



HAL
open science

Evaporation/condensation of water in a granular medium, restricted to the pendular regime. Numerical implementation of the EWGM model.

Édouard Canot

► **To cite this version:**

Édouard Canot. Evaporation/condensation of water in a granular medium, restricted to the pendular regime. Numerical implementation of the EWGM model.. [Rapport Technique] Institut de Physique de Rennes. 2024, pp.11. hal-01245769

HAL Id: hal-01245769

<https://inria.hal.science/hal-01245769>

Submitted on 3 Sep 2024

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Copyright

Evaporation/condensation of water in a granular medium, restricted to the pendular regime: the EWGM model

Implémentation numérique 1-D des variantes **A** et **B**

Édouard CANOT

2 septembre 2024

Les symboles en **magenta** correspondent aux inconnues qui sont fonctions à la fois du temps et de l'espace.

Les 8 inconnues principales sont : $T, \rho_g, \rho_l, \mathbf{v}_g, \alpha_l, p_w, \rho_w, \mathcal{K}$.

Les symboles en **rouge** sont les inconnues ne dépendant que du temps (valeurs au nœuds). Ce sont celles qui restent après la discrétisation en espace (utilisation de la méthode des lignes).

1 Équations physiques utilisées

On a les 8 équations (aux dérivées partielles, ou algébriques) suivantes :

- Conservation de la masse pour le composant « eau » :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\alpha_l \phi \rho_l + (1 - \alpha_l) \phi \rho_w] + \text{div}(\rho_w \mathbf{v}_w) = 0 \quad (1)$$

avec

$$\mathbf{v}_w = \mathbf{v}_g + \mathbf{v}_w^* \quad (2)$$

et

$$\rho_w \mathbf{v}_w^* = -\tau_s D_{w,a} \rho_g \nabla \left(\frac{\rho_w}{\rho_g} \right) \quad (3)$$

$\phi = 0.26$ [arrangement hexagonal compact]

$\rho_l = 1000.0 \text{ kg/m}^3$

$\tau_s = 0.5$

$D_{w,a} = 2 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

- Conservation de la masse pour les deux composants fluides (« eau » et « air ») :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\alpha_l \phi \rho_l + (1 - \alpha_l) \phi \rho_g] + \text{div}(\rho_g \mathbf{v}_g) = 0 \quad (4)$$

- Conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial E_e}{\partial t} + \text{div}[(1 - \alpha_l) \phi \rho_g C_{p,g} T \mathbf{v}_g] = \text{div}(\lambda_e \nabla T) + \rho_l \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} \phi L \quad (5)$$

avec

$$E_e = [(1 - \phi) \rho_s C_s + \alpha_l \phi \rho_l C_l + (1 - \alpha_l) \phi \rho_g C_{v,g}] T \quad (6)$$

et

$$C_{v,g} = \omega_w C_{v,w} + (1 - \omega_w) C_{v,a} \quad (7)$$

où $\omega_w = \rho_w / \rho_g$ est la fraction massique de la vapeur. Enfin :

$$C_{p,g} = C_{v,g} + \frac{R}{M_g}$$

et

$$\frac{1}{M_g} = \frac{\rho_w}{\rho_g} \left(\frac{1}{M_w} - \frac{1}{M_a} \right) + \frac{1}{M_a}$$

$\lambda_e = 1.0 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ [*estimation*]

$\rho_s = 2.6 \text{ kg/m}^3$ (*silice or quartz*)

$C_l = 4.2 \text{ kJ/(kg}\cdot\text{K)}$

$C_s = 0.8 \text{ kJ/(kg}\cdot\text{K)}$

$C_{p,a} = 1.005 \text{ kJ/(kg}\cdot\text{K)}$

$C_{p,w} = 1.89 \text{ kJ/(kg}\cdot\text{K)}$ [à 100 °C]

$L = 2.2 \times 10^3 \text{ kJ/kg}$ [*latent heat of water (liquid/gas)*]

- La vapeur d'eau est un gaz parfait :

$$\frac{p_w}{\rho_w} = \frac{R}{M_w} T \quad (8)$$

$R = 8.31 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$

$M_w = 18 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$

- Le mélange gazeux est également un gaz parfait :

$$\frac{p_g}{\rho_g} = RT \left[\frac{\rho_w}{\rho_g} \left(\frac{1}{M_w} - \frac{1}{M_a} \right) + \frac{1}{M_a} \right] \quad (9)$$

$M_a = 29 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$

- Loi de Darcy :

$$\mathbf{v}_g = -\frac{K_g}{\mu_g} \nabla p_g \quad (10)$$

$$K_g = C_{kc} \frac{(1 - \alpha_l)^3 \phi^3}{[1 - (1 - \alpha_l) \phi]^2}$$

$C_{kc} = 3.11 \times 10^{-11}$ in order to obtain $K_g = 1.0 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ [*perméabilité approximative du sable de Fontainebleau*] when $\alpha_l = 0$.

$\mu_g = 1.22 \times 10^{-5} \text{ kg/(m}\cdot\text{s)}$

- Équilibre liquide/vapeur aux interfaces (équation de Kelvin-Laplace) :

$$p_w = \exp\left(\frac{Vm_l \kappa \sigma(T)}{RT}\right) p_{w,\text{sat}}(T) \quad (11)$$

$$Vm_l = \frac{M_w}{\rho_l} \quad (12)$$

Concernant la tension superficielle, on présente ci-après trois approximations différentes. La première approximation linéaire utilise T en Celsius et n'est valable que sur l'intervalle [0,100] C :

$$\sigma(T) = 76 \times 10^{-3} - 0.17 \times 10^{-3} T \quad (T \text{ en Celsius}) \quad (13)$$

La seconde a le mérite d'être valable jusqu'à la température critique. En revanche, elle s'éloigne quelque peu des valeurs réelles, l'écart maximum ayant lieu pour $T \approx 150 \text{ C}$. Elle provient de Kaviany (1999, p. 513) qui cite lui-même Hsieh (1975) – la forme de l'équation a été suggérée à l'origine par Van der Waals :

$$\sigma(T) = \sigma_0 \left(1 - \frac{T - 273.16}{T_c - \Delta T_m - 273.16} \right)^n \quad (T \text{ en Kelvin}) \quad (14)$$

Pour l'eau $\sigma_0 = 75.5 \times 10^{-3} \text{ N/m}$, $T_c = 647.3 \text{ K}$, $\Delta T_m = 6.14 \text{ K}$ et $n = 1.2$.

La troisième approximation (Vargaftik, 1983) est la plus précise sur tout l'intervalle $[0, 374] \text{ C}$:

$$\sigma(T) = 235.8 \times 10^{-3} \left[\frac{T_c - T}{T_c} \right]^{1.256} \left[1 - 0.625 \frac{T_c - T}{T_c} \right] \quad (T \text{ en Kelvin}) \quad (15)$$

T_c est la température du point critique de l'eau, 374 C – l'interface liquide-gaz doit être en équilibre avec sa vapeur et en présence d'air.

Pour la comparaison de ces trois approximations, voir la feuille de calcul Maple intitulée "sigma-temperature.mw".

La pression à saturation de la vapeur d'eau peut être calculée par :

$$p_{w,\text{sat}}(T) = 10^5 \exp \left(13.7 - \frac{5120}{T} \right) \quad (T \text{ en Kelvin}) \quad (16)$$

(formule approchée de Rankine, valable pour une température entre 5 et 140 C)

- Relation entre le volume d'un ménisque et la courbure de son interface (*modèle toroïdal asymptotique* avec l'angle de contact θ nul) :

$$\kappa = \kappa(\alpha_l) = - \frac{5.06}{R_0 \sqrt{\alpha_l}} \quad (17)$$

$R_0 = 0.1 \times 10^{-3} \text{ m}$. On note aussi que la courbure doit être négative pour les ménisques convexes (convention prise dans l'équation 11). La loi précédente n'est vraie qu'asymptotiquement (c'est-à-dire quand la fraction liquide reste très petite) : voir la figure 1.

Les symboles non colorés utilisés ci-dessus sont des constantes.

Pour le modèle **B**, on a besoin du taux d'évaporation. Son expression donnée ici correspond au modèle ATMM ("*Asymptotic Toroidal Meniscus Model*") et utilise la relation 17 ci-dessus :

$$p_w - p_{w,l} \approx 7.82 \times 10^{-2} \frac{\rho_l}{\rho_g} \phi \frac{R_0^2}{D_{w,a}} p_g \alpha_l^{-\frac{3}{4}} \frac{\partial \alpha_l}{\partial t}$$

note (1) : cette équation est dimensionnellement correcte. De plus, le sens de variation est correct : si $p_w > p_{w,l}$ (membre de gauche positif) alors par diffusion la vapeur se déplace vers l'interface, donc condense et la quantité d'eau liquide α_l croît, donc $\frac{\partial \alpha_l}{\partial t}$ est positif et le membre de droite de l'équation aussi.

note (2) : le coefficient 7.82×10^{-2} peut être remplacé par un nombre exact, combinaison de racines carrées et du nombre π ; ce coefficient, ainsi que l'exposant $-\frac{3}{4}$ appliqué à la fraction liquide α_l , provient du modèle de ménisque : "*Asymptotic Toroidal Meniscus Model*" (ATMM) avec un angle de contact θ nul dans le cas présent. Ils seraient évidemment différents pour un autre modèle.

On voit que les équations 10, 11 et 17 permettent facilement d'éliminer certaines variables pour ne conserver que T , p_g , ρ_g , α_l , ρ_w . La dépendance des variables est représentée dans la matrice de la table 1. C'est un système algébro-différentiel.

2 Géométrie du domaine ; Conditions aux limites et initiales

On se restreint (pour des raisons de simplicité de mise en œuvre) au cas unidimensionnel. z est donc notre unique variable spatiale et on considère un domaine de profondeur H . On choisit d'orienter l'axe z vers le bas, donc :

$$0 < z < H$$

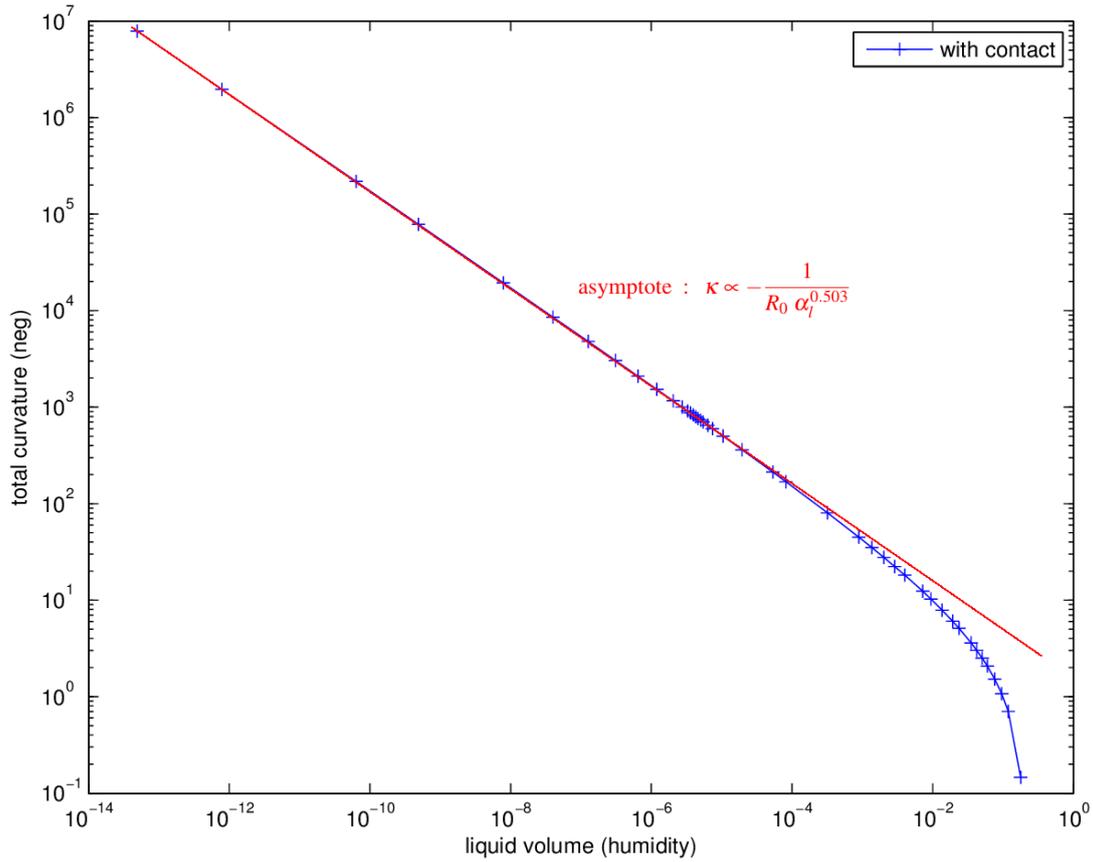


FIGURE 1 – Comparaison entre les modèles de forme de ménisque axisymétrique (forme exacte en bleu, forme toroïdale en rouge). Malgré le fait que l’angle de contact θ soit égal à 10° au lieu de 0° , le comportement asymptotique du modèle exact est similaire au modèle toroïdal. Cependant, des écarts importants ont lieu pour les fractions liquides supérieures à 1 % environ.

	T	p_g	ρ_g	α_l	ρ_w
Mass – water		•	•	•	•
Mass – fluid		•	•	•	
Energy	•	•	•	•	•
Ideal gas – vapor	•			•	•
Ideal gas – mixture	•	•	•		•

TABLE 1 – Dépendance des équations par rapport aux variables : chaque ligne correspond à une équation ou un groupe d’équations.

$H = 0.1$ m (on pourrait prendre plus pour minimiser l’influence du fond et s’approcher d’un milieu semi-infini...)

Concernant les types de conditions aux limites, on distingue :

- pour l’énergie :
 - bord chauffé à température imposée
 - type Dirichlet : $T = \text{valeur connue}$
 - bord isolé thermiquement
 - type Neumann : $\frac{\partial T}{\partial z} = 0$

- pour l'écoulement du gaz (air + vapeur d'eau) :
 - bord ouvert sur l'extérieur (pression et humidité relative connues)
 - type Dirichlet : $p_g = \text{valeur connue}$ ET $p_w = \text{valeur connue}$
 - bord imperméable
 - type Neumann : $\frac{\partial p_g}{\partial z} = 0$ ET $\rho_g \frac{\partial \rho_w}{\partial z} = \rho_w \frac{\partial \rho_g}{\partial z}$
 - bord semi-perméable (interface liquide imperméable à l'air)
 - mixte : $\mathbf{v}_a = 0$ ET $p_w = \text{valeur connue}$

Note 1 : la dissymétrie pour la condition sur la vapeur d'eau (suivant qu'on est en Dirichlet ou en Neumann) provient des conditions physiques à appliquer : l'humidité relative fait intervenir p_w , tandis que le flux diffusif dans (3) fait intervenir ρ_w .

Cependant, comme la variable p_w a été éliminée, il est nécessaire de convertir la condition de Dirichlet sur p_w en une autre condition de Dirichlet sur ρ_w . C'est ce qui sera fait dans l'implémentation numérique, comme précisé ci-dessous.

Note 2 : la condition $\mathbf{v}_a = 0$ ne s'exprime pas de manière directe. Elle implique d'abord $\rho_g \mathbf{v}_g = \rho_w \mathbf{v}_w$; puis en décomposant \mathbf{v}_w , il vient $(\rho_g - \rho_w) \mathbf{v}_g = \rho_w \mathbf{v}_w^*$; enfin, en utilisant les gradients appropriés :

$$(\rho_g - \rho_w) \frac{K_g}{\mu_g} \frac{\partial p_g}{\partial z} = \tau_s D_{w,a} \rho_g \nabla \left(\frac{\rho_w}{\rho_g} \right)$$

En pratique, on ne retiendra pour un bord que les quatre cas suivants (parmi les six possibles) :

- « chauffé et ouvert »
- « chauffé et imperméable »
- « chauffé et semi-perméable »
- « isolé et imperméable »

Étant donné qu'il y a 3 équations différentielles, il faut fixer des conditions aux limites (en $z = 0$ d'une part, et en $z = H$ d'autre part) pour 3 variables. On choisit celles qui viennent de manière naturelle (voir table 2).

	bord $z = 0$ chauffé et ouvert	valeur	bord $z = H$ isolé et imperméable	valeur
T	type D	$T_0(t)$	type N	0
p_g	type D	p_{atm}	type N	0
p_w	type D	$p_{w,0}(t)$	type N	0

TABLE 2 – Conditions aux limites (D=Dirichlet; N=Neumann) pour les variables naturelles (p_w n'apparaît pas dans la liste des 5 variables retenues mais est utilisé par commodité).

Ces conditions apparaissent comme « naturelles » car elles correspondent à la température, la pression, ainsi que l'humidité relative de l'atmosphère extérieure au domaine. Les conditions limites sont ici classiques et traduisent le fait que le bord supérieur ($z = 0$) est ouvert, alors que le bord inférieur ($z = -H$) est fermé, donc imperméable (*d'autres types de conditions aux limites seraient bien entendu possibles – notamment, un chauffage par le fond fermé*).

La température de bord $T_0(t)$ est une fonction croissante du temps, partant d'une valeur initiale $T_0(0) = T_{init}$ qui est la température à l'équilibre du sol ; pour des raisons d'équilibre initial, $p_{w,0}(t)$ est aussi une fonction du temps, mais décroissante vers zéro – c'est-à-dire vers un état de plus en plus sec.

On déduit aussi (voir table 3), par utilisation de l'équation (8), les conditions limites pour ρ_w , impliqué dans un gradient (équations 1-3). De même, on trouvera dans la même table celles pour ρ_g (impliqué

dans un gradient, dans l'équation (4)).

	bord $z = 0$	valeur	bord $z = H$	valeur
ρ_w	type D	$\rho_{w,0}(t)$	type N	0
ρ_g	type D	$\rho_{g,0}$	type N	0

TABLE 3 – Valeurs aux limites (D=Dirichlet; N=Neumann) pour les autres variables. Ce ne sont pas à proprement parler des conditions limites, car elles se déduisent de celles de la table 2.

Concernant les **conditions initiales**, on peut théoriquement donner des valeurs arbitraires aux 5 variables. Cependant, comme on souhaite avoir une évolution proche de l'équilibre, les valeurs initiales devront au moins respecter les deux équations algébriques (8) et (9).

La température, la pression et l'humidité relative sont choisies uniformes, et continues par rapport aux valeurs de la table 2.

3 Discrétisation spatiale des équations

On considère désormais les 5 équations concernant T , p_g , ρ_g , α_l , ρ_w .

Seules les 3 équations aux dérivées partielles (contenant un terme de divergence ou des gradients) sont discrétisées spatialement. Ces 3 équations correspondent aux équations de conservation.

Les deux autres équations (comportement de gaz idéal) étant algébriques, elles sont simplement écrites en chaque nœud.

On discrétise en « différences finies » sur N nœuds (les deux extrémités haute et basse étant respectivement les nœuds 1 et N). Le nombre total d'inconnues est $5N$.

Les équations fournissent alors :

- Conservation de la masse pour le composant « eau » :
Les équations (1-3) contenant le laplacien de ρ_w , un schéma centré devra être utilisé, et on obtiendra $N - 2$ équations discrètes.
- Conservation de la masse pour les deux composants fluides (« eau » et « air ») :
Les équations (4) et (10) contenant le laplacien de p_g , un schéma centré devra être utilisé, et on obtiendra $N - 2$ équations discrètes.
- Conservation de l'énergie :
L'équation (5) contenant le laplacien de T , un schéma centré devra être utilisé, et on obtiendra $N - 2$ équations discrètes.
- Loi de gaz parfait :
Les deux équations restantes sont algébriques; elles s'écrivent en chaque nœud, ce qui donne $2N$ équations discrètes.

Au total, on a donc $5N - 6$ équations discrètes et, avec les 6 conditions aux limites présentées dans la table 2, on arrive à $5N$.

En 1-D, on remplace à la fois l'opérateur divergence et le gradient ∇ par $\frac{\partial}{\partial z}$.

- Conservation de la masse pour l'eau.

Les équations (1-3) deviennent alors, sous une forme complète :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\alpha_l \phi \rho_l + (1 - \alpha_l) \phi \rho_w] = \frac{K_g}{\mu_g} \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho_w \frac{\partial p_g}{\partial z} \right) + \tau_s D_{w,a} \frac{\partial}{\partial z} \left[\rho_g \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho_w}{\rho_g} \right) \right]$$

soit

$$\frac{\partial}{\partial t} [\alpha_l \phi \rho_l + (1 - \alpha_l) \phi \rho_w] = \frac{K_g}{\mu_g} \frac{\partial \rho_w}{\partial z} \frac{\partial p_g}{\partial z} + \frac{K_g}{\mu_g} \rho_w \frac{\partial^2 p_g}{\partial z^2} + \tau_s D_{w,a} \frac{\partial \rho_g}{\partial z} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho_w}{\rho_g} \right) + \tau_s D_{w,a} \rho_g \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left(\frac{\rho_w}{\rho_g} \right)$$

On suppose ensuite que la discrétisation est uniforme et on note par Δz la distance entre deux nœuds consécutifs. Comme l'axe des z pointe vers le bas, on a par conséquent, pour une grandeur X quelconque :

$$\left. \frac{\partial X}{\partial z} \right|^{(i)} \approx \frac{X^{(i+1)} - X^{(i)}}{\Delta z}$$

et

$$\left. \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} \right|^{(i)} \approx \frac{X^{(i+1)} - 2X^{(i)} + X^{(i-1)}}{(\Delta z)^2}$$

Par ailleurs :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\alpha_l \phi \rho_l + (1 - \alpha_l) \phi \rho_w] &= \phi \rho_l \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \phi \frac{\partial \rho_w}{\partial t} - \phi \rho_w \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} - \phi \alpha_l \frac{\partial \rho_w}{\partial t} \\ &= (\rho_l - \rho_w) \phi \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + (1 - \alpha_l) \phi \frac{\partial \rho_w}{\partial t} \end{aligned}$$

Au total, pour la conservation du composant « eau » :

$$\begin{aligned} (\rho_l - \rho_w^{(i)}) \phi \frac{\partial \alpha_l^{(i)}}{\partial t} + (1 - \alpha_l^{(i)}) \phi \frac{\partial \rho_w^{(i)}}{\partial t} &= \frac{K_g}{\mu_g} \left(\frac{\rho_w^{(i+1)} - \rho_w^{(i)}}{\Delta z} \right) \left(\frac{p_g^{(i+1)} - p_g^{(i)}}{\Delta z} \right) \quad (18) \\ &+ \frac{K_g}{\mu_g} \rho_w^{(i)} \left(\frac{p_g^{(i+1)} - 2p_g^{(i)} + p_g^{(i-1)}}{(\Delta z)^2} \right) \\ &+ \tau_s D_{w,a} \left(\frac{\rho_g^{(i+1)} - \rho_g^{(i)}}{\Delta z} \right) \left[\frac{1}{\Delta z} \left(\frac{\rho_w^{(i+1)}}{\rho_g^{(i+1)}} - \frac{\rho_w^{(i)}}{\rho_g^{(i)}} \right) \right] \\ &+ \tau_s D_{w,a} \rho_g^{(i)} \frac{1}{(\Delta z)^2} \left(\frac{\rho_w^{(i+1)}}{\rho_g^{(i+1)}} - 2 \frac{\rho_w^{(i)}}{\rho_g^{(i)}} + \frac{\rho_w^{(i-1)}}{\rho_g^{(i-1)}} \right) \end{aligned}$$

avec $i = 2, \dots, N-1$.

- Conservation des deux composants fluides.

L'équation (4) devient, sous une forme complète :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\alpha_l \phi \rho_l + (1 - \alpha_l) \phi \rho_g] = \frac{K_g}{\mu_g} \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho_g \frac{\partial p_g}{\partial z} \right)$$

soit

$$\frac{\partial}{\partial t} [\alpha_l \phi \rho_l + (1 - \alpha_l) \phi \rho_g] = \frac{K_g}{\mu_g} \frac{\partial \rho_g}{\partial z} \frac{\partial p_g}{\partial z} + \frac{K_g}{\mu_g} \rho_g \frac{\partial^2 p_g}{\partial z^2}$$

De manière similaire à l'équation précédente :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\alpha_l \phi \rho_l + (1 - \alpha_l) \phi \rho_g] = (\rho_l - \rho_g) \phi \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + (1 - \alpha_l) \phi \frac{\partial \rho_g}{\partial t}$$

Au total, pour la conservation des deux composants fluide :

$$(\rho_l - \rho_g^{(i)}) \phi \frac{\partial \alpha_l^{(i)}}{\partial t} + (1 - \alpha_l^{(i)}) \phi \frac{\partial \rho_g^{(i)}}{\partial t} = \frac{K_g}{\mu_g} \left(\frac{\rho_g^{(i+1)} - \rho_g^{(i)}}{\Delta z} \right) \left(\frac{\rho_g^{(i+1)} - \rho_g^{(i)}}{\Delta z} \right) \quad (19)$$

$$+ \frac{K_g}{\mu_g} \rho_g^{(i)} \left(\frac{\rho_g^{(i+1)} - 2\rho_g^{(i)} + \rho_g^{(i-1)}}{(\Delta z)^2} \right)$$

avec $i = 2, \dots, N - 1$.

- Conservation de l'énergie.

L'équation (5), complétée par ses dépendances nécessaires, devient, sous une forme complète :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[(1 - \phi) \rho_s C_s T + \phi \rho_l C_l \alpha_l T + \phi (1 - \alpha_l) \rho_g \left(\frac{\rho_w}{\rho_g} C_{v,w} + \left[1 - \frac{\rho_w}{\rho_g} \right] C_{v,a} \right) T \right] =$$

$$\phi \frac{\partial}{\partial z} \left[(1 - \alpha_l) (\rho_w [C_{p,w} - C_{p,a}] + \rho_g C_{p,a}) T \frac{K_g}{\mu_g} \frac{\partial \rho_g}{\partial z} \right]$$

$$+ \lambda_e \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \rho_l \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} \phi L$$

Les termes de dérivées en temps doivent être tous développés, et regroupés dans le membre de gauche ; en revanche, on laisse regroupés le plus possible les dérivées en z , en séparant juste les dérivées premières et secondes :

$$(1 - \phi) \rho_s C_s \frac{\partial T}{\partial t} + \phi \rho_l C_l \left[T \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \alpha_l \frac{\partial T}{\partial t} \right] + \phi (C_{v,w} - C_{v,a}) \frac{\partial}{\partial t} [(1 - \alpha_l) \rho_w T]$$

$$+ \phi C_{v,a} \frac{\partial}{\partial t} [(1 - \alpha_l) \rho_g T] - \phi \rho_l L \frac{\partial \alpha_l}{\partial t} = \lambda_e \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

$$+ \phi \frac{K_g}{\mu_g} \frac{\partial}{\partial z} [(1 - \alpha_l) (\rho_w [C_{p,w} - C_{p,a}] + \rho_g C_{p,a}) T] \frac{\partial \rho_g}{\partial z}$$

$$+ \phi \frac{K_g}{\mu_g} (1 - \alpha_l) (\rho_w [C_{p,w} - C_{p,a}] + \rho_g C_{p,a}) T \frac{\partial^2 \rho_g}{\partial z^2}$$

Finalement :

$$[(1 - \phi) \rho_s C_s + \phi \rho_l C_l \alpha_l + \phi (C_{v,w} - C_{v,a}) (1 - \alpha_l) \rho_w + \phi C_{v,a} (1 - \alpha_l) \rho_g] \frac{\partial T}{\partial t}$$

$$+ [\phi \rho_l C_l T - \phi (C_{v,w} - C_{v,a}) \rho_w T - \phi C_{v,a} \rho_g T - \phi \rho_l L] \frac{\partial \alpha_l}{\partial t}$$

$$+ \phi (C_{v,w} - C_{v,a}) (1 - \alpha_l) T \frac{\partial \rho_w}{\partial t}$$

$$+ \phi C_{v,a} (1 - \alpha_l) T \frac{\partial \rho_g}{\partial t} = \lambda_e \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

$$+ \phi \frac{K_g}{\mu_g} \frac{\partial}{\partial z} [(1 - \alpha_l) (\rho_w [C_{p,w} - C_{p,a}] + \rho_g C_{p,a}) T] \frac{\partial \rho_g}{\partial z}$$

$$+ \phi \frac{K_g}{\mu_g} (1 - \alpha_l) (\rho_w [C_{p,w} - C_{p,a}] + \rho_g C_{p,a}) T \frac{\partial^2 \rho_g}{\partial z^2}$$

Après discrétisation, on obtient :

$$\begin{aligned}
& \left[\alpha_l^{(i)} \phi \rho_l C_l + (1 - \alpha_l^{(i)}) \phi \rho_g^{(i)} \left(\frac{\rho_w^{(i)}}{\rho_g^{(i)}} C_{p,w} + \left[1 - \frac{\rho_w^{(i)}}{\rho_g^{(i)}} \right] C_{p,a} \right) + (1 - \phi) \rho_s C_s \right] \frac{\partial T^{(i)}}{\partial t} \quad (20) \\
& - (1 - \alpha_l^{(i)}) \phi \frac{\partial \rho_g^{(i)}}{\partial t} - \phi \rho_l L \frac{\partial \alpha_l^{(i)}}{\partial t} = \lambda_e \frac{T^{(i+1)} - 2T^{(i)} + T^{(i-1)}}{(\Delta z)^2} \\
& + \rho_g^{(i)} \left(\frac{\rho_w^{(i)}}{\rho_g^{(i)}} C_{p,w} + \left[1 - \frac{\rho_w^{(i)}}{\rho_g^{(i)}} \right] C_{p,a} \right) \frac{K_g}{\mu_g} \left(\frac{\rho_g^{(i+1)} - \rho_g^{(i)}}{\Delta z} \right) \left(\frac{T^{(i+1)} - T^{(i)}}{\Delta z} \right) \\
& - (1 - \alpha_l^{(i)}) \phi \frac{K_g}{\mu_g} \left(\frac{\rho_g^{(i+1)} - \rho_g^{(i)}}{\Delta z} \right)^2
\end{aligned}$$

avec $i = 2, \dots, N-1$.

Enfin, comme annoncé plus haut, les deux dernières équations algébriques se discrétisent très facilement.

- Comportement de gaz parfait pour la vapeur d'eau.

L'équation (8), combinée à (11-12) devient :

$$R \rho_w^{(i)} T^{(i)} = M_w \exp \left[- \frac{M_w \kappa(\alpha_l^{(i)}) \sigma(T^{(i)})}{\rho_l R T^{(i)}} \right] p_{w,\text{sat}}(T^{(i)}) \quad (21)$$

avec $i = 1, \dots, N$.

$\sigma(T)$, $p_{w,\text{sat}}(T)$ et $\kappa(\alpha_l)$ sont des modèles ajustables décrits respectivement par les équations (13) [ou (14)], (15) et (16).

- Comportement de gaz parfait pour le mélange gazeux.

L'équation (9) s'écrit immédiatement :

$$\frac{\rho_g^{(i)}}{\rho_g^{(i)}} = R T^{(i)} \left[\frac{\rho_w^{(i)}}{\rho_g^{(i)}} \left(\frac{1}{M_w} - \frac{1}{M_a} \right) + \frac{1}{M_a} \right] \quad (22)$$

avec $i = 1, \dots, N$.

Le système DAE (système différentiel algébrique) à résoudre est donc constitué des équations (17) à (21).

4 Résolution par un solveur DAE approprié

Utilisation de MUESLI. Solveur DAE (schéma BDF).

5 Choix des valeurs numériques

Le milieu choisit est un sable « idéal », proche de celui de Fontainebleau, dont les grains sphériques ont tous le même rayon : 0.1 mm.

L'épaisseur de l'échantillon est de 10 ou de 20 cm.

La durée de chauffage est de 1, 3, 6, 9 et 12 heures, pour des températures allant jusqu'à 190°C (mais on pourrait évidemment chauffer plus...).

6 Programmation

Tout est programmé en Fortran. La matrice jacobienne est calculée par un script de calcul formel (Maple ou Maxima) et la traduction en code Fortran automatiquement incluse dans le programme. Cette matrice est stockée en creux pour accélérer sa factorisation via les solveurs linéaires de SuiteSparse.

Le modèle **A** est résolu sur un simple PC portable (Intel Core i5, 2.40 GHz, 8 Go de RAM) en une quinzaine de secondes de temps CPU pour une discrétisation 1-D de 500 nœuds (donc 2500 inconnues, car il y a 5 inconnues à chaque nœud).

Pour stabiliser le calcul numérique, il a fallu toutefois faire un changement de variable et travailler avec $\log(\alpha_i)$.

7 Résultats

Les résultats obtenus sont intéressants et montrent un comportement très riche. Les différentes courbes pour toutes les variables (primaires et secondaires) ont été sorties au format EPS, en fonction de la coordonnée spatiale z et du temps t .