

## ***ANNEXE A***

***TOUGH2-LGM : Manuel d'utilisation***

## A 1.0 Tables et Listes

### A 1.0.1 Table des matières

<b>A 1.0</b>	<b>TABLES ET LISTES .....</b>	<b>1</b>
A 1.0.1	TABLE DES MATIÈRES.....	1
A 1.0.2	LISTES DE FIGURES .....	2
A 1.0.3	LISTES DES TABLEAUX .....	2
<b>A 1.1</b>	<b>INTRODUCTION .....</b>	<b>3</b>
<b>A 1.2</b>	<b>PRINCIPAUX MODULES .....</b>	<b>4</b>
A 1.2.1	LGMT2M.F.....	4
A 1.2.2	LGMT2F.F.....	5
A 1.2.3	LGMEOS3.F.....	6
A 1.2.4	MESHM.F.....	7
A 1.2.5	MA28.F.....	7
<b>A 1.3</b>	<b>LISTE DES SOUS-PROGRAMMES.....</b>	<b>8</b>
<b>A 1.4</b>	<b>PRÉPARATION DU FICHIER D'ENTRÉE .....</b>	<b>11</b>
A 1.4.1	TITLE.....	11
A 1.4.2	ROCKS.....	11
A 1.4.2.1	<i>Fonctions de perméabilité relative et de pression capillaire.....</i>	<i>13</i>
A 1.4.3	PARAM .....	15
A 1.4.4	TIMES.....	18
A 1.4.5	ELEME.....	20
A 1.4.7	GENER.....	24
A 1.4.7.1	<i>Injection de masse.....</i>	<i>26</i>
A 1.4.7.2	<i>Source/puits de chaleur .....</i>	<i>27</i>
A 1.4.7.3	<i>Pompage d'un mélange multiphase.....</i>	<i>27</i>
A 1.4.8	INCON.....	30
A 1.4.9	FIN .....	35
<b>A 1.5</b>	<b>BIBLIOGRAPHIE .....</b>	<b>36</b>

### **A 1.0.2 Listes de figures**

Figure 1 : Tableau d'entrée de données .....	10
Figure 2 : Exemple de bloc TITLE .....	11
Figure 3 : Exemple de bloc ROCKS .....	14
Figure 4 : Exemple de bloc PARAM .....	15
Figure 5 : Exemple de bloc TIMES.....	18
Figure 6 : Exemple 1D de bloc ELEM.....	20
Figure 7 : Exemple 2D de bloc ELEM.....	20
Figure 8 : Exemple 1D de bloc CONNE .....	22
Figure 9 : Exemple 2D de bloc CONNE .....	22
Figure 10 : Exemple d'injection COM1 .....	26
Figure 11 : Exemple de bloc GENER .....	29
Figure 12 : Exemple de bloc INCON.....	33
Figure 13 : Exemple des blocs finaux .....	35

### **A 1.0.3 Listes des tableaux**

Table 1 : Paramètres d'entrée du bloc ROCKS .....	12
Table 2 : Paramètres d'entrée du bloc PARAM .....	16
Table 3 : Paramètres d'entrée du bloc TIMES.....	19
Table 4 : Paramètres d'entrée du bloc ELEM.....	21
Table 5 : Paramètres d'entrée du bloc CONNE .....	23
Table 6 : Paramètres d'entrée du bloc GENER .....	25
Table 7 : Constantes d'Henry .....	31
Table 8 : Paramètres d'entrée du bloc INCON.....	34

## A 1.1 INTRODUCTION

TOUGH2-LGM: *Landfill Gas Migration* est un modèle numérique de différence finie intégrale qui simule l'écoulement de liquide de gaz et le transport de chaleur dans les sites d'enfouissement et dans les formations géologiques adjacentes. Nous supposons que l'écoulement comporte quatre composantes : l'eau, l'air atmosphérique (azote seulement pour simplifier), le méthane et le dioxyde de carbone. L'eau du modèle provient de la teneur en eau initiale du mélange des déchets, des eaux d'infiltration et des eaux souterraines. L'air atmosphérique est présent dans les déchets au moment de la mise en place des déchets et dans les formations adjacentes. Le méthane, le dioxyde de carbone et la chaleur sont produits par la fermentation de la matière organique. Les quatre composés sont présents dans les deux phases. La cinquième et dernière variable est la chaleur.

Les propriétés de la phase gazeuse sont une combinaison des propriétés physiques de chaque composé présent. La loi d'Henry régit la dissolution des gaz dans la phase liquide, ainsi les composés gazeux sont également présents dans la phase liquide. L'effet des gaz dissouts sur les propriétés physiques du liquide étant marginal, les propriétés physiques du mélange ne sont pas ajustées.

La migration des fluides et de la chaleur du site d'enfouissement vers l'atmosphère et les formations adjacentes ainsi que l'infiltration des eaux météoriques, des eaux souterraines et l'air atmosphérique, se font par différents processus. L'advection et la diffusion dans les deux phases contribuent à l'écoulement des fluides. Le transport de chaleur se fait par conduction et par le transport de masse des autres phénomènes d'écoulement. Les propriétés des fluides sont modifiées par la température, ce qui contribue également à l'écoulement. Une variation de pression due à la différence de densité peut même entraîner la convection libre.

La quantité de variables et de phénomènes impose l'utilisation d'une solution numérique. Les chapitres suivants expliquent la construction du programme et de ses différents modules. Ensuite, le troisième chapitre liste les modules, les sous-programmes et comptabilisent les modifications de TOUGH2. Le dernier chapitre explique les paramètres requis par le modèle et la façon de disposer l'information dans le fichier d'entrée de données.

## **A 1.2      PRINCIPAUX MODULES**

TOUGH2-LGM (NASTEV 1998) est majoritairement basé sur la version TOUGH2 (PRUESS 1991) qui est elle-même une version du simulateur général MULKOM (PRUESS 1983). TOUGH2-LGM a été modifié de sa version UNIX originale pour fonctionner sur PC. La version PC a été compilée avec Compac Visual Fortran 6 sur un système d'exploitation Windows XP.

Malgré les nombreux exemples d'utilisation de TOUGH, TOUGH2-LGM n'a pas été exploité souvent. Voici la liste des publications qui traitent d'une modélisation TOUGH2-LGM : (NASTEV 1998; NASTEV, M., LEFEBVRE, R., THERRIEN, R., GELINAS, P. 2003; NASTEV, THERRIEN, LEFEBVRE et GELINAS 2001; VIGNEAULT 1999; BOUR, TAFFOUREAU et THERRIEN 2003)

Comme TOUGH2, TOUGH2-LGM est divisé en cinq modules : LGMT2M.F, LGMT2F.F, LGMEOS3.F, MESHM.F et MA28.F.

### **A 1.2.1      LGMT2M.F**

Ce module contient le programme principal. Toutes les matrices y sont dimensionnées. Cette version permet l'utilisation de 20 000 éléments (MNEL), 44 000 connexions (MNCON), 10 000 points d'injection/pompage (*sink/source*) (MNOGN) et 25 000 points d'injection/pompage qui dépendent du temps (MGTAB). Malheureusement, la nouvelle version PC ne permet pas de redimensionner facilement les matrices à partir du programme principal. Les regroupements de variables <<COMMON>> doivent être modifiés individuellement dans tous les modules et fonctions où ils se trouvent. De plus, il faut noter que les variables peuvent changer de nom d'un COMMON à un autre et seul l'ordre des variables est important. Le nombre d'éléments et de connexions prévue représente un temps de calcul de plusieurs heures. Il n'est pas recommandé d'excéder ce nombre d'élément avec les capacités de calcul des PC en 2006.

Ce module contrôle l'exécution des sous-programmes suivants :

- LGMT2F.F : lie le fichier d'entrée, complète avec les valeurs par défaut les paramètres non définis et prépare les données d'entrée finales
- RFILE.F : lie les données d'entrée finales des *Disk Files*
- INDATA.F : imprime les données d'entrée finales si MOP(7)>0
- CYCIT.F : exécute les sous-programmes associés au pas de temps

### **A 1.2.2 LGMT2F.F**

Ce module lie le fichier d'entrée, complète les éléments non définis par les paramètres par défaut et prépare les données d'entrée finales.

L'état thermodynamique du système d'écoulement est défini en supposant l'équilibre local entre les deux phases. Il est décrit par cinq variables principales : la pression, la saturation en gaz, la fraction massique de méthane dans la phase gazeuse, la fraction massique de dioxyde de carbone dans la phase gazeuse et la température. La fraction massique des composés gazeux exclut la vapeur d'eau dans les paramètres d'entrée.

Onze fonctions complètent les paramètres secondaires de l'état thermodynamique, tel la saturation en liquide, la pression capillaire, la fraction massique en air (1-%CH<sub>4</sub>-%CO<sub>2</sub>), la fraction massique en vapeur d'eau, la fraction massique des trois gaz dans le liquide ainsi que la perméabilité relative, la viscosité, la densité et l'enthalpie des deux phases.

### **A 1.2.3      LGMEOS3.F**

La plupart des calculs sont effectués dans ce module. Tout d'abord, les paramètres suivants sont définis :

- quantité de composé fluide  $NK=MNK=4$  (eau, air atmosphérique, méthane et dioxyde de carbone)
- Nombre d'équations  $MNEQ=NK+1=5$  (chaleur)

Chaque équation correspond à une des cinq variables principales. Tous les paramètres principaux de la dernière itération sont inscrits dans un très grand vecteur nommé et dimensionné  $X((MNK+1)*MNEL)$ . On s'y réfère en utilisant un autre vecteur NLOC qui associe à chaque élément la position de la première variable dans le vecteur  $X()$ .

$X(NLOC+1)$ : la pression, en pascal ;

$X(NLOC+2)$ : la fraction massique de gaz dans le liquide, si  $X_2 < 1$ , ce qui correspond à un écoulement saturé, ou la saturation en gaz, si  $X_2 > 10$ , ce qui correspond à un écoulement non saturé. Si  $X_2$  représente la saturation en gaz, le programme soustrait 10 de la donnée dans le fichier d'entrée,  $S_{\text{gas}} = X_2 - 10$ . Le préfixe 10 sert d'indicateur.

$X(NLOC+3)$ : La fraction massique de méthane dans la phase gazeuse, excluant la vapeur d'eau.

$X(NLOC+4)$  : La fraction massique de dioxyde de carbone dans la phase gazeuse, excluant la vapeur d'eau.

$X(NLOC+5)$ : La température en degré C;

- Nombre de phases  $NPH=MNPH=2$ , liquide et gaz ;
- Nombre de paramètres secondaires autres qu'une masse,  $NB=MNB=6$ .

Les paramètres thermodynamiques secondaires de tous les éléments de la dernière itération sont inscrits un à la suite de l'autre dans un très long vecteur nommé et dimensionné de la façon suivante :  $PAR((MNEQ+1)*(MNPH*(MNB+MNK)+2)*MNEL)$ . On s'y réfère en utilisant un autre vecteur NLOC2 qui associe à chaque élément la position de la première variable dans le vecteur  $PAR()$ .

$PAR(NLOC2+1)$  : saturation en gaz (du liquide, si saturé)  $[0,1]$ ;

$PAR(NLOC2+2)$  : perméabilité relative  $[0,1]$ ;

- PAR(NLOC2+3) : viscosité ( $\sim 0.15E-04$  Pa\*s pour la phase gazeuse);
- PAR(NLOC2+4) : densité ( $\sim 1.2$  kg/m<sup>3</sup> pour le gaz et  $\sim 1000$  kg/m<sup>3</sup> pour le liquide);
- PAR(NLOC2+5) : enthalpie ;
- PAR(NLOC2+6) : pression capillaire (0.0 si saturé);
- PAR(NLOC2+NB+1): fraction massique d'eau  $X_{H_2O}^{masse} = 1 - X_2$  ;
- PAR(NLOC2+NB+2): fraction massique d'air atmosphérique  

$$X_{N_2}^{masse} = X_2(1 - X_3 - X_4)$$
 ;
- PAR(NLOC2+NB+3): fraction massique de méthane  $X_{CH_4}^{masse} = X_2 X_3$  ;
- PAR(NLOC2+NB+4): fraction massique de dioxyde de carbone  $X_{CO_2}^{masse} = X_2 X_4$

La relation suivante définit la relation entre la fraction molaire et la fraction massique :

$$X_i^{masse} = \frac{X_i^{mol} M_i}{\sum X_i^{mol} M_i} \quad \text{et} \quad X_i^{mol} = \frac{\frac{X_i^{masse}}{M_i}}{\sum \frac{X_i^{masse}}{M_i}}$$

#### **A 1.2.4 MESH.M.F**

MeshMaker est un outil interne de génération de maillage. Il peut générer un maillage d'une à trois dimensions cartésiennes ou d'une à deux dimensions radiales. Ce module n'a pas été modifié, cependant il n'a pas été testé sur la dernière version compilée sur PC. En cas de problème, une autre version de TOUGH pourrait être utilisée pour générer le maillage. L'utilisation de ce module est expliquée à la page 46 de (PRUESS 1991)

#### **A 1.2.5 MA28.F**

Ce module résout le système d'équations linéaires. Il n'a pas été modifié dans aucune version de TOUGH2-LGM. Pour plus d'information, veuillez vous référer à (PRUESS 1987) et (PRUESS 1991)



### A 1.3 LISTE DES SOUS-PROGRAMMES

Pour les besoins de la conversion au système d'exploitation Windows, tous les sous-programmes et toutes les fonctions ont été légèrement modifiés. Les modifications mentionnées dans la liste suivante touchent directement la fonctionnalité du code. TOUGH2-LGM est basé sur TOUGH2 utilisant EOS3 (équation d'état). Les pages 133 et 134 de (NASTEV 1998) comporte également l'explication des sous-routines.

#### **LGMT2M.F**

**LGM.F** : dimensionne les matrices (modifié par NasteV)  
**IO.F** : ouvre les fichiers textes MESH, GENER, INCON, SAVE, MINC LINEQ et TABLE, appelés *Disk Files* (modifié par NasteV)  
**FLOP.F** : calcule le nombre de chiffres significatifs pour les variables réelles  
**SECOND.F** : chronomètre le temps de calcul du CPU (ne fonctionne plus)

#### **LGMT2F.F**

**INPUT.F** : pré-processeur de lecture et d'écriture de données (modifié par NasteV)  
**RFILE.F** : lie les données d'entrée finales des *Disk Files* (modifié par NasteV)  
**INDATA.F** : imprime la plupart des données d'entrée si MOP(7)>0 (modifié par NasteV)  
**CYCIT.F** : exécute les sous-programmes associés au pas de temps (modifié par NasteV)  
**MULTI.F** : calcule les flux (modifié par NasteV)  
**QU.F** : calcule tous les termes provenant des points d'injection/pompage (modifié par NasteV)  
  
**LINEQ.F** : appelle la résolution du système linéaire  
**CONVER.F** : met à jour les variables primaires après chaque pas de temps convergent  
**WRIFL.F** : génère le fichier SAVE lorsque le programme est terminé  
**FINDER.F** : adressage des valeurs dans les vecteurs  
**FINDL.F** : adressage des valeurs dans les vecteurs  
**QINTER.F** : interpolation linéaire des points d'injection/pompage en fonction du temps  
**HINTER.F** : interpolation linéaire des enthalpies  
**THYME.F** : chronométrage du temps de calcul du CPU  
**TSTEP.F** : ajustement des pas de temps pour coïncider avec des temps explicitement demandés dans les données d'entrée (modifié par NasteV)  
**MC19A.F** : algorithme de Harwell pour la mise à l'échelle des matrices  
**REL.P.F** : calcule les perméabilités relatives des deux phases  
**PCAP.F** : calcule la pression capillaire en fonction de la saturation et la température

<b>SAT.F</b>	: calcule la pression partielle de vapeur d'eau en fonction de la température	
<b>TSAT.F</b>	: fonction inverse de SAT.F	
<b>COWAT.F</b>	: calcule la densité et l'énergie interne de l'eau liquide en fonction de la pression et de la température	
<b>SUPST.F</b>	: calcule la densité et l'énergie interne de la vapeur d'eau en fonction de la pression et de la température	
<b>SIGMA.F</b>	: calcule la tension de surface de l'eau en fonction de la température	
<b>VIS.F</b>	: calcule la viscosité de l'eau et de la vapeur d'eau en fonction de la température et de la pression	
<b>VISW.F</b>	: calcule la viscosité de l'eau liquide en fonction de la température et de la pression	
<b>VISS.F</b>	: calcule la viscosité de la vapeur d'eau en fonction de la température et de la pression	
<b>THERC.F</b>	: calcule la conductivité thermique de l'eau liquide et de la vapeur d'eau en fonction de la température et de la pression	
<b>CCHPR.F</b>	: calcule la production de CH <sub>4</sub> , de CO <sub>2</sub> et de chaleur par les déchets en décomposition, en fonction de leurs âges	(créé par Nastev)
<b>HENRY.F</b>	: calcule la fraction massique de CO <sub>2</sub> dans l'eau	(copié de EOS2 par Nastev)
<b>SOLUT.F</b>	: calcule l'enthalpie de dissolution du CO <sub>2</sub>	(copié de EOS2 par Nastev)
<b>CO2.F</b>	: calcule l'enthalpie et la densité du CO <sub>2</sub> gazeux	(copié de EOS2 par Nastev)
<b>DIFF.F</b>	: calcule les coefficients de diffusion du mélange de gaz	(créé par Nastev)
<b>HENRYC.F</b>	: calcule les constantes d'Henry en fonction de la température	
		(nouvelle compilation par Nastev)

### **LGMEOS3.F**

<b>EOS.F</b>	: calcule les variables thermodynamiques	(modifié par Nastev)
<b>PP.F</b>	: calcule la pression partielle, la densité et l'énergie interne du gaz	
<b>VISCO.F</b>	: calcule la viscosité de la phase gazeuse	(désactivé par Nastev)
<b>VISCOSITY.F</b>	: calcule la viscosité de la phase gazeuse	(créé par Nastev)
<b>COVIS.F</b>	: première estimation de la viscosité de la phase gazeuse	(créé par Nastev)
<b>OUT.F</b>	: impression dans le fichier de sortie	(modifié par Nastev)
<b>SHEAT.F</b>	: calcule la capacité thermique	(créé par Nastev)
<b>PLOT.F</b>	: enregistre des données graphiques	(effacé par Franzidis)
<b>LGMBAL.F</b>	: calcule le bilan de masse à chaque itération convergente	(créé par Nastev)
<b>BALLAN.F</b>	: imprime le bilan de masse aux temps explicitement demandés dans les données d'entrée	(créé par Nastev)
<b>BALLA.F</b>	: calcul du bilan de masse	(désactivé par Nastev)

1		2		3		4		5		6		7		8	
TITLE:															
BLOCKS:															
RAT		NAD		DROK		POR		PER(1)		PER(2)		PER(3)		CUET	
COM		EXPAH		CDRV		TORTX		GX							
IAP		AP(1)		AP(2)		AP(3)		AP(4)		AP(5)		AP(6)		AP(7)	
ICP		CP(1)		CP(2)		CP(3)		CP(4)		CP(5)		CP(6)		CP(7)	
PARAM:															
TEI		MCVC		NSEC		MCVPA		MOP(1), 1=1,24		DIFFO		YEXP		BE	
KQATR															
TSTART		TIMAX		DELTER OF -MDIT		DELTHX		ELST		GF		REDLT		SCALE	
RE1		RE2		U		WUP		WHR		DFAC					
DEP(1)		DEP(2)		DEP(3)		DEP(4)		DEP(5)							
(optional)															
TIMES:															
ITI		ITE		DELA		TINTER									
YIS(1)		YIS(2)		YIS(3)						YIS(11)					
ELEMENTS:															
EL		NE		MSEQ		MADD		MA1		MA2		UOLX		TDEP	
												X		Y	
														Z	
COMME:															
EL1		NE1		EL2		NE2		MSEQ		MAD1		MAD2		ISOT	
ITAB															
EL		NE		SL		NS		MSEQ		MADD		MADS		LTAB	
														TYPE	
														GX	
														EX	
														HG	
F1(1)		F1(2)												F1(LTAB)	
F2(1)		F2(2)												F2(LTAB)	
F3(1)		F3(2)												F3(LTAB)	
IMCOM:															
EL		NE		MSEQ		MADD		PORX							
(optional)															
SITRAIT:															
EMDCY:															

Figure 1 : Tableau d'entrée de données

## A 1.4 PRÉPARATION DU FICHIER D'ENTRÉE

Les données d'entrée sont regroupées en blocs. Chaque bloc regroupe plusieurs lignes de 80 caractères. Le début d'un bloc est identifié par un titre en majuscules de 5 caractères et la fin du bloc est identifiée par une ligne vide. Le premier bloc, TITLE, contient le titre et le dernier, ENDCY, exécute le programme. Ce type de formulation est un vestige de l'entrée de données par fiches. La position des caractères sur la ligne doit être exactement celle décrite et les nombres réels doivent obligatoirement contenir un point. La figure 1 de la page précédente montre les positions. L'ordre des blocs est arbitraire sauf pour le bloc CONNEC qui doit être entré immédiatement après ELEME. Il est fortement suggéré de se baser sur un fichier d'entrée existant et fonctionnel. La figure 1 montre le format du fichier d'entrée de données.

Toutes les unités sont du SI, c'est-à-dire que les unités sont mètre, seconde, pascal, newton, kilogramme, watt, degré Celsius et joule. Les éléments en gras dans la colonne des suggestions sont des valeurs très fortement suggérées, voire obligatoires.

### A 1.4.1 **TITLE**

C'est un bloc d'une ligne qui contient un texte identifiant le modèle. Par exemple :

*Site C.E.S.M.: 40 waste & 30 sand columns in 16 layers. Bottom saturated, atm. from top side*

Figure 2 : Exemple de bloc TITLE

### A 1.4.2 **Rocks**

Ce bloc permet d'introduire les paramètres du milieu poreux. Le programme accepte jusqu'à 27 différents matériaux pour une simulation. La description, le format, le symbole, l'unité et des suggestions sont compilés au tableau 1 de la page suivante.

Table 1 : Paramètres d'entrée du bloc ROCKS

Ligne 1	Descriptions: propriétés physiques des milieux	format	symbole	unité	suggestions
MAT	Nom du matériel	5, char	-	-	ABC12
NAD	Deux lignes additionnelles pour les fonctions capillaires et de perméabilité	5, entier	-	-	<b>2</b>
DROK	Densité	10, réel	$\rho$	Kg/m <sup>3</sup>	2650.0
POR	Porosité par défaut pour les éléments non spécifiés dans INCON	10, réel	n	[adim]	0.2654
PER(ISOT=1 à 3)	Perméabilités intrinsèques dans les trois directions	3 x 10, réel	$K_x, K_y, K_z$	m <sup>2</sup>	1.0E-14
CWET	Conductivité thermique en conditions saturées	10, réel	$\lambda_{sat}$	W/m°C	1.79
SPHT	Capacité thermique spécifique	10, réel	$C_s$	J/Kg°C	900.0
Ligne 2	Descriptions: propriétés physiques des milieux	format	symbole	unité	suggestions
COM	Compressibilité du solide	10, réel	$\beta$	m <sup>2</sup> /N	0.0
EXPAN	Expansivité thermique	10, réel	$\alpha$	1/°C	0.0
CDRY	Conductivité thermique en conditions sèches	10, réel	$\lambda_{sec}$	W/m°C	0.6749
TORTX	Ancien paramètre de tortuosité, elle est maintenant calculé selon DIFF0	10, réel	-	-	1.0
	Si TORTX>0, diffusion activée. Si TORTX=0, diffusion désactivée.				
GK	Paramètre de l'effet de Klinkenberg	10, réel	b	Pa	0.0
Ligne 3	Descriptions: fonction de perméabilité relative	format	symbole	unité	suggestions
IRP	Identification de la fonction de perméabilité relative, de 1 à 9	5, entier	-	-	3
	Vide	5, espace	-	-	-
RP(I=1 à 7)	Paramètres de la fonction de perméabilité	(1 à 7) x 10, réel	-	-	-
Ligne 4	Descriptions: fonction capillaire	format	symbole	unité	suggestions
ICP	Identification de la fonction de capillarité, de 1 à 9	5, entier	-	-	7
	Vide	5, espace	-	-	-
CP(I=1 à 7)	Paramètres de la fonction de capillarité	(1 à 7) x 10, réel	-	-	-

#### A.1.4.2.1 Fonctions de perméabilité relative et de pression capillaire

Les fonctions de perméabilité et les fonctions capillaires décrites ci-dessous sont suggérées pour leurs représentativités du milieu poreux. Pour des besoins de simplification du modèle, plusieurs fonctions sont énumérées à l'Appendice A et B de (PRUESS 1987). Il faut toutefois noter qu'il y a une erreur dans la formulation de  $IRP=7$ , (VAN GENUCHTEN 1980). Elle a été remplacé par  $IRP=9$  (LEFEBVRE 1994). Les mêmes paramètres sont utilisés.

#### Fonctions de perméabilité relative (IRP)

##### IRP=3 : (COREY 1954)

$RP(1) = S_{wr}$  = saturation résiduelle en eau [adim]

$RP(2) = S_{gr}$  = saturation résiduelle en gaz (normalement 0) [adim]

$S_{we} = (S_w - S_{wr}) / (1 - S_{gr} - S_{wr})$  = saturation effective en eau [adim]

$K_{rl} = (S_{we})^4$  = perméabilité relative au liquide [adim]

$K_{rg} = (1 - S_{we})^2 (1 - S_{we})^2$  = perméabilité relative au gaz [adim]

Cette fonction de perméabilité relative donne un résultat très semblable à (VAN GENUCHTEN 1980), surtout pour les sables. Une différence de seulement 5% est observée pour un silt moyen. Cette fonction est beaucoup plus simple que celle de Van Genuchten, donc requiert un maillage moins raffiné. Ceci peut éviter des problèmes de convergence lorsque la saturation est presque complète.

#### Fonctions de pression capillaire (IPC)

##### ICP=7 : (VAN GENUCHTEN 1980)

$CP(1) = m$  = paramètre m de Van Genuchten [adim]

$CP(2) = S_{wr}$  = saturation résiduelle en eau [adim]

$CP(3) = \alpha$  = paramètre m de Van Genuchten [ $Pa^{-1}$ ]

$CP(4) = PC_m$  = Pression capillaire maximale [Pa]

$CP(5) = S_{mw}$  = saturation maximale en eau [adim]

$S_{we} = (S_w - S_{wr}) / (S_{mw} - S_{wr})$  = saturation effective en eau [adim]

Si  $S_w \geq S_{mw}$ ,  $P_c = 0$

Si  $(1/\alpha)(S_{we}^{-1/m} - 1)^{1-m} \geq PC_m$ ,  $P_c = PC_m$

Sinon  $P_c = (1/\alpha)(S_{we}^{-1/m} - 1)^{1-m}$

ROCKS	1	2	3	4	5	6	7	8	9
WASTE	2	815.	.50	0.7E-11	0.35E-11	0.E-00	0.200	1900.	
	0.	0.	0.045	0.7	0.0				
	9	0.29	0.20	1.0					
	7	0.29	0.20	4.56E-05	1.E9	1.0			
CALCA	2	2246.0	0.20	6.E-16	6.0E-16	1.E-16	3.6	840.0	
	0.	0.	1.6	0.7	0.0				
	9	0.23	0.14	1.0					
	7	0.23	0.14	1.33E-04	1.E9	1.0			
SANDL	2	1700.0	0.44	1.1E-13	1.3E-13	1.E-10	1.3	1500.8	
	0.	0.	0.44	0.7	0.0				
	9	0.57	0.10	1.0					
	7	0.57	0.10	1.33E-04	1.E9	1.0			
DEPOT	2	750.0	0.40	1.1E-13	1.3E-13	1.E-10	0.200	1500.8	
	0.	0.	0.045	0.7	0.0				
	9	0.43	0.014	1.0					
	7	0.43	0.014	0.005	100.	1.0			

**Figure 3 : Exemple de bloc ROCKS**

### A 1.4.3 Param

Le bloc PARAM introduit les paramètres de calcul, le contrôle des pas de temps et les conditions initiales par défaut pour les éléments qui ne sont pas décrits dans le modèle INCON. Plusieurs paramètres n'ont plus de fonctions dans TOUGH2-LGM mais ne doivent absolument pas être modifiés.

Il est conseillé de débiter avec un pas de temps très faible, car le contact entre les conditions par défaut et les conditions imposées est brutal et crée une instabilité. Le pas de temps augmente de façon exponentielle une fois que les premières itérations convergentes sont réalisées. S'il augmente trop rapidement et que la convergence n'est pas atteinte après huit itérations, le pas de temps est automatiquement divisé par REDLT. Si toutefois l'instabilité persiste et cause l'arrêt des calculs, il est possible de bloquer le pas de temps au niveau maximum DELTMX. Il faut toutefois utiliser cet outil avec précaution car si le pas de temps maximum est trop bas, le régime permanent peut être atteint artificiellement.

La lecture sur les lignes a été étendue à 100 caractères pour pouvoir inscrire le paramètre DEP(5). Tous les paramètres sont décrits au tableau 2. La figure 4 donne un exemple de l'entrée de données du bloc PARAM.

```
PARAM-----1-----*-123456789012345678901234-----*-----5-----*-----6-----*-----7-----*-----8
8 39999 09999000020100001000271000084
      0.946728000.      600.      0.      9.81      1.4
      1.E-5      1.      0.1      1.0      1.0      1.E-08      1.0
      100000.      10.58      0.0      0.0      5.0
12345678901234512345678901234512345678901234512345678901234512345678912345
```

**Figure 4 : Exemple de bloc PARAM**



Table 2 : Paramètres d'entrée du bloc PARAM

Ligne 1	Descriptions: options d'affichage et de calcul	format	suggestions
NOITE	Le nombre d'itérations par pas de temps	2, entier	<b>8</b>
KDATA	Si KDATA=1, Imprime les sélections de variables les plus importantes	2, entier	<b>3</b>
	Si KDATA=2, ajoute l'impression des flux et des vitesses de masse et de chaleurs		
	Si KDATA=3, ajoute l'impression des variables et leurs variations		
MCYC	Le nombre de pas de temps maximal	4, entier	<b>9999</b>
	note: Si le modèle ne converge pas en 9999 itérations on utilise SAVE dans INCON		
	et on recommence avec un nouveau TSTRAT = temps de l'itération 9999		
MSEC	Temps de calcul maximum en secondes ( $0 = \infty$ )	4, entier	<b>0</b>
MCYPR	Impression après chaque pas de temps multiple de MCYPR	4, entier	<b>9999</b>
MOP(1=1 à 24)	Paramètre de calcul	24, entier	-
MOP(1)	Impression des itérations non convergentes si $MOP(1) \neq 0$	1, entier	<b>0</b>
MOP(2 à 6)	Si $MOP(2 \text{ à } 6) \neq 0$ , impression courte dans les sous-programmes CYCIT, MULTI, QU,	5, entier	<b>0</b>
	EOS et LINEQ, respectivement pour déceler des problèmes dans le code		
MOP(7)	Si $MOP(7) \neq 0$ , impression des données d'entrée	1, entier	<b>1</b>
MOP(8)	N'existe pas	1, entier	<b>0</b>
MOP(9)	Fonction désactivée dans TOUGH2-LGM, Fonction de composition pour l'option MASS	1, entier	<b>0</b>
	dans les injections/pompages . MASS=WATE=COM1 dans TOUGH2-LGM		
MOP(10)	Fonction d'interpolation de la conductivité thermique en fonctions de la saturation	1, entier	<b>0</b>
	Si $MOP(10) = 0$ , $CDRY + (CWET-CDRY) Sw^{-1/2}$ , Pruess (1991)		
	Si $MOP(10) = 1$ , $CDRY + (CWET-CDRY)Sw$ , linéaire		
MOP(11)	Fonction désactivée dans TOUGH2-LGM, paramètre de mobilité de l'option MASS	1, entier	<b>0</b>
MOP(12)	Méthode d'interpolation pour les taux variables d'injection/pompage dans le temps	1, entier	<b>1</b>
	Si $MOP(12)=0$ , interpolation linéaire et si $MOP(12)=1$ , fonction à palier		
MOP(13)	N'existe pas	1, entier	<b>0</b>
MOP(14)	Si $MOP(14)=0$ , décomposition matricielle dans le cas d'une défaillance de pivot due à une	1, entier	<b>0</b>
	matrice mal conditionnée. Si les décompositions sont trop fréquentes, réduire plutôt le critère		
	de stabilité numérique U. Ce problème survient normalement lorsque des éléments seaturent ou se désaturent complètement.		
MOP(15)	N'existe pas	1, entier	<b>0</b>
MOP(16)	Si le nombre d'itérations $ITER \leq MOP(16)$ , pas de temps automatiquement multiplié par 1.3,	1, entier	<b>2</b>
	Si $ITER > 8$ , le pas de temps sera divisé par REDLT, $dt=dt/1.4$ ,		
MOP(17)	Si $MOP(16)=7$ , le facteur d'échelle $SCALE=1$ ( non-testé dans TOUGH2-LGM).	1, entier	<b>7</b>
MOP(18)	$MOP(18) = 1$ garde inactive une fonction qui n'existe plus dans TOUGH2-LGM	1, entier	<b>1</b>
MOP(19 à 22)	N'existe pas	4, entier	<b>0</b>

Table 2 : Paramètres d'entrée du bloc PARAM

MOP(23)	Si MOP(23) $\geq 8$ , un bilan de masse est calculé et Si MOP(23) = 9, impression des flux	1, entier	<b>9</b>
MOP(24)	Si MOP(24) = 4, fonction de production de biogaz dans les déchets activés.	1, entier	0
	Si MOP(24) = 0, fonction inactive.		
DIFF0	Ancien paramètre de diffusion gazeuse libre.	10, réel	-1.0
	Si DIFF0<0, la tortuosité est calculé selon Millington et Quirk (1961), $\tau = ((n \text{ Sg})^{10/3})/n^2$		
	Si DIFF0>0, la tortuosité est calculé selon Lai (1976), $\tau = (n \text{ Sg})^{5/3}$		
TEXP	Paramètre d'ajustement des coefficients de diffusions des gaz en fonction de la température.	10,réel	<b>1.8</b>
BE	Paramètre d'ajustement des coefficients de diffusions des gaz pour la condensation/dissolution	10,réel	<b>0.0</b>
<b>Ligne 2</b>	<b>Descriptions: paramètre de pas de temps</b>	<b>format</b>	<b>suggestions</b>
TSTART	Temps du début de la simulation en secondes	10, réel	0.0
TIMAX	Temps final de la simulation en secondes	10,réel	100000.0
DELTEN	Durée du pas de temps initial en secondes	10,réel	1.0
DELTMX	Durée maximale du pas de temps en secondes (0 = $\infty$ )	10, réel	0.0
ELST	Nom de l'élément pour qui une impression des variables principales est demandée après chaque itération convergente. Attention, les noms d'éléments sont sensibles aux majuscules!	3, char et 2, entier	ABC12
	Vide		
GF	Accélération de gravité en $\text{m/s}^2$ , la direction de G est définie dans ELEME	10,réel	<b>9.81</b>
REDLT	Facteur de réduction du pas de temps après 8 itérations sans succès	10,réel	1.4
	L'augmentation est fixée à 1.3 selon le critère MOP(16)		
SCALE	Facteur d'échelle pour le dimensionnement du maillage. Non testé dans TOUGH2-LGM.	10, réel	<b>1.0</b>
<b>Ligne 3</b>	<b>Descriptions: paramètre de résolution</b>	<b>format</b>	<b>suggestions</b>
RE1	Critère de convergence de l'erreur relative	10, réel	<b>1.0E-5</b>
RE2	Critère de convergence de l'erreur absolue	10, réel	<b>1.0</b>
U	Critère de conditionnement de la matrice pour les pivots. Ne pas changer, voir MOP(14)	10, réel	<b>0.1</b>
WUP	Paramètre d'une fonction inactive dans TOUGH2-LGM	10, réel	<b>1.0</b>
WNR	Facteur pour résolution itérative de Newton/Raphson, [0,1]	10, réel	<b>1.0</b>
DFAC	Facteur itératif pour les dérivés numériques, (0=1.0E-8)	10, réel	<b>1.0E-8</b>
<b>Ligne 4</b>	<b>Descriptions: paramètres principaux par défaut si l'élément est non spécifié dans INCON</b>	<b>format</b>	<b>suggestions</b>
DEP(1)	Pression en pascal par défaut	20, réel	100000.0
DEP(2)	Saturation en gaz par défaut, voir explication dans LGMEOS, X(NLOC+2):	20, réel	10.58
DEP(3)	Fraction massique de méthane par défaut	20, réel	0.2666666
DEP(4)	Fraction massique de dioxyde de carbone par défaut	20, réel	0.7333333
DEP(5)	Température en degré C par défaut	20, réel	8.0

**A 1.4.4      Times**

Ce bloc définit les temps choisis pour l’impression d’un tableau de tous les paramètres de tous les éléments, ainsi que le flux de toutes les connexions. Ce bloc est optionnel. Il n’est utile que pour décrire un régime transitoire et ne devrait pas être utilisé avant d’avoir tenté un régime permanent.

Tous les paramètres sont décrits au tableau 3. La figure 5 donne un exemple de l’entrée de données du bloc TIMES.

```
TIMES-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7-----*-----8-----*-----9
      4      4
31557600.157788000.473040000.946728000.
```

**Figure 5 : Exemple de bloc TIMES**

Table 3 : Paramètres d'entrée du bloc TIMES

<b>Ligne 1</b>	<b>Descriptions: Définit les temps auxquels une impression sera effectuée</b>	<b>format</b>	<b>suggestions</b>
ITI	Nombre de temps inscrits dans le bloc	5, entier	$ITI \leq 100$
ITE	Nombre de temps pour lesquels une impression sera effectuée (par défaut=ITI)	5, entier	$ITI \leq ITE \leq 100$
<b>Ligne 2 à 14</b>	<b>Descriptions: Définit les temps auxquels une impression sera effectuée</b>	<b>format</b>	<b>suggestions</b>
TIS(I=1,ITI)	Temps, en secondes, auxquels une impression est demandée	ITI x 10, entier	-

### A 1.4.5 Eleme

Ce bloc permet d'introduire les informations concernant les éléments du modèle. Les éléments sont définis par leur volume, leur matériau, par les coordonnées X, Y et Z de leur centre de gravité et par le temps de leur déposition dans le site. Inscrire leurs positions est optionnel car ces données ne sont utilisées dans aucun calcul. Cependant, elles peuvent servir pour exploiter les données dans un autre logiciel ou simplement comme point de repère. Les temps de déposition ne s'appliquent que si la fonction de génération est activée avec un MOP(24) = 4. Tous les paramètres sont décrits dans le tableau de la page suivante. La lecture sur les lignes a été étendue à 90 caractères pour pouvoir inscrire l'âge des déchets.

Les éléments inactifs, utilisés comme condition limite, doivent obligatoirement avoir un volume nul, contrairement aux autres versions de TOUGH où il suffit de placer la liste des éléments inactifs à la suite d'un seul élément nul. Par précaution, il est conseillé de placer tous les éléments inactifs à la fin de la liste.

Une grille régulière peut facilement être construite en utilisant les paramètres NSEQ et NAD. Ces entiers sont utilisés pour créer plusieurs éléments de volumes identiques. NSEQ est le nombre d'éléments identiques et NAD est l'intervalle entre chaque NE dans le nom, EL-NE. Par exemple, tous les éléments du modèle linéaire, ELE01 à ELE99, peuvent être créés par une seule ligne.

```
ELEME---1---*---2---*---Vol---*---4---*---5---*---'X'---*---'Y'---*---'Z'---*---Tdep
ELE1   98   1WASTE   1.0
```

Figure 6 : Exemple 1D de bloc ELEM

La figure 7 montre un exemple de coupe en deux dimensions, 45 x 5, avec génération de biogaz

```
ELEME---1---*---2---*---Vol---*---4---*---5---*---'X'---*---'Y'---*---'Z'---*---Tdep
01Z01  44   1DMSLT   1.0                                -1.0
02Z01  44   1DMSLT   1.0                                -1.0
03Z01  44   1DMSLT   1.0                                 0.1
04Z01  44   1DMSLT   1.0                                 0.6
05Z01  44   1DMSLT   1.0                                 1.1
ATM01  44   1DMSLT   0.0                                -10.0
```

Figure 7 : Exemple 2D de bloc ELEM

Table 4 : Paramètres d'entrée du bloc ELEM

Ligne 1 à ...	Descriptions: géométrie des éléments	format	suggestions
EL, NE	Nom de l'élément	3, char et 2, entier	ABC01
NSEQ	Nombre d'éléments additionnels avec les mêmes paramètres	5, entier	98
MA1, MA2	Nom du matériau tel que décrit dans le bloc ROCKS	5, char	SABLE
NADD	Incrément entre deux éléments successifs	5, entier	1
VOLX	Volume (de l' ou des) élément(s) en m <sup>3</sup>	10, réel	1.0
	Vide	20, espace	
X, Y et Z	Coordonnées de l'élément	3 x 10, réel	-
TDEP	Temps de déposition (l'âge) d'élément (pour les déchets) avant le début de la simulation	10, réel	-10.0
	Si TDEP= -10.0, pas de production des biogaz, valide pour les éléments inactifs		
	Si TDEP= - 1.0, production uniquement de CO <sub>2</sub> =1.8 m <sup>3</sup> /t/y (3.533 kg/t/y)		
	valide pour les couches supérieures en contact avec l'atmosphère (dégradation aérobie)		
	Si TDEP> 0.0, la production des biogaz est de 55%-CH <sub>4</sub> et 45%-CO <sub>2</sub> par volume.		
	Si TDEP=0.0, la production des biogaz est constante		
	55%-CH <sub>4</sub> =2.2 m <sup>3</sup> /t/y (1.575 kg/t/y) et 45%-CO <sub>2</sub> =1.8 m <sup>3</sup> /t/y (3.533 kg/t/y)		

### A 1.4.6 Conne

Ce bloc permet d'introduire les informations concernant les connexions entre les éléments du modèle. Les paramètres sont expliqués dans le tableau 5. Il est également possible de répéter les connexions qui ont des propriétés identiques de la même façon. Les figures 8 et 9 montrent les connexions pour les mêmes exemples linéaires et en coupe.

```
CONNE----1--NSEQ---2----*--ISOT--- Dist1-----*--Dist2-----Area--Hor(0.)/Ver(1.)Link
ELE01ELE02   97    1    1    3         0.5         0.5         1.0         1.0
```

Figure 8 : Exemple 1D de bloc CONNE

```
CONNE----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----8
01Z0102Z01   44    1    1    3  5.00E-01  5.00E-01         1.0         1.
02Z0103Z01   44    1    1    3  5.00E-01  5.00E-01         1.0         1.
03Z0104Z01   44    1    1    3  5.00E-01  5.00E-01         1.0         1.
04Z0105Z01   44    1    1    3  5.00E-01  5.00E-01         1.0         1.
05Z0106Z01   44    1    1    3  5.00E-01  5.00E-01         1.0         1.
01Z0101Z02   43    1    1    1  5.00E-01  5.00E-01         1.0         0.
02Z0102Z02   43    1    1    1  5.00E-01  5.00E-01         1.0         0.
03Z0103Z02   43    1    1    1  5.00E-01  5.00E-01         1.0         0.
04Z0104Z02   43    1    1    1  5.00E-01  5.00E-01         1.0         0.
05Z0105Z02   43    1    1    1  5.00E-01  5.00E-01         1.0         0.
01Z01ATM01   44    1    1    3  5.00E-01  1.00E-02         1.0        -1.
```

Figure 9 : Exemple 2D de bloc CONNE

Le programme ne distingue pas entre un maillage rectiligne ou radial. Pour créer un maillage radial, il suffit de calculer les volumes et les surfaces de cylindre au lieu de cube. Ainsi, les surfaces et les volumes seront de plus en plus grands en s'éloignant du puits. Les connexions pour des éléments inexistants sont ignorées. Ainsi, on peut simplifier la construction du maillage en généralisant le réseau.

Table 5 : Paramètres d'entrée du bloc CONNE

Ligne 1 à ...	Descriptions:contact entre les éléments	format	suggestions
EL1, NE1	Nom du premier élément de la connexion	3, char et 2, entier	ELE01
EL2, NE2	Nom du deuxième élément de la connexion	3, char et 2, entier	ELE02
NSEQ	Nombre de connexions additionnelles avec les mêmes paramètres	5, entier	97
NADD1	Incrément du nom du premier élément dans la connexion	5, entier	1
NADD2	Incrément du nom du deuxième élément dans la connexion	5, entier	1
ISOT	Paramètres pour définir la direction de la perméabilité intrinsèque, PER(ISOT) dans ROCKS	5, entier	1 à 3
D1	Distance entre le centre élément et l'interface entre les éléments	10,réel	0.5
D2	Distance entre le centre élément et l'interface entre les éléments	10, réel	0.5
AREAX	Surface de l'interface entre le premier et le deuxième élément	10,réel	1.0
BETAX	Cosinus de l'angle entre le vecteur de la connexion (1 vers 2) et le vecteur gravitationnel	10, réel	1.0
	C'est-à-dire que si l'élément 1 est au-dessus de l'élément 2, $GF \times BETAX > 0$ .		



### **A 1.4.7 Gener**

Le bloc GENER définit les informations concernant les points de pompage/injection du modèle. Le tableau X fait un résumé et explique les différents paramètres. Voici les différents TYPE possibles :

TYPE: COM1, WATE : injection d'une masse d'eau liquide en kg/s

COM2, AIR : injection d'une masse d'azote en kg/s

COM3 : injection d'une masse de méthane en kg/s

COM4 : injection d'une masse de dioxyde de carbone en kg/s

HEAT : source/puits de chaleur en J/s (non testé dans TOUGH2-LGM)

VOL. : pompage d'un volume de gaz ou d'eau en m<sup>3</sup>/s. Dans le cas d'un gaz, les fractions de gaz seront égaux aux fractions dans la cellule

DELV : pompage d'une masse de gaz ou d'eau correspondant à une pression de consigne dans le puits

Le tableau 6 donne les paramètres d'entrée généraux et le chapitre suivant explique en détail chaque fonction.

Table 6 : Paramètres d'entrée du bloc GENER

Ligne 1	Descriptions:point injection/pompage	format
EL, NE	Nom de l'élément qui contient le point d' injection/pompage	3, char et 2, entier
SL, NS	Nom du point d'injection/pompage	3, char et 2, entier
NSEQ	Nombre de points d'injection/pompage avec les mêmes paramètres	5, entier
NADD	Incrément dans les noms de point d'injection/pompage	5, entier
NADS	Incrément du nom de l'élément contenant le point d'injection pompage	5, entier
LTAB	Si LTAB =0, taux d'injection/pompage constant (LTAB=0 par défaut)	5, entier
	Si LTAB=1 et TYPE=DELV, un puits par cellule	
	Si LTAB>1, LTAB est le nombre de points dans les tableaux pour un taux variable dans le temps	
	Vide	
TYPE	COM1, WATE, COM2, AIR, COM3, COM4, HEAT, VOL. ou DELV,	4, char
ITAB	Si ITAB > 1, LTAB enthalpie spécifique en fonction du temps sera lue dans le tableau	1, char
	Si ITAB = vide, aucune lecture d'un tableau d'enthalpie	
GX	Si GX<0, taux de pompage constant et Si GX>0, taux d'injection constant.	10, réel
	Taux en Kg/s sauf si TYPE=VOL. en m3/s ou si TYPE=HEAT en J/s	
	Si TYPE=DELV, GX est l'indice de productivité PI en m3	
EX	Pour les puits d'injection, EX est l'enthalpie en joule.	10, réel
	Pour TYPE=DELV, EX est la pression de consigne à atteindre dans le puits	
	EX est inutile pour tous autres puits de pompage	
HG	Si le TYPE= DELV, HG est la hauteur ou la longueur de la crépine en m	10, réel
	Si le TYPE≠ DELV, HG est inutile.	
Ligne 2 à ...	Descriptions:tableau	format
F1	Temps du tableau de génération en s	LTAB x 10, réel
Ligne 3 à ...	Descriptions: tableau	format
F2	Taux de pompage injection du tableau en kg/s, en m3/s ou en J, selon le TYPE	LTAB x 10, réel
Ligne 4 à ...	Descriptions: tableau	format
F3	Enthalpie du fluide injecté du tableau en J	LTAB x 10, réel

### A 1.4.7.1. Injection de masse

a) TYPE = COM1 = WATE

Si  $LTAB \leq 1$ , un taux constant d'injection de la masse d'eau, en kg/s, est défini.

GX: taux constant d'injection de masse d'eau en kg/s,  $GX > 0$

EX: enthalpie de l'eau injectée en J.

HG: non utilisé.

Si  $LTAB > 1$ , un taux variable d'injection de la masse d'eau, en kg/s, est défini. Cette option est utile pour simuler l'infiltration dans le milieu poreux pendant un ou deux mois par année par exemple.

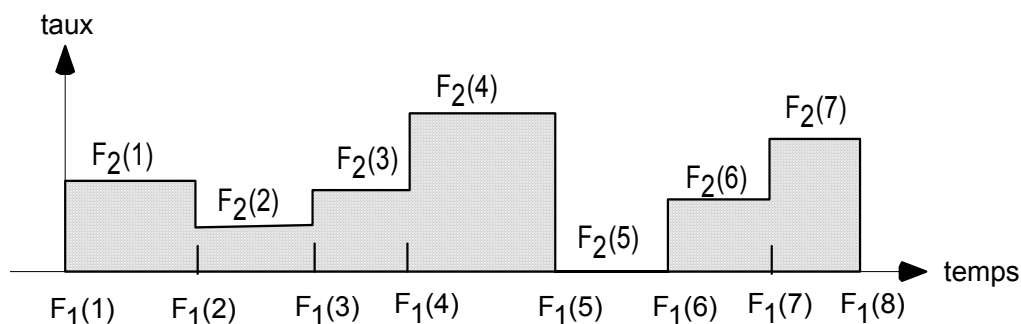
GX: non utilisé, le taux d'injection d'eau est spécifié dans les tableaux F2(L)

EX: enthalpie de l'eau injectée en J

HG: non utilisé

LTAB indique le nombre des périodes d'injection/pompage. Cette option peut être utilisée pour simuler l'infiltration au lieu de saturation constante dans les éléments de limite. Or, pour les conditions de limite, on suppose une saturation en gaz de 99% et une faible pression capillaire,  $P_c \sim 100$  Pa et, de l'autre côté. Avec cette option, on injecte de l'eau dans la couche supérieure du modèle aux temps et taux voulus. Voici un exemple :

- F1(L), L=1, LTAB: temps d'injection variable,  $F_1(1)=0$ ,
- F2(L), L=1, LTAB: les taux de masse (en kg/s) de l'injection



**Figure 10 : Exemple d'injection COM1**

Attention : L'utilisation de la fonction par échelon est définie par  $MOP(12)=1$ , dans le bloc PARAM. Si  $MOP(12)=0$ , l'interpolation est linéaire.

**b) TYPE = COM2 = AIR, TYPE = COM3 ou TYPE = COM4**

Si  $LTAB \leq 1$ , un taux constant d'injection de la masse d'azote, de méthane ou de dioxyde de carbone, respectivement, en kg/s est défini.

GX: le taux constant d'injection de gaz en kg/s ( $GX > 0$ )

EX: enthalpie de gaz injectée en J.

HG: non utilisé.

Si  $LTAB > 1$ , la masse injectée varie selon les données du tableau, de la même façon que dans l'exemple avec l'eau. Les paramètres sont décrits au tableau 6. En injectant un à un plusieurs composantes dans la même cellule, il est possible de créer des sources d'un mélange voulu.

#### A 1.4.7.2. Source/puits de chaleur

**TYPE = HEAT**

Les sources/puits de chaleur sont un ajout ou une extraction en J/s, de la même façon que les composées injectent ou pompent des Kg/s.

Si  $LTAB \leq 1$ , la source/puit de chaleur à un taux constant, en J/s

GX: le taux constant en J/s

Si  $GX > 0$ , le taux est retiré

Si  $GX < 0$ , le taux est ajouté

EX: non utilisé.

HG: non utilisé.

Si  $LTAB > 1$ , le taux varie selon les données du tableau, de la même façon que dans l'exemple avec l'eau. Les paramètres sont décrits au tableau 6.

#### A 1.4.7.3. Pompage d'un mélange muliphasé

Les types VOL. et DELV sont conçus pour modéliser de façon plus réaliste le comportement d'un puits de captage. Le mélange de gaz et d'eau de la cellule est selon une consigne de volume ou de pression de captage.

**a) TYPE: = VOL.**, le taux volumétrique de pompage de la phase gazeuse sera défini.

Si  $LTAB \leq 1$ , le taux de pompage est constant.

Si  $LTAB \geq 1$ , le taux de pompage n'est pas constant et les tableaux contenant les temps et les taux volumétriques doivent être fournis de la même façon que tous les autres TYPE. Les fractions de masse des gaz (vapeur d'eau, air atmosphérique, méthane et dioxyde de carbone) seront extraits selon les fractions PAR(I) actuelles dans l'élément. On peut utiliser VOL. pour l'injection de l'air atmosphérique, mais une petite erreur sera introduite parce que les fractions de masse des gaz injectés, qui ne devraient être uniquement de l'air atmosphérique, seront ajoutées selon les fractions PAR(I) dans l'élément. Pendant le pompage de la phase gazeuse, il est possible de pomper une petite quantité (~1%) de la phase liquide.

GX: le taux constant (volume de gaz en  $m^3/s$ ),  $GX < 0$ . pompage;

EX: enthalpie pour les puits d'injection (J), non utilisé pour les puits de pompage;

HG: non utilisé.

**b) TYPE: = DELV**, la pression de la phase gazeuse dans le puits est définie. Les taux de pompage et les fractions de masse des gaz (vapeur d'eau, air atmosphérique, méthane et dioxyde de carbone) seront extraits selon la pression imposée et selon les fractions PAR(I) actuelles de l'élément.

GX: index de la productivité PI (en  $m^3$ ). Il est calculé selon l'équation donnée ci-dessous. Si on veut obtenir la pression de consigne dans le puits, il faut imposer une valeur élevée à PI. Si le PI est faible il est possible que la pression de consigne ne soit jamais atteinte.

EX: la pression de consigne dans le puits en Pa;

HG: la hauteur ou la longueur de la crépine (souvent égale à la hauteur de l'élément).

L'index de la productivité d'un puits de rayon 1.0 m foré dans un élément de  $\Delta x = 10$  m,  $\Delta y = 6$  m, et  $\Delta z = 1$  m, est de:

$$GX \equiv PI = \frac{2\pi k h}{\ln\left(\frac{r_e}{r_w}\right) - 0.5 + s} = \frac{2 \cdot 3.14 \cdot 2.E-11 \cdot 6}{\ln\left(\frac{1.78}{1.0}\right) - 0.5 + 1.} = \frac{75.36}{1.08} = 6.98E-10$$

où:  $k$  est la perméabilité intrinsèque (en  $m^2$ ),  $h$  est la hauteur du puits dans élément,  $r_w$  est le rayon du puits,  $r_e$  est le rayon effectif,  $r_e = \sqrt{\frac{\Delta x \Delta z}{\pi}}$ , et  $s$  est le *skin factor*.

La figure 11 montre des exemple de TYPE de points d'injection/pompage variés.

```

GENER-----1-----Pres-2-----*-----3-----*-----4-----*--GX -----*--EX -----*--HG -----*-----8-----*-----9

A   1INJ 1                                AIR

D   13INJ 1                                1   VOL.    2.0E-04   329500.

E   13POM 1                                1   VOL.   -1.0E-04

B   13POM 1                                1   DELV   6.98E-10   99500.        6.

C   13POM 1                                1   DELV   6.98E-10   99500.        6.

B   1BIN 1      9      1      1            WATE  6.338E-06   21119.        1.

A   1AIN 1      9      1      1      62     WATE                                63197.        1.

      0.  2592000. 31557600. 34149600. 63115200. 65707200. 94672800. 97264800.126230400.128822400.

157788000.160380000.189345600.191937600.220903200.223495200.252460800.255052800.284018400.286610400.

315576000.318168000.347133600.349725600.378691200.381283200.410248800.412840800.441806400.444398400.

473364000.475956000.504921600.507513600.536479200.539071200.568036800.570628800.599594400.602186400.

631152000.633744000.662709600.665301600.694267200.696859200.725824800.728416800.757382400.759974400.

788940000.791532000.820497600.823089600.852055200.854647200.883612800.886204800.915170400.917762400.

946728000.949320000.

.00007716      0. .00007716      0. .00007716      0. .00007716      0. .00007716      0.

.00007716      0. .00007716      0. .00007716      0. .00007716      0. .00007716      0.

.00007716      0. .00007716      0. .00007716      0. .00007716      0. .00007716      0.

.00007716      0. .00007716      0. .00007716      0. .00007716      0. .00007716      0.

.00007716      0. .00007716      0. .00007716      0. .00007716      0. .00007716      0.

.00007716      0. .00007716

```

**Figure 11 : Exemple de bloc GENER**

### A 1.4.8 *Incon*

On introduit ici les informations concernant les conditions initiales du modèle, c'est-à-dire les variables thermodynamiques primaires: X1, X2, X3, X4 et X5. Pour les éléments dont le volume est égal à zéro, soit les éléments de limite, les variables thermodynamiques ne changent pas dans le temps. Les éléments non définis dans ce bloc seront affectés par les variables thermodynamiques principales par défaut, définies dans le bloc PARAM. Les conditions initiales pour des éléments inexistants sont ignorées. Ainsi, on peut simplifier les conditions initiales en généralisant.

- **X1**: La pression est donnée en Pa. Pour les éléments en deux phases ou en phase gazeuse uniquement, la pression représente le poids d'air. La pression atmosphérique égale à 101325 Pa et pour chaque mètre de colonne d'air additionnel on ajoute  $(28.96/22.414=1.29 \text{ kg/m}^3)*9.81=\underline{\underline{12.3 \text{ Pa}}}$ . La pression pour les éléments saturés en eau est égale à la pression d'air plus le poids de l'eau. Or, pour chaque mètre d'eau on ajoute  $1000.\text{kg/m}^3*9.81=\underline{\underline{9810 \text{ Pa}}}$ .

- X2: Si  $X2 > 10.$ , X2 représente la saturation en gaz + 10.

- X2: Si  $X2 < 1.$ , X2 représente la fraction de masse de gaz (air atmosphérique-nitrogène et/ou méthane et/ou dioxyde de carbone) dans la phase liquide. Pour obtenir la fraction de masse des gaz (air, méthane et/ou dioxyde de carbone) dans la phase liquide on utilise la loi de Henry, qui définit la fraction molaire (volumétrique) de gaz dissout en fonction de sa pression partielle au-dessus de la surface d'eau selon,

$$x_i^{mole} = \frac{p_i}{H_i}$$

où,  $p_i$  est la pression partielle du gaz en Pa,  $H$  est la constante de la loi d'Henry (fonction du type de gaz, type de liquide et la température). La constante de la loi d'Henry est présentée dans le tableau 7 pour les composants de biogaz et eau en fonction de la température.

La constante de la loi d'Henry et pression partielle de vapeur d'eau				
Temp t (°C)	AIR $H_{AIR} \cdot 10^9$ (Pa/mol fraction)	CH <sub>4</sub> $H_{CH_4} \cdot 10^9$ (Pa/mole fraction)	CO <sub>2</sub> $H_{CO_2} \cdot 10^7$ (Pa/mole fraction)	Pression de vapeur d'eau (Pa)
0	4.66	2.46	7.837	611
5	5.35	2.81	9.013	872
10	6.02	3.18	10.54	1227
15	6.66	3.57	12.38	1704
20	7.27	3.95	14.48	2337
25	7.84	4.33	16.79	3166
30	8.37	4.70	19.27	4241
35	8.86	5.05	21.89	5622
40	9.31	5.38	24.60	7375
45	9.72	5.69	27.38	9582
50	10.08	5.96	30.19	12335

**Table 7 : Constantes d'Henry**

Une fois la fraction molaire obtenue, on utilise l'équation suivante pour la transférer en fraction de masse,

$$x_i^{mass} = \frac{x_i^{mol} M_i}{\sum_{i=1}^4 x_i^{mol} M_i}$$

où,  $M_i$  est la masse moléculaire de composants ( $M_{air}=28.96$ ;  $M_{CH_4}=16.05$ ,  $M_{CO_2}=44.01$  et  $M_{H_2O}=18.016$ ).

Exemple: trouver la fraction de masse d'air dissout dans l'eau à  $t=5^\circ\text{C}$ .

1) pression partielle d'air atmosphérique

$$p_{air}=101325-1227=100098 \text{ Pa}$$



2) fraction molaire d'air atmosphérique dissout dans l'eau

$$x_{AIR}^{mol} = \frac{p_{AIR}}{H_{AIR}} = \frac{100098}{6.02 \times 10^9} = 1.663 \times 10^{-5}$$

3) fraction de masse d'air atmosphérique

$$x_{AIR}^{mass} = \frac{x_{AIR}^{mol} M_{AIR}}{x_{AIR}^{mol} M_{AIR} + x_{H_2O}^{mol} M_{H_2O}} = \frac{1.663 \times 10^{-5} \times 28.96}{1.663 \times 10^{-5} \times 28.96 + (1 - 1.663 \times 10^{-5}) \times 18.016} = 0.267 \times 10^{-4}$$

- X3: la fraction de masse de méthane dans la phase gazeuse ou dans la phase liquide, si l'élément est saturé.

- X4: la fraction de masse de dioxyde de carbone dans la phase gazeuse ou dans la phase liquide, si l'élément est saturé.

- X5: la température en °C

Il est fortement déconseillé de donner à des éléments inactifs ou même actifs des conditions initiales saturées. Il ne faut surtout pas tenter de calculer manuellement la dissolution des gaz pour imposer des saturations en gaz à un élément saturé. Si l'élément est absolument essentiel au modèle, il est préférable de modéliser une colonne pour laisser le programme calculer lui-même les conditions initiales du modèle.

Le tableau 8 décrit les paramètres de ce bloc. La figure 12 donne un exemple d'entrée pour le bloc INCON. La lecture sur les lignes a été étendue à 100 caractères pour pouvoir inscrire le paramètre X(5).

```

INCON----1----Pres-2-----*----3-----*-X2-4-----*----5-----*-X3-6-----*----7-----*-X4-8-----*----9-----*-T-10
A   0   40   1           0.2
           101361.9           10.58           0.27           0.73           25.0
BCU 1   29   1
           100127.7           10.58           0.00           0.00           5.0
BCB41  29   1           0.2
           103127.7           0.0000298           0.00           0.00           5.0
BCB41  29   1
           103127.7           0.0000203           0.00           0.00           10.0
BCB41  29   1
           103127.7           0.0000103           0.00           0.00           25.0
BCB41  29   1
           103127.7           0.0000103           0.00           0.00           30.0

```

**Figure 12 : Exemple de bloc INCON**

Table 8 : Paramètres d'entrée du bloc INCON

Ligne 1	Descriptions: définition des éléments aux conditions initiales imposées	format	symbole	unité
EL, NE	Nom de l'élément auquel on impose ces conditions initiales	3, char et 2, entier		
NSEQ	Nombre des éléments additionnels avec les mêmes conditions initiales	5, entier		
NADD	Incrément dans le nom des éléments avec les mêmes conditions initiales	5, entier		
PORX	Porosité de(s) (l')élément(s). La porosité par défaut est fixée dans ROCKS	15, entier	n	[adim]
Ligne 2	Descriptions: variables thermodynamiques primaires en conditions initiales	format	symbole	unité
X1	Pression au centre des éléments	20, entier	P	Pa
X2	Si $X > 10$ , $X - 10$ est la saturation de gaz de l'élément non saturé	20, entier	Sg	[adim]
	Si $X \leq 1$ , X est la saturation de gaz dans le liquide			
X3	Fraction massique du méthane dans la phase gazeuse ou liquide	20, entier	$w_g^{CH_4}$ ou $w_l^{CH_4}$	[adim]
X4	Fraction massique du dioxyde de carbone dans la phase gazeuse	20, entier	$w_g^{CO_2}$ ou $w_l^{CO_2}$	[adim]
X5	Température du centre de l'élément	20, entier	T	°C

### **A 1.4.9      *Fin***

Ces deux blocs identifient la fin du fichier d'entrée de données, puis ordonnent l'exécution du programme.

`START`

`ENDCY`

**Figure 13 : Exemple des blocs finaux**

## A 1.5 Bibliographie

1. BOUR, O., TAFFOUREAU, E., THERRIEN, R. 2003. "Lateral landfill gas migration: characterization and preliminary results". *Proceedings Sardinia 2003, Ninth International Waste Management and Landfill Symposium*. Italy : CISA, Environmental Sanitary Engineering Centre. [n.p.].
2. COREY, A.T. 1954. *Interrelation between gas and oil relative permeabilities*. United States: Pennsylvania State University . 64.
3. LAI, S.-H., TIEDJE, J.M., ERICKSON, A.E. 1976. "In situ measurement of gas diffusion coefficient in soils". *Soil Science Society of America*. 40 : 3-6.
4. LEFEBVRE, R. 1994. *Caractérisation et modélisation numérique du drainage minier acide dans les haldes de steriles*. 412. Thèse, Université Laval.
5. MILLINGTON, R.J., QUIRK, J.P. 1961. "Permeability of porous solids". *Faraday Society -- Transactions*. 57 : 463. 1200-1207. Faraday Society, London, England.
6. NASTEV, M. 1998. *Modeling landfill gas generation and migration in sanitary landfills and geological formations* .373. Université Laval.
7. NASTEV, M., LEFEBVRE, R., THERRIEN, R., GELINAS, P. 2003. "Numerical modeling of lateral landfill gas migration". *Journal of Solid Waste Technology and Management*. 29 : 4. 265-276. Widener University School of Civil Engineering.
8. NASTEV, M., THERRIEN, R., LEFEBVRE, R., GELINAS, P. 2001. "Gas production and migration in landfills and geological materials". *Journal of Contaminant Hydrology*. 52:1-4. 187-211.
9. PRUESS, K. 1983. *Development of the general purpose simulator MULKOM, Annual report 1982*. California: Lawrence Berkeley Laboratory, Earth Sciences Division. LBL-15227.
10. PRUESS, K. 1987. *TOUGH: User's Guide*. Berkeley, California: University of California. 78.
11. PRUESS, K. 1991. *TOUGH2-A general-purpose numerical simulator for multiphase fluid and heat flow*. Berkeley, California: University of California. 102.
12. VAN GENUCHTEN, M.Th. 1980. "Closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils". *Soil Science Society of America Journal*. 44 : 5. 892-898.
13. VIGNEAULT, H. 1999. *Modélisation numérique du rayon d'influence des puits de captage des biogaz dans les sites d'enfouissement sanitaires*. 138. Université du Québec-INRS-Géoressources.