

Notice d'utilisation du modèle THM

Résumé :

On détaille ici la procédure à suivre pour la réalisation d'un calcul THM.

Table des matières

1 Les grandes lignes.....	3
1.1 Contexte des études THM.....	3
1.2 Généralités.....	3
1.3 Etapes de calculs.....	4
2 Les différentes étapes de calcul.....	4
2.1 Choix du modèle.....	4
2.2 Définition du matériau.....	7
2.2.1 Mot clé facteur ELAS.....	8
2.2.2 Mot clé simple COMP_THM.....	8
2.2.3 Mot clé facteur THM_INIT.....	10
2.2.4 Mot clé facteur THM_LIQU.....	12
2.2.5 Mot clé facteur THM_GAZ.....	13
2.2.6 Mot clé facteur THM_VAPE_GAZ.....	13
2.2.7 Mot clé facteur THM_AIR_DISS.....	14
2.2.8 Mot clé facteur THM_DIFFU.....	15
2.2.9 Récapitulation des fonctions de couplages et leur dépendance.....	19
2.2.9.1 Mot clé facteur THM_DIFFU.....	20
2.3 Initialisation du calcul.....	22
2.4 Chargements et conditions aux limites.....	26
2.5 Le calcul non linéaire.....	28
2.6 Le post-traitement.....	31
2.6.1 Isovaleurs avec Gibi.....	32
2.6.2 Isovaleurs avec IDEAS.....	33
3 Bibliographie.....	33
Annexe 1 Contraintes généralisées et variables internes.....	34
Annexe 2 Exemple 1 de fichier de commande.....	35
Annexe 3 Exemple 2 de fichiers de commande.....	39
Annexe 4 Post traitement GIBI.....	45
Annexe 5 Eléments supplémentaires sur les conditions aux limites en THM.....	47

1 Les grandes lignes

1.1 Contexte des études THM

Avant toute chose, il convient de définir le cadre bien précis des calculs Thermo-Hydro-Mécaniques. Ceux-ci ont pour application exclusive l'étude des milieux poreux. Sachant cela, la modélisation THM couvre l'évolution mécanique de ces milieux et les écoulements en leur sein. Ces derniers concernent un ou deux fluides et sont régis par les lois de Darcy (fluides darcéens). Le problème de THM complet traite donc de l'écoulement des ou du fluide(s), de la mécanique du squelette, ainsi que de la thermique : la résolution est entièrement couplée (et non chaînée).

1.2 Généralités

Les calculs s'appuient sur des familles de lois de comportement THM pour les milieux poreux saturés et non saturés. 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. La formulation de la modélisation Thermo-hydro-mécanique (THM) en milieu poreux telle qu'elle est faite dans *Code_Aster* est détaillée dans [R7.01.11] et [R7.01.10]. Toutes les notations employées ici s'y réfèrent donc. On rappelle cependant quelques notations indispensables par la suite :

Concernant les fluides, on considère (cas le plus complet) deux phases (liquide et gaz) et deux constituants appelés par commodité eau et air. On utilise alors les indices suivants :

- w pour le 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 : $p_w(x, t)$, $p_{ad}(x, t)$, $p_{vp}(x, t)$, $p_{as}(x, t)$,
- la température du milieu $T(x, t)$.

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 varie selon les lois de comportements.

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 $p_{gz}(x, t) = p_{vp} + p_{as}$,
- la pression capillaire $p_c(x, t) = p_{gz} - p_{lq} = p_{gz} - p_w - p_{ad}$.

Nous verrons par la suite la terminologie Aster pour ces variables.

1.3 Etapes de calculs

Pour les étapes nécessaires à la fabrication d'un calcul Aster, indépendamment des aspects purement THM, on se référera à la documentation de chaque commande utilisée.

Dans l'ensemble de ce document on se référera à un exemple type de fichier de calcul donné en annexe. Dans tout calcul Aster, plusieurs étapes clés doivent être effectués :

- Choix de la modélisation
- Données matériaux
- Initialisation
- Calcul
- Post-traitement

2 Les différentes étapes de calcul

2.1 Choix du modèle

Le choix se fait par l'utilisation de la commande `AFPE_MODELE` comme dans l'exemple ci-dessous :

```
MODELE=AFPE_MODELE (MAILLAGE=MAIL,  
                    AFPE=_F (TOUT='OUI',  
                             PHENOMENE='MECANIQUE',  
                             MODELISATION='AXIS_THH2MD',),),)
```

Le traitement numérique en THM nécessite un maillage quadratique puisque les éléments sont de type P2 en déplacement et P1 en pression et température afin d'éviter des problèmes d'oscillations.

Le phénomène 'MECANIQUE' est obligatoire quel que soit le type de modélisation choisi (avec ou sans mécanique).

L'utilisateur doit renseigner ici de manière obligatoire le mot clé `MODELISATION`. Ce mot clé permet de définir le type d'élément affecté à un type de maille. Les modélisations disponibles en THM sont les suivantes :

MODELISATION	Modélisation géométrique	Phénomènes pris en compte
D_PLAN_HM	plane	Mécanique, hydraulique avec une pression inconnue
D_PLAN_HMD	plane	Mécanique, hydraulique avec une pression inconnue (lumpé)
D_PLAN_HHM	plane	Mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues
D_PLAN_HHMD	plane	Mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues (lumpé)
D_PLAN_HH2MD	plane	Mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues et deux constituants par phase (lumpé)
D_PLAN_THH	plane	Thermique, hydraulique avec deux pressions inconnues
D_PLAN_THHD	plane	Thermique, hydraulique avec deux pressions inconnues (lumpé)
D_PLAN_THH2D	plane	Thermique, hydraulique avec deux pressions inconnues et deux constituants par phase (lumpé)
D_PLAN_THM	plane	Thermique, mécanique, hydraulique avec une pression inconnue
D_PLAN_THVD	plane	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues (2 phases : eau liquide et vapeur) (lumpé)
D_PLAN_THMD	plane	Thermique, mécanique, hydraulique avec une pression inconnue (lumpé)
D_PLAN_THHM	plane	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues
D_PLAN_THHMD	plane	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions

inconnues (lumpé)

D_PLAN_THH2MD	plane	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues et deux constituants par phase (lumpé)
AXIS_HM	axisymétrique	Mécanique, hydraulique avec une pression inconnue
AXIS_HMD	axisymétrique	Mécanique, hydraulique avec une pression inconnue (lumpé)
AXIS_HHM	axisymétrique	Mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues
AXIS_HHMD	axisymétrique	Mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues (lumpé)
AXIS_HH2MD	axisymétrique	Mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues et deux constituants par phase (lumpé)
AXIS_THH	axisymétrique	Thermique, hydraulique avec deux pressions inconnues
AXIS_THHD	axisymétrique	Thermique, hydraulique avec deux pressions inconnues (lumpé)
AXIS_THH2D	axisymétrique	Thermique, hydraulique avec deux pressions inconnues et deux constituants par phase (lumpé)
AXIS_THM	axisymétrique	Thermique, mécanique, hydraulique avec une pression inconnue
AXIS_THMD	axisymétrique	Thermique, mécanique, hydraulique avec une pression inconnue (lumpé)
AXIS_THVD	axisymétrique	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues (2 phases : eau liquide et vapeur) (lumpé)
AXIS_THHM	axisymétrique	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues
AXIS_THHMD	axisymétrique	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues (lumpé)
AXIS_THH2MD	axisymétrique	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues et deux constituants par phase (lumpé)
3D_HM	3D	Mécanique, hydraulique avec une pression inconnue
3D_HMD	3D	Mécanique, hydraulique avec une pression inconnue (lumpé)
3D_HHM	3D	Mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues
3D_HHMD	3D	Mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues (lumpé)
3D_HH2MD	3D	Mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues et deux constituants par phase (lumpé)
3D_THH	3D	Thermique, hydraulique avec deux pressions inconnues
3D_THHD	3D	Thermique, hydraulique avec deux pressions inconnues (lumpé)
3D_THH2D	3D	Thermique, hydraulique avec deux pressions inconnues et deux constituants par phase (lumpé)
3D_THM	3D	Thermique, mécanique, hydraulique avec une pression inconnue
3D_THMD	3D	Thermique, mécanique, hydraulique avec une pression inconnue (lumpé)
3D_THVD	3D	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues (2 phases : eau liquide et vapeur) (lumpé)
3D_THHM	3D	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues
3D_THHMD	3D	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues (lumpé)
3D_THH2MD	3D	Thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues et deux constituants par phase (lumpé)

Les inconnues principales qui sont aussi les valeurs des degrés de liberté, sont notées dans le cas de la modélisation la plus complète (3D thermique, mécanique, hydraulique avec deux pressions inconnues).

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

Le contenu de PRE1 et PRE2 dépend du couplage choisi et sera explicité dans la section 2.2.3. Suivant la modélisation choisie, seul certains de ces degrés de liberté existent. Le tableau ci-dessus résume les degrés de liberté utilisés pour chaque modélisation

MODELISATION	u_x	u_y	u_z	PRE1 ^{ddl}	PRE2 ^{ddl}	T ^{ddl}
D_PLAN_HM	X	X		X		
D_PLAN_HMD	X	X		X		
D_PLAN_HHM	X	X		X	X	
D_PLAN_HHMD	X	X		X	X	
D_PLAN_HH2MD	X	X		X	X	
D_PLAN_THH				X	X	X
D_PLAN_THHD				X	X	X
D_PLAN_THH2D				X	X	X
D_PLAN_THM	X	X		X		X
D_PLAN_THMD	X	X		X		X
D_PLAN_THVD				X	X	X
D_PLAN_THHM	X	X		X	X	X
D_PLAN_THHMD	X	X		X	X	X
D_PLAN_THH2MD	X	X		X	X	X
AXIS_HM	X	X		X		
AXIS_HMD	X	X		X		
AXIS_HHM	X	X		X	X	
AXIS_HHMD	X	X		X	X	
AXIS_HH2MD	X	X		X	X	
AXIS_THH				X	X	X
AXIS_THHD				X	X	X
AXIS_THH2D				X	X	X
AXIS_THM	X	X		X		X
AXIS_THMD	X	X		X		X
AXIS_THVD				X	X	X
AXIS_THHM	X	X		X	X	X
AXIS_THHMD	X	X		X	X	X
AXIS_THH2MD	X	X		X	X	X
3D_HM	X	X	X	X		
3D_HMD	X	X	X	X		
3D_HHM	X	X	X	X	X	
3D_HHMD	X	X	X	X	X	
3D_HH2MD	X	X	X	X	X	
3D_THH				X	X	X
3D_THHD				X	X	X
3D_THH2D				X	X	X
3D_THM	X	X	X	X		X
3D_THMD	X	X	X	X		X
3D_THVD				X	X	X
3D_THHM	X	X	X	X	X	X
3D_THHMD	X	X	X	X	X	X
3D_THH2MD	X	X	X	X	X	X

Les contraintes généralisées et les variables internes sont toutes indiquées en [§Annexe 1]. Les notations utilisées sont celles définies dans [R7.01.11].

Remarque concernant le traitement numérique (mot clé se terminant par D) :

Les modélisations se terminant par la lettre D indiquent que l'on fait un traitement permettant de diagonaliser (« lumped ») la matrice de masse afin d'éviter les oscillations. Pour cela les points d'intégration sont pris aux sommets des éléments. On conseille vivement à l'utilisateur de systématiquement choisir ce type de modélisation.

2.2 Définition du matériau

Le matériau est défini par la commande `DEFI_MATERIAU` comme dans l'exemple ci-dessous :

```
MATERBO=DEFI_MATERIAU (ELAS=_F (E=5.15000000E8,  
                                NU=0.20,  
                                RHO=2670.0,  
                                ALPHA=0.),),  
COMP_THM = 'LIQU_AD_GAZ_VAPE',  
THM_LIQU=_F (RHO=1000.0,  
             UN_SUR_K=0.,  
             ALPHA=0.,  
             CP=0.0,  
             VISC=VISCOLIQ,  
             D_VISC_TEMP=DVISCOL),),  
THM_GAZ=_F (MASS_MOL=0.01,  
            CP=0.0,  
            VISC=VISCOGAZ,  
            D_VISC_TEMP=ZERO),),  
THM_VAPE_GAZ=_F (MASS_MOL=0.01,  
                 CP=0.0,  
                 VISC=VISCOGAZ,  
                 D_VISC_TEMP=ZERO),),  
THM_AIR DISS=_F (  
                 CP=0.0,  
                 COEF_HENRY=HENRY  
                 ),),  
THM_INIT=_F (TEMP=300.0,  
             PRE1=0.0,  
             PRE2=1.E5,  
             PORO=1.,  
             PRES_VAPE=1000.0,  
             DEGR_SATU=0.4),),  
THM_DIFFU=_F (R_GAZ=8.32,  
              RHO=2200.0,  
              CP=1000.0,  
              BIOT_COEF=1.0,  
              SATU_PRES=SATUBO,  
              D_SATU_PRES=DSATBO,  
              PESA_X=0.0,  
              PESA_Y=0.0,  
              PESA_Z=0.0,  
              PERM_IN=KINTBO,  
              PERM_LIQU=UNDEMI,  
              D_PERM_LIQU_SATU=ZERO,  
              PERM_GAZ=UNDEMI,  
              D_PERM_SATU_GAZ=ZERO,  
              D_PERM_PRES_GAZ=ZERO,  
              FICKV_T=ZERO,  
              FICKA_T=FICK,  
              LAMB_T=ZERO,  
              ),),);
```

2.2.1 Mot clé facteur ELAS

Définition des caractéristiques élastiques linéaires constantes ou fonctions du paramètre 'TEMP'.

- ◆ E
Module d'Young. On vérifie que $E \geq 0$.
- ◆ NU
Coefficient de Poisson. On vérifie que $-1 \leq \nu \leq 0.5$.
- ◇ ALPHA
Coefficient de dilatation thermique isotrope des grains.

2.2.2 Mot clé simple COMP_THM

Permet de sélectionner dès la définition du matériau la loi de couplage THM. Les lois possibles sont

```
◇ COMP_THM = / 'LIQU_SATU' ,  
              / 'LIQU_GAZ' ,  
              / 'GAZ' ,  
              / 'LIQU_GAZ_ATM' ,  
              / 'LIQU_VAPE_GAZ' ,  
              / 'LIQU_AD_GAZ_VAPE' ,  
              / 'LIQU_VAPE' ,  
/ 'GAZ'
```

Loi de comportement d'un gaz parfait c'est-à-dire vérifiant la relation $P/\rho = RT/Mv$ où P est la pression, ρ la masse volumique, Mv la masse molaire, R la constante des gaz parfaits et T la température (Cf. [R7.01.11] pour plus de détails). Pour un milieu saturé uniquement. Les données nécessaires du champ matériau sont fournies dans l'opérateur `DEFI_MATERIAU`, sous le mot clé `THM_GAZ`.

```
/ 'LIQU_SATU'
```

Loi de comportement pour un milieu poreux saturé par un seul liquide (Cf. [R7.01.11] pour plus de détails). Les données nécessaires du champ matériau sont fournies dans l'opérateur `DEFI_MATERIAU`, sous le mot clé `THM_LIQ`.

```
/ 'LIQU_GAZ_ATM'
```

Loi de comportement pour un milieu poreux non saturé avec un liquide et du gaz à pression atmosphérique (Cf. [R7.01.11] pour plus de détails). Les données nécessaires du champ matériau sont fournies dans l'opérateur `DEFI_MATERIAU`, sous les mots clés `THM_LIQ` et `THM_GAZ`.

```
/ 'LIQU_VAPE_GAZ'
```

Loi de comportement pour un milieu poreux non saturé eau/vapeur/air sec avec changement de phase (Cf. [R7.01.11] pour plus de détails). Les données nécessaires du champ matériau sont fournies dans l'opérateur `DEFI_MATERIAU`, sous les mots clés `THM_LIQ`, `THM_VAPE` et `THM_GAZ`.

```
/ 'LIQU_AD_GAZ_VAPE'
```

Loi de comportement pour un milieu poreux non saturé eau/vapeur/air sec/air dissous avec changement de phase (Cf. [R7.01.11] pour plus de détails). Les données nécessaires du champ matériau sont fournies dans l'opérateur `DEFI_MATERIAU`, sous les mots clés `THM_LIQ`, `THM_VAPE`, `THM_GAZ` et `THM_AIR_DISS`.

/ 'LIQU_VAPE'

Loi de comportement pour un milieu poreux saturé par un composant présent sous forme liquide ou vapeur. avec changement de phase (Cf. [R7.01.11] pour plus de détails). Les données nécessaires du champ matériau sont fournies dans l'opérateur `DEFI_MATERIAU`, sous les mots clés `THM_LIQ` et `THM_VAPE`. **Cette loi n'est valable que pour les modélisations de type THVD.**

/ 'LIQU_GAZ'

Loi de comportement pour un milieu poreux non saturé liquide/gaz sans changement de phase (Cf. [R7.01.11] pour plus de détails). Les données nécessaires du champ matériau sont fournies dans l'opérateur `DEFI_MATERIAU`, sous les mots clés `THM_LIQ` et `THM_GAZ`.

Le tableau ci-dessous précise les mots clés obligatoires pour les sous commandes suivantes en fonction de la loi de couplage choisie.

Légendes : O : Mot clé Obligatoire
T : Mot clé obligatoire en Thermique
 : Mot clé Inutile pour ce type de loi de couplage

	LIQU_SATU	LIQU_GAZ	GAZ	LIQU_GAZ_AT M	LIQU_VAPE_GAZ	LIQU_AD_GAZ_VAPE	LIQU_VAPE
THM_INIT	O	O	O	O	O	O	O
PRE1	O	O	O	O	O	O	O
PRE2		O			O	O	
PORO	O	O	O	O	O	O	O
TEMP	T	O	O	T	O	O	O
PRES_VAPE					O	O	O
THM_DIFFU	O	O	O	O	O	O	O
R_GAZ		O	O		O	O	O
RHO	O	O	O	O	O	O	O
BIOT_COEF	O	O	O	O	O	O	O
PESA_X	O	O	O	O	O	O	O
PESA_Y	O	O	O	O	O	O	O
PESA_Z	O	O	O	O	O	O	O
SATU_PRES		O	I	O	O	O	O
D_SATU_PRES		O	I	O	O	O	O
PERM_LIQU	I	O	I	O	O	O	O
D_PERM_LIQU_SATU		O		O	O	O	O
PERM_GAZ		O			O	O	O
D_PERM_SATU_GAZ		O			O	O	O
D_PERM_PRES_GAZ		O			O	O	O
FICKV_T					O	O	
FICKV_PV							
FICKV_PG							
FICKV_S							
D_FV_T							
D_FV_PG							
FICKA_T						O	
FICKA_PA							
FICKA_PL							
FICKA_S							
D_FA_T							
CP	T	T	T	T	T	T	T
PERM_IN/PERM_END	O	O	O	O	O	O	O
LAMB_T	T	T	T	T	T	T	T
LAMB_S							
LAMB_PHI							
LAMB_CT							
D_LB_T							
D_LB_S							
D_LB_PHI							
THM_LIQU	O	O		O	O	O	O
RHO	O	O		O	O	O	O
UN_SUR_K	O	O		O	O	O	O
VISC	O	O		O	O	O	O
D_VISC_TEMP	O	O		O	O	O	O
ALPHA	T	T		T	T	T	T
CP	T	T		T	T	T	T
THM_GAZ		O	O	O	O	O	
MASS_MOL		O	O	O	O	O	
VISC		O	O	O	O	O	

D_VISC_TEMP	0	0	0	0	0
CP	T	T	T	T	T
THM_VAPE_GAZ				0	0
MASS_MOL	0	0	0	0	0
CP	0	0	0	0	0
VISC	0	0	0	0	0
D_VISC_TEMP	0	0	0	0	0
THM_AIR_DISS				0	0
CP	0	0	0	0	0
COEF_HENRY	0	0	0	0	0

2.2.3 Mot clé facteur THM_INIT

Pour tous les comportements Thermo-Hydro-Mécaniques, il permet de décrire un état de référence de la structure (cf. [R7.01.11] et [R7.01.14]). Sa syntaxe est la suivante :

```
THM_INIT = _F (
    ♦ TEMP      = temp ,      [R]
    ♦ PRE1      = pre1 ,      [R]
    ♦ PRE2      = pre2 ,      [R]
    ♦ PORO      = poro ,      [R]
    ♦ PRES_VAPE = pvap ,      [R]
)
```

Pour bien comprendre ces données, il faut distinguer les inconnues aux noeuds, que nous appelons $\{u\}^{ddl}$ et les valeurs définies sous le mot clé THM_INIT que nous appelons p^{ref} et T^{ref}

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

La signification des inconnues PRE1 et PRE2 varie suivant les modèles. En notant p_w la pression d'eau, p_{ad} la pression d'air dissous, p_{lq} la pression de liquide $p_{lq} = p_w + p_{ad}$, p_{as} , p_{vp} la pression de vapeur, p_g la pression d'air sec et $p_g = p_{as} + p_{vp}$ la pression totale de gaz et $p_c = p_g - p_{lq}$ la pression capillaire (aussi appelée succion), on a les significations suivantes des inconnues PRE1 et PRE2

Comportement KIT	LIQU_SATU	LIQU_GAZ_ATM	GAZ	LIQU_VAPE_GAZ
PRE1	p_{lq}	$-p_{lq}$	p_g	$p_c = p_g - p_{lq}$
PRE2				p_g

Comportement KIT	LIQU_GAZ	LIQU_VAPE	LIQU_AD_GAZ_VAPE
PRE1	$p_c = p_g - p_{lq}$	p_{lq}	$p_c = p_g - p_{lq}$
PRE2	p_g		p_g

Tableau 2.2.3-1 : contenu de PRE1 et PRE2

On pourra se reporter au [§3.3.2.3] de la documentation de la commande STAT_NON_LINE [U4.51.03].

On définit alors les pressions et la température « totales » par :

$$p = p^{ddl} + p^{ref} ; T = T^{ddl} + T^{ref}$$

Toutes les valeurs en entrée ou sortie (conditions aux limites ou résultat de IMPR_RESU) sont les inconnues nodales p^{ddl} et T^{ddl} .

Par contre ce sont les pressions et la température totale qui sont utilisées dans les lois de comportement $\frac{p}{\rho} = \frac{R}{M} T$ pour les gaz parfaits, $\frac{d\rho_l}{\rho_l} = \frac{dp_l}{K_l} - 3\alpha_l dT$ pour le liquide et dans la relation saturation/pression capillaire.

Notons que les valeurs nodales peuvent être initialisées par le mot clé ETAT_INIT de la commande STAT_NON_LINE (cf. 2.3).

L'utilisateur doit être très prudent dans la définition des valeurs de THM_INIT : en effet, la définition de plusieurs matériaux avec des valeurs différentes des quantités définies sous THM_INIT conduit à des valeurs initiales discontinues de la pression et de la température, ce qui n'est en fait pas compatible avec le traitement général qui est fait de ces quantités. Nous conseillons donc à l'utilisateur la démarche suivante :

- si on a initialement un champ uniforme de pression ou de température, on le renseigne directement par le mot clé THM_INIT,
- si on a un champ non uniforme, on définit par exemple une référence par le mot clé THM_INIT de la commande DEFI_MATERIAU, et les valeurs initiales par rapport à cette référence par le mot clé ETAT_INIT de la commande STAT_NON_LINE (cf. 2.3).

◆ TEMP

Température de référence T_{ref} .

La valeur de la température de référence entrée derrière le mot clé TEMP_REF de la commande AFFE_MATERIAU est ignorée.

◆ PRE1

Comme vu dans le tableau 1 :

Pour les comportements : LIQU_SATU , et LIQU_VAPE pression de liquide de référence.

Pour le comportement : GAZ pression de gaz de référence.

Pour le comportement : LIQU_GAZ_ATM pression de liquide de référence changée de signe.

Pour les comportements : LIQU_VAPE_GAZ , LIQU_AD_GAZ_VAPE et LIQU_GAZ pression capillaire de référence.

◆ PRE2

Pour les comportements : LIQU_VAPE_GAZ, LIQU_AD_GAZ_VAPE et LIQU_GAZ et pression de gaz de référence.

Remarque importante :

Il ne faut jamais prendre une valeur de PRE2 égale à zéro sous peine de problèmes numériques.

◆ PORO

Porosité initiale.

◆ PRES_VAPE

Pression de vapeur initiale pour les comportements : LIQU_VAPE_GAZ, LIQU_AD_GAZ_VAPE, LIQU_VAPE et LIQU_GAZ.

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 :

$$p_w - p_w^0 = \frac{R}{M_{vp}^{ol}} T \ln \left(\frac{p_{vp}}{p_{vp}^{sat}(T)} \right)$$

Cette relation n'est valable que pour des évolutions isothermes. Pour des évolutions avec variation de température, connaissant une loi donnant la pression de vapeur saturante à la température T_c , par exemple :

$$p_{vp}^{sat}(T_0) = 10^{2.7858 + \frac{T_0 - 273.5}{31.559 + 1.1354(T_0 - 273.5)}}$$

, et un degré d'hygrométrie HR , on en déduit la pression de vapeur grâce à

$$p_{vp}(T_0) = HR p_{vp}^{sat}(T_0)$$

En outre, il ne faut jamais prendre une valeur de PRES_VAPE égale à zéro.

2.2.4 Mot clé facteur THM_LIQU

Ce mot clé concerne tous les comportements THM faisant intervenir un liquide (cf. [R7.01.11]). Sa syntaxe est la suivante :

```
THM_LIQU = _F (
    ◆ RHO                = rho ,      [R]
    ◇ UN_SUR_K           = usk ,      [R]
    ◇ ALPHA              = alp ,      [R]
    ◇ CP                 = cp ,       [R]
    ◇ VISC                = vi ,      [fonction **]
    ◇ D_VISC_TEMP        = dvi ,     [fonction **]
)
```

◆ RHO

Masse volumique du liquide pour la pression définie sous le mot clé PRE1 du mot clé facteur THM_INIT.

◇ UN_SUR_K

Inverse de la compressibilité du liquide : K_l .

◇ ALPHA

Coefficient de dilatation du liquide α_l

Si p_l désigne la pression du liquide, ρ_l sa masse volumique et T la température, le

comportement du liquide est : $\frac{d\rho_l}{\rho_l} = \frac{dp_l}{K_l} - 3\alpha_l dT$

◇ CP

Chaleur massique à pression constante du liquide.

- ◇ VISC [fonction**]
Viscosité du liquide. Fonction de la température.
- ◇ D_VISC_TEMP [fonction**]
Dérivée de la viscosité du liquide par rapport à la température. Fonction de la température. L'utilisateur doit assurer la cohérence avec la fonction associée à VISC.

2.2.5 Mot clé facteur THM_GAZ

Ce mot clé facteur concerne tous les comportements THM faisant intervenir un gaz (cf. [R7.01.11]). Pour les comportements faisant intervenir à la fois un liquide et un gaz, et quand on prend en compte l'évaporation du liquide, les coefficients renseignés ici concernent le gaz sec. Les propriétés de la vapeur sont renseignées sous le mot clé THM_VAPE_GAZ. Sa syntaxe est la suivante :

```
THM_GAZ = _F (
    ◇ MASS_MOL      = Mgs ,      [R]
    ◇ CP            = cp ,      [R]
    ◇ VISC          = vi ,      [fonction **]
    ◇ D_VISC_TEMP  = dvi ,      [fonction **]
)
```

- ◇ MASS_MOL

Masse molaire du gaz sec. M_{gs}

Si p_{gs} désigne la pression du gaz sec, ρ_{gs} sa masse volumique, R la constante des gaz parfaits et T la température, le comportement du gaz sec est : $\frac{p_{gs}}{\rho_{gs}} = \frac{RT}{M_{gs}}$.

- ◇ CP

Chaleur massique à pression constante du gaz sec.

- ◇ VISC [fonction**]

Viscosité du gaz sec. Fonction de la température.

- ◇ D_VISC_TEMP [fonction**]

Dérivée par rapport à la température de la viscosité du gaz sec. Fonction de la température. L'utilisateur doit assurer la cohérence avec la fonction associée à VISC.

2.2.6 Mot clé facteur THM_VAPE_GAZ

Ce mot clé facteur concerne tous les comportements THM faisant intervenir à la fois un liquide et un gaz, et prenant en compte l'évaporation du liquide (cf. [R7.01.11]). Les coefficients renseignés ici concernent la vapeur. La syntaxe est la suivante :

```
THM_VAPE_GAZ = _F (
    ◇ MASS_MOL      = m ,      [R]
    ◇ CP            = cp ,      [R]
    ◇ VISC          = vi ,      [fonction **]
    ◇ D_VISC_TEMP  = dvi ,      [fonction **]
)
```

◇ MASS_MOL

Masse molaire de la vapeur. M_{vp}

◇ CP

Chaleur massique à pression constante de la vapeur.

◇ VISC [fonction**]

Viscosité de la vapeur. Fonction de la température.

◇ D_VISC_TEMP [fonction**]

Dérivée par rapport à la température de la viscosité de la vapeur. Fonction de la température.
L'utilisateur doit assurer la cohérence avec la fonction associée à VISC.

2.2.7 Mot clé facteur THM_AIR DISS

Ce mot clé facteur concerne le comportement THM THM_AD_GAZ_VAPE prenant en compte la dissolution de l'air dans le liquide (cf. [R7.01.11]). Les coefficients renseignés ici concernent l'air dissous. La syntaxe est la suivante :

```
THM_AD_GAZ_VAPE = _F (
  ◆ CP = cp , [R]
  ◆ COEF_HENRY = kh , [fonction **]
)
```

◇ CP

Chaleur massique à pression constante de l'air dissous.

◇ COEF_HENRY

Constante de Henry K_H , permettant de relier la concentration molaire d'air dissous C_{ad}^{ol} (moles/m³) à la pression d'air sec :

$$C_{ad}^{ol} = \frac{P_{as}}{K_H}$$

Remarque :

La constante de Henry que nous utilisons ici s'exprime en Pa.m³.mol⁻¹. Dans la littérature il existe différentes manières d'écrire la loi de Henry. Par exemple dans la formulation du cahier des charges de la plate-forme Alliances [bib2]. La loi de Henry est donnée par

$\omega_l^a = \frac{P_{as}}{H} \frac{M_{as}^{ol}}{M_w} \rho_w$ avec la concentration d'air dans l'eau que l'on peut ramener à une masse volumique telle que $\omega_l^a = \rho_{ad}$. H est un coefficient qui s'exprime en Pa. Il faudra dans ces cas écrire l'équivalence $K_H = H \frac{M_w}{\rho_w}$

2.2.8 Mot clé facteur THM_DIFFU

Obligatoire pour tous les comportements THM (cf. [R7.01.11]). L'utilisateur doit s'assurer de la cohérence des fonctions et de leur dérivée. La syntaxe est la suivante :

```
THM_DIFFU = _F (
  ◆ R_GAZ           = rgaz ,           [R]
  ◇ RHO            = rho ,           [R]
  ◇ CP             = cp ,           [R]
  ◇ BIOT_COEF      = bio ,           [R]
  ◇ SATU_PRES      = sp ,           [fonction]
  ◇ D_SATU_PRES    = dsp ,           [fonction]
  ◇ PESA_X         = px ,           [R]
  ◇ PESA_Y         = py ,           [R]
  ◇ PESA_Z         = pz ,           [R]
  ◇ PERM_IN        = perm ,         [fonction]
  ◇ PERM_LIQU      = perml ,        [fonction]
  ◇ D_PERM_LIQU_SATU = dperm ,      [fonction]
  ◇ PERM_GAZ       = permg ,        [fonction]
  ◇ D_PERM_SATU_GAZ = dpsg ,        [fonction]
  ◇ D_PERM_PRES_GAZ = dppg ,        [fonction]
  ◇ FICKV_T        = fvt ,           [fonction]
  ◇ FICKV_PV       = / fvpv ,       [fonction]
  / 1 ,           [DEFAULT]
  ◇ FICKV_PG       = / fvpv ,       [fonction]
  / 1 ,           [DEFAULT]
  ◇ FICKV_S        = / fvs ,        [fonction]
  / 1 ,           [DEFAULT]
  ◇ D_FV_T         = / dfvt ,       [fonction]
  / 0 ,           [DEFAULT]
  ◇ D_FV_PG        = / dfvpg ,      [fonction]
  / 0 ,           [DEFAULT]
  ◇ FICKA_T        = fat ,           [fonction]
  ◇ FICKA_PA       = / fapv ,       [fonction]
  / 1 ,           [DEFAULT]
  ◇ FICKA_PL       = / fapg ,       [fonction]
  / 1 ,           [DEFAULT]
  ◇ FICKA_S        = / fas ,        [fonction]
  / 1 ,           [DEFAULT]
  ◇ D_FA_T         = / dfat ,       [fonction]
  / 0 ,           [DEFAULT]
  ◇ LAMB_T         = / lambt ,      [fonction]
  / 0 ,           [DEFAULT]
  ◇ LAMB_S         = / lambs ,      [fonction]
  / 1 ,           [DEFAULT]
  ◇ LAMB_PHI       = / lambp ,      [fonction]
  / 1 ,           [DEFAULT]
  ◇ LAMB_CT        = / lambct ,     [fonction]
  / 0 ,           [DEFAULT]
  ◇ D_LB_S         = / dlambs ,     [fonction]
  / 0 ,           [DEFAULT]
  ◇ D_LB_T         = / dlambt ,     [fonction]
  / 0 ,           [DEFAULT]
  ◇ D_LB_PHI       = / dlambp ,     [fonction]
  / 0 ,           [DEFAULT]
  ◇ SIGMA_T        = st ,           [fonction]
  ◇ D_SIGMA_T      = dst ,         [fonction]
  ◇ PERM_G_INTR    = pgi ,         [fonction]
```

```
◇ CHAL_VAPO          = cv  ,          [fonction **]  
◇ EMMAG              = em  ,          [R]  
)
```

◆ R_GAZ

Constante des gaz parfaits.

◇ RHO

Pour les comportements hydrauliques masse volumique homogénéisée initiale [R7.01.11].

◇ CP

Pour les comportements thermiques, chaleur massique à contrainte constante du solide seul (des grains).

Remarque :

Attention il s'agit ici de la chaleur massique uniquement et non pas de « ρC_p », comme c'est fait pour d'autres commandes thermiques. La masse volumique des grains est calculée dans le code à partir de la masse volumique homogénéisée [R7.01.11].

◇ BIOT_COEF

Coefficient de Biot.

◇ SATU_PRES [fonction**]

Pour les comportements de matériaux non saturés (LIQU_VAPE_GAZ, LIQU_GAZ, LIQU_GAZ_ATM), isotherme de saturation fonction de la pression capillaire.

Remarque :

Pour des raisons numériques, il faut éviter que la saturation atteigne la valeur 1. Aussi il est très fortement recommandé de multiplier la fonction capillaire (comprise généralement entre 0 et 1) par 0,999.comme indiqué sur le fichier de commande donné en exemple en annexe.

◇ D_SATU_PRES [fonction**]

Pour les comportements de matériaux non saturés (LIQU_VAPE_GAZ, LIQU_GAZ, LIQU_GAZ_ATM), dérivée de la saturation par rapport à la pression.

◇ PESA_X

Pesanteur selon x, utilisé uniquement si la modélisation choisie dans AFFE_MODELE inclut 1 ou 2 variables de pression.

Remarque :

La pesanteur définie ici est celle utilisée dans l'équation de Darcy uniquement. Quand il y a des calculs mécaniques, la pesanteur est également définie dans AFFE_CHAR_MECA. Cette remarque s'applique bien sur pour les trois composantes de la pesanteur.

◇ PESA_Y

Pesanteur selon y, utilisé uniquement si la modélisation choisie dans AFFE_MODELE inclut 1 ou 2 variables de pression.

◇ PESA_Z

Pesanteur selon z, utilisé uniquement si la modélisation choisie dans AFFE_MODELE inclut 1 ou 2 variables de pression.

◇ PERM_IN [fonction**]

Perméabilité intrinsèque : fonction de la porosité.

La perméabilité au sens classique K , dont la dimension est celle d'une vitesse se calcule de la façon suivante :

$$K = \frac{K_{int} K_{rel}}{m} \rho_l g$$
 où K_{int} est la perméabilité intrinsèque, K_{rel} la perméabilité relative, m la viscosité, ρ_l la masse volumique du liquide et g l'accélération de la pesanteur.

◇ PERM_LIQ [fonction**]

Perméabilité relative au liquide : fonction de la saturation.

◇ D_PERM_LIQ_SATU [fonction**]

Dérivée de la Perméabilité relative au liquide par rapport à la saturation : fonction de la saturation.

◇ PERM_GAZ [fonction**]

Perméabilité relative au gaz : fonction de la saturation et de la pression de gaz.

◇ D_PERM_SATU_GAZ [fonction**]

Dérivée de la perméabilité au gaz par rapport a la saturation : fonction de la saturation et de la pression de gaz.

◇ D_PERM_PRES_GAZ [fonction**]

Dérivée de la perméabilité au gaz par rapport a la pression de gaz : fonction de la saturation et de la pression de gaz.

◇ FICKV_T [fonction**]

Pour les comportements LIQU_VAPE_GAZ et LIQU_AD_GAZ_VAPE, partie multiplicative du coefficient de Fick fonction de la température pour la diffusion de la vapeur dans le mélange gazeux. Le coefficient de Fick pouvant être fonction de la saturation, la température, la pression de gaz et la pression de vapeur, on le définit comme un produit de 4 fonctions : FICKV_T, FICKV_S, FICKV_PG, FICKV_VP. Seul FICKV_T est obligatoire pour les comportements LIQU_VAPE_GAZ et LIQU_AD_GAZ_VAPE.

◇ FICKV_S [fonction**]

Pour les comportements LIQU_VAPE_GAZ et LIQU_AD_GAZ_VAPE, partie multiplicative du coefficient de Fick fonction de la saturation pour la diffusion de la vapeur dans le mélange gazeux. Dans le cas où on utilise cette fonction, on recommande de prendre FICKV_S(1) = 0.

◇ FICKV_PG [fonction**]

Pour les comportements LIQU_VAPE_GAZ et LIQU_AD_GAZ_VAPE, partie multiplicative du coefficient de Fick fonction de la pression de gaz pour la diffusion de la vapeur dans le mélange gazeux.

◇ FICKV_VP [fonction**]

Pour les comportements LIQU_VAPE_GAZ et LIQU_AD_GAZ_VAPE, partie multiplicative du coefficient de Fick fonction de la pression de vapeur pour la diffusion de la vapeur dans le mélange gazeux.

◇ D_FV_T [fonction**]

Pour les comportements LIQU_VAPE_GAZ et LIQU_AD_GAZ_VAPE, dérivée du coefficient FICKV_T par rapport à la température.

- ◇ D_FV_PG [fonction**]
Pour les comportements LIQU_VAPE_GAZ et LIQU_AD_GAZ_VAPE, dérivée du coefficient FICKV_PG par rapport à la pression de gaz.
- ◇ FICKA_T [fonction**]
Pour le comportement LIQU_AD_GAZ_VAPE, partie multiplicative du coefficient de Fick fonction de la température pour la diffusion de l'air dissous dans le mélange liquide. Le coefficient de Fick pouvant être fonction de la saturation, la température, la pression d'air dissous et la pression de liquide, on le définit comme un produit de 4 fonctions : FICKA_T, FICKA_S, FICKV_PA, FICKV_PL. Dans le cas de LIQU_AD_GAZ_VAPE, seul FICKA_T est obligatoire.
- ◇ FICKA_S [fonction**]
Pour le comportement LIQU_AD_GAZ_VAPE, partie multiplicative du coefficient de Fick fonction de la saturation pour la diffusion de l'air dissous dans le mélange liquide.
- ◇ FICKA_PA [fonction**]
Pour le comportement LIQU_AD_GAZ_VAPE, partie multiplicative du coefficient de Fick fonction de la pression d'air dissous pour la diffusion de l'air dissous dans le mélange liquide.
- ◇ FICKA_PL [fonction**]
Pour le comportement LIQU_AD_GAZ_VAPE, partie multiplicative du coefficient de Fick fonction de la pression de liquide pour la diffusion de l'air dissous dans le mélange liquide.
- ◇ D_FA_T [fonction**]
Pour le comportement LIQU_AD_GAZ_VAPE, dérivée du coefficient FICKA_T par rapport à la température.
- ◇ LAMB_T [fonction**]
Partie multiplicative de la conductivité thermique du mélange dépendant de la température (cf. [§2.2.9]). Cette opérande est obligatoire dans le cas thermique.
- ◇ LAMB_S [fonction**]
Partie multiplicative (égale à 1 par défaut) de la conductivité thermique du mélange dépendant de la saturation (cf. [§2.2.9]).
- ◇ LAMB_PHI [fonction**]
Partie multiplicative (égale à 1 par défaut) de la conductivité thermique du mélange dépendant de la porosité (cf. [§2.2.9]).
- ◇ LAMB_CT [fonction**]
Partie de la conductivité thermique du mélange constante et additive (cf. [§2.2.9]). Cette constante est égale à zéro par défaut.
- ◇ D_LB_T [fonction**]
Dérivée de la partie de la conductivité thermique du mélange dépendant de la température par rapport à la température.
- ◇ D_LB_S [fonction**]
Dérivée de la partie de la conductivité thermique du mélange dépendant de la saturation.
- ◇ D_LB_PHI [fonction**]
Dérivée de la partie de la conductivité thermique du mélange dépendant de la porosité.

◇ EMMAG [fonction**]

Coefficient d'emménagement. Ce coefficient n'est pris en compte que dans les cas des modélisations sans mécanique.

2.2.9 Récapitulation des fonctions de couplages et leur dépendance

Les tableaux ci-dessous rappelle les différentes fonctions et leur éventuelles dépendances et obligation.

Mot clé facteur THM_LIQU

◆	RHO	ρ_{lq}^0
◇	UN_SUR_K	$\frac{1}{K_{lq}}$
◇	ALPHA	α_{lq}
◇	CP	C_{lq}^p
◇	VISC	$\mu_{lq}(T)$
◇	D_VISC_TEMP	$\frac{\partial \mu_{lq}(T)}{\partial T}$

Mot clé facteur THM_GAZ

◇	MASS_MOL	M_{as}^{ol}
◇	CP	C_{as}^p
◇	VISC	$\mu_{as}(T)$
◇	D_VISC_TEMP	$\frac{\partial \mu_{as}(T)}{\partial T}$

Mot clé facteur THM_VAPE_GAZ

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

Mot clé facteur THM_AIR_DISS

◇	CP	C_{ad}^p
◇	COEF_HENRY	K_H

Mot clé facteur THM_INIT

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

2.2.9.1 Mot clé facteur THM_DIFFU

◆	R_GAZ	R
◇	RHO	r_0
◇	CP	C_σ^s
◇	BIOT_COEF	b
◇	SATU_PRES	$S_{lq}(p_c)$
◇	D_SATU_PRES	$\frac{\partial S_{lq}(p_c)}{\partial p_c}$
◇	PESA_X	F_x^m
◇	PESA_Y	F_y^m
◇	PESA_Z	F_z^m
◇	PERM_IN	$K^{int}(\phi)$
◇	PERM_LIQU	$k_{lq}^{rel}(S_{lq})$
◇	D_PERM_LIQU_SATU	$\frac{\partial k_{lq}^{rel}(S_{lq})}{\partial S_{lq}}$
◇	PERM_GAZ	$k_{gz}^{rel}(S_{lq}, p_{gz})$
◇	D_PERM_SATU_GAZ	$\frac{\partial k_{gz}^{rel}(S_{lq}, p_{gz})}{\partial S_{lq}}$
◇	D_PERM_PRES_GAZ	$\frac{\partial k_{gz}^{rel}(S_{lq}, p_{gz})}{\partial p_{gz}}$
◇	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	$\frac{\partial f_{vp}^T(T)}{\partial T}$

◇	D_FV_PG	$\frac{\partial f_{vp}^{gz}(P_{gz})}{\partial P_{gz}}$
◇	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	$\frac{\partial f_{ad}^T(T)}{\partial T}$
◇	LAMB_T	$\lambda_T^T(T)$
◇	D_LB_T	$\frac{\partial \lambda_T^T(T)}{\partial T}$
◇	LAMB_PHI	$\lambda_\varphi^T(\varphi)$
◇	D_LB_PHI	
◇	LAMB_S	$\lambda_S^T(S)$
◇	D_LB_S	$\frac{\partial \lambda_S^T(S)}{\partial S}$
◇	LAMB_CT	λ_{CT}^T

Remarque :

Dans le cas où il y a de la thermique :

λ^T est fonction de la porosité, de la saturation et de la température et est donnée sous la forme du produit de trois fonctions :

$\lambda^T = \lambda_\varphi^T(\varphi) \cdot \lambda_S^T(S_{lq}) \cdot \lambda_T^T(T) + \lambda_{cte}^T$ avec $\lambda_T^T(T)$ (c.a.d $LAMB_T$) obligatoire et les autres fonctions par défaut prises égales à un, sauf $\lambda_{cte}^T = 0$.

Pour le coefficient de Fick du mélange gazeux, dans le cas $LIQU_VAPE_GAZ$ et $LIQU_AD_GAZ_VAPE$ $F_{vp}(P_{vp}, P_{gz}, T, S) = f_{vp}^{vp}(P_{vp}) \cdot f_{vp}^{gz}(P_{gz}) \cdot f_{vp}^T(T) \cdot f_{vp}^S(S)$ avec $f_{vp}^T(T)$ obligatoire, les autres fonctions étant prises par défaut égales à un, et les dérivées égales à zéro. on négligera les dérivées par rapport à la pression de vapeur et à la saturation.

Dans le cas $LIQU_VAPE_GAZ_AD$, le coefficient de Fick du mélange liquide sera sous le forme : $F_{ad}(P_{ad}, P_{lq}, T, S) = f_{ad}^{ad}(P_{ad}) \cdot f_{ad}^{lq}(P_{lq}) \cdot f_{ad}^T(T) \cdot f_{ad}^S(S)$, avec $f_{ad}^T(T)$ obligatoire, les autres fonctions étant prises par défaut égales à un, et la dérivée égale à zéro. On ne considère que la dérivée par rapport à la température (les autres sont de toutes façons prises égales à zéro).

2.3 Initialisation du calcul

Pour définir un état initial, il faut définir un état de contraintes (aux éléments), des inconnues nodales . et des variables internes.

- Dans le mot clé THM_INIT de DEFI_MATERIAU , on définit des valeurs de référence pour les inconnues nodales.
- Par le mot clé DEPL du mot clé facteur ETAT_INIT de la commande STAT_NON_LINE , on affecte le champs d'initialisation des inconnues nodales.
- Par le mot clé SIGM du mot clé facteur ETAT_INIT . de la commande STAT_NON_LINE , on affecte le champs d'initialisation des contraintes.
- Par le mot clé VARI du mot clé facteur ETAT_INIT on affecte (éventuellement) le champs d'initialisation des variables internes.

Afin de préciser les choses, on rappelle à quelle catégorie de variables appartient chaque grandeur physique (ces grandeurs physiques existant ou non suivant la modélisation choisie) :

Inconnues nodales	$p_c, p_g, p_{lq}, T, u_x, u_y, u_z$
Contraintes aux points de Gauss	$\sigma'_{xx}, \sigma'_{yy}, \sigma'_{zz}, \sigma'_{xy}, \sigma'_{xz}, \sigma'_{yz}, \sigma_p,$ $m_w, M_{w_x}, M_{w_y}, M_{w_z}, m_{vp}, M_{vp_x}, M_{vp_y}, M_{vp_z}, m_{as}, M_{as_x}, M_{as_y}, M_{as_z},$ $m_{ad}, M_{ad_x}, M_{ad_y}, M_{ad_z}, h_w^m, h_{vp}^m, h_{as}^m, h_{ad}^m, Q', q_x, q_y, q_z$
Variables internes	$\phi, \rho_{lq}, p_{vp}, S_{lq}$

La correspondance entre nom de composante Aster et grandeur physique est explicitée en [§Annexe 1].

L'initialisation des inconnues nodales ainsi que la différence entre état initial et état de référence ont été décrites et détaillées dans [§2.2.3]. On rappelle néanmoins que $p = p^{ddl} + p^{ref}$ pour les pressions PRE1 et PRE2 et $T = T^{ddl} + T^{ref}$ pour les températures, où p^{ref} et T^{ref} sont définis sous le mot clé THM_INIT de la commande DEFI_MATERIAU.

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 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 $u = u^{ddl} + u^{ref}$ 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.

Concernant les contraintes, les champs à renseigner sont les contraintes indiquées en annexe I suivant la modélisation choisie.

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. L'introduction des conditions initiales est très importante, 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. Dans cet état de référence, on peut considérer que les enthalpies sont nulles,
- l'état initial : il doit être en équilibre thermodynamique. Pour les enthalpies de l'eau et de la vapeur on devra prendre :

$${}^{init}h_w^m = \frac{P_w^{init} - P_l^{ref}}{\rho_w} = \frac{P_w^{init} - P_{atm}}{\rho_w}$$

$${}^{init}h_{vp}^m = L(T^{init}) = \text{chaleur latente de vaporisation}$$

$${}^{init}h_{as}^m = 0$$

$${}^{init}h_{ad}^m = 0$$

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

Remarque :

La pression initiale de vapeur devra être prise en cohérence avec ces choix (cf [§2.2.3]).

Concernant les contraintes mécaniques, la partition des contraintes en contraintes totale et effective s'écrit :

$$\sigma = \sigma' + \sigma_p \mathbf{1}$$

où σ est la contrainte totale, c.a.d celle qui vérifie : $\text{Div}(\sigma) + rF^m = 0$

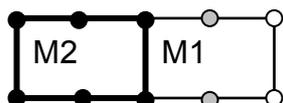
σ' est la contrainte effective. Pour les lois de contraintes effectives, elle vérifie :

$d\sigma' = f(d\varepsilon - \alpha_0 dT, \alpha)$, où $\varepsilon = \frac{1}{2}(\nabla u + {}^T\nabla u)$ et α représente les variables internes.

σ_p se calcule en fonction des pressions hydrauliques. L'écriture adoptée est incrémentale et, si l'on veut que la valeur de σ_p soit cohérente avec la valeur p^{ref} (PRE1) définie sous le mot clé THM_INIT, il faut initialiser σ_p par le mot clé SIGM du mot clé facteur ETAT_INIT de la commande STAT_NON_LINE.

Mise en garde :

Dans le cas d'un champs de pressions ou de températures hétérogène, il faut assurer « manuellement la continuité » entre les champs. Celle ci n'est – pour l'instant – pas prise en compte automatiquement. Dans l'état actuel, les degrés de libertés (ddl) aux nœuds situés à l'interface entre deux mailles prennent la valeur du ddl du matériau initialisé en dernier comme sur la figure. En conséquence le matériaux affecté en premier se retrouve avec des valeurs de déplacements hétérogènes. Pour assurer la continuité, il faut imposer aux nœuds milieu (en grisé sur la [Figure 2.3-a]) une valeur moyenne entre les deux matériaux. Ce traitement est nécessaire en vu d'un post-traitement correct mais n'a pas d'impact sur le calcul en lui même.



- Valeur au nœud du ddl rentré pour la maille M1 (affecté en premier)
- Valeur au nœud du ddl rentré pour la maille M2 (affecté en second)
- Valeur à modifier (moyenne entre M1 et M2)

Figure 2.3-a : Gestion des discontinuités entre deux mailles

Si on se réfère à l'exemple présenté en [Annexe 3], les champs de déplacements initialisés dans ETAT_INIT sont alors définis par exemple de la manière suivante :

```
CHAMNO=CREA_CHAMP (MAILLAGE=MAIL,
                    OPERATION='AFFE',
                    TYPE_CHAM='NOEU_DEPL_R',
                    AFFE=( _F (TOUT='OUI',
                               NOM_CMP='TEMP',
                               VALE=0.0, ),
                          _F (GROUP_NO='SURFBO',
                               NOM_CMP='PRE1',
                               VALE=7.E7, ),
                          _F (GROUP_NO='SURFBG',
                               NOM_CMP='PRE1',
                               VALE=3.E7, ),
                          _F (NOEUD= ('NO300', 'NO296'),
                               NOM_CMP='PRE1',
                               VALE=5.E7, ),
                          _F (GROUP_NO='SURFBO',
                               NOM_CMP='PRE2',
                               VALE=0.0, ),
                          _F (GROUP_NO='SURFBG',
                               NOM_CMP='PRE2',
                               VALE=0.0, ), ), );
```

Et les champs de contrainte de la manière suivante:

```
SIGINIT=CREA_CHAMP (MAILLAGE=MAIL,
                    OPERATION='AFFE',
                    TYPE_CHAM='CART_SIEF_R',
                    AFFE=( _F (GROUP_MA='BO',
                               NOM_CMP=
                               ('SIXX', 'SIYY', 'SIZZ', 'SIXY', 'SIXZ',
                                'SIYZ', 'SIP', 'M11', 'FH11X', 'FH11Y', 'ENT11',
                                'M12', 'FH12X', 'FH12Y', 'ENT12',
                                'QPRIM', 'FHTX', 'FHTY', 'M21',
                                'FH21X', 'FH21Y', 'ENT21',
                                'M22', 'FH22X', 'FH22Y', 'ENT22', ),
                               VALE=
                               (0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,
                                0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,
```

```
0.0,0.0,0.0, 2500000.0,  
0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,  
0.,0.,0.,0.) , ) , )
```

2.4 Chargements et conditions aux limites

Toutes les conditions aux limites ou chargement sont affectés via la commande `AFFE_CHAR_MECA` [U4.44.01]. Les chargements sont ensuite activés par le mot clé facteur `EXCIT` de la commande `STAT_NON_LINE`.

De manière classique, deux types de conditions aux limites sont possibles :

- Des conditions de type Dirichlet qui consistent à imposer sur une partie de frontière des valeurs fixées pour des inconnues principales appartenant à $\{u\}^{ddl}$ (et non $u = u^{ddl} + u^{init}$) pour cela on utilise du mot clé facteur `DDL_IMPO` de `AFFE_CHAR_MECA`.
- Des conditions de type Neuman qui consistent à imposer des valeurs aux « quantités duales », soit en ne disant rien (flux nuls), soit en leur donnant une valeur via les mots clés `FLUN`, `FLUN_HYDR1` et `FLUN_HYDR2` du mot clé facteur `FLUX_THM_REP` de la commande `AFFE_CHAR_MECA`. Ce flux est ensuite multiplié par une fonction du temps (par défaut égale à 1) dans le sous mot clé `EXCIT` de la commande `STAT_NON_LINE`. Les conditions mécaniques en contraintes totales $\sigma.n$ sont elles données via `PRES_REP` de la commande `AFFE_CHAR_MECA`. On se référera à la documentation de cette commande pour en connaître les possibilités.

D'un point de vue syntaxique les conditions de Dirichlet s'appliquent donc comme sur l'exemple suivant

```
DIRI=AFFE_CHAR_MECA (MODELE=MODELE,  
                    DDL_IMPO= ( _F (GROUP_NO='GAUCHE',  
                                TEMP=0.0, ) ,  
                                _F (TOUT='OUI',  
                                PRE2=0.0, ) ,  
                                _F (GROUP_NO='GAUCHE',  
                                PRE1=0.0, ) ,  
                                _F (TOUT='OUI',  
                                DX=0.0, ) ,  
                                _F (TOUT='OUI',  
                                DY=0.0, ) ,  
                                _F (TOUT='OUI',  
                                DZ=0.0, ) ,  
                    ) , )
```

Pour les conditions de Neuman, la syntaxe sera alors comme sur l'exemple suivant :

```
NEU1=AFFE_CHAR_MECA (MODELE=MODELE,  
                    FLUX_THM_REP= _F (GROUP_MA='DROIT',  
                                FLUN=200.,  
                                FLUN_HYDR1=0.0,  
                                FLUN_HYDR2=0.0) , ) ;  
NEU2=AFFE_CHAR_MECA (MODELE=MODELE,  
                    PRES_REP= _F (GROUP_MA='DROIT',  
                                PRES=2., ) , ) ;
```

On définit ensuite la fonction multiplicative que l'on veut appliquer, par exemple à `NEU1` :

```
FLUX=DEFI_FONCTION (NOM_PARA='INST',  
                   VALÉ=
```

```
(0.0, 386.0,  
315360000.0, 312.0,  
9460800000.0, 12.6), );
```

Les chargements sont ensuite activés dans STAT_NON_LINE via le mot clé EXCIT de la manière suivante :

```
EXCIT= (
    _F (CHARGE=DIRI, ),
    _F (CHARGE=NEU2, ),
    _F (CHARGE=NEU1,
        FONC_MULT=FLUX, ),
    ),
```

FLUN correspond à la valeur du flux de chaleur. FLUN_HYDR1 et FLUN_HYDR2 correspondent aux valeurs des flux hydrauliques associés aux pressions PRE1 et PRE2. S'il n'y a pas d'ambiguïté pour la thermique ou la mécanique, en revanche les inconnues principales hydrauliques PRE1 et PRE2 changent suivant le couplage choisi. Comme on le rappelle ci-dessous

Comportement	LIQU_SATU	LIQU_VAPE	LIQU_GAZ_ATM	GAZ	LIQU_VAPE_GAZ LIQU_GAZ LIQU_AD_GAZ_VA PE
PRE1	p_{lq}	p_{lq}	$-p_{lq}$	p_g	$p_c = p_g - p_{lq}$
PRE2					p_g

Les flux associés sont :

$$\text{Pour PRE1, FLUN_HYDR1 : } (M_w + M_{vp}) \cdot n = M_w^{ext} + M_{vp}^{ext}$$

$$\text{Pour PRE2, FLUN_HYDR2 : } (M_{ad} + M_{as}) \cdot n = M_{ad}^{ext} + M_{as}^{ext}$$

Nous allons donc résumer les diverses possibilités en distinguant le cas où on impose des valeurs à PRE1 et/ou PRE2 et celui où on travaille sur des combinaisons des 2. On signale qu'on peut bien sur avoir différents types de conditions aux limites suivant les morceaux de frontière (groupes de nœuds ou de mailles) que l'on traite. Pour un aperçu plus complet et plus détaillé de la manière dont sont traitées les conditions aux limites dans le cas non saturé, on se reportera à la note reproduite dans l'annexe 2.

- **Cas des conditions aux limites faisant intervenir les inconnues principales PRE1 et PRE2**

On résume ici le cas habituel où on impose des valeur à PRE1 et/ou PRE2.

- Dirichlet sur PRE1 et Dirichlet sur PRE2
L'utilisateur impose une valeur à PRE1 et PRE2 ; les flux sont des résultats de calcul.
- Dirichlet sur PRE1 et Neuman sur PRE2
L'utilisateur impose une valeur à PRE1 et une valeur au flux associé à PRE2 en ne disant rien sur PRE2 ou en donnant une valeur à FLUN_HYDR2.
- Dirichlet sur PRE2 et Neuman sur PRE1
L'utilisateur impose une valeur à PRE2 et une valeur au flux associé à PRE1 en ne disant rien sur PRE1 ou en donnant une valeur à FLUN_HYDR1.
- Neuman sur PRE2 et Neuman sur PRE1
Les deux flux sont imposés soit en ne disant rien sur PRE1 et/ou PRE2 (flux nuls) soit en donnant une valeur à FLUN_HYDR1.et/ou FLUN_HYDR2

- **Cas des conditions aux limites faisant intervenir une relation linéaire entre les inconnues principales PRE1 et PRE2**

Il est également possible de manier des combinaisons linéaires de PRE1 et PRE2. Il faut toutefois manier cela avec précaution de manière à partir d'un problème correctement posé. La syntaxe de cet opérateur est détaillée dans la documentation de AFFE_CHAR_MECA, l'exemple ci-dessous en illustre ce type de condition:

```
P_DDL=AFFE_CHAR_MECA (MODELE=MODELE,  
                      LIAISON_GROUP=( _F (  
                                      GROUP_NO_1= 'BORDS',  
                                      GROUP_NO_2= 'BORDS',  
                                      DDL_1='PRE1',  
                                      DDL_2='PRE2',  
                                      COEF_MULT_1 = x,  
                                      COEF_MULT_2 = y.,  
                                      COEF_IMPO =z, ) , ) ,  
                      ) ;
```

Cette commande signifie que sur la frontière définie par le groupe de nœuds 'BORDS', les pressions PRE1 et PRE2 sont reliées par la relation linéaire

$$x \text{ PRE1} + y \text{ PRE2} = z$$

Remarque :

Les flux imposés sont des quantités scalaires qui peuvent s'appliquer sur une ligne ou une surface interne au solide modélisé. Dans ce cas, ces conditions aux limites correspondent à une source.

2.5 Le calcul non linéaire

Le calcul est effectué par la commande STAT_NON_LINE comme dans l'exemple ci-dessous :

```
U0=STAT_NON_LINE (MODELE=MODELE,  
                  CHAM_MATER=CHMAT0,  
                  EXCIT=(  
                      _F (CHARGE=T_IMP, ) ,  
                      _F (CHARGE=CALINT,  
                          FONC_MULT=FLUX, ) , ) ,  
                  COMP_INCR=_F (RELATION='KIT_THHM',  
                                RELATION_KIT=('ELAS', 'LIQU_GAZ' , 'HYDR_UTILITY'), ) ,  
RECH_LINEAIRE =_F (RESI_LINE_RELA = 1.E-3 ,  
RHO_MIN       = 0.1 ,  
                RHO_MAX           = 0.2 ,  
                ITER_LINE_MAXI    = 3 , ) ,  
                  ETAT_INIT=_F (DEPL=CHAMNO,  
                                SIGM=SIGINIT),  
                  INCREMENT=_F (LIST_INST=INST1, ) ,  
                  NEWTON=_F (MATRICE='TANGENTE', REAC_ITER=10, ) ,  
CONVERGENCE=_F (RESI_GLOB_MAXI=1.0000000000000001E-05,  
                ITER_GLOB_MAXI=150,  
                ARRET='NON',  
                ITER_INTE_MAXI=5, ) ,  
                  ARCHIVAGE=_F (PAS_ARCH=1, ) , ) ;
```

A cette commande on affecte le modèle (mot clé MODELE), le/les matériaux (mot clé CHAM_MATER), le/les chargements (mot clé EXCIT) et l'état initial (mot clé ETAT_INIT) que l'on a définis par toutes les commandes décrites précédemment.

Pour les informations générales concernant cette commande et sa syntaxe, on se reportera à sa documentation. On précise juste que la méthode de calcul est une méthode de Newton.

Attention :

Sous le mot clé facteur NEWTON, on doit mettre une matrice de type 'TANGENTE' et non 'ELASTIQUE' .

On ne parle ici que de ce qui est spécifique aux calculs THM à savoir les mots clés facteurs RELATION et RELATION_KIT du mot clé COMP_INCR qui sont étroitement liés.

RELATION est renseigné par des relations de types KIT_XXXX qui permettent de résoudre simultanément de deux à quatre équations d'équilibre. Les équations considérées dépendent du suffixe XXXX avec la règle suivante :

- M désigne l'équation d'équilibre mécanique,
- T désigne l'équation d'équilibre thermique,
- H désigne une équation d'équilibre hydraulique.
- V désigne la présence d'une phase sous forme vapeur (en plus du liquide)

Une seule lettre H signifie que le milieu poreux est saturé (une seule variable de pression p), par exemple soit de gaz, soit de liquide, soit d'un mélange liquide/gaz (dont la pression du gaz est constante).

Deux lettres H signifient que le milieu poreux est non saturé (deux variables de pression p), par exemple un mélange liquide/vapeur/gaz.

La présence des deux lettres HV signifie que le milieu poreux est saturé par un composant (en pratique de l'eau), mais que ce composant peut être sous forme liquide ou vapeur. Il n'y a alors qu'une équation de conservation de ce composant, donc un seul degré de liberté pression, mais il y a un flux liquide et un flux vapeur. Les relations possibles sont alors les suivantes :

```
/ 'KIT_HM'  
/ 'KIT_THM'  
/ 'KIT_HHM'  
/ 'KIT_THH'  
/ 'KIT_THV'  
/ 'KIT_THHM'
```

Le tableau ci-dessous résume à quel kit correspond chaque modélisation :

KIT_HM	D_PLAN_HM, D_PLAN_HMD, AXIS_HM, AXIS_HMD, 3D_HM, 3D_HMD
KIT_THM	D_PLAN_THM, D_PLAN_THMD, AXIS_THM, AXIS_THMD, 3D_THM, 3D_THMD
KIT_HHM	D_PLAN_HHM, D_PLAN_HHMD, AXIS_HHM, AXIS_HHMD, 3D_HHM, 3D_HHMD, D_PLAN_HH2MD, AXIS_HH2MD, 3D_HH2MD
KIT_THH	D_PLAN_THH, D_PLAN_THHD, AXIS_THH, AXIS_THHD, 3D_THH, 3D_THHD, D_PLAN_THH2D, AXIS_THH2D, 3D_THH2D
KIT_THV	D_PLAN_THVD, AXIS_THVD, 3D_THVD
KIT_THHM	D_PLAN_THHM, D_PLAN_THHMD, AXIS_THHM, AXIS_THHMD, 3D_THHM, 3D_THHMD, D_PLAN_THH2MD, AXIS_THH2MD, 3D_THH2MD

Pour chaque phénomène modélisé (thermique et/ou mécanique et/ou hydraulique), on doit préciser dans RELATION_KIT :

- Le modèle de comportement mécanique du squelette s'il y a modélisation mécanique (M),
 - / 'ELAS'
 - / 'CJS'
 - / 'LAIGLE'
 - / 'ELAS_THM'
 - / 'CAM_CLAY'
 - / 'DRUCKER_PRAGER'

- Le comportement des liquides/gaz ,(le même que celui indiqué dans COMP_THM sous DEFI_MATERIAU, cf. [§2.2.2])

```
/ 'LIQU_SATU'  
/ 'LIQU_GAZ'  
/ 'GAZ'  
/ 'LIQU_GAZ_ATM'  
/ 'LIQU_VAPE_GAZ'  
/ 'LIQU_AD_GAZ_VAPE'  
/ 'LIQU_VAPE'
```

- De plus dans tous les cas, **on doit impérativement renseigner** : HYDR_UTIL sous RELATION_KIT (ce mot clé permet de renseigner la courbe de saturation et sa dérivée en fonction de la pression capillaire ainsi que la perméabilité relative et sa dérivée en fonction de la saturation).

Si on reprend l'exemple ci-dessus, on traite de manière couplée un problème thermo-hydro-mécanique pour un milieu poreux non saturé avec LIQU_GAZ comme comportement du liquide, et une loi élastique comme comportement mécanique.

Attention :

Selon le KIT_XXXX choisi, tous les comportements ne sont pas licites (par exemple si on choisit un milieu poreux non saturé, on ne peut pas affecter un comportement de type gaz parfait). toutes les combinaisons possibles sont résumées ci-dessous

Pour relation KIT_HM :

(' ELAS'	' GAZ'	' HYDR_UTIL')
(' CJS'	' GAZ'	' HYDR_UTIL')
(' LAIGLE'	' GAZ'	' HYDR_UTIL')
(' CAM_CLAY'	' GAZ'	' HYDR_UTIL')
(' ELAS'	' LIQU_SATU'	' HYDR_UTIL')
(' CJS'	' LIQU_SATU'	' HYDR_UTIL')
(' LAIGLE'	' LIQU_SATU'	' HYDR_UTIL')
(' CAM_CLAY'	' LIQU_SATU'	' HYDR_UTIL')
(' ELAS'	' LIQU_GAZ_ATM'	' HYDR_UTIL')
(' CJS'	' LIQU_GAZ_ATM'	' HYDR_UTIL')
(' LAIGLE'	' LIQU_GAZ_ATM'	' HYDR_UTIL')
(' CAM_CLAY'	' LIQU_GAZ_ATM'	' HYDR_UTIL')

Pour relation KIT_THM :

(' ELAS'	' GAZ'	' HYDR_UTIL')
(' CJS'	' GAZ'	' HYDR_UTIL')
(' LAIGLE'	' GAZ'	' HYDR_UTIL')
(' CAM_CLAY'	' GAZ'	' HYDR_UTIL')
(' ELAS'	' LIQU_SATU'	' HYDR_UTIL')
(' CJS'	' LIQU_SATU'	' HYDR_UTIL')
(' LAIGLE'	' LIQU_SATU'	' HYDR_UTIL')
(' CAM_CLAY'	' LIQU_SATU'	' HYDR_UTIL')
(' ELAS'	' LIQU_GAZ_ATM'	' HYDR_UTIL')
(' CJS'	' LIQU_GAZ_ATM'	' HYDR_UTIL')
(' LAIGLE'	' LIQU_GAZ_ATM'	' HYDR_UTIL')
(' CAM_CLAY'	' LIQU_GAZ_ATM'	' HYDR_UTIL')

Pour relation KIT_HHM :

```
(' ELAS'           ' LIQU_GAZ'           ' HYDR_UTIL' )  
( ' CJS'           ' LIQU_GAZ'           ' HYDR_UTIL' )  
( ' LAIGLE'        ' LIQU_GAZ'           ' HYDR_UTIL' )  
( ' CAM_CLAY'      ' LIQU_GAZ'           ' HYDR_UTIL' )  
( ' ELAS'           ' LIQU_VAPE_GAZ'      ' HYDR_UTIL' )  
( ' CJS'           ' LIQU_VAPE_GAZ'      ' HYDR_UTIL' )  
( ' LAIGLE'        ' LIQU_VAPE_GAZ'      ' HYDR_UTIL' )  
( ' CAM_CLAY'      ' LIQU_VAPE_GAZ'      ' HYDR_UTIL' )  
( ' ELAS'           ' LIQU_AD_GAZ_VAPE'   ' HYDR_UTIL' )  
( ' CJS'           ' LIQU_AD_GAZ_VAPE'   ' HYDR_UTIL' )  
( ' LAIGLE'        ' LIQU_AD_GAZ_VAPE'   ' HYDR_UTIL' )  
( ' CAM_CLAY'      ' LIQU_AD_GAZ_VAPE'   ' HYDR_UTIL' )
```

Pour relation KIT_THH :

```
(' LIQU_GAZ'           ' HYDR_UTIL' )  
( ' LIQU_VAPE_GAZ'      ' HYDR_UTIL' )  
( ' LIQU_AD_GAZ_VAPE'   ' HYDR_UTIL' )
```

Pour relation KIT_THV :

```
(' LIQU_VAPE'           ' HYDR_UTIL' )
```

Pour relation KIT_THHM :

```
(' ELAS'           ' LIQU_GAZ'           ' HYDR_UTIL' )  
( ' CJS'           ' LIQU_GAZ'           ' HYDR_UTIL' )  
( ' LAIGLE'        ' LIQU_GAZ'           ' HYDR_UTIL' )  
( ' CAM_CLAY'      ' LIQU_GAZ'           ' HYDR_UTIL' )  
( ' ELAS'           ' LIQU_VAPE_GAZ'      ' HYDR_UTIL' )  
( ' CJS'           ' LIQU_VAPE_GAZ'      ' HYDR_UTIL' )  
( ' LAIGLE'        ' LIQU_VAPE_GAZ'      ' HYDR_UTIL' )  
( ' CAM_CLAY'      ' LIQU_VAPE_GAZ'      ' HYDR_UTIL' )  
( ' ELAS'           ' LIQU_AD_GAZ_VAPE'   ' HYDR_UTIL' )  
( ' CJS'           ' LIQU_AD_GAZ_VAPE'   ' HYDR_UTIL' )  
( ' LAIGLE'        ' LIQU_AD_GAZ_VAPE'   ' HYDR_UTIL' )  
( ' CAM_CLAY'      ' LIQU_AD_GAZ_VAPE'   ' HYDR_UTIL' )
```

Remarque :

En cas de problème de convergence il peut être très utile d'activer la recherche linéaire comme indiqué dans l'exemple donné en tête de cette section. La recherche linéaire n'améliore cependant pas systématiquement la convergence, elle est donc à manier avec précaution.

2.6 Le post-traitement

Le post traitement des données en THM ne varie pas du post traitement Aster habituel. On rappelle juste que pour toute impression des valeurs qui ne sont pas les inconnues nodales, il est nécessaire de calculer ces valeurs par la commande CALC_ELEM dont on donne un exemple ci-après.

Pour les contraintes :

```
U0=CALC_ELEM(reuse =U0,  
             MODELE=MODELE,  
             CHAM_MATER=CHMAT0,  
             TOUT_ORDRE='OUI',  
             OPTION=('SIEF_ELNO_ELGA'),  
             RESULTAT=U0,);
```

Pour les variables internes :

```
U0=CALC_ELEM(reuse =U0,  
             MODELE=MODELE,  
             CHAM_MATER=CHMAT0,  
             TOUT_ORDRE='OUI',  
             OPTION=('VARI_ELNO_ELGA'),  
             RESULTAT=U0,);
```

Il faut toutefois rappeler que toutes les valeurs de déplacements en sorties correspondent à u^{ddl} et non $u = u^{ddl} + u^{ref}$.

Il est également important de connaître le nom des contraintes et les numéros des variables internes. Tout cela est consigné dans l'annexe I. Ainsi l'exemple suivant permet d'imprimer la masse d'eau liquide sur le groupe de nœuds HAUT à tous les instants.

```
TAB1=POST_RELEVE_T(ACTION=_F(INTITULE='CONT',  
                              GROUP_NO=('HAUT'),  
                              RESULTAT=U0,  
                              NOM_CHAM='SIEF_ELNO_ELGA',  
                              TOUT_ORDRE='OUI',  
                              NOM_CMP=('M11'),  
                              OPERATION='EXTRACTION',),),);  
  
IMPR_TABLE(TABLE=TAB1,  
           FICHER='RESULTAT',  
           FORMAT='AGRAF',  
           PAGINATION='INST',  
           NOM_PARA=('INST','COOR_X','M11'),);
```

L'exemple suivant permet d'imprimer les valeurs de porosité au nœud 1 et au premier instant.

```
TAB2=POST_RELEVE_T(ACTION=_F(INTITULE='DEPL',  
                              NOEUD='NO1',  
                              RESULTAT=U0,  
                              NOM_CHAM='VARI_ELNO_ELGA',  
                              NUME_ORDRE=1,  
                              NOM_CMP=('V2'),  
                              OPERATION='EXTRACTION',),),);  
  
IMPR_TABLE(TABLE=TAB2,  
           FICHER='RESULTAT',  
           FORMAT='AGRAF',  
           PAGINATION='INST',  
           NOM_PARA=('INST','COOR_X','V2'),);
```

Concernant le tracé des isovaleurs IDEAS ainsi que GIBI sont les deux outils utilisés.

2.6.1 Isovaleurs avec Gibi

Un fichier .cast lisible par des commandes GIBI est créée via la commande IMPR_RESU comme sur l'exemple ci-dessous :

```
IMPR_RESU(RESU=_F(FORMAT='CASTEM',  
                 RESULTAT=U0,  
                 MAILLAGE=MAIL,  
                 NUME_ORDRE=1,)),);
```

Le fichier obtenu est ensuite lu par un fichier de traitement. Un exemple de fichiers gibi de traitement des données est en [Annexe 4].

2.6.2 Isovaleurs avec IDEAS

Un fichier .unv lisible par IDEAS est créé via la commande `IMPR_RESU` au format IDEAS comme sur l'exemple ci-dessous :

```
IMPR_RESU (RESU=_F (FORMAT=' IDEAS' ,  
                    RESULTAT=U0 ,  
                    MAILLAGE=MAIL ,  
                    NUME_ORDRE=1 , ) , ) ,
```

3 Bibliographie

- 1) Catsius Clay project. Calculation and testing of behaviour of unsaturated clay as barrier in radioactive waste repositories.
- 2) Fiche de modèle de référence – Couplage thermique hydraulique ANDRA-CNT ACSS 02-006

Annexe 1 Contraintes généralisées et variables internes

Les contraintes :

Numéro	Nom de composante Aster	Contenu	Modélisations
1	SIXX	σ'_{xx}	Si mécanique (.. M ...)
2	SIYY	σ'_{yy}	Si mécanique (.. M ...)
3	SIZZ	σ'_{zz}	Si mécanique (.. M ...)
4	SIXY	σ'_{xy}	Si mécanique (.. M ...)
5	SIXZ	σ'_{xz}	Si mécanique (.. M ...)
6	SIYZ	σ'_{yz}	Si mécanique (.. M ...)
7	SIP	σ_p	Si mécanique (.. M ...)
8	M11	m_w	Dans tous les cas
9	FH11X	M_{w_x}	Dans tous les cas
10	FH11Y	M_{w_y}	Dans tous les cas
11	FH11Z	M_{w_z}	Dans tous les cas
12	ENT11	h_w^m	Dans tous les cas
13	M12	m_{vp}	Si 2 pressions inconnues (.. HH ...)
14	FH12X	M_{vp_x}	Si 2 pressions inconnues (.. HH ...)
15	FH12Y	M_{vp_y}	Si 2 pressions inconnues (.. HH ...)
16	FH12Z	M_{vp_z}	Si 2 pressions inconnues (.. HH ...)
17	ENT12	h_{vp}^m	Si 2 pressions inconnues (.. HH ...)
18	M21	m_{as}	Si 2 pressions inconnues (.. HH ...)
19	FH21X	M_{as_x}	Si 2 pressions inconnues (.. HH ...)
20	FH21Y	M_{as_y}	Si 2 pressions inconnues (.. HH ...)
21	FH21Z	M_{as_z}	Si 2 pressions inconnues (.. HH ...)
22	ENT21	h_{as}^m	Si 2 pressions inconnues (.. HH ...)
18	M22	m_{ad}	Si modélisation de l'air dissous (...HH2...)
19	FH22X	M_{ad_x}	Si modélisation de l'air dissous (...HH2...)
20	FH22Y	M_{ad_y}	Si modélisation de l'air dissous (...HH2...)
21	FH22Z	M_{ad_z}	Si modélisation de l'air dissous (...HH2...)
22	ENT22	h_{ad}^m	Si modélisation de l'air dissous (...HH2...)
23	QPRIM	Q	Si thermique
24	FHTX	q_x	Si thermique
25	FHTY	q_y	Si thermique
26	FHTZ	q_z	Si thermique

Dans le cas sans mécanique, les variables internes :

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 avec mécanique les premiers numéros seront celles 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 2 Exemple I de fichier de commande

```
# EXEMPLE DE CALCUL AXIS_THH2MD

DEBUT();
PRE_GIBI();
#####
#####
#####

INST1=DEFI_LIST_REEL(DEBUT=0.0,
                     INTERVALLE=(
                       _F(JUSQU_A=500000000.,NOMBRE=50,),
                       _F(JUSQU_A=2000000000.,NOMBRE=20,),
                       ),);

MAIL=LIRE_MALLAGE();

MAIL=DEFI_GROUP(reuse =MAIL,
                MAILLAGE=MAIL,
                CREA_GROUP_NO=( _F(GROUP_MA='BAS',),
                                _F(GROUP_MA='HAUT',),
                                _F(GROUP_MA='GAUCHE',),
                                _F(GROUP_MA='DROIT',),
                                _F(GROUP_MA='BO',),
                                ),);

MODELE=AFPE_MODELE(MAILLAGE=MAIL,
                   AFPE=_F(TOUT='OUI',
                           PHENOMENE='MECANIQUE',
                           MODELISATION='AXIS_THH2MD',),);

#
#

UN=DEFI_CONSTANTE(VALE=1.0,);
UNDEMI=DEFI_CONSTANTE(VALE=0.5,);

ZERO=DEFI_CONSTANTE(VALE=0.0,);

VISCOLIQ=DEFI_CONSTANTE(VALE=1.E-3,);
VISCOGAZ=DEFI_CONSTANTE(VALE=1.E-03,);
DVISCOL=DEFI_CONSTANTE(VALE=0.0,);
DVISCOG=DEFI_CONSTANTE(VALE=0.0,);

LI2=DEFI_LIST_REEL(DEBUT=-1.E9,
                  INTERVALLE=(
                    _F(JUSQU_A=1.E9,
                      NOMBRE=500,),),);

LI1=DEFI_LIST_REEL(DEBUT=0.10000000000000001,
                  INTERVALLE=_F(JUSQU_A=0.989999999999999999,
                                NOMBRE=500,),);
```

```
PAS=1.E-2,););

# LIMITATION DE LA SATURATION MAX (<1)
#CONSTBO = DEFI_CONSTANTE ( VALE : 0.99);
#

SLO = FORMULE(REEL = '' (REEL:PCAP) =
              0.4''');

SATUBO=CALC_FONC_INTERP (FONCTION=SLO,
                        LIST_PARA=LI2,
NOM_PARA='PCAP',
                        PROL_GAUCHE='LINEAIRE',
                        PROL_DROITE='LINEAIRE',
                        INFO=2,);

DSATBO=DEFI_CONSTANTE (VALE=0.);
#

#
# COEF. DE FICK
#

FICK=DEFI_CONSTANTE (VALE=3.E-10,);

KINTBO=DEFI_CONSTANTE (VALE=9.9999999999999995E-19,);
HENRY=DEFI_CONSTANTE (VALE=50000.);

MATERBO=DEFI_MATERIAU (ELAS=_F (E=5.15000000E8,
                                NU=0.200000000000000001,
                                RHO=2670.0,
                                ALPHA=0.),
COMP_THM = 'LIQU_AD_GAZ_VAPE',
THM_LIQU=_F (RHO=1000.0,
             UN_SUR_K=0.,
             ALPHA=0.,
             CP=0.0,
             VISC=VISCOLIQ,
             D_VISC_TEMP=DVISCOL,),
THM_GAZ=_F (MASS_MOL=0.01,
            CP=0.0,
            VISC=VISCOGAZ,
            D_VISC_TEMP=ZERO,),
THM_VAPE_GAZ=_F (MASS_MOL=0.01,
                 CP=0.0,
                 VISC=VISCOGAZ,
                 D_VISC_TEMP=ZERO,),
THM_AIR DISS=_F (
                CP=0.0,
                COEF_HENRY=HENRY
                ),
THM_INIT=_F (TEMP=300.0,
             PRE1=0.0,
             PRE2=1.E5,
             PORO=1.,
             PRES_VAPE=1000.0,
             DEGR_SATU=0.4,),
THM_DIFFU=_F (R_GAZ=8.32,
              RHO=2200.0,
              CP=1000.0,
              BIOT_COEF=1.0,
              SATU_PRES=SATUBO,
              D_SATU_PRES=DSATBO,
              PESA_X=0.0,
              PESA_Y=0.0,
              PESA_Z=0.0,
              PERM_IN=KINTBO,
              PERM_LIQU=UNDEMI,
              D_PERM_LIQU_SATU=ZERO,
              PERM_GAZ=UNDEMI,
              D_PERM_SATU_GAZ=ZERO,
              D_PERM_PRES_GAZ=ZERO,
              FICKV_T=ZERO,
              FICKA_T=FICK,
              LAMB_T=ZERO,
```

```

    ),);

CHMAT0=AFFE_MATERIAU (MAILLAGE=MAIL,
    AFFE=( _F (GROUP_MA='BO',
        MATER=MATERBO,)),
    ),);

CHAMNO=CREA_CHAMP (MAILLAGE=MAIL,
    OPERATION='AFFE',
    TYPE_CHAM='NOEU_DEPL_R',
    AFFE=( _F (TOUT='OUI',
        NOM_CMP='TEMP',
        VALE=0.0,)),
    _F (TOUT='OUI',
        NOM_CMP='PRE2',
        VALE=1000.0,)),
    _F (TOUT='OUI',
        NOM_CMP='PRE1',
        VALE=1.E6,)),
    ),);

TIMP=AFFE_CHAR_MECA (MODELE=MODELE,
    DDL_IMPO=( _F (TOUT='OUI',
        TEMP=0.0,)),
    _F (GROUP_NO=('HAUT', 'BAS', 'GAUCHE', 'DROIT'),
        DX=0.0,)),
    _F (GROUP_NO=('HAUT', 'BAS', 'GAUCHE', 'DROIT'),
        DY=0.0,)),
    _F (GROUP_MA='GAUCHE',
        PRE2=15000.)),
    _F (GROUP_MA='GAUCHE',
        PRE1=1.E6,)),
    ),
    );

SIGINIT=CREA_CHAMP (MAILLAGE=MAIL,
    OPERATION='AFFE',
    TYPE_CHAM='CART_SIEF_R',
    AFFE=( _F (GROUP_MA='BO',
        NOM_CMP=
        ('SIXX', 'SIYY', 'SIZZ', 'SIXY', 'SIXZ',
        'SIYZ', 'SIP', 'M11', 'FH11X', 'FH11Y', 'ENT11',
        'M12', 'FH12X', 'FH12Y', 'ENT12',
        'QPRIM', 'FHTX', 'FHTY', 'M21',
        'FH21X', 'FH21Y', 'ENT21',
        'M22', 'FH22X', 'FH22Y', 'ENT22',)),
        VALE=
        (0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,
        0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,
        0.0,0.0,0.0, 2500000.0,
        0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,
        0.,0.,0.,0.)),
    ), );

U0=STAT_NON_LINE (MODELE=MODELE,
    CHAM_MATER=CHMAT0,
    EXCIT=(
    _F (CHARGE=TIMP,)),
    COMP_INCR=_F (RELATION='KIT_THHM',
        RELATION_KIT=('ELAS', 'LIQU_AD_GAZ_VAPE', 'THER_POLY', 'HYDR_UTIL',)),
    ETAT_INIT=_F (DEPL=CHAMNO,
        SIGM=SIGINIT,)),
    INCREMENT=_F (LIST_INST=INST1,
    ),
    NEWTON=_F (MATRICE='TANGENTE',
        REAC_ITER=1,)),
    RECH_LINEAIRE=_F (RESI_LINE_RELA=0.100000000000000001,
        ITER_LINE_MAXI=3,)),
    CONVERGENCE=_F (
        RESI_GLOB_RELA=1.E-6,
        ITER_GLOB_MAXI=80,
    ),
    PARM_THETA=0.8,
```

```
SOLVEUR=_F(METHODE='MULT_FRONT',  
           STOP_SINGULIER='NON',),  
);
```

```
FIN();
```

Annexe 3 Exemple 2 de fichiers de commande

```
# EXEMPLE DE CALCUL AXIS_THHMD POUR UN BI-MATERIAUX (BARRIERE OUVRAGEE ET
# BARRIERE GEOLOGIQUE)

DEBUT(CODE=_F(NOM='WTNA100A',NIV_PUB_WEB='INTERNET'),);

MAIL=LIRE_MALLAGE();

#
# LISTE DES INSTANTS DE CALCUL
#

INST1=DEFI_LIST_REEL(DEBUT=0.0,
                    INTERVALLE=( _F(JUSQU_A=1.E7,NOMBRE=10,),
                                _F(JUSQU_A=1.E8,NOMBRE=1,),
                                _F(JUSQU_A=1.E9,NOMBRE=9,),),);

MAIL=DEFI_GROUP(reuse =MAIL,
               MAILLAGE=MAIL,
               CREA_GROUP_NO=( _F(GROUP_MA='LBABG',),
                               _F(GROUP_MA='LBABO',),
                               _F(GROUP_MA='LINTBO',),
                               _F(GROUP_MA='LINTBG',),
                               _F(GROUP_MA='SURFBO',),
                               _F(GROUP_MA='SURFBG',),
                               _F(GROUP_MA='SURF',),),);

MODELE=AFFE_MODELE(MAILLAGE=MAIL,
                  AFFE=_F(TOUT='OUI',
                          PHENOMENE='MECANIQUE',
                          MODELISATION='AXIS_THHMD',),);

#
#

UN=DEFI_CONSTANTE(VALE=1.0,);

ZERO=DEFI_CONSTANTE(VALE=0.0,);

VISCOLIQ=DEFI_CONSTANTE(VALE=1.E-3,);

VISCOGAZ=DEFI_CONSTANTE(VALE=1.8E-05,);

DVISCOL=DEFI_CONSTANTE(VALE=0.0,);

DVISCOG=DEFI_CONSTANTE(VALE=0.0,);

LI2=DEFI_LIST_REEL(DEBUT=0.0,
                  INTERVALLE=_F(JUSQU_A=1.E9, PAS=1.E6,));

LI1=DEFI_LIST_REEL(DEBUT=1.E-5,
                  INTERVALLE=_F(JUSQU_A=1.0, PAS=0.099999,));

#
# PROPRIETES DE LA BARRIERE OUVRAGEE
#

LTBO=DEFI_CONSTANTE(VALE=0.59999999999999998,);
LSO = FORMULE(REEL = ''(REEL:SAT) = (0.35*SAT) '');

LSBO=CALC_FONC_INTERP(FONCTION=LSO,
                     LIST_PARA=LI1,
                     NOM_PARA='SAT',
                     PROL_GAUCHE='LINEAIRE',
                     PROL_DROITE='LINEAIRE',
                     INFO=2,);

DLSBO=DEFI_CONSTANTE(VALE=0.35,);

SL = FORMULE(REEL = ''(REEL:PCAP) = 0.99*(1.-PCAP*6.E-9) '');
```

```
SATUBO=CALC_FONC_INTERP (FONCTION=SL,
                        LIST_PARA=LI2,
                        NOM_PARA='PCAP',
                        PROL_DROITE='CONSTANT',
                        PROL_GAUCHE='CONSTANT',
                        INFO=2,);

DSL = FORMULE (REEL = ''' (REEL:PCAP) = -6.E-9*0.99''');

DSATBO=CALC_FONC_INTERP (FONCTION=DSL,
                        LIST_PARA=LI2,
                        NOM_PARA='PCAP',
                        PROL_DROITE='CONSTANT',
                        PROL_GAUCHE='CONSTANT',
                        INFO=2,);

PERM = FORMULE (REEL = ''' (REEL:SAT) = SAT''');

PERM11BO=CALC_FONC_INTERP (FONCTION=PERM,
                        LIST_PARA=LI1,
                        NOM_PARA='SAT',
                        PROL_DROITE='CONSTANT',
                        PROL_GAUCHE='CONSTANT',
                        INFO=2,);

DPERMBO = FORMULE (REEL = ''' (REEL:SAT) = 1.'''');

DPR11BO=CALC_FONC_INTERP (FONCTION=DPERMBO,
                        LIST_PARA=LI1,
                        NOM_PARA='SAT',
                        PROL_DROITE='CONSTANT',
                        PROL_GAUCHE='CONSTANT',
                        INFO=2,);

PERM2BO = FORMULE (REEL = ''' (REEL:SAT) = 1.-SAT''');

PERM21BO=CALC_FONC_INTERP (FONCTION=PERM2BO,
                        LIST_PARA=LI1,
                        NOM_PARA='SAT',
                        PROL_DROITE='CONSTANT',
                        PROL_GAUCHE='CONSTANT',
                        INFO=2,);

DPERM2BO = FORMULE (REEL = ''' (REEL:SAT) = -1.'''');

DPR21BO=CALC_FONC_INTERP (FONCTION=DPERM2BO,
                        LIST_PARA=LI1,
                        NOM_PARA='SAT',
                        PROL_DROITE='CONSTANT',
                        PROL_GAUCHE='CONSTANT',
                        INFO=2,);

#
# CONDUCTIVITE THERMIQUE DE LA BO
#

DM8=DEFI_CONSTANTE (VALE=9.9999999999999995E-08,);

KINTBO=DEFI_CONSTANTE (VALE=9.9999999999999995E-21,);

MATERBO=DEFI_MATERIAU (ELAS=_F (E=1.9E+20,
                                NU=0.200000000000000001,
                                RHO=2670.0,
                                ALPHA=0.),),
COMP_THM = 'LIQU_GAZ',
THM_LIQU=_F (RHO=1000.0,
             UN_SUR_K=5.00000000000000003E-10,
             ALPHA=1.E-4,
             CP=4180.0,
             VISC=VISCOLIQ,
             D_VISC_TEMP=DVISCOL,),
THM_GAZ=_F (MASS_MOL=0.02896,
            CP=1000.0,
```

```
VISC=VISCOGAZ,
D_VISC_TEMP=ZERO, ),
THM_VAPE_GAZ=_F(MASS_MOL=0.017999999999999999,
CP=1870.0,
VISC=VISCOGAZ,
D_VISC_TEMP=ZERO, ),
THM_INIT=_F(TEMP=293.0,
PRE1=0.0,
PRE2=1.E5,
PORO=0.34999999999999998,
PRES_VAPE=2320.0,
DEGR_SATU=0.57420000000000004, ),
THM_DIFFU=_F(R_GAZ=8.3149999999999995,
RHO=2670.0,
CP=482.0,
BIOT_COEF=1.0,
SATU_PRES=SATUBO,
D_SATU_PRES=DSATBO,
PESA_X=0.0,
PESA_Y=0.0,
PESA_Z=0.0,
PERM_IN=KINTBO,
PERM_LIQU=PERM11BO,
D_PERM_LIQU_SATU=DPR11BO,
PERM_GAZ=PERM21BO,
D_PERM_SATU_GAZ=DPR21BO,
D_PERM_PRES_GAZ=ZERO,
LAMB_T=LTBO,
LAMB_S=LSBO,
D_LE_S=DLSBO,
LAMB_CT=0.728, );

#
# PROPRIETES DE LA BARRIERE GEOLOGIQUE
#

KINTBG=DEFI_CONSTANTE (VALE=9.999999999999998E-20, );

LTBG=DEFI_CONSTANTE (VALE=0.5999999999999998, );
LSG = FORMULE (REEL = '' (REEL:SAT) =
(0.05*SAT) '' );

LSBG=CALC_FONC_INTERP (FONCTION=LSG,
LIST_PARA=L11,
NOM_PARA='SAT',
PROL_GAUCHE='LINEAIRE',
PROL_DROITE='LINEAIRE',
INFO=2, );
DLSBG=DEFI_CONSTANTE (VALE=0.05, );

MATERBG=DEFI_MATERIAU (ELAS=_F (E=1.9E+20,
NU=0.20000000000000001,
RHO=2670.0,
ALPHA=0.0, ),
COMP_THM = 'LIQU_GAZ',
THM_LIQU=_F (RHO=1000.0,
UN_SUR_K=5.0000000000000003E-10,
ALPHA=1.E-4,
CP=4180.0,
VISC=VISCOLIQ,
D_VISC_TEMP=DVISCOL, ),
THM_GAZ=_F (MASS_MOL=0.02896,
CP=1000.0,
VISC=VISCOGAZ,
D_VISC_TEMP=ZERO, ),
THM_VAPE_GAZ=_F (MASS_MOL=0.017999999999999999,
CP=1870.0,
VISC=UN,
D_VISC_TEMP=ZERO, ),
THM_INIT=_F (TEMP=293.0,
PRE1=0.0,
PRE2=1.E5,
PORO=0.050000000000000003,
PRES_VAPE=2320.0,
DEGR_SATU=0.8117999999999997, ),
THM_DIFFU=_F (R_GAZ=8.3149999999999995,
RHO=2670.0,
```

```
CP=706.0,
BIOT_COEF=1.0,
SATU_PRES=SATUBO,
D_SATU_PRES=DSATBO,
PESA_X=0.0,
PESA_Y=0.0,
PESA_Z=0.0,
PERM_IN=KINTBG,
PERM_LIQU=PERM11BO,
D_PERM_LIQU_SATU=DPR11BO,
PERM_GAZ=PERM21BO,
D_PERM_SATU_GAZ=DPR21BO,
D_PERM_PRES_GAZ=ZERO,
LAMB_T=LTBG,
LAMB_S=LSBG,
D_LB_S=DLSBG,
LAMB_CT=1.539),);

CHMAT0=AFFE_MATERIAU (MAILLAGE=MAIL,
    AFFE=( _F (GROUP_MA='SURFBO',
        MATER=MATERBO, ),
        _F (GROUP_MA='SURFBG',
        MATER=MATERBG, ), ), );
#
# AFFECTATION DE L ETAT INITIAL
#

CHAMNO=CREA_CHAMP (MAILLAGE=MAIL,
    OPERATION='AFFE',
    TYPE_CHAM='NOEU_DEPL_R',
    AFFE=( _F (TOUT='OUI',
        NOM_CMP='TEMP',
        VALE=0.0, ),
        _F (GROUP_NO='SURFBO',
        NOM_CMP='PRE1',
        VALE=7.E7, ),
        _F (GROUP_NO='SURFBG',
        NOM_CMP='PRE1',
        VALE=3.E7, ),
        _F (NOEUD=('NO300', 'NO296'),
        NOM_CMP='PRE1',
        VALE=5.E7, ),
        _F (GROUP_NO='SURFBO',
        NOM_CMP='PRE2',
        VALE=0.0, ),
        _F (GROUP_NO='SURFBG',
        NOM_CMP='PRE2',
        VALE=0.0, ), ), );
# FLUX EVOLUTIF IMPOSE EN P. INTERNE
#

FLUX=DEFI_FONCTION (NOM_PARA='INST',
    VALE=
    (0.0, 386.0,
    315360000.0, 312.0,
    946080000.0, 12.6), );

CALEXT=AFFE_CHAR_MECA (MODELE=MODELE,
    DDL_IMPO=( _F (TOUT='OUI',
        TEMP=0.0, ),
        _F (TOUT='OUI',
        PRE2=0.0, ),
        _F (TOUT='OUI',
        DX=0.0, ),
        _F (TOUT='OUI',
        DY=0.0, ), ), );

CALINT=AFFE_CHAR_MECA (MODELE=MODELE,
    FLUX_THM_REP=_F (GROUP_MA='LINTBO',
        FLUN=1.0,
        FLUN_HYDR1=0.0,
        FLUN_HYDR2=0.0, ), );

SIGINIT=CREA_CHAMP (MAILLAGE=MAIL,
    OPERATION='AFFE',
    TYPE_CHAM='CART_SIEF_R',
```

```

AFFE=( _F(GROUP_MA='SURFBO',
          NOM_CMP=
            ('SIXX','SIYY','SIZZ','SIXY','SIXZ','SIYZ','SIP','M11','FH11X',
             'FH11Y','ENT11','M12','FH12X','FH12Y','ENT12','M21','FH21X','FH21
Y','ENT21','QPRIM',
          'FHTX','FHTY'),
          VALE=
            (0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,-70000.0,0.0,0.0,0.0,
             2450000.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0)),
        _F(GROUP_MA='SURFBG',
          NOM_CMP=
            ('SIXX','SIYY','SIZZ','SIXY','SIXZ','SIYZ','SIP','M11','FH11X',
             'FH11Y','ENT11','M12','FH12X','FH12Y','ENT12','M21','FH21X','FH21
Y','ENT21','QPRIM',
          'FHTX','FHTY'),
          VALE=
            (0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,-29900.0,0.0,0.0,0.0,
             2450000.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0)),);

U0=STAT_NON_LINE(MODELE=MODELE,
                 CHAM_MATER=CHMAT0,
                 EXCIT=(
                   _F(CHARGE=CALEXT, ),
                   _F(CHARGE=CALINT,
                     FONC_MULT=FLUX, ),
                   ),
                 COMP_INCR=_F(RELATION='KIT_THHM',
                               RELATION_KIT=('ELAS','LIQU_GAZ','THER_POLY','HYDR_UTIL'), ),
                 ETAT_INIT=_F(DEPL=CHAMNO,
                               SIGM=SIGINIT),
                 INCREMENT=_F(LIST_INST=INST1, ),
                 NEWTON=_F(MATRICE='TANGENTE',
                            REAC_ITER=10, ),
                 CONVERGENCE=_F(RESI_GLOB_MAXI=1.0000000000000001E-05,
                                 ITER_GLOB_MAXI=150,
                                 ARRET='NON',
                                 ITER_INTE_MAXI=5, ),
                 PARM_THETA=0.56999999999999995,
                 ARCHIVAGE=_F(PAS_ARCH=1, ), );

U0=CALC_ELEM(reuse =U0,
             MODELE=MODELE,
             CHAM_MATER=CHMAT0,
             TOUT_ORDRE='OUI',
             OPTION=('SIEF_ELNO_ELGA','VARI_ELNO_ELGA'),
             RESULTAT=U0, );

TRB=POST_RELEVE_T(ACTION=_F(INTITULE='DEPL',
                              GROUP_NO=('LBABG','LBABO'),
                              RESULTAT=U0,
                              NOM_CHAM='DEPL',
                              NUME_ORDRE=(1,10,11,20),
                              NOM_CMP=('PRE1'),
                              OPERATION='EXTRACTION', ), );

TRB2=POST_RELEVE_T(ACTION=_F(INTITULE='CONT',
                              GROUP_NO=('LBABG','LBABO'),
                              RESULTAT=U0,
                              NOM_CHAM='SIEF_ELNO_ELGA',
                              TOUT_ORDRE='OUI',
                              NOM_CMP=('M11','FH11X','FH11Y'),
                              OPERATION='EXTRACTION', ), );

ZTRB3=POST_RELEVE_T(ACTION=_F(INTITULE='DEPL',
                              NOEUD=('NO294','NO295','NO299','NO300','NO304','NO305','NO309'),
                              RESULTAT=U0,
                              NOM_CHAM='VARI_ELNO_ELGA',
                              TOUT_ORDRE='OUI',
                              NOM_CMP=('V2'),
                              OPERATION='EXTRACTION', ), );

IMPR_TABLE(TABLE=TRB,
           FICHER='RESULTAT',
           FORMAT='AGRAF',
           PAGINATION='INST',
           NOM_PARA=('INST','COOR_X','PRE1'), );
```

```
IMPR_TABLE(TABLE=ZTRB,  
           FICHER='RESULTAT',  
           FORMAT='AGRAF',  
           PAGINATION='INST',  
           NOM_PARA=('INST','COOR_X','PRE1'),);  
  
#  
# V2 masse volumique du liquide  
#  
IMPR_TABLE(TABLE=ZTRB3,  
           FICHER='RESULTAT',  
           FORMAT='AGRAF',  
           PAGINATION='INST',  
           NOM_PARA=('INST','COOR_X','V2'),);  
  
FIN();
```

Annexe 4 Post traitement GIBI

```
* DEFINITION DU FICHIER CONTENANT LES RESULTATS
* -----
OPTI REST FORM 'visuthmtbtcas3-1.cast' ;
REST FORM ;

*OPTI TRAC PSC ;

* trace du maillage
trac TOUT ;

* Creation de contours (pour pouvoir tracer les isovaleurs
* sans les elements : necessaire si maillage tres fin)
contout = contour tout ;
trac contout ;

* liste des instants a depouiller
lis0 = lect 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 ;
* selection modele
moc = (MAIL ELEM QUA8) ;
* et (MAIL ELEM SEG3);
*
md = MODE moc MECANIQUE ELASTIQUE ;

* Bouclage sur les instants
* -----
n = dime lis0 ;
repetier loop1 n ;
  i = (extr lis0 &loop1) + 1 ;
  p = U0 . i . inst ;
* Deformee
  depla = U0 . i . DEPL ;
  titre 'TBT cas3-1 : Deformee Temps ='p'secondes ' ;
defl = DEFORME TOUT depla 5. rouge ;
initl = DEFORME TOUT depla 0. bleu ;
TRAC (defl et initl) ;
TRAC defl ;
defl1s = DEFORME SABLE depla 1. rouge ;
initl1s = DEFORME SABLE depla 0. bleu ;
  titre 'TBT cas3-1 : Deformee Sable Temps ='p'secondes ' ;
TRAC (defl1s et initl1s) ;
  titre 'TBT cas3-1 : Deformee BO Temps ='p'secondes ' ;
deflbo = DEFORME (BO1 et BO2) depla 5. rouge ;
initlbo = DEFORME (BO1 et BO2) depla 0. bleu ;
TRAC (deflbo et initlbo) ;

* (le chpoint depla est transf en chamelem pour les temperatures)
cham2 = CHAN CHAM depla md NOEUD ;

* Visualisation des temperatures avec THM
chtemp = EXCO TEMP cham2 ;
titre 'TBT cas3-1 : Temperature Temps ='p'secondes ' ;
* trac chtemp md 14 TOUT ;
trac chtemp md 14 contout ;
* Visualisation des pression de pores
chprel = EXCO PRE1 cham2 ;
```

```
titre 'TBT cas3-1 : Pression de pores Temps ='p'secondes ' ;
* trac chpre1 md 14 TOUT ;
* Visualisation de l'augmentation de pression de gaz
chpre2 = EXCO PRE2 cham2 ;
titre 'TBT cas3-1: Augmentation de Pgz Temps ='p'secondes ' ;
trac chpre2 md 14 contout ;

* Contraintes
sig = U0 . i . SIEF ;
sigxx = EXCO SMXX sig;
sigyy = EXCO SMYY sig;
sigzz = EXCO SMZZ sig;
sigp = EXCO SIP sig;
* Calcul contraintes Totales
sixxt = sigxx + sigp ;
siyyt = sigyy + sigp ;
sizzt = sigzz + sigp ;
TITRE 'TBT cas3-1 : Contrainte Sxx Temps ='p'secondes ' ;
*trac sigxx md 14 TOUT ;
trac sigxx md 14 contout ;
*TITRE 'TBT cas3-1 : Cont. totale Sxx Temps ='p'secondes ' ;
*trac sixxt md 14 contout ;
TITRE 'TBT cas3-1 : Contrainte Syy Temps ='p'secondes ' ;
*trac sigyy md 14 TOUT ;
trac sigyy md 14 contout ;
*TITRE 'TBT cas3-1 : Cont. totale Syy Temps ='p'secondes ' ;
*trac siyyt md 14 contout ;
TITRE 'TBT cas3-1 : Contrainte Szz Temps ='p'secondes ' ;
*trac sigzz md 14 TOUT ;
trac sigzz md 14 contout ;
*TITRE 'TBT cas3-1 : Cont. totale Szz Temps ='p'secondes ' ;
*trac sizzt md 14 contout ;
TITRE 'TBT cas3-1 : Pression SIP Temps ='p'secondes ' ;
trac sigp md 14 contout ;

* variables internes
var = U0 . i . VARI ;
var1 = EXCO V1 var ;
var2 = EXCO V2 var ;
var3 = EXCO V3 var ;
var4 = EXCO V4 var ;
TITRE 'TBT cas3-1 : Accroissement porosite a t ='p'secondes ' ;
* trac var1 md 14 TOUT ;
trac var1 md 14 contout ;
TITRE 'TBT cas3-1 : Accroissement RhoLiq a t ='p'secondes ' ;
* trac var2 md 14 TOUT ;
trac var2 md 14 contout ;
TITRE 'TBT cas3-1 : Accroissement Pvp a t ='p'secondes ' ;
* trac var3 md 14 TOUT ;
trac var3 md 14 contout ;
TITRE 'TBT cas3-1 : Saturation a t ='p'secondes ' ;
* trac var4 md 14 TOUT ;
trac var4 md 14 contout ;

* On réduit au sable
*sigb=REDU sig sable ;
*sigxx = EXCO SMXX sigb ;
*TITRE 'TBT cas3-1 :SiXX SABLE t='p'secondes ' ;
*trac sigxx md 14 SABLE ;
fin loop1 ;
```

opti donn 5 ;

fin ;

Annexe 5 Eléments supplémentaires sur les conditions aux limites en THM

Dans ce qui suit on ne prend pas en compte l'air dissous (l'indice lq correspond alors à celui de l'eau w) et on s'attache au cas non saturé.

Nous rappelons ici le choix des inconnues de pression.

Comportement	LIQU_GAZ et LIQU_VAPE_GAZ
PRE1	Pression capillaire : $p_c = p_{gz} - p_{lq}$
PRE2	Pression de gaz $p_{gz} = p_{vp} + p_{as}$

A5.1 Formulation variationnelle des équations de conservation

On se réfère ici à [R7.01.11]. Ces équations sont

$$\dot{m}_{lq} + \dot{m}_{vp} + Div(M_{lq} + M_{vp}) = 0 \quad \text{éq A5.1-1}$$

$$\dot{m}_{as} + Div(M_{as}) = 0 \quad \text{éq A5.1-2}$$

La formulation variationnelle déduite est donnée par

$$-\int_{\Omega} (\dot{m}_{lq} + \dot{m}_{vp}) \pi_1 d\Omega + \int_{\Omega} (M_{lq} + M_{vp}) \cdot \nabla \pi_1 d\Omega = \int_{\partial\Omega} (M_{lq_{ext}} + M_{vp_{ext}}) \cdot \pi_1 d\Gamma \quad \forall \pi_1 \in P_{1_{ad}} \quad \text{éq A5.1-3}$$

$$-\int_{\Omega} \dot{m}_{as} \pi_2 d\Omega + \int_{\Omega} M_{as} \cdot \nabla \pi_2 d\Omega = \int_{\partial\Omega} M_{as_{ext}} \cdot \pi_2 d\Gamma \quad \forall \pi_2 \in P_{2_{ad}} \quad \text{éq A5.1-4}$$

Les pressions capillaires et de gaz sont liées aux pressions d'eau, de vapeur et d'air sec par les relations :

$$p_c = p_{gz} - p_{lq} \quad \text{éq A5.1-5}$$

$$p_{gz} = p_{vp} + p_{as} \quad \text{éq A5.1-6}$$

La pression de vapeur n'est pas une variable indépendante. Elle est reliée à la pression de liquide p_{lq} par les relations

$$\frac{dp_{vp}}{\rho_{vp}} = \frac{dp_{lq}}{\rho_{lq}} + (h_{vp}^m - h_{lq}^m) \frac{dT}{T} \quad \text{éq A5.1-7}$$

$$dh_{lq}^m = C_{lq}^p dT + (1 - 3\alpha_{lq} T) \frac{dp_{lq}}{\rho_{lq}} \quad \text{éq A5.1-8}$$

$$dh_{vp}^m = C_{vp}^p dT \quad \text{éq A5.1-9}$$

Ces relations montrent que la pression de vapeur est déterminée complètement par la connaissance de p_{lq}

(et de son évolution). Souvent, ces relations servent à établir la loi de Kelvin, $\frac{p_{lq} - p_{lq}^0}{\rho_{lq}} = \frac{R}{M_{vp}^{ol}} T \ln \left(\frac{p_{vp}}{p_{vp}^{sat}(T)} \right)$,

mais cette loi n'est pas utilisée directement dans Aster.

Les documents de référence Aster ne disent rien sur ce que sont les variables π_1 et π_2 . Mais deux éléments peuvent nous mettre sur la piste :

- D'une part, $\pi_1 \in P_{1_{ad}}$ et $\pi_2 \in P_{2_{ad}}$ alors que $P_{1_{ad}}$ et $P_{2_{ad}}$ sont les espaces d'appartenance de PRE1 et PRE2 (incluant donc leurs conditions aux limites).
- D'autre part, au chapitre 7. de [R7.01.10], on voit que la déformation virtuelle $E_g^{*el} = (v, \varepsilon(v), \pi_1, \nabla \pi_1, \pi_2, \nabla \pi_2, \tau, \nabla \tau)$ est liée au vecteur de déplacement nodaux virtuel $U^{*el} = (v, \pi_1, \pi_2, \tau)$ par le même opérateur Q_g^{el} que celui qui relie entre eux la déformation $E_g^{el} = (u, \varepsilon(u), p_1, \nabla p_1, p_2, \nabla p_2, T, \nabla T)$ et le déplacement nodal $U^{el} = (u, p_1, p_2, T)$:
 - $E_g^{*el} = Q_g^{el} U^{*el}$
 - $E_g^{el} = Q_g^{el} U^{el}$

Il est alors clair que π_1 et π_2 sont des variations virtuelles de p_1 et p_2

D'où le tableau :

$$\begin{aligned} p_1 = p_c &\Rightarrow \pi_1 = \delta p_c = p_c^* \\ p_1 = p_{lq} &\Rightarrow \pi_1 = \delta p_{lq} = p_{lq}^* \\ p_2 = p_{gz} &\Rightarrow \pi_2 = \delta p_{gz} = p_{gz}^* \end{aligned}$$

A5.2 Cas de conditions aux limites faisant intervenir les inconnues principales

Ce que nous disons dans ce paragraphe et les suivants est relatif à une partie de la frontière $\partial\Omega_d$ sur laquelle des conditions sont prescrites : rien n'empêche bien sûr que ces conditions ne soient pas les mêmes sur des parties de frontières différentes. Nous traitons dans ce chapitre le cas habituel où on impose des conditions sur PRE1 et/ou PRE2, par opposition au chapitre suivant où nous parlerons de relations linéaires entre inconnues.

$$p_c = p_{gz} - p_{lq} = p_c^{imp}$$

$$p_{gz} = p_{as} + p_{vp} = p_{gz}^{imp}$$

Les flux sont alors des résultats de calculs par [éq A5.1-3] et [éq A5.1-4]

- **Dirichlet PRE1, neuman PRE2**

C'est le cas où on impose une valeur à PRE1 et une valeur au flux associé à PRE2, en ne disant rien sur PRE2 ou en donnant une valeur à `FLUN_HYDR2` de `FLUX_THM_REP` dans `AFPE_CHAR_MECA`. Appelons $M_{2_{ext}}$ cette quantité imposée, qui vaudra 0 si rien n'est dit relativement à PRE2. Nous noterons $p_1 = p_1^{imp}$ la condition imposée sur PRE1
Ceci correspond à :

$$p_c = p_{gz} - p_{lq} = p_c^{imp}$$

$$p_1^{imp} = p_c^{imp}$$

Pour faire la démonstration dans le cadre non homogène, il faudrait introduire un relèvement de la condition $p_1 = p_1^{imp}$ (c.à.d un champ particulier vérifiant cette condition). Cela alourdit les écritures et n'apporte rien, on se place donc dans le cadre homogène $p_1^{imp} = 0$

Dans [éq A5.1-3] et [éq A5.1-4], on peut donc prendre et π_2 quelconque et π_1 vérifiant $\pi_1 = 0$ sur $\partial\Omega_d$
On commence alors à prendre $\pi_1 = 0$ et $\pi_2 = 0$ sur tout le bord $\partial\Omega$ et on obtient [éq A5.1-1] et [éq A5.1-2] au sens des distributions. On multiplie alors [éq A5.1-1] par π_1 tel que $\pi_1 = 0$ sur $\partial\Omega_d$ on multiplie [éq A5.1-2] par π_2 quelconque, on intègre par partie, on tient compte de [éq A5.1-3] et [éq A5.1-4] et on obtient, en désignant par n la normale au bord :

$$\int_{\partial\Omega_d} M_{as} \cdot n \cdot \pi_2 d\Gamma = \int_{\partial\Omega_d} M_{2_{ext}} \pi_2 d\Gamma, \quad \forall \pi_2$$

On en déduit

$$M_{as} \cdot n = M_{2ext} \text{ sur } \partial \Omega_d$$

- **Dirichlet PRE2, neuman PRE1**

C'est le cas où on impose une valeur à PRE2 et une valeur au flux associé à PRE1, en ne disant rien sur PRE1 ou en donnant une valeur à FLUN_HYDR1 de FLUX_THM_REP dans AFFE_CHAR_MECA. Appelons M_{1ext} cette quantité imposée, qui vaudra 0 si rien n'est dit relativement à PRE2. Nous noterons $p_2 = p_2^{imp}$ la condition imposée sur PRE2
Ceci correspond à :

$$\begin{aligned} p_{gz} &= p_{as} + p_{vp} = p_{gz}^{imp} \\ p_2^{imp} &= p_{gz}^{imp} \end{aligned}$$

La démonstration est la même qu'au paragraphe précédent et aboutit à :

$$(M_{lq} + M_{vp}) \cdot n = M_{1ext} \text{ sur } \partial \Omega_d$$

A5.3 Cas de conditions aux limites faisant intervenir des relations linéaires entre inconnues principales

Le Code_Aster permet d'introduire comme conditions aux limites des relations entre degrés de liberté, portés par le même nœud ou par des nœuds différents. Cette possibilité est atteinte via le mot clé LIAISON_DDL de la commande AFFE_CHAR_MECA.

Soit p_{lq}^{imp} la valeur que l'on veut imposer à la pression de liquide sur $\partial \Omega_d$. Compte tenu de [éq A5.1-5], et du choix des inconnues principales pour ce comportement, on écrit :

$$p_{gz} - p_c = p_2 - p_1 = p_{lq}^{imp} \quad \text{éq A5.3-1}$$

Les relations linéaires sont traitées dans Aster par introduction de multiplicateurs de Lagrange. Ceci correspond en l'espèce à la formulation suivante :

Trouver p_1, p_2, μ tels que :

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega} (\dot{m}_{lq} + \dot{m}_{vp}) \pi_1 d\Omega + \int_{\Omega} (M_{lq} + M_{vp}) \cdot \nabla \pi_1 d\Omega - \int_{\Omega} \dot{m}_{as} \pi_2 d\Omega + \int_{\Omega} M_{as} \cdot \nabla \pi_2 d\Omega + \\ & + \int_{\partial \Omega_d} \mu^* (p_2 - p_1 - p_{lq}^{imp}) d\Gamma + \int_{\partial \Omega_d} \mu (\pi_2 - \pi_1 - p_{lq}^{imp}) d\Gamma \quad \forall \pi_1, \pi_2, \mu^* \end{aligned} \quad \text{éq A5.3-2}$$

Pour faire la démonstration dans le cadre non homogène, il faudrait introduire un relèvement de la condition $p_2 - p_1 - p_{lq}^{imp} = 0$ (c.a.d des champs particuliers vérifiant cette condition). Cela alourdit les écritures et n'apporte rien, on se place donc dans le cadre homogène $p_{lq}^{imp} = 0$

On commence alors à prendre $\pi_1=0$ et $\pi_2=0$ sur tout le bord $\partial\Omega$ et on obtient [éq A5.1-1] et [éq A5.1-2] au sens des distributions. On multiplie alors [éq A5.1-1] par π_1 quelconque on multiplie [éq A5.1-2] par π_2 quelconque, on intègre par partie, on porte les résultats trouvés dans [éq A5.3-2] et on obtient :

$$\int_{\partial\Omega_d} (M_{lq} + M_{vp}) \cdot n \cdot \pi_1 d\Gamma + \int_{\partial\Omega_d} M_{as} \cdot n \cdot \pi_2 d\Gamma + \int_{\partial\Omega_d} \mu^* (p_2 - p_1) d\Gamma + \int_{\partial\Omega_d} \mu (\pi_2 - \pi_1) d\Gamma = 0 \quad \forall \pi_1, \pi_2, \mu^* \quad \text{éq A5.3-3}$$

Il est clair que [éq A5.3-3] redonne bien $p_2 - p_1 = p_{lq}^{imp} = 0$

En prenant de plus $\pi_2 - \pi_1 = 0$, on trouve :

$$\int_{\partial\Omega_d} (M_{lq} + M_{vp} + M_{as}) \cdot n \cdot \pi_1 d\Gamma = 0 \quad \forall \pi_1$$

D'où l'on déduit :

$$(M_{lq} + M_{vp} + M_{as}) \cdot n = 0 \text{ sur } \partial\Omega_d \quad \text{éq A5.3-4}$$

A5.4 Les cas non linéaires

Nous ne faisons ici qu'aborder des questions plus difficiles consistant à imposer soit la pression de vapeur soit la pression d'air sec. Compte tenu des relations [éq A5.1-7], [éq A5.1-8] et [éq A5.1-9] imposer une valeur sur la pression de vapeur revient à imposer une relation non linéaire sur la pression de liquide. De même imposer une pression d'air sec.

A titre d'exemple, nous abordons le cas d'une pression d'air sec imposée pour un comportement LIQU_VAPE_GAZ, et nous supposons que nous sachions écrire la relation non linéaire reliant la pression de vapeur et la pression de liquide.

La relation à imposer est donc :

$$p_{as} = p_{gz} - p_{vp} = p_2 - p_{vp} = p_{as}^{imp} \quad \text{éq A5.4-1}$$

En différentiant cette relation, on trouvera une condition sur les variations virtuelles de pressions :

$$dp_{as} = dp_{gz} - \frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{lq}} dp_{lq} = dp_{gz} - \frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{lq}} (dp_{gz} - dp_c)$$

Soit encore

$$dp_{as} = dp_2 - \frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{lq}} (dp_2 - dp_1) = \frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{lq}} dp_1 + \left(1 - \frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{lq}}\right) dp_2$$

La formulation variationnelle serait alors :

$$-\int_{\Omega} (\dot{m}_{lq} + \dot{m}_{vp}) \pi_1 d\Omega + \int_{\Omega} (M_{lq} + M_{vp}) \cdot \nabla \pi_1 d\Omega - \int_{\Omega} \dot{m}_{as} \pi_2 d\Omega + \int_{\Omega} M_{as} \cdot \nabla \pi_2 d\Omega + \int_{\partial\Omega_d} \mu^* (p_2 - p_{vp} - p_{as}^{imp}) d\Gamma + \int_{\partial\Omega_d} \mu \left(\frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{lq}} \pi_1 + \left(1 - \frac{\partial p_{vp}}{\partial p_{lq}}\right) \pi_2 \right) d\Gamma \quad \forall \pi_1, \pi_2, \mu^*$$

Et on trouverait :

$$\int_{\partial\Omega_d} (M_{lq} + M_{vp}) \cdot n \cdot \pi_1 d\Gamma + \int_{\partial\Omega_d} M_{as} \cdot n \cdot \pi_2 d\Gamma + \int_{\partial\Omega_d} \mu \left(\frac{\partial P_{vp}}{\partial p_{lq}} \pi_1 + \left(1 - \frac{\partial P_{vp}}{\partial p_{lq}} \right) \pi_2 \right) d\Gamma = 0 \quad \forall \pi_1, \pi_2$$

En prenant $\frac{\partial P_{vp}}{\partial p_{lq}} \pi_1 + \left(1 - \frac{\partial P_{vp}}{\partial p_{lq}} \right) \pi_2 = 0$ on trouverait :

$$\left(1 - \frac{\partial P_{vp}}{\partial p_{lq}} \right) (M_{lq} + M_{vp}) \cdot n - \frac{\partial P_{vp}}{\partial p_{lq}} M_{as} \cdot n = 0 \quad \text{éq A5.4-2}$$