_{totalamas}$	$V_{s_ex}/V_{totalamas}$	$V_{totalamas}/V_{totalamas}$	$V_{w_free}/V_{totalamas}$
26.4	1	0.1999	0	1	1
39.6	1.5	0.3382	0.1383	1	0.8910
46.2	1.75	0.4215	0.2216	1	0.8253
52.8	2	0.5170	0.3171	1	0.7500
code					
C	$a=C_{cr}/C_{sat}$	$V_{cr}/V_{totalamas}$	$V_{s_ex}/V_{totalamas}$	$V_{totalamas}/V_{totalamas}$	$V_{w_free}/V_{totalamas}$
26.4536	1.0020	0.2004	0.0005	1.0000	0.9996
39.8961	1.5112	0.3417	0.1418	1.0000	0.8882
46.9281	1.7776	0.4314	0.2315	1.0000	0.8175
53.9361	2.0430	0.5349	0.3350	1.0000	0.7359

Une correspondance entre les résultats de calcul des volumes en fonction de la concentration est observée dans les courbes de la figure 6-11. On peut donc s'assurer que le code fonctionne correctement.

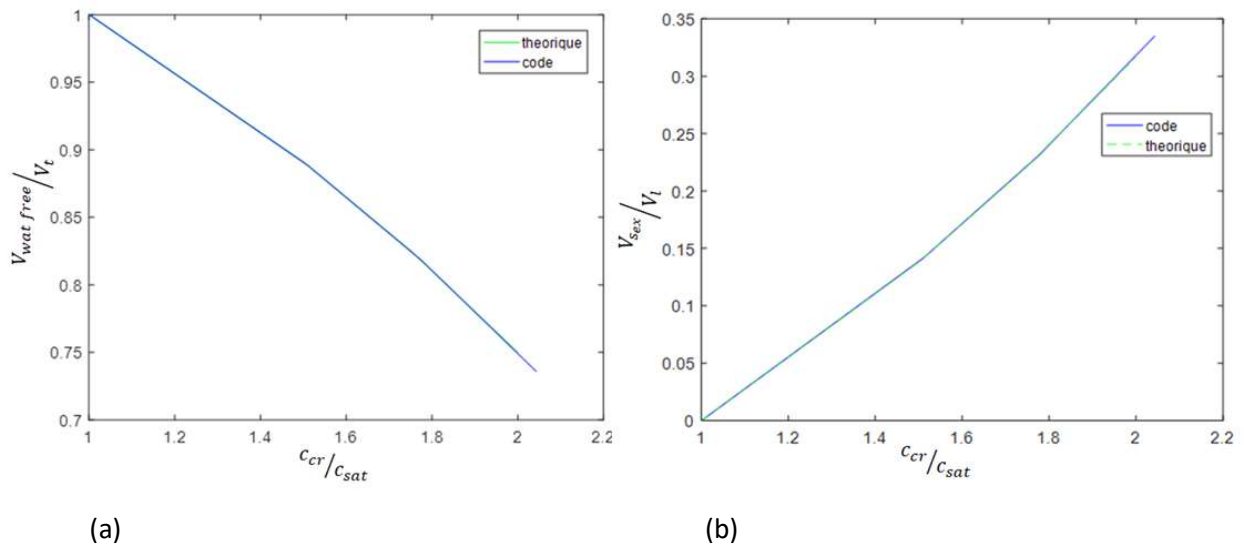


Figure 6- 11: (a) Volume d'eau libre par rapport au volume de l'amas en fonction de la sursaturation. (b) Volume du sel en excès par rapport au volume de l'amas en fonction de la sursaturation.

6.8 Croissance de la structure de sel :

La deuxième partie de ce chapitre consiste à faire croître l'amas de cristal après avoir placé le premier point de nucléation. On s'intéresse à la subflorescence de type 1 décrite dans le chapitre précédent. Le premier cristal est placé sur le front de séchage et la croissance se fait

Chapitre6 : Simulation numérique de la croissance d'un subflorescence de type1 dans un milieu poreux dans le cadre de l'approche des réseaux de pores

dans la zone totalement sèche. On néglige les films liquides dans un premier temps. Cette croissance est contrôlée par le phénomène d'évaporation et l'évolution de l'amas [17]. Considérons donc un amas de cristaux encore humide, c'est-à-dire en contact avec de la solution comme schématisé sur la figure 6-12.

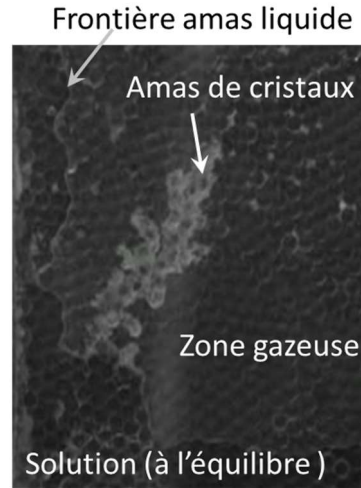


Figure 6-12 : Image d'un amas de cristaux se développant dans la phase gazeuse et connecté à un amas liquide supposé à la solubilité.

Contrairement à la nucléation, on suppose que la croissance de la structure de sel est pilotée par l'évaporation. En se basant donc sur la loi de croissance (équation 6-23) [16], cette équation montre que la croissance de l'amas est proportionnelle au flux d'évaporation :

$$(6-23) \frac{dz_t}{dt} = \frac{c_{sat} J_t}{\rho_{cr}(1-\varepsilon_{cr})(1-c_{sat})} \left[\frac{Da}{1+Da} \right]$$

Avec:

Da : Le nombre de Damkhöler [16]: qui caractérise la compétition entre la réaction de précipitation-dissolution et le transport diffusif exprimé par:

$$(6-24) Da = \sqrt{\frac{(1-\varepsilon_{cr})^2(1-c_{sat})k_r}{\varepsilon_{cr}D_{s,eff}a_v}}$$

Où z_t est la position d'un point à la frontière de l'amas des cristaux, ε_{cr} la porosité du sel, $D_{s,eff}$ est la diffusivité effective (m^2s^{-1}), a_v la surface du pore (m^2), c_{sat} est la solubilité et k_r le coefficient de la réaction de dissolution-précipitation. Dans nos exécutions on prend $Da = 1$.

6.8.1 Modélisation de la croissance de la subflorescence:

La modélisation de la croissance de la subflorescence est basée sur l'algorithme suivant :

- 1) Le taux d'évaporation J est calculé pour chaque ménisque à la frontière de l'amas liquide et pour chaque interface amas de cristaux-gaz à la frontière de l'amas de cristaux par la résolution de l'équation de diffusion. (l'équation 2-6 du chapitre 2)
- 2) A l'aide de l'équation (6-23), on calcule le taux de croissance local dans chaque lien et pore à la frontière de l'amas de cristal.

- 3) Le taux global d'évaporation de l'amas liquide J est la somme des taux d'évaporation de l'amas liquide et l'amas de cristaux. On applique les règles du séchage et on identifie l'élément de volume V_t de plus grand diamètre, le temps de vidange de cet élément est donc:

$$(6- 25)t_{v-al} = \rho_\ell V_t / J$$

- 4) Soit

$$(6- 26)\frac{dV_{ci}}{dt} = J_i \frac{c_{sat}}{\rho_{cr}(1-\varepsilon_{cr})(1-c_{sat})} \left[\frac{Da}{1+Da} \right]$$

Où V_{ci} est le volume occupé par l'amas de cristal dans l'élément du réseau i (pore ou lien) et J_i le taux d'évaporation pour l'élément considéré.

La croissance de l'amas de cristaux s'effectue selon l'équation (6-26) dans tous les éléments de l'interface cristal-gaz. On peut donc identifier l'élément à la frontière de l'amas de cristal qui va se remplir le premier comme suit :

$$(6- 27)t_{r-ac} = \frac{V_{ci}}{\left(J_i \frac{c_{sat}}{\rho_{cr}(1-\varepsilon_{cr})(1-c_{sat})} \left[\frac{Da}{1+Da} \right] \right)}$$

- 5) Actualisation du réseau

Le pas du temps est donné par :

$$(6- 28)dt = \min (t_{r-ac}, t_{v-al})$$

- Si $dt = t_{v-al}$ ($t_{v-al} < t_{r-ac}$): l'élément de l'amas liquide identifié en 3) est complètement envahi et l'amas de cristal croit localement (c'est-à-dire dans chaque élément interfacial de l'amas de cristal) selon :

$$(6- 29)V_{ci}(t + t_{v-al}) = V_{ci}(t) + J_i \frac{c_{sat}}{\rho_{cr}(1-\varepsilon_{cr})(1-c_{sat})} \left[\frac{Da}{1+Da} \right] t_{v-al}$$

- Si $dt = t_{r-ac}$ ($t_{v-al} > t_{r-ac}$): l'élément de l'amas liquide identifié en 3) est partiellement séché selon :

$$(6- 30)\rho_\ell V_t(t + t_{r-ac}) = \rho_\ell V_t(t) - J t_{r-ac}$$

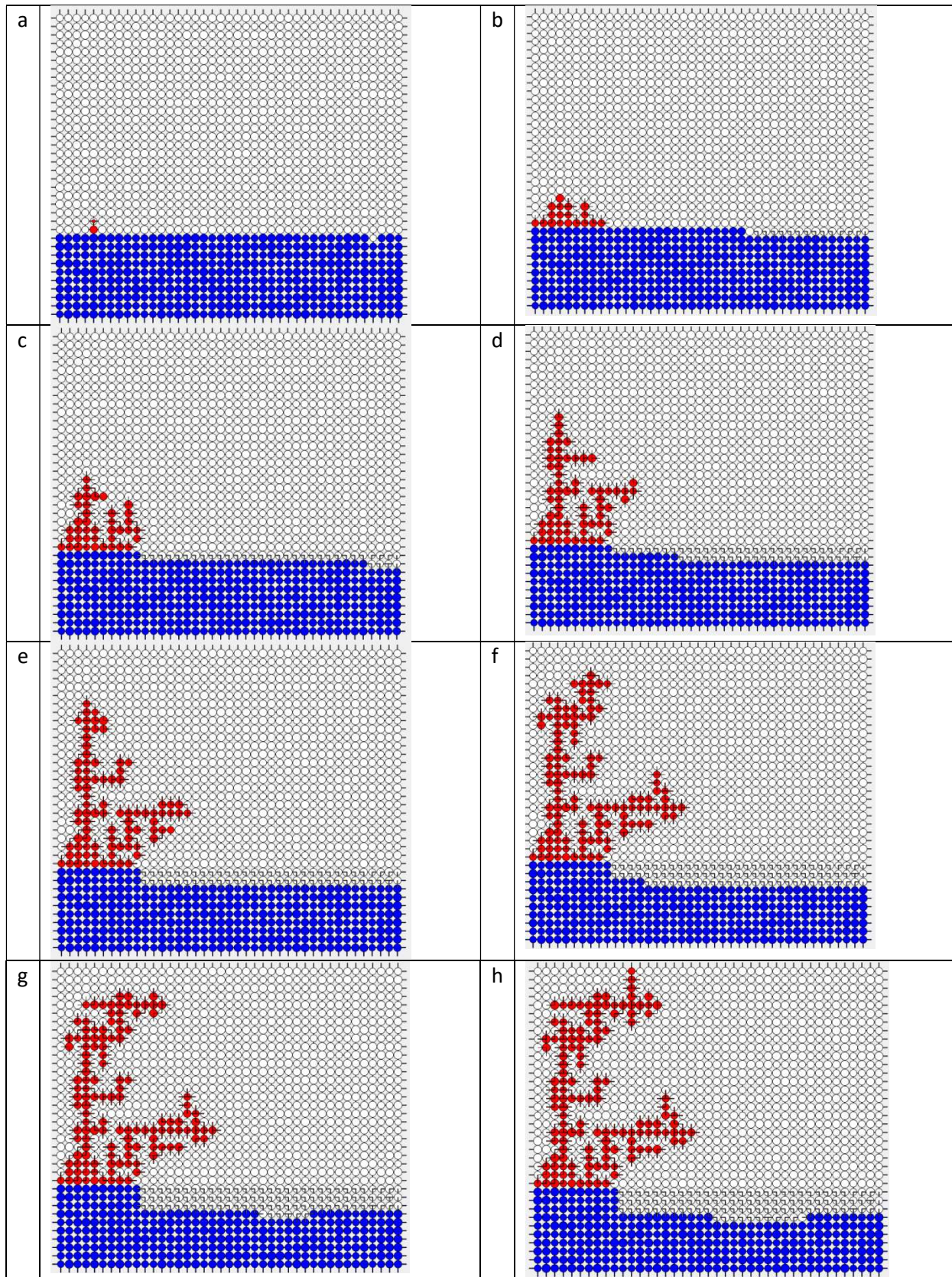
Et l'élément interfacial de l'amas de cristal correspondant à t_{r-ac} est complétement envahi tandis que les autres éléments se remplissent selon :

$$(6- 31)V_{ci}(t + t_{r-ac}) = V_{ci}(t) + J_i \frac{c_{sat}}{\rho_{cr}(1-\varepsilon)(1-c_{sat})} \left[\frac{Da}{1+Da} \right] t_{r-ac}$$

6.8.2 Représentation des résultats de la croissance de la subflorescence :

Le tableau 6-2 illustre les étapes de formation de la subflorescence avec l'exemple de réseau de pores choisi précédemment ($\varepsilon = 0.8899$). Le point de nucléation choisi est obtenu pour une fraction massique légèrement supérieur à la solubilité (une légère sursaturation).

Tableau 6-2 : Etapes de formation de la subflorescence dans un exemple de réseau 36*41 de porosité $\epsilon_{cr} = 0.8899$



L'évolution de la structure cristalline, en appliquant les règles de l'algorithme développé précédemment, est dirigée vers la face supérieure du réseau restant toujours attachée à l'amas liquide. La subflorescence présente aussi des branches dans les directions latérales et qui sont moins importantes. Le front de séchage entre l'amas liquide (de mouillabilité mixte (hydrophobe ayant une zone hydrophile sous la structure de sel)) et zone sèche continue à évoluer linéairement.

L'expérience a montré que la croissance de la structure de sel est contrôlée par la distribution de flux de séchage à sa limite. En effet, une surconcentration locale dans le sel donne lieu à la formation d'une subflorescence principale qui reste attachée à la zone liquide saturée. La première observation est que la structure s'est développée progressivement sur la longueur du micromodèle. En outre, cette croissance est dirigée vers le bord ouvert du réseau (la face supérieure) dans la région remplie de gaz comme indiquée sur la figure 6-13. En comparant avec notre simulation numérique, on remarque que la morphologie de la subflorescence principale est similaire à l'allure expérimentale.

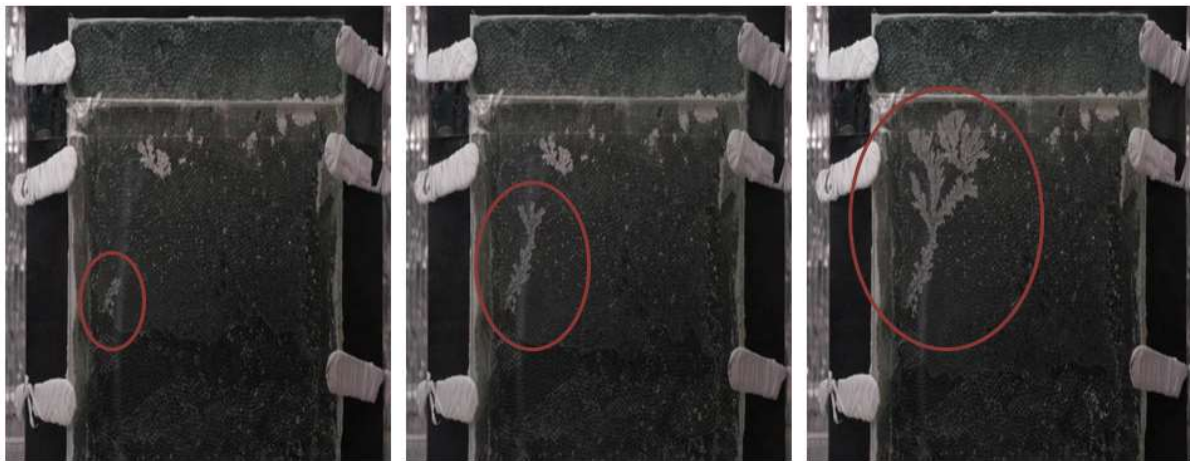


Figure 6-13 : Quelques étapes expérimentales de croissance de la subflorescence principale [17]

Les résultats de la simulation sont considérés acceptables vu la ressemblance trouvée avec le résultat expérimental. Toutefois, la différence expérimentale-numérique est principalement due à la taille du réseau de l'expérience qui est plus grand que celui du code (le réseau de l'expérience est 60×73 alors qu'on choisit de générer le code avec un réseau de 36×41). Par ailleurs la zone de transition (discutée dans le chapitre 5 de ce manuscrit) est négligée pour l'instant dans ce modèle. La porosité du milieu joue aussi un rôle important dans la mise en place de la structure de sel. En effet, numériquement, on génère aléatoirement les tailles des pores et liens de notre réseau et on travaille avec une porosité assez élevée vu que la taille des pores est trois fois plus grande que celle des liens (dans l'exemple présentée $\epsilon = 0.8899$) tandis que la porosité du réseau expérimentale est entre 0.37 et 0.47.

L'introduction des paramètres de l'expérience afin de pouvoir faire une comparaison précise, fait l'objet d'un article en cours de préparation

Chapitre6 : Simulation numérique de la croissance d'une subflorescence de type1 dans un milieu poreux dans le cadre de l'approche des réseaux de pores

Les différences observées lors de la comparaison expérimentale-numérique peuvent être expliquées par le rôle que peut jouer les subflorescences de types 2 et 3 discutées dans le chapitre 5 et illustrées dans la figure 6-14 puisque à ce stade de modélisation on ne tient pas compte de ces structures de sel qui apparaissent plutôt dans le réseau et leur effet probable sur la croissance de la subflorescence principale.

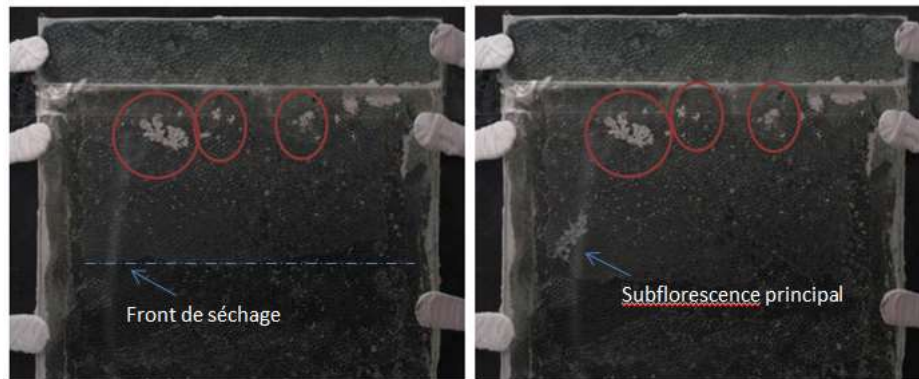


Figure 6-14 : Des structures de sel développées en haut du réseau avant l'apparition de la subflorescence principale étudiée

Une autre génération a été faite sur ce réseau 36*41 où on a gardé la taille des éléments du réseau et on a modifié la distribution aléatoire des rayons. Illustrée par la figure 6-15, la morphologie de la structure cristalline est similaire à celle de l'exemple précédent mais avec une croissance plus au moins rapide (moins de ramifications). La distribution de la pression et du flux sont illustrées respectivement sur les figures 6-16 et 6-17. On remarque que les lignes de pression (figure 6-16) sont très rapprochées en haut du réseau c.a.d au sommet de la subflorescence. On peut clairement identifier le contour ou la morphologie de la subflorescence sur les isobares. La figure 6-17, qui illustre le flux d'évaporation à la frontière de l'amas cristallin (la frontière vapeur-crist), montre que le flux est aussi très important au sommet de la structure de sel ce qui prouve que la croissance de la subflorescence est contrôlée par l'évaporation et plus on se rapproche de la surface plus le flux d'évaporation local est important.

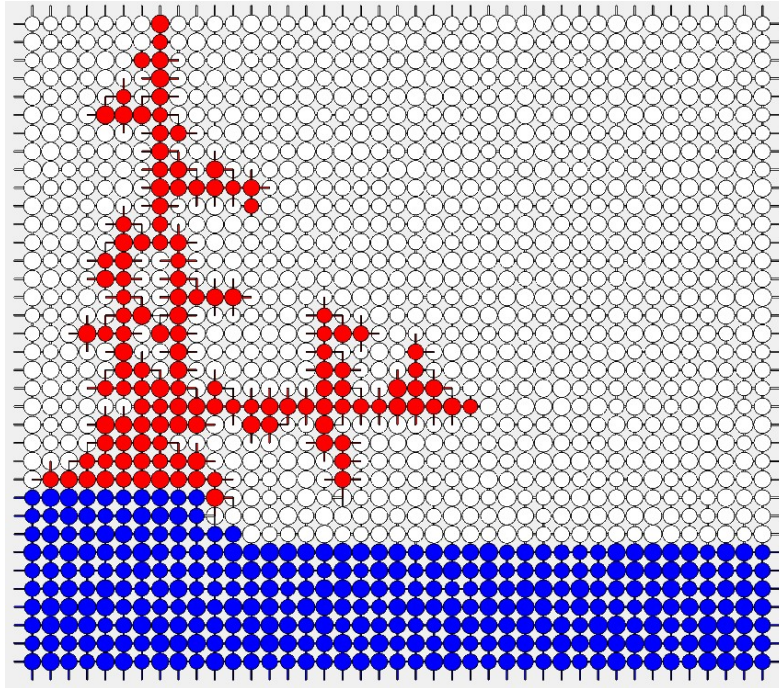


Figure 6-15 : Croissance de la subflorescence principale d'une nouvelle distribution aléatoire des rayons des pores et des liens du réseau 36*41.

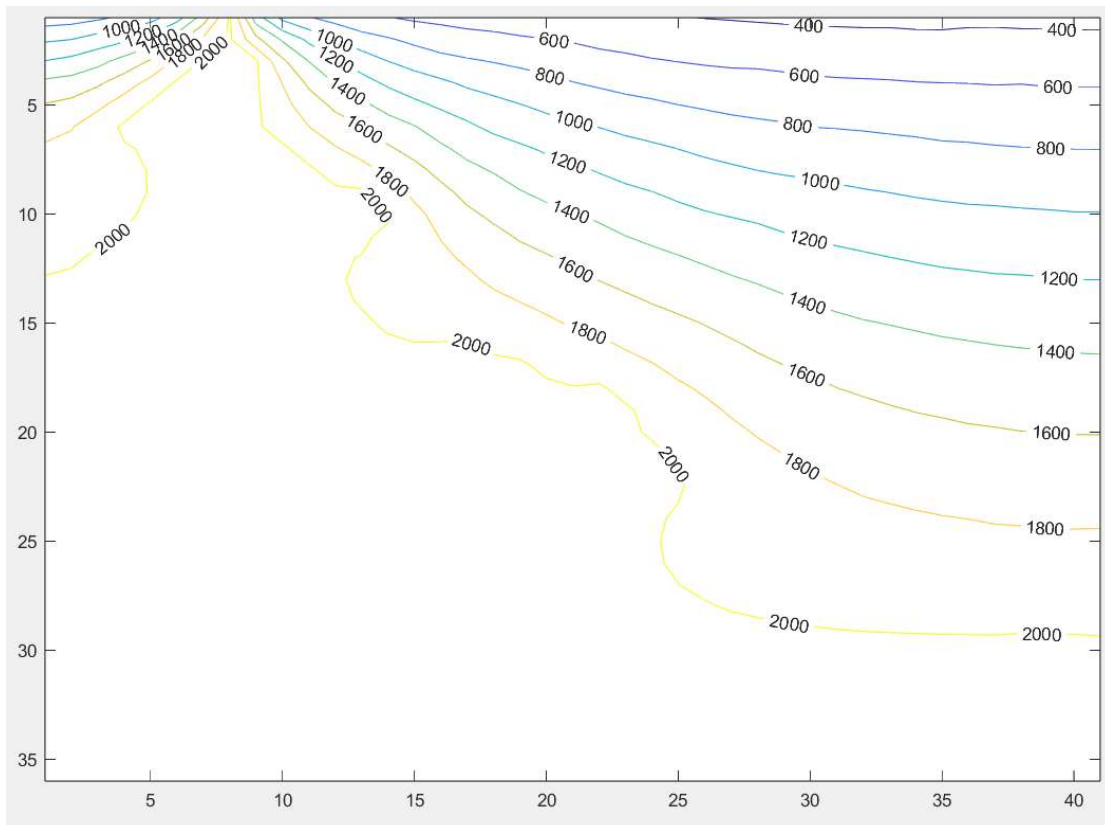


Figure 6-16: La distribution des lignes de pression du même réseau 36*41

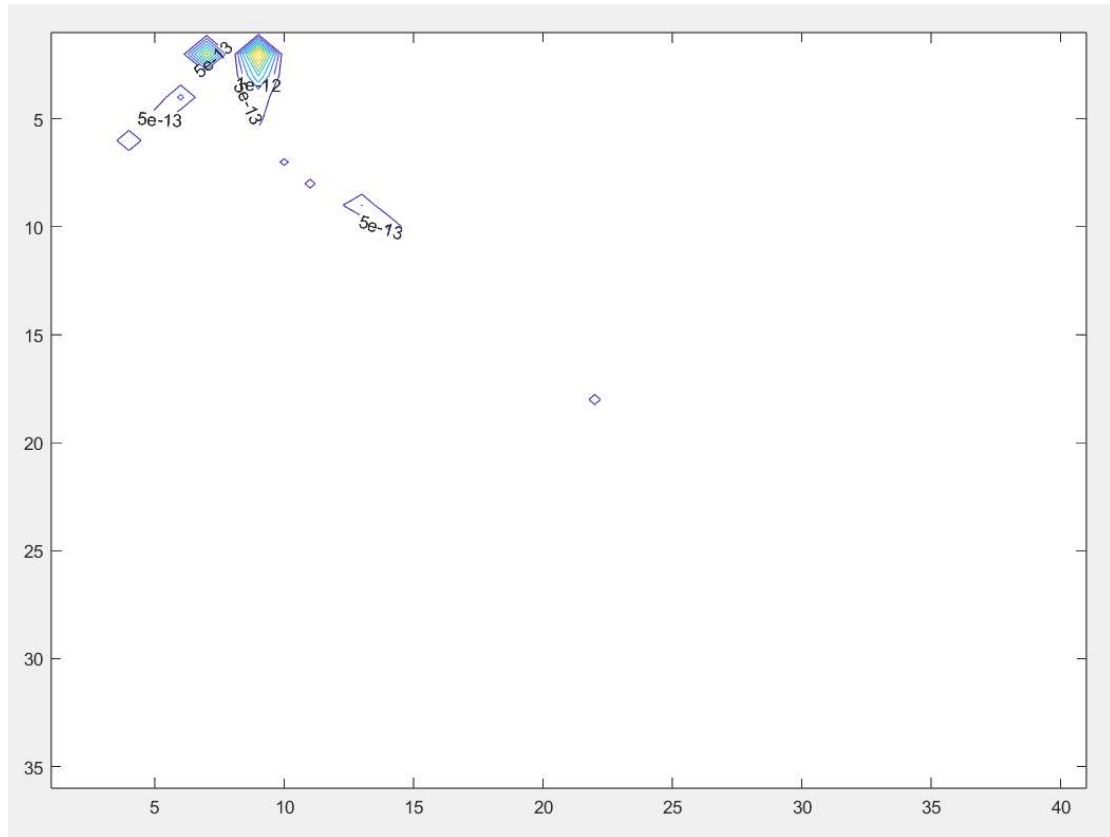
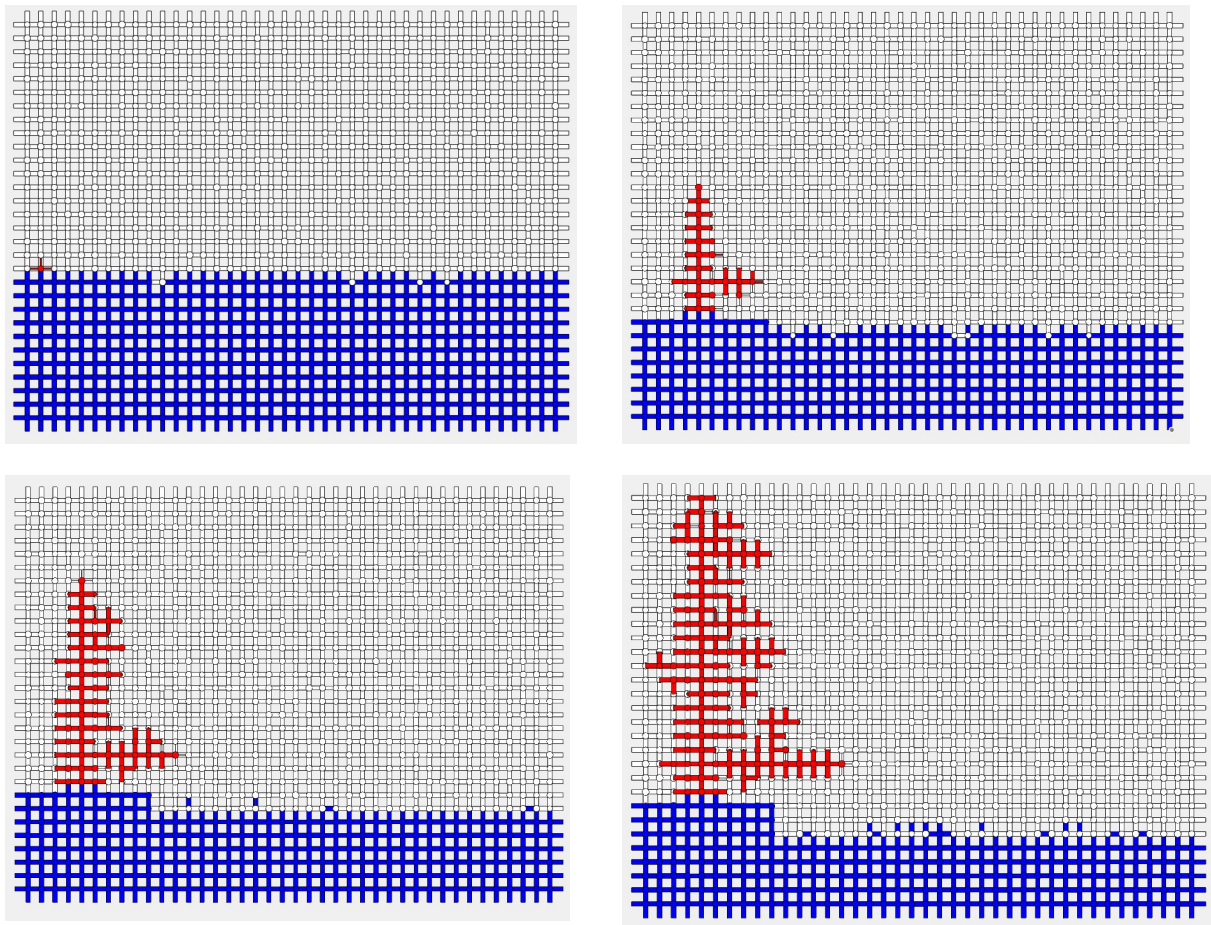


Figure 6-17: Distribution de flux à la frontière vapeur-crist du réseau 36*41

D'autres réalisations ont été générées afin de bien valider la concordance de notre code avec les résultats expérimentaux. Dans un premier temps, on a fait varier la taille des éléments de notre réseau de départ tout en gardant les mêmes distributions aléatoires. Deux cas sont à traiter. Mis à part l'exemple de base d'un réseau classique où la taille des pores est trois fois plus grande que celle des liens, deux exemples de réseaux micro fluidiques sont choisis. Le premier où la taille des pores est inférieure à celle des liens (tableau 6-3) et le deuxième où les pores et les liens ont la même taille.

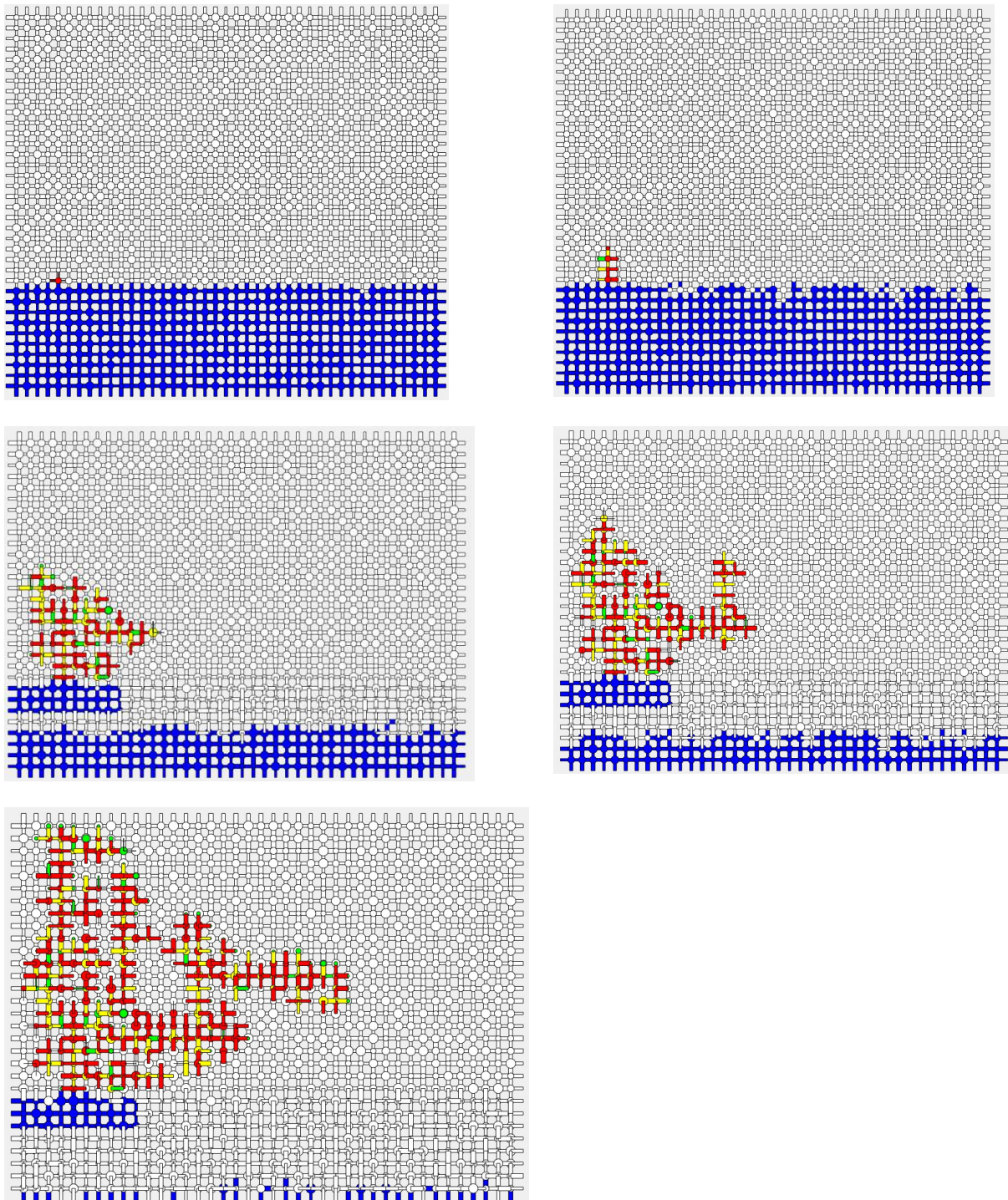
Le tableau 6-3 regroupe quelques étapes de croissance dans un PNM de taille 36*41 et dont la taille des pores est entre 0.2 et 0.25 et celle des liens entre 0.3 et 0.35 (la porosité dans ce cas est égale à 0.05). Le front de séchage évolue toujours linéairement et la subflorescence croît vers le bord supérieur du réseau tout en ayant des branches moins ramifiées que l'exemple précédant avec une croissance quasi verticale.

Tableau 6- 3 : Etapes de formation de la subflorescence dans un exemple de réseau 36*41 tels que les rayons des pores : 0.2-0.25 et les rayons des liens : 0.3-0.35



Le tableau 6-4 illustre la croissance de la subflorescence dans le cas d'un réseau microfluidique dont la taille des pores et des liens est la même (dans ce cas entre 0.2 et 0.4 et de porosité égale à $\varepsilon = 0.1367$). Le code couleur utilisé dans cet exemple est détaillé dans l'annexe D. La structure de sel croit toujours dans la phase gazeuse du milieu et dirigée vers la face ouverte du réseau. Cette croissance n'est pas compacte et s'étale sur la longueur du micromodèle en présentant des ramifications comme dans l'expérience. Avec cette distribution de rayons, la structure est beaucoup plus développée dans la partie gazeuse du réseau et l'enfoncement du front de séchage est plus profond que dans les autres exemples.

Tableau 6- 4 : Etapes de la croissance de la subflorescence dans un exemple de réseau36*41 tels que la taille des pores=la taille des liens : 0.2-0.4



Par ailleurs, on a fait des réalisations en modifiant la porosité de la structure de sel. Cette dernière est normalement fixe est prise égale 0.25 (voir section 6-5), est modifié est prise égale à 0.6. Pour une même réalisation, on peut clairement voir à travers la figure6-18 la modification de la transformation de l'allure de la subflorescence par rapport à une porosité de sel égale à 0.25. En effet, en augmentant la porosité, la quantité de sel à placer au début de

la formation de l'amas de sel (la nucléation) devient importante (voir les équations de la section 6-5). La croissance est toutefois toujours dirigée vers la sortie et étalée sur le réseau.

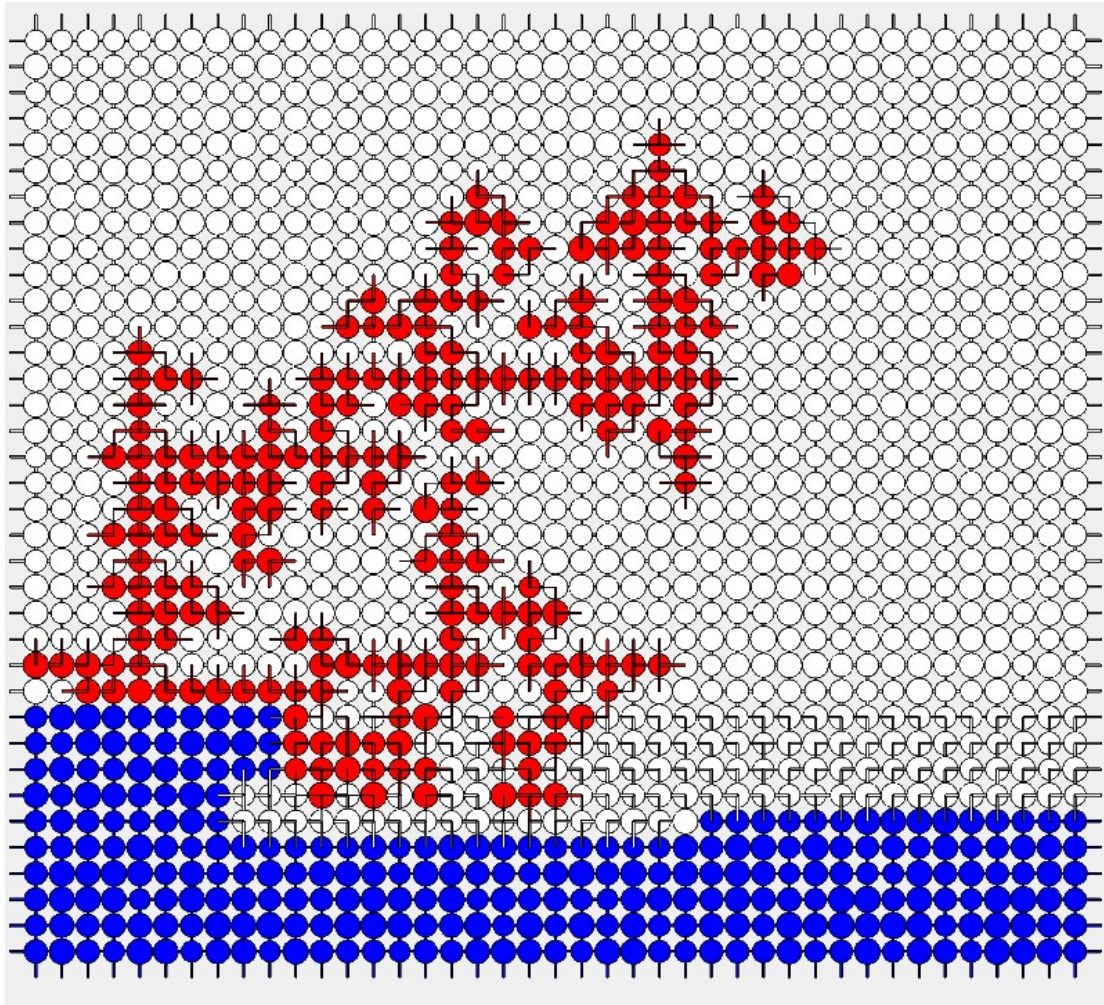


Figure 6-18 : croissance de la subflore en modifiant la porosité de la structure de sel $\varepsilon = 0.6$

Conclusion

L'élaboration d'un tel code de séchage nous a permis d'estimer les concentrations du sel dans les différents amas du réseau. Il nous a permis aussi de générer la croissance de la structure saline principale. En effet, on a trouvé une structure semblable à celle trouvée dans l'expérience pour différentes porosités du réseau et porosité du cristal. La variation des propriétés du réseau et de la porosité impactent la compacité de la subflore et sa vitesse de croissance.

Références

- [1] Y. Le Bray and M. Prat (1999). Three-dimensional pore network simulation of drying in capillary porous media, *Int. J. Heat Mass Transfer* 42, 4207
- [2] M. Prat (2002). Recent advances in pore-scale models for drying of porous media, *Chem. Eng. J.* 86, 153
- [3] M. Prat (2002). Pore network models of drying, contact angle and films flows, *Chem. Eng. Technol.* 34, 1029.
- [4] T. Metzger, E. Tsotsas, and M. Prat (2007). Pore-network models: A powerful tool to study drying at the pore level and understand the influence of structure on drying kinetics, in *Computational Tools at Different Scales, Modern Drying Technology Vol. 1*, edited by A. Mujumdar and E. Tsotsas. Wiley, New York, ,Chap. 2, pp. 57–102.
- [5] N. Sghaier, M. Prat, and S. Nasrallah (2007). On ions transport during drying in a porous medium. *Transport in Porous Media*, 67(2) :243–274.
- [6] S. Veran-Tissoires (2011). Sur le phénomène de cristallisation discrète à la surface ou à l'intérieur d'un milieu poreux. Thèse, Université de Toulouse.
- [7] H. P. Huinink, L. Pel, and M. A. J. Michels (2002). How ions distribute in a drying porous medium: A simple model. *Physics of Fluids*, 14(4) :1389–1395.
- [8] Nour SGHAIER- BEN CHIEKH (2006). Evaporation en milieu poreux en présence de sel dissous. Influence des films liquides et des conditions de mouillabilité. thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- [9] M. Mauricio duenas velasco. Evaporation en milieu poreux en presence de sel dissous. Structure et lois de croissance des efflorescences (2016). Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- [10] J.-H. Kim, J. A. Ochoa, and S. Whitaker (1987). Diffusion in anisotropic porous media. *Transport in Porous Media*, 2(4) :327–356.
- [11] F. Ahmad, A. Rahimi, E. Tsotsas, M. Prat, and A. Kharaghani (2021). From micro-scale to macro-scale modeling of solute transport in drying capillary porous media, *Int. J. Heat Mass Transfer* 165, 120722.
- [12] B. Diouf, S. Geoffroy, A. Abou-Chakra, and M. Prat (2018). Locus of first crystals on the evaporative surface of a vertically textured porous medium, *EPJ Appl. Phys.* 81, 11102.
- [13] M. Talbi, M. Prat (2022). Percolating and nonpercolating liquid phase continuum model of drying in capillary porous media with application to solute transport in the very low Péclet number limit. *PHYSICAL REVIEW FLUIDS*, 7, 014306.
- [14] S. B. Dalziel, G. O. Hughes, and B. R. Sutherland (2000). Whole-field density measurements by 'synthetic schlieren'. *Experiments in Fluids*, 28 :322–335.
- [15] G. Lekminea, M. Pessela, and H. Auradoub (2009). Imagerie électrique 2D du suivi de panaches de polluants en zone saturée. In *Journées d'étude sur les milieux poreux*.

Chapitre6 : Simulation numérique de la croissance d'un subflorescence de type1 dans un milieu poreux dans le cadre de l'approche des réseaux de pores

[16] G. Licsandru, C. Noiriél, P.Duru, S. Geoffroy, A. Abou-Chakra, M. Prat (2019). Dissolution-precipitation driven upward migration of a salt crust. *Physical Review E* 100 (3), 032802.

[17] N. Sghaier, S. Geoffroy, M. Prat, H. Eloukabi, and S. Ben Nasrallah (2014). Evaporation driven growth of large crystallized salt structures in a porous medium. *Phys. Rev. E* 90, 042402

Conclusions et Perspectives

Conclusion générale et Perspectives

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés au séchage des milieux poreux saturés en solution pure, de l'eau dans notre cas, et en présence de sel en relation avec les problèmes d'altération des sols et de dégradation des bâtiments, dans un cadre purement numérique.

En se basant sur les études antérieures menées à l'Imft par Marc Prat et l'équipe Yortsos en Amérique, nous avons développé notre propre code de séchage des milieux poreux de type réseau de pores avec MATLAB. Notre laboratoire est désormais capable de combiner les travaux de recherche sur ce domaine sur le plan numérique aussi bien qu'expérimental déjà lancé depuis des années.

Dans une première partie, après avoir définies les notions de base sur lesquelles porte le phénomène de séchage et les milieux poreux, nous avons présenté notre simulateur bidimensionnel qui permet de générer aléatoirement des réseaux et analyser l'évolution de l'interface liquide gaz ou le front de séchage fondée sur le principe de la percolation d'invasion. L'étude d'un cas simple de PNM a permis de valider les résultats obtenus et s'offrir la possibilité d'étaler les domaines d'étude.

En plus de la capillarité, les forces de gravité interviennent aussi dans le déplacement du liquide dans le milieu poreux. Elles affectent l'interface ou le front de séchage en éliminant les digitations et envahissant le réseau ligne par ligne. La mouillabilité a aussi un impact sur l'interface puisque son comportement varie selon l'angle de contact choisi. En tenant compte seulement des forces capillaires, dans le cas hydrophile comme l'hydrophobe, on a obtenu des fronts digités avec des amas liquides piégés dans le milieu qui s'évaporent graduellement au cours du séchage. En introduisant des forces de gravité, le front de séchage commence à se stabiliser et le nombre d'amas isolés se réduit considérablement. Notre but étant d'avoir un front de séchage parfaitement plat, nous avons enrichi l'étude par l'analyse des états des voisins des pores formant le réseau. Cette nouvelle étude a montré que la valeur du potentiel de chaque nœud du réseau dépend des liaisons, qui entourent le pore en question, si elles sont liquides ou vapeurs. Par conséquent, pour un cas hydrophobe, le front de séchage peut être stable et plat avec ou sans forces de gravité et donc indépendamment du positionnement du micro-modèle (vertical ou horizontal). Afin de balayer le maximum de configuration qu'on peut rencontrer expérimentalement, une étude d'un réseau de mouillabilité mixte a été aussi menée. L'invasion est en fait stimulée par la zone hydrophobe du réseau créant ainsi une zone liquide piégée dans le réseau envahie plus tard.

Notre intérêt dans la deuxième partie de la thèse porte sur l'étude des milieux poreux en présence du sel dans une solution saturant le milieu poreux. Après avoir exposé les dégradations causées par le sel sur les sols, les bâtiments et les monuments historiques, nous avons présenté une expérience antérieurement réalisée par notre équipe, et sur laquelle s'est basée notre étude en tant que modèle de validation. On a montré en premier lieu que l'évolution du front de séchage est linéaire avec le temps. Contrairement à l'étude de la

première partie où on a négligé l'effet des films liquides capillaires, l'étude de l'expérience a dévoilé qu'une zone de transition est formée entre la zone liquide saturée et la zone sèche du micro-modèle. et qui est le siège des films liquides capillaires faisant la différence entre le front de séchage et le front d'évaporation. On a distingué, à la suite de la cristallisation, trois types de subflorescences dans le micro-modèle. Des structures de sels qualifiées de type 3, formées à proximité du front d'évaporation. D'autres de type 2 développées dans la partie liquide contrairement à ce qui était démontré dans les travaux précédents, et finalement des subflorescences de type 1 relativement grandes par rapports aux autres poussées dans la phase gazeuse. Le dernier chapitre de notre thèse s'intéresse justement à la simulation de ce type de subflorescence, le type 1. D'abord un code de calcul de la concentration du sel dans le PNM a été établi permettant de suivre son évolution au cours du séchage. L'extension de ce code nous a permis de générer la croissance de la subflorescence principale de type 1 dont la résultante est semblable à celle trouvée dans l'expérience.

Les perspectives de ce travail sont nombreuses, en se limitant à quelques-unes, on peut citer :

Sur le plan numérique, on va d'abord continuer avec la subflorescence de type 1 en la simulant dans les conditions de l'expérience, et voir son comportement lorsqu'on modifie certaines propriétés (porosité, épaisseur de la couche de diffusion etc...). En plus de la structure de sel de type 1, la modélisation des autres subflorescences formées fera aussi l'objet d'un travail ultérieur.

A long terme, nous adopterons le code réseau de pores développé dans cette thèse pour simuler le séchage d'une dispersion de PTFE saturant initialement un milieu fibreux. Cela permettra de comparer les résultats avec les expériences réalisées dans le cadre d'une autre thèse ayant pour objectif la fonctionnalisation des couches de diffusion des PEMFC, dans le but d'améliorer et de contrôler leur hydrophobisation. En effet, les piles à combustible à membrane échangeuse de protons (PEMFC selon l'acronyme anglais) constituent une technologie clé, intensivement étudiée à travers le monde dans le contexte de la transition énergétique et de la lutte contre le changement climatique. Dans ces piles, l'hydrogène est recombinaison à l'oxygène pour produire de l'électricité, ainsi que de l'eau et de la chaleur. Bien qu'aujourd'hui les PEMFC aient atteint un bon niveau de maturité, ces progrès passent par une amélioration des différents composants constitutifs d'une pile : la membrane protonique, les couches catalytiques (CCs), les couches de diffusion (GDLs pour leur acronyme anglais) et les plaques bipolaires. En particulier, l'optimisation des propriétés des couches de diffusion est un objectif majeur pour atteindre des performances élevées et une gestion efficace de l'eau. Il est bien établi que rendre hydrophobes les couches de diffusion est important, notamment pour limiter le risque de noyage.

Annexes

Annexe A : La diffusion de vapeur dans la phase gazeuse.

L'invasion dans le réseau de pores modifie la saturation du milieu et par la suite la pression partielle de chaque pore. En effet l'expression de flux massique est fortement dépendante de l'état des éléments de réseau (liquide ou vapeur).

Initialement, le réseau est saturé en liquide, la pression en chaque pore est égale donc à la pression de saturation. L'objectif étant de déterminer la pression partielle dans un pore gazeux, ses voisins peuvent avoir différents états comme indiqué sur la figure. A l'interface liquide-gaz, la pression est toujours égale à la pression de saturation. Dans ces cas la distance l entre le centre du pore en question et l'interface liquide-vapeur peut varier d'une situation à une autre.

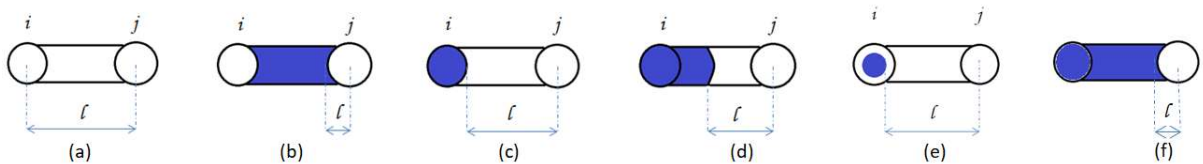


Figure A-1 : Différents types de pores et liaisons rencontrés dans le PNM lors de la simulation.

L'évaporation étant supposée monodimensionnelle entre deux pores, Le taux d'évaporation s'exprime par la loi de Fick, dans le cas présenté par la figure, comme suit :

$$(A-1)J = \frac{-DM_v}{RT} (P_{v,j} - P_{v,i}) \frac{S}{L}$$

Avec, $P_{v,i}$ et $P_{v,j}$ les pressions partielles de vapeur, respectivement, des pores I et j. $D = 2.5 \cdot 10^{-5} m^2 \cdot s^{-1}$ est le coefficient de diffusion moléculaire de la vapeur d'eau dans l'air, $M_v = 18.01 \cdot 10^{-3} kg \cdot mol^{-1}$ est la masse molaire de la vapeur et $R = 8.31 J \cdot mol^{-1} K^{-1}$ la constante des gaz parfaits. L est la distance entre les pores I et j qui est égale au pas de réseau (voir la figure A-1 (a)).

S est la section de la liaison cylindrique entre les pores i et j, est donnée par :

$$(A-2)S = \frac{\pi}{4} (DIL)^2$$

Avec DIL le diamètre de la liaison entre i et j.

En appliquant l'équation A-1, le taux d'évaporation pour les cas (b),(c),(d),(e) et (f) est exprimée comme suit :

$$(A-3)J = \frac{-DM_v}{RT} (P_{v,j} - P_{v,sat}) \frac{S}{l}$$

$P_{v,sat}$ est la pression de vapeur saturante et l la distance illustrée sur la figure selon le cas à traiter.

Le réseau n'étant ouvert que par la surface supérieure, la pression à l'extrémité la plus éloignée de la couche de diffusion monodimensionnelle est égale à la pression partielle de vapeur $P_{v\infty}$.

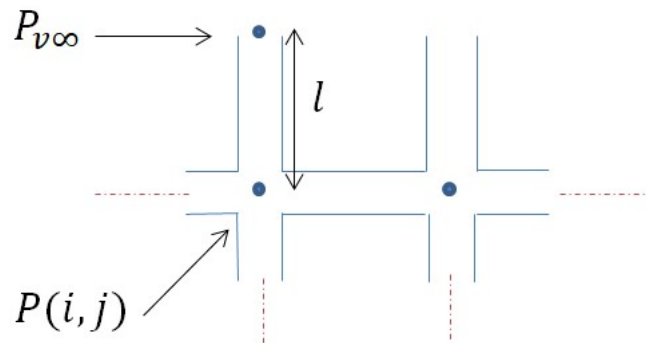


Figure A-2 : Représentation d'une partie de la couche limite

Dans ce cas la pression partielle de vapeur est exprimée par :

$$(A-4) \dot{m}_{ij} = \frac{-DM_v}{RT} (P_{v,(i,j)} - P_{v,\infty}) \frac{S}{l}$$

La section S d'une liaison verticale est la même qu'une liaison horizontale et est égale à :

$$(A-5) S = \frac{\pi}{4} (l^2)$$

Or en chaque nœud gazeux, le bilan massique s'écrit :

$$(A-6) \sum_i J_i = 0$$

Les équations A-1 et A-6 donnent alors :

$$(A-7) \sum_i J_i = \frac{-DM_v}{RT} (P_{v,j} - P_{v,i}) \frac{S}{L} = 0$$

En utilisant une méthode de résolution directe par MATLAB, le système linéaire, établi à partir de l'équation A-7, s'écrit sous la forme :

$$(A-8) Ax = b$$

Cette fonction MATLAB est appelée « linsolve ». En effet, elle permet de résoudre le système linéaire $Ax = b$ en utilisant soit la factorisation LU si la matrice A est carrée soit la factorisation QR sinon. Pour un réseau de taille $M \times N$ avec une couche limite discrétisée par h lignes, A est de taille $((M+h) \times N)$.

Exemple de calcul :

Considérons un réseau de taille 2×2 avec une couche limite égale à 2 représenté par la figure A-3 ci-dessous :

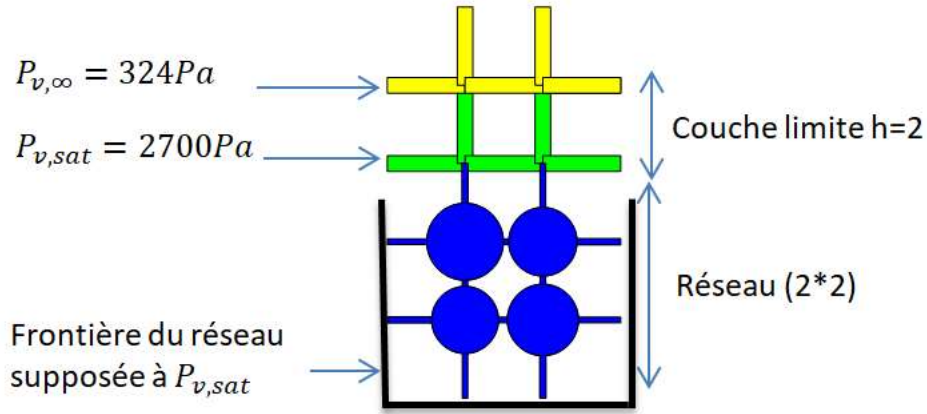


Figure A-3 : Représentation du PNM de taille 2*2 avec la couche de diffusion h=2.

Lors de la première invasion, et en appliquant l'équation A-7 sur la figure A-4 on trouve :

$$(A-9)P_{2,2} = \frac{1}{\alpha_{2,2}} (-\alpha_G P_{2,1} - \alpha_H P_{1,1} - \alpha_B P_{3,2})$$

$$\text{Avec } \alpha_{2,2} = \alpha_G + \alpha_H + \alpha_B \quad (A-10)$$

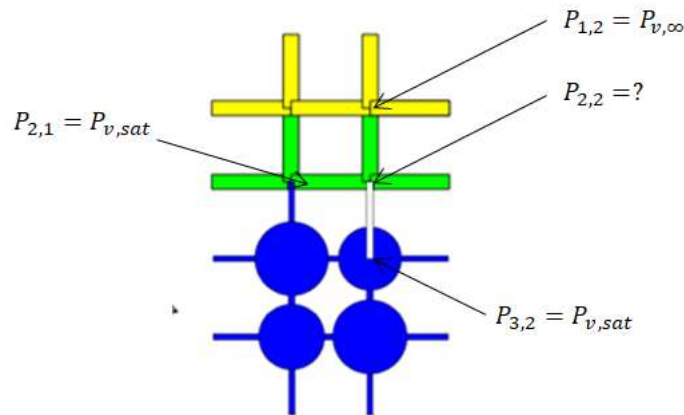


Figure A-4 : Représentation du voisinage du point de pression P(2,2) à déterminer.

La matrice A du système A-8, est carrée de taille 8*8 s'écrit alors dans ce cas :

$$(A-11)AP = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & 1 & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_{2,2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 1 & & & \\ & & & & & 1 & & \\ & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{1,1} \\ P_{1,2} \\ P_{2,1} \\ P_{2,2} \\ P_{3,1} \\ P_{3,2} \\ P_{4,1} \\ P_{4,2} \end{pmatrix} = b = \begin{pmatrix} P_{v\infty} \\ -\alpha_H P_{v\infty} \\ -\alpha_G P_{vsat} \\ 0 \\ P_{vsat} \\ -\alpha_B P_{vsat} \\ P_{vsat} \\ P_{vsat} \end{pmatrix}$$

On utilise les équations A-5 et A-7 pour trouver α_H et α_G , on obtient :

$$\alpha_H = \alpha_G = [(-2.5 * 10^{(-5)} * 18 * 10^{(-3)}) / (8.31 * 295)] * (3.14/4) * l \quad (A-12)$$

Par conséquent :

$$(A-13)\alpha_H = \alpha_G = \frac{-DM_v}{RT} \frac{S}{L} = \frac{-DM_v}{RT} \frac{\pi(l^2)}{4} \frac{1}{l} = \frac{-DM_v}{RT} \frac{\pi}{4} l$$

Quand le processus de séchage avance (voir la figure A-5), la pression des poreux gazeux est modifiée toujours en appliquant les équations ci-dessus

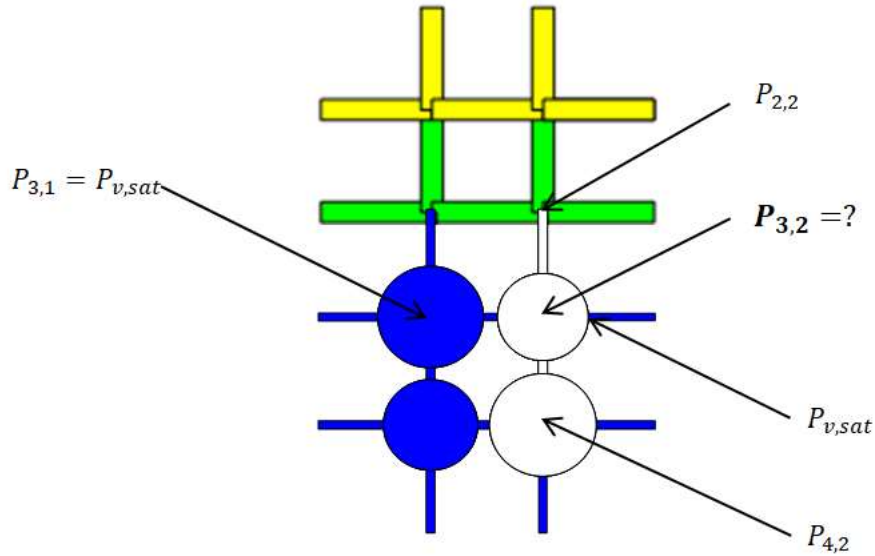


Figure A-5 : Représentation d'un réseau au cours du séchage.

L'objectif, à partir du cas illustré par la figure A-5, est de déterminer la pression du point (3,2). L'équation A-7 nous donne :

$$(A-14)P_{3,2} = \frac{1}{\alpha_{3,2}} (-\alpha_G P_{3,1} - \alpha_H P_{2,2} - \alpha_B P_{4,2} - \alpha_D P_{v,sat})$$

Les pressions inconnues sont $P_{2,2}$, $P_{3,2}$, $P_{4,2}$, la liaison de gauche, du pore (3,2) étant liquide la pression à l'interface est égale donc à $P_{v,sat}$. L'équation A-14 devient alors :

$$(A-15)\alpha_{3,2}P_{3,2} + \alpha_H P_{2,2} + \alpha_B P_{4,2} = -\alpha_G P_{3,1} - \alpha_D P_{v,sat} = -(\alpha_G + \alpha_D)P_{v,sat}$$

$$\text{Avec } \alpha_{3,2} = \alpha_B + \alpha_H + \alpha_G + \alpha_D \quad (A-16)$$

α_B , α_H , α_G et α_D sont déterminés selon les configurations présentées dans la figure A-1. En effet, la liaison à droite du pore (3,2) étant sur la frontière, sa pression est égale à la pression de saturation si elle est à l'état liquide et elle est nulle si elle est envahie (on suppose toujours que le flux est nul sur les bords du réseau sauf la face supérieure).

Dans ce cas et à partir des équations A-2 et A-7 :

$$(A-17)\alpha_D = \frac{-DM_v}{RT} \frac{S}{l} = \frac{-DM_v}{RT} \frac{\pi}{4} (DILH(1,3))^2 \frac{1}{r_p(1,2)}$$

Avec $DILH(1,3)$ le diamètre de la liaison horizontale (1,3) et $r_p(1,2)$ est le rayon du pore (1,2).

$$(A-18)\alpha_H = \frac{-DM_v}{RT} \frac{S}{l} = \frac{-D}{RT} \frac{v}{4} \frac{\pi}{4} DILV(1,2))^2 \frac{1}{L} = \frac{-D}{RT} \frac{v}{4} \frac{\pi}{4} DILV(1,2))^2$$

Avec $DILV(1,2)$ le diamètre de la liaison verticale (1,2) et L le pas de réseau considéré égale à 1. De même pour α_B , telle que $DILV(2,2)$ est le diamètre de la liaison verticale (2,2) :

$$(A-19)\alpha_B = \frac{-DM_v}{RT} \frac{S}{l} = \frac{-DM_v}{RT} \frac{\pi}{4} DILV(2,2))^2 \frac{1}{L} = \frac{-DM_v}{RT} \frac{\pi}{4} DILV(2,2))^2$$

Et finalement :

$$(A-20)\alpha_G = \frac{-D}{RT} \frac{v}{4} \frac{S}{l} = \frac{-DM_v}{RT} \frac{\pi}{4} (DILV(1,2))^2 \frac{1}{r_p(1,2)}$$

En appliquant l'équation A-15, notre système matriciel A-8 s'écrit donc :

$$(A-21)AP = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & 1 & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_{2,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ & & & & 1 & & & & \\ & & 0 & -\alpha_H & 0 & \alpha_{3,2} & 0 & -\alpha_B & \\ & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & 0 & \alpha_{4,2} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{1,1} \\ P_{1,2} \\ P_{2,1} \\ P_{2,2} \\ P_{3,1} \\ P_{3,2} \\ P_{4,1} \\ P_{4,2} \end{pmatrix} = b = \begin{pmatrix} P_{v\infty} \\ P_{v\infty} \\ P_{vsat} \\ 0 \\ \alpha_G P_{vsat} \\ 0 \\ P_{vsat} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Annexe B : Traitement des images

Dans cet annexe, nous présentons un algorithme MATLAB pour extraire le front de vapeur à partir d'une image d'un micro-modèle constitué de billes sphériques comprises entre deux plaques transparentes collées avec du RTV et rempli d'eau saline. L'algorithme comporte les étapes suivantes :

1) Chargement de l'image et affûtage.

- L'image est chargée.
- Un filtre Laplacien est utilisé pour affiner l'image. En effet, le filtre Laplacien est un filtre passe-haut qui met en évidence les bords en identifiant les transitions d'intensité soudaines dans l'image. Il s'agit d'un filtre de convolution spécifique utilisé pour accentuer les détails caractérisés par des changements rapides de luminosité. Ainsi, il est idéal pour rendre les contours des objets visibles. En appliquant une convolution avec un masque $\begin{bmatrix} 0,1,0 \\ 1,-4,1 \\ 0,1,0 \end{bmatrix}$, le filtre Laplacien agit comme un détecteur de passage par zéro pour identifier les pixels de bord.
- L'image affinée est créée en soustrayant l'original de l'image filtrée pour supprimer les artefacts.

2) Correction gamma et suppression du bruit.

- L'image affinée est convertie en nuance de gris, puis ajustée avec une valeur gamma adéquate pour adapter la luminosité des pixels de manière non linéaire afin de corriger sélectivement le contraste de l'image en mettant en exergue les détails dans les zones claires ou sombres de l'image.
- Les trous dans l'image sont remplis. En effet, les traitements entraînent l'apparition des petits artefacts formant des trous dans l'image, un algorithme spécialisé est utilisé pour résoudre ce problème. Cet algorithme analyse les contours connectés de l'image pour identifier les zones vides entourées par des pixels appartenant à des objets. Pour restaurer l'intégrité de l'image, ces zones sont identifiées et remplies. Ce processus garantit que les objets de l'image sont complets et continus, sans lacunes ou trous indésirables.
- Un filtre gaussien est appliqué pour lisser l'image et réduire le bruit tout en conservant les contours et les grandes structures.

3) Érosion et binarisation.

- L'image est érodée avec un élément structurant en forme de disque pour supprimer les détails et pour séparer les objets qui se chevauchent.
- L'image est convertie en binaire en utilisant un seuil adéquat.

4) Détection et analyse des contours.

- L'image binaire est utilisée pour trouver les limites des objets en utilisant un détecteur de contour adéquat.
- Seul l'objet le plus grand est conservé qui correspond au front vapeur.
- Les contours de l'objet restant sont lissés et tracés.
- Une partie spécifique de la courbe est extraite en spécifiant ses limites x et y.

5) Un contrôle visuel est toujours effectué, et un ajustement manuel peut être effectué si nécessaire.

Annexe C : Modèle d'un front de séchage net régressant avec un modèle de fil capillaire simplifié.

Comme indiqué par la figure C-1, l'origine de y est au sommet de la couche diffuse avec y dirigé vers le bas du micromodèle ($y = z + h$, où h est la hauteur de cette couche). Le taux d'évaporation est exprimé par :

$$(C-1) J = A \varepsilon D_{eff} \frac{M_v}{RT} \left(\frac{P_{vf} - P_{v\infty}}{y_f - h_{tz}} \right)$$

Avec $y_f = h$ à $t = 0$, où y_f la position du front de séchage et h_{tz} est la hauteur de la zone de transition (zone de films capillaires)

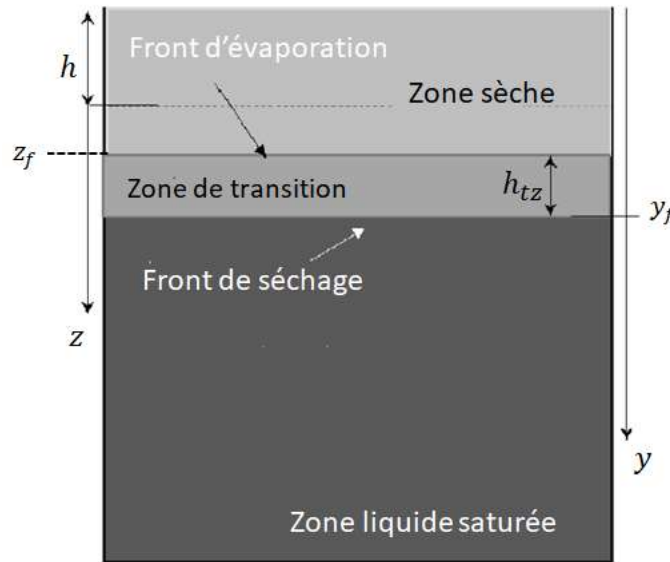


Figure C- 1 : Le front de séchage net régressif dans le micromodèle avec zone de transition

Le bilan massique est donné par :

$$(C-2) \rho_l \frac{d}{dt} \left(\varepsilon A \left((H + h) - y_f \right) \right) = -J = -A \varepsilon D_{eff} \frac{M_v}{RT} \left(\frac{P_{vf} - P_{v\infty}}{y_f - h_{tz}} \right)$$

En intégrant l'équation C-2 et posant $y_f = h$ à $t = 0$, on trouve :

$$(C-3) y_f = \sqrt{(h - h_{tz})^2 + 2D_{eff} \frac{M_v}{\rho_l RT} (P_{vf} - P_{v\infty})t} + h$$

Par conséquent :

$$(C-4) z_f = \rho_l \varepsilon A (H + h) - y_f(t) = \rho_l \varepsilon A (H + h) - \rho_l \varepsilon A y_f(t)$$

Avec $m(0) = \rho_l \varepsilon A H$

La masse perdue par l'évaporation peut être alors exprimée comme suit :

Annexe C : Modèle d'un front de séchage net régressant avec un modèle de fil capillaire simplifié.

$$(C-5) \delta m(t) = m(0) - m(t) = \rho_l \varepsilon A (y_f(t) - h) = \rho_l \varepsilon A z_f(t)$$

En combinant C-3 et C-5, on obtient :

$$(C-6) \delta m(t) = \rho_l \varepsilon A H \left(\sqrt{(h - h_{tz})^2 + 2D_{eff} \frac{M_v}{\rho_l R T} (P_{vf} - P_{v\infty}) t} - (h - h_{tz}) \right)$$

Annexe D : Le code couleur de la croissance de la subflorescence type1 dans le modèle de réseau de pore

En suivant l'algorithme de croissance de la subflorescence de type 1 formée, on distingue deux pas de temps caractéristiques à prendre en considération lors de la croissance de la structure de sel. En effet, le temps de vidange est le temps nécessaire pour faire vider un élément liquide (l'envahir par le gaz) et le temps de remplissage qui est le temps nécessaire pour remplir un élément gazeux de sel.

Dans notre algorithme deux cas peuvent se présenter :

- Le temps de vidange t_{v-al} est supérieur au temps de remplissage t_{r-ac} , dans ce cas l'élément liquide est totalement vidé (passage du bleu au blanc) et le sel occupera partiellement chaque élément interfaciale de l'amas de cristal qu'on représente par la couleur rouge. Or cet élément de frontière peut être initialement vide (sans sel) ou déjà remplie partiellement, dans ce cas on ajoute la quantité de sel calculée à l'itération (i) à la quantité de sel déjà posée à l'itération (i-1).

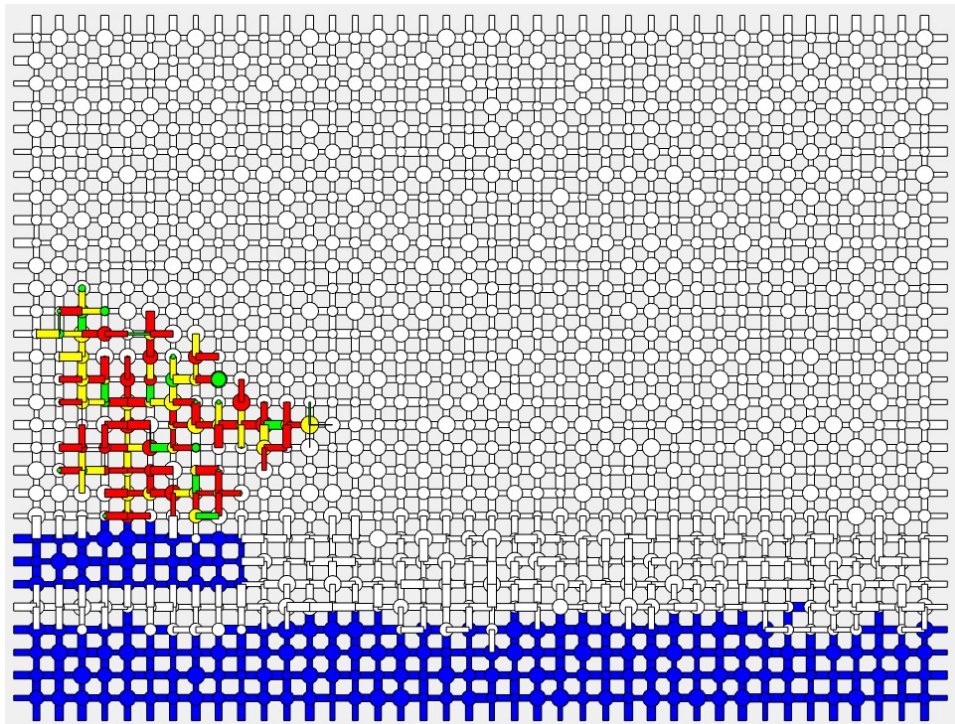


Figure D-1 : Le code couleur représentant la croissance de la subflorescence de type1

- Le temps de vidange t_{v-al} est inférieur au temps de remplissage t_{r-ac} , dans ce cas l'élément liquide est partiellement vidé (passage du bleu au blanc) et pour le sel :

Annexe D : Le code couleur de la croissance de la suflorescence type1 dans le modèle de réseau de pore

L'élément interfacial de l'amas de sel correspondant à t_{r-ac} est totalement rempli de sel et coloré en jaune et les autres éléments de la frontière se remplissent partiellement proportionnellement à ce temps t_{r-ac} qu'on représente par la couleur verte.