



Transfert d'eau en sol aride avec changement de phase

Ali Chammari^a, Betaboale Naon^b, Fabien Cherblanc^a, Jean-Claude Bénet^a

^a Laboratoire de mécanique et génie civil, Université Montpellier 2, CC 048, place Eugène Bataillon, 34095 Montpellier cedex 05, France

^b IUT – Université polytechnique de Bobo-Dioulasso, 01 BP 1091 Bobo-Dioulasso, Burkina Faso

Reçu le 18 juin 2003 ; accepté après révision le 24 juillet 2003

Présenté par Michel Combarrous

Résumé

La modélisation du transfert d'eau dans un sol à faible teneur en eau (domaine pendulaire et hygroscopique) proposée s'appuie sur l'idée d'un changement de phase liquide–gaz accompagné d'un transfert en phase gazeuse. Le modèle de changement de phase développé introduit un coefficient phénoménologique déterminé lors d'une étude expérimentale de volatilisation sur des échantillons centimétriques. Dans un deuxième temps, des simulations numériques basées sur le modèle de transfert sont comparées aux cinétiques expérimentales de séchage d'un échantillon macroscopique. Le bon accord obtenu conforte l'hypothèse d'un transport en phase gazeuse associé à un changement de phase avec non-équilibre thermodynamique liquide–gaz. *Pour citer cet article : A. Chammari et al., C. R. Mecanique 331 (2003).*

© 2003 Académie des sciences. Publié par Éditions scientifiques et médicales Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abstract

Water transport with phase change at low water content. The description of water transport in soil at low water content proposed is based on the idea that liquid–gas phase change occurs with vapor diffusion in the gas phase. The phase change modelisation introduces a phenomenological coefficient characterized through an experimental investigation done on small-scale soil samples. Then, numerical simulations are compared to experimental drying kinetics carried out on macroscopic soil samples. Good agreement is obtained, which strengthens the hypothesis of transport in the gas phase associated with a non-equilibrium liquid–gas phase change. *To cite this article: A. Chammari et al., C. R. Mecanique 331 (2003).*

© 2003 Académie des sciences. Publié par Éditions scientifiques et médicales Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Mots-clés : Milieux granulaires ; Sols ; Milieux poreux ; Transfert d'eau ; Changement de phase ; Sol aride ; Évaporation

Keywords: Granular media; Soils; Porous media; Water transport; Phase change; Dry soil; Evaporation

Abridged English version

The physical mechanisms involved during water transport at very low water content have still not been clearly identified. In a very dry region, the knowledge of these mechanisms is of primary interest in order to improve

Adresses e-mail : chammari@lmgc.univ-montp2.fr (A. Chammari), bnaon@hotmail.com (B. Naon), cherblanc@lmgc.univ-montp2.fr (F. Cherblanc), benet@lmgc.univ-montp2.fr (J.-C. Bénet).

water resources management and to optimize irrigation strategy. Darcy's law can fairly describe the water flow when dealing with a soil in the funicular domain. As long as the water phase is continuous, the capillary pressure is defined and can be used. However, in the pendular or hygroscopic domain, water is adsorbed on the solid interface and the concepts of pressure field or capillary potential are meaningless. In these situations, the chemical potential becomes the key parameter that controls the water transport.

The main idea developed in this paper is that water transport is achieved through vapor diffusion in the gas phase. This means that the liquid phase is subjected to a phase change. This phase change results from a thermodynamics non-equilibrium between the liquid phase and the gas phase, as long as the chemical potential of water is different between both phases. To describe these phenomena, the soil is represented by a three-phase system, constituted of an undeformable solid phase, an immobile pure water liquid phase and a gas phase constituted of water vapor and dry air. The physical mechanisms taken into account are the diffusion of water vapor and dry air in the gas phase, and the liquid–gas phase change of water. The state variables chosen are the water content w defined as the ratio between apparent mass densities of liquid and solid, and the partial pressure of water vapor in the gas phase P_v^* .

A phenomenological model is proposed based on the Thermodynamics of Irreversible Processes ideas. The phase change rate J is written as a linear function of the chemical potential non-equilibrium. In such systems, the chemical potential non-equilibrium can be formulated as the logarithm of the ratio of the partial pressure of water vapor P_v^* to the partial pressure of water vapor at equilibrium $P_{v\text{eq}}^*$. This model introduces a phenomenological coefficient L , that depends on the water content, the temperature, the soil, . . . Near equilibrium, i.e., in the linear domain, this coefficient has been determined in a previous experimental investigation done on clayey silty sand samples (centimetric-scale), the principle and the main results are briefly recalled. The coefficient L tends to 0 for low ($\approx 0\%$) and high ($\approx 13\%$) water content, and shows a maximum for intermediate water content, interpreted as the transition between hygroscopic and pendular domains. Nevertheless, in practical applications, phase change occurs in conditions that are outside of this linear domain. In these situations, the coefficient L increases significantly as the partial pressure of water vapor P_v^* decreases. Thus, a first interpretation of experimental results far from equilibrium is proposed in terms of a linear dependence of coefficient L on the partial pressure of water vapor P_v^* .

This theoretical model is then compared to experimental drying experiments at a larger scale. Soil samples of clayey silty sand (decimetric-scale) are compacted and prepared in order to obtain a low water content ($w = 8\%$). These samples are disposed in a drying atmosphere at controlled temperature and humidity. Drying kinetics (water content as a function of time) are obtained through sample mass measurement. Based on the phenomenological model and the experimental correlations for L presented in this paper, one-dimensional numerical simulations of drying are performed. Very good agreement between theoretical predictions and experimental results is obtained. This shows the relevance of this approach to describe water transport at very low water content. It also emphasizes the significance of focusing on phase change far from equilibrium, even if further investigations are required.

The theoretical results presented could be extrapolated to model the natural attenuation of volatile contaminants such as light hydrocarbons trapped in the porous skeleton after conventional pumping. The phase change is thermally activated and increased by dry air injection (venting technique), bringing some interesting perspectives to this work.

1. Introduction

Tant que l'eau d'un sol se trouve sous forme continue ou partiellement continue, la notion de potentiel capillaire garde son sens, et le transfert en phase liquide est bien décrit par la loi de Darcy. Cependant lorsque la teneur en eau décroît, dans les domaines pendulaire et hygroscopique, l'eau n'est alors présente que sous forme d'îlots sans communication entre eux et sous forme adsorbée à la surface des grains solides. Le concept de potentiel capillaire perd son sens physique et il faut le remplacer par le concept thermodynamique de potentiel chimique. Dans ce domaine de teneurs en eau, les mécanismes qui régissent le transfert d'eau sont encore mal connus. Néanmoins des

expériences réalisées [1–3] ont montré que les transferts en phase gazeuse peuvent expliquer les transferts d'eau dans les domaines pendulaire et hygroscopique. C'est le cas dans les sols pauvres en eau comme ceux situés dans les zones semi-arides et arides. Hors du domaine hygroscopique où, à température constante, la pression partielle de vapeur est uniforme, la migration de celle-ci par diffusion ne peut s'effectuer que si il existe un déséquilibre thermodynamique entre l'eau et la vapeur d'eau, se traduisant par une discontinuité du potentiel chimique de l'eau et autorisant l'existence d'un gradient de pression partielle de la vapeur d'eau. Dans le but d'apporter des éléments de modélisation, cet article est structuré en trois parties.

La première partie rappelle la modélisation mathématique des transferts dans les sols avec changement de phase, adoptée dans cette étude. Afin de faire apparaître les couplages entre transfert de matière et changement de phase, l'outil approprié est la thermodynamique des processus irréversibles, utilisée hors du domaine linéaire. La deuxième partie décrit alors l'étude expérimentale qui permet de valider la loi de changement de phase proposée et d'identifier le coefficient phénoménologique associé. Le troisième volet est consacré à l'étude du séchage d'un sol contenant une faible quantité d'eau. Les résultats d'une expérience de séchage sont comparés à la simulation numérique basée sur le modèle théorique. Cette confrontation a pour objet de juger de la pertinence du modèle utilisé et des approximations adoptées. Elle permet aussi de mettre à jour les points à développer en priorités dans les investigations futures.

2. Modélisation isotherme du transport de l'eau

La modélisation théorique s'appuie sur une description phénoménologique des mécanismes intervenant lors des transferts d'un liquide dans un milieu poreux à trois phases : une phase solide (s) indéformable, une phase liquide (l) constituée d'eau pure liée à la phase solide, et une phase gazeuse (g) contenant de la vapeur d'eau (v) et de l'air sec (a). Les mécanismes élémentaires pris en compte sont la diffusion des constituants de la phase gazeuse, et le changement de phase liquide–vapeur. En conditions isothermes, pour décrire l'évolution de l'état de l'eau sous ses deux formes, liquide et vapeur, nous retenons comme variables d'état, la teneur en liquide w définie comme le rapport des masses volumiques apparentes des phases liquide et solide dans le sol, $w = \rho_l / \rho_s$, et la pression partielle de vapeur présente dans la phase gazeuse P_v^* . L'équation de bilan de masse de la phase liquide s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{J}{\rho_s} \quad (1)$$

où J est le flux de changement de phase [$\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-3}$] modélisé sous la forme [1,3]

$$J = -L \frac{R_g}{M_l} \ln \frac{P_v^*}{P_{v\text{éq}}^*} \quad \text{avec } P_{v\text{éq}}^* = a(w) P_{vs}(T) \quad (2)$$

L [$\text{kg}\cdot\text{K}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-5}$] est le coefficient phénoménologique de changement de phase liquide–gaz, $R_g = 8,314$ [$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$] est la constante des gaz parfaits, $\rho_s = 1500$ [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$] est la masse volumique apparente de la phase solide, $M_l = 0,018$ [$\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1}$] est la masse molaire de l'eau liquide, $a(w)$ est l'activité de l'eau (Éq. (5)) et $P_{vs}(T)$ est la pression de vapeur saturante de l'eau à la température T . Quant au bilan de pression partielle de vapeur dans le milieu il se présente sous la forme :

$$\eta_g \frac{\partial P_v^*}{\partial t} = -J \frac{R_g T}{M_l} - (D_{vs} P_{v,k}^*)_{,k} \quad (3)$$

où η_g est la fraction volumique de la phase gazeuse et D_{vs} est le coefficient de diffusion de la vapeur dans le sol.

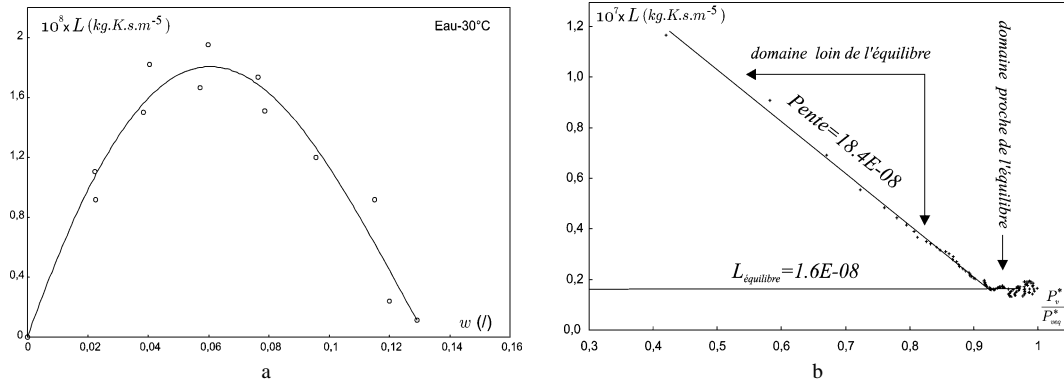


Fig. 1. Coefficient phénoménologique de changement de phase de l'eau dans un sol ($T = 30\text{ }^{\circ}\text{C}$).

Fig. 1. Phenomenological phase change coefficient of water in a soil ($T = 30\text{ }^{\circ}\text{C}$).

3. Étude expérimentale du changement de phase

Dans le but de décrire les transferts dans les sols en zone aride, on s'intéresse à des domaines de teneurs où la phase liquide n'est plus continue dans le milieu. Cela correspond aux domaines pendulaire et hygroscopique [4]. Les limites de ces domaines hydriques sont étroitement liées aux propriétés intrinsèques du sol et à la nature du liquide présent. Dans le cas de l'eau dans un sable limoneux argileux utilisé par la suite, le domaine pendulaire est relativement vaste $6\% < w < 13\%$ [5].

Le changement de phase modélisé par l'Éq. (2) introduit un coefficient phénoménologique L qui dépend de la teneur en liquide, de la température, de la pression de l'air et des caractéristiques du sol. Afin de pouvoir utiliser cette loi, il est indispensable, d'une part, de déterminer le domaine de validité, d'autre part, d'apprécier le coefficient L . Des études récentes ont été menées [6,5] pour caractériser le phénomène de changement de phase de l'eau dans un sol limoneux argileux à différentes températures, à l'aide d'une expérience de volatilisation [3]. Le principe consiste à provoquer un déséquilibre thermodynamique entre la phase liquide interstitielle et la vapeur contenue dans les pores d'un échantillon de sol maintenu à une température donnée T . La phase gazeuse, composée d'air sec et de vapeur d'eau, est extraite en provoquant une forte dépression dans le milieu, puis remplacée par de l'air sec. L'exploitation des évolutions de la pression totale de la phase gazeuse P_g^* et de la température T pendant la phase de retour à l'équilibre conduit à la détermination du coefficient L pour une teneur en eau w et une température T données. Le résultat présenté dans la Fig. 1(a) est la variation du coefficient phénoménologique L , en fonction de la teneur en eau dans le sol w , à la température $T = 30\text{ }^{\circ}\text{C}$. Ce résultat est exploité à travers l'équation suivante :

$$L(w, T = 30\text{ }^{\circ}\text{C}) = 1,4067 \times 10^{-4} w^4 - 2,4911 \times 10^{-5} w^3 - 3,4541 \times 10^{-6} w^2 + 5,6727 \times 10^{-7} w \quad (4)$$

Ce coefficient est obtenu en exploitant les mesures dans un domaine proche de l'équilibre, où le modèle est linéaire (Éq. (2)). Cependant, les premiers enseignements retenus des applications au séchage des sols arides montrent qu'une très forte variation du coefficient de changement de phase par rapport aux valeurs obtenues dans le domaine linéaire est à envisager. Ces observations ont conduit à étudier le phénomène de changement de phase loin de l'équilibre [6]. La première approche consiste à introduire une dépendance linéaire du coefficient L en fonction du rapport $P_v^*/P_{véq}^*$. L'analyse du graphique obtenu Fig. 1(b) permet de distinguer deux intervalles. Le premier défini par $P_v^*/P_{véq}^* \geq 0,93$, où le coefficient L est celui obtenu dans le domaine proche de l'équilibre par la relation (4), noté $L_{équilibre}$. En deçà, lorsque $P_v^*/P_{véq}^* \leq 0,93$, le coefficient L augmente linéairement au fur et à mesure que le rapport $P_v^*/P_{véq}^*$ diminue. Le modèle suivant peut être proposé :

$$\text{si } P_v^*/P_{véq}^* \geq 0,93 \quad \text{alors } L = L_{équilibre}$$

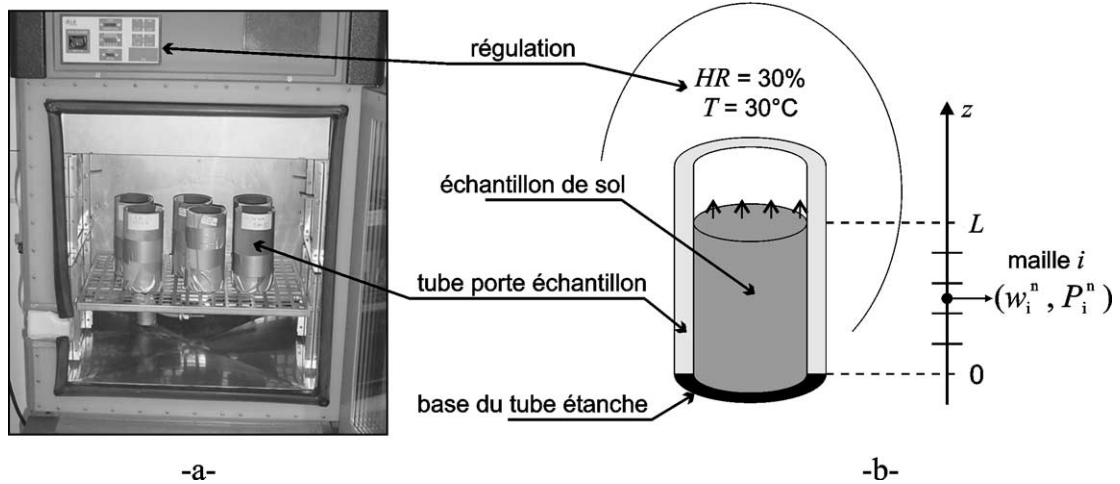


Fig. 2. Séchage d'un échantillon de sol humide ($w_0 = 8\%$ – $T = 30\text{ °C}$ – $HR = 30\%$).
 Fig. 2. Drying of a wet soil sample ($w_0 = 8\%$ – $T = 30\text{ °C}$ – $HR = 30\%$).

$$\text{si } P_v^*/P_{v\text{éq}}^* \leq 0,93 \quad \text{alors } L = -18,4 \times 10^{-8} \left(\frac{P_v^*}{P_{v\text{éq}}^*} \right) + (L_{\text{équilibre}} - 17,1 \times 10^{-8})$$

L'ensemble des résultats présentés permettent d'exploiter ce modèle de changement de phase liquide–gaz dans une expérience à plus grande échelle illustrée dans la partie suivante.

4. Séchage d'un sol à faible teneur en eau

4.1. Expériences

Les échantillons cylindriques sont obtenus par compactage d'un mélange de sol et d'eau. Le sol utilisé est un sable limoneux argileux de masse volumique réelle $\rho_s^* = 2650 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Le mélange est compacté dans des tubes en PVC de manière à obtenir une masse volumique apparente égale à $\rho_s = 1500 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Les échantillons ont une hauteur $L = 10 \text{ cm}$ et un diamètre $D = 8.14 \text{ cm}$.

Les échantillons sont placés dans une enceinte climatique régulée en température et en humidité relative (Fig. 2(a)). A intervalles de temps réguliers, les échantillons sont extraits de l'enceinte et pesés. Par différence par rapport à l'état initial, ces mesures permettent de calculer la teneur en eau moyenne de l'échantillon et d'établir les différentes cinétiques expérimentales de séchage représentées sur la Fig. 3. Pour cette étude, 9 cinétiques ont été réalisées. Une bonne reproductibilité des résultats est observée.

4.2. Modélisation numérique

Les expériences décrites dans la partie précédente peuvent être modélisées par un problème unidimensionnel suivant la direction verticale, et discrétisées sur un maillage régulier. Les inconnues (w et P_v^*) sont affectées aux centres des mailles. Un schéma implicite en temps a été retenu pour des raisons de stabilité, avec un pas de temps dt constant. Pour la maille i au pas de temps n , les inconnues sont notées w_i^n et P_i^n (Fig. 2(b)). Les Éqs. (1) et (3) sont écrites sous la forme :

$$\frac{w_i^{n+1} - w_i^n}{dt} - \frac{J(w_i^{n+1}, P_i^{n+1})}{\rho_s} = 0$$

$$\frac{P_i^{n+1} - P_i^n}{dt} + J(w_i^{n+1}, P_i^{n+1}) \frac{R_g T}{\eta_g M_l} - D_{vs} \frac{P_{i+1}^{n+1} - 2P_i^{n+1} + P_{i-1}^{n+1}}{dz} = 0$$

Les termes de changement de phase J et de porosité η_g , dépendant des inconnues w et P , sont évalués au pas de temps $n + 1$. Compte tenu de la non linéarité des équations, une méthode de Newton est utilisée pour la résolution.

Au vu des expériences décrites précédemment, les conditions initiales sont à $t = 0$, $w_0 = 8\%$. La pression partielle de vapeur initiale P_{v0}^* est déduite directement de la relation (2) :

$$P_{v0}^* = P_{vs}(30^\circ\text{C}) = 4,267 \text{ kPa} \quad \text{car} \quad a(w_0 = 8\%) = 1$$

De plus, les conditions aux limites imposées sont un flux de diffusion nul sur la face inférieure ($z = 0$) et une humidité relative $HR = 30\%$ sur la face supérieure ($z = L$). Cette dernière condition se traduit par :

$$P_v^*(x = L) = HR \times P_{vs}(30^\circ\text{C}) = 1,280 \text{ kPa}$$

L'état de l'eau dans ce milieu poreux est décrit, dans le domaine hygroscopique ($0\% < w < 6\%$) par une isotherme de sorption/désorption, et dans le domaine funiculaire ($w > 13\%$) par une courbe de rétention capillaire et des coefficients de perméabilités [7]. On utilise l'activité de l'eau $a(w)$, déduite de l'isotherme de désorption de l'eau dans le sol à la température considérée :

$$\begin{cases} w < 6\%, & a(w) = 831847,52w^4 - 92668,702w^3 + 2795,6281w^2 + 8,2065586w \\ w \geq 6\% & a(w) = 1 \end{cases} \quad (5)$$

Une formulation du coefficient de diffusion de la vapeur d'eau dans le sol D_{vs} en fonction du coefficient dans l'air D_{va} a été proposée par Penman [8] :

$$D_{vs} = 0,66\eta_g D_{va} \quad \text{avec} \quad D_{va} = 2,57 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

4.3. Comparaison des résultats expérimentaux avec les simulations

Les courbes expérimentales sont confrontées à la prévision théorique issue de la simulation numérique sur la Fig. 3. La superposition des cinétiques expérimentales et numérique est très satisfaisante. Les courbes convergent en fin de séchage vers une teneur en eau d'équilibre aux alentours de 2%, qui correspond bien à la valeur d'équilibre donnée par l'isotherme de désorption. Les vitesses expérimentales de séchage paraissent plus élevées lorsque

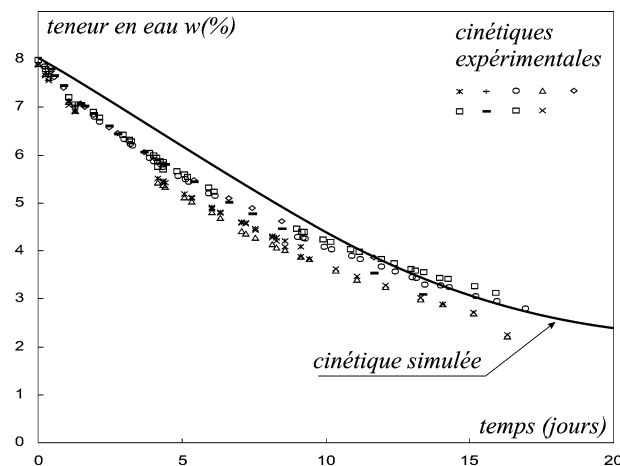


Fig. 3. Cinétiques de séchages expérimentales et numérique.

Fig. 3. Experimental and numerical drying kinetics.

6% < w < 8%, ceci résultant de la non homogénéité de l'état de l'eau dans l'échantillon. Des îlots capillaires peuvent exister et autoriser localement des transferts en phase liquide. Dans le domaine hygroscopique ($w < 6\%$), les vitesses expérimentales et théoriques sont en conséquent plus proches. La pression partielle de vapeur P_v^* moyenne calculée est environ $P_v^*/P_{v\text{éq}}^* \approx 0,5$, ce qui correspond, d'après la Fig. 1(b), à une situation loin de l'équilibre.

5. Conclusion

Ce travail vise à valider l'hypothèse d'un non-équilibre thermodynamique lors du transfert dans un sol à faible teneur en eau. Les résultats satisfaisants présentés confortent l'idée d'un transport en phase gazeuse. Le comportement loin de l'équilibre est clairement mis en évidence. Ces travaux doivent être complétés par une confrontation entre des profils de teneurs et de températures, mesurés et simulés.

Cette étude, qui est réalisée dans le cadre d'un projet sur la gestion des ressources en eau des sols des régions arides, est également étendue à l'étude de l'atténuation naturelle d'un contaminant liquide dans un sol. Le modèle théorique développé et l'approche expérimentale retenue, sont donc des outils adaptés au traitement de ces deux sujets d'actualité.

Références

- [1] J.-C. Bénét, P. Jouanna, Phenomenological relation of phase change of water in a porous media: experimental verification and measurement of the phenomenological coefficient, *Int. J. Heat Mass Transfer* 31 (1982) 1747–1754.
- [2] G. Fras, Macroscopisation des transferts en milieux dispersés polyphasiques – application à l'étude de l'interface entre un milieu poreux et une atmosphère séchante, Thèse de 3^{ème} cycle, Université Montpellier 2, 1989.
- [3] T. Ruiz, J.-C. Bénét, Phase change in a heterogeneous medium: comparison between the vaporization of water and heptane in an unsaturated soil at two temperatures, *Transport in Porous Media* 44 (2001) 337–353.
- [4] J. Bear, J.M. Buchlin, *Modelling and Applications of Transport Phenomena in Porous Media*, Kluwer Academic, 1989.
- [5] T. Ruiz, Eléments de modélisation et contribution expérimentale à l'étude du transport réactif dans un sol non saturé, Thèse de 3^{ème} cycle, Université Montpellier 2, 1998.
- [6] A. Chammari, Transfert gazeux dans les sols avec changement de phase – application à quelques aspects de géotechnique environnementale, Thèse de 3^{ème} cycle, Université Montpellier 2, 2002.
- [7] C. Saix, P. Devillers, M.S. El Youssoufi, Eléments de couplage thermomécanique dans la consolidation de sols non saturés, *Canad. Geotechn. J.* 37 (2000) 1–10.
- [8] E. Mignard, Contribution à l'étude des transferts en milieux poreux par la thermodynamique du non équilibre – cas de la dissolution des gaz dans les sols, Thèse de doctorat, INSA Toulouse, 1984.