

---

# Modèle de cinétique locale de sorption couplé au phénomène d'hystérésis pour les matériaux biosourcés

Nicolas Reuge, Sophie Moissette, Marjorie Bart, Florence Collet, Christophe Lanos

Univ Rennes, Laboratoire de Génie Civil et Génie Mécanique - EA 3913, Equipe Matériaux Thermo Rhéologie, IUT Rennes, 3 rue du Clos Courtel, BP 90422 35704 Rennes (France)

reuge@free.fr

---

*RÉSUMÉ.* Les modèles classiques décrivant les transferts de masse hygriques dans les matériaux de construction semblent inadaptés dans le cas des matériaux biosourcés. Ils reposent sur l'hypothèse d'un équilibre local instantané entre humidité relative et teneur en eau. Ces deux paramètres évoluent en fonction des flux diffusifs en suivant les isothermes de sorption. Ceci conduit à des temps de stabilisation beaucoup plus courts que ceux obtenus expérimentalement. Une nouvelle approche est présentée ici, elle s'affranchit de l'équilibre local instantané en introduisant une cinétique locale pour décrire la transformation de l'eau de l'état vapeur à l'état liquide et inversement. Cette cinétique locale de sorption est couplée au phénomène bien connu d'hystérésis. Elle est ajustée au regard de données bibliographiques fournissant des mesures de suivi de masse d'un béton de chanvre en conditions d'adsorption / désorption. Cette approche permet un excellent recalage sur l'expérience. Enfin, les comparaisons de simulations de tests MBV (cycles isothermes de HR de 33% ↔ 75%) à l'expérience sont également en faveur du modèle cinétique. Ce dernier constitue une avancée conséquente dans le domaine étudié.

*ABSTRACT.* The classic models describing the hygric mass transfers inside building materials seem unsuitable in the case of bio-based materials. They are based on the assumption of instantaneous local equilibrium between relative humidity and water content. These two parameters evolve according to the diffusive fluxes following the sorption isotherms. This leads to predict much shorter times of stabilization than those experimentally obtained. A new approach is presented here, it frees from the local instantaneous equilibrium introducing a local kinetic to describe the transformation of water from vapor state to liquid state and vice versa. The local kinetics of sorption is coupled with the well-known hysteresis phenomenon. It is adjusted from bibliographic data giving mass evolution of a hemp concrete under adsorption / desorption conditions. This allows an excellent fitting on the experiments. Finally, comparisons of simulations of MBV tests (RH cycles of 33% ↔ 75%) with experiments are also in favour of the kinetics model. The latter represents a consistent step forward in the studied domain.

*MOTS-CLÉS :* matériaux biosourcés, cinétique local, sorption, transfert de masse, modélisation.

*KEY WORDS :* bio-based materials, local kinetics, sorption, mass transfer, modeling.

---

## 1. Introduction

La modélisation des transferts hygrothermiques au sein des matériaux de construction est d'une aide précieuse pour prédire les évolutions d'humidité et de température à l'intérieur des bâtiments soumis à des charges intérieures et à des conditions extérieures données et changeantes. Elle permet d'estimer leurs performances hygrothermiques. Les modèles utilisés reposent naturellement sur les équations de conservation de masse et de chaleur en régime instationnaire et sur des hypothèses largement admises depuis longtemps, en particulier un équilibre local instantané entre humidité relative et teneur en eau déterminé par les isothermes de sorption des matériaux considérés.

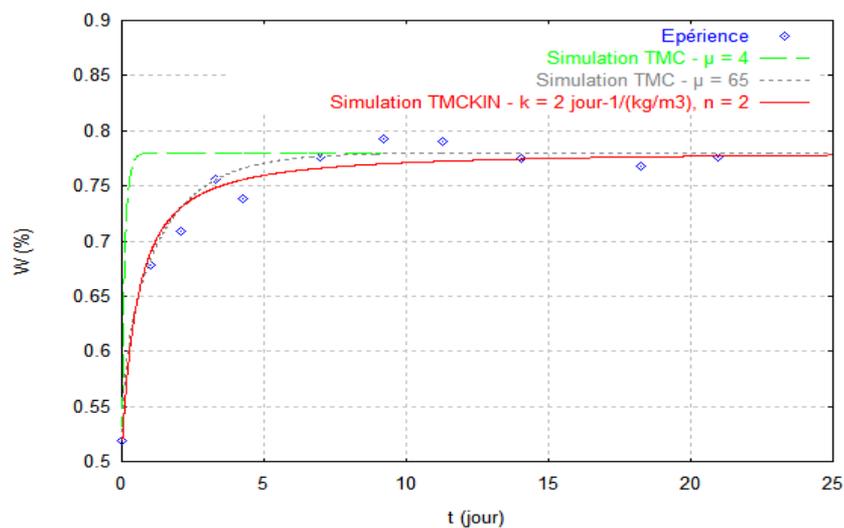
Concernant le domaine des matériaux biosourcés, les investigations numériques sont récentes et peu nombreuses. Il se pose en premier lieu des difficultés de caractérisation de leurs propriétés hygrothermiques car leur variabilité peut être conséquente. De plus, ils présentent des isothermes d'adsorption et de désorption très différentes conduisant à l'apparition de comportements hystérétiques relativement complexes : des modèles existent pour les décrire et des études numériques les incorporant ont conduit à des résultats en accord avec l'expérience [OUM 14]. Par contre, des échantillons de tels matériaux soumis à des incréments d'humidité relative (HR) présentent des durées de stabilisation de leur masse particulièrement longues : leur teneur en eau

met plusieurs jours voir plusieurs semaines à se stabiliser [COL 13], ce que les modèles actuels ne sont pas en mesure de reproduire.

On propose de modifier le modèle classique en y incorporant des cinétiques locales de sorption : la transformation de l'eau de l'état vapeur à l'état liquide (adsorption) et inversement (désorption) au sein des matériaux biosourcés dépendent de cinétiques locales d'adsorption et de désorption. Cette étude s'appuie sur les mesures effectuées par Collet et al. [COL 13] sur le béton de chanvre EASY-R.

## 2. Cinétiques globales de sorption : comparaisons préliminaires entre expériences et simulations

Le béton de chanvre EASY-R est un composite biosourcé constitué de chènevotte et d'un liant minéral (à base de chaux). Ses propriétés et son comportement hygrothermiques ont été caractérisés avec minutie par Collet et al. [COL 13]. Sa masse volumique à sec ( $450 \text{ kg.m}^{-3}$ ), son facteur de résistance à la vapeur d'eau  $\mu$  (égal à  $4 \pm 25\%$  à sec) et ses isothermes d'adsorption et de désorption sont donc connus. La Figure 1 présente la cinétique globale d'adsorption mesurée pour un échantillon cylindrique de 5 cm de diamètre, étanché aux extrémités, de EASY-R initialement stabilisé à un  $HR$  de 33% et soumis à un  $HR$  ambiant de 43% (par cinétique globale d'adsorption, on entend l'évolution de la teneur en eau moyenne  $W$  dans l'échantillon entier en fonction du temps, cette dernière étant le rapport de la masse totale d'eau dans l'échantillon sur la masse de l'échantillon sec, en pour cent).



**Figure 1.** Evolution temporelle de la teneur en eau moyenne  $W$  dans un échantillon de EASY-R stabilisé à un  $HR$  de 33% puis soumis à un  $HR$  ambiant de 43%. Expérience [COL 13], simulations TMC avec  $\mu = 4$  et  $\mu = 65$  et simulation TMCKIN avec  $\mu = 4$ ,  $k = 2 \text{ jour}^{-1}/(\text{kg.m}^{-3})$  et  $n = 2$ .

D'après les mesures, dans ces conditions opératoires, la stabilisation de  $W$  n'est observée qu'au bout de 7 à 10 jours. Une simulation de cette cinétique globale d'adsorption a ensuite été effectuée à l'aide d'un code 1D (en mode cylindrique) appelé TMC, développé au sein de notre laboratoire sous MATLAB [OUM 14] et reposant sur l'hypothèse classique d'équilibre (*i.e.* équilibre instantané entre humidité relative locale  $\varphi$  et teneur en eau locale  $w$  selon les courbes de sorption). Avec  $\mu$  égal à 4, la simulation conduit à une durée de stabilisation inférieure à 1 jour, donc bien trop courte (voir Figure 1). Avec TMC, il faudrait considérer  $\mu$  égal à 65 pour reproduire correctement l'évolution temporelle de  $W$  (voir Figure 1) donc une valeur de  $\mu$  environ 16 fois plus grande que sa valeur déterminée expérimentalement !

Il apparaît donc évident que TMC repose sur une ou des hypothèses qui ne sont pas valides dans ce cas de figure. D'où l'idée de remettre en cause l'hypothèse d'équilibre  $\varphi / w$  et d'introduire une cinétique locale ayant la forme suivante :

$$k = k_0 (w_{eq}(\varphi) - w)^n \quad [1]$$

où  $k_0$  est une constante cinétique,  $w_{eq}(\varphi)$  la teneur en eau locale d'équilibre correspondant à l'humidité locale  $\varphi$ ,  $w$  ( $\text{kg.m}^{-3}$ ) la teneur en eau locale et  $n$  l'ordre de la cinétique. On peut justifier l'existence d'une telle cinétique par le fait que le dépôt d'eau liquide au sein du béton de chanvre serait conditionné par une diffusion des

molécules d'eau dans les cellules végétales suivant un processus extrêmement lent, ceci a été mis en évidence dans le cas du bois [ENG 13]. Il s'agirait donc d'une cinétique apparente représentant ce phénomène.

Le code TMC a été modifié pour prendre en compte cette cinétique locale, il est désormais appelé TMCKIN. Une nouvelle simulation a donc été effectuée en ajustant les paramètres  $k_0$  et  $n$  (voir Figure 1). Avec une cinétique d'ordre  $n$  égal à 2 et une constante cinétique d'adsorption cinétique  $k_0$  égal à  $2 \text{ jour}^{-1}/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$ , il apparait que la simulation est en très bon accord avec l'expérience.

### 3. Modélisation mathématique

Avec le modèle classique d'équilibre, la conservation de l'eau vapeur / liquide peut être écrite sous la forme d'une unique équation :

$$\frac{\partial w}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \nabla \left[ \left( \frac{D_v}{\mu} \right) M_w P_{sat} / RT + D_{p,l} \frac{\partial w}{\partial \varphi} \right] \nabla \varphi = 0 \quad [2]$$

En introduisant une cinétique locale, il est nécessaire de scinder l'équation pour considérer la conservation de la vapeur d'eau d'une part et la conservation de l'eau liquide d'autre part :

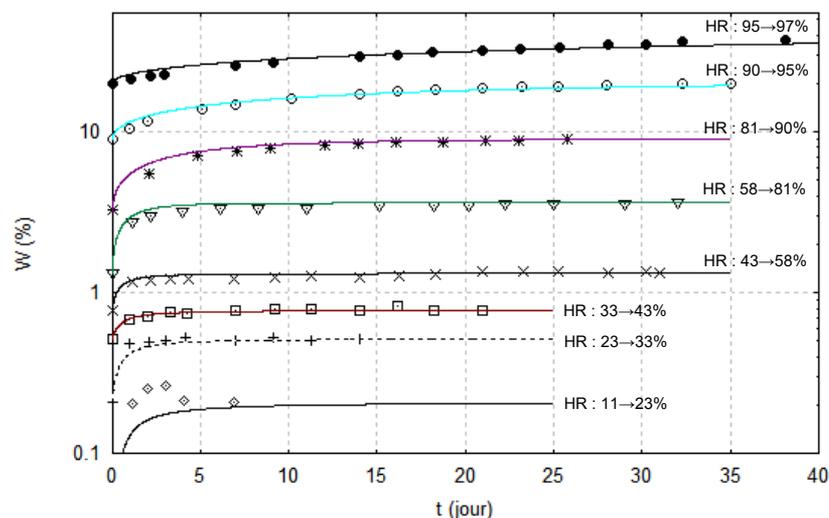
$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} - \nabla (D_{p,l} \nabla w) = k_0 (w_{eq}(\varphi) - w)^n \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \nabla \left( \frac{D_v}{\mu} \nabla \varphi \right) = -RT / M_w P_{sat} k_0 (w_{eq}(\varphi) - w)^n \end{cases} \quad [3,4]$$

Tout comme avec le modèle classique, le modèle cinétique est associé à un modèle d'hystérésis pour décrire l'évolution des isothermes d'adsorption / désorption [OUM 14]. Avec ce dernier, la détermination des isothermes de sorption secondaires dépend de la position des points d'inversion. Avec le modèle de cinétique locale, les inversions adsorption / désorption se produisent lorsque  $w_{eq}(\varphi) - w$  change de signe.

### 4. Ajustement du modèle de cinétique locale sur les cinétiques globales de sorption

Dans [COL 13], l'échantillon de EASY-R a été caractérisé en adsorption et désorption par des paliers graduels de HR compris entre 23% et 97%. Les cinétiques globales obtenues en adsorption sont présentés sur la Figure 2. Comme on peut le constater, les temps de stabilisation sont compris entre quelques jours et quelques semaines.

Le code TMCKIN a été utilisé pour simuler ces expériences. Comme on peut le constater sur la Figure 2, les ajustements sont globalement très bons en considérant une cinétique d'ordre  $n$  égal à 2 et une constante cinétique d'adsorption cinétique  $k_0$  égal à  $2 \text{ jour}^{-1}/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$ .

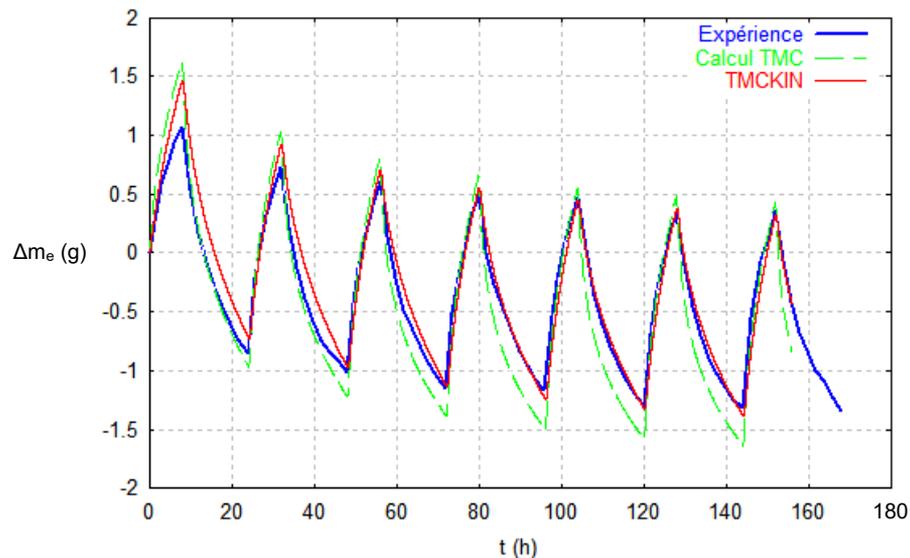


**Figure 2.** Evolution temporelle de la teneur en eau moyenne  $W$  dans un échantillon de EASY-R pour différents paliers de HR. Expérience [COL 13], simulations TMCKIN avec  $\mu = 4$ ,  $k = 2 \text{ jour}^{-1}/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$  et  $n = 2$ .

Concernant les cinétiques globales de désorption, de très bons ajustements ont également pu être obtenus avec les mêmes paramètres ( $n = 2$  et  $k_0 = 2 \text{ jour}^{-1}/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$ ).

## 5. Simulations TMC et TMCKIN de cycles MBV (HR 33% ↔ 75%)

Toujours dans l'étude de Collet et al. [COL 13], des échantillons de EASY-R d'épaisseur 7,3 cm ont été soumis à un test classique "MBV" avec alternance de HR ambiants de 75% (8h) puis 33% (16h). L'évolution temporelle de la masse d'eau relative mesurée, puis simulée avec TMC et TMCKIN (en mode 1D cartésien) sont présentés sur la Figure 3. Il apparaît que les résultats obtenus avec TMCKIN sont en bon accord avec l'expérience tandis que TMC surestime significativement l'amplitude des variations.



**Figure 2.** Evolution temporelle de la masse d'eau dans les échantillons de EASY-R soumis à des cycles de HR 33% ↔ 75% [COL 13], simulation TMC, simulation TMCKIN avec  $\mu = 4$ ,  $k = 2 \text{ jour}^{-1}/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$  et  $n = 2$ .

## 6. Conclusion

Un modèle de cinétique locale a été présenté, justifié et introduit dans un code 1D de transferts hygrothermiques. Pour les matériaux de construction biosourcés et le béton de chanvre EASY-R étudié ici en particulier, les simulations effectuées avec le modèle de cinétique locale (TMCKIN) reproduisent bien les résultats expérimentaux (cinétiques globales de sorption, cycles MBV) contrairement aux simulations effectuées avec l'approche classique (TMC).

Ce modèle constitue une avancée conséquente dans le domaine étudié. Il sera particulièrement intéressant d'observer l'influence du modèle de cinétique locale sur l'évolution temporelle des transferts hygrothermiques ayant lieu dans une paroi biosourcée soumise à un climat donné.

## Remerciements

Ce travail a été effectué et financé dans le cadre du projet européen ISOBIO – (<http://isobioproject.com>) relevant du programme de recherche et d'innovation Horizon 2020 (agreement No. 636835).

## 7. Bibliographie

[COL 13] COLLET F., CHAMOIN J., PRETOT S., LANOS C., « Comparison of the hygric behaviour of three hemp concretes », *Energy and Building*, vol. 62, 2013, p. 294-303.

[ENG 13] ENGELUND E.T., THYGESEN L.G., SVENSSON S., HILL C.A.S., « A critical discussion of the physics of wood-water interactions », *Wood Sci. Technol.*, vol. 47, 2013, p. 141-161.

[OUM 14] OUMEZIANE Y.A., BART M., MOISSETTE S., LANOS C., « Hysteretic behaviour and moisture buffering of hemp concrete », *Transp. Porous Med.*, vol. 103, 2014, p. 515-533.