Chapitre 2

Modélisation du transfert de matière et de chaleur dans un milieu poreux

Dans ce chapitre nous expliquons les principes de milieu poreux, d'écoulement diphasique et de thermodynamique qui nous permettent de modéliser les ISDND. Ce chapitre comporte trois parties. Dans la première partie nous menons une étude bibliographique sur les paramètres physiques-hydrauliques et thermiques des déchets comme la masse volumique, la porosité, la teneur en eau, la saturation, la capacité calorifique, etc. Nous donnons dans cette partie la définition de ces paramètres ainsi que leurs ordres de grandeurs dans la littérature, et nous discutons le choix qui été fait entre les deux paramètres de teneur en eau et de saturation pour le modèle numérique. La définition de ces paramètres et leurs ordres de grandeurs dans le cas des déchets ont été pour la plupart tirés de l'étude bibliographique très complète effectuée par Olivier (2003). Dans la deuxième partie de ce chapitre, nous nous servons de ces paramètres pour développer un modèle d'écoulement diphasique des fluides immiscibles (liquide et gaz) et de transfert de chaleur, basé sur les équations de conservation de la masse et de l'énergie et la loi de Darcy. Dans la troisième partie nous présentons les méthodes numériques que nous avons choisies pour résoudre les équations de transfert de masse et de chaleur dans le milieu poreux, la méthode des volumes finis. Afin de valider l'efficacité de cette méthode pour résoudre les problèmes d'écoulement diphasique, les résultats de simulation numérique en utilisant ce modèle sont comparés à des solutions analytiques existantes pour deux cas: une colonne horizontale sans gravité et avec injection de liquide et une colonne verticale avec gravité et sans injection de liquide.

Nous considérons quelques hypothèses pour simplifier le modèle d'écoulement diphasique : nous ne considérons pas la déformation de la phase solide (tassement des déchets solides) ni la consolidation des déchets dans le modèle. La dégradation des déchets solides est uniquement considérée dans le modèle biologique de dégradation et de production de méthane, au chapitre trois. Le modèle est homogénéisé et nous ne considérons pas dans le modèle les variations de certains paramètres comme la densité et la teneur en eau avec la profondeur. Les variations de ces paramètres sera étudiée dans le chapitre quatre, par expérimentation en laboratoire.

2.1 Variables et paramètres hydrauliques et thermiques définissant un écoulement diphasique dans un milieu poreux

Les milieux poreux sont des milieux constitués d'une phase solide, appelée matrice poreuse, et d'une phase complémentaire à cette phase solide, appelée espace interstitiel ou espace poreux, définie par la porosité du milieu. L'espace poreux peut être occupé par une ou plusieurs phases fluides. Lorsqu'il n'existe qu'une seule phase fluide, on dit que le milieu poreux est saturé. Dans le cas où plusieurs fluides occupent l'espace poreux, on parle de milieux poreux non saturés (par rapport à un fluide de référence).

2.1.1 Teneur en eau et saturation

Teneur en eau

La teneur en eau d'un sol est définie comme le rapport de la masse d'eau présente entre les éléments solides du sol sur la masse sèche de sol après passage de l'échantillon à l'étuve (à 105°C pendant 24h). Dans le cas des déchets, la notion de teneur en eau est plus complexe car les éléments du déchet, à commencer par la matière organique, sont constitués d'une proportion importante d'eau (Olivier, 2003). On peut donc distinguer dans le cas du déchet l'eau constitutive

interne aux éléments solides du déchet, incluse dans la mesure du poids volumique solide γ_{si} des constituants i du déchet et l'eau de mouillage qui remplit les interstices entre les constituants du déchet. Cette eau de mouillage est elle-même divisée en trois sous catégories, l'eau adsorbée sous forme de fines pellicules à la surface des constituants, l'eau capillaire distribuée dans les micropores (et plus particulièrement aux points de contact entre particules) et enfin l'eau gravitaire distribuée dans les macro-pores. En régime non saturé, seule cette dernière est libre de circuler au travers du déchet.

La quantité d'eau de mouillage ne peut être connue que dans le cas d'un déchet type reconstitué en laboratoire pour lequel le volume d'eau ajouté aux éléments de déchet (eau de mouillage) est connu. Les mesures indirectes de teneur en eau (comme à l'aide de sondes résistives) ne donnent pas entière satisfaction à ce jour (Yuen, 1999). A partir des deux types d'eau définis précédemment, nous pouvons définir trois états du matériau déchet: l'état sec (sans eau), l'état solide (incluant l'eau constitutive) et l'état humide (incluant à la fois l'eau constitutive et l'eau de mouillage). La Figure (2-1) présente ces trois états.



Figure (2-1) Description des états sec, solide et humide du déchet (d'après Olivier, 2003)

En utilisant ces états solide et humide du matériau, nous pouvons établir au moins neuf expressions de la teneur en eau (%) rapportées respectivement à la masse de déchet solide (m_s) , sèche (m_d) ou humide (m_h) (Olivier, 2003):

Teneur en eau (constitutive) à l'état solide :

$$\omega_s = \frac{m_s - m_d}{m_s} \qquad \qquad \omega_s' = \frac{m_s - m_d}{m_d} \qquad \qquad \omega_s'' = \frac{m_s - m_d}{m_h}$$

Teneur en eau (totale) à l'état humide :

$$\omega_h = \frac{m_h - m_d}{m_s} \qquad \qquad \omega'_h = \frac{m_h - m_d}{m_d} \qquad \qquad \omega''_h = \frac{m_h - m_d}{m_h}$$

Teneur en eau de mouillage :

$$\omega_h - \omega_s = \frac{m_h - m_s}{m_s} \qquad \qquad \omega'_h - \omega'_s = \frac{m_h - m_s}{m_d} \qquad \qquad \omega''_h - \omega''_s = \frac{m_h - m_s}{m_h}$$

Parmi ces différentes expressions de la teneur en eau, ω_s , ω_h et ω''_h représentent les valeurs les plus couramment fournies dans la littérature (Olivier, 2003). La teneur en eau du déchet à un instant donné dépend d'un certain nombre de facteurs parmi lesquels sa composition initiale, son conditionnement (tri, broyage), son mode de mise en place (compactage), son degré de biodégradation mais aussi le degré d'étanchéité de la couverture et enfin le drainage (et éventuellement la réinjection) de lixiviat. L'eau est non seulement indispensable aux réactions biochimiques mais elle permet aussi l'échange de nutriments et de microorganismes au moyen de pontages capillaires.

La structure hétérogène du déchet implique une répartition de cette teneur en eau souvent aléatoire. Tandis que les vides ouverts (ou inter-particulaires) peuvent être dans un état quasi sec, les vides fermés (ou intra-particulaires) peuvent rester partiellement voire entièrement saturés. La séparation entre deux couches de déchet constitue également une zone à forte porosité favorable à l'accumulation d'eau (Aguilar-Juarez, 2000). A l'échelle des constituants, la teneur en eau peut passer de quelques pourcents (plastique, papier, etc.) à plus de 75 % (rapporté à la masse solide) s'agissant de fruits et légumes.

Capacité de rétention et capacité au champ : La capacité de rétention représente la quantité maximale d'eau capillaire (et adsorbée) que le milieu est capable de retenir à l'équilibre. Elle correspond donc à la teneur en eau totale au dessus de laquelle l'eau est drainée sous l'influence de la gravité. Cette capacité de rétention peut aussi être définie comme la somme de la teneur en eau initiale et de la capacité d'absorption du déchet définie par la quantité d'eau que le déchet peut absorber sans drainage. Immédiatement après stockage, de fortes capacités d'absorption sont en général observées (Bellenfant, 2001). Celles-ci se réduisent ensuite sous l'effet de la compression et de la biodégradation.

La capacité de rétention est souvent remplacée par la capacité au champ, calculée suite à un essai de ressuyage par le bas (vidange non forcée) de 48 heures, l'équilibre étant ou non atteint (Vincent, 1991). Cette dernière représente donc une valeur approchée de la capacité de rétention par excès puisque augmentée d'une grande partie de l'eau provenant d'un écoulement gravitaire lent. Dans la pratique, les deux termes sont toutefois employés sans distinction, les temps de ressuyage n'étant presque jamais évalués. Si l'on se réfère aux équations de teneur en eau proposées précédemment, la capacité de rétention équivaut à une teneur en eau de mouillage à l'équilibre. Elle est donc calculée alternativement sous la forme $(\omega_h - \omega_s)_{\acute{e}auilibre}$, $(\omega'_h - \omega'_s)_{\acute{e}auilibre}$ ou encore $(\omega_h'' - \omega_s'')_{equilibre}$. Les travaux de Beaven et Powrie (1995) et de Zornberg (1999) ont mis en évidence à partir d'essais de laboratoire la diminution de la capacité au champ des déchets avec l'augmentation de la contrainte verticale (ou de la profondeur). Suite à l'analyse d'échantillons récupérés sur le site de Montech et d'essais de laboratoire, Lanini (1998) est arrivé toutefois au constat inverse, ce qui pourrait signifier que d'autres paramètres que la compression, à commencer par la structure du déchet, puissent influer de manière significative la teneur en eau à l'équilibre (Olivier, 2003). La capacité de rétention moyenne (rapportée à la masse solide) se situerait autour de 30 à 40 %. La capacité au champ diminue avec l'âge des déchets (ces derniers se minéralisant progressivement, la capacité d'absorption diminue) et la profondeur car le tassement augmente la densité du déchet et réduit par conséquent la taille des pores (Ademe, 2001).

On a vu dans cette partie que différentes mesures de teneur en eau sont possibles en utilisant les termes humide ou solide pour la masse des déchets et de l'eau. Les valeurs proposées dans la littérature ne précisent pas en général la définition utilisée pour mesurer ce paramètre (Olivier, 2003). C'est pour cette raison que nous avons décidé d'utiliser la saturation des déchets comme

paramètre du modèle, à cause de sa définition simple et claire basée sur le volume de déchets et pas sur la masse. Une autre raison pour ce choix est que la définition de certains paramètres de milieu poreux est basée sur la saturation, comme la perméabilité relative et la pression capillaire, comme nous allons voir aux paragraphes suivants.

Saturation

Le degré de saturation en phase liquide exprime le volume de lixiviat présent dans les vides ouverts, $V_{liauide}$ sans l'eau constitutive, rapporté au volume de ces derniers, $V_{vides-ouvertes}$:

$$S_l = \frac{V_{liquide}}{V_{vides-ouvertes}}.$$
(2-1)

Dans le cas étudié dans cette thèse, nous considérons uniquement deux phases au sein de l'espace poreux : une phase liquide et une phase gazeuse. Par conséquent nous désignerons par S la saturation en liquide (la saturation en gaz valant : $S_g = 1 - S_l$). Comme nous avons précisé dans la définition de la capacité au champ, au-dessous de certaines valeurs de la teneur en eau des déchets, il n y a plus de drainage dans le milieu. Cette valeur est définie comme la saturation résiduelle, S_r . Kling et al. (2006) propose une valeur de 0,2 pour la saturation résiduelle des déchets. Nous n'avons pas trouvé dans la littérature de définition physique de la saturation résiduelle. Certains auteurs l'assimilent à la capacité au champ. Pour nous, le terme de saturation résiduelle signifie la capacité de rétention en utilisant la définition de la saturation au lieu de la teneur en eau. Le stockage de lixiviat dans les déchets est possible parce qu'en général la capacité au champ des déchets est inférieure à leur saturation résiduelle (McCreanor 1998). La saturation résiduelle des déchets est estimée entre 0,20 et 0,35 par Oweiss et al. (1990), Korfiatis (1984) et Noble et al (1991). Dans notre modèle nous utilisons les valeurs de la saturation résiduelle, de la saturation minimum (pour l'activité microbienne) et de la saturation initiale des déchets d'une ISDND-bioactive proposées dans la littérature. Comme les valeurs proposées ont en générale une gamme assez large, nous estimons ensuite les valeurs correspondant à chaque cas étudié d'ISDND-bioactive en réalisant une analyse inverse. Nous définirons également une relation permettant d'estimer la saturation à partir de la teneur en eau, de la porosité et de la densité des déchets. Nous présentons d'abord la définition de la porosité et de la densité et leurs ordres de grandeurs dans la littérature. Nous décrivons ensuite la relation que nous utilisons pour estimer la saturation des déchets à partir de ces paramètres et de la teneur en eau.

2.1.2 Porosité

La porosité représente la quantité de vides disponibles au sein d'un matériau. Comme pour la teneur en eau, on trouve dans la littérature de nombreuses valeurs de porosité sans que l'on sache toujours très bien de quoi il s'agit. Dans un souci de clarté, nous avons pris le parti de ne jamais mentionner le terme de porosité n sans lui accoler un qualificatif précis. C'est ainsi que l'on a introduit trois porosités bien distinctes :

- Porosité totale (n_t)
- Porosité ouverte ou inter-particulaire (n_o)
- Porosité efficace ou de drainage (n_{e})



Intérêt limité

Expression analytique résolue à partir du poids volumique moyen des constituants (au temps initial) Valeur tirée de tests de percolation (vidange)

Figure (2-2) Détermination des trois paramètres de caractérisation de la porosité du déchet (d'après Olivier, 2003)

Le calcul de la porosité ouverte (n_o) nécessite la détermination préalable de la composition pondérale et des poids volumiques solides des différents constituants du déchet et enfin de son poids volumique en place. Elle est donc mesurable exclusivement à l'instant initial de mise en place du déchet (Olivier, 2003). On constate que la porosité ouverte est très sensible aux fluctuations du poids volumique des constituants. La porosité ouverte est décrit comme suit :

$$n_o = \frac{V_t - V_s}{V_t} = \frac{V_{vides-ouvertes}}{V_t},$$
(2-2)

où V_t est le volume total et V_s est le volume des déchets solides, comme présenté sur la Figure (2-

2). Pour une couche de déchet donnée, la porosité efficace (n_e) dépend de la contrainte effective imposée à la couche. Beaven et Powrie (1995) ont observé une évolution de la porosité efficace de quelque 15 à 20 % à moins de 2 % sous l'action d'une variation de contrainte de 30 à 450 kPa (équivalent au poids d'une colonne de déchet de 40 à 50 m de déchet environ). Landva et Clark (1990) ont proposé des valeurs de porosité entre 30 et 60% pour les déchets. Les valeurs proposées par Zeiss et Major (1992) sont entre 47 et 58%.



a) Evolution de la porosité efficace des différents types de déchet (âgé, ménagers, traité) en fonction de la contrainte verticale moyenne (Powrie et al. 2000)



Figure (2-3) b) Variations de la porosité efficace avec la contrainte (Beaven et al., 1995)

La Figure (2-3) peut permettre de faire varier la porosité des déchets dans un modèle numérique avec la profondeur des déchets. Pour mesurer la porosité effective dans une colonne de déchets, Figure (2-4), on peut mesurer le volume d'eau nécessaire pour augmenter le niveau de l'eau de la section 2 à la section 3, à l'aide de la réserve A qui a un niveau plus haut que la section 3. La porosité effective pour le déchet situé entre les niveaux 2 et 3 est calculée comme suit (Olivier 2003):



Figure (2-4) Colonne expérimentale pour mesurer la porosité efficace des déchets

Hudson et al. (2001) ont étudié les variations de la porosité avec la contrainte verticale dans une colonne de 2,5m de hauteur et de 2m de diamètre. La contrainte verticale est appliquée en haut de cellule et augmente en 5 ou 6 étapes jusqu'à 600 KPa qui représente un déchet à environ 60m de profondeur, si la densité du déchet est supposée égale à 1 environ). Après chaque niveau de contrainte, la porosité efficace est mesurée (Figure 2-5).



Figure (2-5) Variations de la porosité efficace avec la contrainte verticale, Hudson et al. (2001)

D'autres valeurs pour la porosité efficace, n_e sont présentées par Olivier et al. (2007) entre 2,38% et 2,95 %, entre 1% et 10% par Hudson et al. (2001) et entre 4 et 5% sur une ISDND-bioactive en France (données d'exploitation, non publiées).

Comme nous l'avons indiqué auparavant notre modèle est homogénéisé et ne considère pas la variation des paramètres avec la profondeur. Les paramètres comme la porosité et la saturation sont estimés dans le modèle pour chaque cas étudié par analyse inverse. Nous choisissons les gammes des valeurs de chaque paramètre, proposées dans la littérature par rapport à différentes variables comme la profondeur, et nous estimons les meilleures valeurs pour un cas homogénéisé équivalant en comparant les résultats du modèle avec les résultats expérimentaux. Par contre pour les expérimentations en laboratoire, nous étudions les variations des paramètres saturation et densité (et donc porosité) des déchets et leur influence sur la biodégradation anaérobie et la production de biogaz.

2.1.3 Masse volumique - densité

La masse volumique des déchets, ρ , varie avec le temps (la biodégradation et le tassement) et la profondeur des déchets. Les déchets sont en général compactés jusque 600 kg/m³ (Olivier, 2003). Cette valeur augmente au fur et a mesure du temps passé par le déchet dans l'alvéole et à cause du tassement. Les valeurs expérimentales pour un déchet à 24 mètres de profondeur montrent que la masse volumique augmente jusqu'à 1000kg/m³ après 10 ans (Olivier, 2003). Dans le domaine des déchets on utilise en général le terme de densité pour définir la masse volumique en kg/m³, malgré que la densité soit un paramètre sans dimension (le rapport de la densité des déchets sur la densité de l'eau). Dans cette thèse on utilisera le terme densité pour exprimer la masse volumique en Kg/m³.

Les valeurs proposées pour la densité des déchets varient entre 165 et 304 kg/m³ selon Zeiss et Major (1992). Kling et Korkealaakso (2006) ont utilisé une valeur de 600 kg/m³ pour la modélisation d'un bioréacteur en Finlande. Olivier et al. (2007) à réalisé des essais de laboratoire pour déterminer les variations de densité des déchets avec la contrainte verticale pour des déchets secs, solides et humides, dont les définitions sont présentées sur la Figure (2-1). Les résultats sont présentés pour deux colonnes expérimentales, test1 et test2. Les paramètres des colonnes expérimentales et les courbes de densité sont présentés dans le Tableau 2-1 et sur la Figure (2-6), respectivement. Les variations de la densité humide des déchets proposées par Hudson et al. (2001) sont présentées sur la Figure (2-7).

		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
Paramètres	Test 1	Test 2
Masse solide de déchets (kg)	442	420
Volume d'eau ajouté (Litre)	66	155
Hauteur initiale des déchets (cm)	83,37	84,5
Température intérieure (°C)	26-30	32-36

Tableau 2-1 Paramètre des colons expérimentaux (Olivier et al., 2007)



Figure (2-6) Variations de densité aux états humide, solide et sec avec la contrainte verticale (Olivier et al., 2007)



Figure (2-7) Variations de densité des déchets humides avec la contrainte verticale (Hudson et al., 2001)

Comme pour la masse des déchets, au paragraphe 2.1.1, différentes définitions de la densité des déchets est possible : la densité solide, sèche et humide. Les relations suivantes sont définies entre les densités et les teneurs en eau (Olivier, 2003):

$$\rho_s = \frac{\rho_h}{1 + (\omega_h - \omega_s)} \qquad \qquad \rho_d = \frac{\rho_h}{1 + \omega'_h} \qquad \qquad \rho_d = \frac{\rho_s}{1 + \omega'_s}$$

D'autres valeurs sont proposées dans la littérature pour le poids volumique des déchets $\gamma(kN/m^3) = \rho.g$, où g est l'accélération de la pesanteur. En général, le poids volumique solide moyenné sur la hauteur d'une colonne de déchet ou pour l'ensemble d'un casier est compris entre 8 et 11 kN/m3 (Olivier et al., 2003). Quant aux poids volumiques humides, ils sont tirés de mesures directes (essais à la pelle ou carottage) ou indirectes. Ils fluctuent généralement dans les gammes suivantes :

- o déchet non compacté (immédiatement après déversement sur site) : 2 à 6 kN/m3
- o déchet fraîchement compacté (non surchargé) : 6 à 9 kN/m3
- o déchet moyennement surchargé : 8 à 10 kN/m3
- o déchet fortement surchargé : 9 à 13 kN/m3

2.1.4 Définition de la saturation à partir de la teneur en eau

L'équation suivante nous permet d'estimer la saturation des déchets à partir de la teneur en eau. Les équations de notre modèle diphasique sont basées sur la porosité ouverte (équation 2-2). Pour trouver le volume d'eau dans l'équation de saturation (équation 2-1) nous utilisons le terme de teneur en eau de mouillage ($\omega_h - \omega_s$) définie au paragraphe 2.1.1. En utilisant la relation entre la teneur en eau de mouillage et la densité humide (paragraphe 2.1.3) et l'équation (2-2) dans l'équation de saturation (équation 2-1) nous obtenons la relation suivante entre la saturation et la teneur en eau :

$$S_l = \frac{1}{n_o} \left[1 - \frac{m_s}{m_h} (\omega_h - \omega_s) \right].$$
(2-3)

Comme nous l'avons expliqué précédemment, nous n'utilisons pas cette équation dans notre modèle. Nous considérons une gamme de valeurs proposées dans la littérature pour la saturation, et nous estimons la saturation de chaque cas d'ISDND-bioactive en effectuant des analyses inverses pour déterminer les paramètres conduisant aux résultats les plus proches des résultats expérimentaux et *in situ*.

2.1.5 Pression capillaire

Lorsque deux phases non fluides miscibles de mouillabilités différentes coexistent, elles sont séparées par une interface courbe. La pression est discontinue à la traversée de cette interface, et la différence de pression entre la phase mouillante (liquide) et la phase non mouillante (gaz) s'appelle la pression capillaire:

$$P_c(S) = P_g - P_l \tag{2-4}$$

La pression capillaire dépend du matériau étudié, mais aussi de la paire de fluides saturants et de la température. La fonction qui relie la pression capillaire à la saturation est une fonction strictement décroissante. Il existe dans la littérature différentes modèles de capillarité pour fournir des expressions analytiques représentant les courbes capillaires, dont la relation entre la saturation et la pression capillaire. Le modèle de Van Genuchten définit la relation entre la saturation et la pression capillaire comme suit:

$$P_{c}(S) = -\rho_{l}g \frac{1}{\alpha} \left(S_{e}^{-1/m} - 1 \right)^{1/n},$$

$$S_{e} = \frac{S_{l} - S_{r}}{S_{\max} - S_{r}},$$
(2-5)

où $n = 1/(1-m) \cdot n$, m et $\alpha(m^{-1})$ sont les paramètres empiriques de Van Genuchten et S_e est la saturation efficace. S_r est la saturation résiduelle et S_{max} est la saturation maximum.

Les paramètres de Van Genuchten proposés par Aran (2000) sont: $\alpha = 10(m^{-1})$, m = 0,8718. Kling et al. (2006) a utilisé les valeurs suivantes pour sa modélisation: $\alpha / \rho g = 8,4.10^{-4}(Pa)$ et alors $\alpha \approx 8,4(m^{-1})$, $S_r = 0,2$. Le stockage de lixiviat dans les déchets est possible parce qu'en général la capacité au champ des déchets est inférieure à leur saturation résiduelle (McCreanor 1998). La saturation résiduelle des déchets est estimée entre 20-35 % par Oweiss et al. (1990), Korfiatis (1984) et Noble et al (1991).

2.1.6 Perméabilité relative et intrinsèque

Le lixiviat s'écoule essentiellement au travers des pores ouverts présents dans le déchet, dans des proportions dépendant à la fois de facteurs hydriques (précipitations, infiltrations, recirculation), de la nature des déchets (granularité, structure, teneur en eau initiale) et de leur mode de traitement et de mise en place (tri, broyage, compactage).

La perméabilité intrinsèque d'un milieu poreux k_i (m²) traduit la tortuosité et la géométrie du milieu poreux. La perméabilité relative k_{rP} (P : phase liquide ou gazeuse) traduit la facilité de circulation plus ou moins grande d'un fluide dans un milieu poreux partiellement occupé par un autre suivant le degré de saturation de ce milieu (écoulement diphasique). En milieu diphasique, l'état totalement saturé n'existe que très rarement et on considère généralement que proche de la saturation, une fraction irréductible d'un constituant P ne peut être chassé par l'autre fluide. Dans ces deux cas, la perméabilité relative prend alors la valeur 1 et la perméabilité intrinsèque devient égale à la perméabilité à saturation. Différentes valeurs de la perméabilité intrinsèque au gaz dans les déchets sont proposées dans la littérature (Tableau 2-2).

Auteurs	Profondeur des déchets (m)	$k_i (m^2)$
	3 - 6	(11 - 22,5). 10 ⁻¹²
Pradeep et al. (2005)	6 - 12	(5,4 - 10,9). 10 ⁻¹²
	12 - 18	$(3 - 7, 3)$. 10^{-12}
Cestaro (2003)		$(0, 1 - 1). 10^{-10}$
Tchobanoglous et al. (1	993)	1,0. 10 ⁻¹⁰
Baehr A. L. (1991)		(3,0 - 4,8). 10 ⁻¹¹
Findikakis and Leckie (1	1979)	9,9. 10 ⁻¹³
Esmaili (1975)		2,4. 10 ⁻¹⁰

Tableau 2-2 Valeurs de la perméabilité intrinsèque des déchets au gaz

La perméabilité relative est une fonction de la saturation et elle est comprise entre 0 et 1. Le concept de perméabilité relative intervient dans les écoulements diphasiques en milieux poreux. Il traduit le fait qu'en plus de la résistance de la matrice poreuse, une des phases peut constituer un obstacle au déplacement de l'autre. Il existe différents modèles dans la littérature pour la perméabilité relative. Le modèle de Van Genuchten d'écrit la relation entre les perméabilités relatives au gaz, k_{rg} et au liquide k_{rl} , comme suit :

$$k_{rl} = S_e^2 \left[1 - \left(1 - S_e^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]$$

$$k_{rg} = \left(1 - S_e^{-1} \right)^2 \left[1 - S_e^{\frac{1}{m}} \right]^m.$$
(2-6)

2.1.7 Conductivité hydraulique

Dans la littérature et plus précisément dans la modélisation des transferts d'humidité, les auteurs utilisent plus régulièrement la conductivité hydraulique à saturation K_s (m/s) qui est reliée aux deux autres perméabilités par la relation :

$$K_s = k_i kr_i(s_i = 1) \frac{\rho_i \cdot g}{\mu_i}, \qquad (2-7)$$

où $\rho_l(kg/m^3)$ et $\mu_l(Pa.s)$ sont la masse volumique et la viscosité dynamique du liquide, respectivement. La conductivité hydraulique définit le volume écoulé de lixiviat par unité de surface et de temps, par le gradient hydraulique. Les valeurs proposées dans la littérature pour la conductivité hydraulique des déchets à saturation sont présentées dans le Tableau 2-3.

 K_s (m/s) Source Remarques $1,0.10^{-7} - 1,0.10^{-5}$ Oweis et al. (1990) Essais de puits (Profondeur: 11m) New Jersey 6,7.10⁻⁷ - 9,8.10⁻⁶ Shank, (1993) 1,0.10⁻⁹ - 1,0.10⁻⁶ Bleiker et al. (1995) Essais sur échantillons de déchet en laboratoire 1,5.10⁻⁴ - 1,0.10⁻⁴ Essais sur colonnes (h=2 m et ϕ = 34*cm*) Lanini (1998) $1,0.10^{-6} - 4,0.10^{-4}$ Lanini (1998) Essais sur carottes extraites du CSD de Montech $5,0.10^{-4} - 1,0.10^{-7}$ Landva et al. (1998) 2,8.10⁻⁵ - 3,1.10⁻⁶ Powrie et Beaven (1999) Pression moyenne de 120 kPa 1,0.10⁻⁶ - 1,0.10⁻⁵ Olivier (2003) $1,2.10^{-7} - 6,3.10^{-6}$ Wysocki et al. (2003) McCreanor, Reinhart et Jain $1,0.10^{-4} - 1,0.10^{-9}$ (2000, 2005)2,5.10-5 Gawande et al. (2005)

Tableau 2-3 Ordres de grandeur de la conductivité hydraulique à saturation des déchets ménagers

En milieu non saturé, ce qui représente le cas général s'agissant du matériau déchet, la conductivité hydraulique est cependant inférieure aux valeurs présentées dans le Tableau 2-3. La conductivité hydraulique des déchets diminue à pression de confinement (et donc à profondeur) croissante. Cela se traduit par une diminution de la perméabilité (ce qui revient à une diminution de la porosité) avec l'augmentation du poids volumique du déchet (Oweis, 1986 rapporté par Beaven, 1996). Toujours en conditions saturées, Beaven et Powrie (1995) ont déterminé des conductivités hydrauliques oscillant entre 10⁻³ m/s (à faible confinement) et un peu moins de 10⁻⁷ m/s (pour une contrainte de 450 kPa). Avec le temps, on observe une diminution de la perméabilité en fond de casier pouvant à terme bloquer plus ou moins totalement l'écoulement gravitaire.



Figure (2-8) Variations de la conductivité hydraulique verticale avec la contrainte verticale

Dans la réalité enfin, le mode de mise en place et le compactage du déchet par couches induit une certaine anisotropie du matériau (stratification horizontale) caractérisée par une conductivité hydraulique horizontale, K_{sh} généralement supérieure de 2 à 10 fois à la conductivité hydraulique verticale, K_{sv} (Hudson et al. 2000,2001).

2.1.8 Conductivité thermique des déchets

Dach et Jager (1995) proposent des valeurs relativement élevées pour des déchets humides et chauds (λ compris entre 0,4 et 1 W/mK) et des conductivités moindres pour des déchets plus froids et moins saturés en liquide (λ compris entre 0,15 et 0,4 W/mK). Il faut noter que ces données sont relatives à des déchets prétraités mécaniquement et biologiquement.

Yoshida et al (1997) calculent, à partir de la composition des déchets, les conductivités thermiques équivalentes en série ($\lambda = 0,18 W/mK$) puis en parallèle ($\lambda = 1,57 W/mK$) pour en déduire une conductivité effective choisie comme étant la moyenne géométrique des deux précédentes ($\lambda = 0.53 W/mK$). Les mesures réalisées par Lanini (1998) (méthode de la sonde à choc thermique) sur un déchet de décharge indiquent une valeur proche de 0.09W/mK, ce qui représente une valeur très faible pour ce type de milieu. Aguilar-Juarez (2000) estime à 0,3W/mKla conductivité thermique des déchets lors de la modélisation du comportement thermique d'une alvéole pendant son remplissage. Il existe donc une grande gamme de valeurs concernant la conductivité thermique des déchets. Certains auteurs ont mesuré et noté l'influence de l'humidité (Dach et Jagger, 1995); Lanini, 1998) mais aucun n'a intégré cette dépendance dans sa modélisation. Aran (2000) dans sa thèse a étudié les effets de la saturation et de l'âge des déchets sur les valeurs de la conductivité thermique. La méthode utilisée est la méthode des chocs thermiques qui consiste à chauffer le milieu poreux et mesurer sa montée en température à partir des sondes implantées dans la décharge. La vitesse de propagation de l'onde thermique permet de déduire les valeurs de la conductivité thermique. Aran (2000) a proposé des courbes de valeurs de la conductivité thermique en fonction de la saturation pour des déchets jeunes (0-10m) et plus âgés (20-30m):





Figure (2-9) Conductivité thermique des déchets en fonction de l'humidité, Aran (2000)

On remarque que selon cet auteur la conductivité thermique augmente avec la saturation et diminue avec l'âge du déchet. Kling et al. (2006) a utilisé dans son modèle une valeur de 2,1W/mK comme conductivité thermique humide. Manna (1999) propose une conductivité thermique de 0,0445W/mK pour les déchets et de 0,1395W/mK pour le sol et Yesiller et al. (2005) a proposé 1W/mK.

2.1.9 Capacité calorifique des déchets

Pour déterminer la capacité calorifique des déchets, nous avons utilisé la méthode d'addition massique (Miller, 2003; Zeiss, 1999). Avec cette méthode et en connaissant la valeur de la capacité calorifique et la masse sèche de chaque composant des déchets on peut trouver la capacité calorifique sèche totale de l'ensemble des déchets.

$$MC_{p} = \sum \left[M_{i} \cdot C_{p_{i}} \right] \tag{2-8}$$

Où M_i et $C_{p_i}(kJ/kg.K)$ sont la masse sèche et la capacité calorifique massique de chaque composant i des déchets. Pour les masses sèches des composants et leurs pourcentages massiques en France, nous avons utilisé les valeurs proposées par l'ADEME (1993). Les valeurs de capacité calorifique de ces composants sont tirées de Yoshida (1997). Le Tableau 2-4 présente la méthode d'addition massique pour définir la capacité calorifique des déchets et du biogaz.

Tableau 2-4 Calcul de la capacité calorifique des phases solide, liquide et gazeuse d'une décharge

Catégories	Masse sèche (%)	Cp (KJ/Kg.K)	(Cp × masse)
Déchets putrescibles (déchets de cuisine et verts)	15,80	1,715	0,271
Papiers (emballages, journaux, magazines)	17,70	1,260	0,223
Cartons (cartons plats, ondulés, autres)	9,20	1,260	0,116
Complexes (emballages complexes type Tétra brick)	1,60	1,400	0,022
Textiles (emballages textiles, autres)	3,00	1,310	0,039
Textiles sanitaires (couches, coton hygiénique)	1,90	1,310	0,025
Plastiques (PE, PVC, PET, polystyrène)	12,70	2,100	0,267
Combustibles non classés (bois, caoutchouc)	3,90	1,360	0,053
Verres	19,10	1,160	0,222
Métaux (aluminium, métaux ferreux, cuivre)	5,60	0,700	0,039
Incombustibles non classés (pierres, gravats)	8,90	0,800	0,071
Déchets spéciaux (chiffons souillés, piles)	0,70	0,500	0,004

Capacité calorifique totale des déchets			1,352
Capacité calorifique de l'eau			4,180
Méthane	50,00	2,290	1,145
Dioxyde de Carbone	50,00	0,850	0,423
Capacité calorifique totale du biogaz			1,568

Manna (1999) à proposé les valeurs suivantes pour la capacité calorifique des déchets, du biogaz et du sol: les déchets : 2,17 kJ/kg.K, sol: 0,73 kJ/kg.K et biogaz: $1,7136 kJ/Nm^3K$. D'autres valeurs de la capacité calorifique des déchets proposées dans la littérature sont présentées dans le Tableau 2-5.

$C_p(kJ/kg.K)$	Auteur	Matériel
0,65	Dash (1998)	Métaux
0,85	Dash (1998)	Sable, Verre
0,86	Hammerschimidt (2003)	DND
1,26	Yoshida et al. (1997)	DND
1,5	Dash (1998)	Papier
1,7	Dash (1998)	Cotton
1,9	Dash (1998)	Bois
2,2	Dash (1998)	Plastique

Tableau 2-5 Valeurs de la capacité calorifique des déchets

2.2 Modélisation du transfert de matière et de chaleur dans un milieu poreux

Pour qu'un transport de fluides à travers le matériau soit possible, l'espace poreux doit être partiellement connecté. A l'échelle microscopique, le matériau est bien entendu trop complexe pour être exactement décrit par un modèle. Pour cette raison, différentes théories sont utilisées pour décrire le comportement des fluides d'un milieu poreux. L'approche que nous utilisons est l'approche dite macroscopique. Elle est basée sur l'existence d'un Volume Elémentaire Représentatif (V.E.R) qui permet la définition de quantités macroscopiques comme la moyenne sur ce V.E.R de la même quantité prise à l'échelle microscopique (ou échelle des pores). La taille de ce V.E.R doit être suffisamment grande pour que les hétérogénéités présentes à l'échelle microscopique (Figure 2-10). De plus dans notre approche, le milieu poreux sera vu comme la superposition de deux milieux continus : au même point géométrique coïncident une particule du squelette, qui comprend la matrice poreuse et l'espace poreux connecté, et une particule fluide.



Figure (2-10) Définition du volume élémentaire représentatif sur lequel est moyennée la propriété P de milieu poreux

2.2.1 Principes de la thermodynamique des systèmes irréversibles

Il existe différentes approches théoriques en thermodynamique parmi lesquelles nous avons choisi et utilisé les principes adoptés par Coussy (1995) pour développer un modèle d'écoulement diphasique dans les milieux poreux : l'approche de la thermodynamique des systèmes irréversibles. La thermodynamique des systèmes irréversibles repose sur les deux grands principes de la thermodynamique et comme toute théorie macroscopique, reste muette sur la nature physique intrinsèque des phénomènes de couplage qu'elle décrit.

Cependant, la thermodynamique des systèmes irréversibles fournira des bases solides pour la conception des modèles numériques de transferts de chaleur et de masse dans les milieux poreux. Coussy à traité le milieu poreux comme un milieu continu unique. Celui-ci est vu comme étant la superposition de deux milieux continus : le squelette et les fluides, qui ne constitue pas une nouvelle démarche. Elle constitue traditionnellement la base du calcul en hydrogéologie (Bear, 1972 ; Marsily, 1986), qui consiste à écrire les équations phénoménologiques à l'échelle du pore et à obtenir les équations macroscopiques par intégration sur un volume élémentaire représentatif. Le milieu poreux est considéré non déformable, non saturé (la phase gazeuse est présente dans le système) et il n y a pas de changement de phase pour les fluides.

Le premier principe appliqué à un milieu poreux décrit la variation de l'énergie totale du milieu pendant un temps dt. Cette variation, dE, résulte d'échanges d'énergie avec l'extérieur sous la forme d'échanges de chaleur dQ, de processus associés au travail des forces extérieures dW, ou d'échanges de matière dE_{mat} :

$$dE = dE_{mat} + dQ + dW \tag{2-9}$$

Les quantités dQ et dW peuvent être évaluées à partir des mécanismes utilisés pour le transfert de chaleur et en spécifiant les forces qui effectuent le travail. Dans notre modèle de milieu poreux indéformable, il est possible de faire quelques hypothèses simplificatrices; il n'y a pas de déformations du squelette et par conséquent l'énergie mécanique liée aux déformations du squelette n'est pas prise en compte. Ainsi, les tenseurs des contraintes et des déformations agissant sur l'ensemble de la matrice poreuse sont nuls. De plus, par souci de simplicité, les seuls efforts extérieurs par unité de masse qui sont pris en compte sont les efforts de gravité. Le deuxième principe appliqué à un milieu poreux implique que l'entropie, S_{ent} , est une grandeur extensive. Lorsqu'un système est constitué de plusieurs parties, l'entropie totale est égale à la somme des entropies de chaque partie. Dès lors, la variation d'entropie dS_{ent} peut être décomposée en deux termes : la production d'entropie d_iS_{ent} dues aux changements internes du système et le flux entropique d_eS_{ent} dû aux échanges (énergie et matière) avec le milieu extérieur.

2.2.2 Un modèle complet d'écoulement d'eau et de gaz au sein d'un milieu poreux

Dans ce paragraphe, nous présentons une modélisation des écoulements diphasiques sans changement de phase. Pour cela, nous présentons les équations de conservation de matière et d'énergie et les fonctions thermodynamiques (Coussy, 1995).

2.2.2.1 Conservation de la masse

Considérons le cas où le milieu poreux est constitué de la matrice solide, d'un liquide et d'un gaz. La conservation de chacun des constituants (liquide, gaz) s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{\partial m_l}{\partial t} + \nabla .(\rho_l V_l) = 0\\ \frac{\partial m_g}{\partial t} + \nabla .(\rho_g V_g) = \alpha_g \end{cases}$$
(2-10)

où: $m_l = n_o S_1 \rho_l$ et $m_g = n_o (1 - S_1) \rho_g$. n_o est la porosité ouverte du milieu, S_1 est la saturation en liquide et ρ_p est la masse volumique des phases P(l,g), dont les définitions ont été présentées au 2.1. V_p est la vitesse de filtration de la phase P définie par la loi de Darcy et α_g est le terme de production de biogaz qui est définit à partir du modèle biologique de dégradation et de production de biogaz, développé dans le chapitre 3.

Loi de Darcy

Les vitesses des phases fluides s'écoulant dans un milieu poreux peuvent s'exprimer par la loi de Darcy généralisée :

$$V_{P}(m/s) = \frac{k_{iP}k_{rP}}{\mu_{P}} (\nabla P_{P} + \rho_{P}g)$$
(2-11)

où k_{iP} , k_{rP} , μ_P et P_P sont les perméabilités intrinsèque et relative, la viscosité dynamique et la pression de chaque phase P, respectivement. Les définitions et l'ordre de grandeur de ces paramètres sont donnés au 2.1. La pression de liquide est définie par rapport à sa hauteur, Z, dans une colonne :

$$p_l = \rho_l \cdot g.Z. \tag{2-12}$$

La pression du gaz est définie comme la différence entre la pression de liquide et la pression capillaire (équation 2-4). La masse volumique du gaz peut être ensuite définie comme suit :

$$\rho_g = \frac{M_g P_g}{RT} \tag{2-13}$$

où M_a est la masse molaire du gaz (kg/mol), R(J/mol.K) est la constante universelle des gaz parfaits et T(K) est la température.

2.2.2.2 Le bilan d'énergie

Le bilan d'énergie que l'on propose repose sur la formulation du bilan d'entropie dans le cas d'un milieu poreux rigide et indéformable (Coussy, 1995) :

$$T\frac{\partial\widetilde{\eta}}{\partial t} + \sum_{P=l,g} g_P \frac{\partial m_P}{\partial t} = -\nabla (h_P \rho_P V_P) - \nabla (q + \widetilde{Q}), \qquad (2-14)$$

Où T est la température du milieu, $\tilde{\eta}$ est l'entropie de l'ensemble des phases du milieu, g_p est l'enthalpie libre, h_p est l'enthalpie massique, U_p est la vitesse de Darcy et m_p est la masse de la phase P. Le premier terme à droite signifie le transfert de chaleur par convection et le deuxième terme signifie le flux de chaleur par conduction, défini par la loi de Fourier:

 $q = \lambda \nabla T, \tag{2-15}$

dans laquelle λ est la conductivité thermique. Finalement le troisième terme à droite, \tilde{Q} signifie le terme source d'énergie. Dans notre modèle couplé, ce terme est défini comme la production de chaleur à partir de la production de biogaz dans les ISDND-bioactives (voir chapitre 3).

2.3 Méthodes numériques et validation sur des cas simplifiés

Nous présentons dans cette section les outils numériques nécessaires à la discrétisation et à la résolution numérique des équations de conservation de masse et d'énergie (Eymard, 2000; Benard et al., 2005) décrites dans la partie précédente.

2.3.1 La méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis est une méthode de discrétisation bien adaptée à la résolution numérique des équations de conservation de grandeurs extensives telles que (2-10) et (2-14). Cette méthode possède diverses propriétés telles que la conservation locale des flux, le respect du principe du maximum, la possibilité de l'appliquer à des maillages quelconques (maillages structurés ou non structurés) qui la rendent attractive. Un autre avantage de cette méthode est qu'elle conduit à des schémas numériques robustes. Cela explique pourquoi cette méthode est largement employée dans divers domaines : la mécanique des fluides, le transfert de chaleur et de masse, la simulation de réservoirs dans le génie pétrolier, etc.

La méthode des volumes finis repose sur une formulation intégrale du problème continu tandis que la méthode des éléments finis est basée sur la minimisation d'une énergie. Pourtant, la discrétisation d'une équation elliptique du deuxième ordre à l'aide de ces méthodes peut conduire à des problèmes discrets très proches et parfois identiques.

Supposons que l'on veuille résoudre le problème suivant, défini par une équation de conservation:

$$\begin{cases} \frac{\partial a(x,t)}{\partial t} + \nabla F(x,t) = f(x,t) \\ a(x,0) = a_0(x) \end{cases}$$
(2-16)

Où *a* a une valeur réelle dans un domaine Ω , F(x, t) est le flux de la grandeur *a* et f(x, t) un terme source. a_0 est la valeur de la grandeur *a* à t = 0. Soit Ω_d un maillage composé d'un nombre fini de points (les nœuds du maillage), autour desquels on définit des volumes élémentaires *K* (volumes de contrôle) contigus, non juxtaposés et sans discontinuité d'interface.

On note N_K le sous ensemble de Ω_d comprenant les voisins du volume K. Les nœuds du maillage sont les points où sont localisées les variables. La méthode consiste tout d'abord à intégrer les équations sur un volume élémentaire K (volume de contrôle)

$$\int_{k} \frac{\partial a(x,t)}{\partial t} dx + \int_{k} F(s,t) \vec{n}_{k} ds = \int_{k} f(x,t) dx$$
(2-17)

Où \vec{n}_k est le vecteur normal à ∂K dirigé vers l'extérieur et ds la mesure surfacique en dimension 3, linéique en dimension 2 et ponctuelle en dimension 1, puis à discrétiser sur chaque maille du domaine, l'équation (2-17) au temps $t_n = n\partial t$ (∂t est une constante d'intégration temporelle et $n \in N$).

$$\frac{1}{\partial t} \int_{k} \left(a^{n+1}(x) - a^{n}(x) \right) dx + \int_{\partial k} F^{n}(s, t_{n}) \vec{n}_{k} ds = \int_{k} f(x, t_{n}) dx$$
(2-18)

Notons que la dérivée partielle en temps a été approchée par un schéma d'Euler explicite afin d'obtenir une approximation de $a^n(x)$ solution de l'équation (2-16) au temps t_n . D'autres schémas de discrétisation temporelle (schémas d'ordre supérieurs ou schéma implicite) peuvent bien entendu être utilisés. Pour chaque frontière K/L séparant le volume de contrôle K du volume de contrôle voisin L, la deuxième intégrale de l'équation (2-18) peut s'écrire:

$$\int_{\partial K} F^{n}(s,t_{n})\vec{n}_{K}(s)ds = \sum_{L \in \mathbb{N}_{K}} \int_{K/L} F^{n}(s,t_{n})\vec{n}_{K,L}(s)ds$$
(2-19)

Où $\vec{n}_{K,L}(s)$ est le vecteur normal à l'interface K/L. En désignant par a_k^n et f_k^n les valeurs discrètes de a(x, t) et de f(x, t), dans le volume de contrôle K à l'instant $t = t_n$ et en notant que:

$$F_{K,L}^n \approx \int_{K/L} F^n(s,t_n) \vec{n}_{K,L}(s) ds$$
(2-20)

La discrétisation de l'équation (2-16) par la méthode des volumes finis conduit à:

$$\begin{cases} \frac{m(K)}{\partial t}(a_{k}^{n+1}-a_{k}^{n})+\sum_{L\in\mathbb{N}_{K}}F_{K,L}^{n}=m(K)f_{K}^{n}\\ a_{K}^{0}=\int_{k}a_{0}(x)dx \end{cases}$$
(2-21)

Où m(K) est une mesure du volume de contrôle K. Les deux aspects importants de cette méthode sont :

1. la conservation des flux, c'est à dire qu'on a $F_{K,L}^n = -F_{K,L}^n$ pour tout les volumes de contrôle K et $L \in \mathbb{N}_K$ et pour tout les $n \in N$.

2. la consistance de l'approximation du terme d'échange $\int_{K/L} F^n(s,t_n)n_{K,L}(s)ds$ à travers la frontière ∂K pour chaque volume de contrôle.

2.3.2 Enjeu du décentrage dans le schéma de volumes finis explicite

Nous voulons savoir ici quel choix de $a_{K/L}^n$ permettra d'avoir le principe du maximum sur a c'est à dire $A \le a_K^n \le B$ alors $A \le a_K^{n+1} \le B$. On obtient cette condition si on peut exprimer a_K^{n+1} comme une combinaison linéaire de la forme :

$$a_K^{n+1} = \sum_{L \in \mathcal{N}_K} \theta_L^n a_L^n \quad \text{avec} \quad \sum_{L \in \mathcal{N}_K} \theta_L^n = 1 \quad \text{et} \quad \theta_L^n \ge 0$$
(2-22)

Pour ça, nous étudions ici un cas sans diffusion, comme dans notre modèle. L'idée qui vient à l'esprit pour approcher le terme $a_{K/L}^n$ est:

$$a_{K/L}^{n} = \alpha_{K/L} a_{K}^{n} + (1 - \alpha_{K/L}) a_{L}^{n}$$
(2-23)

Avec $\alpha_{K/L} = 0.5$. C'est donc un schéma centré. Le problème s'écrit alors

$$\frac{m(K)}{\partial t}(a_k^{n+1} - a_k^n) + \sum_L \frac{1}{2}V_{K,L}(a_K^n + a_L^n) = 0$$
(2-24)

Pour étudier la stabilité de ce schéma, exprimons le terme a_K^{n+1} en fonction de a_K^n et a_L^n :

$$a_{K}^{n+1} = \left(1 - \frac{\partial t}{m(K)} \sum_{L} \frac{V_{K/L}}{2}\right) a_{k}^{n} - \frac{\partial t}{m(K)} \sum_{L} \frac{V_{K/L}}{2} a_{L}^{n}$$
(2-25)

D'après l'hypothèse $\nabla V(x,t) = 0$ qui implique $\sum_{L} V_{K/L} = 0$, on ne peut pas garantir la positivité des coefficients de la combinaison linéaire. On observe en pratique que le schéma centré est instable. Maintenant si on prend $\alpha_{K/L} = 1$ lorsque $V_{K/L} > 0$, alors le problème devient :

$$\frac{m(K)}{\partial t}(a_K^{n+1} - a_K^n) + \sum_{V, V_{K,L\geq 0}} \frac{1}{2}V_{K,L}a_K^n + \sum_{V, V_{K,L\leq 0}} \frac{1}{2}V_{K,L}a_L^n = 0$$
(2-26)

On peut donc écrire :

$$a_k^{n+1} = \left(1 - \frac{\partial t}{m(K)} \sum_{V, V_{K,L\geq 0}} V_{K,L}\right) a_k^n - \frac{\partial t}{m(K)} \sum_{V, V_{K,L\leq 0}} V_{K,L} a_L^n$$
(2-27)

On a donc écrit $a_k^{n+1} = \sum_{L \in \mathbb{N}_K} \theta_L^n a_L^n$ avec $\sum_{L \in \mathbb{N}_K} \theta_L^n = 1$ et la condition $\theta_L^n \ge 0$ est vérifié si $\partial t \le \frac{m(K)}{\sum_{L, V_{K,L} \ge 0} V_{K/L}}$.

Par conséquent le schéma décentré respecte le principe du maximum.

2.3.3 Ecoulement diphasique en milieu poreux

Les équations qui régissent les écoulements de deux phases incompressibles en milieu poreux sont de la forme suivante, comme nous l'avons déjà présenté dans l'équation (2-10):

$$\begin{cases} \frac{\partial n_o S_l}{\partial t} + \nabla [k_{rl} (-\nabla P_l - \rho_l g)] = 0\\ \frac{\partial n_o (1 - S_l)}{\partial t} + \nabla [k_{rg} (-\nabla P_g - \rho_g g)] = 0 \end{cases}$$
(2-28)

La discrétisation de cette équation par la méthode des volumes finis conduit à:

$$\begin{cases} n_o \frac{m(K)}{\partial t} (S_{l_k}^{n+1} - S_{l_k}^n) + \sum_{L \in \mathbf{N}_K} F_{lK,L} = 0\\ n_o \frac{m(K)}{\partial t} [(1 - S_l)_k^{n+1} - (1 - S_l)_k^n] + \sum_{L \in \mathbf{N}_K} F_{gK,L} = 0 \end{cases}$$
(2-29)

Dans lequel:

$$F_{lK,L} = -\frac{m(K/L)}{d(x_{K}, x_{L})} K_{l}(s_{lK,L}^{n+1}) \Big[P_{lL}^{n+1} - P_{lK}^{n+1} - \rho_{lK}^{n} g(Z_{K}^{n+1} - Z_{L}^{n+1}) \Big]$$

$$F_{gK,L} = -\frac{m(K/L)}{d(x_{K}, x_{L})} K_{g}(s_{gK,L}^{n+1}) \Big[P_{lL}^{n+1} + P_{C}^{n+1} - P_{lK}^{n+1} - P_{C}^{n+1} - \rho_{gK}^{n} g(Z_{K}^{n+1} - Z_{L}^{n+1}) \Big]$$
(2-30)

Dans l'évaluation des flux, le gradient de pression a été évalué à l'aide d'un schéma centré et la saturation est évaluée à l'aide d'un schéma décentré phase par phase :

$$S_{lK,L}^{n} = \begin{cases} S_{L}^{n+1} & \text{si} \quad \left[P_{lK}^{n+1} - P_{lL}^{n+1} + \rho_{lK}^{n} g(Z_{K}^{n+1} - Z_{L}^{n+1}) \right] > 0 \\ S_{K}^{n+1} & \text{sinon} \end{cases}$$

$$S_{gK,L}^{n} = \begin{cases} S_{gL}^{n+1} & \text{si} \quad \left[P_{lK}^{n+1} + P_{C}^{n+1} - P_{lL}^{n+1} - P_{C}^{n+1} - \rho_{gK}^{n} g(Z_{K}^{n+1} - Z_{L}^{n+1}) \right] > 0 \\ S_{gK}^{n+1} & \text{sinon} \end{cases}$$
(2-31)

Il faut noter ici que la méthode de décentrage phase par phase conduit au respect des différents principes du maximum. Cette méthode de décentrage s'avère simple à implémenter et très robuste.

2.3.4 La méthode de Newton

Nous avons vu que la discrétisation en temps et en espace des équations couplées aux dérivées partielles par un schéma de volumes finis conduit à la résolution d'un ensemble d'équations non linéaires de la forme :

$$E_{K,j} \left[\left(U_{L,j} \right)_{i=1...N, L \in \Omega_d} \right] = 0 \text{ pour } K \in \Omega_d, j = 1...N$$
(2-32)

Pour résoudre ce système, on utilise la méthode de Newton, une méthode itérative qui consiste à initialiser la valeur U_0 et à définir une suite de systèmes linéaires tangents :

$$J^{m}.(U^{m+1} - U^{m}) = -E^{m}(U^{m})$$
(2-33)

Dans lesquels U^m est le vecteur de l'ensemble des inconnus à l'itération m et où J^m désigne la matrice jacobienne définie par :

$$J_{K,i,L,j}^{m} = \frac{\partial E_{K,j}^{m+1}}{\partial U_{L,j}} (U^{m})$$
(2-34)

On est donc amené à résoudre un système linéaire dont la solution est donnée par $\Delta U^m = U^{m+1} - U^m$ à chaque itération de Newton. Pour chaque itération m, on calcule U^{m+1} en fonction de U^m grâce à la relation $U^{m+1} = U^m + \Delta U^m$. On passe ensuite à l'itération suivante jusqu'à ce que le critère de convergence soit satisfait (on peut démontrer que le taux de convergence de la méthode est quadratique). Remarquons que dans cette étude, le problème à résoudre est instationnaire.

Cela signifie que le schéma de Newton-Raphson doit être imbriqué dans la boucle de calcul d'intégration temporelle. A chaque pas de temps, on démarre les itérations de Newton avec les valeurs convergées au pas précédent. Comme les itérations du schéma de Newton sont bien imbriquées dans la boucle de calcul d'intégration temporelle, il est essentiel d'obtenir la convergence de la méthode de Newton pour que le schéma global fonctionne. Une telle exigence impose parfois des limites très strictes sur le pas de temps afin que le candidat initial de la méthode de Newton soit suffisamment proche de la solution. On peut montrer qu'il est inutile d'exiger une précision plus grande pour la convergence du schéma de Newton-Raphson, que celle du schéma d'intégration temporelle.

On peut aussi renforcer les propriétés de convergence en utilisant un paramètre de sousrelaxation $\omega_m (0 < \omega_m \le 1)$. On calcule $\Delta \tilde{U}^m$ par:

$$J^m \Delta \widetilde{U}^m = -E^m (U^m) \tag{2-35}$$

Si \widetilde{U}^m est trop grand, on pose:

$$\Delta U^{m} = \min\left(1, \frac{\omega_{m}}{\|\tilde{U}^{m}\|}\right) \Delta \tilde{U}^{m}$$
(2-36)

2.3.5 Validation du modèle diphasique sur une solution analytique

Nous allons valider le modèle d'écoulements diphasiques sur deux cas de colonnes unidimensionnelles horizontales et verticales, en utilisant les valeurs des paramètres que nous avons trouvés dans la littérature, pour lequel nous avons une solution analytique. Celle-ci est basée sur les équations de Buckley-Leverett (1942) et la méthode de Welge (1952). Nous étudions le cas d'un écoulement diphasique de gaz et d'eau dans un milieu poreux sous les hypothèses suivantes:

- l'écoulement est unidimensionnel,
- les liquides sont immiscibles et incompressibles,
- le milieu poreux est non déformable,
- l'écoulement des liquides est basé sur la loi de Darcy,
- la pression capillaire est négligée.

Nous allons d'abord présenter les formulations d'écoulement diphasique dans une colonne unidimensionnelle dans un cas général. Puis nous appliquerons ces formulations pour deux cas d'une colonne horizontale et d'une colonne verticale.



Figure (2-11) Schéma d'une colonne linéaire unidimensionnelle

On peut écrire les équations de conservation de la masse (2-10) sous la forme :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} (n_o S_l \rho_l) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k_{rl} k_{il}}{\mu_l} \rho_l (\frac{\partial P_l}{\partial x} + \rho_l g \sin \theta) \right) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (n_o (1 - S_l) \rho_g) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k_{rg} k_{ig}}{\mu_g} \rho_g (\frac{\partial P_g}{\partial x} + \rho_g g \sin \theta) \right) = 0. \end{cases}$$

$$(2-37)$$

En éliminant la masse volumique de chaque coté et en composant les deux formulations on obtient:

$$\frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\left[\left(\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l} \left(\frac{\partial P_l}{\partial x} + \rho_l g \sin \theta \right) \right) + \left(\frac{k_{rg}k_{ig}}{\mu_g} \left(\frac{\partial P_g}{\partial x} + \rho_g g \sin \theta \right) \right) \right]}_{\mathcal{Q}(S)} = 0.$$
(2-38)

La dérivée du terme Q(S) est égale à zéro, alors le terme Q(S) sera constant et égal au débit total de liquide et de gaz.

$$\left(\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l}\left(\frac{\partial P_l}{\partial x} + \rho_l g\sin\theta\right)\right) + \left(\frac{k_{rg}k_{ig}}{\mu_g}\left(\frac{\partial P_g}{\partial x} + \rho_g g\sin\theta\right)\right) = q_{total}$$
(2-39)

Comme la pression capillaire est négligée, on peut écrire:

$$\frac{\partial P_l}{\partial x} = \frac{\partial P_g}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial x}, \qquad (2-40)$$

et alors:

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{-\left(\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l}\rho_l g\sin\theta\right) - \left(\frac{k_{rg}k_{ig}}{\mu_g}\rho_g g\sin\theta\right) + q_{total}}{\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l} + \frac{k_{rg}k_{ig}}{\mu_g}}.$$
(2-41)

On peut écrire la forme générale suivante pour l'écoulement diphasique de liquide:

$$\frac{\partial}{\partial t}S - \frac{\partial}{\partial x}f(S) = 0, \qquad (2-42)$$

et alors on obtient la fonction f(S) comme suit:

$$f(S) = -\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l} \left(\frac{-\left(\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l}\rho_l g \sin\theta\right) - \left(\frac{k_{rg}k_{ig}}{\mu_g}\rho_g g \sin\theta\right) + q_{total}}{\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l} + \frac{k_{rg}k_{ig}}{\mu_g}} + \rho_l g \sin\theta} \right), \qquad (2-43)$$

qui devient:

$$f(S) = \left(\frac{\left(\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l}, \frac{k_{rg}k_{ig}}{\mu_g} \Delta \rho g \sin \theta\right) + q_{total} \frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l}}{\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l} + \frac{k_{rg}k_{ig}}{\mu_g}}\right) \times \frac{1}{n_o}, \qquad (2-44)$$

où $\Delta \rho = \rho_l - \rho_g$. Pour un écoulement horizontal ($\theta = 0$) on obtient:

$$f(S) = \left(\frac{\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l}}{\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l} + \frac{k_{rg}k_{ig}}{\mu_g}}\right) \times \frac{q_{total}}{n_o},$$
(2-45)

et pour un écoulement vertical ($\theta = 90^\circ$) on aura:

$$f(S) = \left(\frac{\left(\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l}, \frac{k_{rg}k_{ig}}{\mu_g} \Delta \rho g\right) + q_{total}}{\frac{k_{rl}k_{il}}{\mu_l} + \frac{k_{rg}k_{ig}}{\mu_g}}\right) \times \frac{1}{n_o}.$$
(2-46)

2.3.5.1 Equation de Buckley-Leverett

Buckley et Leverett (1942) ont présenté des équations de base pour expliquer les écoulements diphasiques unidimensionnels. Pour le déplacement de gaz par l'eau, l'équation détermine la vitesse de la surface d'eau avec une saturation constante, S_w qui se déplace dans un système linéaire. L'équation de Buckley-Leverett est présentée comme suit, en utilisant l'équation de conservation de la masse (équation 2-37) et de flux à travers un volume élémentaire de section A et longueur dx, *A.dx*, et pour un débit d'injection constant:

$$V_{S_w} = \frac{dx}{dt}\Big|_{S_w} = \frac{q_{total}}{A.n_o} \frac{df(S)}{dS_w}\Big|_{S_w}.$$
(2-47)

 V_{S_w} est la vitesse de la surface de liquide avec une saturation S_w . L'équation de Buckley-Leverett implique que pour un flux constant d'injection de liquide, cette vitesse est directement proportionnelle à la dérivée de l'écoulement diphasique qui est évalué pour cette saturation, comme on peut voir dans l'équation (2-47). En intégrant cette équation entre le temps initial $(t_0 = 0)$ qui est le temps de début de l'injection et chaque instant t, on peut trouver la distance atteinte par la surface à la saturation S_w .

$$x|S_{w} = \frac{1}{A.n_{o}} \frac{df(S)}{dS_{w}} \bigg|_{S_{w}} \int_{0}^{t} q_{total} dt$$
(2-48)

La valeur d'intégrale ci-dessus est le volume accumulé d'eau, W_i qui est égal à zéro quand t = 0, comme condition initiale.

$$x \left| S_w = \frac{W_i}{A.n_o} \frac{df(S)}{dS_w} \right|_{Sw}$$
(2-49)

Il y a des difficultés mathématiques pour appliquer cette méthode. Tandis qu'il y a un point d'inflexion dans la courbe de l'écoulement diphasique f(S), il y aura un point de maximum sur la courbe de sa dérivée avec la distance, ce qui veut dire qu'à chaque position, il existe deux

saturations différentes pour la surface d'eau au même instant, ce qui n'a pas de sens physique. Cela signifie que l'équation de Buckley-Leverett ne peut pas représenter la saturation de choc. Derrière le choc avec une saturation de S_{wf} , la saturation varie entre $S_r < S_w < S_{max}$, dont les définitions sont présentées au 2.1.1.

Les équations (2-47) et (2-48) peuvent être utilisées pour déterminer la vitesse et la position de la saturation d'eau. En outre, dans cette gamme de valeurs de la saturation, la pression capillaire est en général négligeable. On peut tracer la fonction f(S) avec les formulations de l'écoulement diphasique pour les modèles horizontal et incliné comme on les a trouvés dans les formulations (2-44) et (2-45).



Figure (2-12) a) Ecoulement diphasique, b) Dérivé de la fonction f_w , c) Compensation des secteurs pour déterminer l'avant d'un choc, d) Distribution de saturation en avant d'un choc

Pour tracer le profil de saturation avec la méthode de Buckley-Leverett, il faut trouver la ligne verticale sur la Figure (2-12c) de façon que les surfaces A et B soient égales. Cette ligne représente la discontinuité du choc.

2.3.5.2 Méthode de Welge

La méthode de Welge (1952) est une méthode graphique qui est beaucoup appliquée pour résoudre les problèmes d'écoulement diphasique dans les milieux poreux. Cette méthode consiste à distribuer la saturation sur une distance entre le point d'injection et la surface du choc ce qui donne une saturation moyenne avant la surface du choc \overline{S}_{wf} à chaque instant t. En utilisant cette méthode, on peut trouver le profil d'un écoulement 1D linéaire pendant l'injection avec un débit constant. Pour cela il faut suivre les étapes suivantes (Willhite, 1986):

- a) tracer la courbe d'écoulement diphasique f(S), équation (2-44) entre S_r et S_{\max} , en négligeant la pression capillaire.
- b) tracer sa tangente passant par $S_w = S_r$ et f(S) = 0 sur la courbe de f(S). Le point de tangence a les coordonnées de $(S_w = S_{wf}, f_w = f_w|_{S_{wf}})$ et l'extrapolation de cette ligne à f(S) = 1 donne la valeur moyenne de la saturation derrière la frontière pendant la traversée, \overline{S}_{wf} (Figure 2-13).



Figure (2-13) Schéma graphique de la méthode de Welge (1952)

Nous allons appliquer cette méthode pour résoudre les problèmes d'un écoulement diphasique dans une colonne horizontale avec un débit d'injection constant et une colonne verticale à moitié saturée, sans injection de liquide et nous comparerons les résultats avec ceux du modèle diphasique.

2.3.6 Comparaison des résultats numériques avec les solutions analytiques

2.3.6.1 Colonne horizontale

Nous considérons un milieu poreux unidimensionnel avec écoulement diphasique de gaz et de liquide. L'exemple le plus simple est de considérer un écoulement horizontal d'eau qui déplace le gaz. Les formulations de la perméabilité relative et les paramètres du milieu sont présentés par l'équation (2-6). Les paramètres de milieu sont présentés sur le tableau suivant:

Tableau 2-6 Paramètres de milieu diphasique 1D					
S_l	S_r	$S_{\rm max}$	т	μ_l (Pa.s)	$\mu_{g}(Pa.s)$
0,7	0,7	0,97	0,8718	1,0.10 ⁻⁰³	1 ,2 .10 ⁻⁰⁵

On trace la courbe d'écoulement diphasique f(S) pour un écoulement horizontal, entre la saturation résiduelle et maximum. On peut alors tracer les fonctions f(S), l'enveloppe concave $\hat{f}(S)$ et la dérivée de l'enveloppe concave $\hat{f}'(S)$.



Figure (2-14) a) Enveloppe concave de l'écoulement diphasique et b) Profil de la solution analytique

En traçant la tangente passant par $S_w = 0,7, f(S) = 0$ on trouve la valeur moyenne de la saturation derrière le frontière qui est égale à $S_{wf} = 0,955$ sur la courbe de Figure (2-14). Le point de f'(S = 0,955) est obtenu par la relation:

$$f'(S=0.955) = \frac{f(S=0.955) - f(S=0.7)}{(0.955 - 0.7)} = 3.63$$

Un paramètre important pour définir l'efficacité de l'écoulement, est le rapport de mobilité du point de frontière qui est sous la forme (Willhite, 1986):

$$M = \frac{k_{rl}' / \mu_l}{k_{rg}' / \mu_g}$$
(2-50)

Où $k'_{rl} = k_{rl}(S_w = S_{max})$ et $k'_{rg} = k_{rg}(S_w = S_r)$. Pour un écoulement horizontal stable il faut que $M \le 1$. Un autre paramètre pour définir la stabilité de l'écoulement de Buckley-Leverett est le rapport de mobilité de frontière de choc:

$$M_{S} = \frac{k_{rl}'(S_{wf})/\mu_{g} + k_{rl}'(S_{wf})/\mu_{w}}{k_{rg}'/\mu_{g}}$$
(2-51)

Hagoort (1974) a montré, par un argument empirique, que l'écoulement de Buckley-Leverett est stable quand $M_s < 1$. Les résultats des valeurs de M_s et M sont présentés ci-dessous:

Tableau 2-7 Résultats de l'étude de stabilité d'écoulement diphasique 1D

$S_{\scriptscriptstyle w\!f}$	$k'_{rl}(S_{wf})$	$k'_{rg}(S_{wf})$	M_{s}	M
0,955	605	7,26	0,0073	0,0082

Le déplacement de frontière de choc est obtenu à partir de l'équation (2-48) avec $S_{wf} = 0.955$.

Pour le modèle numérique nous utilisons un modèle 1D avec un longueur de 10m et une surface de $A=1 \text{ m}^2$, avec 500 mailles.



Figure (2-15) Schéma de colonne horizontale

Les conditions à la limite sont : débit imposé sur la gauche et condition de pression atmosphérique sur la droite pour permettre la sortie du liquide. La porosité du milieu est considérée égale à 0,2 et le débit d'injection est égal à 0,2 m^3/h . En utilisant la formulation de Buckley-Leverett, on peut trouver la vitesse de la frontière de choc qui se déplace avec une saturation de 0,955, en utilisant l'équation (2-47):

$$v_{Sw} = \frac{0.2}{1 \times 0.2} \times 3.63 = 3.63(m/h)$$

Alors à chaque pas de temps on obtient la position de la frontière dans le milieu en multipliant la vitesse par le pas de temps. Les résultats de la solution analytique et de la modélisation numérique sont montrés sur la Figure (2-16).



Figure (2-16) Résultats de simulation numérique et solution analytique

2.3.6.2 Colonne verticale

La colonne verticale de 10m est représentée dans la Figure (2-17). La colonne est saturée d'eau dans la moitié supérieure et la moitié inférieure contient 30% de gaz. La condition limite est la saturation de 0 et la pression atmosphérique appliquées en z = 10m (en haut).



Figure (2-17) Schéma de colon vertical avec gravité

La fonction f(S) pour une colonne verticale est tracée en utilisant l'équation (2-46). Les courbes de f(S), de l'enveloppe concave $\hat{f}(S)$ et de la dérivée de l'enveloppe concave $\hat{f}'(S)$ sont présentées sur la Figure (2-18).



Figure (2-18) a) Enveloppe concave de l'écoulement diphasique et b) Profil de la solution analytique

Déterminées par les enveloppes concaves, les valeurs de la saturation de choc obtenues sont $S_1^* \approx 0.9204$ et $S_2^* \approx 0.9060$, respectivement pour le premier et le deuxième choc. La vitesse de propagation des chocs est déterminée à partir de la relation Rankine-Hugoniot (Willhite, 1986):

$$f'(S_1^*) = \frac{[f(1)=0] - f(S_1^*)}{1 - S_1^*} \text{ et } f'(S_2^*) = \frac{f(S_2^*) - [f(0,7)=0]}{S_2^* - 0,7}$$

En appliquant la porosité dans la formulation ci-dessus, on obtient $f'(S_1^*) = -1, 4.10^{-3}$ et $f'(S_2^*) = 5, 64.10^{-4}$. Alors le profil de la solution analytique est tracé comme le présente la Figure 21b. Le déplacement des chocs est tracé pour les différents pas de temps, pour la solution analytique et la simulation numérique. La Figure (2-19) montre que les résultats de la simulation numérique sont parfaitement en accord avec la solution analytique.



Figure (2-19) Résultats de la simulation numérique et de la solution analytique pour une colonne verticale avec gravité

La comparaison du modèle hydrodynamique avec les solutions analytiques pour deux cas, avec et sans gravité, montre bien que notre modèle hydrodynamique est validé par la solution analytique. Dans les chapitres suivants nous allons introduire le modèle de dégradation et de production de biogaz qui est couplé avec ce modèle d'écoulement diphasique et nous appliquerons ensuite le modèle couplé au cas d'ISDND-bioactives.