



HAL
open science

Modélisation du transport actif de soluté en milieu poreux en présence d'un biofilm

Laurent Orgogozo, F. Golfier, C. Oltéan, M.A. Buès, B. Wood, M. Quintard

► **To cite this version:**

Laurent Orgogozo, F. Golfier, C. Oltéan, M.A. Buès, B. Wood, et al.. Modélisation du transport actif de soluté en milieu poreux en présence d'un biofilm. CFM 2007 - 18ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2007, Grenoble, France. hal-03361125

HAL Id: hal-03361125

<https://hal.science/hal-03361125>

Submitted on 1 Oct 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Modélisation numérique du transport actif de soluté en milieu poreux en présence d'une phase biofilm : validité de l'hypothèse de l'équilibre de masse local

L. Orgogozo¹, F. Golfier¹, C. Oltéan¹, M.A. Buès¹, B. Wood², M. Quintard³

¹Nancy Université - Laboratoire Environnement, Géomécanique et Ouvrages, École Nationale Supérieure de Géologie, Rue du Doyen Marcel Roubault, BP40F-54501 Vandoeuvre-lès-Nancy, France

²Environmental Engineering, Oregon State University, Corvallis, OR 97331, USA

³Institut de Mécanique des Fluides, Allée du Professeur Camille Soula, 31400 Toulouse, France
Laurent.Orgogozo@ensg.inpl-nancy.fr

Résumé :

Dans un milieu poreux, les biofilms, composés de bactéries entourées de substances organiques extracellulaires, se développent généralement sur les parois des pores. Le métabolisme bactérien convertit les solutés organiques en biomasse. Le système d'équations régissant à l'échelle de Darcy le transport bio-actif d'un soluté organique dans un milieu poreux incluant une phase biofilm a été établi à partir des données à l'échelle du pore, dans le cas où l'hypothèse d'équilibre de masse local entre les phases fluide et biofilm est vérifiée. La méthode de changement d'échelle utilisée a été la méthode de prise de moyenne volumique. Certains résultats établis grâce à ce modèle sont présentés ici. Le domaine de validité de ce modèle en termes de conditions hydrodynamiques et physico-chimiques définies par les nombres adimensionnels caractéristiques du processus (nombre de Péclet et de Damköhler) a été identifié.

Abstract :

In a porous medium, biofilms, which are composed of bacteria and extracellular organic substances, grow on the pore walls. Bacterial metabolism converts organic solutes into biomass. The governing system of equations of bio-reactive transport at the Darcy scale in a porous media including a biofilm phase has been derived from the data available at the pore-scale, in the case of the existence of a local mass equilibrium between the biofilm phase and the fluid phase. The upscaling method used was the volume averaging method. Impact of microscopic parameters on the effective coefficients of the upper scale has been presented. The domain of validity of this model has been established in terms of hydrodynamic, physical and chemical conditions (Péclet and Damköhler dimensionless numbers).

Mots-clefs : Milieux poreux ; Biofilm ; Changement d'échelle

1 Introduction

La modélisation du transport d'espèces chimiques en présence de colonies bactériennes appelées biofilms est un domaine de recherche qui suscite un intérêt croissant pour ses applications environnementales : bioremédiation des sites et sols pollués (biosparging), protection des aquifères menacés d'une éventuelle contamination (bio-barrière). Les solutés organiques sont assimilés par le métabolisme bactérien, qui les convertit *in fine* en biomasse. Cette propriété des biofilms en font un outil de limitation de la contamination d'aquifères par des polluants organiques. La modélisation des phénomènes de transport bioréactif permettrait d'optimiser ces procédés de bioremédiation. Une des difficultés de la modélisation de ce type de transport est l'aspect multi-échelle du phénomène. La Figure 1 présente les différentes échelles associées. Le substrat, transporté par convection et diffusion dans le fluide ambiant (eau), pénètre par diffusion dans le biofilm où il est consommé par les réactions biochimiques associées au métabolisme bactérien.

Des études récentes montrent que la biodégradation des polluants organiques par le métabolisme bactérien s'effectue principalement dans les zones de mélange entre le substrat,

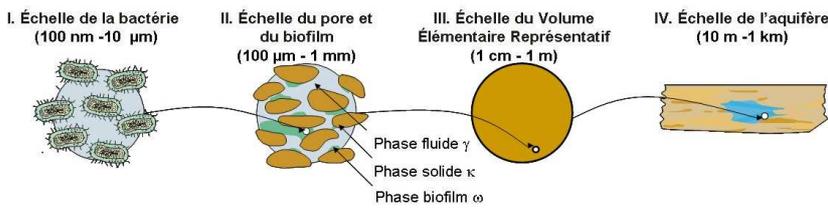


Figure 1 : Les différentes échelles associées aux phénomènes de transport bio-actif en milieux poreux incluant une phase biofilm

généralement issue d'une source ponctuelle, et l'accepteur d'électron associé à la biodégradation (e.g. : l'oxygène), qui est le plus souvent présent dans le milieu ambiant (Knutson *et al.*, 2006). Le tenseur de dispersion

est donc un paramètre essentiel à l'évaluation de l'importance de la biodégradation des polluants organiques en milieu poreux. L'estimation d'un tenseur de dispersion macroscopique qui prend en compte les phénomènes à l'échelle microscopique peut être effectuée à l'aide des méthodes de changement d'échelle. L'étude de l'impact du développement de biofilms dans un milieu poreux saturé sur le transport de solutés bioréactifs a déjà fait l'objet d'un certain nombre de travaux. Ainsi, le changement d'échelle permettant d'établir les caractéristiques physico-chimiques du biofilm considéré comme une phase continue (passage de l'échelle I à l'échelle II, Figure 1) a été développé par Wood et Whitaker (1998) à partir de la méthode de prise de moyenne volumique (e.g. : Whitaker, 1999). L'objectif de la présente étude est de poursuivre ces travaux par le développement du changement d'échelle suivant, i.e. : passage de l'échelle II à l'échelle III (Figure 1). La méthode de prise de moyenne volumique a également été retenue pour ce changement d'échelle. Deux régimes de transport ont ainsi été identifiés : (i) un régime d'équilibre de masse local entre les phases aqueuse et biofilm à l'échelle de Darcy et (ii) un régime de non équilibre de masse local entre ces deux phases. Dans le cas de l'hypothèse d'un équilibre de masse local, le changement d'échelle considéré conduit à un modèle de transport à l'échelle de Darcy à une seule équation. Un code numérique a été développé pour déterminer les coefficients du tenseur de dispersion effective associés à un tel modèle. Le domaine de validité du modèle d'équilibre de masse local a ainsi pu être défini par des expérimentations numériques. Enfin, on a pu étudier l'impact de différentes caractéristiques microscopiques du biofilm et du milieu poreux sur la dispersion à l'échelle de Darcy.

2 Modèle de changement d'échelle traduisant l'hypothèse de l'équilibre de masse local

Les équations gouvernant le transport d'un soluté bioréactif A à l'échelle du pore sont explicitées ci-dessous (γ désigne la phase fluide, ω la phase biofilm et κ la phase solide et B l'accepteur d'électron). À cette échelle, le champ de vitesse \mathbf{v}_γ est défini à partir des équations de Stokes. Il vient alors :

$$\frac{\partial c_{A\omega}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{A\omega} \cdot \nabla c_{A\omega}) - \mu_{A\omega} \rho_\omega \frac{c_{A\omega}}{c_{A\omega} + K_{A\omega}} \frac{c_{B\omega}}{c_{B\omega} + K_{B\omega}} \quad \text{dans la phase biofilm,} \quad (1.a)$$

$$\frac{\partial c_{A\gamma}}{\partial t} + \mathbf{v}_\gamma \cdot \nabla c_{A\gamma} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{A\gamma} \cdot \nabla c_{A\gamma}) \quad \text{dans la phase fluide,} \quad (1.b)$$

$$\text{avec : } -\mathbf{n}_{\omega\kappa} \cdot \mathbf{D}_{A\omega} \cdot \nabla c_{A\omega} = 0 \quad \text{sur } A_{\omega\kappa}, \quad (1.c)$$

$$-\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathbf{D}_{A\gamma} \cdot \nabla c_{A\gamma} = 0 \quad \text{sur } A_{\gamma\kappa}, \quad (1.d)$$

$$\text{et : } c_{A\gamma} = K_{A,eq} c_{A\omega} \quad \text{sur } A_{\gamma\omega}, \quad (1.e)$$

$$-\mathbf{n}_{\gamma\omega} \cdot \mathbf{D}_{A\omega} \cdot \nabla c_{A\omega} = -\mathbf{n}_{\gamma\omega} \cdot \mathbf{D}_{A\gamma} \cdot \nabla c_{A\gamma} \quad \text{sur } A_{\gamma\omega}. \quad (1.f)$$

Ce système est fermé par la donnée des conditions initiales. c_{A_i} et c_{B_ω} [mol/m³] correspondant aux concentrations locales respectivement du substrat dans la phase i et de l'accepteur d'électron dans la phase ω . $\mathbf{D}_{A\gamma}$ et $\mathbf{D}_{A\omega}$ [m²/s] désignent les tenseurs de diffusion du substrat A respectivement dans la phase γ et dans la phase ω (Wood et Whitaker, 1998). $\mu_{A\omega}$ [mol/(kg.s)] est défini comme le taux maximum de réaction par unité de masse de biofilm et ρ_ω [kg/m³]

comme la masse de cellules bactériennes par unité de volume de biofilm. $K_{A\omega}$ et $K_{B\omega}$ [mol/m³] sont les constantes de demi-saturation des solutés A et B de la réaction biologique et $K_{A,eq}$ [-] est la constante d'équilibre de masse pour le soluté A à l'interface entre phases fluide et biofilm.

La méthode de prise de moyenne volumique permet de passer de ces équations de l'échelle du pore à celles qui régissent le transport à l'échelle de Darcy. On définit les moyennes intrinsèques des concentrations en soluté dans chacune des phases et la moyenne pondérée des concentrations en soluté dans le milieu par :

$$\langle c_{A\omega} \rangle^\omega = \frac{1}{V_\omega} \int_{V_\omega} c_{A\omega} dV \quad ; \quad \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma = \frac{1}{V_\gamma} \int_{V_\gamma} c_{A\gamma} dV \quad (2.a)$$

$$\{c_A\} = \left(\frac{\varepsilon_\gamma}{\varepsilon_\omega + \varepsilon_\gamma} \right) \langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma + \left(\frac{\varepsilon_\omega}{\varepsilon_\omega + \varepsilon_\gamma} \right) K_{A,eq} \langle c_{A\omega} \rangle^\omega. \quad (2.b)$$

V_γ et V_ω sont respectivement le domaine fluide et le domaine biofilm du volume de prise de moyenne V . Le volume V doit respecter la contrainte de séparation des échelles, *i.e.* : les longueurs caractéristiques des hétérogénéités de l'échelle microscopique doivent être négligeables devant la longueur caractéristique du volume V , qui doit elle-même être négligeable devant les longueurs caractéristiques des hétérogénéités de l'échelle macroscopique. On exprime ensuite l'hypothèse de l'équilibre de masse local pour le soluté A entre la phase fluide et la phase biofilm sous la forme :

$$\langle c_{A\gamma} \rangle^\gamma = K_{A,eq} \langle c_{A\omega} \rangle^\omega = \{c_A\}. \quad (3)$$

On obtient alors un système à une seule équation pour le transport de l'espèce A à l'échelle du Volume Élémentaire Représentatif du milieu poreux. À cette échelle, le champ de vitesse $\langle \mathbf{v}_\gamma \rangle^\gamma$ est défini par la loi de Darcy. L'équation de transport, qui traduit l'hypothèse de l'équilibre de masse local à cette même échelle, est :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_\gamma + K_{A,eq}^{-1} \varepsilon_\omega) \{c_A\} + \nabla \cdot (\varepsilon_\gamma \langle \mathbf{v}_\gamma \rangle^\gamma \{c_A\}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{eff} \cdot \nabla \{c_A\}) - \varepsilon_\omega \mu_{A\omega} \rho_\omega \frac{\{c_A\}}{\{c_A\} + K_{A,eq} K_{A\omega}} \frac{\{c_B\}}{\{c_B\} + K_{B,eq} K_{B\omega}} \quad (4)$$

avec:

$$\mathbf{D}_{eff} = (\varepsilon_\gamma \mathbf{D}_{A\gamma} \mathbf{I} + K_{A,eq}^{-1} \varepsilon_\omega \mathbf{D}_{A\omega}) + \mathbf{D}_{A\gamma} \left(\frac{1}{V_{A_{\omega\gamma}(t)}} \int_{A_{\omega\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\gamma\omega} \mathbf{b}_{A\gamma} dA + \frac{1}{V_{A_{\gamma\kappa}(t)}} \int_{A_{\gamma\kappa}(t)} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \mathbf{b}_{A\gamma} dA \right) + K_{A,eq}^{-1} \mathbf{D}_{A\omega} \cdot \left(\frac{1}{V_{A_{\omega\gamma}(t)}} \int_{A_{\omega\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\omega\gamma} \mathbf{b}_{A\omega} dA + \frac{1}{V_{A_{\omega\kappa}(t)}} \int_{A_{\omega\kappa}(t)} \mathbf{n}_{\omega\kappa} \mathbf{b}_{A\omega} dA \right) - (\langle \tilde{\mathbf{v}}_\gamma \mathbf{b}_{A\gamma} \rangle). \quad (5)$$

où $\mathbf{b}_{A\gamma}$ et $\mathbf{b}_{A\omega}$ sont des champs vectoriels définis par un problème de fermeture résolu sur une cellule unitaire représentative de la géométrie du milieu à l'échelle du pore. Ce problème de fermeture est présenté ci-dessous. Ainsi dans la phase biofilm on a :

$$\nabla \cdot (\mathbf{D}_{A\omega} \cdot \nabla \mathbf{b}_{A\omega}) = \frac{1}{V_\omega} \int_{A_{\omega\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\omega\gamma} \cdot (\mathbf{D}_{A\omega} \cdot \nabla \mathbf{b}_{A\omega}) dA + \frac{1}{V_\omega} \int_{A_{\omega\kappa}(t)} \mathbf{n}_{\omega\kappa} \cdot (\mathbf{D}_{A\omega} \cdot \nabla \mathbf{b}_{A\omega}) dA, \quad (6.a)$$

et dans la phase fluide on a :

$$\tilde{\mathbf{v}}_\gamma + \mathbf{v}_\gamma \cdot \nabla \mathbf{b}_{A\gamma} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{A\gamma} \nabla \mathbf{b}_{A\gamma}) - \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\omega\gamma}(t)} \mathbf{n}_{\gamma\omega} \cdot (\mathbf{D}_{A\gamma} \nabla \mathbf{b}_{A\gamma}) dA - \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\kappa}(t)} \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot (\mathbf{D}_{A\gamma} \nabla \mathbf{b}_{A\gamma}) dA, \quad (6.b)$$

$$\text{C.L.1} \quad \mathbf{b}_{A\gamma} = \mathbf{b}_{A\omega} \text{ sur } A_{\gamma\omega}, \quad (6.c)$$

$$\text{C.L.2} \quad -\mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathbf{D}_{A\gamma} = \mathbf{n}_{\gamma\kappa} \cdot \mathbf{D}_{A\gamma} \nabla \mathbf{b}_{A\gamma} \text{ sur } A_{\gamma\kappa}, \quad (6.d)$$

$$\text{C.L.3} \quad -\mathbf{n}_{\omega\kappa} \cdot \mathbf{D}_{A\omega} = \mathbf{n}_{\omega\kappa} \cdot \mathbf{D}_{A\omega} \cdot \nabla \mathbf{b}_{A\omega} \text{ sur } A_{\omega\kappa}, \quad (6.e)$$

$$\text{C.L.4} \quad -\mathbf{n}_{\gamma\omega} \cdot (\mathbf{D}_{A\omega} \cdot \nabla \mathbf{b}_{A\omega} - K_{A,eq} \mathbf{D}_{A\gamma} \nabla \mathbf{b}_{A\gamma}) = -\mathbf{n}_{\gamma\omega} \cdot (K_{A,eq} \mathbf{D}_{A\gamma} \mathbf{I} - \mathbf{D}_{A\omega}) \text{ sur } A_{\gamma\omega}, \quad (6.f)$$

auxquelles s'ajoutent les conditions de périodicité et enfin les conditions de moyenne intrinsèques nulles par phase. L'établissement de ce problème de fermeture a été effectué par Wood *et al.* (2002).

3 Étude de l'impact de la morphologie du milieu poreux et du biofilm à l'échelle du pore sur la dispersion à l'échelle de Darcy en régime d'équilibre de masse local

Un code numérique de résolution du problème de fermeture associé au modèle de l'équilibre local a été développé. Le schéma de discrétisation utilisé est un schéma aux volumes finis du premier ordre avec anti-diffusion, communément appelé schéma de Murman anti-diffusé conservatif. Ce code permet d'évaluer les coefficients du tenseur de dispersion effective à l'échelle de Darcy à partir des données physico-chimiques et géométriques de l'échelle du pore. Ces données sont synthétisées par une cellule unitaire représentative de la structure du milieu à l'échelle microscopique. L'impact de la morphologie du biofilm et de la complexité de la géométrie du milieu sur la dispersion a ainsi pu être étudié. La Figure 2 présente les différentes cellules unitaires considérées dans ce travail.

Les fractions volumiques de biofilm de toutes les cellules sont égales à 0,11 ; les fractions volumiques de fluide sont égales à 0,59 dans les cas (a) et (b) et à 0,31 dans les cas (c) et (d). Les cellules (a) et (b) représentent des milieux bidimensionnels de grains identiques. La différence significative entre ces deux milieux résulte de la complexité du réseau de grains, *i.e.* : un réseau cubique régulier (a) et un réseau en quinconce (b). La cellule unitaire (d) représente un milieu tridimensionnel réaliste : la phase solide a été obtenue par tomographie d'un milieu poreux réel constitué de bille de verre de 250 micromètres de diamètres (Wood *et al.*, 2004), et la phase biofilm a été simulée par l'usage d'un programme de développement de biofilm par automate cellulaire (Picioreanu *et al.*, 1999). La cellule unitaire (c) est une représentation simplifiée du même milieu poreux, équivalente à la cellule unitaire (d) du point de vue de la taille des billes et des fractions volumiques de chaque phase. Le tenseur de diffusion du substrat A dans le biofilm est sphérique de terme courant égal à la moitié du coefficient de diffusion du substrat A dans l'eau. Le nombre de Péclet de cellule est défini en fonction d'une longueur l caractéristique de la cellule considérée, de la moyenne intrinsèque de la vitesse dans la phase fluide et du coefficient de diffusion du substrat A dans l'eau. La longueur caractéristique considérée dans les cas (a) et (b) est la longueur l reporté en Figure 2. Dans les cas (c) et (d), cette longueur caractéristique est la longueur de corrélation associée à la géométrie de la cellule dans la direction principale de l'écoulement.

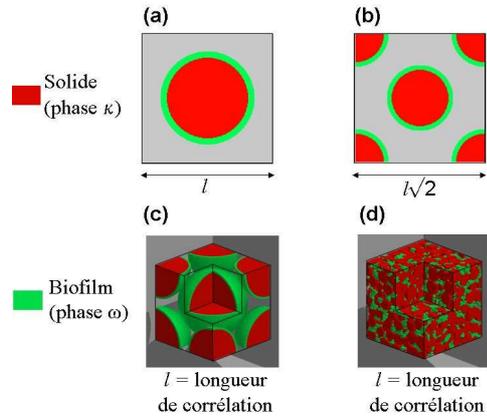


Figure 2 : Cellules unitaires représentatives des milieux poreux considérés à l'échelle du pore

3.2 Domaine de validité du modèle d'équilibre local

Le domaine de validité du modèle d'équilibre local a été identifié en fonction des deux nombres adimensionnels caractéristiques du régime de transport bioréactif, le nombre de Péclet et le nombre de Damköhler, définis à l'échelle de la cellule unitaire. Le nombre de Péclet de cellule considéré est celui défini pour la cellule unitaire (a) (Cf. § 2). Le nombre de Damköhler

de cellule s'exprime par : $Da = l^2 \mu_{A\omega} \rho_{\omega} k / D_{A\omega} K_{A\omega}$ et représente le rapport entre le taux de consommation du substrat et le transport par diffusion dans la phase biofilm. Pour déterminer le domaine de validité du modèle d'équilibre de masse local, on considère un milieu poreux bidimensionnel dont la structure microscopique est définie par la cellule unitaire (a). On effectue des simulations de transport bioréactif pour une telle géométrie directement à l'échelle microscopique à l'aide du logiciel commercial Comsol Multiphysics, puis des simulations monodimensionnelles avec le modèle macroscopique à une équation (Cf. § 2). La géométrie microscopique considérée pour la simulation directe est représentée sur la Figure 3. Une condition de périodicité est imposée aux limites supérieures et inférieures de cette géométrie, afin de simuler les conditions d'un transport macroscopique globalement unidimensionnel. Par compa-

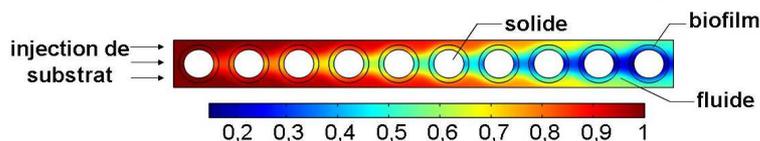


Figure 3 : Exemple de champ de concentration réduite établi par simulation à l'échelle microscopique

raison des courbes de percées obtenues par simulation 1D à l'échelle macroscopique avec le modèle d'équilibre de masse local et par simulations 2D à l'échelle microscopique, le domaine de validité du modèle d'équilibre de masse local a pu être défini. C'est le domaine pour lequel les différences relatives entre les moments d'ordre 1 et d'ordre 2 des distributions dérivées (*e.g.* : Buès et Zilliox, 1990) sont inférieures à une valeur fixée arbitrairement à 1,5%. Par application de cette méthode, il ressort que le modèle d'équilibre de masse local est valide à bas nombre de Péclet et bas nombre de Damköhler, *i.e.*, quand le champ de concentration est contrôlé par les phénomènes diffusifs. En effet, les temps caractéristiques de transport dans les phases fluide et biofilm sont alors du même ordre. Par contre, pour des nombres de Péclet et des nombres de Damköhler plus élevés, les phénomènes convectifs et réactifs deviennent prépondérants et l'hypothèse de l'équilibre local n'est plus valide. Même dans ce cas, les résultats obtenus suggèrent que l'on peut utiliser le modèle d'équilibre de masse local hors de son strict domaine de validité tant que l'importance des termes réactifs n'est pas prépondérante. Ainsi, pour des nombres de Damköhler inférieurs à 10, on a moins de 5% d'erreur sur les moments d'ordre 1 pour des nombres de Péclet inférieurs ou égaux à 100, et moins de 10% d'erreur sur les moments d'ordre 2 pour des nombres de Péclet inférieurs ou égaux à 10.

3.1. Comparaison entre calculs du coefficient de dispersion longitudinal pour des géométries simples et complexes, bidimensionnelles et tridimensionnelles

La Figure 4 présente l'évolution des coefficients diagonaux du tenseur de dispersion à l'échelle de Darcy en fonction du nombre de Péclet de cellule calculé pour différents milieux poreux. Ce graphique (1) montre la comparaison entre deux cas bidimensionnels, dont les géométries microscopiques sont définies respectivement par les cellules (a) et (b), alors que le graphique (2) correspond à la comparaison entre deux cas tridimensionnels, dont les géométries microscopiques sont définies respectivement par les cellules (c) et (d). Nous nous focaliserons sur le régime à bas Péclet correspondant au domaine de validité de notre modèle.

Abordons tout d'abord les cas bidimensionnels. À bas nombres de Péclet, l'absence d'impact de la complexité du milieu sur la dispersion effective est due au régime de transport, qui est de type diffusif. On constate ainsi que les coefficients de diffusion effective sont essentiellement fonctions des fractions volumiques de chaque phase. Dans ce cas là, la donnée des fractions volumiques des différentes phases du milieu semble donc suffisante pour un calcul de dispersion effective à faibles nombres de Péclet.

Considérons maintenant les cas tridimensionnels plus complexes. On constate qu'on ne retrouve pas la même valeur de dispersion à bas nombre de Péclet en configuration simplifiée et

en configuration réaliste (31% de différence pour la dispersion longitudinale) bien que les fractions volumiques soient les mêmes. Cela peut traduire l'effet des différences de morphologie de l'interface fluide-biofilm qui existent entre ces deux configurations.

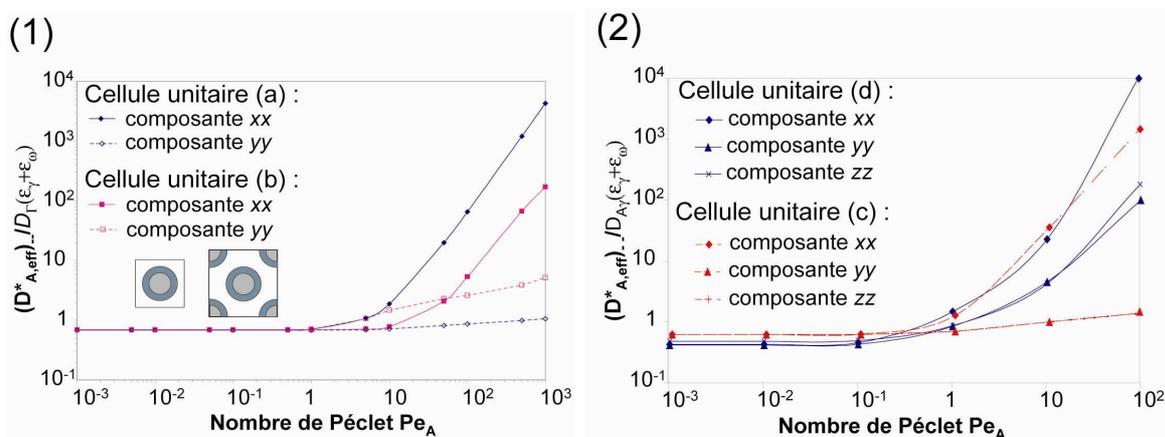


Figure 4 : Dispersions effectives à l'échelle macroscopique en fonction du nombre de Péclet (1) pour les configurations (a) et (b) & (2) pour les configurations (c) et (d)

4 Conclusions

Ce travail a permis d'estimer de manière quantitative l'impact de la présence d'une phase biofilm sur les caractéristiques hydrodispersives d'un milieu poreux. Un modèle simplifié de transport a ainsi été développé. Son domaine de validité est celui des processus de transport caractérisés par des nombres de Péclet et de Damköhler inférieurs à 1. La seule donnée des fractions volumiques de chaque phase du milieu semble permettre d'évaluer le tenseur de dispersion macroscopique pour des milieux de géométrie suffisamment simple. Néanmoins, dans le cas de géométries plus complexes, l'influence de la morphologie de l'interface du biofilm peut ne pas être négligeable. Des hypothèses de non-équilibre de masse local sont en cours d'examen afin d'étendre le domaine de transport réactif modélisable par changement d'échelle.

Références

- Buès, M. A., Zilliox, L. 1990 Déplacements Miscible avec Contraste de Densité et de Viscosité en milieu Poreux. Identification des paramètres de Déplacement et Stabilité en Régime de Dispersion Mécanique, *Journal of Hydrology*, **120**, 125-141
- Knutson, C., Valocchi, A., Werth, C. 2006 Comparison of continuum and pore-scale models of nutrient biodegradation under transverse mixing conditions, *Advances in Water Resource*.
- Piciooreanu, C., Van Loosdrecht, M. C. M., Heijnen, J. J. 1999 Discrete-differential modelling of biofilm structure, *Water Science and Technology*, **39**, 7, 115-425
- Whitaker, S. 1999 The Method of Volume Averaging, *Theory and applications of transport in porous media*, éditeur: Bear, J., Dordrecht : Kluwer
- Wood, B. D., Whitaker, S. 1998 Diffusion and reaction in biofilms, *Chemical Engineering Science*, **53**, 3, 397-425
- Wood, B. D., Quintard, M., Golfier, F., Whitaker, S. 2002 Biofilms in porous media: development of macroscopic transport equation via volume averaging with closure, *Computational Methods in Water Resources*, **2**, 1195-1202
- Wood, B. D., Golfier, F., Majors, P., Quintard, M., Whitaker, S. 2004 Biofilms in porous media: Upscaling conservation equations and measurement of microbial distributions via NMR, *Proceedings of the Inter. Water Assoc. Conference on Biofilms (Las Vegas, 2004)*, 38-44.