Modèles de comportement THHM

Résumé :

Cette note présente une famille de lois de comportement THM pour les milieux saturés et non saturés. On y décrit les relations permettant de calculer les quantités hydrauliques et thermiques, en tenant compte de couplages forts entre ces phénomènes et aussi avec les déformations mécaniques. Les relations présentées ici peuvent être couplées avec n'importe quelle loi de comportement mécanique, sous réserve de faire l'hypothèse dite des contraintes effectives de Bishop et que la loi de comportement mécanique définisse des constantes élastiques (utiles pour les termes couplés). La partie purement mécanique des lois n'est pas présentée.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Table des Matières

1 Introduction....5
2 Présentation du problème : Hypothèses, Notations....6
2.1 Description du milieu poreux....6
2.2 Notations....6
2.2.1 Variables descriptives du milieu....6
2.2.1.1 Variables géométriques....7
2.2.1.2 Variables d'état thermodynamique....7
2.2.1.3 Champs descriptifs du milieu....8
2.2.2 Dérivées particulaires....8
2.2.3 Grandeurs....8
2.2.3.1 Grandeurs caractéristiques du milieu hétérogène....9
2.2.3.2 Grandeurs mécaniques....9
2.2.3.3 Grandeurs hydrauliques....10
2.2.3.4 Grandeurs thermiques....11
2.2.4 Données extérieures....11
3 Équations constitutives....11
3.1 Équations de conservation....11
3.1.1 Équilibre mécanique....11
3.1.2 Conservation des masses fluides....12
3.1.3 Conservation de l'énergie : équation thermique....12
3.2 Équations de comportement....12
3.2.1 Évolution de la porosité....12
3.2.1.1 Cas général isotrope....12
3.2.1.2 Cas isotrope transverse....13
3.2.1.3 Cas sans couplage mécanique....15
3.2.2 Évolution des apports de masse fluide....15
3.2.3 Lois de comportement des fluides....16
3.2.3.1 Liquide....16
3.2.3.2 Gaz....16
3.2.4 Évolution des enthalpies....17
3.2.4.1 Enthalpie liquide....17
3.2.4.2 Enthalpie des gaz....17
3.2.4.3 Apport de chaleur hors fluides....17
3.2.5 Lois de diffusion (lois complémentaires)....18
3.2.5.1 Diffusion de la chaleur....18
3.2.5.2 Diffusion des fluides....19
3.2.6 Équilibre eau-vapeur....22

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

3.2.7 Équilibre air sec-air dissous....22
3.2.8 Le comportement mécanique....23
3.2.9 Précisions sur les termes de transferts diphasiques....24
3.2.9.1 L'isotherme de sorption....24
3.2.9.2 Le modèle Mualem - Van Genuchten....24
3.2.10 Récapitulatif des caractéristiques du matériau et des données utilisateur....26
3.3 L'état de référence et l'état initial....27
3.4 Inconnues nodales, valeurs initiales et valeurs de référence....28
3.5 Contraintes effectives et contraintes totales. Conditions aux limites de contrainteLa partition des contraintes en contraintes totale et effective s'écrit :....29
3.6 Quelques valeurs numériques....29
4 Calcul des contraintes généralisées....30
4.1 Cas sans air dissous....31
4.1.1 Calcul de la porosité et le la masse volumique du fluide....31
4.1.1.1 Calcul de la porosité: cas isotrope....31
4.1.1.2 Calcul de la porosité: cas isotrope transverse....31
4.1.1.3 Calcul de la masse volumique du fluide....31
4.1.2 Calcul des coefficients de dilatation....31
4.1.3 Calcul des enthalpies fluides....32
4.1.4 Pressions de vapeur et d'air....32
4.1.5 Calcul des apports massiques....33
4.1.6 Calcul de la capacité calorifique et de la chaleur Q'....33
4.1.7 Calcul des contraintes mécaniques....34
4.1.8 Calcul des flux hydriques et thermiques....34
4.2 Cas avec air dissous....35
4.2.1 Calcul de la porosité....35
4.2.1.1 Calcul de la porosité: cas isotrope....35
4.2.1.2 Calcul de la porosité: cas isotrope transverse....35
4.2.2 Calcul des coefficients de dilatation....35
4.2.3 Calcul des pressions de vapeur, d'air dissous et sec et des masses volumiques. 36
4.2.4 Calcul des enthalpies fluides....38
4.2.5 Calcul des apports massiques....38
4.2.6 Calcul de la capacité calorifique et de la chaleur Q'....38
4.2.7 Calcul des contraintes mécaniques....39
4.2.8 Calcul des flux hydriques et thermiques....39
5 Calcul des dérivées des contraintes généralisées....40
5.1 Dérivées des contraintes....40
5.2 Dérivées des apports massiques....40
5.2.1 Cas sans air dissous....41
5.2.2 Cas avec air dissous....42

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

5.3 Dérivées des enthalpies et de la chaleur Q'....43
5.3.1 Cas sans air dissous....43
5.3.2 Cas avec air dissous....43
5.4 Dérivées des enthalpies et de la chaleur Q'....44
5.4.1 Cas sans air dissous....44
5.4.2 Cas avec air dissous....44
5.5 Dérivées du flux de chaleur....45
5.6 Dérivée des flux hydriques....45
5.6.1 Cas sans air dissous....45
5.6.2 Cas avec air dissous....47
6 Bibliographie....51
7 Description des versions du document....51
Annexe 1 Contraintes généralisées et variables internes....53
Annexe 2 Données matériau....54
Annexe 3 Dérivées des pressions en fonction des déformations généralisées....57
Annexe 4 Dérivées secondes des pressions de vapeur et d'air dissous en fonction des déformations généralisées....59
Annexe 5 Équivalence avec les formulations ANDRA....61

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

1 Introduction

Nous présentons ici une famille de lois de comportement THM pour les milieux saturés et non saturés. Nous décrivons les relations permettant de calculer les quantités hydrauliques et thermiques, en tenant compte de couplages forts entre ces phénomènes et aussi avec les déformations mécaniques. Les relations présentées ici peuvent être couplées avec n'importe quelle loi de comportement mécanique, sous réserve de faire l'hypothèse dite des contraintes effectives de Bishop et que la loi de comportement mécanique définisse des constantes élastiques (utiles pour les termes couplés). Pour cette raison, la partie purement mécanique des lois n'est pas présentée ici.

Les modélisations retenues s'appuient sur la présentation des milieux poreux élaborée notamment par O. Coussy [1]. Les relations de comportement sont obtenues à partir de considérations thermodynamiques et avec des arguments d'homogénéisation que nous ne présentons pas ici, et qui sont entièrement décrits dans le document de P. Charles [2]. De même l'écriture générale des équations d'équilibre et de conservation n'est pas détaillée, et l'on renvoie le lecteur aux documents [R5.03.01] [3] et [R7.01.10] [4], lesquels contiennent des définitions utiles à la compréhension du présent document.

La mécanique des milieux poreux rassemble une collection très exhaustive de phénomènes physiques touchant aux solides et aux fluides. Elle fait l'hypothèse d'un couplage entre les évolutions mécaniques des solides et des fluides, vus comme des milieux continus, avec les évolutions hydrauliques, qui règlent les problèmes de diffusion de fluides au sein de parois ou de volumes, et les évolutions thermiques.

Chacun des constituants du milieu poreux a donc un comportement mécanique, hydraulique et thermique. La théorie tente de rassembler tous ces phénomènes physiques. Les phénomènes chimiques (transformations des constituants, réactions produisant des constituants etc...), de même que les phénomènes radiologiques ne sont pas pris en compte à ce stade du développement de *Code_Aster*. Les phénomènes mécaniques, hydrauliques et thermiques sont pris en compte ou non selon le comportement invoqué par l'utilisateur dans la commande STAT_NON_LINE, selon la nomenclature suivante :

Modélisation	Phénomènes pris en compte
KIT_H	Hydraulique avec une pression inconnue
KIT_HM	Mécanique, hydraulique avec une pression inconnue
KIT_HHM	Mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues
KIT_THH	Thermique, hydraulique avec deux pressions inconnues
KIT_THM	Thermique, mécanique, hydraulique avec une pression inconnue
KIT_THHM	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues

Le document présent décrit les lois pour le cas le plus général dit THHM. Les cas plus simples s'obtiennent à partir du cas général en annulant simplement les quantité absentes.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2 Présentation du problème : Hypothèses, Notations

Dans le présent chapitre, on s'attache principalement à présenter le milieu poreux et ses caractéristiques.

2.1 Description du milieu poreux

Le milieu poreux considéré est un volume constitué d'une matrice solide plus ou moins homogène, plus ou moins cohérente (très cohérente dans le cas du béton, peu dans le cas du sable). Entre les éléments solides, on trouve des pores. On distingue les pores fermés qui n'échangent rien avec leurs voisins et les pores connectés dans lesquels les échanges sont nombreux. Lorsque l'on parle de porosité, c'est bien de ces pores connectés dont on parle.

A l'intérieur de ces pores se trouvent un certain nombre de fluides (on exclut la solidification de ces fluides), présents éventuellement sous plusieurs phases (liquide ou gazeuse exclusivement), et présentant une interface avec les autres constituants. Pour simplifier le problème et prendre en compte l'importance relative des phénomènes physiques, la seule interface considérée est celle entre le liquide et le gaz, les interfaces fluide/solide étant négligées.

2.2 Notations

Nous supposons que les pores du solide sont occupés par au plus deux constituants, chacun coexistant dans deux phases au maximum, l'une liquide et l'autre gazeuse. Les grandeurs X associées à la phase j ($j=1,2$) du fluide i seront notées : X_{ij} . Quand il y a deux constituants en plus du solide, ce sont un liquide (typiquement l'eau) et un gaz (typiquement l'air sec) , sachant que le liquide peut être présent sous forme gazeuse (vapeur) dans le mélange gazeux et que l'air peut être présent sous forme dissous dans l'eau. Quand il n'y a qu'un seul constituant en plus du solide, cela peut être un liquide ou un gaz. Par la suite on parlera d'air pour le composant gazeux, mais il peut s'agir de n'importe quel autre composant (hydrogène, CO_2 etc.).

Le milieu poreux à l'instant actuel est noté Ω , sa frontière $\partial\Omega$. Il est noté $\Omega_0, \partial\Omega_0$ à l'instant initial.

Le milieu est défini par :

- des paramètres (vecteur position x , temps t),
- des variables (déplacements, pressions, température),
- des grandeurs intrinsèques (contraintes et déformations, apports massiques, chaleur, enthalpies, flux hydrauliques, thermiques...).

Les hypothèses générales effectuées sont les suivantes :

- hypothèse des petits déplacements,
- évolutions thermodynamiques réversibles (pas nécessairement pour la mécanique),
- comportement isotrope, isotrope transverse (3D), orthotrope (2D),
- les gaz sont des gaz parfaits,
- mélange idéal de gaz parfaits (pression totale = somme des pressions partielles),
- équilibre thermodynamique entre les phases d'un même constituant.

Les différentes notations sont explicitées ci-après.

2.2.1 Variables descriptives du milieu

Ce sont les variables dont la connaissance en fonction du temps et du lieu permettent de connaître complètement l'état du milieu. Ces variables se décomposent en deux catégories :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

- variables géométriques,
- variables d'état thermodynamique.

2.2.1.1 Variables géométriques

Dans tout ce qui suit, on adopte une représentation lagrangienne par rapport au squelette (au sens de [1]) et les coordonnées $\mathbf{x}=\mathbf{x}_s(t)$ sont celles d'un point matériel attaché au squelette. Tous les opérateurs de dérivation spatiaux sont définis par rapport à ces coordonnées.

Les déplacements du squelette sont notés $\mathbf{u}(\mathbf{x},t)=\begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{pmatrix}$.

2.2.1.2 Variables d'état thermodynamique

De façon générale, on utilise les indices suivants :

w pour l'eau liquide,
ad pour l'air dissous,
as pour l'air sec,
vp pour la vapeur d'eau.

Les variables thermodynamiques sont :

- les pressions des constituants : $p_w(\mathbf{x},t)$, $p_{ad}(\mathbf{x},t)$, $p_{vp}(\mathbf{x},t)$, $p_{as}(\mathbf{x},t)$,
- la température du milieu : $T(\mathbf{x},t)$.

Ces différentes variables ne sont pas totalement indépendantes. En effet, si l'on considère un seul constituant, l'équilibre thermodynamique entre ses phases impose une relation entre la pression de la vapeur et la pression du liquide de ce constituant. Finalement, il n'y a qu'une seule pression indépendante par constituant, de même qu'il n'y a qu'une seule équation de conservation de la masse. Le nombre de pressions indépendantes est donc égal au nombre de constituants indépendants. Le choix de ces pressions est libre (combinaisons des pressions des constituants) à condition que les pressions choisies, associées à la température, forment un système de variables indépendantes.

Pour le cas dit saturé (un seul constituant air ou eau) nous avons choisi la pression de cet unique constituant.
Pour le cas dit non saturé (présence d'air et d'eau), nous avons choisi comme variables indépendantes :

- la pression totale du gaz : $p_{gz}(\mathbf{x},t)=p_{vp}+p_{as}$,
- la pression capillaire : $p_c(\mathbf{x},t)=p_{gz}-p_{lq}=p_{gz}-p_w-p_{ad}$.

Ces pressions ont une interprétation physique très forte, la pression de gaz totale pour des raisons évidentes, et la pression capillaire, également appelée succion, parce que les phénomènes capillaires sont très importants dans la modélisation présentée ici. Il aurait été possible également de choisir la pression de vapeur ou le degré d'humidité relative (rapport entre la pression de vapeur et la pression de vapeur saturante à la même température) physiquement accessible. La modélisation devient alors plus complexe et de toute façon, pression capillaire, pression de gaz et degré d'humidité relative (rapport entre la pression de vapeur et la pression de vapeur saturante) HR sont reliés par la loi de Kelvin.

Pour le cas particulier du comportement dit '`LIQU_GAZ_ATM`' on fait l'hypothèse dite de Richards : les pores ne sont pas saturés par le liquide, mais la pression du gaz est supposée constante et la seule variable de pression est la pression de liquide.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2.2.1.3 Champs descriptifs du milieu

Les inconnues principales, qui sont aussi les inconnues nodales (notées $\mathbf{U}(\mathbf{x},t)$ dans ce document) sont :

- 2 ou 3 (selon la dimension d'espace) déplacements $u_x(\mathbf{x},t), u_y(\mathbf{x},t), u_z(\mathbf{x},t)$ pour les modélisations KIT_HM, KIT_HHM, KIT_THM, KIT_THHM,
- la température $T(\mathbf{x},t)$ pour les modélisations KIT_THH, KIT_THM, KIT_THHM,
- deux pressions $p_1(\mathbf{x},t), p_2(\mathbf{x},t)$ (qui sont $p_c(\mathbf{x},t)$, $p_{gz}(\mathbf{x},t)$ dans le cas étudié) pour les modélisations KIT_HHM, KIT_THH, KIT_THHM,
- une pression $p_1(\mathbf{x},t)$ (qui est $p_w(\mathbf{x},t)$ ou $p_{gz}(\mathbf{x},t)$ selon que le milieu est saturé par un liquide ou un gaz) pour les modélisations KIT_H, KIT_HM, KIT_THM.

2.2.2 Dérivées particulaires

Ce paragraphe reprend en partie le paragraphe « dérivées particulaires, densités volumiques et massiques » du document [R7.01.10]. La description que nous faisons du milieu est lagrangienne par rapport au squelette.

Soit a un champ quelconque sur Ω , soit $\mathbf{x}_s(t)$ la coordonnée d'un point attaché au squelette que nous suivons dans son mouvement et soit $\mathbf{x}_{\text{fl}}(t)$ la coordonnée d'un point attaché au fluide. On note $\dot{a}=\frac{d^S a}{dt}$ la dérivée temporelle dans le mouvement du squelette :

$$\dot{a}=\frac{d^S a}{dt}=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{a(\mathbf{x}(t+\Delta t),(t+\Delta t)-a(\mathbf{x}(t),t))}{\Delta t}$$

$\dot{a}$ est appelée dérivée particulaire et souvent notée $\frac{da}{dt}$. Nous préférons utiliser une notation qui rappelle que la configuration utilisée pour repérer une particule est celle du squelette par rapport auquel une particule de fluide a une vitesse relative. Pour une particule de fluide le repérage $x_s(t)$ est quelconque, c'est à dire que la particule de fluide qui occupe la position $\mathbf{x}_s(t)$ à l'instant t n'est pas la même que celle qui occupe la position $\Omega^0(1+\varepsilon_V)(1-\varphi)=\Omega^0(1-\varphi^0)(1+\varepsilon_{Vs})$ à un autre instant t'.

2.2.3 Grandeurs

Les équations d'équilibre sont :

- la conservation de la quantité de mouvement pour la mécanique,
- la conservation des masses de fluide pour l'hydraulique,
- la conservation de l'énergie pour la thermique.

L'écriture de ces équations est donnée dans le document [R7.01.10] [4], lequel définit aussi ce que nous appelons de façon générale une loi de comportement THM et donne les définitions des contraintes et déformations généralisées. Le présent document utilise ces définitions. Les équations d'équilibre font intervenir directement les contraintes généralisées.
Les contraintes généralisées sont reliées aux déformations généralisées par les lois de comportement. Les déformations généralisées se calculent directement à partir des variables d'état et de leurs gradients spatiaux temporels.
Les lois de comportements peuvent utiliser des quantités annexes, souvent rangées dans les variables internes. Nous regroupons ici sous le vocable de grandeur à la fois les contraintes, les déformations et des grandeurs annexes.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

2.2.3.1 Grandeurs caractéristiques du milieu hétérogène

- La porosité eulérienne : φ .
  Si on note $\Omega_{(\varphi)}$ la partie du volume Ω occupé par les vides dans la configuration courante, on a :
  $$\varphi = \frac{\Omega_{(\varphi)}}{\Omega}$$
  La définition de la porosité est donc celle de la porosité eulérienne.

- La saturation en liquide : S_{lq}
  Si on note Ω_{lq} le volume total occupé par le liquide, dans la configuration courante, on a par définition :
  $$S_{lq} = \frac{\Omega_{lq}}{\Omega_{\varphi}}$$
  Cette saturation est donc finalement une proportion variant entre 0 et 1.

- Les masses volumiques eulériennes de l'eau ρ_w , de l'air dissous ρ_{ad} , de l'air sec ρ_{as} , de la vapeur ρ_{vp} , du gaz ρ_{gz} .
  Si on note γ_w (resp γ_{ad} , γ_{as} , γ_{vp}) les masses d'eau (resp d'air dissous, d'air sec et de vapeur) contenus dans un volume du Ω squelette dans la configuration courante, on a par définition :
  $$\gamma_w = \int_{\Omega} \rho_w S_{lq} \varphi \, d\Omega \quad \gamma_{\mathrm{ad}} = \int_{\Omega} \rho_{ad} S_{lq} \varphi \, d\Omega$$
  $$\gamma_{\mathrm{as}} = \int_{\Omega} \rho_{as} \left(1 - S_{lq}\right) \varphi \, d\Omega \quad \gamma_{\mathrm{vp}} = \int_{\Omega} \rho_{vp} \left(1 - S_{lq}\right) \varphi \, d\Omega$$
  La masse volumique du mélange gazeux est simplement la somme des masses volumiques de l'air sec et de la vapeur :
  $$\rho_{gz} = \rho_{as} + \rho_{vp}$$
  De même pour le mélange liquide :
  $$\rho_{lq} = \rho_w + \rho_{ad}$$
  On note ρ_w^0 , ρ_{ad}^0 , ρ_{vp}^0 , ρ_{as}^0 les valeurs initiales des masses volumiques.

- La masse volumique homogénéisée lagrangienne : r .
  À l'instant courant la masse du volume Ω , M_{Ω} , est donnée par : $M_{\Omega} = \int_{\Omega_0} r d\Omega_0$.

2.2.3.2 Grandeurs mécaniques

- Le tenseur des déformations $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2}\left(\nabla \mathbf{u} + {}^T \nabla \mathbf{u}\right)$.
  On notera $\epsilon_V = tr\left(\boldsymbol{\varepsilon}\right)$.
- Le tenseur des contraintes qui s'exercent sur le milieu poreux : $\boldsymbol{\sigma}$.
  Ce tenseur se décompose en un tenseur des contraintes effectives plus un tenseur de contraintes de pression, $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}' + \boldsymbol{\sigma}_p$ et $\boldsymbol{\sigma}_p$ sont des composantes des contraintes

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

généralisées. Ce découpage est finalement assez arbitraire, mais correspond tout de même à une hypothèse assez communément admise, au moins pour les milieux saturés en liquide.

2.2.3.3 Grandeurs hydrauliques

- Les apports massiques en constituants $m_w, m_{ad}, m_{vp}, m_{as}$ (unité : kilogramme par mètre cube).
  Ils représentent la masse de fluide apportée entre les instants initiaux et actuels. Ils font partie des contraintes généralisées.

- Les flux hydrauliques $\mathbf{M}_w, \mathbf{M}_{ad}, \mathbf{M}_{vp}, \mathbf{M}_{as}$ (unité : kilogramme/seconde/mètre carré).
  On pourrait très bien ne donner aucune définition plus précise des apports de masse et des flux, considérant que leur définition se résume à vérifier les équations d'équilibre hydraulique :

$$\begin{cases} \dot{m}_w + \dot{m}_{vp} + Div\left(\mathbf{M}_w + \mathbf{M}_{vp}\right) = 0 \\ \dot{m}_{as} + \dot{m}_{ad} + Div\left(\mathbf{M}_{as} + \mathbf{M}_{ad}\right) = 0 \end{cases} \qquad \textbf{éq 2.2.3.3-1}$$

Nous allons néanmoins préciser le sens physique des ces grandeurs, sachant que ce que nous écrivons maintenant est déjà une loi de comportement.
Les vitesses des constituants sont mesurées dans un référentiel fixe en espace et en temps.

On note $\mathbf{v}_w$ la vitesse de l'eau, $\mathbf{v}_{ad}$ celle de l'air dissous, $\mathbf{v}_{vp}$ celle de la vapeur, $\mathbf{v}_{as}$ celle de l'air sec, et $\mathbf{v}_S = \frac{d\,\mathbf{u}}{dt}$ celle du squelette.
Les apports massiques sont définis par :

$$\begin{aligned} m_w &= \rho_w\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi\, S_{lq} - \rho_w^0 \varphi^0 S_{lq}^0 \\ m_{ad} &= \rho_{ad}\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi\, S_{lq} - \rho_{ad}^0 \varphi^0 S_{lq}^0 \\ m_{as} &= \rho_{as}\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi\left(1-S_{lq}\right) - \rho_{as}^0 \varphi^0\left(1-S_{lq}^0\right) \\ m_{vp} &= \rho_{vp}\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi\left(1-S_{lq}\right) - \rho_{vp}^0 \varphi^0\left(1-S_{lq}^0\right) \end{aligned} \qquad \textbf{éq 2.2.3.3-2}$$

Les flux massiques sont définis par :

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\mathrm{w}} &= \rho_w \varphi\, S_l\left(\mathbf{v}_{\mathrm{w}} - \mathbf{v}_{\mathrm{s}}\right) \\ \mathbf{M}_{ad} &= \rho_{ad} \varphi\, S_l\left(\mathbf{v}_{ad} - \mathbf{v}_{\mathrm{s}}\right) \\ \mathbf{M}_{as} &= \rho_{as} \varphi\left(1-S_l\right)\left(\mathbf{v}_{as} - \mathbf{v}_{\mathrm{s}}\right) \\ \mathbf{M}_{vp} &= \rho_{vp} \varphi\left(1-S_l\right)\left(\mathbf{v}_{vp} - \mathbf{v}_{\mathrm{s}}\right) \end{aligned} \qquad \textbf{éq 2.2.3.3-3}$$

Les apports massiques permettent de définir la masse volumique globale vue par rapport à la configuration de référence :

$$r = r_0 + m_w + m_{ad} + m_{vp} + m_{as} \qquad \textbf{éq 2.2.3.3-4}$$

où r_0 désigne la masse volumique homogénéisée à l'instant initial.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

On introduit d'autres grandeurs hydrauliques intermédiaires :

- concentration de la vapeur dans le gaz : $C_{vp}=\frac{p_{vp}}{p_{gz}}$,
- flux de gaz : $\frac{\mathbf{M}_{gz}}{\rho_{gz}}=\left(1-C_{vp}\right)\frac{\mathbf{M}_{as}}{\rho_{as}}+C_{vp}\frac{\mathbf{M}_{vp}}{\rho_{vp}}$. Cette équation précise que la vitesse du gaz est obtenue en faisant une moyenne (somme pondérée) des vitesses des différents gaz en fonction de leur concentration,
- la pression de vapeur p_{vp} .

2.2.3.4 Grandeurs thermiques

- la chaleur non convectée Q' (voir plus loin) (unité : Joule),
- les enthalpies massiques des constituants h_{ij}^m ($h_w^m, h_{ad}^m, h_{vp}^m, h_{as}^m$) (unité : Joule/Kelvin/kilogramme),
- le flux de chaleur : $\mathbf{q}$ (unité : $J/s/m^2$).

Toutes ces grandeurs appartiennent aux contraintes généralisées au sens du document [R7.01.10] [4].

2.2.4 Données extérieures

- la force massique $\mathbf{F}^{\mathrm{m}}$ (en pratique la gravité),
- les sources de chaleur Θ ,
- les conditions aux limites portant soit sur des variables imposées, soit sur des flux imposés.

3 Équations constitutives

3.1 Équations de conservation

Il ne s'agit ici que d'un rappel, la façon de les établir est présentée dans [R7.01.10] [4].

3.1.1 Équilibre mécanique

En notant $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur des contraintes mécaniques totales et r la masse volumique homogénéisée du milieu, l'équilibre mécanique s'écrit :

$$\mathbf{Div}\left(\boldsymbol{\sigma}\right)+r\,\mathbf{F}^{\mathrm{m}}=\mathbf{0} \qquad \textbf{éq 3.1.1-1}$$

Nous rappelons que r est reliée aux variations de masse fluide par la relation :

$$r=r_0+m_w+m_{ad}+m_{vp}+m_{as} \qquad \textbf{éq 3.1.1-2}$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

3.1.2 Conservation des masses fluides

Pour le fluide la dérivée $\dot{a}=\frac{d^s a}{dt}$ est en fait une dérivée eulérienne et les équations que nous écrivons pour le fluide comportent des termes de transport, même s'ils peuvent être cachés par le choix des inconnues. Les équations de conservation des masses fluides s'écrivent alors :

$$\begin{cases} \dot{m}_w+\dot{m}_{vp}+Div\left(M_w+M_{vp}\right)=0 \\ \dot{m}_{as}+\dot{m}_{ad}+Div\left(M_{as}+M_{ad}\right)=0 \end{cases}$$ **éq 3.1.2-1**

3.1.3 Conservation de l'énergie : équation thermique

$$h_w^m\dot{m}_w+h_{ad}^m\dot{m}_{ad}+h_{vp}^m\dot{m}_{vp}+h_{as}^m\dot{m}_{as}+\dot{Q}'+Div\left(h_w^m\mathbf{M}_{\mathrm{w}}+h_{ad}^m\mathbf{M}_{ad}+h_{vp}^m\mathbf{M}_{vp}+h_{as}^m\mathbf{M}_{as}\right)+Div\left(\mathbf{q}\right)=$$
$$\left(\mathbf{M}_{\mathrm{w}}+\mathbf{M}_{ad}+\mathbf{M}_{vp}+\mathbf{M}_{as}\right)F^m+\Theta$$

éq 3.1.3-1

3.2 Équations de comportement

3.2.1 Évolution de la porosité

3.2.1.1 Cas général isotrope

$$d\,\varphi=\left(b-\varphi\right)\left(d\,\varepsilon_V-3\,\alpha_0\,dT+\frac{dp_{gz}-S_{lq}\,dp_c}{K_s}\right)$$ **éq 3.2.1-1**

Dans cette équation, on voit apparaître les coefficients b et K_s. b est le coefficient de Biot et K_s est le module de compressibilité des grains solides. Si K_0 désigne le module de compressibilité « drainé » du milieu poreux, on a la relation :

$$b=1-\frac{K_0}{K_s}$$ **éq 3.2.1-2**

Remarque :

L'expression 3.2.1-1 peut paraître inhabituelle compte tenu de la définition standard du coefficient de Biot. Cela est dû au fait que nous utilisons la porosité eulérienne φ alors que la définition habituelle du coefficient de Biot se base sur la définition lagrangienne $\mathbf{\Phi}$ de cette quantité.
Les deux définitions sont reliées par la relation :

$$\mathbf{\Phi}=\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi$$ **éq 3.2.1-3**

Dans le cas d'une évolution isotherme pour un milieu saturé, la variation de porosité lagrangienne est simplement proportionnelle à la variation de volume :

$$d\,\mathbf{\Phi}=b\,.\,d\,\varepsilon_V$$ **éq 3.2.1-4**

Reportant éq 3.2.1-4 dans éq 3.2.1-3, on trouve :

$$\left(1+\varepsilon_V\right)d\,\varphi=\left(b-\varphi\right)d\,\varepsilon_V$$

Pour ε_V petit (hypothèse retenue dans les modélisations THM), on obtient $d\,\varphi=\left(b-\varphi\right)d\,\varepsilon_V$, qui correspond bien à [éq 3.2.1-1] pour le cas examiné.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

3.2.1.2 Cas isotrope transverse

$$d\varphi = \boldsymbol{B} : \boldsymbol{d}\varepsilon - \varphi\, d\varepsilon_V - 3\alpha_\varphi dT + \frac{dp_{gz} - S_{lq} dp_c}{M_\varphi}$$

éq 3.2.1-5

Dans cette équation, on voit apparaître le tenseur de Biot $\boldsymbol{B}$, le module de Biot de la matrice solide $\frac{1}{M_\varphi}$ et α_φ le coefficient de dilatation différentiel.

L'expression du coefficient de dilatation différentiel est donnée par la relation :

$$\alpha_\varphi = \frac{(\boldsymbol{B} - \varphi\delta) : \boldsymbol{\alpha_0}}{3}$$

éq 3.2.1-6

- δ la matrice identité ,
- $\boldsymbol{B} = (b_L(\boldsymbol{e_L}\otimes\boldsymbol{e_L} + \boldsymbol{e_T}\otimes\boldsymbol{e_T}) + b_N(\boldsymbol{e_N}\otimes\boldsymbol{e_N}))$ le tenseur de Biot fonction des coefficients moyens de Biot b_L et b_N selon les directions N et L du repère local d'orthotropie (L,T,N). Dans le cas isotrope $b_L = b_N = b$,
- $\boldsymbol{\alpha_0} = (\alpha_L(\boldsymbol{e_L}\otimes\boldsymbol{e_L} + \boldsymbol{e_T}\otimes\boldsymbol{e_T}) + \alpha_N(\boldsymbol{e_N}\otimes\boldsymbol{e_N}))$ le tenseur de dilatation thermique fonction de α_N et α_L les coefficients moyens de dilatation du milieux poreux et des grains solides selon les directions N et L du repère local d'orthotropie (L,T,N).Dans le cas isotrope $\alpha_L = \alpha_N = \alpha_0$.

Remarque :

Dans le cas isotrope l'expression du coefficient de dilatation différentiel est donnée par :

$$\alpha_\varphi = (b - \varphi)\alpha_0$$

L'expression du module de Biot de la matrice solide est donnée par la relation suivante ([11] et [13]) :

$$\frac{1}{M_\varphi} = (\boldsymbol{B} - \varphi\delta) : \boldsymbol{S_0^S} : \delta$$

éq 3.2.1-7

Remarque :

Dans le cas isotrope l'expression du module de Biot de la matrice solide est donnée par :

$$\frac{1}{M_\varphi} = 3(b - \varphi)\left(\frac{1 - 2\nu^S}{E^S}\right)$$

- $\boldsymbol{S_0^S}$ la matrice de souplesse du squelette, fonction du module de Young de la matrice solide E^S et du coefficient de Poisson de la matrice solide ν^S . En supposant que microscopiquement le squelette est isotrope homogène [12], l'expression de la matrice de souplesse est donnée par :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\boldsymbol{S}_{\mathbf{0}}^{\boldsymbol{S}}=\begin{pmatrix} \frac{1}{E^S} & -\frac{\nu^S}{E^S} & -\frac{\nu^S}{E^S} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu^S}{E^S} & \frac{1}{E^S} & -\frac{\nu^S}{E^S} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu^S}{E^S} & -\frac{\nu^S}{E^S} & \frac{1}{E^S} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\frac{(1+\nu^S)}{E^S} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\frac{(1+\nu^S)}{E^S} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\frac{(1+\nu^S)}{E^S} \end{pmatrix} \quad \textbf{éq 3.2.1-8}$$

En pratique il est très difficile d'avoir accès aux paramètres microscopiques E^S et ν^S caractérisant la matrice solide. Nous pouvons cependant nous affranchir de la connaissance de ces deux paramètres par déduction du coefficients de compressibilité des grains solides à partir des paramètres élastiques du milieu poreux.

Compte tenu de ce qui a été dit précédemment, nous avons choisis de fixer arbitrairement dans la programmation la valeur de $\nu^S=0,3$ (cf. [12]). On adopte ensuite la démarche suivante afin de déterminer le tenseur de souplesse de la matrice solide :

- on suppose qu'à l'échelle microscopique, la matrice solide est homogène. En outre on considère que la déformation volumique de la matrice solide entre l'instant initial et l'instant final (après chargement mécanique) est négligeable. Ainsi la définition du module de compressibilité des grains solides est données par :

$$K_S=\frac{E^S}{3\left(1-2\,\nu^S\right)}$$

- les expressions des composantes du tenseur de Biot, selon les axes L et N du repère local d'orthotropie sont données par [12]:

$$\begin{cases} b_L=1-\dfrac{M_{11}+M_{12}+M_{13}}{3\,K_S} \\ b_N=1-\dfrac{2M_{13}+M_{33}}{3\,K_S} \end{cases}$$

avec :

$$M_{11}=\frac{E_L(E_N-E_L\nu_{\mathrm{LN}}^2)}{(1+\nu_{\mathrm{LT}})(E_N-E_N\nu_{\mathrm{LT}}-2E_L\nu_{\mathrm{LN}}^2)}$$

$$M_{12}=\frac{E_L(E_N\nu_{\mathrm{LT}}+E_N\nu_{\mathrm{LN}}\nu_{\mathrm{LT}}+E_L\nu_{\mathrm{LN}}^2)}{(1+\nu_{\mathrm{LT}})(E_N-E_N\nu_{\mathrm{LT}}-2E_L\nu_{\mathrm{LN}}^2)}$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$M_{13}=\frac{E_L E_N \nu_{LN}}{(1+\nu_{LT})(E_N-E_N\nu_{LT}-2E_L\nu_{LN}^2)}$$

$$M_{33}=\frac{E_L^2(1-\nu_{LT})}{E_N-E_N\nu_{LT}-2E_L\nu_{LN}^2}$$

En considérant l'une ou l'autre des deux expressions ci-dessus (compte tenu de l'hypothèse d'isotropie effectuée sur K_S), nous sommes alors en mesure d'isoler K_S .

- à partir de l'expression de K_S déterminée précédemment, on peut avoir accès au module de Young E^S de la matrice solide sachant que :

$$\begin{cases} \nu_S=0,3 \\ E_S=3\left(1-2\nu^S\right)K^S \end{cases} \quad \text{éq 3.2.1-9}$$

3.2.1.3 Cas sans couplage mécanique

Pour les modélisations purement hydrauliques ou thermo-hydrauliques sans couplage mécanique, il est toutefois possible de faire varier la porosité via un coefficient d'emmagasinement E_m . Ce dernier relie alors la variation de porosité à la variation de pression de liquide tel que :

$$d\varphi=E_{m.}\,dp_{lq}$$

Ce coefficient n'est pas pris en compte dans le cas des modélisations avec mécanique (*`HM*`)

3.2.2 Évolution des apports de masse fluide

En utilisant la définition des apports de masse fluide et en faisant valoir des arguments purement géométriques, on trouve :

$$\begin{aligned} m_w&=\rho_w\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi S_{lq}-\rho_w^0\varphi^0 S_{lq}^0 \\ m_{ad}&=\rho_{ad}\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi S_{lq}-\rho_{ad}^0\varphi^0 S_{lq}^0 \\ m_{as}&=\rho_{as}\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi\left(1-S_{lq}\right)-\rho_{as}^0\varphi^0\left(1-S_{lq}^0\right) \\ m_{vp}&=\rho_{vp}\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi\left(1-S_{lq}\right)-\rho_{vp}^0\varphi^0\left(1-S_{lq}^0\right) \end{aligned} \quad \text{éq 3.2.2-1}$$

Remarque :

Si nous utilisions la porosité lagrangienne, les apports massique s'écriraient :

$$\begin{aligned} m_w&=\rho_w\varphi S_{lq}-\rho_w^0\varphi^0 S_{lq}^0 \\ m_{ad}&=\rho_{ad}\varphi S_{lq}-\rho_{ad}^0\varphi^0 S_{lq}^0 \\ m_{as}&=\rho_{as}\varphi\left(1-S_{lq}\right)-\rho_{as}^0\varphi^0\left(1-S_{lq}^0\right) \\ m_{vp}&=\rho_{vp}\varphi\left(1-S_{lq}\right)-\rho_{vp}^0\varphi^0\left(1-S_{lq}^0\right) \end{aligned}$$

A titre d'exemple, nous démontrons la première relation dans le cas saturé $S_{lq}=1$ (avec $\rho_{lq}=\rho_w$).

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Soit un domaine élémentaire de milieu poreux de volume Ω . On note Ω_s le volume occupé par les grains solides et Ω_l le volume occupé par le liquide et le gaz. On note Ω^0 , Ω_s^0 , Ω_l^0 les mêmes volumes à l'état initial. Nous rappelons que ε_V note la variation de volume du milieu poreux et nous notons ε_{V_s} la variation volumique des grains solides.

On a par définition : $\varphi=\frac{\Omega_l}{\Omega}$

$$\Omega_s=\Omega-\Omega_l=\Omega\left(1-\varphi\right)=\Omega_s^0\left(1+\epsilon_{Vs}\right)$$

Mais $\Omega\left(1-\varphi\right)=\Omega^0\left(1+\epsilon_V\right)\left(1-\varphi\right)$.
On en déduit :

$$\Omega^0\left(1+\varepsilon_V\right)\left(1-\varphi\right)=\Omega_s^0\left(1+\varepsilon_{Vs}\right)$$

Il suffit d'écrire alors $\Omega_s^0=\Omega^0\left(1-\varphi^0\right)$ pour obtenir :

$$\Omega^0\left(1+\varepsilon_V\right)\left(1-\varphi\right)=\Omega^0\left(1-\varphi^0\right)\left(1+\varepsilon_{Vs}\right)$$

D'où l'on déduit :

$$\varepsilon_{Vs}\left(1-\varphi^0\right)=\varepsilon_V\left(1-\varphi\right)-\left(\varphi-\varphi^0\right)$$

On utilise la définition eulérienne de la masse volumique homogénéisée r' (à ne pas confondre avec la définition lagrangienne de l'équation [éq 3.1.1-2]) :

$$r'=\rho_{(s)}(1-\varphi)+\rho_{(lq)}\varphi$$

et la définition de l'apport massique en liquide :

$$r'\Omega=\left(r_0+m_{lq}\right)\Omega^0$$

On obtient :

$$\rho_s\left(1-\varphi\right)\Omega+\rho_{lq}\varphi\,\Omega=\rho_{s}^0\left(1-\varphi^0\right)\Omega^0+\rho_{lq}^0\varphi^0\,\Omega^0+m_{lq}\Omega^0$$

soit encore :

$$\rho_s\Omega_s+\rho_{lq}\varphi\left(1+e_V\right)\Omega^0=\rho_s^0\Omega_s^0+\rho_{lq}^0\varphi^0\Omega^0+m_{lq}\Omega^0$$

Utilisant la conservation de la masse des grains solides : $\rho_s\Omega_s=\rho_s^0\Omega_s^0$ on obtient finalement :

$$\rho_{lq}\varphi\left(1+\varepsilon_V\right)=\rho_{lq}^0\varphi^0+m_{lq}$$

3.2.3 Lois de comportement des fluides

3.2.3.1 Liquide

$$\frac{d\,\rho_w}{\rho_w}=\frac{dp_w}{K_w}-3\,\alpha_w\,dT \qquad \textbf{éq 3.2.3.1-1}$$

On voit apparaître le module de compressibilité de l'eau K_w et son module de dilatation α_w .

3.2.3.2 Gaz

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Pour les équations de comportement des gaz, on prend la loi des gaz parfaits :

$$\frac{p_{vp}}{\rho_{vp}} = \frac{R}{M_{vp}^{ol}} T \qquad \text{éq 3.2.3.2-1}$$

$$\frac{p_{as}}{\rho_{as}} = \frac{R}{M_{as}^{ol}} T \qquad \text{éq 3.2.3.2-2}$$

On voit apparaître la masse molaire de la vapeur, M_{vp}^{ol} , et celle de l'air sec, M_{as}^{ol} .

3.2.4 Évolution des enthalpies

3.2.4.1 Enthalpie liquide

$$dh_w^m = C_w^p dT + \left(1 - 3\alpha_w T\right)\frac{dp_w}{\rho_w} \qquad \text{éq 3.2.4.1-1}$$

On voit apparaître la chaleur massique à pression constante de l'eau : C_w^p .

En remplaçant dans cette expression la pression du liquide par sa valeur en fonction de la pression capillaire et de la pression du gaz, on a :

$$dh_w^m = \left(1 - 3\alpha_w T\right)\frac{dp_{gz} - dp_c - dp_{ad}}{\rho_w} + C_w^p dT \qquad \text{éq 3.2.4.1-2}$$

En notant C_{ad}^p la chaleur massique à pression constante de l'air dissous, on a :

$$dh_{ad}^m = C_{ad}^p dT \qquad \text{éq 3.2.4.1-3}$$

3.2.4.2 Enthalpie des gaz

$$dh_{vp}^m = C_{vp}^p dT \qquad \text{éq 3.2.4.2-1}$$

$$dh_{as}^m = C_{as}^p dT \qquad \text{éq 3.2.4.2-2}$$

On voit apparaître la chaleur massique à pression constante de l'air sec C_{as}^p et celle de la vapeur C_{vp}^p .

3.2.4.3 Apport de chaleur hors fluides

C'est la quantité $\delta Q'$ qui représente la chaleur reçue par le système hors apport enthalpique des fluides.

$$\delta Q' = (\boldsymbol{C_0} : \boldsymbol{\alpha_0} : \boldsymbol{d\varepsilon})\, T + 3\alpha_{lq}^m T dp_c - \left(3\alpha_{gz}^m + 3\alpha_{lq}^m\right) T dp_{gz} + C_\varepsilon^0 dT \qquad \text{Éq 3.2.4.3-1}$$

On voit apparaître plusieurs coefficients de dilatation : $\alpha_{lq}^m, \alpha_{gz}^m$. Les composantes du tenseur $\boldsymbol{\alpha_0}$ sont des données matériaux. Dans le cas isotrope, les composantes du tenseur sont égales $(\alpha_L = \alpha_N = \alpha_0)$ et correspondent à la fois aux coefficients de dilatation du milieu poreux et à ceux des grains solides (qui se trouvent être forcément égaux dans la théorie que nous présentons ici).

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

On voit également apparaître le tenseur $\boldsymbol{C_0}$, correspondant à la matrice de Hooke du squelette. Ce tenseur est fonction des paramètres mécaniques du milieu poreux $(E_L, E_N, \nu_{LT}, \nu_{LN}, G_{LN})$ dans le cas isotrope transverse ou (E, ν) dans le cas isotrope.

Remarque :

Dans le cas isotrope l'expression de l'apport de chaleur hors fluide est donnée par :

$$\delta Q' = (3 K_0 \alpha_0 d\varepsilon_V) T + 3 \alpha_{lq}^m T dp_c - \left(3 \alpha_{gz}^m + 3 \alpha_{lq}^m\right) T dp_{gz} + C_\varepsilon^0 dT$$

avec K_0 le coefficient de compressibilité du milieu poreux, fonction des paramètres élastique du milieu poreux (E, ν)

$\alpha_{lq}^m, \alpha_{gz}^m$ sont donnés par les relations :

$$\alpha_{gz}^m = \left(1 - S_{lq}\right) \alpha_\varphi + \frac{\varphi \left(1 - S_{lq}\right)}{3T} \quad \textbf{éq 3.2.4.3-2}$$

$$\alpha_{lq}^m = S_{lq} \alpha_\varphi + \alpha_{lq} \varphi S_{lq} \quad \textbf{éq 3.2.4.3-3}$$

On voit également apparaître dans [éq 3.2.4.3-1] la chaleur spécifique à déformation constante du milieu poreux C_ε^0 , qui dépend de la chaleur spécifique à contrainte constante du milieu poreux C_σ^0 par la relation :

$$C_\varepsilon^0 = C_\sigma^0 - T (\boldsymbol{C_0} : \boldsymbol{\alpha_0}) : \boldsymbol{\alpha_0} \quad \textbf{éq 3.2.4.3-4}$$

Remarque :

Dans le cas isotrope l'expression de la chaleur spécifique à déformation constante du milieu poreux est donnée par :

$$C_\varepsilon^0 = C_\sigma^0 - 9 T K_0 \alpha_0^2$$

C_σ^0 est donnée par une loi de mélange :

$$C_\sigma^0 = \left(1 - \phi\right) \rho_s C_\sigma^s + S_{lq} \phi \left(\rho_w C_w^p + \rho_{ad} C_{ad}^p\right) + \left(1 - S_{lq}\right) \phi \left(\rho_{vp} C_{vp}^p + \rho_{as} C_{as}^p\right) \quad \textbf{éq 3.2.4.3-5}$$

où C_σ^s représente la chaleur spécifique à contrainte constante des grains solides et ρ_s la masse volumique des grains solides. Pour le calcul de ρ_s , on néglige la déformation des grains solides, on confond donc ρ_s avec sa valeur initiale ρ_s^0, laquelle se calcule en fait à partir de la masse spécifique initiale du milieu poreux r_0 par la formule suivante des mélanges :

$$\left(1 - \phi^0\right) \rho_s^0 = r_0 - \left(\rho_w^0 + \rho_{ad}^0\right) S_{lq}^0 \phi^0 - \left(1 - S_{lq}^0\right) \phi^0 \left(\rho_{vp}^0 + \rho_{as}^0\right) \quad \textbf{éq 3.2.4.3-6}$$

3.2.5 Lois de diffusion (lois complémentaires)

3.2.5.1 Diffusion de la chaleur

On prend la loi classique de Fourrier :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\mathbf{q} = -\boldsymbol{\lambda}^{T} . \nabla T \qquad \text{éq 3.2.5.1-1}$$

où l'on voit apparaître le tenseur de conductivité thermique $\boldsymbol{\lambda}^{T}$.

Le tenseur de conductivité est fonction de la porosité, de la saturation et de la température et est donnée sous la forme du produit de trois fonctions plus une constante :

$$\boldsymbol{\lambda}^{T} = \lambda_{\varphi}^{T}(\phi) . \lambda_{S}^{T}(S_{lq}) . \boldsymbol{\lambda}_{T}^{T}(T) + \boldsymbol{\lambda}_{cte}^{T} \qquad \text{éq 3.2.5.1-2}$$

Dans le cas isotrope, on a $\boldsymbol{\lambda}^{T} = \lambda^{T} . \mathbf{1}$, $\boldsymbol{\lambda}_{T}^{T}(T) = \lambda_{T}^{T}(T) . \mathbf{1}$ et $\boldsymbol{\lambda}_{cte}^{T} = \lambda_{cte}^{T} . \mathbf{1}$.

3.2.5.2 Diffusion des fluides

Ce sont les lois de Darcy, auxquelles on rajoute la loi de Fick en présence de vapeur.
Les lois de Darcy sont écrites pour le gaz et pour le liquide :

$$\frac{\mathbf{M}_{lq}}{\rho_{lq}} = \boldsymbol{\lambda}_{lq}^{H} \left(-\nabla p_{lq} + \rho_{lq} \mathbf{F}^{m} \right) \qquad \text{éq 3.2.5.2-1}$$

$$\frac{\mathbf{M}_{gz}}{\rho_{gz}} = \boldsymbol{\lambda}_{gz}^{H} \left(-\nabla p_{gz} + \rho_{gz} \mathbf{F}^{m} \right) \qquad \text{éq 3.2.5.2-2}$$

où nous voyons apparaître les tenseurs de conductivité hydraulique $\boldsymbol{\lambda}_{lq}^{H}$ et $\boldsymbol{\lambda}_{gz}^{H}$ pour le liquide et le gaz respectivement. Dans les cas isotrope, $\boldsymbol{\lambda}_{lq}^{H} = \lambda_{lq}^{H} . \mathbf{1}$ et $\boldsymbol{\lambda}_{gz}^{H} = \lambda_{gz}^{H} . \mathbf{1}$.

On fait l'approximation que $\frac{\mathbf{M}_{w}}{\rho_{w}} = \lambda_{w}^{H} \left(-\nabla p_{lq} + \rho_{lq} \mathbf{F}^{m} \right)$.

Remarque :

Dans cette expression de la loi de Darcy, on néglige l'accélération différentielle de l'eau. Dans le cas de de milieux très perméables et très poreux soumis à un chargement sismique, cela peut constituer une limite.

La diffusion dans le mélange gazeux est donnée par la loi de Fick grâce à la relation :

$$\frac{\mathbf{M}_{vp}}{\rho_{vp}} - \frac{\mathbf{M}_{as}}{\rho_{as}} = -\frac{D_{vp}}{C_{vp}(1 - C_{vp})} \nabla \left(\frac{p_{vp}}{p_{gz}} \right) \qquad \text{éq 3.2.5.2-3}$$

où D_{vp} est le coefficient de diffusion de Fick du mélange gazeux ($L^2.T^{-1}$), on note par la suite F_{vp} tel que :

$$F_{vp} = \frac{D_{vp}}{C_{vp}(1 - C_{vp})} \qquad \text{éq 3.2.5.2-4}$$

et avec

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$C_{vp}=\frac{p_{vp}}{p_{gz}}$$ **éq 3.2.5.2-5**

On a donc :

$$\frac{\mathbf{M}_{vp}}{\rho_{vp}}-\frac{\mathbf{M}_{as}}{\rho_{as}}=-F_{vp}\nabla C_{vp}$$ **éq 3.2.5.2-6**

De plus, on a :

$$\frac{\mathbf{M}_{gz}}{\rho_{gz}}=\left(1-C_{vp}\right)\frac{\mathbf{M}_{as}}{\rho_{as}}+C_{vp}\frac{\mathbf{M}_{vp}}{\rho_{vp}}$$ **éq 3.2.5.2-7**

et :

$$\rho_{gz}=\rho_{vp}+\rho_{as}$$ **éq 3.2.5.2-8**

Pour la diffusion du mélange liquide, l'écriture usuelle est la suivante :

$$\mathbf{M}_{ad}-\mathbf{M}_{w}=-D_{ad}\nabla\rho_{ad}$$ **éq 3.2.5.2-9**

où D_{ad} est le coefficient de diffusion de Fick du mélange liquide. Afin de garder une écriture homogène avec celle du mélange gazeux on note par la suite F_{ad} tel que :

$$F_{ad}=D_{ad}$$ **éq 3.2.5.2-10**

Et la concentration C_{ad} correspond ici à la masse volumique de l'air dissous :

$$C_{ad}=\rho_{ad}$$ **éq 3.2.5.2-11**

$$\mathbf{M}_{ad}-\mathbf{M}_{w}=-F_{ad}\nabla C_{ad}$$ **éq 3.2.5.2-12**

Concernant le liquide, on a admis que la loi de Darcy liquide s'applique à la vitesse de l'eau liquide. Il n'y a donc pas à définir de vitesse moyenne du liquide.

$$\frac{\mathbf{M}_{w}}{\rho_{w}}=\lambda_{lq}^{H}\left(-\nabla p_{lq}+\rho_{lq}\mathbf{F}^{m}\right)$$ **éq 3.2.5.2-13**

et :

$$\rho_{lq}=\rho_{w}+\rho_{ad}$$ **éq 3.2.5.2-14**

En combinant ces relations, on trouve alors :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\frac{\mathbf{M}_{as}}{\rho_{as}} = \lambda_{gz}^{H}\left(-\nabla p_{gz} + \rho_{gz}\mathbf{F}^{m}\right) + C_{vp}F_{vp}\nabla C_{vp} \quad \textbf{éq 3.2.5.2-15}$$

$$\frac{\mathbf{M}_{vp}}{\rho_{vp}} = \lambda_{gz}^{H}\left(-\nabla p_{gz} + \rho_{gz}\mathbf{F}^{m}\right) - (1-C_{vp})F_{vp}\nabla C_{vp} \quad \textbf{éq 3.2.5.2-16}$$

$$\frac{\mathbf{M}_{w}}{\rho_{w}} = \lambda_{lq}^{H}\left(-\nabla p_{lq} + \rho_{lq}\mathbf{F}^{m}\right) \quad \textbf{éq 3.2.5.2-17}$$

$$\mathbf{M}_{ad} = \rho_{ad}\lambda_{lq}^{H}\left(-\nabla p_{lq} + \rho_{lq}\mathbf{F}^{m}\right) - F_{ad}\nabla C_{ad} \quad \textbf{éq 3.2.5.2-18}$$

Les tenseurs de conductivités hydrauliques λ_{lq}^{H} et λ_{gz}^{H} ne sont pas directement des données et leur valeur est connue à partir des formules :

$$\lambda_{lq}^{H} = \frac{\boldsymbol{K}^{\text{int}}(\varphi).k_{lq}^{rel}(S_{lq})}{\mu_{w}(T)} \quad \textbf{éq 3.2.5.2-19}$$

$$\lambda_{gz}^{H} = \frac{\boldsymbol{K}^{\text{int}}(\varphi).k_{gz}^{rel}(S_{lq},p_{gz})}{\mu_{gz}(T)} \quad \textbf{éq 3.2.5.2-20}$$

$\boldsymbol{K}^{\text{int}}$ est le tenseur de perméabilité intrinsèque, caractéristique du milieu poreux et donnée utilisateur, fonction quelconque de la porosité . Dans le cas isotrope, $\boldsymbol{K}^{\text{int}} = K^{\text{int}}.\mathbf{1}$;

μ_{w} est la viscosité dynamique de l'eau, caractéristique du l'eau et donnée utilisateur, fonction quelconque de la température ;

μ_{gz} est la viscosité dynamique du gaz, caractéristique du gaz et donnée utilisateur, fonction quelconque de la température ;

k_{lq}^{rel} est la perméabilité relative au liquide, caractéristique du milieu poreux et donnée utilisateur, fonction quelconque de la saturation en liquide ;

k_{gz}^{rel} est la perméabilité relative au gaz, caractéristique du milieu poreux et donnée utilisateur, fonction quelconque de la saturation en liquide et de la pression de gaz.

Remarque :

Les conductivités hydrauliques définies ici ne sont pas forcément très familières pour les mécaniciens de sols, qui utilisent couramment pour les milieux saturés la perméabilité k, laquelle est homogène à une vitesse.

La relation entre les tenseurs $\boldsymbol{k}$ et λ_{lq}^{H} est ainsi : $\lambda_{lq}^{H} = \dfrac{\boldsymbol{k}}{\rho_{w}g}$ où g est l'accélération de la pesanteur.

Le coefficient de diffusion de Fick du mélange gazeux F_{vp} est une caractéristique du milieu poreux, donnée utilisateur fonction quelconque de la pression de vapeur, de la pression de gaz, de la saturation et de la température que l'on écrira comme un produit de fonction de chacune de ces variables: $F_{vp}(P_{vp},P_{gz},T,S) = f_{vp}^{vp}(P_{vp}).f_{vp}^{gz}(P_{gz}).f_{vp}^{T}(T).f_{vp}^{S}(S)$ on négligera les dérivées par rapport à la pression de vapeur et à la saturation. De la même manière pour le coefficient de diffusion de Fick du milieu liquide : $F_{ad}(P_{ad},P_{lq},T,S) = f_{ad}^{ad}(P_{ad}).f_{ad}^{lq}(P_{lq}).f_{ad}^{T}(T).f_{ad}^{S}(S)$, on ne prend en compte que la dérivée en fonction de la température.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

3.2.6 Équilibre eau-vapeur

Cette relation est essentielle et elle a pour conséquence de réduire le nombre d'inconnues de pression.
On note h_w^m l'enthalpie massique de l'eau, s_w^m son entropie et $g_w^m = h_w^m - Ts_w^m$ son enthalpie libre.
On note h_{vp}^m l'enthalpie massique de la vapeur, s_{vp}^m son entropie et $g_{vp}^m = h_{vp}^m - Ts_{vp}^m$ son enthalpie libre.
L'équilibre eau vapeur s'écrit :

$$g_{vp}^m = g_w^m \quad \textbf{éq 3.2.6-1}$$

Qui donne :

$$h_{vp}^m - h_w^m = T\left(s_{vp}^m - s_w^m\right) \quad \textbf{éq 3.2.6-2}$$

Par ailleurs, la définition de l'enthalpie libre nous apprend que : $dg = \frac{dp}{\rho} - sdT$, ce qui, appliqué à la vapeur et à l'eau, combiné à la relation $dg_{vp}^m = dg_w^m$ et en utilisant [éq 3.2.6-2] donne :

$$\frac{dp_{vp}}{\rho_{vp}} = \frac{dp_w}{\rho_w} + \left(h_{vp}^m - h_w^m\right)\frac{dT}{T} \quad \textbf{éq 3.2.6-3}$$

Cette relation peut être exprimée en fonction de la pression capillaire et de la pression de gaz :

$$dp_{vp} = \frac{\rho_{vp}}{\rho_w}\left(dp_{gz} - dp_c - dp_{ad}\right) + \rho_{vp}\left(h_{vp}^m - h_w^m\right)\frac{dT}{T} \quad \textbf{éq 3.2.6-4}$$

3.2.7 Équilibre air sec-air dissous

L'air dissous se définit via la constante de Henry K_H, qui relie la concentration molaire d'air dissous C_{ad}^{ol} ($moles/m^3$) à la pression d'air sec :

$$C_{ad}^{ol} = \frac{p_{as}}{K_H} \quad \textbf{éq 3.2.7-1}$$

avec $C_{ad}^{ol} = \frac{\rho_{ad}}{M_{ad}^{ol}}$ **éq 3.2.7-2**

La masse molaire de l'air dissous, M_{ad}^{ol} est logiquement la même que celle de l'air sec M_{as}^{ol}. Pour l'air dissous, on prend la loi des gaz parfait :

$$\frac{p_{ad}}{\rho_{ad}} = \frac{R}{M_{as}^{ol}}T \quad \textbf{éq 3.2.7-3}$$

La pression d'air dissous est donc reliée à celle d'air sec par :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$p_{ad} = \frac{p_{as}}{K_H} RT$$ **éq 3.2.7-4**

3.2.8 Le comportement mécanique

On l'écrira sous forme différentielle :

$$d\,\boldsymbol{\sigma} = d\,\boldsymbol{\sigma}' + d\,\boldsymbol{\sigma}_p$$ **éq 3.2.8-1**

Dans le cas général (hors loi 'HYDR_TABBAL'), en utilisant une formulation de Bishop [10] élargie aux milieux non saturés on écrit :

$$d\,\boldsymbol{\sigma_p} = -\boldsymbol{B}\left(dp_{gz} - S_{lq}\,dp_c\right)$$ **éq 3.2.8-2**

(qui correspond bien dans le cas saturé à la formulation classique de Biot $d\,\boldsymbol{\sigma_p} = -\boldsymbol{B}\,dp_{lq}$).
On voit donc apparaître dans la formule [éq 3.2.8-2], le tenseur de Biot. Dans le cas isotrope $\boldsymbol{B} = b.\mathbf{1}$ et $\boldsymbol{\sigma_p} = \sigma_p.\mathbf{1}$.
Cette formulation est valable pour des gammes de séchage « raisonnables », à savoir des humidités relatives (ou degré d'hygrométrie) HR comprises entre 50 % et 100 %. On rappelle que l'humidité relative HR et la pression capillaire sont reliées par la loi de Kelvin (cf. section 3.3).
Pour des gammes d'humidités relatives descendant au dessous de 50 %, le modèle issu de la thèse de Ginger El Tabbal [14] est préconisé. Ce modèle est appelé par le mot clé HYDR_TABBAL sous RELATION_KIT. En plus des effet capillaires utilisés dans la formulation ci-dessus, l'effet de l'adsorption est ici pris en compte. Dans ce cas, la contrainte hydraulique s'écrit sous la forme $d\,\boldsymbol{\sigma_p} = -\boldsymbol{B}\,d\,\pi$ avec :

$$d\,\pi = dp_{gz} - S_{BJH}\,dp_c - \frac{1}{3}\,p_c(S_{BJH})dS_{BJH}$$
$$+\frac{2}{3}(A_0/\phi^0)\left(-\left(\omega_{BJH}(S_{BJH})\,dt(HR) + t(HR)\,d\,\omega_{BJH}(S_{BJH})\right).dp_c - \left(\frac{\partial\gamma}{\partial\varepsilon_s}\right)\Big|_\mu d\,\omega_{BJH}(S_{BJH})\right)$$
éq 3.2.8-3

Avec S_{BJH} , A_0 , ω_{BJH} , $t(HR)$ et $\left(\frac{\partial\gamma}{\partial\varepsilon_s}\right)\Big|_\mu$ les données d'entrée du modèle calculées au préalable. On en donne ici la définition :
S_{BJH} Fraction volumique d'eau liquide fonction de HR (eau non adsorbée). Cette fonction est calculée par la méthode BJH [16].
A_0 Surface totale des pores (ou surface spécifique du matériaux) par unité de volume m²/m³. Il s'agit du produit de la densité sèche (g/m³) du matériau par la surface spécifique (m²/g) déterminée par méthode BET [17] ou BJH [16].
ω_{BJH} Fraction surfacique des pores non saturés fonction de l'humidité relative HR. Il s'agit du rapport entre la surface des pores insaturés (par unité de volume) déterminée par la méthode BJH (à une humidité relative donnée) et la surface totale des pores A_0 .
$t(HR)$ Épaisseur de la couche d'eau adsorbée. Cette épaisseur est évaluée par une relation empirique dite de Badmann [15] .
$\left(\frac{\partial\gamma}{\partial\varepsilon_s}\right)\Big|_\mu$ Terme de Shuttleworth, fortement dépendant de l'orientation et de la morphologie de la surface solide. Ce terme est recalé à partir d'expérience de retrait de séchage.

S_{BJH} , A_0 , ω_{BJH} , sont donc calculés à partir de données expérimentales par des méthodes numériques dites BET ou BJH. La méthodologie pour obtenir ces paramètres ainsi que l'épaisseur de la couche adsorbée et le paramètre de Shuttleworth est décrite en détail dans la doc U2.04.05.

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Dans la relation [éq 3.2.8-1] l'évolution du tenseur de contrainte effective $\boldsymbol{\sigma}'$ est supposée ne dépendre que du déplacement du squelette et des variables internes $\boldsymbol{\alpha}$. Les termes habituels liés à la déformation thermique sont intégrés au calcul de la contrainte effective :

$$d\boldsymbol{\sigma}' = f\left(d\boldsymbol{\varepsilon} - \alpha_0 dT\,\mathbf{I}, d\boldsymbol{\alpha}\right) \qquad \textbf{éq 3.2.8-4}$$

La raison de ce choix est de pouvoir utiliser n'importe quelle loi de thermomécanique classique pour le calcul des contraintes effectives, lois qui, dans la plus part des écritures sont conformes à [éq 3.2.8-3]. En pratique, la déformation thermique s'évalue par la formule suivante:

$$\varepsilon^{th}(T) = \alpha_0\left(T - T_{ini}\right) \qquad (1)$$

La température de référence est donnée par THM_INIT/TEMP dans DEFI_MATERIAU .

3.2.9 Précisions sur les termes de transferts diphasiques

3.2.9.1 L'isotherme de sorption

Pour fermer le système, il reste encore une relation à écrire, reliant la saturation et les pressions. Nous avons choisi de considérer que la saturation en liquide était une fonction quelconque de la pression capillaire, que cette fonction était une caractéristique du milieu poreux et fournie en donnée par l'utilisateur.

Etant donné que l'utilisateur peut très bien fournir une fonction $S_{lq}\left(p_c\right)$ affine par morceaux, et étant donné que la dérivée de cette fonction, $\frac{\partial S_{lq}}{\partial p_c}$, joue un rôle physique essentiel, nous avons choisi de demander à l'utilisateur de fournir également cette courbe, restant à sa charge de s'assurer de la cohérence des données ainsi spécifiées. Il existe cependant pour l'utilisateur la possibilité de faire appel à un modèle analytique de saturation et sa dérivée codé « en dur » dans le source : le modèle de Mualem-Van Genuchten (voir section suivante).

On remarque que dans l'approche présente, on parle d'un relation biunivoque entre saturation et pression capillaire. On sait que pour la plupart des milieux poreux, ce n'est pas la même relation qui doit être utilisée pour les chemins de séchage et pour les chemins d'hydratation. C'est une des limites de l'approche présente.

3.2.9.2 Le modèle Mualem - Van Genuchten

Concernant le comportement hydraulique, l'utilisateur dispose actuellement de deux choix : rentrer manuellement, et sous forme tabulée, perméabilités relatives, lois de saturation et leur dérivées en s'assurant de leur cohérence (mot clé HYDR_UTIL ou HYDR_TABBAL sous RELATION_KIT), soit de faire appel à un modèle connu et programmé sous forme analytique : le modèle Mualem – Van Genuchten (mot clé HYDR_VGM ou HYDR_VGC sous RELATION_KIT).

Remarque :

Il existe bien sur d'autres modèles classiques pour décrire le comportement hydraulique (Brook Corey par exemple) mais il ne sont actuellement pas disponibles dans Aster. C'est alors à l'utilisateur de les rentrer sous forme tabulée dans le fichier de commande. Le modèle Mualem-Van Genuchten est un modèle classique pour la description des matériaux argileux typiques des problèmes de stockage sous terrain. Pour la perméabilité relative au gaz, il est courant d'utiliser soit une version Van Genuchten, soit une version cubique.

Le modèle Mualem-Van Genuchten se traduit par une loi saturation/pression capillaire (Van Genuchten à laquelle on rajoute une pression d'entrée) telle que :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$S_{we}=\frac{1}{\left[1+\left(\frac{P_c-P_e}{P_r}\right)^n\right]^m}$$

avec $S_{we}=\frac{S-S_{wr}}{1-S_{wr}}$ et $m=1-\frac{1}{n}$

n, S_{wr} (saturation résiduelle en eau) et P_r sont des paramètres du modèles renseignés par l'utilisateur dans son fichier de commande. P_e est également un paramètre (par défaut pris égal à 0) correspondant à une pression d'entrée (le milieu ne se désature que si la pression capillaire est supérieure à cette pression.

La perméabilité relative à l'eau s'exprime alors en intégrant le modèle de prédiction proposé par Mualem (1976) dans le modèle de capillarité de Van Genuchten :

$$k_r^w=\sqrt{S_{we}}\left(1-\left(1-S_{we^{1/m}}\right)^m\right)^2$$

La perméabilité au gaz est formulée de façon similaire dans le cas du modèle HYDR_VGM :

$$k_r^{gz}=\sqrt{\left(1-S_{we}\right)}\left(1-S_{we^{1/m}}\right)^{2m}$$

ou bien par une simple loi cubique dans le cas du HYDR_VGC :

$$k_r^{gz}=\left(1-S\right)^3$$

Dans *code_aster*, nous faisons un traitement numérique de ce modèle dans les zones « limites » ($S=1$ ou $S=0$). Pour cela nous utilisons deux paramètres supplémentaires correspondant à un traitement que l'on effectue sur ces courbes, $Smax$ et $CSAT$:

Pour $S>Smax$, ces courbes sont interpolées par un polynôme de degré 2 $C1$ en $Smax$, de manière à éviter d'avoir à traiter des dérivées de valeurs infinies. En effet, pour $S=1$:

$$\frac{\partial k_r^w(S)}{\partial S}=\infty$$

et pour le cas HYDR_VGM $\frac{\partial k_r^{gz}(S)}{\partial S}=\infty$

Pour éviter d'avoir alors à traiter ce problème (qui n'a a priori pas de signification physique) on remplace ces fonctions à partir d'une saturation $Smax$ par un polynôme du second ordre C^1 en ce point.

Ce qui donne pour la fonction $k_r^w(S)$:
Pour $S=Smax$, on détermine le polynôme $PL(S)$ tel que :

$$\begin{cases} PL(S\max)=k_r^w(S\max) \\ PL'(S\max)=\frac{\partial k_r^w}{\partial S}(S\max) \end{cases} \quad \text{et} \quad PL(1)=0$$

Pour $S>Smax$, $k_r^w(S)$ est remplacé par $PL(S)$.
Et pour $k_r^{gz}(S)$ dans le cas HYDR_VGM :
Pour $S=Smax$, on détermine le polynôme $PG(S)$ tel que :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\begin{cases} PG(S\max) = k_r^{gz}(S\max) \\ PG'(S\max) = \dfrac{\partial k_r^{gz}}{\partial S}(S\max) \end{cases} \quad \text{et} \quad PG(0)=1$$

Pour $S > Smax$, $k_r^{gz}(S)$ est remplacé par $PG(S)$.

Pour la succion $S(Pc)$ et pour $Pc < Pcmin$ (avec $S(Pcmin) = Smax$) on prolonge la courbe $S(Pc)$ par une hyperbole telle que la courbe soit C^1 en ce point :
Pour $S > Smax$:

$$S(Pc) = 1 - \frac{A}{B - Pc}$$

avec A et B tels que la courbe soit $C1$ en $Smax$.

On a donc bien une courbe décroissante qui tend vers 1 quand Pc tend vers $-\infty$. Ce traitement nous permet de gérer des pressions capillaires négatives (dans ces zones là le termes de pression capillaire est abusif, il s'agit implicitement d'un changement de variable permettant de traiter un problème quasi-saturé).

$S(Pc)$ est ensuite multipliée par un coefficient « de sécurité » $CSAT$ de manière à ce que la saturation n'atteigne jamais 1 (problème que l'on ne sait pas traiter). On conseille de prendre une valeur de $CSAT$ très proche de 1 (0,999999 par exemple).

3.2.10 Récapitulatif des caractéristiques du matériau et des données utilisateur

- les modules d'Young drainés E_L et E_N ainsi que les coefficients de Poisson drainés ν_{LT} et ν_{LN} qui permettent le calcul de la matrice de souplesse du milieu poreux. (cas isotrope transverse),
- le module d'Young drainé E , et le coefficient de Poisson drainé ν qui permettent le calcul de la matrice de souplesse du milieu poreux. (cas isotrope),
- les coefficients de Biot moyens b_L et b_N qui permettent le calcul du module de Biot de la matrice solide $\frac{1}{M_\varphi}$ (cas isotrope transverse),
- le coefficient de Biot $b = 1 - \frac{K_0}{K_S}$ permet de calculer le module de compressibilité des grains solides K_S , utile dans le calcul de la porosité pour le cas isotrope,
- le module de compressibilité de l'eau K_w ,
- le coefficient de dilatation de l'eau α_w ,
- la constante des gaz parfaits R ,
- la masse molaire de la vapeur M_{vp}^{ol} ,
- la masse molaire de l'air sec M_{as}^{ol} ,(= M_{ad}^{ol})
- la chaleur massique à pression constante de l'eau C_w^p ,
- la chaleur massique à pression constante de l'air dissous C_{ad}^p
- la chaleur massique à pression constante de l'air sec C_{as}^p ,
- la chaleur massique à pression constante de la vapeur C_{vp}^p ,
- les coefficients de dilatation moyens du milieu poreux α_L et α_N , qui sont aussi ceux des grains solides. Ils permettent le calcul de α_φ (cas isotrope transverse),

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

- le coefficient de dilatation du milieu poreux α_0 , qui est aussi celui des grains solides. Il permet le calcul de $\alpha_\varphi = (b - \varphi)\alpha_0$ (cas isotrope),
- la chaleur massique à contrainte constante des grains solides C_σ^s ,
- le tenseur de conductivité thermique des grains solides seuls, λ_s^T , fonction quelconque de la température,
- le tenseur de conductivité thermique du liquide, $\boldsymbol{\lambda}_{lq}^{T}$, fonction quelconque de la température,
- le tenseur de conductivité thermique de l'air sec, $\boldsymbol{\lambda}_{as}^{T}$, fonction quelconque de la température,
- le coefficient de diffusion de Fick pour le mélange gazeux, F_{vp} , fonction quelconque de la température, de la pression de gaz, de la pression de vapeur et de la saturation
- le coefficient de diffusion de Fick pour le mélange liquide, F_{ad} , fonction quelconque de la température et de la pression de liquide, de la pression de l'air dissous et de la saturation.
- La constante de Henry K_H fonction quelconque de la température,
- le tenseur de perméabilité intrinsèque, $\boldsymbol{K}^{\mathbf{int}}$, fonction quelconque de la porosité,
- la viscosité dynamique de l'eau, μ_w , fonction quelconque de la température,
- la viscosité dynamique du gaz, μ_{gz} , fonction quelconque de la température,
- la perméabilité relative au liquide, k_{lq}^{rel} , fonction quelconque de la saturation en liquide,
- la perméabilité relative au gaz, k_{gz}^{rel} , fonction quelconque de la saturation en liquide et de la pression de gaz,
- la relation saturation/pression capillaire, $S_{lq}(p_c)$, fonction quelconque de la pression capillaire,
- de façon générale l'état initial est caractérisé par :
  - la température initiale,
  - les pressions initiales d'où l'on déduit la saturation initiale $S_{lq}^0\left(p_c^0\right)$,
  - la masse spécifique initiale de l'eau ρ_w^0 ,
  - la porosité initiale ϕ^0 ,
  - la pression initiale de la vapeur p_{vp}^0 d'où l'on déduit la masse volumique initiale de la vapeur ρ_{vp}^0 ,
  - la pression initiale de l'air sec p_{as}^0 d'où l'on déduit la masse volumique initiale de l'air sec ρ_{as}^0 .
  - la masse volumique initiale homogénéisée du milieu poreux r_0 ,
  - les enthalpies initiales du l'eau, de l'air dissous, de la vapeur et de l'air sec.

3.3 L'état de référence et l'état initial

L'introduction des conditions initiales est très importante, notamment pour les enthalpies.
En pratique, on peut raisonner en considérant que l'on a trois états pour les fluides :

- l'état courant,
- l'état de référence : c'est celui des fluides à l'état libre. Bien souvent on prendra pour les pressions d'eau et d'air la pression atmosphérique. Dans cet état de référence, on peut considérer que les enthalpies sont nulles,
- l'état initial : il est important de noter que, à l'état initial du milieu poreux, l'eau est dans un état hygroscopique différent de celui de l'eau libre. Pour les enthalpies de l'eau et de la vapeur on devra prendre :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$^{init}h_w^m = \frac{p_w^{init} - p_l^{ref}}{\rho_w} = \frac{p_w^{init} - p_{atm}}{\rho_w}$$
$$^{init}h_{vp}^m = L(T^{init}) = \text{chaleur latente de vaporisation}$$
$$^{init}h_{as}^m = 0$$
$$^{init}h_{ad}^m = 0$$

Remarques :

La pression initiale de vapeur doit être prise en cohérence avec les autres données. Bien souvent, on part de la connaissance d'un état initial d'hygrométrie. Le degré hygrométrique est le rapport entre la pression de vapeur et la pression de vapeur saturante à la température considérée. On utilise alors la loi de Kelvin qui donne la pression du liquide en fonction de la pression de vapeur, de la température et de la pression de vapeur saturante : $\frac{p_w - p_w^{ref}}{\rho_w} = \frac{R}{M_{vp}^{ol}} T \ln\left(\frac{p_{vp}}{p_{vp}^{sat}(T)}\right)$ *. Cette relation n'est valable que pour des évolutions isothermes. On souligne que* p_w^{ref} *correspond à un état d"équilibre auquel correspond* p_{vp}^{sat} *, cet état d'équilibre correspond en fait à* $p_w^0 = p_{gz}^0 = 1$ *atm. Pour des évolutions avec variation de température, connaissant une loi donnant la pression de vapeur saturante à la température* T_0 *, par exemple :* $p_{vp}^{sat}(T_0) = 10^{\left(2.7858 + \frac{T_0 - 273.5}{31.559 + .1354(T_0 - 273.5)}\right)}$ *, et un degré d'hygrométrie* HR *, on en déduit la pression de vapeur grâce à* $p_{vp}(T_0) = HR\, p_{vp}^{sat}(T_0)$ *.*

3.4 Inconnues nodales, valeurs initiales et valeurs de référence

Nous abordons ici un point qui tient plus à des choix de programmation qu'à de véritables aspects de formulation. Néanmoins, nous l'exposons parce qu'il a des conséquences pratiques importantes. Les inconnues principales qui sont aussi les valeurs des degrés de liberté, sont notées :

$$\{u\}^{ddl} = \begin{Bmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \\ \text{PRE1}^{ddl} \\ \text{PRE2}^{ddl} \\ T^{ddl} \end{Bmatrix}$$

Selon la modélisation, elles peuvent avoir des significations différentes :

	LIQU_SATU	LIQU_VAPE	LIQU_GAZ_ATM	GAZ	LIQU_VAPE_GAZ
PRE1	p_w	p_w	$p_c = -p_w$	p_{gz}	$p_c = p_{gz} - p_w$
PRE2					p_{gz}

	LIQU_GAZ	LIQU_AD_GAZ_VAPE	LIQU_AD_GAZ
PRE1	$p_c = p_{gz} - p_w$	$p_c = p_{gz} - p_w - p_{ad}$	$p_c = p_{gz} - p_w - p_{ad}$
PRE2	p_{gz}	p_{gz}	p_{gz}

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

On définira alors les pressions réelles et la température réelle par :

$p = p^{ddl} + p^{init}$ pour les pressions PRE1 et PRE2 et $T = T^{ddl} + T^{init}$ pour les températures, où p^{init} et T^{init} sont définis sous le mot clé THM_INIT de la commande DEFI_MATERIAU.
Les valeurs écrites par IMPR_RESU sont les valeurs de $\{u\}^{ddl}$. Les conditions aux limites sont définies pour $\{u\}^{ddl}$. Le mot clé DEPL du mot clé facteur ETAT_INIT de la commande STAT_NON_LINE définit les valeurs initiales de $\{u\}^{ddl}$. Les valeurs initiales des enthalpies, qui appartiennent aux contraintes généralisées sont définies à partir du mot clé SIGM du mot clé facteur ETAT_INIT de la commande STAT_NON_LINE. Les pressions réelles et la température réelle sont utilisées dans les lois de comportement, notamment les lois du type $S_{lq} = f(p_c)$ ou $\frac{dp}{p} = \frac{d\rho}{\rho} + \frac{dT}{T}$. Les valeurs initiales des masses volumiques de la vapeur et de l'air sec sont définies à partir des valeurs initiales des pressions de gaz et de vapeur (valeurs lues sous le mot clé THM_INIT de la commande DEFI_MATERIAU). On remarque que, pour les déplacements, la décomposition $u = u^{ddl} + u^{init}$ n'est pas faite : le mot clé THM_INIT de la commande DEFI_MATERIAU ne permet donc pas de définir des déplacements initiaux. La seule façon d'initialiser les déplacements est donc de leur donner une valeur initiale par le mot clé facteur ETAT_INIT de la commande STAT_NON_LINE.

3.5 Contraintes effectives et contraintes totales. Conditions aux limites de contrainteLa partition des contraintes en contraintes totale et effective s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}' + \boldsymbol{\sigma}_p$$

$\boldsymbol{\sigma}$ est la contrainte totale, c.a.d celle qui vérifie : $\mathbf{Div}(\boldsymbol{\sigma}) + r\,\mathbf{F}^m = 0$
$\boldsymbol{\sigma}'$ est la contrainte effective. Pour les lois de contraintes effectives, elle vérifie : $d\boldsymbol{\sigma}' = f(d\boldsymbol{\varepsilon} - \alpha_0 dT, \boldsymbol{\alpha})$, où $\boldsymbol{\varepsilon} = 1/2(\nabla \mathbf{u} + {}^T\nabla \mathbf{u})$ et $\boldsymbol{\alpha}$ représente les variables internes. Le tenseur $\boldsymbol{\sigma}_p$ se calcule en fonction des pressions hydrauliques. L'écriture adoptée est incrémentale et, si l'on veut que la valeur de $\boldsymbol{\sigma}_p$ soit cohérente avec la valeur p^{init} définie sous le mot clé THM_INIT, il faut initialiser les composantes de $\boldsymbol{\sigma}_p$ par le mot clé SIGM du mot clé facteur ETAT_INIT de la commande STAT_NON_LINE.

Dans les fichiers résultats, on trouve les contraintes effectives σ' sous les noms de composantes SIXX ... et $\boldsymbol{\sigma}_p$ sous le nom SIPXX … . Les conditions aux limites en contraintes sont écrites en contraintes totales.

3.6 Quelques valeurs numériques

Nous donnons ici quelques valeurs raisonnables pour certains coefficients. Ces valeurs ne sont pas programmées dans *Code_Aster*, elles sont fournies ici à titre indicatif :

Pour les gaz parfaits, on retient les valeurs suivantes :

$R = 8.3144\ J.K^{-1}$
$M_{vp}^{ol} = 18.\ 10^{-3}\ kg.mole^{-1}$
$M_{as}^{ol} = 28.9610^{-3}\ kg.mole^{-1}$

Pour le CO_2, la valeur de la constante de Henry à $20\,°C$ est de :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$K_H = 3162\ Pa.m^3 mole^{-1}$

Pour l'eau liquide, on a :
$\rho_w = 1000\ kg/m^3$
$K_w = 2000\ MPa$

Le coefficient de dilatation thermique de l'eau est correctement approché par la formule :

$$\alpha_w = 9.52\ 10^{-5} \ln(T - 273) - 2.19\ 10^{-4}\ (K^{-1})$$

Les capacités calorifiques ont pour valeurs :

$$C_\sigma^s = 800\ J.kg^{-1}K^{-1}$$
$$C_{lq}^p = 4180\ J.kg^{-1}K^{-1}$$
$$C_{vp}^p = 1870\ J.kg^{-1}K^{-1}$$
$$C_{as}^p = 1000\ J.kg^{-1}K^{-1}$$

On donne également une loi d'évolution de la chaleur latente de changement de phase liquide vapeur :

$$L(T) = 2500800 - 2443(T - 273.15)\ J/kg$$

4 Calcul des contraintes généralisées

Dans ce chapitre, nous précisons comment sont intégrées les relations décrites au chapitre 3. Plus précisément encore, nous donnons les expressions des contraintes généralisées au sens du document [R7.01.10] [4] quand les lois de comportements THM sont appelées pour l'option RAPH_MECA au sens du document [R5.03.01] [3]. Afin que ce document suive de plus prêt l'ordre de programmation, nous allons considérer deux cas : le cas sans air dissous et celui avec.

Les contraintes généralisées sont :

$$\boldsymbol{\sigma}', \boldsymbol{\sigma}_p; m_w, \mathbf{M}_w, h_w^m; m_{vp}, \mathbf{M}_{vp}, h_{vp}^m; m_{as}, \mathbf{M}_{as}, h_{as}^m; m_{ad}, \mathbf{M}_{ad}, h_{ad}^m; Q', \mathbf{q}$$

Les déformations généralisées , à partir desquelles on calcule les contraintes généralisées sont :

$$\mathbf{u}, \varepsilon(\mathbf{u}); p_c, \nabla p_c; p_{gz}, \nabla p_{gz}; T, \nabla T$$

Les variables internes que nous avons retenues sont :

Dans le cas sans vapeur :

$$\varphi, \rho_w, S_{lq}$$

Dans le cas avec vapeur et sans air dissous :

$$\varphi, \rho_w, p_{vp}, S_{lq}$$

Dans le cas avec vapeur et air dissous:

$$\varphi, \rho_w, p_{vp}, p_{ad}, S_{lq}$$

Dans ce chapitre, nous adoptons les notations habituelles Aster, à savoir les indices + pour les valeurs des quantités en fin de pas de temps et les indices - pour les quantités au début du pas de temps.

Ainsi, les quantités connues sont :

- les contraintes, déformations généralisées et variables internes au début du pas de temps :
  - $\boldsymbol{\sigma}'^-, \boldsymbol{\sigma}_p^-; m_w^-, \mathbf{M}_w^-, h_w^{m^-}; m_{vp}^-, \mathbf{M}_{vp}^-, h_{vp}^{m^-}; m_{as}^-, \mathbf{M}_{as}^-, h_{as}^{m^-}; m_{ad}^-, \mathbf{M}_{ad}^-, h_{ad}^{m^-}; Q'^-, \mathbf{q}^-$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

- $\mathbf{u}^-, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^-); p_c^-, \nabla p_c^-; p_{gz}^-, \nabla p_{gz}^-; T^-, \nabla T^-$
- $\varphi^-, \rho_w^-, p_{vp}^-, p_{ad}^-$

- les déformations généralisées à la fin du pas de temps :
  - $\mathbf{u}^+, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^+); p_c^+, \nabla p_c^+; p_{gz}^+, \nabla p_{gz}^+; T^+, \nabla T^+$
- Les quantités inconnues sont les contraintes, et variables internes à la fin du pas de temps :
  - $\boldsymbol{\sigma}'^+, \boldsymbol{\sigma}_p^+; m_w^+, \mathbf{M}_\mathbf{w}^+, h_w^{m^+}; m_{vp}^+, \mathbf{M}_{\mathbf{vp}}^+, h_{vp}^{m^+}; m_{as}^+, \mathbf{M}_{\mathbf{as}}^+, h_{as}^{m^+}; m_{ad}^+, \mathbf{M}_{\mathbf{ad}}^+, h_{ad}^{m^+}; Q'^+, \mathbf{q}^+$
  - $\varphi^+, \rho_w^+, p_{vp}^+, p_{ad}^+$

4.1 Cas sans air dissous

4.1.1 Calcul de la porosité et le la masse volumique du fluide

4.1.1.1 Calcul de la porosité: cas isotrope

La première chose à faire est bien sûr de calculer la saturation à la fin du pas de temps $S_{lq}^+ = S_{lq}(p_c^+)$. La porosité se trouve en intégrant sur le pas de temps l'équation [éq 3.2.1-1].

On obtient alors :

$$\ln\left\{\frac{b-\varphi^+}{b-\varphi^-}\right\} = \left\{-(\varepsilon_v^+ - \varepsilon_v^-) + 3\alpha_0(T^+ - T^-) - \frac{(p_{gz}^+ - p_{gz}^-) - S_{lq}^+(p_c^+ - p_c^-)}{K_S}\right\} \quad \textbf{éq 4.1.1-1}$$

4.1.1.2 Calcul de la porosité: cas isotrope transverse

La première chose à faire est bien sûr de calculer la saturation à la fin du pas de temps $S_{lq}^+ = S_{lq}(p_c^+)$. La porosité se trouve en intégrant sur le pas de temps l'équation [éq 3.2.1-3]. L'intégration est donc ici explicite contrairement au cas isotrope.
On obtient alors :

$$(\varphi^+ - \varphi^-) = \boldsymbol{B} : (\boldsymbol{\varepsilon}^+ - \boldsymbol{\varepsilon}^-) - \varphi^-(\varepsilon_v^+ - \varepsilon_v^-) - 3\alpha_\varphi(T^+ - T^-) + \frac{(p_{gz}^+ - p_{gz}^-) - S_{lq}^+(p_c^+ - p_c^-)}{M_\varphi} \quad \textbf{éq 4.1.1-2}$$

4.1.1.3 Calcul de la masse volumique du fluide

La masse volumique du liquide se trouve en intégrant sur le pas de temps l'équation [éq 3.2.3.1-1].

Ce qui donne :

$$\ln\left(\frac{\rho_w^+}{\rho_w^-}\right) = \frac{p_{gz}^+ - p_{gz}^- - p_c^+ + p_c^-}{K_w} - 3\alpha_w(T^+ - T^-) \quad \textbf{éq 4.1.1-3}$$

4.1.2 Calcul des coefficients de dilatation

Il est important de remarquer que le coefficient de dilatation thermique différentiel est recalculé à partir de la porosité évaluée en fin de pas de temps. Compte tenu de cela on pose :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\alpha_{\varphi}^{+}=\frac{(\boldsymbol{B}\text{-}\varphi^{+}\boldsymbol{\delta}):\boldsymbol{\alpha_0}}{3}$$ **éq 4.1.2-1**

Remarque :

Dans le cas isotrope [éq 4.1.2-1] devient :

$$\alpha_{\varphi}^{+}=(b\text{-}\varphi^{+})\,\alpha_0$$

Il s'agit ensuite d'une simple application des formules [éq 3.2.4.3-2] et [éq 3.2.4.3-3], lesquelles sont évaluées en fin de pas de temps :

$$\alpha_{vp}^{m^+}=\alpha_{as}^{m^+}=\alpha_{gz}^{m^+}=(1\text{-}S_{lq}^{+})\,\alpha_{\varphi}^{+}+\frac{\varphi^{+}(1\text{-}S_{lq}^{+})}{3\,T^{+}}$$ **éq 4.1.2-2**

$$\alpha_{w}^{m^+}=S_{lq}^{+}\alpha_{\varphi}^{+}+\alpha_{lq}\varphi^{+}S_{lq}^{+}$$ **éq 4.1.2-3**

4.1.3 Calcul des enthalpies fluides

Les enthalpies fluides sont calculées par intégration des équations [éq 3.2.4.1-1], [éq 3.2.4.2-1], [éq 3.2.4.2-2].

$$h_{w}^{m^+}=h_{w}^{m^-}+C_{w}^{p}\left(T^{+}-T^{-}\right)+\frac{\left(1-3\,\alpha_{w}\,T^{+}\right)}{\rho_{w}^{+}}\left(p_{gz}^{+}-p_{gz}^{-}-p_{c}^{+}+p_{c}^{-}\right)$$ **éq 4.1.3-1**

$$h_{vp}^{m^+}=h_{vp}^{m^-}+C_{vp}^{p}\left(T^{+}\text{-}T^{-}\right)$$ **éq 4.1.3-2**

$$h_{as}^{m^+}=h_{as}^{m^-}+C_{as}^{p}\left(T^{+}\text{-}T^{-}\right)$$ **éq 4.1.3-3**

4.1.4 Pressions de vapeur et d'air

Partant de la relation [éq 3.2.6-4] dans laquelle on porte la loi de comportement des gaz parfaits [éq 3.2.3.2-1], on trouve $\frac{dp_{vp}}{p_{vp}}=\frac{M_{vp}^{ol}}{RT}\left(\frac{1}{\rho_w}dp_{gz}-\frac{1}{\rho_w}dp_c+\left(h_{vp}^{m}-h_{w}^{m}\right)\frac{dT}{T}\right)$ que l'on intègre par un chemin d'abord à température constante (on considère alors la masse volumique de l'eau constante), puis de T^{-} à T^{+} à pressions constantes.

$$\ln\left(\frac{p_{vp}^{+}}{p_{vp}^{-}}\right)=\frac{M_{vp}^{ol}}{RT^{+}}\frac{1}{\rho_{w}^{+}}\left[\left(p_{gz^+}-p_{gz}^{-}\right)-\left(p_{c^+}-p_{c}^{-}\right)\right]+\frac{M_{vp}^{ol}}{R}\int_{T^-}^{T^+}\left(h_{vp}^{m}-h_{w}^{m}\right)\frac{dT}{T^2}$$

Le premier terme correspond au chemin à température constante, le second au chemin à pressions constantes. En utilisant les définitions [éq 3.2.4.1-1] et [éq 3.2.4.2-1] des enthalpies, on voit que pour une évolution à pressions constantes :

$$\frac{h_{vp}^{m}-h_{w}^{m}}{T^2}=\frac{h_{vp}^{m^-}-h_{w}^{m^-}}{T^2}+\frac{\left(C_{vp}^{p}-C_{w}^{p}\right)\left(T-T^{-}\right)}{T^2}$$

On a donc pour un tel chemin :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\int_{T^-}^{T^+}\left(h_{vp}^m-h_w^m\right)\frac{dT}{T^2}=\left(h_{vp}^{m^-}-h_w^{m^-}\right)\left(\frac{1}{T^-}-\frac{1}{T^+}\right)+\left(C_{vp}^p-C_w^p\right)\left(\ln\left(\frac{T^+}{T^-}\right)+T^-\left(\frac{1}{T^+}-\frac{1}{T^-}\right)\right)$$

Soit finalement :

$$\ln\left(\frac{p_{vp}^+}{p_{vp}^-}\right)=\frac{M_{vp}^{ol}}{RT^+}\frac{1}{\rho_w^+}\left[\left(p_{gz^+}-p_{gz}^-\right)-\left(p_{c^+}-p_c^-\right)\right]+\frac{M_{vp}^{ol}}{R}\left(h_{vp}^{m^-}-h_w^{m^-}\right)\left(\frac{1}{T^-}-\frac{1}{T^+}\right)+\frac{M_{vp}^{ol}}{R}\left(C_{vp}^p-C_w^p\right)\left(\ln\left(\frac{T^+}{T^-}\right)+\frac{T^-}{T^+}-1\right)$$ **éq 4.1.4-1**

On peut alors calculer les masses volumiques de la vapeur et de l'air par les relations [éq 3.2.3.2-1] et [éq 3.2.3.2-2] :

$$\rho_{vp}^+=\frac{M_{vp}^{ol}}{R}\frac{p_{vp}^+}{T^+}$$ **éq 4.1.4-2**

$$\rho_{as}^+=\frac{M_{as}^{ol}}{R}\frac{\left(p_{gz}^+-p_{vp}^+\right)}{T^+}$$ **éq 4.1.4-3**

4.1.5 Calcul des apports massiques

Les équations [éq 3.2.2-1] donnent des apports massiques nuls à l'instant 0. On écrit de façon incrémentale les équations [éq 3.2.2-1] :

$$\begin{aligned}m_w^+&=m_w^-+\rho_w^+\left(1+\varepsilon_V^+\right)\varphi^+S_{lq}^+-\rho_w^-\left(1+\varepsilon_V^-\right)\varphi^-S_{lq}^-\\m_{as}^+&=m_{as}^-+\rho_{as}^+\left(1+\varepsilon_V^+\right)\varphi^+\left(1-S_{lq}^+\right)-\rho_{as}^-\left(1+\varepsilon_V^-\right)\varphi^-\left(1-S_{lq}^-\right)\\m_{vp}^+&=m_{vp}^-+\rho_{vp}^+\left(1+\varepsilon_V^+\right)\varphi^+\left(1-S_{lq}^+\right)-\rho_{vp}^-\left(1+\varepsilon_V^-\right)\varphi^-\left(1-S_{lq}^-\right)\end{aligned}$$ **éq 4.1.5-1**

4.1.6 Calcul de la capacité calorifique et de la chaleur Q'

On a maintenant tous les éléments pour appliquer à la fin du pas de temps la formule [éq 3.2.4.3-5] :

$$C_\sigma^{0^+}=\left(1-\varphi^+\right)\rho_sC_\sigma^s+S_{lq}^+\varphi^+\rho_w^+C_w^p+\left(1-S_{lq}^+\right)\varphi^+\left(\rho_{vp}^+C_{vp}^p+\rho_{as}^+C_{as}^p\right)$$ **éq 4.1.6-1**

On utilise bien sûr [éq 3.2.4.3-4] qui donne :

$$C_\varepsilon^{0+}=C_\sigma^{0+}-T^+\left(\boldsymbol{C_0}:\boldsymbol{\alpha_0}\right):\boldsymbol{\alpha_0}$$ **éq 4.1.6-2**

Remarque :

Dans le cas isotrope [éq 4.1.6-2] devient :

$$C_\varepsilon^{0+}=C_\sigma^{0+}-9T^+K_0\alpha_0^2$$

Bien que la variation de chaleur $\delta Q'$ ne soit pas une différentielle totale, il est néanmoins licite de l'intégrer sur le pas de temps et on obtient en intégrant [éq 3.2.4.3-1].

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$Q'^{+}=Q'^{-}+(\boldsymbol{C_0}:\boldsymbol{\alpha_0}):\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{+}-\boldsymbol{\varepsilon}^{-}\right)T^{1/2}+3\,\alpha_{lq}^{m^{+}}T^{1/2}\left(p_c^{+}-p_c^{-}\right)-\left(3\,\alpha_{gz}^{m^{+}}+3\,\alpha_{lq}^{m^{+}}\right)T^{1/2}\left(p_{gz}^{+}-p_{gz}^{-}\right)+C_{\varepsilon}^{0^{+}}\left(T^{+}-T^{-}\right)$$

éq 4.1.6-3

où nous avons noté : $T^{1/2}=\dfrac{T^{+}+T^{-}}{2}$. Nous avons choisi ici une formule de « point milieu » pour la variable température.

Remarque :

Dans le cas isotrope [éq 4.1.6-3] devient :

$$Q'^{+}=Q'^{-}+(3\,K_0\,\alpha_0)\left(\varepsilon_V^{+}-\varepsilon_V^{-}\right)T^{1/2}+3\,\alpha_{lq}^{m^{+}}T^{1/2}\left(p_c^{+}-p_c^{-}\right)-\left(3\,\alpha_{gz}^{m^{+}}+3\,\alpha_{lq}^{m^{+}}\right)T^{1/2}\left(p_{gz}^{+}-p_{gz}^{-}\right)+C_{\varepsilon}^{0^{+}}\left(T^{+}-T^{-}\right)$$

4.1.7 Calcul des contraintes mécaniques

Le calcul des contraintes effectives se fait en invoquant les lois incrémentales de mécanique choisies par l'utilisateur. On intègre sur le pas de temps [éq 3.2.8-2] et on a :

$$\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}^{+}=\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}^{-}-\boldsymbol{B}\left(p_{gz}^{+}-p_{gz}^{-}\right)+\boldsymbol{B}\,S_{lq}^{+}\left(p_c^{+}-p_c^{-}\right)$$

éq 4.1.7-1

Dans le cas isotrope on a $\boldsymbol{B}=b\,.\,\mathbf{1}$, $\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}^{+}=\sigma_p^{+}.\mathbf{1}$ et $\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}^{-}=\sigma_p^{-}.\mathbf{1}$

4.1.8 Calcul des flux hydriques et thermiques

Il faut bien sûr calculer tous les coefficients de diffusion :

Le coefficient de Fick $F^{+}=F\left(T^{+},p_c^{+},p_{gz}^{+}\right)$

Le tenseur de diffusivité thermique $\boldsymbol{\lambda}^{\boldsymbol{T}+}=\lambda_{\phi}^{T}(\varphi^{+}).\lambda_S^{T}(S_{lq}^{+}).\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{T}}^{\boldsymbol{T}}(T^{+})+\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{cte}}^{\boldsymbol{T}}$

Les tenseurs de perméabilité et de conductivité hydraulique :

$$\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}^{+}}=\frac{\boldsymbol{K}^{\mathbf{int}}(\varphi^{+}).k_w^{rel}\left(S_{lq}^{+}\right)}{\mu_w\left(T^{+}\right)}\qquad \boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}^{+}}=\frac{\boldsymbol{K}^{\mathbf{int}}(\varphi^{+}).k_{gz}^{rel}\left(S_{lq}^{+},p_{gz}^{+}\right)}{\mu_{gz}\left(T^{+}\right)}$$

Dans le cas isotrope, $\boldsymbol{K}^{\mathbf{int}}=K^{\mathrm{int}}.\mathbf{1}$, $\boldsymbol{\lambda}^{\boldsymbol{T}}=\lambda^{T}.\mathbf{1}$, $\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{T}}^{\boldsymbol{T}}(T)=\lambda_T^{T}(T).\mathbf{1}$ et $\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{cte}}^{\boldsymbol{T}}=\lambda_{cte}^{T}.\mathbf{1}$

La concentrations en vapeur: $C_{vp}^{+}=\dfrac{p_{vp}^{+}}{p_{vp}^{+}}$

Il ne reste plus alors qu'à appliquer les formules [éq 3.2.5.1-1], [éq 3.2.5.2-15], [éq 3.2.5.2-16] et [éq 3.2.5.2-17] pour trouver :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\mathbf{q}^{+}=-\boldsymbol{\lambda}^{T^{+}}\nabla T^{+} \qquad \text{éq 4.1.8-1}$$

$$\frac{\mathbf{M}_{as}^{+}}{\rho_{as}^{+}}=\boldsymbol{\lambda}_{gz}^{H^{+}}\left[-\nabla p_{gz}^{+}+\left(\rho_{as}^{+}+\rho_{vp}^{+}\right)\mathbf{F}^{\mathbf{m}}\right]+C_{vp}^{+}F_{vp}^{+}\nabla C_{vp}^{+} \qquad \text{éq 4.1.8-2}$$

$$\frac{\mathbf{M}_{vp}^{+}}{\rho_{vp}^{+}}=\boldsymbol{\lambda}_{gz}^{H^{+}}\left[-\nabla p_{gz}^{+}+\left(\rho_{as}^{+}+\rho_{vp}^{+}\right)\mathbf{F}^{\mathbf{m}}\right]-\left(1-C_{vp}^{+}\right)F_{vp}^{+}\nabla C_{vp}^{+} \qquad \text{éq 4.1.8-3}$$

$$\frac{\mathbf{M}_{w}^{+}}{\rho_{w}^{+}}=\boldsymbol{\lambda}_{lq}^{H^{+}}\left[-\nabla p_{lq}^{+}+\rho_{w}^{+}F^{m}\right] \qquad \text{éq 4.1.8-4}$$

Dans les cas isotrope, $\boldsymbol{\lambda}_{lq}^{H}=\lambda_{lq}^{H}.\mathbf{1}$ et $\boldsymbol{\lambda}_{gz}^{H}=\lambda_{gz}^{H}.\mathbf{1}$.

4.2 Cas avec air dissous

4.2.1 Calcul de la porosité

4.2.1.1 Calcul de la porosité: cas isotrope

De la même manière, la première chose à faire est de calculer la saturation à la fin du pas de temps $S_{lq}^{+}=S_{lq}\left(p_{c}^{+}\right)$. La porosité se trouve en intégrant sur le pas de temps l'équation [éq 3.2.1-1]. On rappelle donc que :

$$\ln\left\{\frac{b-\varphi^{+}}{b-\varphi^{-}}\right\}=\left\{-\left(\varepsilon_{v}^{+}-\varepsilon_{v}^{-}\right)+3\alpha_{0}\left(T^{+}-T^{-}\right)-\frac{\left(p_{gz}^{+}-p_{gz}^{-}\right)-S_{lq}^{+}\left(p_{c}^{+}-p_{c}^{-}\right)}{K_{S}}\right\}$$

4.2.1.2 Calcul de la porosité: cas isotrope transverse

De la même manière, la première chose à faire est de calculer la saturation à la fin du pas de temps $S_{lq}^{+}=S_{lq}\left(p_{c}^{+}\right)$. La porosité se trouve en intégrant sur le pas de temps l'équation [éq 3.2.1-1]. On rappelle donc que :

$$\left(\varphi^{+}-\varphi^{-}\right)=\boldsymbol{B}:\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{+}-\boldsymbol{\varepsilon}^{-}\right)-\varphi^{-}\left(\varepsilon_{v}^{+}-\varepsilon_{v}^{-}\right)-3\alpha_{\varphi}\left(T^{+}-T^{-}\right)+\frac{\left(p_{gz}^{+}-p_{gz}^{-}\right)-S_{lq}^{+}\left(p_{c}^{+}-p_{c}^{-}\right)}{M_{\varphi}}$$

4.2.2 Calcul des coefficients de dilatation

De la même manière, le coefficient de dilatation thermique différentiel est recalculé à partir de la porosité évaluée en fin de pas de temps. Compte tenu de cela on pose :

$$\alpha_{\varphi}^{+}=\frac{\left(\boldsymbol{B}-\varphi^{+}\boldsymbol{\delta}\right):\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{0}}}{3} \qquad \text{éq 4.2.2-1}$$

Remarque :

Dans le cas isotrope [éq 4.2.2-1] devient :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\alpha_{\varphi}^{+}=(b-\varphi^{+})\,\alpha_{0}$$

Il s'agit ensuite d'une simple application des formules [éq 3.2.4.3-2] et [éq 3.2.4.3-3], lesquelles sont évaluées en fin de pas de temps :

$$\alpha_{vp}^{m^+}=a_{as}^{m+}=a_{gz}^{m+}=\left(1-S_{lq}^{+}\right)\alpha_{\varphi}^{+}+\frac{\varphi^{+}\left(1-S_{lq}^{+}\right)}{3\mathrm{T}^{+}} \qquad \textbf{éq 4.2.2-2}$$

$$\alpha_{w}^{m^+}=S_{lq}^{+}\alpha_{\varphi}^{+}+\alpha_{lq}\varphi^{+}S_{lq}^{+} \qquad \textbf{éq 4.2.2-3}$$

$$\alpha_{ad}^{m^+}=S_{lq}^{+}\alpha_{\varphi}^{+}+\frac{\varphi^{+}S_{lq}^{+}}{3\mathrm{T}^{+}} \qquad \textbf{éq 4.2.2-4}$$

4.2.3 Calcul des pressions de vapeur, d'air dissous et sec et des masses volumiques

Partant de la relation [éq 3.2.6-4] dans laquelle on porte la loi de comportement des gaz parfaits [éq 3.2.3.2-1], on trouve :

$$\frac{dp_{vp}}{p_{vp}}=\frac{M_{vp}^{ol}}{RT}\left(\frac{1}{\rho_{w}}dp_{w}+\left(h_{vp}^{m}-h_{w}^{m}\right)\frac{dT}{T}\right) \qquad \textbf{éq 4.2.3-1}$$

Contrairement au cas sans air dissous p_w n'est maintenant plus connu :

$$p_{w}=p_{lq}-p_{ad}=p_{gz}-p_{c}-\frac{RT}{K_{H}}p_{as}=p_{gz}-p_{c}-\frac{RT}{K_{H}}(p_{gz}-p_{vp})$$

donc :

$$dp_{w}=dp_{gz}-dp_{c}-\frac{RT}{K_{H}}(dp_{gz}-dp_{vp})-\frac{R}{K_{H}}(p_{gz}-p_{vp})\,dT \qquad \textbf{éq 4.2.3-2}$$

On intègre [éq 4.2.3.1] en y incluant [éq 4.2.3.2] par un chemin d'abord à température constante (on considère alors la masse volumique de l'eau constante), puis de T^- à T^+ à pressions constantes. Au final on obtient :

$$\ln\left(\frac{p_{vp}^{+}}{p_{vp}^{-}}\right)=\frac{M_{vp}^{ol}}{\rho_{w}^{-}}\left(\frac{1}{RT^{+}}-\frac{1}{K_{H}}\right)\left(p_{gz^+}-p_{gz}^{-}\right)+\frac{M_{vp}^{ol}}{\rho_{w}^{-}K_{H}}\left(p_{vp^+}-p_{vp}^{-}\right)-\frac{M_{vp}^{ol}}{\rho_{w}^{-}RT^{+}}\left(p_{c^+}-p_{c}^{-}\right)+\frac{M_{vp}^{ol}R}{\rho_{w}^{-}K_{H}}\left(p_{vp^+}-p_{gz}^{+}\right)\ln\left(\frac{T^{+}}{T^{-}}\right)+\frac{M_{vp}^{ol}}{R}\int_{T^-}^{T^+}\left(h_{vp}^{m}-h_{w}^{m}\right)\frac{dT}{T^{2}} \qquad \textbf{éq 4.2.3-3}$$

Contrairement au cas précédent, on a ici une équation non linéaire à résoudre. On va faire pour ça une méthode de type correcteur-prédicteur. On pose $\tilde{p}_{vp}$ tel que :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\ln\left(\frac{\tilde{p}_{vp}}{p_{vp}^-}\right)=\frac{M_{vp}^{ol}}{\rho_w^-}\left(\frac{1}{RT^+}-\frac{1}{K_H}\right)\left(p_{gz^+}-p_{gz}^-\right)-\frac{M_{vp}^{ol}}{\rho_w^- RT^+}\left(p_{c^+}-p_c^-\right)+\frac{M_{vp}^{ol}}{R}\int_{T^-}^{T^+}\left(h_{vp}^m-h_w^m\right)\frac{dT}{T^2}$$ **éq 4.2.3-4**

et donc

$$\tilde{p}_{vp}=p_{vp}^-.\exp\left(\frac{M_{vp}^{ol}}{\rho_w^-}\left(\frac{1}{RT^+}-\frac{1}{K_H}\right)\left(p_{gz^+}-p_{gz}^-\right)-\frac{M_{vp}^{ol}}{\rho_w^- RT^+}\left(p_{c^+}-p_c^-\right)+\int_{T^-}^{T^+}\left(h_{vp}^m-h_w^m\right)\frac{dT}{T^2}\right)$$ **éq 4.2.3-5**

En outre, comme dans la section [§4.1.4], on rappelle que :

$$\int_{T^-}^{T^+}\left(h_{vp}^m-h_w^m\right)\frac{dT}{T^2}=\left(h_{vp}^{m^-}-h_w^{m^-}\right)\left(\frac{1}{T^-}-\frac{1}{T^+}\right)+\left(C_{vp}^p-C_w^p\right)\left(\ln\left(\frac{T^+}{T^-}\right)+T^-\left(\frac{1}{T^+}-\frac{1}{T^-}\right)\right)$$

Comme $\ln\left(\frac{p_{vp}^+}{p_{vp}^-}\right)=\ln\left(\frac{\tilde{p}_{vp}}{p_{vp}^-}\right)+\ln\left(\frac{p_{vp}^+}{\tilde{p}_{vp}}\right)$ et que par D.L $\ln\left(\frac{p_{vp}^+}{\tilde{p}_{vp}}\right)=\ln\left(1+\frac{p_{vp}^+-\tilde{p}_{vp}}{\tilde{p}_{vp}}\right)\approx\frac{p_{vp}^+}{\tilde{p}_{vp}}-1$,

p_{vp}^+ sera donc donné par l'expression linéaire suivante :

$$\frac{p_{vp}^+}{\tilde{p}_{vp}}=1+\frac{M_{vp}^{ol}}{\rho_w^- K_H}\left(p_{vp}^+-p_{vp}^-\right)+\frac{M_{vp}^{ol}R}{\rho_w^- K_H}\left(p_{vp}^+-p_{gz}^-\right)\ln\left(\frac{T^+}{T^-}\right)$$ **éq 4.2.3-6**

d'où

$$p_{vp}^+=\frac{\left(\rho_w^- K_H-M_{vp}^{ol}\left(p_{vp}^-+p_{gz}^- R\ln\left(\frac{T^+}{T^-}\right)\right)\right)}{\left(\frac{\rho_w^- K_H}{\tilde{p}_{vp}}-M_{vp}^{ol}\left(1+R\ln\left(\frac{T^+}{T^-}\right)\right)\right)}$$ **éq 4.2.3-7**

A partir de là les autres pressions se calculent facilement :

$$p_{as}^+=p_{gz}^+-p_{vp}^+$$
$$p_{ad}^+=\frac{p_{as}^+}{K_H}RT^+$$
$$p_w^+=p_{gz}^+-p_c^+-p_{ad}^+$$

On peut alors calculer les masses volumiques de la vapeur et de l'air par les relations [éq 3.2.3.2-1], [éq 3.2.3.2-2] et [éq 3.2.7-3] :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\rho_{vp}^{+}=\frac{M_{vp}^{ol}}{R}\frac{p_{vp}^{+}}{T^{+}} \quad \textbf{éq 4.2.3-8}$$

$$\rho_{as}^{+}=\frac{M_{as}^{ol}}{R}\frac{\left(p_{gz}^{+}-p_{vp}^{+}\right)}{T^{+}} \quad \textbf{éq 4.2.3-9}$$

$$\rho_{ad}^{+}=\frac{p_{ad}^{+}M_{as}^{ol}}{RT^{+}} \quad \textbf{éq 4.2.3-10}$$

La masse volumique de l'eau se trouve en intégrant sur le pas de temps l'équation [éq 3.2.3.1-1].

Ce qui donne :

$$\ln\left(\frac{\rho_{w}^{+}}{\rho_{w}^{-}}\right)=\frac{p_{gz}^{+}-p_{gz}^{-}-p_{c}^{+}+p_{c}^{-}-p_{ad}^{+}+p_{ad}^{-}}{K_{w}}-3\,\alpha_{w}\left(T^{+}-T^{-}\right) \quad \textbf{éq 4.2.3-11}$$

4.2.4 Calcul des enthalpies fluides

Les enthalpies fluides sont calculées par intégration des équations [éq 3.2.4.1-1], [éq 3.2.4.1-3], [éq 3.2.4.2-1], [éq 3.2.4.2-2].

$$h_{w}^{m^{+}}=h_{w}^{m^{-}}+C_{w}^{p}\left(T^{+}-T^{-}\right)+\frac{\left(1-3\,\alpha_{w}T^{+}\right)}{\rho_{w}^{+}}\left(p_{gz}^{+}-p_{gz}^{-}-p_{c}^{+}+p_{c}^{-}\ -p_{ad}^{+}+p_{ad}^{-}\right) \quad \textbf{éq 4.2.4-1}$$

$$h_{ad}^{m^{+}}=h_{ad}^{m^{-}}+C_{ad}^{p}\left(T^{+}-T^{-}\right) \quad \textbf{éq 4.2.4-2}$$

$$h_{vp}^{m^{+}}=h_{vp}^{m^{-}}+C_{vp}^{p}\left(T^{+}-T^{-}\right) \quad \textbf{éq 4.2.4-3}$$

$$h_{as}^{m^{+}}=h_{as}^{m^{-}}+C_{as}^{p}\left(T^{+}-T^{-}\right) \quad \textbf{éq 4.2.4-4}$$

4.2.5 Calcul des apports massiques

Les équations [éq 3.2.2-1] donnent des apports massiques nuls à l'instant 0. On écrit de façon incrémentale les équations [éq 3.2.2-1] :

$$\begin{aligned}
m_{w}^{+}&=m_{w}^{-}+\rho_{w}^{+}\left(1+\varepsilon_{V}^{+}\right)\varphi^{+}S_{lq}^{+}-\rho_{w}^{-}\left(1+\varepsilon_{V}^{-}\right)\varphi^{-}S_{lq}^{-}\\
m_{ad}^{+}&=m_{ad}^{-}+\rho_{ad}^{+}\left(1+\varepsilon_{V}^{+}\right)\varphi^{+}S_{lq}^{+}-\rho_{ad}^{-}\left(1+\varepsilon_{V}^{-}\right)\varphi^{-}S_{lq}^{-}\\
m_{as}^{+}&=m_{as}^{-}+\rho_{as}^{+}\left(1+\varepsilon_{V}^{+}\right)\varphi^{+}\left(1-S_{lq}^{+}\right)-\rho_{as}^{-}\left(1+\varepsilon_{V}^{-}\right)\varphi^{-}\left(1-S_{lq}^{-}\right)\\
m_{vp}^{+}&=m_{vp}^{-}+\rho_{vp}^{+}\left(1+\varepsilon_{V}^{+}\right)\varphi^{+}\left(1-S_{lq}^{+}\right)-\rho_{vp}^{-}\left(1+\varepsilon_{V}^{-}\right)\varphi^{-}\left(1-S_{lq}^{-}\right)
\end{aligned} \quad \textbf{éq 4.2.5-1}$$

4.2.6 Calcul de la capacité calorifique et de la chaleur Q'

On a maintenant tous les éléments pour appliquer à la fin du pas de temps la formule [éq 3.2.4.3-5] :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$C_{\sigma}^{0^+}=(1-\varphi^+)\rho_s C_{\sigma}^{s}+S_{lq}^{+}\varphi^{+}(\rho_w^{+}C_w^{p}+\rho_{ad}^{+}C_{ad}^{p})+(1-S_{lq}^{+})\varphi^{+}\left(\rho_{vp}^{+}C_{vp}^{p}+\rho_{as}^{+}C_{as}^{p}\right) \quad \textbf{éq 4.2.6-1}$$

On utilise bien sûr [éq 3.2.4.3-4] qui donne :

$$C_{\varepsilon}^{0+}=C_{\sigma}^{0+}-T^{+}(\boldsymbol{C_0}:\boldsymbol{\alpha_0}):\boldsymbol{\alpha_0} \quad \textbf{éq 4.2.6-2}$$

Remarque :

Dans le cas isotrope [éq 4.2.6-2] devient :

$$C_{\varepsilon}^{0+}=C_{\sigma}^{0+}-9T^{+}K_0\alpha_0^2$$

Bien que la variation de chaleur $\delta Q'$ ne soit pas une différentielle totale, il est néanmoins licite de l'intégrer sur le pas de temps et on obtient en intégrant [éq 3.2.4.3-1].

$$Q'^{+}=Q'^{-}+(\boldsymbol{C_0}:\boldsymbol{\alpha_0}):\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{+}-\boldsymbol{\varepsilon}^{-}\right)T^{1/2}+3\alpha_{lq}^{m^+}T^{1/2}\left(p_c^{+}-p_c^{-}\right)-\left(3\alpha_{gz}^{m^+}+3\alpha_{lq}^{m^+}\right)T^{1/2}\left(p_{gz}^{+}-p_{gz}^{-}\right)+C_{\varepsilon}^{0^+}\left(T^{+}-T^{-}\right) \quad \textbf{éq 4.2.6-3}$$

où nous avons noté : $T^{1/2}=\dfrac{T^{+}+T^{-}}{2}$. Nous avons choisi ici une formule de « point milieu » pour la variable température.

Remarque :

Dans le cas isotrope [éq 4.2.6-3] devient :

$$Q'^{+}=Q'^{-}+(3K_0\alpha_0)\left(\varepsilon_V^{+}-\varepsilon_V^{-}\right)T^{1/2}+3\alpha_{lq}^{m^+}T^{1/2}\left(p_c^{+}-p_c^{-}\right)-\left(3\alpha_{gz}^{m^+}+3\alpha_{lq}^{m^+}\right)T^{1/2}\left(p_{gz}^{+}-p_{gz}^{-}\right)+C_{\varepsilon}^{0^+}\left(T^{+}-T^{-}\right)$$

4.2.7 Calcul des contraintes mécaniques

Le calcul des contraintes effectives se fait en invoquant les lois incrémentales de mécanique choisies par l'utilisateur. On intègre sur le pas de temps [éq 3.2.8-2] et on a :

$$\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}^{+}=\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}^{-}-\boldsymbol{B}\left(p_{gz}^{+}-p_{gz}^{-}\right)+\boldsymbol{B}\,S_{lq}^{+}\left(p_c^{+}-p_c^{-}\right) \quad \textbf{éq 4.2.7-1}$$

Dans le cas isotrope on a $\boldsymbol{B}=b.\mathbf{1}$, $\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}^{+}=\sigma_p^{+}.\mathbf{1}$ et $\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}^{-}=\sigma_p^{-}.\mathbf{1}$

4.2.8 Calcul des flux hydriques et thermiques

Il faut bien sûr calculer tous les coefficients de diffusion :

Les coefficients de Fick $F_{vp}^{+}(P_{vp}^{+},P_{gz}^{+},T^{+},S^{+})$ et $F_{ad}^{+}(P_{ad}^{+},P_{lq}^{+},T^{+},S^{+})$

Le tenseur de diffusivité thermique $\boldsymbol{\lambda}^{\boldsymbol{T}+}=\lambda_{\varphi}^{T}(\varphi^{+}).\lambda_{S}^{T}(S_{lq}^{+}).\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{T}}^{\boldsymbol{T}}(T^{+})+\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{cte}}^{\boldsymbol{T}}$

Les tenseurs de perméabilité et conductivité hydraulique :

$$\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}^+}=\frac{\boldsymbol{K}^{\mathbf{int}}(\varphi^{+}).k_w^{rel}\left(S_{lq}^{+}\right)}{\mu_w\left(T^{+}\right)} \qquad \boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}^+}=\frac{\boldsymbol{K}^{\mathbf{int}}(\varphi^{+}).k_{gz}^{rel}\left(S_{lq}^{+},p_{gz}^{+}\right)}{\mu_{gz}\left(T^{+}\right)}$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Dans le cas isotrope, $\boldsymbol{K}^{\mathbf{int}}=K^{\mathrm{int}}.\mathbf{1}$, $\boldsymbol{\lambda}^{\boldsymbol{T}}=\lambda^{T}.\mathbf{1}$, $\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{T}}^{\boldsymbol{T}}(T)=\lambda_{T}^{T}(T).\mathbf{1}$ et $\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{cte}}^{\boldsymbol{T}}=\lambda_{cte}^{T}.\mathbf{1}$.

Les concentrations en vapeur et air dissous : $C_{vp}^{+}=\dfrac{p_{vp}^{+}}{p_{gz}^{+}}$ et $C_{ad}^{+}=\rho_{ad}^{+}$

Il ne reste plus alors qu'à appliquer les formules [éq 3.2.5.1-1], [éq 3.2.5.2-15], [éq 3.2.5.2-16], [éq 3.2.5.2-17] et [éq 3.2.5.2-18] pour trouver :

$$\mathbf{q}^{+}=-\boldsymbol{\lambda}^{\boldsymbol{T}^{+}}\nabla T^{+} \qquad \textbf{éq 4.2.8-1}$$

$$\frac{M_{as}^{+}}{\rho_{as}^{+}}=\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}^{+}}\left[-\nabla p_{gz}^{+}+\left(\rho_{as}^{+}+\rho_{vp}^{+}\right)F^{m}\right]+C_{vp}^{+}F_{vp}^{+}\nabla C_{vp}^{+} \qquad \textbf{éq 4.2.8-2}$$

$$\frac{\mathbf{M}_{vp}^{+}}{\rho_{vp}^{+}}=\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}^{+}}\left[-\nabla p_{gz}^{+}+\left(\rho_{as}^{+}+\rho_{vp}^{+}\right)\mathbf{F}^{m}\right]-\left(1-C_{vp}^{+}\right)F_{vp}^{+}\nabla C_{vp}^{+} \qquad \textbf{éq 4.2.8-3}$$

$$\frac{\mathbf{M}_{w}^{+}}{\rho_{w}^{+}}=\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}^{+}}\left[-\nabla p_{lq}^{+}+\left(\rho_{w}^{+}+\rho_{ad}^{+}\right)\mathbf{F}^{m}\right] \qquad \textbf{éq 4.2.8-4}$$

$$\mathbf{M}_{ad}^{+}=\rho_{ad}^{+}\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}}\left[-\nabla p_{lq}+\left(\rho_{w}^{+}+\rho_{ad}^{+}\right)\mathbf{F}^{m}\right]-F_{ad}^{+}\nabla C_{ad}^{+} \qquad \textbf{éq 4.2.8-5}$$

Dans les cas isotrope, $\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}}=\lambda_{lq}^{H}.\mathbf{1}$ et $\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}}=\lambda_{gz}^{H}.\mathbf{1}$

5 Calcul des dérivées des contraintes généralisées

Dans ce chapitre, nous donnons les expressions des dérivées des contraintes généralisées par rapport aux déformations généralisées au sens du document [R7.01.10] [4], c'est-à-dire les termes qui sont calculés quand les lois de comportements THM sont appelées pour l'option RIGI_MECA_TANG au sens du document [R5.03.01] [3].
Afin de ne pas alourdir l'exposé, nous donnons l'expression des différentielles des contraintes généralisées, sachant que les dérivées partielles s'en déduisent directement.

5.1 Dérivées des contraintes

Le calcul de la différentielle des contraintes effectives est laissé à la charge de la loi de comportement purement mécanique, que nous ne décrivons pas dans ce document. La différentielle de la contrainte σ_{p} est donnée directement par l'expression [éq 3.2.8-2].

5.2 Dérivées des apports massiques

En différenciant [éq 3.2.2-1], on a :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\frac{dm_w}{\rho_w}=\frac{d\,\rho_w}{\rho_w}\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi S_{lq}+d\,\varepsilon_V\varphi S_{lq}+\left(1+\varepsilon_V\right)d\,\varphi S_{lq}+\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi\, dS_{lq}$$
$$\frac{dm_{ad}}{\rho_{ad}}=\frac{d\,\rho_{ad}}{\rho_{ad}}\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi S_{lq}+d\,\varepsilon_V\varphi S_{lq}+\left(1+\varepsilon_V\right)d\,\varphi S_{lq}+\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi\, dS_{lq}$$
$$\frac{dm_{as}}{\rho_{as}}=\frac{d\,\rho_{as}}{\rho_{as}}\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi\left(1-S_{lq}\right)+d\,\varepsilon_V\varphi\left(1-S_{lq}\right)+\left(1+\varepsilon_V\right)d\,\varphi\left(1-S_{lq}\right)-\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi\, dS_{lq}$$
$$\frac{dm_{vp}}{\rho_{vp}}=\frac{d\,\rho_{vp}}{\rho_{vp}}\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi\left(1-S_{lq}\right)+d\,\varepsilon_V\varphi\left(1-S_{lq}\right)+\left(1+\varepsilon_V\right)d\,\varphi\left(1-S_{lq}\right)-\left(1+\varepsilon_V\right)\varphi\, dS_{lq}$$

éq 5.2-1

5.2.1 Cas sans air dissous

En tenant compte de [éq 3.2.1-1] et de [éq 3.2.3.1-1], [éq 3.2.3.2-1], [éq 3.2.3.2-2] et en supposant $1+\varepsilon_V\approx 1$ on trouve :

$$\left.\begin{aligned}
\frac{dm_w}{\rho_w}&=S_{lq}\,\boldsymbol{B}:\boldsymbol{d\,\varepsilon}+\left(\varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial P_c}-\frac{S_{lq}\varphi}{K_w}-\frac{S_{lq}^2}{M_\varphi}\right)dp_c+S_{lq}\left(\frac{\varphi}{K_w}+\frac{1}{M_\varphi}\right)dp_{gz}-3\,\alpha_w^m dT\\
\frac{dm_{vp}}{\rho_{vp}}&=\left(1-S_{lq}\right)\boldsymbol{B}:\boldsymbol{d\,\varepsilon}+\left(-\varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial P_c}-\frac{\left(1-S_{lq}\right)S_{lq}}{M_\varphi}\right)dp_c+\left(\frac{\left(1-S_{lq}\right)}{M_\varphi}\right)dp_{gz}+\varphi\left(1-S_{lq}\right)\frac{dp_{vp}}{p_{vp}}-3\,\alpha_{vp}^m dT\\
\frac{dm_{as}}{\rho_{as}}&=\left(1-S_{lq}\right)\boldsymbol{B}:\boldsymbol{d\,\varepsilon}+\left(-\varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial P_c}-\frac{\left(1-S_{lq}\right)S_{lq}}{M_\varphi}\right)dp_c+\left(\frac{\left(1-S_{lq}\right)}{M_\varphi}\right)dp_{gz}+\varphi\left(1-S_{lq}\right)\frac{dp_{as}}{p_{as}}-3\,\alpha_{as}^m dT
\end{aligned}\right\}$$

éq 5.2.1-1

On voit apparaître la dérivée de la saturation en liquide par rapport à la pression capillaire, quantité qui joue un rôle essentiel.

L'expression [éq 3.2.6-4] de la différentielle de la pression de vapeur permet aussi de calculer la pression d'air sec :

$$dp_{as}=\left(1-\frac{M_{vp}^{ol}p_{vp}}{RT\,\rho_w}\right)dp_{gz}+\frac{M_{vp}^{ol}p_{vp}}{RT\,\rho_w}dp_c-\frac{M_{vp}^{ol}p_{vp}}{RT}\left(h_{vp}^m-h_w^m\right)\frac{dT}{T}$$

éq 5.2.1-2

On reporte [éq 5.2.1-2] et [éq 3.2.6-4] dans [éq 5.2.1-1] et on trouve :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\frac{dm_w}{\rho_w} = S_{lq}\boldsymbol{B}:\boldsymbol{d\varepsilon} + \left(\varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial P_c} - \frac{S_{lq}\varphi}{K_w} - \frac{S_{lq}^2}{M_\varphi}\right)dp_c + S_{lq}\left(\frac{\varphi}{K_w} + \frac{1}{M_\varphi}\right)dp_{gz} - 3\alpha_w^m dT \quad \textbf{éq 5.2.1-3}$$

$$\begin{aligned}\frac{dm_{vp}}{\rho_{vp}} &= (1-S_{lq})\boldsymbol{B}:\boldsymbol{d\varepsilon} + \left(-\varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial p_c} - \frac{(1-S_{lq})S_{lq}}{M_\varphi} - \frac{\varphi(1-S_{lq})}{p_{vp}}\frac{\rho_{vp}}{\rho_{lq}}\right)dp_c \\ &+ \left(\frac{(1-S_{lq})}{M_\varphi} - \frac{\varphi(1-S_{lq})}{p_{vp}}\frac{\rho_{vp}}{\rho_{lq}}\right)dp_{gz} \\ &+ \left(-3\alpha_{vp}^m + \frac{\rho_{vp}\varphi(1-S_{lq})(h_{vp}^m - h_{lq}^m)}{p_{vp}T}\right)dT\end{aligned} \quad \textbf{éq 5.2.1-4}$$

$$\begin{aligned}\frac{dm_{as}}{\rho_{as}} &= (1-S_{lq})\boldsymbol{B}:\boldsymbol{d\varepsilon} + \left(-\varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial p_c} - \frac{(1-S_{lq})S_{lq}}{M_\varphi} - \frac{\varphi(1-S_{lq})}{p_{as}}\frac{\rho_{vp}}{\rho_{lq}}\right)dp_c \\ &+ \left(\frac{(1-S_{lq})}{M_\varphi} - \frac{\varphi(1-S_{lq})}{p_{as}}\frac{\rho_{lq}-\rho_{vp}}{\rho_{lq}}\right)dp_{gz} + \left(-3\alpha_{as}^m + \frac{\rho_{vp}\varphi(1-S_{lq})(h_{vp}^m - h_{lq}^m)}{p_{as}T}\right)dT\end{aligned} \quad \textbf{éq 5.2.1-5}$$

5.2.2 Cas avec air dissous

Comme précédemment, en tenant compte de [éq 3.2.1-1] et de [éq 3.2.3.1-1], [éq 3.2.3.2-1], [éq 3.2.3.2-2], [éq 3.2.7.3] et en supposant $1+\varepsilon_V \approx 1$ on trouve :

$$\begin{aligned}\frac{dm_w}{\rho_w} &= bS_{lq}\,d\varepsilon_V + \left(\frac{S_{lq}\varphi}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial P_c} - \frac{S_{lq^2}(b-\varphi)}{K_s} + \varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial P_c}\right)dp_c + S_{lq}\left(\frac{\varphi}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial P_{gz}} + \frac{(b-\varphi)}{K_s}\right)dp_{gz} + \\ &\left(\frac{\varphi S_{lq}}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial T} - 3\alpha_w^m\right)dT\end{aligned} \quad \textbf{éq 5.2.2-1}$$

$$\begin{aligned}\frac{dm_{ad}}{\rho_{ad}} &= bS_{lq}\,d\varepsilon_V + \left(\frac{S_{lq}\varphi M_{as}^{ol}}{\rho_{ad}K_H}\frac{\partial p_{as}}{\partial P_c} - \frac{S_{lq^2}(b-\varphi)}{K_s} + \varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial P_c}\right)dp_c + \\ &S_{lq}\left(\frac{\varphi M_{as}^{ol}}{\rho_{ad}K_H}\frac{\partial p_{as}}{\partial P_{gz}} + \frac{(b-\varphi)}{K_s}\right)dp_{gz} + S_{lq}\left(\frac{\varphi M_{as}^{ol}}{\rho_{ad}K_H}\frac{\partial p_{as}}{\partial T} - 3\alpha_0(b-\varphi)\right)dT\end{aligned} \quad \textbf{éq 5.2.2-2}$$

$$\begin{aligned}\frac{dm_{vp}}{\rho_{vp}} &= b(1-S_{lq})\,d\varepsilon_V + \left(-\varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial P_c} - \frac{(1-S_{lq})S_{lq}(b-\varphi)}{K_s} - \frac{\varphi(1-S_{lq})}{p_{vp}}\frac{\rho_{vp}}{\rho_{lq}}\right)dp_c + \\ &\left(\frac{(b-\varphi)(1-S_{lq})}{K_s} + \frac{\varphi(1-S_{lq})}{p_{vp}}\frac{\rho_{vp}}{\rho_{lq}}\right)dp_{gz} + \left(-3\alpha_{vp}^m + \frac{\varphi\rho_{vp}(1-S_{lq})(h_{vp}^m - h_{lq}^m)}{p_{vp}T}\right)dT\end{aligned} \quad \textbf{éq 5.2.2-3}$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\frac{dm_{as}}{\rho_{as}} = b(1-S_{lq})d\varepsilon_V + \left(-\varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial P_c} - \frac{(1-S_{lq})S_{lq}(b-\varphi)}{K_s} + \frac{\varphi(1-S_{lq})}{p_{as}}\frac{\rho_{vp}}{\rho_{lq}}\right)dp_c + \left(\frac{(b-\varphi)(1-S_{lq})}{K_s} + \frac{\varphi(1-S_{lq})}{p_{as}}\frac{\rho_{lq}-\rho_{vp}}{\rho_{lq}}\right)dp_{gz} + \left(-3\alpha_{vp}^m - \frac{\varphi\,\rho_{vp}(1-S_{lq})(h_{vp}^m - h_{lq}^m)}{p_{as}T}\right)dT \quad \text{éq 5.2.2-4}$$

Les dérivées partielles sont données en [§ Annexe 3].

5.3 Dérivées des enthalpies et de la chaleur Q'

Là encore, nous ne faisons que rappeler des expressions déjà fournies au chapitre 2 :

5.3.1 Cas sans air dissous

$$dh_w^m = \left(1-3\alpha_w T\right)\frac{dp_{gz}-dp_c}{\rho_w} + C_w^p dT$$
$$dh_{vp}^m = C_{vp}^p dT$$
$$dh_{as}^m = C_{as}^p dT$$
$$\delta Q' = 3\alpha_0 K_0 T d\varepsilon_V + 3\alpha_{lq}^m T dp_c - \left(3\alpha_{gz}^m + 3\alpha_{lq}^m\right)T dp_{gz} + C_\varepsilon^0 dT$$

5.3.2 Cas avec air dissous

Comme précédemment, en tenant compte de [éq 3.2.1-1] et de [éq 3.2.3.1-1], [éq 3.2.3.2-1], [éq 3.2.3.2-2], [éq 3.2.7.3] et en supposant $1+\varepsilon_V \approx 1$ on trouve :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\frac{dm_w}{\rho_w}=S_{lq}\,\boldsymbol{B}:\boldsymbol{d\varepsilon}+\left(\frac{S_{lq}\varphi}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial P_c}-\frac{S_{lq}^2}{M_\varphi}+\varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial P_c}\right)dp_c+S_{lq}\left(\frac{\varphi}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial P_{gz}}+\frac{1}{M_\varphi}\right)dp_{gz}+\left(\frac{\varphi S_{lq}}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial T}-3\alpha_w^m\right)dT$$

éq 5.2.2-1

$$\frac{dm_{ad}}{\rho_{ad}}=S_{lq}\,\boldsymbol{B}:\boldsymbol{d\varepsilon}+\left(\frac{S_{lq}\varphi M_{as}^{ol}}{\rho_{ad}K_H}\frac{\partial p_{as}}{\partial P_c}-\frac{S_{lq}^2}{M_\varphi}+\varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial P_c}\right)dp_c+S_{lq}\left(\frac{\varphi M_{as}^{ol}}{\rho_{ad}K_H}\frac{\partial p_{as}}{\partial P_{gz}}+\frac{1}{M_\varphi}\right)dp_{gz}$$
$$+S_{lq}\left(\frac{\varphi M_{as}^{ol}}{\rho_{ad}K_H}\frac{\partial p_{as}}{\partial T}-3\alpha_\varphi\right)dT$$

éq 5.2.2-2

$$\frac{dm_{vp}}{\rho_{vp}}=(1-S_{lq})\,\boldsymbol{B}:\boldsymbol{d\varepsilon}+\left(-\varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial P_c}-\frac{(1-S_{lq})S_{lq}}{M_\varphi}-\frac{\varphi(1-S_{lq})}{p_{vp}}\frac{\rho_{vp}}{\rho_{lq}}\right)dp_c+\left(\frac{(1-S_{lq})}{M_\varphi}+\frac{\varphi(1-S_{lq})}{p_{vp}}\frac{\rho_{vp}}{\rho_{lq}}\right)dp_{gz}+$$
$$+\left(-3\alpha_{vp}^m+\frac{\varphi\rho_{vp}(1-S_{lq})(h_{vp}^m-h_{lq}^m)}{p_{vp}T}\right)dT$$

éq 5.2.2-3

$$\frac{dm_{as}}{\rho_{as}}=(1-S_{lq})\,\boldsymbol{B}:\boldsymbol{d\varepsilon}+\left(-\varphi\frac{\partial S_{lq}}{\partial P_c}-\frac{(1-S_{lq})S_{lq}}{M_\varphi}+\frac{\varphi(1-S_{lq})}{p_{as}}\frac{\rho_{vp}}{\rho_{lq}}\right)dp_c+$$
$$\left(\frac{((1-S_{lq})}{M_\varphi}+\frac{\varphi(1-S_{lq})}{p_{as}}\frac{\rho_{lq}-\rho_{vp}}{\rho_{lq}}\right)dp_{gz}+\left(-3\alpha_{vp}^m-\frac{\varphi\rho_{vp}(1-S_{lq})(h_{vp}^m-h_{lq}^m)}{p_{as}T}\right)dT$$

éq 5.2.2-4

Les dérivées partielles sont données en [§Annexe 3].

5.4 Dérivées des enthalpies et de la chaleur Q'

Là encore, nous ne faisons que rappeler des expressions déjà fournies au chapitre 2 :

5.4.1 Cas sans air dissous

$$dh_w^m=\left(1-3\alpha_w T\right)\frac{dp_{gz}-dp_c}{\rho_w}+C_w^p\,dT$$
$$dh_{vp}^m=C_{vp}^p\,dT$$
$$dh_{as}^m=C_{as}^p\,dT$$
$$\delta Q'=(\boldsymbol{C_0}:\boldsymbol{\alpha_0}:\boldsymbol{d\varepsilon})\,T+3\alpha_{lq}^m T dp_c-\left(3\alpha_{gz}^m+3\alpha_{lq}^m\right)T dp_{gz}+C_\varepsilon^0\,dT$$

5.4.2 Cas avec air dissous

$$dh_w^m=\left(1-3\alpha_w T\right)\frac{dp_{gz}-dp_c-dp_{ad}}{\rho_w}+C_w^p\,dT$$
$$=\left(\frac{1-3\alpha_w T}{\rho_w}\right)\left[\left(1-\frac{\partial p_{ad}}{\partial p_{gz}}\right)dp_{gz}-\left(1+\frac{\partial p_{ad}}{\partial p_c}\right)dp_c\right]+\left(C_w^p-\frac{1-3\alpha_w T}{\rho_w}\frac{\partial p_{ad}}{\partial T}\right)dT$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$dh_{ad}^{m} = C_{ad}^{p}\, dT$$
$$dh_{vp}^{m} = C_{vp}^{p}\, dT$$
$$dh_{as}^{m} = C_{as}^{p}\, dT$$
$$\delta Q' = (\boldsymbol{C_0} : \boldsymbol{\alpha_0} : \boldsymbol{d\,\varepsilon})\, T + 3\,\alpha_{lq}^{m}\, T dp_c - \left(3\,\alpha_{gz}^{m} + 3\,\alpha_{lq}^{m}\right) T dp_{gz} + C_{\varepsilon}^{0}\, dT$$

5.5 Dérivées du flux de chaleur

On part de [éq 3.2.5.1-1] et de [éq 3.2.5.1-2].

En différenciant [éq 3.2.5.1-2] et en utilisant [éq 3.2.1-1], on trouve :

$$\begin{aligned} d\lambda^{T} &= \lambda_{\varphi}^{T}{}'(\varphi).\lambda_{S}^{T}(S_{lq}).\boldsymbol{\lambda_T^T}(\boldsymbol{T}).\boldsymbol{B}:\boldsymbol{d\,\varepsilon} \\ &+ \frac{1}{M_{\varphi}}\lambda_{\varphi}^{T}{}'(\varphi).\lambda_{S}^{T}(S_{lq}).\boldsymbol{\lambda_T^T}(\boldsymbol{T})\, dp_{gz} \\ &+ \left(\lambda_{\varphi}^{T}(\varphi).\lambda_{S}^{T}{}'(S_{lq}).\boldsymbol{\lambda_T^T}(\boldsymbol{T}).\frac{\partial S_{lq}}{\partial p_c} - S_{lq}\frac{1}{M_{\varphi}}\lambda_{\varphi}^{T}{}'(\varphi).\lambda_{S}^{T}(S_{lq}).\boldsymbol{\lambda_T^T}(\boldsymbol{T})\right) dp_c \\ &+ \left(\lambda_{\varphi}^{T}(\varphi).\lambda_{S}^{T}(S_{lq}).\boldsymbol{\lambda_T^T}'(\boldsymbol{T}) - 3\,\alpha_{\varphi}\lambda_{\varphi}^{T}{}'(\varphi).\lambda_{S}^{T}(S_{lq}).\boldsymbol{\lambda_T^T}(\boldsymbol{T})\right) dT \end{aligned}$$

Soit finalement :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{dq} &= -\lambda_{\varphi}^{T}{}'(\varphi).\lambda_{S}^{T}(S_{lq}).\boldsymbol{\lambda_T^T}(\boldsymbol{T}).\boldsymbol{B}:\boldsymbol{d\,\varepsilon}.\boldsymbol{\nabla} T \\ &- \frac{1}{M_{\varphi}}\lambda_{\varphi}^{T}{}'(\varphi).\lambda_{S}^{T}(S_{lq}).\boldsymbol{\lambda_T^T}(\boldsymbol{T}).\boldsymbol{\nabla} T\, \mathrm{dp}_{gz} \\ &- \left(\lambda_{\varphi}^{T}(\varphi).\lambda_{S}^{T}{}'(S_{lq}).\boldsymbol{\lambda_T^T}(\boldsymbol{T}).\frac{\partial S_{lq}}{\partial p_c} - S_{lq}\frac{1}{M_{\varphi}}\lambda_{\varphi}^{T}{}'(\varphi).\lambda_{S}^{T}(S_{lq}).\boldsymbol{\lambda_T^T}(\boldsymbol{T})\right).\boldsymbol{\nabla} T\, \mathrm{dp}_c \\ &- \left(\lambda_{\varphi}^{T}(\varphi).\lambda_{S}^{T}(S_{lq}).\boldsymbol{\lambda_T^T}'(\boldsymbol{T}) - 3\,\alpha_{\varphi}\lambda_{\varphi}^{T}{}'(\varphi).\lambda_{S}^{T}(S_{lq}).\boldsymbol{\lambda_T^T}(\boldsymbol{T})\right).\boldsymbol{\nabla} T\, \mathrm{dT} \end{aligned}$$

éq 5.4-1

5.6 Dérivée des flux hydriques

Il faut bien sûr repartir des équations [éq 3.2.5.2-15], [éq 3.2.5.2-16], [éq 3.2.5.2-17] et [éq 3.2.5.2-18] que l'on différencie.

5.6.1 Cas sans air dissous

$$\begin{aligned} d\,\mathbf{M}_{as} &= \left(\frac{\mathbf{M}_{as}}{\rho_{as}} + \rho_{as}\boldsymbol{\lambda_{gz}^H}.\boldsymbol{F}^{\mathbf{m}}\right) d\,\rho_{as} + (\mathbf{M}_{as} - \rho_{as} C_{vp} F_{vp} \boldsymbol{\nabla} C_{vp}).[\boldsymbol{\lambda_{lq}^H}]^{-1}\, d\,\boldsymbol{\lambda_{gz}^H} \\ &+ \rho_{as}\boldsymbol{\lambda_{gz}^H}\left(-d\,\boldsymbol{\nabla}\, p_{gz} + d\,\rho_{vp}\mathbf{F}^{\mathbf{m}}\right) \\ &+ \rho_{as} C_{vp}\left(\frac{\partial F_{vp}}{\partial T}\, dT + \frac{\partial F_{vp}}{\partial p_{gz}}\, p_{gz}\right)\boldsymbol{\nabla} C_{vp} + \rho_{as} dC_{vp} F_{vp}\boldsymbol{\nabla} C_{vp} + \rho_{as} C_{vp} F_{vp} d\,\boldsymbol{\nabla} C_{vp} \end{aligned}$$

éq 5.5.1-1

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$d\,\mathbf{M}_{vp}=\left(\frac{\mathbf{M}_{vp}}{\rho_{vp}}+\rho_{vp}\boldsymbol{\lambda}_{gz}^{H}.\boldsymbol{F}^{m}\right)d\,\rho_{vp}+(\mathbf{M}_{vp}+\rho_{vp}(1-C_{vp})F_{vp}\nabla C_{vp}).[\boldsymbol{\lambda}_{gz}^{H}]^{-1}.d\,\boldsymbol{\lambda}_{gz}^{H}$$
$$+\rho_{vp}\boldsymbol{\lambda}_{gz}^{H}(-d\nabla p_{gz}+d\,\rho_{as}\mathbf{F}^{m})$$
$$-(1-C_{vp})\rho_{vp}\left(\frac{\partial F_{vp}}{\partial T}dT+\frac{\partial F_{vp}}{\partial p_{gz}}p_{gz}\right)\nabla C_{vp}+\rho_{vp}dC_{vp}F_{vp}\nabla C_{vp}-\rho_{vp}(1-C_{vp})F_{vp}d\nabla C_{vp}$$

éq 5.5.1-2

$$d\,\mathbf{M}_{w}=\left(\frac{\mathbf{M}_{\mathbf{w}}}{\rho_{w}}+\rho_{w}\boldsymbol{\lambda}_{lq}^{H}.\boldsymbol{F}^{m}\right)d\,\rho_{w}+[\boldsymbol{\lambda}_{lq}^{H}]^{-1}.\mathbf{M}_{\mathbf{w}}.d\,\boldsymbol{\lambda}_{lq}^{H}$$
$$-\rho_{w}\boldsymbol{\lambda}_{lq}^{H}(d\nabla p_{gz}-d\nabla p_{c})$$

éq 5.5.1-3

Afin d'expliciter complètement ces différentielles, il faut connaître les différentielles des masses volumiques des fluides, ainsi que les différentielles de $C_{vp}=\frac{p_{vp}}{p_{gz}}$ et de son gradient. Connaissant [éq 3.2.6-4], on peut alors calculer la différentielle de la pression d'air sec :

$$dp_{as}=dp_{gz}-dp_{vp}=\frac{\rho_{w}-\rho_{vp}}{\rho_{w}}dp_{gz}+\frac{\rho_{vp}}{\rho_{w}}dp_{c}-\rho_{vp}\left(h_{vp}^{m}-h_{w}^{m}\right)\frac{dT}{T}$$

éq 5.5.1-4

En dérivant la relation des gaz parfaits on a : $\frac{d\,\rho_{as}}{\rho_{as}}=\frac{dp_{as}}{p_{as}}-\frac{dT}{T}$ et $\frac{d\,\rho_{vp}}{\rho_{vp}}=\frac{dp_{vp}}{p_{vp}}-\frac{dT}{T}$, ce qui, en utilisant [éq 3.2.6-4] et [éq 5.5.1-4] donne :

$$d\,\rho_{vp}=\frac{\rho_{vp}^{2}}{\rho_{w}p_{vp}}dp_{gz}-\frac{\rho_{vp}^{2}}{\rho_{w}p_{vp}}dp_{c}+\left(\frac{\rho_{vp}^{2}\left(h_{vp}^{m}-h_{w}^{m}\right)}{Tp_{vp}}-\frac{\rho_{vp}}{T}\right)dT$$

éq 5.5.1-5

$$d\,\rho_{as}=\frac{\rho_{as}}{p_{as}}\frac{\rho_{w}-\rho_{vp}}{\rho_{w}}dp_{gz}+\frac{\rho_{as}}{p_{as}}\frac{\rho_{vp}}{\rho_{w}}dp_{c}+\left(-\frac{\rho_{as}\rho_{vp}\left(h_{vp}^{m}-h_{w}^{m}\right)}{Tp_{as}}-\frac{\rho_{as}}{T}\right)dT$$

éq 5.5.1-6

[éq 3.2.6-4] permet d'exprimer le gradient de la pression de vapeur :

$$\nabla p_{vp}=\frac{\rho_{vp}}{\rho_{lq}}(\nabla p_{gz}-\nabla p_{c})+\rho_{vp}(h_{vp}^{m}-h_{lq}^{m})\frac{\nabla T}{T}$$

éq 5.5.1-7

En différentiant [éq 5.5.1-7] on trouve :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$d\nabla p_{vp}=\frac{\rho_{vp}}{\rho_w}\left(d\nabla p_{gz}-d\nabla p_c\right)+\left(\frac{d\rho_{vp}}{\rho_w}-\frac{\rho_{vp}}{\rho_{w^2}}d\rho_w\right)\left(\nabla p_{gz}-\nabla p_c\right)+\rho_{vp}\left(\frac{h_{vp}^m-h_w^m}{T}\right)d\nabla T$$
$$+d\left(\rho_{vp}\left(\frac{h_{vp}^m-h_w^m}{T}\right)\right)\nabla T$$

éq 5.5.1-8

Le dernier terme de [éq 5.5.1-8] s'écrit :

$$d\left(\rho_{vp}\left(\frac{h_{vp}^m-h_w^m}{T}\right)\right)\nabla T=\left(\frac{h_{vp}^m-h_w^m}{T}\right)\nabla T d\rho_{vp}+\frac{\rho_{vp}}{T}\nabla T\left(dh_{vp}^m-dh_w^m\right)-\rho_{vp}\left(h_{vp}^m-h_w^m\right)\nabla T\frac{dT}{T^2}$$ **éq 5.5.1-9**

Connaissant les différentielles de la pression de vapeur et de son gradient, les expressions des différentielles de C_{vp} et de son gradient sont faciles à calculer :

$dC_{vp}=\frac{dp_{vp}}{p_{gz}}-\frac{p_{vp}}{p_{gz}^2}dp_{gz}$ qui donne : $\nabla C_{vp}=\frac{\nabla p_{vp}}{p_{gz}}-\frac{p_{vp}}{p_{gz}^2}\nabla p_{gz}$ et que l'on différencie en :

$$d\nabla C_{vp}=d\left[\frac{\nabla p_{vp}}{p_{gz}}-\frac{p_{vp}}{p_{gz}^2}\nabla p_{gz}\right]=\frac{d\nabla p_{vp}}{p_{gz}}-\frac{\nabla p_{gz}}{p_{gz}^2}dp_{vp}+\left(2\frac{p_{vp}}{p_{gz}^3}\nabla p_{gz}-\frac{\nabla p_{vp}}{p_{gz}^2}\right)dp_{gz}-\frac{p_{vp}}{p_{gz}^2}d\nabla p_{gz}$$

dp_{vp} est donné par [éq 3.2.6-4] et $d\nabla p_{vp}$ par [éq 5.5.1-8].

5.6.2 Cas avec air dissous

$$d\mathbf{M}_{as}=\left(\frac{\mathbf{M}_{as}}{\rho_{as}}+\rho_{as}\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}}.\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{m}}\right)d\rho_{as}+\left(\mathbf{M}_{as}-\rho_{as}C_{vp}F_{vp}\nabla C_{vp}\right).\left[\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}}\right]^{-1}.d\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}}$$
$$+\rho_{as}\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}}\left(-d\nabla p_{gz}+d\rho_{vp}\mathbf{F}^m\right)$$ **éq 5.5.2-1**
$$+\rho_{as}C_{vp}\left(\frac{\partial F_{vp}}{\partial T}dT+\frac{\partial F_{vp}}{\partial p_{gz}}dp_{gz}\right)\nabla C_{vp}+\rho_{as}dC_{vp}F_{vp}\nabla C_{vp}+\rho_{as}C_{vp}F_{vp}d\nabla C_{vp}$$

$$d\mathbf{M}_{vp}=\left(\frac{\mathbf{M}_{vp}}{\rho_{vp}}+\rho_{vp}\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}}.\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{m}}\right)d\rho_{vp}+\left(\mathbf{M}_{vp}+\rho_{vp}\left(1-C_{vp}\right)F_{vp}\nabla C_{vp}\right).\left[\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}}\right]^{-1}.d\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}}$$
$$+\rho_{vp}\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{gz}}^{\boldsymbol{H}}\left(-d\nabla p_{gz}+d\rho_{as}\mathbf{F}^m\right)$$ **éq 5.5.2-2**
$$-\left(1-C_{vp}\right)\rho_{vp}\left(\frac{\partial F_{vp}}{\partial T}dT+\frac{\partial F_{vp}}{\partial p_{gz}}dp_{gz}\right)\nabla C_{vp}+\rho_{vp}dC_{vp}F_{vp}\nabla C_{vp}-\rho_{vp}(1-C_{vp})F_{vp}d\nabla C_{vp}$$

$$d\mathbf{M}_w=\left(\frac{\mathbf{M}_w}{\rho_w}+\rho_w\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}}.\mathbf{F}^{\boldsymbol{m}}\right)d\rho_w+\mathbf{M}_w.\left[\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}}\right]^{-1}.d\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}}+\rho_w\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}}\left(-d\nabla p_{lq}+d\rho_{ad}\mathbf{F}^m\right)$$ **éq 5.5.2-3**

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$d\,\mathbf{M}_{ad}=\left(-\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}}.\nabla\,p_{lq}+\rho_{lq}\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}}.\mathbf{F}^{\boldsymbol{m}}\right)d\,\rho_{ad}+\rho_{ad}\left(-\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}}.(\nabla\,p_{lq}+\rho_{lq}\mathbf{F}^{m})\right).d\,\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}}$$
$$+\rho_{ad}\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{lq}}^{\boldsymbol{H}}.\left(-d\,\nabla\,p_{lq}+d\,\rho_{w}\mathbf{F}^{m}\right)$$
$$-\left(\frac{\partial F_{ad}}{\partial T}dT+\frac{\partial F_{ad}}{\partial p_c}dp_c\right)\nabla C_{ad}-F_{ad}\,d\,\nabla C_{ad}$$
éq 5.5.2-4

Il faut connaître les différentielles des masses volumiques des fluides, ainsi que les différentielles de $C_{vp}=\frac{p_{vp}}{p_{gz}}$, $C_{ad}=\rho_{ad}$ et de leur gradient. On va tout d'abord calculer les différentielles des masses volumiques en utilisant les dérivées partielles de pressions données dans [§Annexe 3].

En dérivant la relation des gaz parfaits on a : $\frac{d\,\rho_{as}}{\rho_{as}}=\frac{dp_{as}}{p_{as}}-\frac{dT}{T}$ et $\frac{d\,\rho_{vp}}{\rho_{vp}}=\frac{dp_{vp}}{p_{vp}}-\frac{dT}{T}$, que l'on peut exprimer sous la forme :

$$d\,\rho_{as}=\frac{\rho_{as}}{p_{as}}\left(\frac{\partial\,p_{as}}{\partial\,p_c}dp_c+\frac{\partial\,p_{as}}{\partial\,p_{gz}}dp_{gz}\right)+\left(\frac{\rho_{as}}{p_{as}}\frac{\partial\,p_{as}}{\partial\,T}-\frac{\rho_{as}}{T}\right)dT$$
éq 5.5.2-5

$$d\,\rho_{vp}=\frac{\rho_{vp}}{p_{vp}}\left(\frac{\partial\,p_{vp}}{\partial\,p_c}dp_c+\frac{\partial\,p_{vp}}{\partial\,p_{gz}}dp_{gz}\right)+\left(\frac{\rho_{vp}}{p_{vp}}\frac{\partial\,p_{vp}}{\partial\,T}-\frac{\rho_{vp}}{T}\right)dT$$
éq 5.5.2-6

En utilisant la relation [éq 3.2.3.1-1], on obtient :

$$d\,\rho_{w}=\frac{\rho_{w}}{K_{w}}\left(\frac{\partial\,p_{w}}{\partial\,p_c}dp_c+\frac{\partial\,p_{w}}{\partial\,p_{gz}}dp_{gz}\right)+\left(\frac{\rho_{w}}{K_{w}}\frac{\partial\,p_{w}}{\partial\,T}-3\,\rho_{w}\alpha_{w}\right)dT$$
éq 5.5.2-7

Et comme $d\,\rho_{ad}=\frac{M_{as}^{ol}}{K_H}dp_{as}$,

$$d\,\rho_{ad}=\frac{M_{as}^{ol}}{K_H}\left(\frac{\partial\,p_{as}}{\partial\,p_c}dp_c+\frac{\partial\,p_{as}}{\partial\,p_{gz}}dp_{gz}+\frac{\partial\,p_{as}}{\partial\,T}dT\right)$$
éq 5.5.2-8

Comme précédemment, on utilise l' expressions

$dC_{vp}=\frac{dp_{vp}}{p_{gz}}-\frac{p_{vp}}{p_{gz^2}}dp_{gz}$ qui donne

$$dC_{vp}=\frac{1}{p_{gz}}\left(\frac{\partial\,p_{vp}}{\partial\,p_c}dp_c+\frac{\partial\,p_{vp}}{\partial\,T}dT\right)+\left(\frac{1}{p_{gz}}\frac{\partial\,p_{vp}}{\partial\,p_{gz}}-\frac{p_{vp}}{p_{gz}^2}\right)dp_{gz}$$
éq 5.5.2-9

et $\nabla\,C_{vp}=\frac{\nabla\,p_{vp}}{p_{gz}}-\frac{p_{vp}}{p_{gz}^2}\nabla\,p_{gz}$ et que l'on différencie en :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$d\nabla C_{vp}=d\left[\frac{\nabla p_{vp}}{p_{gz}}-\frac{p_{vp}}{p_{gz}^2}\nabla p_{gz}\right]=\frac{d\nabla p_{vp}}{p_{gz}}-\frac{\nabla p_{gz}}{p_{gz}^2}dp_{vp}+\left(2\frac{p_{vp}}{p_{gz}^3}\nabla p_{gz}-\frac{\nabla p_{vp}}{p_{gz}^2}\right)dp_{gz}-\frac{p_{vp}}{p_{gz}^2}d\nabla p_{gz}$$

éq 5.5.2-10

avec

$$\nabla p_{vp}=\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}\nabla p_{gz}+\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}\nabla p_c+\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}\nabla T$$ **éq 5.5.2-11**

et $d\nabla p_{vp}$ que l'on différencie de la manière suivante :

$$\begin{aligned}d\nabla p_{vp}&=d\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}\nabla p_{gz}+d\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}\nabla p_c+d\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}\nabla T+\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}d\nabla p_{gz}+\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}d\nabla p_c+\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}d\nabla T\\&=\left(\frac{\partial}{\partial p_c}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}\nabla p_{gz}+\frac{\partial}{\partial p_c}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}\nabla p_c+\frac{\partial}{\partial p_c}\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}\nabla T\right)dp_c\\&+\left(\frac{\partial}{\partial p_{gz}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}\nabla p_{gz}+\frac{\partial}{\partial p_{gz}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}\nabla p_c+\frac{\partial}{\partial p_{gz}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}\nabla T\right)dp_{gz}\\&+\left(\frac{\partial}{\partial T}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}\nabla p_{gz}+\frac{\partial}{\partial T}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}\nabla p_c+\frac{\partial}{\partial T}\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}\nabla T\right)dT\\&+\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}d\nabla p_{gz}+\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}d\nabla p_c+\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}d\nabla T\end{aligned}$$

éq 5.5.2-12

Les dérivées partielles du second ordre sont développées dans l'[§Annexe 4].

Pour l'air dissous, on procède avec les mêmes étapes :

$$C_{ad}=\rho_{ad}\quad=M_{ad}^{ol}.\frac{p_{ad}}{RT}$$

donc

$dC_{ad}=M_{ad}^{ol}.\left(\frac{dp_{ad}}{RT}-\frac{p_{ad}}{RT^2}dT\right)$ qui donne

$$dC_{ad}=M_{ad}^{ol}.\left[\left(\frac{1}{RT}\frac{\partial p_{ad}}{\partial p_c}\right)dp_c+\left(\frac{1}{RT}\frac{\partial p_{ad}}{\partial p_{gz}}\right)dp_{gz}+\left(\frac{\partial p_{ad}}{\partial T}-\frac{P_{ad}}{RT^2}\right)\frac{1}{p_{lq}}dT\right]$$ **éq 5.5.2-13**

et $\nabla C_{ad}=M_{ad}^{ol}.\left(\frac{\nabla p_{ad}}{RT}-\frac{p_{ad}}{RT^2}\nabla T\right)$ et que l'on différencie en :

$$d\nabla C_{ad}=M_{ad}^{ol}\left[\frac{1}{RT}d\nabla p_{ad}-\frac{\nabla T}{RT^2}dp_{ad}+\left(2\frac{p_{ad}}{RT^3}\nabla T-\frac{\nabla p_{ad}}{RT^2}\right)dT-\left(\frac{p_{ad}}{RT^2}\right)d\nabla T\right]$$ **éq 5.5.2-14**

avec

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\nabla p_{ad} = \frac{\partial p_{ad}}{\partial p_{gz}} \nabla p_{gz} + \frac{\partial p_{ad}}{\partial p_c} \nabla p_c + \frac{\partial p_{ad}}{\partial T} \nabla T \qquad \textbf{éq 5.5.2-15}$$

et $d \nabla p_{ad}$ que l'on différencie de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{\partial}{\partial p_c} \frac{\partial p_{ad}}{\partial p_{gz}} \nabla p_{gz} + \frac{\partial}{\partial p_c} \frac{\partial p_{ad}}{\partial p_c} \nabla p_c + \frac{\partial}{\partial p_c} \frac{\partial p_{ad}}{\partial T} \nabla T \right) dp_c \\
&+ \left(\frac{\partial}{\partial p_{gz}} \frac{\partial p_{ad}}{\partial p_{gz}} \nabla p_{gz} + \frac{\partial}{\partial p_{gz}} \frac{\partial p_{ad}}{\partial p_c} \nabla p_c + \frac{\partial}{\partial p_{gz}} \frac{\partial p_{ad}}{\partial T} \nabla T \right) dp_{gz} \\
&+ \left(\frac{\partial}{\partial T} \frac{\partial p_{ad}}{\partial p_{gz}} \nabla p_{gz} + \frac{\partial}{\partial T} \frac{\partial p_{ad}}{\partial p_c} \nabla p_c + \frac{\partial}{\partial T} \frac{\partial p_{ad}}{\partial T} \nabla T \right) dT \\
&+ \frac{\partial p_{ad}}{\partial p_{gz}} d \nabla p_{gz} + \frac{\partial p_{ad}}{\partial p_c} d \nabla p_c + \frac{\partial p_{ad}}{\partial T} d \nabla T
\end{aligned} \qquad \textbf{éq 5.5.2-16}$$

Les dérivées partielles du second ordre sont développées dans l'[§Annexe 4].

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

6 Bibliographie

[1] O. COUSSY : « Mécanique des milieux poreux ». Éditions TECHNIP.

[2] C. CHAVANT, P. CHARLES, Th. DUFORESTEL, F. VOLDOIRE : « Thermo-hydro-mécanique des milieux poreux non saturés dans le *Code_Aster* ». Note HI-74/99/011/A.

[3] « Algorithme non linéaire quasi statique (opérateur STAT_NON_LINE) ». Document *Aster* [R5.03.01].

[4] « Modélisations THHM généralités et algorithmes ». Document *Aster* [R7.01.10].

[5] A. GIRAUD : « Adaptation au modèle poroélastique non linéaire de Lassabatère-Coussy à la modélisation milieu poreux non saturé ». (ENSG).

[6] J. WABINSKI, F. VOLDOIRE : Thermohydromécanique en milieu saturé. Note EDF/DER HI/74/96/010, de septembre 1996.

[7] T. LASSABATERE : « Couplages hydromécaniques en milieu poreux non saturé avec changement de phase : application au retrait de dessiccation du béton ». Thèse ENPC.

[8] Ph. MESTAT, M. PRAT : « Ouvrages en interaction ». Hermes.

[9] J. F. THILUS et al : « Poro-mechanics », Biot Conférence 1998.

[10] A. W. BISHOP & G. E. BLIGHT: « Somme Aspects of Effective Stress in Saturated and Partly Saturated Soils », Géotechnique n° 3 vol. XIII, pp. 177-197. 1963.

[11] A. GIRAUD « Relation between macroscopic and microscopic properties of constituants in the ansiotropic case ». ENSG

[12] R. GIOT, A. GIRAUD, T. GUILLON « Three-dimensional poromechanical back aalysis of the pulse test accounting for transverse isotropy. » Acta Geotechnica 2012 7:151-165

[13] L. DORMIEUX, E. BOURGEOIS « Introduction à la micromécanique des milieux poreux ». Presse de l'École Nationale des Ponts et Chaussées, Paris, ISBN 2 85978 364, 4 (2002)

[14] G. El TABBAL « Drying behavior of concrete : Application to nuclear waste packages ». Thèse Université Paris-Est. (2020)

[15] R. Badmann, N. Stockausen, M.J. Setzer. « The statistical thickness and the chemical potential of adsorbed water films ». J. Colloid Interface Sci 82, 534-543. 1981

[16] E. Barrett, L. Joyner, P. Halenda. « The determination of pore volume and area distributions in porous substances. » . Computations from Nitrogen Isotherms. *1896*. 1951

[17] S. Brunauer, P.H. Emett, E. Teller. « Adsorption of gases in multimolecular layers. » J. Am. Chem. Soc 60, 309-319 (1938)

7 Description des versions du document

Version Aster	Auteur(s) Organisme(s)	Description des modifications
5	C.Chavant EDF-R&D/AMA	Version initiale
7.4	C.Chavant, S.Granet, EDF-R&D/AMA	
9.2	S.Granet	Loi de Van Genuchten

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

	EDF-R&D/AMA	
10.2	S. Meunier, EDF R&D/AMA	Modélisation Hydraulique Saturée
11.2	F.Voldoire EDF-R&D/AMA	Modifications de mise en forme des équations, quelques corrections ici ou là.
12.1	S.Granet EDF-R&D/AMA	Introduction de l'isotropie transverse

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Annexe 1Contraintes généralisées et variables internes

Les contraintes :

Numéro	Nom de composante Aster	Contenu
1	SIXX	σ'_{xx}
2	SIYY	σ'_{yy}
3	SIZZ	σ'_{zz}
4	SIXY	σ'_{xy}
5	SIXZ	σ'_{xz}
6	SIYZ	σ'_{yz}
7	SIPXX	$\sigma_{p_{xx}}$
8	SIPYY	$\sigma_{p_{yy}}$
9	SIPZZ	$\sigma_{p_{zz}}$
10	SIPXY	$\sigma_{p_{xy}}$
11	SIPXZ	$\sigma_{p_{xz}}$
12	SIPYZ	$\sigma_{p_{yz}}$
13	M11	m_w
14	FH11X	M_{w_x}
15	FH11Y	M_{w_y}
16	FH11Z	M_{w_z}
17	ENT11	h_w^m
18	M12	m_{vp}
19	FH12X	M_{vp_x}
20	FH12Y	M_{vp_y}
21	FH12Z	M_{vp_z}
22	ENT12	h_{vp}^m
23	M21	m_{as}
24	FH21X	M_{as_x}
25	FH21Y	M_{as_y}
26	FH21Z	M_{as_z}
27	ENT21	h_{as}^m
28	M22	m_{ad}
29	FH22X	M_{ad_x}
30	FH22Y	M_{ad_y}

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

31	FH22Z	M_{ad_z}
32	ENT22	h_{ad}^{m}
33	QPRIM	Q'
34	FHTX	q_x
35	FHTY	q_y
36	FHTZ	q_z

Dans le cas sans mécanique, et pour les lois de comportements (LIQU_VAPE_GAZ,LIQU_VAPE, LIQU_AD_GAZ_VAPE et LIQU_AD_GAZ) les variables internes sont :

Numéro	Nom se composante Aster	Contenu
1	V1	$\rho_{lq}-\rho_{lq}^{0}$
2	V2	$\varphi-\varphi^{0}$
3	V3	$p_{vp}-p_{vp}^{0}$
4	V4	S_{lq}

Dans le cas sans mécanique, et pour les lois de comportements (LIQU_GAZ,LIQU_GAZ_ATM,) les variables internes sont :

Numéro	Nom se composante Aster	Contenu
1	V1	$\rho_{lq}-\rho_{lq}^{0}$
2	V2	$\varphi-\varphi^{0}$
3	V3	S_{lq}

Dans le cas sans mécanique, et pour les lois de comportements (LIQU_SATU,) les variables internes sont :

Numéro	Nom se composante Aster	Contenu
1	V1	$\rho_{lq}-\rho_{lq}^{0}$
2	V2	$\varphi-\varphi^{0}$

Dans le cas avec mécanique les premiers numéros seront ceux correspondant à la mécanique (V1 dans le cas élastique, V1 et suivantes pour des modèles plastiques). Le numéro des variables internes ci-dessus devra alors être incrémenté d'autant.

Annexe 2Données matériau

On donne ici la correspondance entre le vocabulaire des commandes Aster et les notations utilisées dans la présente note pour les différentes grandeurs caractéristiques des matériaux.

A2.1 Mot clé facteur THM_LIQU

♦	RHO	ρ_{lq}^{0}
◊	UN_SUR_K	$\frac{1}{K_{lq}}$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

◊	ALPHA	α_{lq}
◊	CP	C_{lq}^{p}
◊	VISC	$\mu_{lq}(T)$
◊	D_VISC_TEMP	$\frac{\partial \mu_{lq}}{\partial T}(T)$

A2.2 Mot clé facteur THM_GAZ

◊	MASS_MOL	M_{as}^{ol}
◊	CP	C_{lq}^{P}
◊	VISC	$\mu_{as}(T)$
◊	D_VISC_TEMP	$\frac{\partial \mu_{as}}{\partial T}(T)$

A2.3 Mot clé facteur THM_VAPE_GAZ

◊	MASS_MOL	M_{VP}^{ol}
◊	CP	C_{vp}^{p}
◊	VISC	$\mu_{vp}(T)$
◊	D_VISC_TEMP	$\frac{\partial \mu_{vp}}{\partial T}(T)$

A2.4 Mot clé facteur THM_AIR_DISS

◊	CP	C_{ad}^{p}
◊	COEF_HENRY	K_H

A2.5 Mot clé facteur THM_INIT

♦	TEMP	^{init}T
♦	PRE1	$^{init}P_1$
♦	PRE2	$^{init}P_2$
♦	PORO	φ^0
♦	PRES_VAPE	P_{vp}^{0}

On rappelle que, selon la modélisation, les deux pressions et représentent :

	LIQU_SATU	LIQU_VAPE	LIQU_GAZ_ATM	GAZ	LIQU_VAPE_GAZ
P_1	p_w	p_w	$p_c = - p_w$	p_{gz}	$p_c = p_{gz} - p_w$
P_2					p_{gz}

	LIQU_GAZ	LIQU_AD_GAZ_VAPE	LIQU_AD_GAZ
P_1	$p_c = p_{gz} - p_w$	$p_c = p_{gz} - p_w - p_{ad}$	$p_c = p_{gz} - p_w - p_{ad}$
P_2	p_{gz}	p_{gz}	p_{gz}

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

A2.6 Mot clé facteur THM_DIFFU

♦	R_GAZ	R
◊	RHO	r_0
◊	CP	C_σ^S
◊	BIOT_COEF	b
◊	BIOT_L	b_L
◊	BIOT_N	b_N
◊	BIOT_T	b_T (cas 2D)
◊	SATU_PRES	$S_{lq}(p_c)$
◊	D_SATU_PRES	$\frac{\partial S_{lq}}{\partial p_c}(p_c)$
◊	PESA_X	$\mathbf{F}_x^m$
◊	PESA_Y	$\mathbf{F}_y^m$
◊	PESA_Z	$\mathbf{F}_z^m$
◊	PERM_IN	$K^{int}(\varphi)$
◊	PERMIN_L	$K_L^{int}(\varphi)$
◊	PERMIN_N	$K_N^{int}(\varphi)$
◊	PERMIN_T	$K_T^{int}(\varphi)$ (cas 2D)
◊	PERM_LIQU	$K_{lq}^{rel}(S_{lq})$
◊	D_PERM_LIQU_SATU	$\frac{\partial k_{lq}^{rel}}{\partial S_{lq}}(S_{lq})$
◊	PERM_GAZ	$k_{gz}^{rel}(S_{lq}, p_{gz})$
◊	D_PERM_SATU_GAZ	$\frac{\partial k_{gz}^{rel}}{\partial S_{lq}}(S_{lq}, p_{gz})$
◊	D_PERM_PRES_GAZ	$\frac{\partial k_{gz}^{rel}}{\partial p_{gz}}(S_{lq}, p_{gz})$
◊	FICKV_T	$f_{vp}^T(T)$
◊	FICKV_S	$f_{vp}^S(S)$
◊	FICKV_PG	$f_{vp}^{gz}(P_g)$
◊	FICKV_PV	$f_{vp}^{vp}(P_{vp})$
◊	D_FV_T	$\frac{\partial f_{vp}^T}{\partial T}(T)$
◊	D_FV_PG	$\frac{\partial f_{vp}^{gz}}{\partial P_{gz}}(P_{gz})$
◊	FICKA_T	$f_{ad}^T(T)$
◊	FICKA_S	$f_{ad}^S(S)$
◊	FICKA_PA	$f_{ad}^{ad}(P_{ad})$
◊	FICKA_PL	$f_{ad}^{lq}(P_{lq})$
◊	D_FA_T	$\frac{\partial f_{vp}^T}{\partial T}(T)$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

◊	LAMB_T	$\lambda_T^T(T)$
◊	LAMB_T_L	$\lambda_T^T(T)$ selon L
◊	LAMB_T_N	$\lambda_T^T(T)$ selon N
◊	LAMB_T_T	$\lambda_T^T(T)$ selon T (2D)
◊	D_LB_T	$\frac{\partial \lambda_T^T(T)}{\partial T}$
◊	D_LB_T_L	$\frac{\partial \lambda_T^T(T)}{\partial T}$ selon L
◊	D_LB_T_N	$\frac{\partial \lambda_T^T(T)}{\partial T}$ selon N
◊	D_LB_T_T	$\frac{\partial \lambda_T^T(T)}{\partial T}$ selon T
◊	LAMB_PHI	$\lambda_\phi^T(\phi)$
◊	D_LB_PHI	$\frac{\partial \lambda_\phi^T(\phi)}{\partial \phi}$
◊	LAMB_S	$\lambda_S^T(S)$
◊	DLAMBS	$\frac{\partial \lambda_S^T(S)}{\partial S}$
◊	LAMB_CT	λ_{CT}^T
◊	LAMB_CL	λ_{CT}^T selon L
◊	LAMB_CN	λ_{CT}^T selon N
◊	LAMB_CT	λ_{CT}^T selon T

Remarque :

Pour les modélisations faisant intervenir la thermique, et pour le calcul de la chaleur spécifique homogénéisée, on utilise la relation : $C_\sigma^0 = (1-\varphi)\rho_s C_\sigma^s + \rho_{lq} S_{lq} \varphi C_{lq}^p + (1-S_{lq})\varphi(\rho_{vp} C_{vp}^p + \rho_{as} C_{as}^p)$ *. Dans cette formule, on confond* ρ_s *avec sa valeur initiale* ρ_S^0 *dont la valeur est lue sous le mot clé* `RHO` *du mot clé facteur* `ELAS`*.*

Annexe 3 Dérivées des pressions en fonction des déformations généralisées

On détaille ici le calcul des dérivées de pression en fonction des déformations généralisées. On rappelle que l'équation [éq 3.2.6.3] est $\frac{dp_{vp}}{\rho_{vp}} = \frac{dp_w}{\rho_w} + L\frac{dT}{T}$ avec $L = h_{vp}^m - h_w^m$. En outre $dp_{ad} = dp_{lq} - dp_w = \frac{R}{K_H} p_{as} dT + \frac{RT}{K_H} dp_{as}$ et $dp_{as} = dp_{gz} - dp_{vp}$. En combinant ces équations on obtient :

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

$$\begin{cases} dp_{vp}\left[\frac{RT}{K_H}-\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\right]=\left(-L\rho_w+p_{ad}\right)\frac{dT}{T}+\left(\frac{RT}{K_H}-1\right)dp_{gz}+dp_c \\ dp_w\left[\frac{\rho_{vp}}{\rho_w}\frac{RT}{K_H}-1\right]=\left(-LR\frac{\rho_{vp}}{K_H}+\frac{p_{ad}}{T}\right)dT+\left(\frac{RT}{K_H}-1\right)dp_{gz}+dp_c \end{cases}$$

On peut donc écrire les dérivées partielles de l'eau et de la vapeur en fonction des déformations généralisées :

$$\frac{\partial p_w}{\partial T}=\frac{-LR\frac{\rho_{vp}}{K_H}+\frac{p_{ad}}{T}}{\frac{\rho_{vp}}{\rho_w}\frac{RT}{K_H}-1};\quad \frac{\partial p_w}{\partial p_{gz}}=\frac{\frac{RT}{K_H}-1}{\frac{\rho_{vp}}{\rho_w}\frac{RT}{K_H}-1};\quad \frac{\partial p_w}{\partial p_c}=\frac{1}{\frac{\rho_{vp}}{\rho_w}\frac{RT}{K_H}-1}$$

$$\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}\frac{\left(-L\rho_w+p_{ad}\right)}{\frac{RT}{K_H}-\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}}\cdot\frac{1}{T};\quad \frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}\frac{\frac{RT}{K_H}-1}{\frac{RT}{K_H}-\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}};\quad \frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}\frac{1}{\frac{RT}{K_H}-\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}}$$

Les relations $dp_{as}=dp_{gz}-dp_{vp}$ et $dp_{ad}=dp_{gz}-dp_c-dp_w$ permettent de dériver toutes les pressions, puisqu'on aura :

$$\frac{\partial p_{as}}{\partial T}=-\frac{\partial p_{vp}}{\partial T};\quad \frac{\partial p_{as}}{\partial p_{gz}}=1-\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}};\quad \frac{\partial p_{as}}{\partial p_c}=-\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}$$

et

$$\frac{\partial p_{ad}}{\partial T}=-\frac{\partial p_w}{\partial T};\quad \frac{\partial p_{ad}}{\partial p_{gz}}=1-\frac{\partial p_w}{\partial p_{gz}};\quad \frac{\partial p_{ad}}{\partial p_c}=-1-\frac{\partial p_w}{\partial p_c}$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Annexe 4 Dérivées secondes des pressions de vapeur et d'air dissous en fonction des déformations généralisées

On calcule ici les dérivées partielles du second ordre de la pression de vapeur nécessaires à la section [§5.5.2]. On notera par la suite :

$$A1=\frac{RT}{K_H}-\frac{\rho_w}{\rho_{vp}} \text{ et } A2=\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\left(\frac{RT}{K_H}-1\right)$$
$$A3=\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}-\frac{1}{T}-\frac{1}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial T}-3\alpha_w$$
$$A4=-\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}+\frac{1}{T}+\frac{1}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial T}-3\alpha_w$$

Dérivées secondes de la pression de vapeur :

$$\frac{\partial}{\partial p_c}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}=\frac{A2}{A1^2}\left(\frac{1}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial p_c}-\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}\right)$$
$$\frac{\partial}{\partial p_{gz}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}=\frac{A2}{A1^2}\left(\frac{1}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial p_{gz}}-\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}\right)$$
$$\frac{\partial}{\partial T}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}=\frac{R}{K_H A1}-\frac{1}{A1^2}\left(\frac{RT}{K_H}-1\right)\left(\frac{R}{K_H}-\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}A4\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial p_c}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}=-\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\frac{1}{A1^2}\left(\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}-\frac{1}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial p_c}\right)$$
$$\frac{\partial}{\partial p_{gz}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}=-\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\frac{1}{A1^2}\left(\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}-\frac{1}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial p_{gz}}\right)$$
$$\frac{\partial}{\partial T}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}=-\frac{1}{A1^2}\left(\frac{R}{K_H}-\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}A4\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial p_c}\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}=-\frac{1}{T}\frac{1}{A1^2}\left(A1\left(1-\frac{\partial p_w}{\partial p_c}(1+L\frac{\rho_w}{K_W})\right)+(p_{ad}-L\rho_w)\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\left(\frac{1}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial p_c}-\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}\right)\right)$$
$$\frac{\partial}{\partial p_{gz}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}=-\frac{1}{T}\frac{1}{A1^2}\left(A1\left(1-\frac{\partial p_w}{\partial p_{gz}}(1+L\frac{\rho_w}{K_W})\right)+(p_{ad}-L\rho_w)\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\left(\frac{1}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial p_{gz}}-\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}\right)\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial T}\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}=\frac{1}{T.A1}\left(\frac{\partial p_{ad}}{\partial T}-L\left(\frac{\rho_w}{K_W}\frac{\partial p_w}{\partial T}-3\alpha_w\rho_w\right)\right)-\frac{1}{T^2.A1^2}\left(\frac{RT}{K_H}-\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}+T\left(\frac{R}{K_H}-\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}A4\right)\right)(p_{ad}-L\rho_w)$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Dérivées secondes de la pression d'air dissous :

$$\frac{\partial}{\partial p_c}\frac{\partial p_{ad}}{\partial p_{gz}}=\frac{RT}{K_H}\frac{A2}{A1^2}\left(\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}-\frac{1}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial p_c}\right)$$
$$\frac{\partial}{\partial p_{gz}}\frac{\partial p_{ad}}{\partial p_{gz}}=\frac{RT}{K_H}\frac{A2}{A1^2}\left(\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}-\frac{1}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial p_{gz}}\right)$$
$$\frac{\partial}{\partial T}\frac{\partial p_{ad}}{\partial p_{gz}}=-R_{K_H}\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\frac{1}{A1}+\left(\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\right)^2\frac{R}{K_H}\frac{A2}{A1^2}\left(1+A3.T\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial p_c}\frac{\partial p_{ad}}{\partial p_c}=\frac{RT}{K_H}\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\frac{1}{A1^2}\left(\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}-\frac{1}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial p_c}\right)$$
$$\frac{\partial}{\partial p_{gz}}\frac{\partial p_{ad}}{\partial p_c}=\frac{RT}{K_H}\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\frac{1}{A1^2}\left(\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}-\frac{1}{K_w}\frac{\partial p_w}{\partial p_{gz}}\right)$$
$$\frac{\partial}{\partial T}\frac{\partial p_{ad}}{\partial p_c}=\frac{R}{K_H}\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\frac{1}{A1^2}\left(1+A3.T\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial p_c}\frac{\partial p_{ad}}{\partial T}=\frac{1}{A1}\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\left(\frac{LR}{K_H}\frac{\rho_{vp}}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_c}-\frac{1}{T}\frac{\partial p_{ad}}{\partial p_c}\right)-\frac{RT}{K_H}\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\frac{1}{A1^2}\left(\frac{LR}{K_H}\rho_{vp}-\frac{p_{ad}}{T}\right).A3$$
$$\frac{\partial}{\partial p_{gz}}\frac{\partial p_{ad}}{\partial T}=\frac{1}{A1}\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\left(\frac{LR}{K_H}\frac{\rho_{vp}}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{gz}}-\frac{1}{T}\frac{\partial p_{ad}}{\partial p_{gz}}\right)-\frac{RT}{K_H}\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\frac{1}{A1^2}\left(\frac{LR}{K_H}\rho_{vp}-\frac{p_{ad}}{T}\right).A3$$
$$\frac{\partial}{\partial T}\frac{\partial p_{ad}}{\partial T}=\frac{1}{A1}\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\left(\frac{LR\rho_{vp}}{K_H}\left(\frac{1}{p_{vp}}\frac{\partial p_{vp}}{\partial T}-\frac{1}{T}\right)+\frac{p_{ad}}{T^2}-\frac{1}{T}\frac{\partial p_{ad}}{\partial T}\right)-\frac{RT}{K_H}\frac{\rho_w}{\rho_{vp}}\frac{1}{A1^2}\left(\frac{LR}{K_H}\rho_{vp}-\frac{p_{ad}}{T}\right).\left(A3+\frac{1}{T}\right)$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Annexe 5 Équivalence avec les formulations ANDRA

Afin de pouvoir s'insérer dans la plate-forme ALLIANCE, il est nécessaire d'être cohérent avec les formulations posées par l'ANDRA. Nous proposons ici une équivalence entre les notations qui seraient dissemblables. Ces différences concernent uniquement l'écriture de :

- L'équation d'énergie
- La loi de Henry
- La diffusion dans le liquide
- La diffusion dans le gaz

Remarque concernant les enthalpies :

Il est nécessaire pour avoir cohérence entre les deux modèles que l'utilisateur de Code_Aster prenne : $h_{lq}^{m_0}=0$ *et* $h_{vp}^{m_0}=L_0$.

A5.1 Équation d'énergie

Le tableau ci-dessus rappelle les deux formulations :

Notations *Code_Aster*	Notations ANDRA
h_{lq}^{m}	$=\dfrac{\boldsymbol{\Phi_w}}{\rho_w S_w n}$
h_{vp}^{m}	$=\dfrac{\boldsymbol{\Phi_v}}{\rho_v \left(1-S_w\right) n}$
h_{as}^{m}	$=\dfrac{\boldsymbol{\Phi_{as}}}{\rho_{as} \left(1-S_w\right) n}$
$\mathbf{M}_{lq}$	$=\rho_w f_w$
$\mathbf{M}_{as}$	$=\rho_{as} f_{as}$
$\mathbf{M}_{vp}$	$=\rho_v f_v$

En réécrivant l'équation de l'énergie de *Code_Aster* avec ces notations , on trouve :

$$\frac{d\,\boldsymbol{\Phi}}{dt}+Div\left(\boldsymbol{\Phi}_w\frac{f_w}{S_w n}+\boldsymbol{\Phi}_{as}\frac{f_{as}}{\left(1-S_w\right)n}+\boldsymbol{\Phi}_v\frac{f_v}{\left(1-S_w\right)n}\right)+Div\left(\boldsymbol{q}\right)\;-\;\left(T-T^0\right)\frac{d}{dt}\left[\left(1-n\right)\rho_s C_s\right]$$
$$+3\,\alpha_0 K_0 T\frac{d\,\varepsilon_v}{dt}+3\,\alpha_{lq}^m T\frac{dp_c}{dt}-3\left(\alpha_{lq}^m+\alpha_{gz}^m\right)T\frac{dp_{gz}}{dt}-9\,TK_0\alpha_{0^2}\frac{dT}{dt}$$
$$=\left(\rho_w f_w+\rho_v f_v+\rho_{as} f_{as}\right)\boldsymbol{g}+\Theta$$

La première ligne étant celle de l'ANDRA et les autres étant a priori négligeables.

A5.2 Loi de Henry

Dans la formulation de l'ANDRA, la formulation de Henry est donnée par $\omega_l^a=\dfrac{P_{as}}{H}\dfrac{M_{as}^{ol}}{M_w}\rho_w$ avec la concentration d'air dans l'eau que l'ont peut ramener à une masse volumique telle que $\omega_l^a=\rho_{ad}$. H s'exprime en Pa .

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)

Dans la formulation de *Code_Aster*, on rappelle que la loi de Henry est exprimée sous la forme : $C_{ad}^{ol}=\frac{\rho_{ad}}{M_{ad}^{ol}}$ avec $C_{ad}^{ol}=\frac{p_{as}}{K_H}$. K_H s'exprime en $Pa.m^3.mol^{-1}$.

On a donc l'équivalence :

$$K_H=H\frac{M_w}{\rho_w}$$

A5.3 Diffusion de la vapeur dans l'air

Dans la formulation ANDRA le flux de vapeur d'eau dans l'air en fonction de la concentration de vapeur d'eau dans l'air ou de l'humidité relative est noté :

$$f_{Diff_v}=-D_v.\nabla\omega_g^e$$

avec la concentration définie comme le rapport molaire dans le gaz : $\omega_g^e=\frac{n_v}{n_g}$.

Dans *Code_Aster*, ce même flux s'écrit : $f_{Diff_v}=F_{vp}\nabla C_{vp}$ avec le coefficient de Fick vapeur $F_{vp}=\frac{D_{vp}}{C_{vp}(1-C_{vp})}$ et D_{vp} le coefficient de diffusion de Fick du mélange gazeux. C_{vp} est défini comme le rapport des pressions tel que : $C_{vp}=\frac{p_{vp}}{p_{gz}}$.

La loi des gaz parfaits permet d'écrire que $C_{vp}=\omega_g^e$ donc $\nabla\omega_g^e=\nabla C_{vp}$ et $f_{Diff_v}=D_v.\nabla C_{vp}$.
Donc l'équivalence *Code_Aster*/ANDRA s'écrit simplement :

$$F_{vp}=D_v .$$

A5.4 Diffusion de l'air dissous dans l'eau

Dans la formulation ANDRA le flux d'air dissous dans l'eau s'exprime

$$f_{a_{ds_e}}=D_a.\nabla\omega_l^a$$

avec $\omega_l^a=\frac{\rho_{ad}}{M_{ad}^{ol}}$.

Dans Code_Aster, ce même flux s'écrit : $f_{a_{ds_v}}=F_{ad}\nabla C_{ad}$ avec le coefficient de Fick air-dissous $F_{ad}=\frac{D_{ad}}{C_{ad}(1-C_{ad})}$ et D_{ad} le coefficient de diffusion de Fick du mélange liquide. C_{ad} est défini tel que : $C_{ad}=w_l^a$. Donc :

$$F_{ad}=D_a .$$

Document diffusé sous licence GNU FDL (http://www.gnu.org/copyleft/fdl.html)