



HAL
open science

Modélisation des transferts réactifs de masse et de chaleur dans les installations de stockage de déchets ménagers

Damien Chenu

► **To cite this version:**

Damien Chenu. Modélisation des transferts réactifs de masse et de chaleur dans les installations de stockage de déchets ménagers. Sciences de la Terre. Institut National Polytechnique (Toulouse), 2007. Français. ⟨NNT : 2007INPT012H⟩. ⟨tel-04601691⟩

HAL Id: tel-04601691

<https://hal.science/tel-04601691v1>

Submitted on 5 Jun 2024

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.



HAL Authorization

Modélisation des transferts réactifs de masse et de chaleur dans les installations de stockage de déchets ménagers : application aux installations de type bioréacteur

THÈSE

présentée et soutenue le 11 mai 2007

pour l'obtention du titre de

Docteur de l'Institut National Polytechnique de Toulouse

(spécialité science de la Terre et de l'Environnement)

par

Damien CHENU

Composition du jury

Président : Jean-Pierre Gourc

Rapporteurs : Pierre Moszkowicz
Frédéric Topin

Examineurs : Michel Quintard
Gérald Debenest
Nathalie Skhiri

Invités : Didier Houi
Xavier Lefebvre

Remerciements

Les travaux de recherche présentés dans ce document se sont déroulés à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT) et ont été initiés sous l'impulsion du CReeD (Centre de Recherche du groupe Veolia Environnement). Je tiens donc tout naturellement à remercier l'ensemble des personnes de ces deux organismes qui ont rendu ce travail possible.

Mes premiers remerciements vont à mon directeur de thèse, Michel Quintard (DR CNRS, IMFT), sans le soutien duquel ces travaux n'auraient probablement jamais abouti. Michel a su me communiquer son goût pour la recherche et pour le travail bien fait. Son encadrement sans faille, son dynamisme à toute épreuve, ainsi que la qualité de son raisonnement m'ont été précieux pour chacune des étapes de mon travail. Ces travaux de thèse n'auraient sans aucun doute pas vu le jour sans l'appui industriel apporté par le CReeD. C'est pour quoi, je tiens à remercier Christophe Aran (Veolia, CReeD), Thomas Lagier (Veolia, CReeD) et surtout Nathalie Skhiri (Veolia, CReeD) et Vassilia Vigneron (Veolia, CReeD) de m'avoir permis de rester au contact de la problématique industrielle liée à mes travaux.

Parmi les permanents du Groupe d'Etude sur les Milieux Poreux (GEMP) de l'IMFT, je tiens également à saluer chaleureusement Pierre Crausse (Pr, IMFT) et Gérard Debenest (MdC, IMFT) qui m'ont apporté leurs connaissances des milieux poreux réactifs et de la modélisation de ceux-ci. Leur disponibilité et leur patience m'ont été d'un soutien indispensable.

Le multidisciplinarité du sujet étudié fut un réel challenge pour moi, et j'ai pu trouvé des éléments de réponse à ces problèmes complexes grâce à diverses collaborations. Je pense en particulier aux coopérations scientifiques que j'ai pu mettre en place avec Xavier Lefebvre (IE, INSA) et Sébastien Pommier (Post-doc, INSA) d'une part et Jean-Pierre Gourc (Pr, LIRIGM/LTHE), Guillaume Stoltz (Doctorant, LIRIGM/LTHE) et Laurent Oxarango (MdC, LIRIGM/LTHE) d'autre part. Je tiens à leur manifester toute ma reconnaissance pour la disponibilité dont ils ont su faire preuve. Ils m'ont également permis de donner une réelle dimension expérimentale à mes travaux de thèse. Les nombreuses réunions de travail à l'INSA de Toulouse ou au LIRIGM de Grenoble ont été l'occasion

de riches échanges qui ont donné une orientation décisive à ma thèse. Enfin, l'occasion qui m'a été donné de collaborer avec ces scientifiques de haut niveau m'a parfois donné le sentiment d'animer une sorte "d'équipe biodégradation", ce qui a été une expérience extrêmement enrichissante d'un point de vue personnelle.

Je n'oublie pas également de remercier l'ensemble du personnel administratif de l'IMFT. Je pense en particulier à Suzy Bernard (IMFT), secrétaire du GEMP, qui s'est toujours démenée pour que l'ensemble de mes déplacements se fassent dans les meilleures conditions qui soient.

Finalement, ces années de thèse ont surtout été l'occasion de rencontrer des personnes dont les qualités humaines rendent les compétences scientifiques et techniques encore plus appréciables. Je remercie l'ensemble des personnes précédemment citées pour ces qualités. Pour tout bon thésard du GEMP qui se respecte, chaque journée est marquée par plusieurs moments que l'on peut qualifier de "rituels". Il y a en particulier le repas du midi et la "pause café". Ces moments sont l'occasion de rencontre ses collègues de galère pour refaire le monde ou avoir des conversations des plus fines (surtout en présence d'Yvan) sur les sujets les plus sérieux ou les plus saugrenus. Au cours de l'année, les points d'orgue de ces moments de franches rigolades et d'ivresse sont sûrement les "apéros des stagiaires" et les "apéros des nouveaux", qui, suggérés par les anciens, sont l'occasion pour les nouveaux arrivants de découvrir la vie du GEMP en partageant un bon moment. Pour tous ces bons moments passés en leur compagnie, je tiens à remercier chaleureusement Fred, Mehdi, Laurent R., Ian, Alex, Fabien, Yvan, Typhaine, Xavier, Franck, Kader, Pauline, Romain, Marie, Olivier C., Oxa, Nicolas P., Nicolas M., Ophélie, Ben, Dominique, David, Florent, Vincent, Bob et j'en oublie certainement parmi les meilleurs.

Je tiens également à saluer particulièrement Raphaël et Marie-Amélie, collègues de galère du CReeD, pour toutes les discussions et les bons moments partagés autour d'une table ou d'un verre en Sardaigne ou ailleurs.

Le bureau que j'occupais à l'IMFT ayant été désigné comme "nomade", j'ai accueilli à mes côté de nombreuses personnes que j'ai eu l'occasion de connaître plus ou moins bien. Heureusement, pour ma dernière année de galère, le bureau est devenu complètement "sédentaire" et Alex, le grand manitou du pétrole, a élu domicile au 214. Il m'est donné ici l'occasion de lui exprimer toute ma reconnaissance pour m'avoir supporter dans tous les moments difficiles de ma dernière année de thèse. Ses conseils et son recul m'ont été d'une grande utilité lorsqu'il s'est agit pour moi de batailler sur tous les fronts de la vie. Merci Alex.

Je m'attarde finalement sur la partie la plus agréable de ces remerciements, puisqu'elle vise à montrer à mes proches combien leur attention et leur affection m'ont été précieuses. J'aurais tout d'abord une pensée particulière pour "Tonton Charlot", dont la bienveillance

de tous les instants m'a été indispensable toutes ces années. Ensuite, viennent tout naturellement tous les copains de l'N7 : Nico, Rico, Mat et Céline, Guyl, Jeff, Bouli, François, Rom1, Caroline, Maria, Raquel ; avec qui tous les bons moments passés en Bretagne, en Espagne, en Provence, en Montagne ou même à Toulouse et à Paris ont été autant de bols d'air pur qui m'ont permis de me ressourcer. Je n'oublie naturellement pas Delphine, qui a partagé ma vie pendant plus de deux ans et qui a su m'apporter tout le soutien qu'elle pouvait me fournir. Qu'elle sache que je n'oublierais pas tous ces moments. Je tiens également à remercier l'ensemble de mes collègues de salsa et de rock pour les soirées d'évasion passées en leur compagnie. J'ai une pensée particulière pour Aurèle, devenue au cours des années une véritable amie, avec laquelle j'ai partagé beaucoup de bonnes choses et beaucoup de conversations enrichissantes.

Enfin je tiens particulièrement à remercier mon père, ma mère et ma jumelle Emi, à qui cette oeuvre est dédiée. Merci pour votre soutien de tous les instants. Je ne saurai jamais comment vous exprimer ma reconnaissance. Merci également à ma famille, à mes oncles et mes tantes, pour qui l'aboutissement de ces travaux est, je le sais, une véritable fierté.

Table des matières

Table des matières	viii
Table des figures	xi
Liste des tableaux	xiv
Liste des abréviations	xvi
Nomenclature	xix
Introduction	1
Déchets ménagers et filières de traitement	1
Les installations de stockage de déchet de classe II	2
Enjeux et objectifs du programme de recherche	3
1 Introduction sur les ISD Bioréacteurs	7
1.1 Introduction aux phénomènes de biodégradation	7
1.1.1 Biodégradation aérobie	8
1.1.2 Biodégradation anaérobie	9
1.1.3 Le concept de ISD bioréacteur	11
1.1.4 Enjeux et développement des ISD bioréacteurs	17
1.2 Modèle conceptuel	19
1.2.1 La matrice déchet	19
1.2.2 Biofilms	23
1.2.3 Modèles existants	26
1.2.4 Modèle retenu	39
2 Mise en place du modèle mathématique	41
2.1 Objectifs et méthode	41
2.1.1 Milieu poreux effectif	43
2.1.2 Méthodes de changement d'échelle	44

2.2	Modèle microscopique	46
2.2.1	Modélisation du biofilm	47
2.2.2	Espèces gazeuses	50
2.2.3	Cas de l'eau	51
2.2.4	Constituants du substrat solide	53
2.2.5	Equation de continuité pour la phase gaz	53
2.2.6	Equation de continuité pour la phase liquide	54
2.2.7	Equation de continuité pour la phase biofilm	54
2.2.8	Equation de continuité pour la phase solide	55
2.2.9	Quantité de mouvement	55
2.2.10	Energie	56
2.3	Modèle macroscopique	57
2.3.1	Loi de Darcy	58
2.3.2	Obtention du modèle macroscopique pour un constituant i gazeux	60
2.3.3	Obtention du modèle macroscopique pour les composants b solides	76
2.3.4	Obtention du modèle macroscopique pour l'eau	77
2.3.5	Obtention du modèle macroscopique pour l'énergie	80
2.4	Modèle mathématique final	87
2.4.1	Relations supplémentaires	87
2.4.2	Equations utilisées dans le modèle numérique	90
3	Evaluation des propriétés du matériau	93
3.1	Bilan sur les propriétés à évaluer	93
3.1.1	Paramètres décrivant l'écoulement dans le milieu poreux	93
3.1.2	Propriétés de transport	94
3.1.3	Paramètres du bilan d'énergie	95
3.1.4	Biofilm/Biodégradation	96
3.1.5	Conclusion	96
3.2	Écoulements	97
3.2.1	Pression capillaire	97
3.2.2	Porosité du déchet	102
3.2.3	Perméabilité	105
3.2.4	Viscosité de la phase gaz	114
3.2.5	Viscosité de la phase liquide	116
3.3	Transport	117
3.3.1	Masse volumique du gaz	117
3.3.2	Masse volumique de la phase liquide	117

3.3.3	Matrice de diffusion de Fick pour la phase gaz	118
3.3.4	Coefficients de diffusion dans la phase liquide	123
3.3.5	Tortuosité	124
3.3.6	Coefficients de dispersion	124
3.3.7	Coefficients d'équilibre entre phases gaz et liquide	125
3.3.8	Loi de Raoult et pression de vapeur saturante	126
3.4	Propriétés énergétiques	127
3.4.1	Evaluation des propriétés d'emménagement de la chaleur	127
3.4.2	Evaluation de la conductivité thermique des déchets	129
3.5	Biodégradation	135
3.5.1	Modèles prenant en compte l'effet de la teneur en eau	136
3.5.2	Protocole expérimental et résultats expérimentaux	137
3.5.3	Modèle de biodégradation	146
4	Développement du modèle MATAABIO	161
4.1	Enjeux numériques	161
4.1.1	Discrétisation temporelle	162
4.1.2	Discrétisation spatiale	166
4.1.3	Splitting d'opérateurs/Traitements des termes réactifs	169
4.1.4	Conditions aux limites et gestion des puits d'injection et de production	171
4.1.5	Méthode de résolution du système	173
4.2	Tests et validation	175
4.2.1	Ecoulements diphasiques	175
4.2.2	Diffusion multi constituant	186
4.2.3	Comportement du modèle : impact de la recirculation de lixiviats sur la production de biogaz	188
4.2.4	Aspect double milieu	191
4.3	Conclusion	200
5	Résultats et discussion	203
5.1	Comportement général de MATAABIO	203
5.1.1	Résultats	205
5.1.2	Ecoulements de gaz et de liquide	211
5.1.3	Transport des constituants	212
5.1.4	Production de biogaz	213
5.1.5	Température	214
5.1.6	Discussion	214
5.2	Influence du procédé de réinjection	215

5.2.1	Résultats pour la chambre d'injection	215
5.2.2	Comparaison des résultats	218
5.3	Influence de la stratégie de réinjection	221
5.3.1	Comparaison des résultats	221
5.4	Influence du débit de réinjection	224
5.4.1	Surface d'impact	224
5.4.2	Production de biogaz	226
5.5	Influence de la perméabilité du déchet	227
5.6	Conclusion et discussion	228
Conclusion et perspectives		231
Bibliographie		233
Annexes		255
A Tri MODECOM		257
B Paramètres du modèle de biodégradation		263
C Théorie de Buckley-Leverett		267

Table des figures

1	Schéma en coupe d'un casier de stockage	4
1.1	Etapas de la dégradation d'un substrat solide	8
1.2	Evolution de la composition du biogaz	11
1.3	Schéma de principe des ISD Bioréacteurs	13
1.4	Composition type des déchets ménagers en France	20
1.5	Répartition granulométrique d'un déchet provenant d'un site opéré par Onyx	22
1.6	Visualisation du développement d'un biofilm en milieu poreux modèle	24
1.7	Etapas schématisées de croissance d'un biofilm	25
1.8	Schématisation du mécanisme réactionnel aérobie	33
1.9	Schématisation du mécanisme réactionnel anaérobie	35
2.1	Différentes échelles caractéristiques	42
2.2	De l'échelle des cellules à l'échelle du biofilm	50
2.3	Équilibre chimique macroscopique : équilibre local ou non-équilibre local	74
3.1	Pression capillaire d'échantillons de déchets	98
3.2	Dispositif de mesure de pression capillaire	99
3.3	Résultats des mesures de pression capillaire réalisées par Stoltz (2007)	100
3.4	Résultats des mesures de pression capillaire en fonction de la saturation	101
3.5	Définition des différentes porosités introduites par Olivier (2003)	102
3.6	Stratification des déchets dans les ISD	105
3.7	Dispositif de mesure de la perméabilité au gaz	111
3.8	Résultats des mesures de perméabilité réalisées par Stoltz (2007)	112
3.9	Répartition des différentes catégories de déchets (% en base humide)	138
3.10	Appareil SAPROMAT	140
3.11	Tests respirométriques sur la fraction papier/carton	142
3.12	Tests respirométriques sur la fraction fermentescible	143
3.13	Effet de l'humidité sur la cinétique de production cumulée de méthane pour la fraction papier /carton	144

3.14	Obtention du fractionnement de la matière d'après le tri des déchets (base matière sèche)	148
3.15	Schéma réactif de l'ensemble des processus de biodégradation considérés . .	150
3.16	Limitation de l'activité bactérienne par la teneur en eau	158
3.17	Limitation de l'activité anaérobie par l'excès de substrat	160
4.1	Représentation 1D du maillage utilisé	168
4.2	Algorithme utilisé dans le code MATAABIO	176
4.3	Représentation schématique du test de Buckley-Leverett	177
4.4	Test de Buckley-Leverett sans effet de gravité $\underline{V}_{\lambda inj} = 1 \cdot 10^{-5}$ m/s	179
4.5	Test de Buckley-Leverett avec effet de gravité. $\underline{V}_{\lambda inj} = 1 \cdot 10^{-5}$ m/s	180
4.6	Test de Buckley-Leverett avec effet de gravité. $\underline{V}_{\lambda inj} = 1 \cdot 10^{-3}$ m/s	181
4.7	Champs de saturation obtenus par les approches de type "Darcy" ou "pseudo Richards" en régime non gravitaire	184
4.8	Champs de pression obtenus par les approches de type "Darcy" ou "pseudo Richards" en régime non gravitaire	184
4.9	Champs de pression obtenus par les approches de type "Darcy" ou "pseudo Richards" en régime gravitaire	185
4.10	Dispositif "modèle" utilisé pour tester la diffusion multi-constituant dans un mélange gazeux	187
4.11	Diffusion multi-constituant dans un mélange gazeux	188
4.12	Alvéole de stockage modèle	189
4.13	Répartition de la saturation dans le domaine	190
4.14	Evolution de la saturation et des fractions massiques aux points A et B . .	191
4.15	Différence entre les deux types de modèles à <i>double milieu</i>	194
4.16	Représentation schématique du test numérique utilisé pour observer le comportement du modèle de <i>double milieu</i>	198
4.17	Evolution des saturations dans le cas du modèle à <i>double milieu</i>	198
4.18	Evolution des saturations dans le cas du modèle à <i>double milieu</i> modifié (échange multiplié par 1000)	200
5.1	Volume de stockage modèle. Dispositif de réinjection de type "puits vertical"	204
5.2	Evolution de la saturation à la suite de l'injection de lixiviats à 15 m ³ /h via un puits vertical	205
5.3	Evolution de la fraction massique en O ₂ à la suite de l'injection de lixiviats à 15 m ³ /h via un puits vertical	206
5.4	Evolution de la fraction massique en CO ₂ à la suite de l'injection de lixiviats à 15 m ³ /h via un puits vertical	207

5.5	Evolution de la fraction massique en CH_4 à la suite de l'injection de lixiviats à 15 m ³ /h via un puits vertical	208
5.6	Evolution de la fraction massique en N_2 à la suite de l'injection de lixiviats à 15 m ³ /h via un puits vertical	209
5.7	Evolution de la température du casier à la suite de l'injection de lixiviats à 15 m ³ /h via un puits vertical	210
5.8	Production de biogaz à la suite de l'injection de lixiviats à 15 m ³ /h via un puits vertical	213
5.9	Volume de stockage modèle. Dispositif de réinjection de type "chambre d'injection"	216
5.10	Evolution de la saturation à la suite de l'injection de lixiviats à 15 m ³ /h via une "chambre d'injection"	217
5.11	Surface impactée par les deux dispositifs de réinjection	218
5.12	Evolution de la saturation en dessous du dispositif d'injection de lixiviat	219
5.13	Production de biogaz pour les deux dispositifs de réinjection	220
5.14	Production de biogaz pour différentes stratégies de réinjection via un puits vertical	222
5.15	Taux de production de méthane pour différentes stratégies de réinjection via un puits vertical	223
5.16	Production de biogaz pour différentes stratégies de réinjection via une "chambre d'injection"	223
5.17	Comparaison de la surface d'impact du puits vertical pour plusieurs débits	225
5.18	Comparaison de la distance d'impact du puits vertical pour plusieurs débits	225
5.19	Influence du débit d'injection sur la production de biogaz	226
5.20	Influence de la perméabilité du déchet sur la production de biogaz	228
A.1	Sélection de l'échantillon de déchets à trier	258
A.2	Répartition granulométrique issue du tri (en %)	259
A.3	Répartition des catégories compositionnelles (en %)	260
A.4	Fiche détaillée donnant le résultat complet du MODECOM	260

Liste des tableaux

1.1	Influence des facteurs environnementaux sur la dégradation anaérobie . . .	11
1.2	Différentes classes de déchets	22
3.1	Paramètres relatifs aux écoulements	94
3.2	Paramètres relatifs au transport par diffusion/dispersion	94
3.3	Paramètres relatifs au transport de chaleur	95
3.4	Paramètres relatifs aux termes réactifs	96
3.5	Paramètres utilisés pour modéliser la courbe de pression capillaire	101
3.6	Valeurs de porosité efficace	103
3.7	Valeurs de perméabilités intrinsèques	109
3.8	Perméabilité horizontale à la phase gaz évaluée par Jain et al. (2005) . . .	111
3.9	Coefficients utilisés pour évaluer la viscosité des gaz purs	116
3.10	Coefficients utilisés pour évaluer la viscosité de la phase liquide	117
3.11	Coefficients de diffusion binaires dans la phase liquide	124
3.12	Coefficients nécessaires au calcul des équilibres gaz/liquide	126
3.13	Coefficients utilisés pour évaluer la pression de vapeur saturante de l'eau liquide	127
3.14	Coefficients utilisés pour évaluer la capacité calorifique massique des gaz purs	128
3.15	Coefficients utilisés pour évaluer la capacité calorifique massique de l'eau liquide	128
3.17	Coefficients utilisés pour évaluer la conductivité thermique des gaz purs . .	134
3.18	Coefficients utilisés pour évaluer la conductivité thermique de l'eau liquide	134
3.19	Conductivité thermique des différents composants de la fraction solide . . .	135
3.20	Caractéristiques des échantillons de déchet	139
3.21	Liste des variables d'état à considérer dans le modèle global de biodégradation	149
3.22	Valeurs utilisées pour les humidités critiques dans le modèle de biodégradation	158
4.1	Propriétés utilisées pour réaliser le test de Buckley-Leverett	178
A.1	Différentes catégories granulométriques d'un tri MODECOM	258

A.2	Différentes catégories compositionnelles d'un tri MODECOM	258
B.1	Valeurs des paramètres utilisées dans le modèle de biodégradation	263

Liste des abréviations

DMA : Déchets Ménagers et Assimilés

CRP : Centre de Recherche sur la Propreté

OM : Ordures Ménagères

ISD : Installation de Stockage de Déchets

AGV : Acides Gras Volatiles

SWANA : Solid Waste Association of North America

STEP : Station d'Épuration

DCO ou COD : Demande Chimique en Oxygène

US EPA : United State Environment Protection Agency

HELP : Hydrologic Evaluation of Landfill Performance

T2LBM : TOUGH2 Landfill Bioreactor Model

TOUGH2 : Transport Of Unsaturated Groundwater and Heat

SUTRA : Saturated Unsaturated Transport Model

HYDRUS 2 : HYDROlogical UnSaturated simulation 2D

VER : Volume Élémentaire Représentatif

CSLM : Confocal Scanning Laser Microscopy

IbM : Individual-based Modelling

BbM : Biomass-based Modelling

DBO ou BOD : Demande Biologique en Oxygène

SQP : Sequential Quadratic Programming

MATAABIO : Modélisation Avancée du Transport Aérobie et Anaérobie dans les ISD

BIOréacteurs

FIM : Fully IMplicit

IMPES : IMplicite Pressure and Explicite Saturation

IMPSAT : IMplicite Pressure and SATuration

AIM : Adaptive IMplicite Method

TVD : Total Variation Diminishing

SNI : Standard Sequential Non-Iterative scheme

SI : Standard Sequential Iterative scheme

CFL : Courant-Friedrich-Levy

Nomenclature

Lettres grecques

$\alpha_{L\theta}$: Coefficient de dispersion longitudinale de la phase θ ($1/m$)

$\alpha_{T\theta}$: Coefficient de dispersion transversale de la phase θ ($1/m$)

ϵ : Porosité du milieu

ϵ_θ : Fraction volumique de la phase θ

η_θ : Viscosité dynamique de la phase θ ($kg/m/s$)

Γ_i : Coefficient d'équilibre thermodynamique du constituant i entre les phases gaz et liquide

Λ_θ : Conductivité thermique de la phase θ ($J/m/s/K$)

$\mu_{\theta i}$: Potentiel chimique du constituant i dans la phase θ (J/mol)

$\omega_{\theta i}$: Fraction massique du constituant i dans la phase θ (kg/kg de θ)

$\Omega_{\theta i}$: Fraction massique moyenne du constituant i dans la phase gaz

Ψ_β : Taux de production d'énergie moyen ($J/m^3/s$)

ψ_θ : Taux de production/consommation de chaleur dans la phase biofilm ($J/m^3/s$)

ρ_θ : Masse volumique de la phase θ (kg/m^3)

τ_θ : Coefficient de tortuosité de la phase θ

$\underline{\underline{\sigma}}_\theta$: Tenseur des contraintes appliqué à la phase θ ($kg/m/s^2$)

Lettres latines

$\dot{m}_{\theta\zeta i}$: Terme de transfert de masse macroscopique du constituant i entre les phases θ et ζ ($kg/m^3/s$)

T : Température moyenne (K)

$\mathcal{A}_{\theta\zeta}$: Interface entre les phases θ et ζ

- $\underline{n}_{\theta\zeta}$: Vecteur normal à l'interface $\mathcal{A}_{\theta\zeta}$
- $\underline{w}_{\theta\zeta}$: Vecteur vitesse de l'interface $\mathcal{A}_{\theta\zeta}$
- \underline{g} : Vecteur accélération de pesanteur (m/s^2)
- \underline{I} : Tenseur identité
- \underline{k}_θ : Tenseur de perméabilité à la phase θ (m^2)
- $\underline{k}_{\theta\zeta}$: Tenseur de couplage visqueux entre les phases θ et ζ (m^2)
- \underline{K} : Tenseur de perméabilité intrinsèque (m^2)
- $\underline{d}_{\gamma ik}$: Élément d'indice $i k$ de la matrice de tenseurs de dispersion du mélange gazeux (m^2/s)
- $\underline{d}_{\lambda i}$: Tenseur de dispersion du constituant i dilué dans la phase liquide (m^2/s)
- $\underline{D}_{eff\beta i}$: Tenseur de diffusion effectif du constituant i dilué dans la phase biofilm (m^2/s)
- $\underline{D}_{eff\gamma ik}$: Élément d'indice $i k$ de la matrice de tenseurs de diffusion effectifs du mélange gazeux (m^2/s)
- $\underline{D}_{eff\lambda i}$: Tenseur de diffusion effectif du constituant i dilué dans la phase liquide (m^2/s)
- $\underline{D}_{\beta i}^*$: Tenseur de diffusion/dispersion du constituant i dilué dans la phase biofilm (m^2/s)
- $\underline{D}_{\gamma ik}^*$: Élément d'indice $i k$ de la matrice de tenseurs de diffusion/dispersion du mélange gazeux (m^2/s)
- $\underline{D}_{\lambda i}^*$: Tenseur de diffusion/dispersion du constituant i dilué dans la phase liquide (m^2/s)
- $\underline{j}_{\theta i}$: Flux diffusif du constituant i dans la phase θ ($kg/s/m^2$)
- \underline{v}_θ : Vecteur vitesse local de la phase θ (m/s)
- \underline{V}_θ : Vitesse de Darcy de la phase θ (m/s)
- $C_{P\theta i}$: Capacité calorifique massique du constituant i dans la phase θ ($J/kg/K$)
- $D_{\beta i}$: Coefficient de diffusion du constituant i dilué dans la phase biofilm (m^2/s)
- $D_{\gamma ik}$: Élément d'indice i et k de la matrice de diffusion de Stefan-Maxwell traduisant la diffusion multi-constituant dans la phase gaz (m^2/s)
- $D_{\lambda i}$: Coefficient de diffusion du constituant i dilué dans la phase liquide (m^2/s)
- f_θ : Force volumique appliqué à la phase θ (m/s^2)
- $h_{\theta i}$: Enthalpie massique du constituant i présent dans la phase θ (J/kg)

- $H_{\theta\zeta}$: Courbure moyenne de la surface $\mathcal{A}_{\theta\zeta}$
 $k_{R\theta}$: Coefficient de perméabilité relative de la phase θ
 Lv_{H_2O} : Chaleur latente de vaporisation de l'eau (J/kg)
 M_i : Masse molaire du constituant i (kg/mol)
 P_γ : Pression moyenne de la phase gaz (Pa)
 P_λ : Pression moyenne de la phase liquide (Pa)
 p_θ : Pression au sein de la phase θ (Pa)
 P_C : Pression capillaire du milieu (Pa)
 $R_{\beta i}$: Taux de réaction moyen du constituant i dans la phase biofilm ($kg/m^3/s$)
 $r_{\beta i}$: Taux de réaction local du constituant i dans la phase biofilm ($kg/m^3/s$)
 S : Saturation en phase liquide du milieu
 $s_{\theta\zeta}$: Tension interfaciale sur la surface $\mathcal{A}_{\theta\zeta}$ ($kg/m/s^2$)
 t : Temps (s)
 T_θ : Température de la phase θ (K)

Indices et opérateurs

- β : Indice désignant les grandeurs se rapportant à la phase biofilm
 γ : Indice désignant les grandeurs se rapportant à la phase gaz
 λ : Indice désignant les grandeurs se rapportant à la phase liquide
 $\langle * \rangle$: Opérateur de prise de moyenne superficielle
 $\langle * \rangle^\theta$: Opérateur de prise de moyenne intrinsèque
 σ : Indice désignant les grandeurs se rapportant à la phase solide
 $\tilde{*}$: Déviation spatiale

Introduction

Déchets ménagers et filières de traitement

En France, la notion de déchet est plutôt vague. Selon le code de l'environnement, *est un déchet tout résidu d'un processus de production, de transformation ou d'utilisation, toute substance, matériau, produit ou plus généralement tout bien ou meuble abandonné ou que son détenteur destine à l'abandon*. D'un point de vue légal, suivant les cas, on distingue les déchets en fonction de leur origine : déchets ménagers ou déchets industriels, ou en fonction de leur nature (dangereux, non dangereux, inertes...). Les déchets sont répertoriés dans une "nomenclature", qui figure à l'annexe II du décret du 18 avril 2002 relatif à la classification des déchets.

Les Déchets Ménagers et Assimilés (DMA) sont les déchets issus de la collecte municipale, c'est à dire ceux produits par les ménages (OM : Ordures Ménagères), les commerçants, les artisans, et même les entreprises et industries quand ils ne présentent pas de caractère dangereux ou polluant : papiers, cartons, bois, verre, textiles, emballages. Sont également assimilés aux déchets ménagers, les déchets banals des entreprises, les encombrants en provenance des collectes spécifiques, les déchets verts, les boues de station d'épuration et divers matériaux recyclables.

Du fait de la diversité de provenance de ces déchets, leur composition est fortement hétérogène et peut varier sensiblement selon leur zone de production géographique ou la saison à laquelle ils sont collectés. Le document présenté ici s'intéresse plus particulièrement aux ordures ménagères et aux déchets industriels banals.

Compte tenu de la complexification des modes de consommation des ménages dans les pays industrialisés comme la France, les OM forment par définition un matériau fortement hétérogène qu'il est difficile de caractériser simplement. Néanmoins, en France, l'ADEME a développé une méthode précise de caractérisation des gisements de déchets basée sur le tri d'échantillons représentatifs (500 kg minimum). Cette méthode est appelée MODECOM[®]. Une caractérisation nationale par la méthode MODECOM[®] réalisée en 1993 fait office de référence quant à la composition type des OM. Le déchet type est ainsi constitué de 28,5% de matière putrescible, 25,4% de papier/carton, 11,1% de plastique

et 13,1% de verre. La fraction restante est quant à elle composée de métaux, textiles, complexes, combustibles non classés, incombustibles non classés et de déchets ménagers spéciaux. L'humidité de ce déchet type représente 35% de la matière sèche alors que la teneur en matière organique en représente 59,2%.

Pour traiter les ordures ménagères, plusieurs types d'installations réglementées existent. Les modes de traitement sont très divers et vont de l'incinération à l'enfouissement, en passant par le compostage ou la méthanisation hors sol. Dans ce document, nous nous intéressons plus particulièrement à l'enfouissement des OM et donc aux installations de stockage (ISD) de classe II. Le principe de fonctionnement de ces ISD réside dans la stabilisation naturelle de la matière organique par biodégradation. Il convient donc de séparer les OM en deux fractions distinctes : une première fraction organique biodégradable, composée principalement de la matière organique assimilable par les microorganismes et une deuxième fraction que l'on qualifiera d'"inerte biologiquement" qui est quant à elle composée à la fois de la matière minérale et de la matière organique non-assimilable par les microorganismes.

Les installations de stockage de déchet de classe II

En 25 ans, la quantité de déchets ménagers produite annuellement en France a été multipliée par trois. En 2004, un ménage français produit en moyenne 353 kg de déchets chaque année. Les emballages représentent à eux seuls 30% du poids des ordures ménagères. Ceci représente, en 2004, une production annuelle de 26,5 millions de tonnes d'ordures ménagères, dont 22 millions de tonnes proviennent directement des ménages. Les 4,5 millions de tonnes restantes étant issues de l'activité des entreprises (Ademe, 2006). En France, la filière stockage reste l'une des filières de traitement les plus utilisées. Parmi les 26,5 millions de tonnes de déchets ménagers produits en 2004, 39% ont été enfouis en installation de stockage de classe II, 43% ont été incinérés, alors que 13% ont été triés ou recyclés et que seulement 6% ont été traités biologiquement (Ademe, 2006). Il convient de noter qu'entre 2003 et 2004, la part des ordures ménagères qui a été enfouie en installation de stockage de classe II a baissé d'environ 1% au bénéfice des filières incinération et tri/recyclage, alors que la production globale de déchets ménagers a également baissé d'environ 1% sur la même période.

Ceci est lié à la modernisation de la politique de gestion des déchets sous l'influence de l'Union Européenne. Ainsi, la réduction des déchets à la source et l'encouragement à la mise en place de filières de recyclage matière et de valorisation énergétique ont été définis comme les principaux objectifs de la loi sur les déchets du 13 juillet 1992 (retranscription de la directive européenne 91/156/CE). La définition de la notion de déchet ultime (*déchet*

qui n'est plus susceptible d'être traité dans les conditions techniques et économiques du moment, notamment par extraction de la part valorisable ou par réduction de son caractère polluant ou dangereux) et la limitation de l'enfouissement à ces seuls déchets ultimes imposée en théorie à partir du 1er juillet 2002, ainsi que les normes européennes imposant la limitation des rejets polluants gazeux ou liquides, ont permis une modernisation rapide des filières de traitement des déchets par stockage.

Bien que le développement de nouvelles filières "propres" de traitement des déchets (recyclage, valorisation matière, valorisation énergétique, etc...) soit défini comme une priorité, ces filières ne peuvent pas absorber l'ensemble de la production de déchet. En conséquence, le traitement des OM en installation de stockage de classe II représente encore en France une solution incontournable de traitement. Ainsi, la France compte aujourd'hui un parc de 312 ISD de classe II d'une capacité supérieure à 3000 tonnes contre 134 incinérateurs. D'après le document Ademe (2006), le nombre de ISD de classe II est en forte diminution en France depuis la fin des années 80. Néanmoins, la taille de ces exploitation et le tonnage qui y est traité est en constante augmentation. Ceci est dû au fait que les diverses évolutions réglementaires (comme l'arrêté du 9 septembre 1997 ou plus récemment celui du 19 janvier 2006) ont entraîné la disparition des décharges sauvages et des décharges brutes pour laisser place à de véritables stations de traitement où les effluents liquides et gazeux sont gérés dans un cadre réglementaire strict. Ainsi, tout nouveau ISD de classe II construit en France doit répondre à des spécifications techniques exigeantes permettant de limiter les émissions non contrôlées dans le milieu environnant (cf. Figure 1).

Dans ce contexte législatif strict, le coût d'exploitation des ISD devient de plus en plus élevé. C'est pourquoi de nombreuses options techniques pour gagner en capacité de stockage (réduction à la source, tri, etc...), pour accélérer la production de méthane et le valoriser (préparation de la charge, réinjection de lixiviats, etc...) sont développées. C'est ainsi que le concept de bioréacteur (réinjection de lixiviat) et même de l'Ecométhaniseur[®] (procédé en 3 étapes : préparation de la charge puis recirculation de lixiviats et enfin valorisation du biogaz) ont été introduits par les industriels du milieu et en particulier Veolia Environnement.

Enjeux et objectifs du programme de recherche

Vers l'Optimisation des Procédés de stockage. La production de déchets ménagers sans cesse en augmentation et la pression législative croissante sur les installations de traitement imposent une évolution constante du métier du stockage. En particulier, le concept de ISD traditionnel a dû évoluer et les exploitants sont désormais contraints de



FIG. 1 – Schéma en coupe d'un casier de stockage du site de Plessis-Gassot (source Onyx/REP Energie)

trouver des réponses aux risques de nuisances pour les populations riveraines, mais également de prendre en compte le devenir à long terme des ISD (durée de post-exploitation). C'est dans ce contexte qu'est apparu le concept de bioréacteur. En effet, on constate dans les pays industrialisés que, malgré des filières de recyclage et de tri des OM de plus en plus développées et performantes, la teneur en matière organique biodégradable de la matière résiduelle destinée à l'enfouissement en ISD de classe II reste élevée. Dans ces conditions, le coût et la durée de post-exploitation des ISD étant élevés, le concept de bioréacteur propose à la fois de réduire la durée de post-exploitation et d'optimiser la production de biogaz par biodégradation de la matière organique. Le concept se base donc sur la recirculation des lixiviats de façon à optimiser les conditions locales de biodégradation et sur l'installation de réseaux de dégazage optimisés de façon à collecter au mieux le biogaz produit.

Cette thèse s'inscrit dans le programme de développement des procédés de type bioréacteur piloté par le Centre de Recherche sur la Propreté (CRP) du groupe Veolia Environnement. Ce programme fait intervenir divers partenaires et comporte plusieurs volets. Le premier volet est un volet expérimental transversal au sein des activités stockage du CRP et regroupe des dispositifs expérimentaux à différentes échelles : depuis l'échelle du laboratoire jusqu'à l'échelle du site en passant par diverses échelles intermédiaires. A l'échelle du site, la société Veolia Environnement exploite un ISD bioréacteur à La Vergne depuis 2002. Le deuxième volet est un volet modélisation phénoménologique et mathéma-

tique. C'est dans le cadre de ce deuxième volet que s'inscrivent les travaux de cette thèse. Les objectifs sont de plusieurs ordres :

- Développer un modèle conceptuel complet répondant aux contraintes imposées par le fonctionnement des ISD. Ceci consiste à comprendre les phénomènes bio-physico-chimiques qui régissent l'ensemble des transferts dans les ISD afin de poser les bases nécessaires au développement d'un modèle mathématique.
- Développer un modèle mathématique adapté pour décrire l'ensemble des éléments identifiés lors de la mise en place du modèle conceptuel. Le modèle mathématique doit être développé à une échelle qui permet son utilisation dans un outil de simulation.
- Obtenir l'ensemble des données nécessaires au développement de l'outil de simulation. Dans le cadre des ISD bioréacteurs, il convient en particulier de savoir déterminer les paramètres qui influencent le transfert de l'humidité au sein du massif de déchet. Il convient également de comprendre l'influence de l'humidité sur la biodégradation de la matière organique présente dans les OM.
- Enfin, l'objectif principal est de développer un outil de simulation numérique permettant de donner des éléments de réflexion et de compréhension quant au développement des procédés utilisés sur les ISD bioréacteurs (dispositif de réinjection, dispositif de drainage des lixiviats et du biogaz, stratégies de réinjection, etc...).

Organisation du mémoire. Le document présenté ici est organisé en cinq parties :

- Le premier chapitre présente une synthèse bibliographique concernant les spécificités des ISD de classe II de type bioréacteur et les travaux de modélisation des différents processus physico-bio-chimiques intervenant dans la gestion de ces sites. Une critique de ces différents modèles est ensuite présentée et les bases d'un nouveau modèle conceptuel sont proposées.
- Le deuxième chapitre présente le développement d'un modèle mathématique en accord avec les bases du modèle conceptuel présenté dans le premier chapitre. Ce modèle mathématique est obtenu à l'échelle de Darcy en appliquant une méthode de changement d'échelle au modèle à l'échelle du pore. Le système d'équations ainsi obtenu permet de décrire les transferts de masse et de chaleur au sein des ISD.
- Dans le troisième chapitre, les paramètres introduits dans le chapitre 2 sont évalués. Une attention particulière est apportée à la détermination des paramètres liés aux écoulements dans le massif poreux de déchets. Le développement d'un nouveau modèle de biodégradation basé sur l'interprétation de données expérimentales est également présenté.
- Le chapitre quatre présente le développement de l'outil de simulation numérique

- nommé MATAABIO. Il présente également des cas de validation de l'outil. En particulier, la validation des écoulements diphasiques ainsi qu'une discussion sur les conditions d'utilisation de la loi de Richards sont présentées. Le comportement du module de biodégradation dans différentes conditions simples est également abordé.
- Le chapitre cinq présente des résultats de simulation dans des cas complexes. Il s'intéresse en particulier à l'aspect réinjection et présente une comparaison de différents dispositifs de réinjection, de différentes modalités de réinjection ainsi que de différentes stratégies de réinjection.

Chapitre 1

Introduction sur la problématique des ISD Bioréacteurs

1.1 Introduction aux phénomènes de biodégradation

Le traitement des ordures ménagères (OM) par voie non-thermique est basé sur un principe simple appelé biodégradation. Placées dans des conditions de température et d'humidité favorables, du fait de leur teneur en matière organique élevée, les OM représentent un lieu de développement favorable d'une flore microbologique. Le terme biodégradation désigne la transformation (partielle ou complète) de la matière organique présente dans les déchets ménagers en composés minéraux et gazeux par ces microorganismes. Comme le soulignent Miller and Clesceri (2003), la biodégradation est un phénomène complexe du fait de la diversité du substrat organique présent dans les OM, de la diversité des conditions environnementales (température, teneur en eau, etc.), ainsi que de la variété importante de microorganismes susceptibles de se développer en fonction des conditions qui leurs sont fournies. La biodégradation peut néanmoins se décomposer en plusieurs étapes, qui diffèrent suivant que le milieu soit en condition aérobie ou anaérobie. Que les conditions soient aérobies ou anaérobies, la première étape des processus de biodégradation est une étape d'hydrolyse au cours de laquelle les molécules organiques complexes sont transformées en molécules de plus petites tailles sous l'action d'enzymes (Gray et al., 1971). Ce sont ces molécules de plus petites tailles qui sont indispensables aux réactions biologiques qui suivent. Le processus réactionnel (voie aérobie ou anaérobie) qui suit cette première étape d'hydrolyse est conditionné par la présence ou non d'oxygène dans le milieu (cf. Figure 1.1).

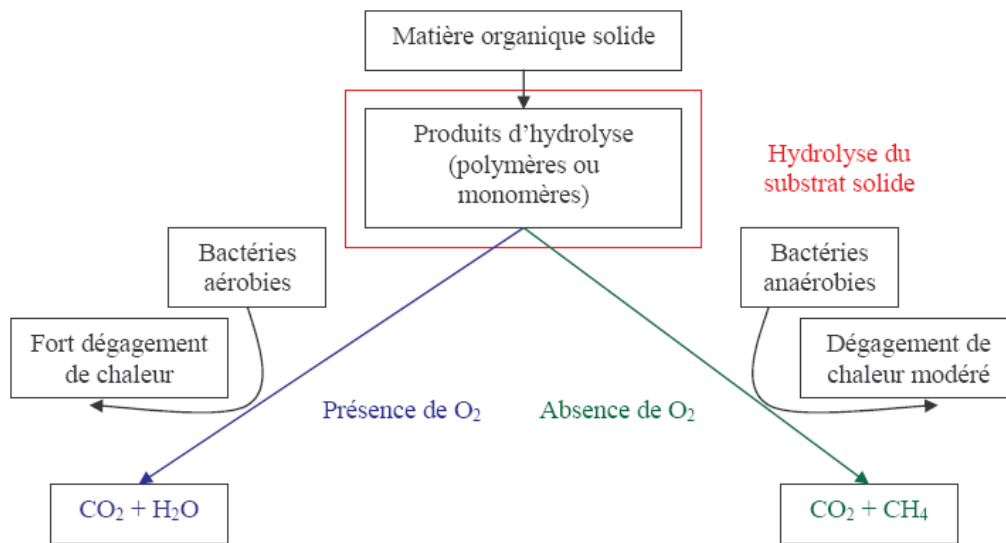


FIG. 1.1 – Etapes de la dégradation d'un substrat solide (source : Aguilar-Juarez (2000))

1.1.1 Biodégradation aérobie

La biodégradation aérobie est utilisée pour la stabilisation des déchets par les procédés assimilés au compostage. En condition aérobie, une grande diversité de micro-organismes pré-existants dans les déchets consomment l'oxygène pour minéraliser la fraction organique des OM en CO_2 et H_2O (Mustin, 1987). La biodégradation aérobie de la matière organique contenue dans les OM est un mécanisme complexe qui est généralement caractérisé par sa forte exothermicité (2830 kJ pour une mole de glucose dégradée (Gourdon, 2002)). Les modifications des conditions thermiques engendrées par l'activité biologique aérobie entraînent une adaptation importante de la flore microbienne à son environnement thermique au cours des processus aérobies. En règle générale, l'évolution temporelle de la température au sein d'un massif de déchets en conditions aérobies permet de définir quatre phases différentes au cours de la dégradation aérobie (Francou, 2003).

- Une fois la colonisation du substrat effectuée par les microorganismes, la première étape de la biodégradation aérobie de la matière organique présente dans les déchets est la phase *mésophile*. Cette phase est caractérisée par la forte production de chaleur engendrée par l'activité microbienne (principalement bactéries et champignons) sur la matière organique facilement biodégradable présente initialement.
- Suite à la phase mésophile, la température atteint rapidement un niveau élevé (entre 65°C et 70°C). Débute alors la phase *thermophile*, au cours de laquelle seuls les microorganismes résistants à des niveaux thermiques élevés (essentiellement des bactéries) peuvent survivre. Au cours de cette phase, une part importante de la matière organique consommée par voie aérobie est transformée, principalement sous forme

de CO_2 . Sous l'effet de la chaleur, l'eau présente dans le milieu est également transformée de manière plus intense par évaporation.

- La diminution de la quantité de substrat organique liée à la phase thermophile entraîne ensuite une phase de *refroidissement* liée au faiblissement de l'activité microbienne. Les pertes thermiques dues aux échanges avec l'air ambiant ou à l'évaporation sont alors plus importantes que la chaleur produite par la consommation aérobie de la matière organique. La chute progressive de la température dans le milieu donne à nouveau des conditions favorables aux microorganismes mésophiles pour coloniser le milieu.
- Commence alors la phase de *maturation*, au cours de laquelle les processus d'humification et de dégradation de la matière organique lentement biodégradable dominant.

L'exploitation industrielle de la biodégradation aérobie de la fraction organique biodégradable contenue dans les OM peut se faire suivant différentes formes suivant les procédés utilisés. Le détail de ces procédés n'est pas donné ici puisque nous focalisons notre étude sur les ISD de classe II au sein desquels l'oxygène atmosphérique est un composé indésirable. Néanmoins, la biodégradation aérobie joue un rôle important pendant la phase d'exploitation (remplissage) des ISD. En effet, au cours du remplissage des alvéoles de stockage, la couche supérieure du massif de déchets est en contact avec l'air ambiant et l'activité microbienne y est majoritairement aérobie. Ceci permet au massif de monter en température (jusqu'à $65^\circ C/70^\circ C$) et ainsi de fournir aux processus anaérobies des conditions initiales favorables (Lanini, 1998; Aguilar-Juarez, 2000; Lefebvre et al., 2000; Aran, 2001). De plus, comme nous le verrons par la suite, l'oxydation aérobie de la fraction organique rapidement biodégradable protège ensuite les populations microbiennes anaérobies d'une inhibition par accumulation d'acides (Barlaz et al., 1989).

1.1.2 Biodégradation anaérobie

La première étape des processus anaérobies est une étape d'hydrolyse de la matière organique solide en molécules hydrolysées complexes. Cette étape est commune à l'ensemble des processus de biodégradation qu'ils soient aérobie ou anaérobies. La biodégradation anaérobie des produits de cette hydrolyse englobe un ensemble complexe de réactions biologiques couplées. Au terme de ces processus réactionnels, les produits de réaction majoritaires sont les gaz CO_2 et CH_4 , qui forment un mélange gazeux quasi équimolaire autrement appelé biogaz. Les étapes de formation de ces composés par l'activité microbienne anaérobie sont au nombre de trois (Farquhar and Rovers, 1973; Pohland and Al-Yousfi, 1994) :

- La première phase de la digestion anaérobie de la matière organique est l'*acidogénèse*.

Elle consiste à transformer les molécules hydrolysées complexes en Acides Gras Volatiles (AGV), alcools, acides aminés, hydrogène et dioxyde de carbone. Cette étape est réalisée par des microorganismes anaérobies facultatifs, c'est à dire que cette étape de la dégradation anaérobie peut être initiée en présence d'oxygène.

- Ensuite les AGV issus de l'acidogénèse sont consommés et transformés par les bactéries acétogènes en acétates (AGV le plus simple), dioxyde de carbone et hydrogène. Cette étape est donc appelée *acétogénèse*. Les bactéries acétogènes sont anaérobies strictes et sont susceptibles de se développer dans des milieux riches en CO_2 ou H_2 .
- La dernière étape du processus est la *méthanogénèse*. Les bactéries responsables de cette étape sont des archaebactéries. On distingue généralement deux types de méthanogénèse : d'une part, la méthanogénèse hydrogénophile au cours de laquelle les bactéries méthanogènes transforment le CO_2 et le H_2 en méthane et en eau et, d'autre part, la méthanogénèse acétoclaste qui transforme les acétates obtenus lors de l'acétogénèse en méthane et dioxyde de carbone. Néanmoins, la méthanogénèse acétoclaste représente la voie principale de production de biogaz dans les conditions de stockage.

L'ensemble des trois phases de méthanisation décrites précédemment sont indissociables et forment un schéma réactionnel appelé fermentation méthanique. A l'inverse des processus aérobie, la biodégradation anaérobie est faiblement exothermique (401 kJ pour une mole de glucose dégradée en trois moles de CH_4 et trois moles de CO_2 (Gourdon, 2002)). Cette faible production de chaleur est en règle générale à peine suffisante pour compenser les dissipations thermiques (Lefebvre et al., 2000) liées au contact avec le milieu environnant (sol et atmosphère). Comme nous l'avons signalé précédemment, les températures optimales pour l'activité des méthanogènes se situant entre 30°C et 55°C (Gourdon, 2002), une courte période de biodégradation aérobie précédant le lancement des processus anaérobie, permet de donner des conditions thermiques favorables aux microorganismes anaérobies. Il convient d'ailleurs de signaler que les processus anaérobies sont complètement inhibés pour des températures inférieures à 20°C (Gourdon, 2002).

Compte tenu de la succession "en cascade" des différentes phases théoriques intervenant dans les processus de biodégradation anaérobie, la composition du gaz produit par l'activité microbienne renseigne sur les processus biologiques actifs au sein du massif de déchet. Le suivi en temps réel de la composition du biogaz produit dans les ISD permet donc de caractériser les différentes étapes de la vie des ISD après la période d'exploitation. Ainsi, la Figure 1.2, introduite par Farquhar and Rovers (1973), présente l'évolution caractéristique de la composition du biogaz au cours de la stabilisation des OM en ISD. Les différentes étapes de biodégradation présentées précédemment y apparaissent clairement et sont caractérisées par une composition de gaz spécifique.

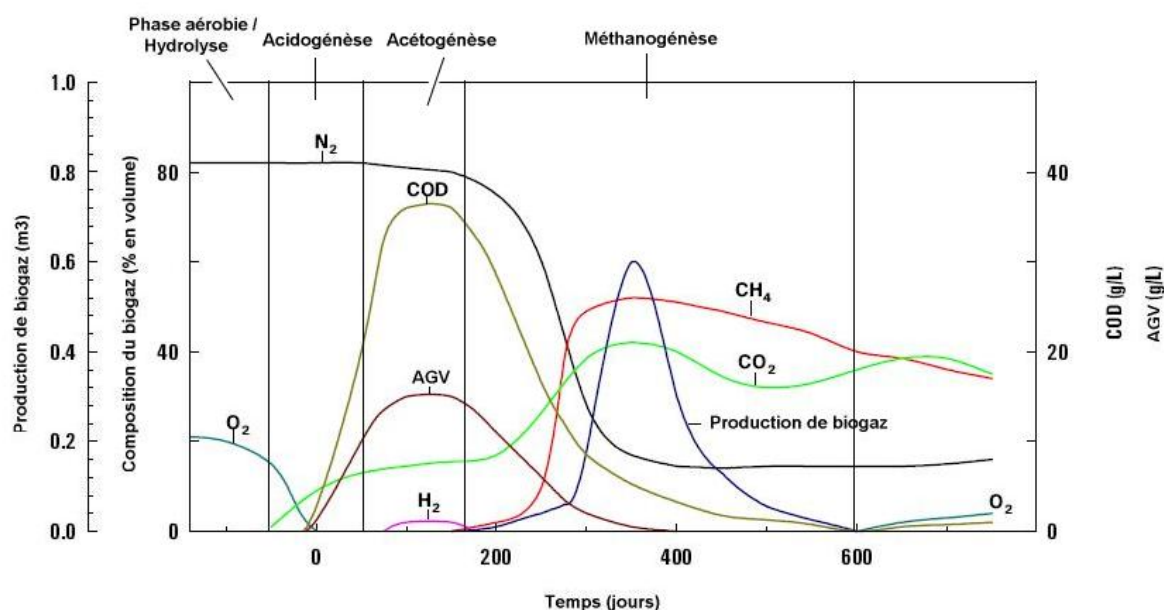


FIG. 1.2 – Evolution typique de la composition du biogaz dans un ISD au cours du temps (Farquhar and Rovers, 1973)

1.1.3 Le concept de ISD bioréacteur

L'installation de conditions favorables au développement des microorganismes anaérobies peut être longue, puisque plusieurs facteurs environnementaux peuvent avoir un impact important, soit favorable, soit inhibiteur sur le développement de la flore anaérobie. Ainsi, dans sa thèse Yuen (1999) résume l'état des connaissances sur ces facteurs influençant l'activité anaérobie dans les OM (cf. Tableau 1.1). C'est de ce constat qu'est apparue l'idée de contrôler les conditions internes au massif de déchet de façon à favoriser et accélérer la biodégradation des OM. Le ISD bioréacteur est l'un des concepts qui découle de cette idée.

TAB. 1.1 – Influence des facteurs environnementaux sur la dégradation anaérobie en ISD Yuen (1999)

Facteurs environnementaux	Critères / Commentaires	Travaux de référence
Humidité	Humidité optimale : 60% ou plus (par rapport à la masse sèche)	Pohland and R. Harper (1986) et Rees (1980)
Oxygène	Potentiel redox optimal pour la méthanogénèse : -200mV -300mV < -100mV	Farquhar and Rovers (1973) Christensen and Kjeldsen (1989) Pohland (1980)

Facteurs environnementaux	Critères / Commentaires	Travaux de référence
pH	pH optimal pour la méthanogénèse 6 à 8 6,4 à 7,2	Ehrig (1983) Farquhar and Rovers (1973)
Alcalinité	Alcalinité optimale pour la méthanogénèse : 2000 mg.L ⁻¹ Concentration maximale en acides organiques pour la méthanogénèse : 3000 mg.L ⁻¹ Rapport maximal acide acétique/alcalinité pour la méthanogénèse : 0,8	Farquhar and Rovers (1973) Farquhar and Rovers (1973) Ehrig (1983)
Température	Température optimale pour la méthanogénèse 40°C 41°C 34 - 38 °C	Rees (1980) Hartz et al. (1982) Mata-Alvarez and Martinez-Viturtia (1986)
Hydrogène	Pression partielle en hydrogène optimale pour l'acétogénèse < 10 ⁻⁶ atm	Barlaz et al. (1987)
Nutriments	Généralement en quantité suffisante dans les OM sauf dans certaines zones localisées dues aux hétérogénéités du substrat	Christensen and Kjeldsen (1989)
Sulfate	Concentration trop élevée ralentit la méthanogénèse	Christensen and Kjeldsen (1989)
Inhibiteurs	Concentration de certains cations engendrant une inhibition modérée (mg/L) : Sodium 3500 - 5500 Potassium 2500 - 4500 Calcium 2500 - 4500 Magnésium 1000 - 1500 Ammonium (total) 1500 - 3000 Métaux lourds : pas d'influence Composés organiques : inhibiteurs à concentrations élevées	McCarty and McKinney (1961) Ehrig (1983) Christensen and Kjeldsen (1989)

Le concept de bioréacteur est dérivé des procédés de biotechnologie industrielle. A l'origine le terme bioréacteur désigne des installations de laboratoire, étanches, au sein desquelles un polluant est dégradé par une biomasse adaptée. Dans le domaine du stockage des déchets, le terme de "bioreactor landfill" (décharge bioréacteur) a été introduit pour

la première fois par la SWANA (Solid Waste Association of North America) et défini comme "toute décharge où l'on injecte des liquides ou de l'air dans le massif de déchets de façon contrôlée de manière à en accélérer la biostabilisation". Ce concept diffère donc de la vision traditionnelle de la décharge conventionnelle ("dry tomb") par le fait que le massif de déchet est vu comme un réacteur biologique au sein duquel on contrôle au maximum les procédés de biodégradation de la matière organique présente dans les OM. La définition du concept n'est pas restreinte aux seules unités de stockage équipées de procédés de réinjection de lixiviats. Elle englobe également les bioréacteurs aérobies et l'ensemble des sites munis de procédés d'injection contrôlée d'eau de pluie ou de boues de stations de traitement d'eaux usées (Pacey et al., 1999). Néanmoins, Warith et al. (2005) précisent, dans leur état de l'art sur la technologie bioréacteur, que dans la majorité des cas, seuls les lixiviats sont réinjectés. C'est ce type de bioréacteur anaérobie qui est représenté sur la Figure 1.3.

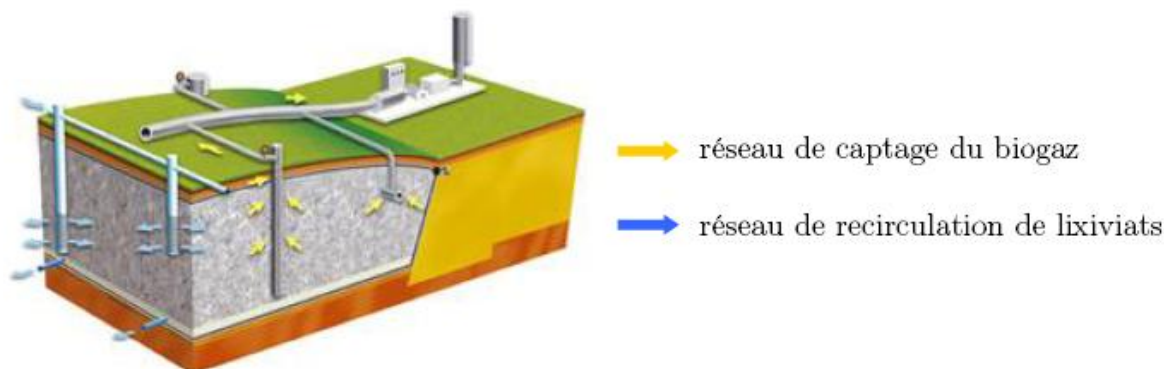


FIG. 1.3 – Schéma de principe des ISD Bioréacteurs (source CRP (2000))

Selon Pohland (1975) ou Pohland and Al-Yousfi (1994), même si la biodégradation de la matière organique dépend de plusieurs facteurs comme le signale Yuen (1999), la teneur en eau locale du massif de déchet est le principal facteur influençant la biodégradation des déchets (cf. Tableau 1.1). C'est pourquoi, la plupart des travaux expérimentaux visant à développer les procédés "bioréacteurs" s'est focalisée sur la gestion de la teneur en eau au sein des alvéoles de stockage. Dans cette optique, depuis les années 70, un nombre important d'études de laboratoire a mis en évidence l'intérêt de la recirculation des lixiviats sur la stabilisation des déchets (Pohland, 1975). La taille des dispositifs expérimentaux varie entre l'échelle d'une colonne et celle de lysimètres de tailles quasi-industrielles. Par exemple, San and Onay (2001) utilisent une cellule de laboratoire en PVC cylindrique de diamètre 0,35 m, de 1 mètre de hauteur, remplie d'un déchet modèle. Le système est maintenu dans un environnement à 34°C. Un système de collecte et de réinjection de lixiviats ainsi qu'un système de collecte de biogaz équipent la cellule. Diverses fréquences de

réinjection sont testées. Le premier effet bénéfique de la recirculation est une accélération notoire des cinétiques de production de biogaz. Un autre impact positif observé par San and Onay (2001) est une stabilisation plus rapide du déchet et une décroissance de la demande chimique en oxygène dans les lixiviats. Sur le même principe, Sponza and Agdag (2004) simulent les conditions de bioréacteur en laboratoire en utilisant une cuve en plexiglas cylindrique de 30 centimètres de diamètre et de 1 mètre de hauteur. La cellule est hermétiquement fermée à l'aide d'un joint en silicone et un système de régulation de température maintient le système à 35°C. Un échantillon de déchet ménager issu de la restauration collective est placé dans la cuve, et une injection cyclique simulant les conditions atmosphériques réelles est utilisée. Trois cellules fonctionnent en parallèle. La première fonctionne sans aucune recirculation, la deuxième est soumise à un débit de recirculation de 9 litres par jour alors que la troisième est soumise à un débit de 21 litres par jour. Les résultats de cette étude montrent, tout d'abord, que la recirculation des lixiviats permet une diminution sensible de la concentration en acides gras volatiles et de la demande chimique en oxygène des lixiviats. Ceci est associé à une stabilisation plus rapide du massif de déchet. En effet, Sponza and Agdag (2004) observent un volume de biogaz produit plus important dans le cas des cellules soumises à recirculation. Néanmoins, il est important de signaler que le volume de biogaz produit est moins important pour un débit de réinjection de 21 litres par jour que pour un débit de 9 litres par jour. Il semble donc qu'il y ait un *débit de réinjection optimal*. Les conclusions de ces travaux mettent donc en évidence une fois encore l'influence de la teneur en eau du déchet sur les cinétiques de biodégradation anaérobie. Cet impact semble être valable dans les deux sens : une teneur en eau trop faible est inhibitrice de l'activité bactériologique, mais une teneur en eau trop importante également. Cette observation avait déjà été introduite par Gurijala and Sulfito (1993), qui évoquent comme explication le fait que, pour des teneurs en eau trop élevées, les bactéries sont trop diluées dans la phase liquide pour pouvoir avoir une activité de fermentation. D'autres expériences de laboratoire sur des échantillons de déchets de tailles plus modestes ont été réalisées. Par exemple, Mora-Naranjo et al. (2004) ou Pommier et al. (2006) travaillent sur des échantillons de déchets de quelques grammes. Ces échantillons sont placés dans des fioles étanches et thermostatées à 55°C pour Mora-Naranjo et al. (2004) et à 25°C pour Pommier et al. (2006). La teneur en eau de ces échantillons est maintenue constante et varie de 27 % (masse d'eau par masse de déchet sec) jusqu'à la saturation du déchet. Les résultats de ces expériences montrent une relation linéaire entre le taux de production de méthane et la teneur en eau du déchet. L'influence de ce paramètre sur la production de biogaz semble prépondérante puisque la production de gaz est plus importante (environ 3 fois plus pour Mora-Naranjo et al. (2004) et 5 fois plus pour Pommier et al. (2006)) à saturation qu'à faible teneur en eau. Cependant aucune inhibition pour des teneurs en eau

élevées n'est identifiée. L'ensemble de ces études de laboratoire souligne l'impact positif de l'apport d'humidité sur l'activité de la flore anaérobie et en particulier sur les microorganismes responsables des étapes d'hydrolyse et d'acidogénèse (Yuen, 1999). Néanmoins, l'accélération des processus d'acidogénèse peut rapidement conférer au massif de déchet un pH trop faible pour que l'activité anaérobie se poursuive. Les lixiviats alors produits sont de pH acides puisque chargés en acides organiques. La réinjection de ces lixiviats peut inhiber complètement les processus anaérobies si le déchet présente un pouvoir tampon insuffisant (Kinmann et al., 1987; Lornage, 2006). A l'inverse, comme le présente (San and Onay, 2001), la réinjection de lixiviats, dont le pouvoir tampon est important, peut permettre d'atteindre des niveaux de pH convenables dans des massifs de déchets de pH initialement trop faibles pour permettre le développement de la flore méthanogène.

Les tests de l'impact de la teneur en eau sur la biodégradation ne se limitent pas à des essais en laboratoire. Comme l'indique Warith et al. (2005) dans son état de l'art, un nombre important de tests de réinjection sur site ont été menés depuis le début des années 90 sur des sites existants, qui ont été instrumentés pour l'occasion. Par exemple, Townsend et al. (1996) instrumentent une décharge de Floride avec des systèmes de réinjection de façon à observer une éventuelle amélioration de la stabilisation du massif. Le carottage des zones de réinjection avant et après installation du dispositif indique bien que la réinjection de lixiviat permet d'obtenir des teneurs en eau plus homogènes et plus élevées. En revanche, les systèmes de collecte de biogaz étant trop proches des dispositifs d'injection, ceux-ci ne permettent pas de contrôler les cinétiques de production de gaz. En effet, le gaz extrait possède une forte teneur en eau du fait de la présence voisine du système de réinjection. Aucune conclusion sur les cinétiques de biodégradation anaérobie ne peut donc être tirée. L'équipe de recherche de D. Reinhart (Reinhart and Al-Yousfi, 1996; Reinhart, 1996) compile également les données obtenues par le suivi de réinjection d'une dizaine de sites aux USA pendant une période d'environ cinq années. Ces études permettent de confirmer l'effet positif de la recirculation de lixiviats sur la production de biogaz, comme le suggèrent les nombreuses études de laboratoire. De la même manière, Warith et al. (2001) étudient les impacts d'une longue période de recirculation sur le comportement physique et mécanique d'un ISD. En effet, les tests de recirculation présentés dans leur étude durent 8 ans sur un ISD de l'Ontario au Canada. La principale conclusion qu'ils en tirent est que la recirculation a un effet bénéfique sur la production du biogaz et donc sur la stabilisation du déchet. Néanmoins, aucune relation quantitative ne peut en être tirée. Enfin, Mehta et al. (2002) comparent le comportement de deux alvéoles de stockage sur le site de Yolo County en Californie. La première alvéole est munie d'un système de réinjection de lixiviats alors que la seconde ne l'est pas. Une série de prélèvements sur chacune des deux alvéoles montre qu'en présence de recirculation la teneur en eau des

échantillons prélevés est plus importante et que la production de biogaz l'est aussi. La conclusion des auteurs est donc que la recirculation permet d'obtenir des teneurs en eau plus élevées, ce qui favorise l'activité biologique. Néanmoins, ils signalent la nécessité de bien concevoir le système de réinjection de façon à obtenir une répartition des teneurs en eau la plus uniforme possible.

Warith et al. (2005) signalent qu'il existe d'autres techniques que la réinjection simple de lixiviats pour accélérer les processus de biodégradation anaérobie de la fraction organique des déchets ménagers. Il mentionne par exemple l'effet positif de l'addition d'inocula comme des boues de STEP (Station d'Épuration) ou de l'adjonction de nutriments aux lixiviats réinjectés. Néanmoins, tout comme la recirculation de lixiviats, ce type de procédés reste sujet à controverse puisque leur efficacité sur site n'est pas évidente et dépend grandement de la composition du déchet et de son hétérogénéité (Yuen, 1999).

Finalement, Reinhart et al. (2002) dressent un bilan de l'état des connaissances au sujet des ISD bioréacteurs. Les avantages de ce type d'installation sont avérés :

- accélération de la production de biogaz. La valorisation potentielle du biogaz ainsi produit (valorisation énergétique) est facilitée.
- accélération de la stabilisation du massif de déchet, réduisant ainsi la durée et le coup de la période de post-exploitation.
- augmentation de la qualité des lixiviats en terme de charge organique (diminution de la DCO), le rendant ainsi plus facile à traiter et diminuant le risque en cas de fuite dans le système d'étanchéité du site. Néanmoins, il semble que la recirculation de lixiviats puisse engendrer une augmentation de la concentration de certaines espèces d'ions (les métaux et l'ammoniaque en particulier).
- gain de vide de fouille lié au tassement plus rapide du massif de déchet sous l'effet de la biodégradation. Ceci laisse penser que la quantité de déchets stockés dans une même alvéole pourrait être plus importante. Néanmoins, ce même tassement peut avoir des conséquences néfastes sur l'intégrité de la couverture et les dispositifs de captage de gaz ou de réinjection de lixiviats.

Binder and Bramryd (2001) concluent également sur l'intérêt environnemental des ISD bioréacteurs du fait du contrôle accru des différents flux de polluants gazeux et liquides pouvant être émis par ces centres de stockage. C'est ainsi que les autorités pour la protection de l'environnement américaines ou irlandaises préconisent explicitement l'installation de dispositifs de recirculation de lixiviats lors de la construction de nouveaux ISD (Carey et al., 2000; Pacey et al., 1999). Même si, pour beaucoup d'auteurs, la recirculation de lixiviats, et plus généralement le contrôle de la teneur en eau locale, ont un avenir prometteur, il convient de mentionner que l'optimisation des procédés de biodégradation ne dépend pas uniquement du contrôle de la teneur en eau et que, dans certains cas, d'autres

dispositifs doivent être mis en place. Il existe notamment des cas où la recirculation de lixiviats ne permet pas d'augmenter la production de biogaz et ou d'autres formes d'optimisation, comme par exemple la séparation des étapes d'acidogénèse et de méthanogénèse, donnent de meilleurs résultats (Komilis et al., 1999).

1.1.4 Enjeux et développement des ISD bioréacteurs

Bien que le concept de bioréacteur soit aujourd'hui internationalement reconnu comme l'une des principales alternatives pour le traitement "durable" des OM, la mise en application à l'échelle industrielle est encore jeune et le retour d'expérience encore faible. Dans son état de l'art sur les techniques de stockage de type bioréacteurs, Reinhart et al. (2002) mentionnent par exemple que quelques 130 sites pratiquent la recirculation de lixiviats aux Etats-Unis. L'ensemble de ces sites fait l'objet d'études et les données collectées sont utilisées par l'Agence de Protection de l'Environnement américaine (US EPA) pour orienter les programmes de recherche et tenter de donner une certaine normalisation aux procédés et techniques utilisées (US EPA, 2002). Néanmoins, comme le mentionnent Benson et al. (2005, 2007), le suivi et l'instrumentation des sites restent encore trop aléatoire ou insuffisant. Hormis quelques sites comme celui de Yolo County, très peu de ISD bioréacteurs font l'objet d'un suivi poussé. De même en Europe, et en particulier en France, le concept de ISD bioréacteur devient petit à petit une alternative aux méthodes classiques de traitement des OM, et le cadre législatif encadrant les pratiques de type bioréacteur prend forme. Ainsi, l'arrêté ministériel du 19 janvier 2006 complétant l'arrêté de 1997 mentionne la possibilité d'utiliser "la re-circulation de lixiviats destinée à accroître la cinétique de production de biogaz". A l'échelle industrielle quelques sites de type bioréacteur (La Vergne, Sydom du Jura) sont en fonctionnement en France. Néanmoins, le manque de retour d'expérience à l'échelle des sites en post-exploitation ne permet pas d'apporter la confirmation des résultats obtenus en laboratoire et de fournir une normalisation concernant les pratiques à mettre en œuvre sur site de façon à obtenir le résultat escompté.

Prenons l'exemple des bioréacteurs anaérobies qui utilisent le principe de réinjection de lixiviats comme "catalyseur" des procédés de biodégradation. Dans ce type d'installation, la gestion optimisée des processus de réinjection est primordiale pour le bon fonctionnement du site. Un nombre de paramètres important permet de gérer les procédés de réinjection, mais le débit, la fréquence et le type de dispositif utilisé sont les principaux. En ce qui concerne les dispositifs de réinjection, aucune normalisation n'existe et différents systèmes sont utilisés. Nous pouvons distinguer trois grands types de systèmes de réinjection.

Aux Etats-Unis, par exemple, la majorité des ISD pratiquant la recirculation de lixiviats utilisent un réseau de drains horizontaux, qui permet en théorie d'obtenir une répartition plus homogène des quantités réinjectées dans le plan horizontal (Reinhart et al., 2002). Néanmoins, ce type de dispositif, suivant la façon dont il a été conçu, peut poser un certain nombre de problèmes pendant l'exploitation des ISD bioréacteurs. Le plus important de ces problèmes est le risque de détérioration du réseau au cours du temps, du fait des tassements différentiels parfois importants que l'on peut observer sur site. Ces différences de tassements locales peuvent être liées à la modification structurelle du déchet du fait de l'addition d'eau dans les zones de réinjection ou du fait de l'action de la biodégradation (US EPA, 2002; Olivier, 2003). De plus, dans le cas où l'on utilise des drains de réinjections horizontaux, il est nécessaire d'installer le dispositif à la conception même de l'ISD, ce qui peut s'avérer contraignant. Comme le signalent Benson et al. (2005), sous l'impulsion de l'US EPA, l'ensemble des ISD bioréacteurs américains bénéficie d'une certaine normalisation des pratiques, excepté pour le dimensionnement et l'exploitation des réseaux de réinjection de lixiviat.

Afin de s'affranchir du risque de dégradation par tassements des réseaux de réinjection, il est possible d'utiliser un réseau de recirculation vertical. Cette technique est moins populaire que la précédente, mais quelques sites en sont équipés aux Etats-Unis ou en Europe (comme sur le site de La Vergne par exemple). Le principal avantage de ce type de dispositif est qu'il est moins sensible à l'influence des tassements. Néanmoins, l'utilisation de puits de réinjection verticaux peut favoriser l'entrée d'air et donc d'oxygène dans le massif de déchet. Ceci peut donc engendrer l'apparition de zones de dégradation aérobie et, dans le pire des cas, favoriser l'apparition de feux de décharge (US EPA, 2002). De plus, même si les résultats expérimentaux ne permettent pas encore de porter des conclusions définitives, il semble que la réinjection de lixiviats via un réseau de puits verticaux localise la biodégradation des déchets dans les zones voisines des puits. Ceci pourrait à terme expliquer la diminution rapide de la perméabilité au voisinage du système et l'apparition de chemins préférentiels (US EPA, 2002).

Enfin, les recherches récentes tendent à développer de nouveaux dispositifs de réinjection qui combinent les avantages des systèmes de recirculation verticaux et horizontaux. Parmi ces dispositifs, on peut citer le système de "blanket" testé par Khire and Haydar (2005). Ces "blankets" sont composés d'un drain de réinjection cylindrique perforé sur toute sa longueur et connecté à une couche drainante d'épaisseur 5 mm et de dimension $12 \times 34 \text{ m}^2$. Ces dispositifs sont placés quasi-horizontalement dans le massif de déchet et permettent en théorie d'obtenir une zone de réinjection minimale d'une surface de $12 \times 34 \text{ m}^2$. Les tests menés par Khire and Haydar (2005) confirment l'intérêt de ce type de dispositif pour obtenir une meilleure homogénéisation des quantités recirculées. En re-

vanche, compte tenu de l'épaisseur du dispositif (5 mm), l'obstruction rapide et complète du dispositif est à craindre.

L'objectif de l'ensemble de ces techniques est bien entendu d'obtenir une répartition la plus homogène possible de la teneur en eau au sein du massif de déchets. Néanmoins, peu d'études expérimentales sur site ou en laboratoire permettent de conclure quant à l'efficacité de l'une ou l'autre techniques. De plus, comme le signalent Reinhart et al. (2002), le choix des paramètres de réinjection, comme la quantité de lixiviats réinjectée, sont fonction de la qualité du déchet (teneur en eau initiale, capacité au champ, propriétés de transport, etc...).

Finalement, les ISD bioréacteurs nécessitent une mise au point technique de qualité afin d'être efficaces et de répondre au cahier des charges économique et environnemental souhaité. En effet, le dimensionnement de l'ensemble des dispositifs techniques mis en œuvre et l'optimisation globale de l'installation nécessitent de comprendre en détail les mécanismes complexes et couplés mis en jeu lors de la vie d'un bioréacteur. Tel est l'enjeu du travail de modélisation que nous nous proposons de mettre en place.

1.2 Modèle conceptuel

Dans cette partie, nous réalisons une synthèse des approches de modélisation des ISD que l'on peut trouver dans la littérature. Nous abordons également les points élémentaires qui doivent apparaître dans le modèle conceptuel que nous développons. Nous précisons en particulier les objectifs de la démarche de modélisation que nous adoptons en rapport avec les phénomènes que nous cherchons à modéliser.

1.2.1 La matrice déchet

La matrice solide formée par les OM est complexe. En effet, elle présente une forte hétérogénéité de composition, de dimension ainsi que de propriétés physiques. Ce sont ces hétérogénéités qui accentuent la complexité des phénomènes qui régissent la vie des ISD bioréacteurs. Ainsi, malgré de nombreux travaux en laboratoire de qualité, l'hétérogénéité de la matrice solide ne permet souvent pas le transfert d'information de l'échelle du laboratoire vers l'échelle du site. Comme le signalent Benson et al. (2007), du fait de la complexité de la matrice solide, les résultats obtenus en laboratoire sont souvent éloignés des informations empiriques obtenues sur site réel. Une description détaillée de l'ensemble des phénomènes mis en jeu dans les ISD doit donc intégrer l'effet de ces hétérogénéités si l'on veut pouvoir effectuer le transfert des informations aux différentes échelles d'expérimentation.

1.2.1.1 Composition

Les déchets ménagers forment un substrat complexe, dont la composition comporte une variabilité géographique, temporelle, sociale et économique importante. On imagine aisément par exemple que suivant la région de collecte (rurale ou citadine) ou la saison, la proportion de déchets alimentaires ou de plastique dans les OM puisse varier du simple au double. Or, l'action des bactéries sur un substrat organique est largement conditionnée par la nature de ce dernier. La composition du déchet est donc un facteur important qu'il est nécessaire de prendre en compte si l'on veut modéliser correctement la dégradation des déchets. En effet, la gestion moderne des ISD est intimement liée à la composition des déchets puisque celle-ci contrôle les quantités de biogaz et de lixiviats émises. A partir de cette constatation un certain nombre de méthodologies pour caractériser la composition des déchets ont été mises en place (McCauley-Bell et al., 1997). En France, la méthodologie utilisée pour caractériser le déchet est la méthode MODECOM (Méthode DE Caractérisation des Ordures Ménagères) développée par l'ADEME (Ademe, 1997). Cette méthode permet de caractériser le déchet par sa composition, donnant ainsi, par exemple, une information sur le gisement de matière fermentescible. La Figure 1.4 présente la composition simplifiée des déchets ménagers en France en 2002.

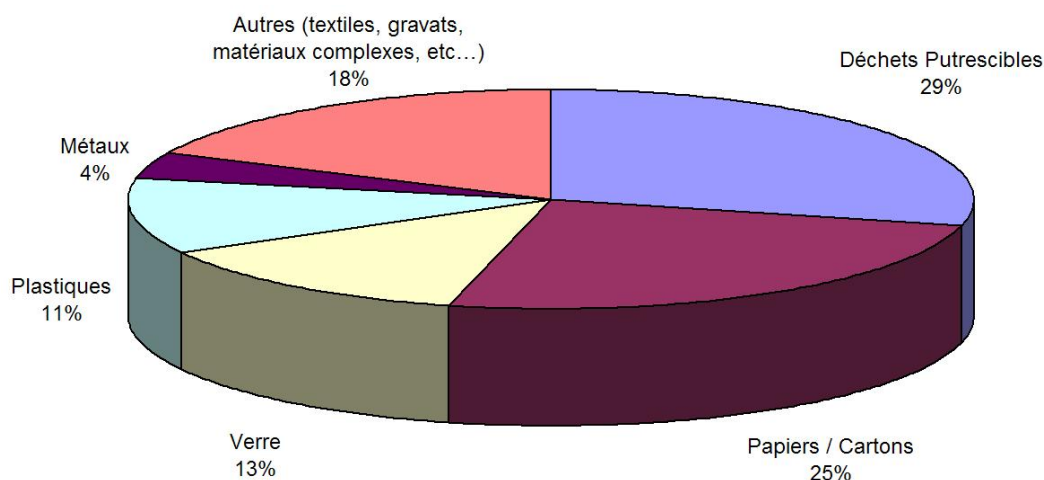


FIG. 1.4 – Composition type des déchets ménagers en France en 2002 (source ADEME)

Du fait de la complexité et de la diversité des éléments constituant les déchets ménagers, il est impossible de prendre en compte l'ensemble des éléments chimiques constitutifs des déchets. Il est donc nécessaire de classer les éléments composants les déchets suivant leurs caractéristiques communes. Une première approche consiste à modéliser les différentes fractions du déchet comme un constituant hydrocarboné dont la formule prendrait la forme $C_aH_bO_cN_d$. Des tests de laboratoire permettent ensuite de déterminer les valeurs des indices a , b , c et d et d'obtenir les bilans stoechiométriques des différentes réactions

mises en jeu lors des diverses étapes de biodégradation. Par exemple, Liwarska-Bizukojc and Ledakowicz (2003) réalisent des expériences de biodégradation aérobie de la fraction putrescible d'échantillons de déchets ménagers à différentes températures. La formulation moyenne obtenue pour cette fraction du déchet est $C_5H_{8,5}O_4N_{0,2}$. Il est possible également d'adopter ce type d'approche pour déterminer une formulation compacte des autres fractions du déchet et ainsi de leur associer des bilans stoechiométriques de réaction dans les cas aérobie et anaérobie. Néanmoins, cette approche est compliquée à mettre en oeuvre compte tenu de la variabilité compositionnelle de chaque fraction de déchet en fonction de la saison, de la région, etc...

Une deuxième approche, plus communément utilisée dans les études de biodégradation, consiste à établir une classification basée sur les cinétiques de dégradation de chaque classe de déchet (Manna et al., 1999). Beaucoup d'études expérimentales menées en laboratoire pour caractériser les cinétiques de biodégradation ne considèrent qu'une seule fraction de déchet biodégradable composée de déchets alimentaires (Wang et al., 1997; Liwarska-Bizukojc et al., 2002; Oldenburg et al., 2002). Néanmoins, la plupart des études de modélisation se basent sur trois classes de matériaux : rapidement biodégradable, lentement biodégradable et inerte. Chacune est caractérisée par une constante d'hydrolyse différente, qui caractérise la difficulté pour les microorganismes à solubiliser les éléments qui la composent (Findikakis and Leckie, 1979; Arigala et al., 1995; El-Fadel et al., 1996; Hashemi et al., 2002).

Enfin, les études de laboratoire menées par Aguilar-Juarez (2000) mettent en évidence quatre classes de déchets. Ceci revient simplement à introduire une classe de déchet intermédiaire que l'on qualifie de moyennement biodégradable. Cette classification nous permet de trouver un compromis entre la nécessité de conserver une certaine complexité dans la description du déchet pour obtenir une bonne précision et les contraintes imposées par les temps de calcul qui limitent le nombre de constituants que l'on peut modéliser. Le Tableau 1.2 résume la classification que nous avons retenue pour caractériser simplement la composition des ordures ménagères.

Cette classification permet de rassembler les éléments constitutifs des OM de structures chimiques comparables et de comportements vis-à-vis de l'activité biologique de biodégradation similaires.

1.2.1.2 Taille caractéristique

Une autre difficulté lorsque l'on tente de comprendre globalement les mécanismes qui régissent le comportement des ISD réside dans la disparité de taille des éléments qui constituent les OM. En effet, sans traitement mécanique préalable à l'enfouissement, les OM présentent une hétérogénéité de dimension importante puisqu'elles peuvent aussi

TAB. 1.2 – Différentes classes de déchets

Fraction du déchet solide	Éléments constitutifs
Rapidement biodégradable	Déchets alimentaires Déchets verts (feuilles, végétaux) Boues
Moyennement biodégradable	Papiers, cartons
Lentement biodégradable	Textiles Déchets ligneux Bois
Inerte	Matière minérale (gravats) Métaux Plastiques

bien contenir des déchets alimentaires, des éléments de mobilier usagés, etc... À titre d'exemple, les résultats d'un MODECOM réalisé sur un site de traitement opéré par Onyx en Normandie (cf. Figure 1.5) présentent la répartition des tailles de particules de déchets solides. Nous constatons que le déchet est loin d'être composé d'éléments solides de

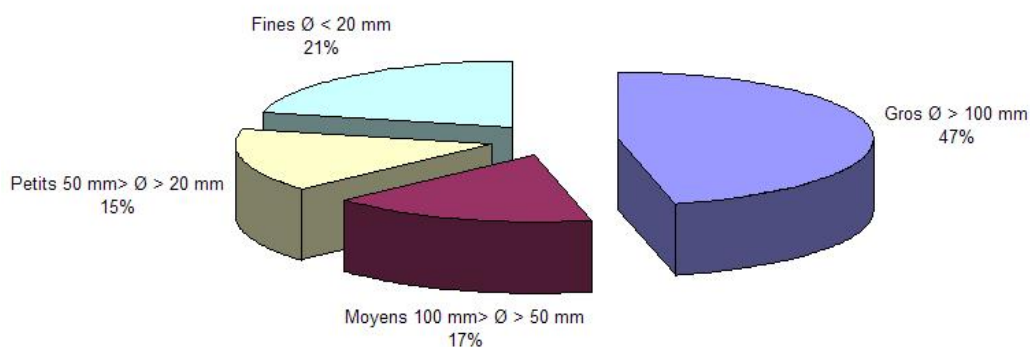


FIG. 1.5 – Répartition granulométrique du déchet provenant d'un site opéré par Onyx en Normandie (d'après un MODECOM réalisé en mars 2005)

tailles homogènes. Même si la répartition entre les 4 catégories de taille granulométrique est arbitraire, nous constatons que chaque catégorie de taille représente une fraction non négligeable de la masse totale de déchet triée. Sans opération de broyage préalable à l'enfouissement, il est donc très difficile de définir une taille caractéristique des éléments solides composant les déchets.

Ces observations sont confirmées par Miller and Clesceri (2003) qui évaluent la disparité de taille, de densité, de forme et de surface spécifique de différents matériaux composant le déchet. Pour Miller and Clesceri (2003), même si une classification des déchets par catégories de taille permet de mieux caractériser les OM dans l'optique de modéliser leur comportement, cette classification reste difficile à définir puisqu'un même matériau peut

posséder plusieurs extensions spatiales dont les tailles caractéristiques sont très différentes (par exemple les feuilles de papier). C'est pourquoi, la répartition granulométrique des éléments constitutifs des OM est rarement utilisée pour caractériser le déchet, puisque celle-ci comporte une variabilité importante. La densité des déchets semble être une unité de mesure plus adaptée pour caractériser les OM.

Malheureusement, même si une classification granulométrique des OM est impossible en pratique, il est aisé de concevoir que la taille des éléments enfouis en ISD peut avoir une importance sur les écoulements de fluide au sein du massif, sur la répartition de l'humidité, ainsi que sur la disponibilité du substrat organique pour l'activité biologique. C'est pourquoi, beaucoup d'industriels du domaine s'intéressent de près à la "préparation de la charge". Ceci consiste simplement à préparer le déchet (tri, broyage, etc...) afin d'obtenir un substrat solide favorable au développement d'une activité de biodégradation, c'est à dire un substrat dont les caractéristiques physiques sont les plus homogènes possible.

1.2.2 Biofilms

La modélisation des processus physico-bio-chimiques intervenant dans les ISD bioréacteurs nécessite d'abord de comprendre et de modéliser correctement les chaînes réactionnelles mais également de décrire finement la localisation des réactions de biodégradation. Comme nous l'avons mentionné précédemment, la dégradation des déchets est l'œuvre de microorganismes. De ce fait, nous pouvons imaginer plusieurs possibilités en ce qui concerne le mode d'action de ces microorganismes : dégradation par des microorganismes isolés à la surface du substrat, dégradation en phase liquide par des bactéries ou amas de bactéries isolés, ou bien colonisation de la surface du substrat puis formation d'un biofilm actif pour la dégradation du substrat. Le concept de biofilm est associé à la formation de couches de bactéries adsorbées sur une surface solide (Bryers, 2000). Le biofilm désigne en réalité une accumulation de bactéries à la surface d'un substrat solide. Celui-ci est la plupart du temps non uniforme en temps et en espace. Il est composé d'un mélange d'eau, de matériaux cellulaires et de matériaux extra cellulaires d'origines microbiennes (Christensen and Characklis, 1990).

En réalité, la structure même de la matrice poreuse formée par le déchet laisse supposer que la biodégradation des OM se fasse par un système de biofilm (Aguilar-Juarez, 2000). De nombreuses expériences de biodégradation en milieu poreux confirment la présence de biofilms. Par exemple, Vayenas et al. (2002) ont visualisé le développement d'un biofilm dans un micromodèle en verre simulant un milieu poreux soumis à un flux de polluant organique liquide. Le résultat de leur étude indique de fortes concentrations de bactéries à proximité des parois solides, confirmant ainsi la présence de biofilm. Dans la même

optique, Kim and Fogler (2000) étudient la croissance de biofilms dans un milieu poreux modèle dans des conditions de faible apport en nutriments. Les résultats de ces expériences permettent de mettre en évidence qu'un film de bactéries se forme très rapidement lorsque l'apport nutritionnel initial est suffisant (cf. Figure 1.6). De plus, une fois formé, le biofilm, même en conditions de pénurie en nutriments, est capable de se maintenir quelques temps.

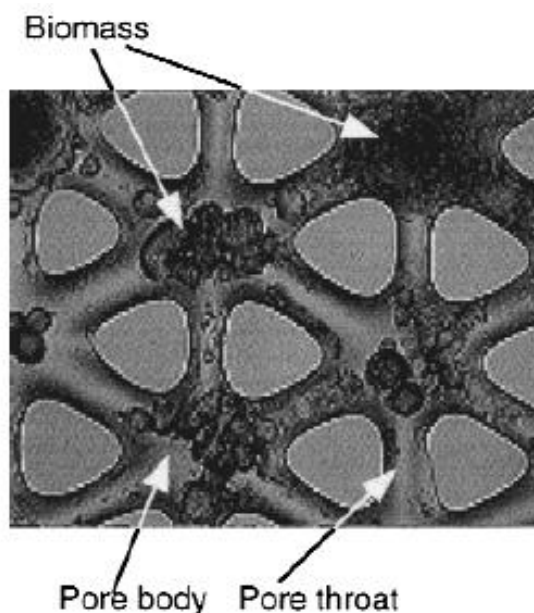


FIG. 1.6 – Visualisation du développement d'un biofilm en milieu poreux modèle d'après Kim and Fogler (2000)

D'autres expériences de laboratoire dans des conditions proches de celles observées sur site, ou des expériences sur des ISD en cours d'exploitation, ont confirmé la présence de ces films bactériens. Kim and Barry (2002) ont mené une campagne de mesures sur les systèmes d'extraction de gaz implantés dans des ISD en exploitation. Ces expériences avaient pour but d'étudier les structures microbiennes présentes dans les décharges. Pour ce faire, ils se sont basés sur le fait que, dans la plupart des systèmes d'extraction, on récupère des " agrégats " de bactéries sur les filtres des systèmes d'extraction. Ceci nous conforte donc dans l'idée que les bactéries colonisent le milieu poreux en formant principalement un biofilm adsorbé sur la matrice solide. D'autres études se sont intéressées de près au développement de ces biofilms dans les ISD, car la prolifération de films de microorganismes peut être à l'origine de la détérioration de l'efficacité des systèmes de drainage ou de réinjection (Rowe et al., 2000; Bouchez et al., 2003; Cooke et al., 2005b,a). Rowe et al. (2000) observent le développement d'un biofilm dans une colonne de milieu poreux modèle (empilement de billes de verre) soumise à un flux de lixiviats récoltés sur un ISD en exploitation. Des relevés de pression le long de la colonne permettent d'observer

les modifications des propriétés hydrodynamiques du milieu poreux liées au développement de biofilm. Les résultats obtenus lors de cette étude donnent des indications sur les conditions (charge en matière organique, débit de liquide) dans lesquelles le biofilm se développe le plus efficacement.

Rittmann (1993) ou Bouwer et al. (2000) justifient de telles observations relativement simplement puisque, dans un milieu poreux, la surface solide spécifique est si importante que cela suggère une adsorption aisée des bactéries. D'autre part les vitesses interstitielles mises en jeu sont relativement faibles et ne permettent pas dans la plupart des cas l'arrachement des biofilms. Cependant, la condition nécessaire au développement des biofilms est la présence d'une humidité assez importante. En effet, comme les biofilms sont majoritairement composés d'eau et de bactéries, on comprend aisément qu'un seuil minimum d'humidité est nécessaire pour que les bactéries puissent coloniser les surfaces solides et ainsi former un biofilm. Les mécanismes de formation de ces biofilms en milieu poreux restent complexes et fortement influencés par les conditions physico-chimiques locales (Bouwer et al., 2000; Rowe et al., 2000). Ils peuvent être décrits par plusieurs étapes. Tout d'abord, quelques bactéries s'adsorbent à la surface du solide. Ensuite, elles consomment les nutriments présents dans le milieu environnant et colonisent le substrat solide par prolifération (cf. Figure 1.7). Au cours de cette phase de croissance, elles produisent des sous-produits comme le CO_2 ou le CH_4 . Enfin, lorsque les conditions deviennent défavorables (manque de nutriments ou d'humidité), la prolifération cesse. Dans le cas où les conditions défavorables perdurent, le biofilm peut disparaître totalement.

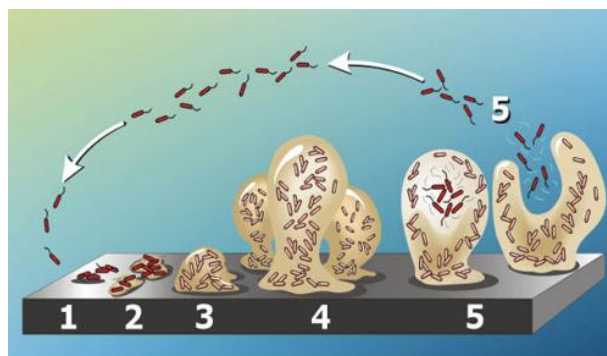


FIG. 1.7 – Étapes schématisques de croissance d'un biofilm : 1. Dépot et adsorption sur le substrat, 2. et 3. croissance, 4. et 5. croissance, colonisation et maturation (d'après Dr David G. Davies, Binghampton University)

L'influence de ces biofilms sur les propriétés hydrodynamiques du milieu poreux peut être importante, comme le montre les expériences de Kim and Fogler (2000) ou Rowe et al. (2000). Ceci s'explique simplement par le fait que la croissance d'un film bactérien adsorbé à la surface du substrat solide diminue la taille des pores (Bouwer et al., 2000). Néanmoins,

dans le cas des ISD, nous ne considérerons pas de modifications de la structure dynamique du biofilm et nous ne considérerons donc pas d'influence du biofilm sur la dynamique des écoulements de fluides. Dans notre étude, nous allons considérer l'approche de Taylor and Jaffe (1990) pour décrire le biofilm. En effet, nous allons considérer que les conditions sont réunies pour que le biofilm puisse être assimilé à une phase continue et non à des agglomérats discontinus. Rittmann (1993) estime que cette hypothèse est justifiée pour les applications où les teneurs en substrat biodégradable sont importantes. Ceci semble être le cas dans les ISD. En effet, la fraction fermentescible représente quasiment 1/3 de la composition des déchets assurant ainsi la disponibilité en substrat biodégradable.

1.2.3 Modèles existants

Les enjeux environnementaux (pollution des sols et des aquifères par les lixiviats ou pollutions atmosphériques par les gaz de décharge) ont incité les exploitants de ISD à mieux comprendre les phénomènes qui régissent les transferts au sein des casiers de stockage d'OM. Plus récemment, la pression législative a poussé les industriels du secteur à développer des techniques environnementalement performantes, comme, par exemple, le concept de bioréacteur. L'intérêt actuel se focalise donc sur l'optimisation de ces procédés afin de les rendre également économiquement performants. C'est dans ce contexte que la modélisation des ISD s'est développée à partir des années 1950. La modélisation des échanges de masse et de chaleur au sein des casiers d'enfouissement de déchets ménagers est donc relativement récente. Il convient d'ailleurs de signaler qu'aucun modèle ne permet encore de prendre en compte la totalité de la période de "vie" des décharges depuis leur remplissage jusqu'à la fin de la post-exploitation. En effet, l'objectif principal de ces études était de prévoir les quantités d'effluents produites au cours de la "vie" d'une décharge. Par conséquent, la phase aérobie de la biodégradation est rarement prise en compte.

1.2.3.1 Ecoulements

La plupart des modèles développés dans la littérature sépare l'étude des écoulements gazeux et liquides dans les ISD. Ceci s'explique par le fait que, historiquement, les recherches ont porté séparément sur la production de lixiviats de décharge dans le cas de projets de prévention de pollution des sols, et sur la production de biogaz dans le cadre de projet de valorisation. Ce sont les concepts de "décharge durable" et de bioréacteur qui ont amené la communauté scientifique et technique à faire coexister les deux approches.

Écoulement de lixiviats En ce qui concerne la modélisation des transferts de liquide dans les ISD, une très bonne synthèse bibliographique est présentée par El Fadel et al. (1997). Dans cette revue bibliographique, les auteurs signalent deux grandes approches pour modéliser les transferts de lixiviats dans les ISD. La première, et la plus ancienne, de ces deux approches consiste en un simple bilan hydrique sur l'ensemble de l'alvéole de stockage. Elle a pour unique but de prévoir la quantité de lixiviats formée via l'évaluation de quantités qui n'ont pas de réelle signification physique. Ce type de bilan est par exemple présenté par Farqhar (1989). Dans ce cas, l'alvéole de stockage est considérée comme une " boîte noire " ayant une certaine capacité d'infiltration. La quantité de liquide percolée est alors calculée de la façon suivante :

$$\textit{Percolation} = \textit{Infiltration} - \textit{Ruissellement} + \textit{Infiltration d'eau souterraine} - \textit{Rétention}$$

Sur cette base relativement simpliste un certain nombre de modèles comme le modèle HELP (Hydrologic Evaluation of Landfill Performance), développé par Schroeder et al. (1984) pour l'US EPA, intègrent des phénomènes plus complexes de façon à décrire plus précisément les transferts. Un exemple de l'utilisation de cette méthode est décrit par Dho et al. (2002). Néanmoins, ce type de modèle présente certaines limitations car il ne décrit pas précisément les phénomènes physiques qui régissent les transferts (Bou-Zeid and El-Fadel, 2004). Par exemple, ce type de modèle permet uniquement le suivi de la répartition verticale de la teneur en eau et ne permet pas de considérer une infiltration hétérogène, car il ne résout pas explicitement les équations régissant le transfert de la phase liquide dans le massif de déchet.

De cette conclusion est née l'idée d'une nouvelle approche consistant à décrire les écoulements de liquides dans les ISD par le couplage des équations de conservation classique de masse (cf. équation 1.1) et de quantité de mouvement décrite par la loi de Darcy (cf. équation 1.2). Ceci sous entend que les conditions nécessaires à l'application de cette équation sont réunies. Les écoulements en ISD s'effectuant majoritairement à faibles nombres de Reynolds, ceci justifie l'application de la loi de Darcy. Ces équations s'écrivent de manière générique sous la forme suivante :

$$\frac{\partial (\epsilon_\theta \rho_\theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon_\theta \rho_\theta \underline{V}_\theta) = 0 \quad (1.1)$$

$$\epsilon_\theta \underline{V}_\theta = -\frac{1}{\mu_\theta} \underline{K}_{abs} \cdot (\nabla P_\theta - \rho_\theta g) \quad (1.2)$$

$$\text{avec } \theta = \gamma \text{ ou } \lambda$$

Dans cette expression, ϵ_θ désigne porosité à la phase mobile θ , \underline{V}_θ sa vitesse interstitielle (m/s), \underline{K}_{abs} désigne le tenseur de perméabilité absolue du milieu (m^2), μ_θ désigne la viscosité dynamique de la phase mobile θ (kg/m/s), désigne la P_θ pression interne à la

phase mobile θ (Pa), désigne la ρ_θ masse volumique de la phase mobile (kg/m^3), désigne la g accélération de pesanteur (m/s^2).

Ces modèles tentent de décrire la physique des écoulements en milieu poreux et sont donc plus adaptés que les bilans hydriques globaux pour décrire l'évolution spatio-temporelle de la teneur en eau. Par exemple, Islam and Singhal (2002) développent un modèle d'écoulement 1D de lixiviats dans un ISD à l'aide de la loi de Darcy et étudient l'impact de cet écoulement sur les processus de précipitation et dissolution. La plupart des modèles récents utilise ce type de description pour simuler les écoulements de lixiviats.

Écoulement de gaz Les premières études de transport de gaz au sein des décharges ont été réalisées dans la continuité des études sur la migration des gaz en milieux poreux initiées sous l'impulsion des industriels du secteur pétrolier. Les premiers modèles spécifiques à l'étude des productions de biogaz (mélange de CO_2 et de CH_4) se basent sur l'hypothèse d'un milieu poreux homogène, indéformable et saturé en biogaz. Le principe se base sur le couplage entre l'équation de conservation de la masse de la phase gazeuse (cf. équation 1.1 avec $\theta = \gamma$) et la loi de Darcy, dont l'expression est identique à l'équation 1.2 si l'on considère que la phase mobile θ est la phase gazeuse. Les premiers à utiliser ce type d'approche sont Findikakis and Leckie (1979). Ils utilisent le couplage de l'équation de Darcy à l'équation de conservation de masse de la phase gazeuse pour développer un modèle 1D de production et de transfert de biogaz dans un ISD. Arigala et al. (1995) adoptent la même approche en deux dimensions et intègrent la modélisation des systèmes d'extraction de biogaz. Hashemi et al. (2002); Chen et al. (2003); Copty et al. (2004) ont exactement la même approche, mais avec une résolution 3D du système d'équations. Nous ne citons pas ici l'ensemble des travaux de modélisation de transport de la phase gazeuse dans les ISD puisque ceux-ci sont nombreux et basés sur les mêmes approches. Néanmoins, il convient de signaler que l'un des modèles de transport et génération de biogaz le plus complet est celui développé par Young (1989, 1994). En effet, tout d'abord pour obtenir les équations de conservation de masse en phase gazeuse, Young (1989) utilise une technique d'homogénéisation sur un volume élémentaire. Ceci est une approche rarement utilisée pour modéliser la physique des ISD, mais qui a le mérite de prendre en compte le caractère multi-échelles du milieu complexe étudié. A ces équations, Young (1989) ajoute une équation de transport de la phase fluide sous la forme d'une loi de Darcy analogue à l'équation 1.2. L'équilibre entre les espèces gazeuses et dissoutes est décrit par une loi de Henry. Ce type d'approche est utilisé pour décrire les écoulements conjoints de gaz et de lixiviats dans les ISD qui ne peuvent être traités avec les lois de Darcy classiques. Les modèles traditionnellement utilisés pour décrire ces écoulements diphasiques sont présentés ci-dessous.

Écoulements couplés de gaz et de liquide Comme nous l'avons vu précédemment, beaucoup de modèles décrivent séparément les transferts de gaz et de liquide dans les ISD. Néanmoins, comme nous l'avons introduit avec les travaux de Young (1989, 1994), ces modèles simplistes tendent à être remplacés par des modèles plus complexes qui intègrent le couplage entre les différentes phases mobiles. L'approche utilisée par Young (1989) consiste à utiliser les équations dites de *Darcy généralisées*. Ceci consiste à considérer que les écoulements de gaz et de liquides dans la matrice poreuse formée par les déchets sont tous deux régis par une équation de type Darcy. Pour prendre en compte le fait que l'écoulement de l'une des deux phases peut être perturbé par le volume occupé par l'autre phase dans l'espace poral, le tenseur de perméabilité est souvent découpé en un produit d'un coefficient de perméabilité relative et un tenseur de perméabilité intrinsèque (cf équation 1.3).

$$\epsilon_{\theta} \underline{V}_{\theta} = - \frac{k_{r\theta}}{\mu_{\theta}} \underline{K}_{abs} \cdot (\underline{\nabla} P_{\theta} - \rho_{\theta} \underline{g}) \quad \text{avec } \theta = \gamma \text{ ou } \lambda \quad (1.3)$$

Dans cette expression, \underline{K}_{abs} représente le tenseur de perméabilité absolue du milieu (m^2) et $k_{r\theta}$ désigne le coefficient de perméabilité relative à la phase mobile θ .

La description détaillée des équations de *Darcy généralisées* sera abordée dans le Chapitre 2. Cette approche est couramment utilisée pour modéliser les transferts conjoints des phases liquide et gaz dans les ISD. On peut notamment citer les codes de calcul T2LBM (TOUGH2 Landfill Bioreactor Model) adapté par Oldenburg et al. (2002) du code TOUGH2 développé par Pruess et al. (1999); Pruess (2004) ou SUTRA (Saturated Unsaturated Transport Model) développé par Voss (1984) pour l'institut de veille géologique américain. A l'aide de l'outil T2LBM, Vigneault et al. (2004) simulent le rayon d'influence d'un puits de captage de biogaz en fonction de la production de biogaz et de la dépression imposée au système de collecte. De même, même s'ils ne s'intéressent qu'au mouvement de la phase liquide, McCreanor and Reinhart (1999) utilisent les lois de Darcy généralisées via l'utilisation de SUTRA pour modéliser l'écoulement de lixiviats dans un casier de stockage d'OM partiellement saturé en liquide. Finalement, un nombre important d'auteurs privilégie cette approche, plutôt qu'une approche utilisant une loi de Darcy simple, pour développer leurs propres modèles numériques (El-Fadel et al., 1996; Aran, 2001; Hashemi et al., 2002; Sanchez et al., 2006; Kindlein et al., 2006).

Une autre approche, très couramment utilisée dans le domaine de l'hydrologie et souvent adoptée dans les modèles de transfert de lixiviats dans les ISD, consiste à utiliser les équations dites de *Richards* pour décrire les écoulements de liquide dans un milieu poreux partiellement saturé en liquide. Cette méthode consiste à utiliser la loi de Darcy généralisée (cf. équation 1.3) couplée à l'équation de conservation de masse de phase liquide

pour décrire les écoulements de lixiviats dans les ISD. Elle est donc identique à l'approche utilisant la loi de Darcy généralisée pour la phase liquide. En revanche, l'utilisation de l'équation de Richards pour la phase liquide suppose que le gradient de pression dans la phase gaz est nul. Ceci revient à considérer que la vitesse de la phase gazeuse est nulle et que le transport convectif du gaz est négligeable. Néanmoins, dans ce genre d'approche, il est tout de même possible de prendre en compte le transport dans la phase gaz en considérant uniquement le transport diffusif des constituants présents dans le gaz, en négligeant le transport par convection puisque l'utilisation de l'équation de Richards impose une vitesse de gaz nulle. Ainsi les codes de calcul HYDRUS 2D (Simunek et al., 2006) et MODUELO2 (Garcia de Cortazar and Monzon, 2007) sont basés sur cette hypothèse. En utilisant ce type d'approche, Lee et al. (2001) ou Haydar and Khire (2005) modélisent l'impact de la recirculation de lixiviats sur les cinétiques de biodégradation à l'aide du programme HYDRUS 2D. Néanmoins, il s'avère que dans les procédés comme les ISD bioréacteurs, les processus de réinjection de lixiviats ou de production de biogaz peuvent engendrer des modifications de pressions importantes de la phase gazeuse. Ainsi (Chenu et al., 2005) comparent les flux de gaz diffusifs et convectifs via l'introduction du nombre adimensionnel de Peclet et montrent qu'il n'est pas possible de négliger les flux convectifs de gaz pendant les phases de réinjection. Il semble donc que les approximations engendrées par l'utilisation de l'équation de Richards soit très limitantes. Nous montrerons certaines des limitations de ce type de modèle dans le Chapitre 4.

Enfin, il convient de citer les travaux de Zacharof and Butler (2004b,a) qui développent une approche alternative à la modélisation déterministe des transferts couplés de gaz et de liquide au sein des ISD. En effet, compte tenu de la nature fortement hétérogène de la matrice solide formée par les OM, Zacharof and Butler (2004b,a) développent un modèle stochastique de transport au sein des ISD. Le concept ainsi introduit consiste à considérer une "particule élémentaire d'eau" présente dans le ISD, dont la vitesse gravitaire est décrite par une loi de probabilité de type log-normale. Les paramètres du modèle sont obtenus par identification avec une série de résultats expérimentaux et une analyse de sensibilité des différents paramètres est réalisée.

1.2.3.2 Transport

Le transport des éléments gazeux ou liquide dans les ISD est un point largement documenté dans la littérature. En effet, comme nous l'avons mentionné précédemment, l'objectif principal des travaux de modélisation des écoulements de liquide et de gaz au sein des ISD est de quantifier les flux de polluants (lixiviats ou biogaz) afin de pouvoir prévoir et contrôler l'impact des ISD sur l'environnement. C'est pourquoi beaucoup de modèles que nous avons présentés précédemment couplent les modèles d'écoulement de

gaz et de liquide à des équations de transport des espèces présentes dans les phases gaz et liquide (équations de convection-diffusion). Ce type d'équation est décrit par l'équation 1.4.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_{\theta} C_{\theta i}) + \nabla \cdot (\varepsilon_{\theta} C_{\theta i} \underline{V}_{\theta}) = \nabla \cdot (\varepsilon_{\theta} \underline{D}^* \cdot \nabla C_{\theta i}) \quad (1.4)$$

avec $\theta = \gamma$ ou λ

Ici, ε_{θ} désigne la porosité à la phase mobile θ , \underline{V}_{θ} sa vitesse interstitielle (m/s), $C_{\theta i}$ la concentration en espèce i gazeuse ou liquide (mol/m³) et \underline{D}^* le tenseur de diffusion-dispersion moléculaire.

Nous verrons dans le Chapitre 2 que dans notre modèle, nous n'utilisons pas la même description. En effet, cette écriture en mol/m³ pose le problème de l'évaluation de la vitesse du constituant i puisque dans ce cas la vitesse considérée est la vitesse molaire moyenne, alors que la vitesse interstitielle utilisée pour décrire les écoulements est la vitesse barycentrique. Ces deux vitesses sont naturellement liées entre elles, mais il convient de prendre garde à la manipulation de ces équations. Pour plus d'informations concernant cette discussion on pourra se référer aux pages 3 à 9 de l'ouvrage de Taylor and Krishna (1993).

De nombreux modèles couplent ce type d'équation de transport aux équations de transport décrites par la loi de Darcy généralisée de façon à simuler le transport convectif et diffusif des espèces gazeuses et dissoutes dans la phase liquide au sein des ISD. On peut citer en particulier les travaux de Young (1994); Aran (2001) ou Kindlein et al. (2006). Comme nous l'avons évoqué précédemment, dans le cas où l'on utilise les approximations introduites via l'utilisation des équations de Richards pour décrire les écoulements couplés de gaz et de liquide, le transport des espèces gazeuses est uniquement diffusif et les auteurs supposent alors que la vitesse de la phase gaz est nulle ($V_{\gamma}=0$). Cela implique donc des restrictions fortes sur la répartition spatiale des concentrations de gaz. Les principales différences entre les modèles développés dans la littérature qui utilisent des équations de conservation du type 1.4 proviennent de l'évaluation des termes diffusifs. Nous discuterons en détail de ces approches dans le Chapitre 3.

1.2.3.3 Thermique

Comme nous l'avons mentionné précédemment, la température locale du déchet est l'un des paramètres qui a un impact important sur l'activité des microorganismes aérobies et anaérobies. De plus, les processus de biodégradation sont des processus exothermiques (principalement en condition aérobie), ce qui peut engendrer des déséquilibres thermiques importants au sein des ISD. C'est pourquoi, beaucoup de modèles, comme celui proposé

par Young (1994), intègrent une équation de conservation de l'énergie afin de pouvoir décrire l'évolution des niveaux thermiques locaux dans les ISD (cf. équation 1.5).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [(\varepsilon_\gamma \rho_g C_{P\gamma} + \varepsilon_\lambda \rho_l C_{P\lambda} + \varepsilon_\sigma \rho_s C_{P\sigma}) T] \\ + \varepsilon_\gamma \rho_\gamma C_{P\gamma} \underline{V}_\gamma \cdot \underline{\nabla} T + \varepsilon_\lambda \rho_\lambda C_{P\lambda} \underline{V}_\lambda \cdot \underline{\nabla} T = \underline{\nabla} \cdot [\underline{k}^* \cdot \underline{\nabla} T] \end{aligned} \quad (1.5)$$

Dans la relation 1.5, ε_γ , ε_λ et ε_σ désignent les fraction volumiques de gaz, de liquide et de solide, $\rho_\gamma, \rho_\lambda$ et ρ_σ désignent les masses volumiques des phases gaz, liquide et solide (kg/m^3), $C_{P\gamma}$, $C_{P\lambda}$ et $C_{P\sigma}$ représentent les capacités calorifiques massiques des phases gaz, liquide, et solide (J/kg/K), T la température du milieu (K), \underline{V}_λ vitesse de la phase liquide (m/s), \underline{V}_γ vitesse de la phase gaz (m/s) et enfin \underline{k}^* désigne le tenseur de conductivité thermique effective du milieu (J/s/m/K).

On retrouve exactement le même type d'équation de conservation dans les travaux de El-Fadel et al. (1996); Lanini (1998) ou Kindlein et al. (2006). Les principales différences entre les différents modèles résident dans l'évaluation des paramètres comme la conductivité thermique du milieu.

1.2.3.4 Biodégradation

L'objectif des nombreux travaux de modélisation des procédés de stockage des OM étant principalement de simuler la production de biogaz par biodégradation, la modélisation de l'activité biologique aérobie et anaérobie a donc été largement documentée depuis les années 1950. Néanmoins, plusieurs approches ont été développées et les résultats obtenus sont très disparates.

Biodégradation aérobie Nous ne cherchons pas ici à décrire l'ensemble des modèles mathématiques utilisés dans la littérature pour décrire les cinétiques de biodégradation aérobie, mais plutôt à identifier les différentes approches possibles suivant leur degré de complexité. Une synthèse des différents modèles mathématiques développés depuis les années 1970 pour décrire les cinétiques de biodégradation aérobie dans les procédés de compostage est d'ailleurs présentée par Mason (2006). Comme le mentionne Mason (2006), des cinétiques du premier ordre vis-à-vis du substrat, des cinétiques de type Monod, ou bien des cinétiques calées empiriquement, peuvent être utilisées pour décrire l'action des microorganismes aérobies sur un substrat organique.

La digestion aérobie fait intervenir un mécanisme réactionnel complexe. Celui-ci est composé de réactions en chaîne schématisées sur la Figure 1.8. Sur la Figure 1.8, $C_{(S)1}$ représente la concentration en carbone organique rapidement biodégradable, $C_{(S)2}$ représente la concentration en carbone organique lentement biodégradable, $C_{(S)3}$ représente

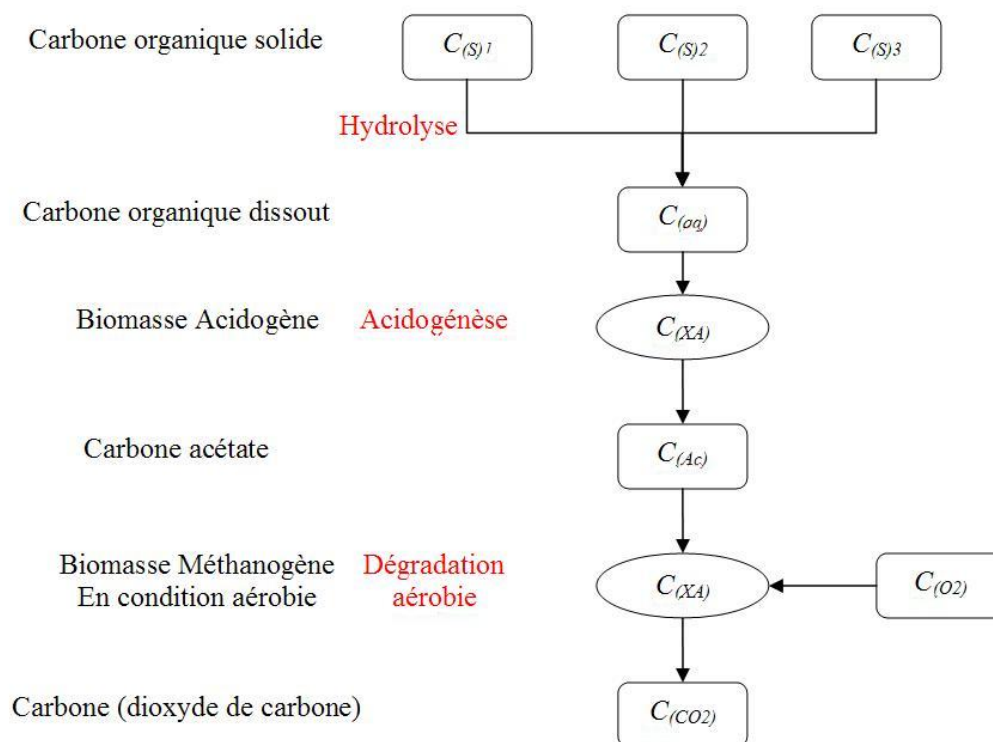


FIG. 1.8 – Schématisation du mécanisme réactionnel aérobique proposé par (Aguilar-Juarez, 2000)

la concentration en carbone organique très lentement biodégradable, $C_{(aq)}$ représente la concentration en carbone dissout, $C_{(XA)}$ représente la concentration en biomasse, $C_{(Ac)}$ représente la concentration en carbone acétate, $C_{(O_2)}$ représente la concentration en oxygène et $C_{(CO_2)}$ représente la concentration en dioxyde de carbone.

Le mécanisme de biodégradation est relativement complexe et fait intervenir plusieurs intermédiaires réactionnels (Miller and Clesceri, 2003). Une première étape d'hydrolyse solubilise le carbone d'origine organique présent dans les déchets solides. Cette étape conduit à la formation de composés organiques plus simples dissouts en phase aqueuse. Ceux-ci sont ensuite transformés en acétate par la biomasse acidogène. Le carbone acétate est enfin consommé par les bactéries méthanogènes qui le transforment en dioxyde de carbone en condition aérobie. Le modèle mathématique le plus complexe que l'on pourrait développer pour décrire la biodégradation aérobie de la matière organique consisterait à obtenir une cinétique chimique pour chacune des étapes précédemment décrites. Néanmoins, Mason (2006) ne mentionne pas de modèle de ce type dans la littérature, et indique que les modèles proposés ne prennent pas en compte les intermédiaires réactionnels et que les cinétiques proposées sont des cinétiques globales de consommation du substrat organique. Ainsi, Aguilar-Juarez (2000) considère que l'étape limitante est l'étape d'hydrolyse du substrat. Par conséquent, l'unique cinétique qu'il considère est une cinétique d'ordre

1 vis-à-vis du substrat solide traduisant l'hydrolyse (cf. équation 1.6).

$$\frac{dC_{(S)i}}{dt} = -K_h^i C_{(S)i} \quad (1.6)$$

Dans cette relation, $C_{(S)i}$ est la concentration en carbone organique solide de la fraction i (kg/m^3) et K_h^i est la constante cinétique d'hydrolyse de ce substrat (jour^{-1}) et t le temps (jour).

En considérant les trois classes de substrat biodégradable précédemment définies, le taux de consommation de dioxygène est obtenu en sommant les trois contributions liées à l'hydrolyse de chacun des substrats (cf. équation 1.7).

$$R_{O_2} = - \sum_{i=1}^3 Y_{O_2/(S)i} K_h^i C_{(S)i} \quad (1.7)$$

Dans l'équation 1.7, R_{O_2} est le taux de consommation d'oxygène ($\text{kg}/\text{m}^3/\text{jour}$) et $Y_{O_2/(S)i}$ est le taux de conversion du substrat de classe i par rapport à sa consommation en oxygène.

Cette formulation mathématique est la plus simple, mais également la plus développée pour décrire la biodégradation aérobie de la matière organique présente dans les OM. Comme nous le verrons par la suite un nombre de dépendances aux facteurs environnementaux doit également être introduit et prend souvent la forme de préfacteurs de la constante d'hydrolyse (Mason, 2006). Ces dépendances seront décrites en détails dans le Chapitre 3. D'après Mason (2006), peu de modèles décrits dans la littérature permettent la simulation correcte du comportement global complexe des centres de compostage. C'est pourquoi nous présenterons le modèle empirique développé par Pommier et al. (2007) dans le Chapitre 3. Ce modèle est une alternative entre les modèles trop complexes et les modèles trop simplistes. Il a également pour avantage de prendre en compte l'impact des conditions d'humidité locale sur les cinétiques de biodégradation aérobie.

Biodégradation anaérobie Compte tenu du fait que les ISD restent la principale voie de traitement des déchets ménagers, de nombreux travaux de modélisation des termes sources anaérobies ont eu lieu. Outre l'influence des paramètres physiques du milieu, la difficulté de modélisation vient de la complexité du mécanisme réactionnel et du nombre d'intermédiaires réactionnels à prendre en compte. Il est donc possible de modéliser les cinétiques de réactions anaérobies de plusieurs façons. Par exemple, dans le modèle de production et de transport de biogaz présenté par El-Fadel et al. (1996) et ensuite repris par Miller and Clesceri (2003), l'ensemble des intermédiaires réactionnels est pris en compte. Comme nous l'avons évoqué précédemment, trois catégories distinctes de substrat biodégradable sont considérées. Le schéma réactionnel considéré est présenté sur la

Figure 1.9.

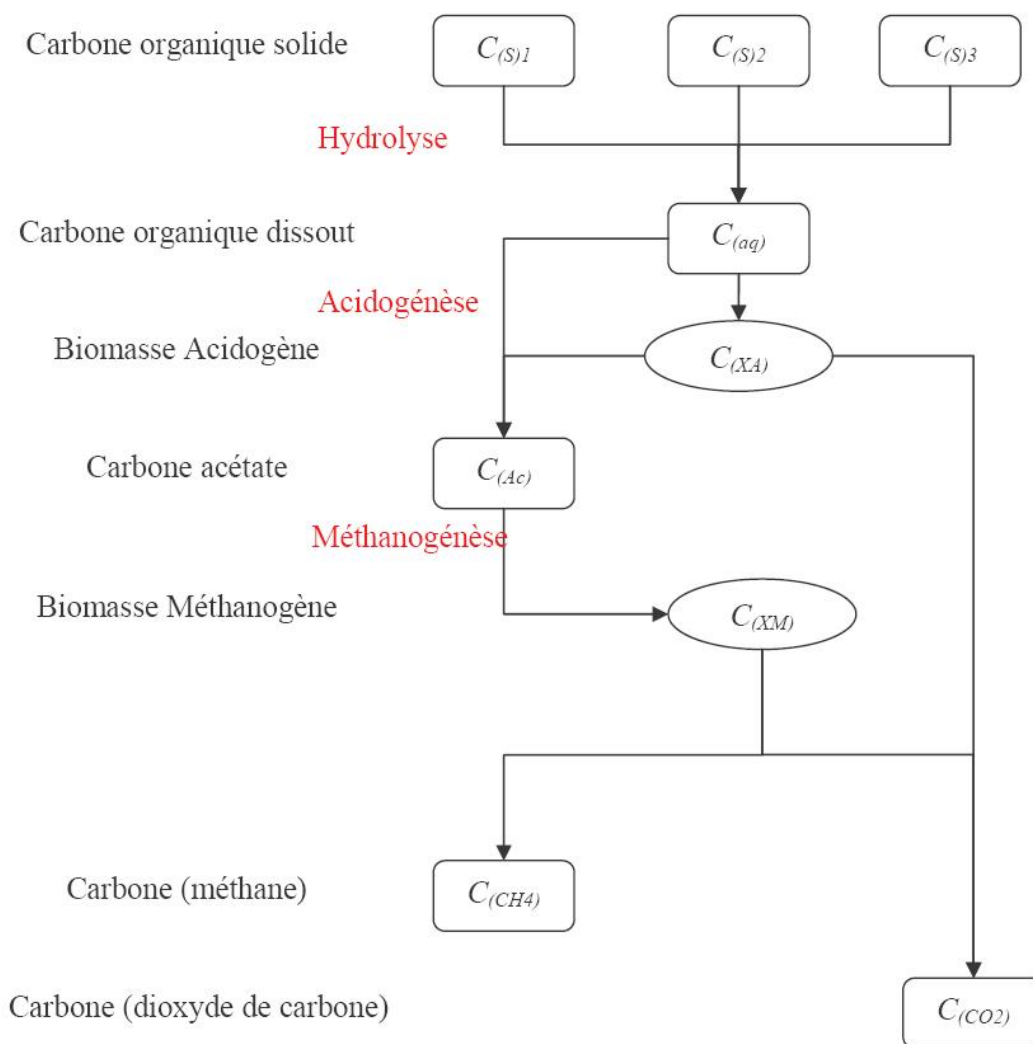


FIG. 1.9 – Schématisation du mécanisme réactionnel anaérobie proposé par (El-Fadel et al., 1996)

Sur la Figure 1.9, $C_{(S)1}$ représente la concentration en carbone organique rapidement biodégradable, $C_{(S)2}$ représente la concentration en carbone organique lentement biodégradable, $C_{(S)3}$ représente la concentration en carbone organique très lentement biodégradable, $C_{(aq)}$ représente la concentration en carbone dissout, $C_{(XA)}$ représente la concentration en biomasse acidogène, $C_{(Ac)}$ représente la concentration en carbone acétate, $C_{(XM)}$ représente la concentration en biomasse méthanogène, $C_{(O_2)}$ représente la concentration en oxygène, $C_{(CO_2)}$ représente la concentration en dioxyde de carbone et $C_{(CH_4)}$ concentration en méthane.

La première étape de ce mécanisme est l'hydrolyse du substrat organique solide. Cette étape est l'étape limitante du processus. La cinétique de cette étape est classiquement

assimilée à une réaction de premier ordre vis-à-vis de la concentration en substrat (cf. équation 1.8).

$$\frac{dC_{(S)i}}{dt} = -K_{h\ ana}^i C_{(S)i} \quad (1.8)$$

Ici, $C_{(S)i}$ représente la concentration en carbone organique solide de la fraction i (kg/m^3) et $K_{h\ ana}^i$ désigne la constante cinétique d'hydrolyse anaérobie de ce substrat (jour^{-1}) et t le temps (jour).

Ensuite, l'ensemble des cinétiques impliquant les autres espèces chimiques et biologiques mentionnées sur la Figure 6 ont des cinétiques de type Monod et leur taux de formation net est la somme des termes de production et de consommation où ils interviennent. Les expressions mathématiques de ces taux de formation sont données par les équations (cf équations 1.9 à 1.14) :

$$\frac{dC_{(aq)}}{dt} = \sum_{i=1}^3 K_{h\ ana}^i C_{(S)i} - \frac{\mu_A}{Y_A} \frac{C_{(aq)}}{K_{SA} + C_{(aq)}} C_{(XA)} \quad (1.9)$$

$$\frac{dC_{(XA)}}{dt} = \left(\mu_A \frac{C_{(aq)}}{K_{SA} + C_{(aq)}} - K_{dA} \right) C_{(XA)} \quad (1.10)$$

$$\frac{dC_{(XM)}}{dt} = \left(\mu_M \frac{C_{(Ac)}}{K_{SM} + C_{(Ac)}} - K_{dM} \right) C_{(XM)} \quad (1.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_{(Ac)}}{dt} &= Y_{HAc} \left[(1 - Y_A) \frac{\mu_A}{Y_A} \frac{C_{(aq)}}{K_{SA} + C_{(aq)}} + K_{dA} \right] C_{(XA)} \\ &\quad - \left[\frac{\mu_M}{Y_M} \frac{C_{(Ac)}}{K_{SM} + C_{(Ac)}} \right] C_{(XM)} \end{aligned} \quad (1.12)$$

$$\frac{dC_{(CH_4)}}{dt} = Y_{CH_4} \left[(1 - Y_M) \frac{\mu_M}{Y_M} \frac{C_{(Ac)}}{K_{SM} + C_{(Ac)}} + K_{dM} \right] C_{(XM)} \quad (1.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_{(CO_2)}}{dt} &= (1 - Y_{HAc}) \left[(1 - Y_A) \frac{\mu_A}{Y_A} \frac{C_{(aq)}}{K_{SA} + C_{(aq)}} + K_{dA} \right] C_{(XA)} \\ &\quad + (1 - Y_{CH_4}) \left[(1 - Y_M) \frac{\mu_M}{Y_M} \frac{C_{(Ac)}}{K_{SM} + C_{(Ac)}} + K_{dM} \right] C_{(XM)} \end{aligned} \quad (1.14)$$

Dans ces relations, $C_{(S)i}$ est la concentration massique en carbone organique solide (kg/m^3), $i=1,2,3$, $C_{(aq)}$ est la concentration massique en carbone aqueux (kg/m^3), $C_{(XA)}$ est la concentration massique en biomasse acidogène (kg/m^3), $C_{(XM)}$ est la concentration massique en biomasse méthanogène (kg/m^3), $C_{(Ac)}$ est la concentration massique en carbone acétate (kg/m^3), $C_{(CO_2)}$ est la concentration massique en dioxyde de carbone (kg/m^3), $C_{(CH_4)}$ est la concentration massique en méthane (kg/m^3), Y_A est le taux de conversion massique du carbone dissous en biomasse acidogénique (kg/kg), μ_A est le taux de croissance maximum de la biomasse acidogène (jour^{-1}), K_{SA} est la constante de demi satura-

tion pour la biomasse acidogène (kg/m^3), K_{dA} est la constante cinétique de décroissance de la biomasse acidogène (jour^{-1}), K_{hi} est la constante d'hydrolyse du constituant solide i (jour^{-1}), Y_M est le taux de conversion massique de l'acétate en biomasse méthanogène (kg/kg), μ_M est le taux de croissance maximum de la biomasse méthanogène (jour^{-1}), K_{SM} est la constante de demi saturation pour la biomasse méthanogène (kg/m^3), K_{dM} est la constante cinétique de décroissance de la biomasse méthanogène (jour^{-1}), Y_{HAc} est le taux de conversion du carbone acétate (kg/kg) et Y_{CH_4} est le taux de conversion du méthane (kg/kg).

Ce modèle est complexe et prend en compte plusieurs intermédiaires réactionnels chimiques (Acétate et Carbone organique aqueux) et biologiques (biomasse acidogène et acétogène). L'ensemble des coefficients intègre des dépendances vis-à-vis des conditions physiques d'exploitation comme la température ou le pH. Ce type d'approche est déjà une vision simplifiée des mécanismes de biodégradation anaérobie. Néanmoins, la plupart des modèles cinétiques de production de biogaz qui s'attachent à prendre en compte les mécanismes de biodégradation anaérobie considère un mécanisme à trois étapes (hydrolyse, acidogénèse et méthanogénèse) avec deux intermédiaires réactionnels chimiques (matière organique dissoute et acétate). Par exemple, Kiely et al. (1997) adoptent une approche similaire à celle proposée par El-Fadel et al. (1996). La principale différence entre ces deux modèles réside dans le choix des modèles mathématiques utilisés pour décrire les différentes cinétiques impliquées. Et ceci est vrai principalement pour la croissance des espèces biologiques puisque Kiely et al. (1997) utilisent des modèles plus complexes pour décrire les termes de croissance bactériologique et intègrent un terme d'inhibition. Nous ne détaillerons pas explicitement tous ces modèles, mais cela indique la disparité des modèles utilisés pour décrire la biodégradation anaérobie. Néanmoins, ce type de modèle complet n'est intéressant que lorsque l'on s'intéresse explicitement à la chimie des bioréacteurs et que la dynamique des phases intervient peu. En effet, si l'on utilise ce type de modèle complexe couplé à un modèle d'écoulement, par exemple, les temps de calculs deviennent très longs (Husain, 1998). De plus, ce type de modèle peut aisément être simplifié puisque l'étape d'hydrolyse du substrat solide est l'étape limitante du processus. Par conséquent, seule la cinétique de cette étape d'hydrolyse nécessite d'être modélisée (Vavilin et al., 1996, 2002, 2004; Haarstrick et al., 2001; Mora-Naranjo et al., 2004).

Ensuite, il est possible d'introduire divers niveaux de complexité dans l'expression de la cinétique de réaction d'hydrolyse Husain (1998). L'expression la plus simple et la plus communément utilisée est la réaction d'ordre 1 vis-à-vis du substrat solide. Il est également possible de décrire ces cinétiques par des modèles de type Monod ou Contois Vavilin et al. (2004). Dans la plupart des études de modélisation de centre de stockage, l'objectif est de pouvoir prévoir des flux de gaz globaux. De ce fait, seule une cinétique de production de

biogaz est nécessaire et il est souvent considéré que les microorganismes sont présents en quantité suffisante par rapport au substrat. La dynamique de croissance ou de décroissance de la biomasse est ainsi négligée. C'est pourquoi une cinétique d'ordre 1 vis-à-vis du substrat a souvent été utilisée (Findikakis and Leckie, 1979; Arigala et al., 1995; Manna et al., 1999; Nastev et al., 2001; Hashemi et al., 2002). Cela revient à considérer le modèle de El-Fadel et al. (1996), mais en ne prenant en compte que la première étape. La constante d'hydrolyse doit alors éventuellement tenir compte de dépendances plus complexes. Les autres cinétiques de réactions sont déduites à l'aide de facteurs multiplicatifs intégrant des taux de conversion. Sur la base de cette hypothèse, (Findikakis and Leckie, 1979; Arigala et al., 1995; Zacharof and Butler, 1999; Nastev et al., 2001) ou (Hashemi et al., 2002) intègrent ces cinétiques de premier ordre par rapport au temps et obtiennent des termes sources sous la forme d'exponentielles du temps. Par exemple, dans le cas d'un substrat unique :

$$R_{CH_4} = K_{h\ ana} C_O e^{-K_{h\ ana} t} \quad (1.15)$$

Ici, R_{CH_4} est le taux de production de méthane (mol/L/s), $K_{h\ ana}$ est la constante d'hydrolyse du substrat converti en méthane (1/s), C_O est la capacité totale de génération de biogaz (mol/L) et t est le temps (s). Le problème de ce type d'approche est qu'il n'est valable que dans le cas de régimes " permanents " correspondant à des conditions limites et initiales compatibles avec ce qui est en fait une solution *particulière* du problème réactionnel que l'on appelle communément *intégrale première*. En particulier, on imagine bien que ce type de modèle est incapable de prendre en compte une quelconque variation des conditions locales de disponibilité du substrat par exemple. Or ces termes exponentiels sont couramment utilisés même dans des cas d'études en régimes non permanents, non compatibles avec les conditions d'émergence de cette solution particulière. Il est donc important de bien noter cela afin d'éviter toute erreur d'interprétation.

L'étude bibliographique des modèles décrivant les termes sources anaérobies montre la diversité des approches qui peuvent être adoptées. Tout d'abord, il sera important dans notre approche d'essayer de choisir les modèles les plus adaptés. C'est-à-dire que, compte tenu de nos objectifs de modélisation, il ne sera sans doute pas viable de décrire complètement les schémas réactionnels impliqués. Le choix du schéma simplifié le plus pertinent devra être fait. De plus, les dépendances aux paramètres physiques sont très importantes et il sera nécessaire de les prendre en compte dans les constantes cinétiques que nous utiliserons. Enfin, nous éviterons toute utilisation de la formulation exponentielle des termes de production de biogaz car elle n'est pas adaptée à nos objectifs. Le modèle utilisé sera décrit en détail dans le Chapitre 3.

1.2.4 Modèle retenu

L'objectif des travaux présentés ici est de modéliser le comportement des bioréacteurs. Le principe des bioréacteurs étant de réinjecter les lixiviats dans le but de stabiliser plus rapidement le massif de déchets, et par la même occasion de produire du biogaz plus rapidement, il est primordial de modéliser correctement l'écoulement des liquides et des gaz dans les casiers. De plus, il est nécessaire de pouvoir prévoir au minimum la composition du biogaz en méthane, par conséquent il est également nécessaire de décrire correctement les transferts de masse. L'impact des conditions thermiques à la fois sur le comportement biologique et physique du système est également important. Les transferts d'énergies doivent donc également être considérés avec attention.

Comme le suggère El Fadel et al. (1997), la modélisation des transferts dans les ISD et en particulier dans les bioréacteurs manque d'une vision globale, car peu de modèles cherchent à coupler l'ensemble des transferts et, également, d'une approche physico-chimique précise. Tout d'abord, nous avons pu remarquer que très peu de modèles couplent les périodes aérobies et anaérobies. Ils ne permettent donc pas de décrire le casier sur l'ensemble de son exploitation. Ensuite, la plupart des modèles ne prennent pas en compte le caractère multi-échelles des casiers de stockage. Il est en effet intéressant plutôt que d'appliquer des équations génériques macroscopiques sans savoir si elles sont applicables, de dériver un modèle d'un jeu d'équations microscopiques dont on est certain de la validité. Le couplage entre les écoulements gazeux et liquide est également très rarement pris en compte. Or, les transferts de masse entre ces deux phases sont importants et les écoulements diphasiques en milieu poreux peuvent être sensiblement différents des écoulements monophasiques. Enfin, aucun modèle ne prend en compte de phase biofilm, dont on a vu qu'elle a un rôle primordiale, puisque c'est au sein du biofilm que l'ensemble des processus de biodégradation ont lieu.

Le modèle mathématique que nous présentons dans le Chapitre 2 intègre donc quatre phases distinctes : deux phases mobiles que sont les phases gaz et liquide et deux phases immobiles que sont les phases solide et biofilm. Le modèle permet de décrire les écoulements des phases mobiles via l'utilisation de lois de Darcy généralisées et l'utilisation des équations de Richards est proscrite. Quatre classes de déchets solides sont considérées, ainsi que cinq espèces chimiques majoritairement présentes sous forme gazeuse ou liquide (N_2 , CO_2 , CH_4 , O_2 et H_2O). Le transport de chacune de ces espèces est pris en compte et un modèle cinétique de biodégradation aérobie et anaérobie est développé. Enfin, le modèle intègre également la conservation de l'énergie totale du système. Chacune des équations de conservation à l'échelle macroscopique est dérivée des équations de conservation valables à l'échelle inférieure via un processus de changement d'échelle.

Chapitre 2

Mise en place du modèle mathématique

Dans le Chapitre 1, nous avons défini les bases du modèle conceptuel permettant de décrire les milieux réactifs que représentent les ISD. Le modèle mathématique doit intégrer le transport diphasique de masse et de chaleur dans le milieu poreux formé par les OM, en prenant en compte les mécanismes biologiques régissant la biodégradation de la matière organique. L'ensemble de ces processus de biodégradation doit être localisé dans une phase continue que l'on nomme biofilm. Le modèle doit également pouvoir prendre en compte les hétérogénéités liées à la structure de la matrice poreuse. Pour des raisons pratiques, le modèle développé décrit les phénomènes à une échelle supérieure à la taille caractéristique des plus petites hétérogénéités présentes dans les OM. Ce chapitre a pour objet de développer le modèle mathématique qui sera ensuite utilisé dans le programme et de justifier la forme des équations de conservation utilisées dans ce modèle.

2.1 Objectifs et méthode

Notre objectif est d'obtenir un modèle mathématique permettant de décrire les transferts réactifs couplés de masse et de chaleur au sein des ISD. Ce modèle doit intégrer l'ensemble des fonctionnalités mentionnées dans le choix du modèle conceptuel. L'approche la plus commune consiste à obtenir et à résoudre le système d'équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et de chaleur décrivant les transferts considérés. Or ces équations de conservation ne sont valables que pour des phases continues. Comme nous l'avons mentionné dans le Chapitre 1, la matrice poreuse formée par les OM est fortement hétérogène en taille, en composition ainsi qu'en propriétés physiques. De ce fait, d'un point de vue conceptuel, la distinction des phases continues gaz, liquide, biofilm et solide ne peut se faire qu'à l'échelle du pore, voire à l'échelle du micro-organisme si l'on considère les hétérogénéités de composition des biofilms.

Partant de ce constat, l'idéal pour décrire ce genre de système est d'écrire les équations

de conservations et les relations aux interfaces entre phases à l'échelle du pore, puis de résoudre le système ainsi obtenu par simulation numérique direct (méthode DNS pour "Direct Numerical Solution"). Malheureusement, ce type de simulation est extrêmement coûteuse en ressource informatique et nécessite une connaissance fine de la structure microscopique du matériau considéré. Elle n'est donc pas adaptée pour les calculs sur des systèmes hétérogènes de grandes dimensions, comme les ISD bioréacteurs. De manière classique, il est donc nécessaire d'utiliser une méthode de changement d'échelle afin de s'affranchir de ces difficultés. Le but de l'ensemble de ces méthodes de changement d'échelle est d'obtenir un modèle macroscopique à l'échelle dite de Darcy décrivant le comportement moyen du système considéré indépendamment des échelles supérieures et inférieures. Une telle approche ne peut s'appliquer qu'à des systèmes où les échelles sont

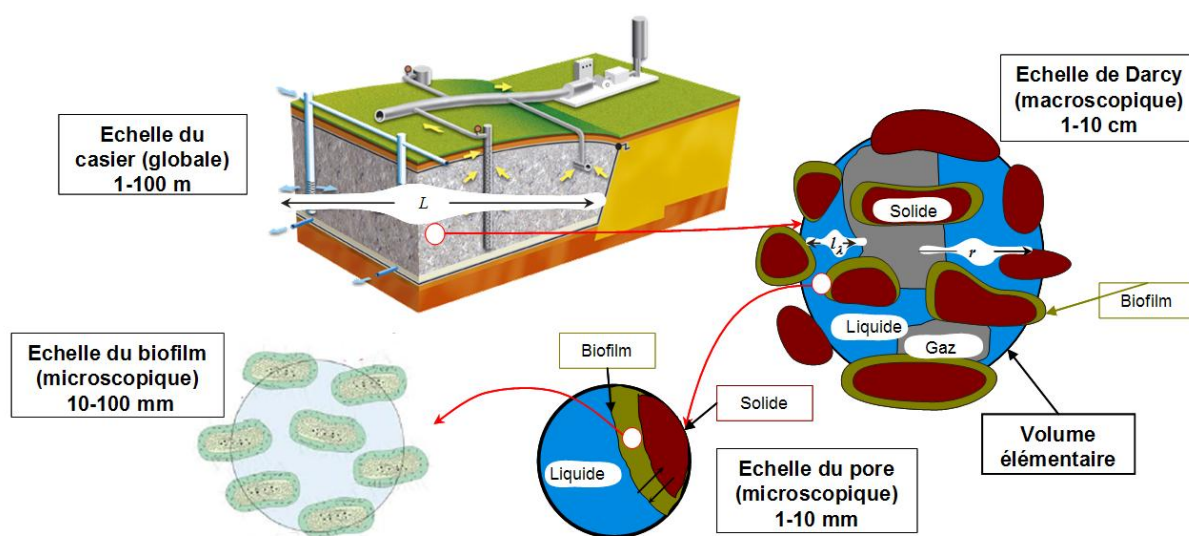


FIG. 2.1 – Différentes échelles caractéristiques

découplées (Bear and Bachmat, 1991; Whitaker, 1999). Sur la Figure 2.1, les différentes échelles qui interviennent lors du processus de modélisation sont représentées : depuis l'échelle du casier de stockage (de dimension L) jusqu'à l'échelle des bactéries en passant par l'échelle du pore (caractérisée par la dimension moyenne du pore l) et par l'échelle macroscopique de Darcy (de dimension caractéristique r). Les conditions de découplage des échelles permettant d'appliquer les méthodes de prise de moyenne volumique sont définies par la relation 2.1.

$$l \ll r \ll L \quad (2.1)$$

Dans le cas des ISD, il semble possible de définir un Volume Élémentaire Représentatif (VER) de dimension caractéristique r permettant de satisfaire aux conditions énoncées par l'équation 2.1. Ce VER est notamment choisi suffisamment petit pour prendre en

compte la structure microscopique du système mais suffisamment grand pour décrire le comportement global du matériau. En d'autres termes, la dimension caractéristique du VER doit notamment être plus grande que la longueur de corrélation des hétérogénéités à l'échelle du pore, et plus petite que la longueur de corrélation des hétérogénéités à l'échelle du massif de déchet. La définition précise du VER en terme de dimension est très difficile à obtenir pour des systèmes complexes comme la matrice poreuse formée par les OM. Néanmoins, nous considérons qu'il est possible de définir une dimension r respectant la relation 2.1 et permettant de définir le VER.

2.1.1 Milieu poreux effectif

Les approches par changement d'échelle sont très répandues dans le développement de modèles mathématiques complexes décrivant en particulier les phénomènes physico-chimiques intervenant dans les milieux poreux. Les recherches sur ces approches ont été particulièrement motivées par les applications hydro-géologiques et pétrolières car elles aident à la description des phénomènes à très grande échelle. En effet, de telles approches permettent d'obtenir un milieu dit effectif qui traduit le comportement moyen d'un milieu hétérogène. L'enjeu des démarches de changement d'échelle est donc de trouver les modèles et d'attribuer les propriétés adéquates au milieu effectif. Dans le domaine du transport multi-constituants réactif en milieux poreux nous pouvons citer par exemple les travaux de Roos et al. (2003) qui développent un modèle de transport macroscopique au sein des piles à combustible ou nos propres travaux Quintard et al. (2006) concernant un modèle général de transport de masse multiconstituant non-linéaire en milieu poreux. Par définition, le milieu effectif doit avoir le même comportement moyen que le milieu détaillé placé dans les mêmes conditions. Contrairement à la majorité des modèles utilisés dans la littérature (cf. Chapitre 1), nous prenons donc le parti de ne pas considérer a priori la forme des équations macroscopiques régissant les phénomènes à l'échelle de Darcy. Nous ne considérons pas de milieu effectif connu "a priori", mais nous cherchons à définir ce milieu ainsi que ses propriétés effectives en utilisant une approche par changement d'échelle. Nous utilisons donc les équations de conservations décrites à l'échelle microscopique pour dériver un système d'équations à l'échelle de Darcy. L'intérêt de la démarche dans notre cas peut être expliqué de la manière suivante. Si les mécanismes de transferts élémentaires (écoulement monophasique, dispersion d'un traceur, etc...) ont fait l'objet de nombreux travaux, le problème considéré dans la thèse est caractérisé par le couplage de nombreux mécanismes, dans un système lui-même déjà très complexe, marqué par la présence de plusieurs phases et constituants. En conséquence, il ne sera pas possible de dériver toutes les équations macroscopiques, en explicitant complètement tous les passages micro-macro.

Il est intéressant, par contre, d'aller le plus loin possible afin de comprendre les problèmes que posent la description macroscopique de tels systèmes, et d'identifier les problèmes non-résolus, qui seront dans la thèse traités de manière semi-heuristique.

2.1.2 Méthodes de changement d'échelle

Comme nous l'avons exposé précédemment, la démarche la plus simple pour obtenir le comportement moyen du système à l'échelle de Darcy consiste à le déduire des résultats de simulation numérique directe à l'échelle microscopique. Cette méthode n'est souvent pas aisée à mettre en oeuvre du fait de la complexité structurelle des milieux considérés. Il existe donc d'autres méthodes théoriques dites de "changement d'échelle" qui servent d'outils à l'obtention d'équations décrivant le comportement moyen du système à partir de considérations microscopiques. Nous ne cherchons pas ici à comparer de façon exhaustive l'ensemble de ces méthodes, mais uniquement à définir et illustrer leur principe. Les méthodes de changement d'échelle cherchent à représenter les champs microscopiques comme la somme de champs moyens et de fluctuations autour de cette moyenne. Dans le cas où ces fluctuations peuvent être reliées aux champs moyens ou à leurs dérivées spatiales, on obtient une forme fermée du système d'équations macroscopiques. Le modèle macroscopique ainsi obtenu peut être utilisé pour décrire les phénomènes régissant le milieu poreux effectif considéré. On notera que la fermeture du système d'équations moyennées n'est pas toujours évidente à résoudre, en particulier lorsque la structure microscopique du milieu poreux est complexe et les mécanismes en jeu nombreux et complexes.

Différentes techniques de changement d'échelle existent. On citera en premier les méthodes stochastiques (Matheron, 1965; Dagan, 1989). Le principe de ces méthodes consiste à considérer les variables physiques comme des variables aléatoires. L'hétérogénéité locale des propriétés du milieu est alors caractérisée par les lois de probabilités associées aux variables aléatoires représentant le milieu. Les propriétés microscopiques du milieu ne sont alors plus considérées comme des valeurs locales, mais comme un échantillon de la variable aléatoire associée. En moyennant ces valeurs locales, on obtient les propriétés du milieu poreux effectif homogène soumis aux mêmes conditions aux limites. Cette méthode se base sur les hypothèses de stationnarité et d'ergodicité et nécessite de connaître les lois de distribution des propriétés locales. Ce type d'approche est largement utilisé dans la littérature, notamment en hydrogéologie et dans le domaine pétrolier.

D'autres méthodes de changement d'échelle dérivent des modèles macroscopiques sans utiliser d'approche statistique. Parmi ces méthodes, on peut citer les méthodes d'homogénéisation introduites par Bensoussan et al. (1978) et Sanchez-Palencia (1980) ou les méthodes de prise de moyenne volumique introduites par Whitaker (1967), Marle (1967)

ou Whitaker (1999). Le principe des méthodes d'homogénéisation consiste à réaliser une analyse asymptotique des variables du problème en utilisant des développements en séries par rapport à un petit paramètre caractéristique du facteur d'échelle micro/macro. Ceci revient à supposer qu'il existe deux types de variables de temps et d'espace. Une famille de variables dites lentes est liée à l'échelle macroscopique et une deuxième famille de variables dites rapides est liée à l'échelle microscopique du système. Le développement des équations de conservation en introduisant ces variables permet d'obtenir un système d'équations pour chacune des deux familles. La "fermeture" du système consiste à introduire une relation entre les deux familles de variables.

Le principe de la méthode de prise de moyenne volumique est similaire. Elle consiste à intégrer les équations du modèle microscopique valables à l'échelle du pore sur un volume d'intégration représenté par le VER et à décomposer les variables microscopiques locales en la somme d'une valeur moyenne macroscopique et d'une déviation spatiale (Gray, 1975; Whitaker, 1999). L'introduction de cette décomposition spatiale dans les équations de conservation écrites à l'échelle du pore permet d'obtenir un système d'équations pour les variables macroscopiques moyennes et un système d'équations pour les déviations spatiales. La résolution approchée de ce système couplé est obtenue sous la forme d'un problème de fermeture permettant de relier les déviations aux champs moyens ou à leurs dérivées spatiales. On obtient alors une forme fermée du système d'équations macroscopiques qui peut être manipulée seule pour traiter les problèmes à l'échelle macroscopique.

Dans notre cas, nous avons utilisé la technique de prise de moyenne volumique pour réaliser le changement d'échelle. La raison de ce choix réside dans le fait que cette méthode apporte un fil directeur précis pour exprimer les bilans globaux, détecter les termes d'échange interfaciaux, etc... Tout comme les méthodes d'homogénéisation, elle n'entraîne pas a priori d'hypothèses très contraignantes sur la microstructure du milieu. D'autre part, elle confère une signification physique explicite aux propriétés moyennes obtenues au terme du processus de changement d'échelle. Ceci peut être très intéressant pour l'exploitation de résultats expérimentaux. Toutes ces méthodes de changement d'échelles sont bien connues aujourd'hui, on ne présentera donc ici que les éléments essentiels à la compréhension, et on renvoie à la littérature pour les discussions classiques sur les approximations utilisées, la démonstration des théorèmes nécessaires, etc... Si l'on considère un système composé de deux phases notées θ et ζ , pour toute variable ψ_θ microscopique associée à la phase θ , on associera une variable moyenne $\langle \psi_\theta \rangle$ définie par l'équation 2.2. $\langle \psi_\theta \rangle$ est appelée moyenne superficielle.

$$\langle \psi_\theta \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}_\theta} \psi_\theta dV \quad (2.2)$$

On définira également la moyenne intrinsèque $\langle \psi_\theta \rangle^\theta$ par l'équation 2.3, moyenne qui a une

signification physique plus directe notamment dans le cas de concentrations.

$$\langle \psi_\theta \rangle^\theta = \frac{1}{\mathcal{V}_\theta} \int_{\mathcal{V}_\theta} \psi_\theta dV \quad (2.3)$$

La moyenne superficielle est reliée à la moyenne intrinsèque via la porosité du milieu à la phase θ (cf. équation 2.4).

$$\langle \psi_\theta \rangle = \epsilon_\theta \langle \psi_\theta \rangle^\theta \quad (2.4)$$

Nous rappelons ci-dessous les théorèmes de prise de moyenne utiles pour la suite du développement :

$$\langle \underline{\nabla} \psi_\theta \rangle = \underline{\nabla} \langle \psi_\theta \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\theta\zeta}} \psi_\theta \underline{n}_{\theta\zeta} dA \quad (2.5)$$

$$\langle \underline{\nabla} \cdot \psi_\theta \rangle = \underline{\nabla} \cdot \langle \psi_\theta \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\theta\zeta}} \psi_\theta \cdot \underline{n}_{\theta\zeta} dA \quad (2.6)$$

$$\left\langle \frac{\partial \psi_\theta}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \psi_\theta \rangle}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\theta\zeta}} \psi_\theta \underline{w}_{\theta\zeta} \cdot \underline{n}_{\theta\zeta} dA \quad (2.7)$$

Dans ce travail, l'intérêt de la prise de moyenne est d'obtenir une description macroscopique des phénomènes que nous souhaitons modéliser et de définir de nouvelles propriétés effectives générées par le processus de changement d'échelle. Dans la suite de ce chapitre, nous allons présenter la démarche utilisée pour obtenir le modèle macroscopique de transport réactif dans les ISD bioréacteurs.

2.2 Modèle microscopique

Comme nous venons de le voir, la première étape de la démarche de changement d'échelle consiste à obtenir le jeu d'équations à l'échelle microscopique qui régit les conservations de masse de chaque constituant que nous souhaitons modéliser, de quantité de mouvement et de chaleur dans chaque continuum. Compte tenu des objectifs développés dans le Chapitre 1, un certain nombre d'hypothèses simplificatrices est considéré. Nous supposons en particulier que les phases solide et biofilm sont immobiles. Cela signifie que le squelette de la phase solide formé par la matrice déchet conserve sa structure, bien que le substrat organique solide soit consommé par biodégradation. Cette hypothèse peut être justifiée par le fait qu'une partie non négligeable de la matrice solide est composée de déchet classé "inerte" qui ne subit aucune dégradation biologique. C'est cette fraction inerte qui fournit à la matrice solide sa structure mécanique. De même, nous ne considérons pas de croissance du biofilm ou de modification de sa structure. Cette hypothèse est plus restrictive, et est largement dictée par l'état d'avancement de la recherche dans

ce domaine. Comme nous l'avons dit précédemment, il n'était pas possible dans le cadre de ce travail de résoudre tous les problèmes. Dans la suite du document, nous utiliserons l'indice γ pour désigner la phase gaz, l'indice λ pour désigner la phase liquide, l'indice β pour désigner la phase biofilm, ainsi que l'indice σ pour désigner la phase solide.

Dans la suite du document, $\omega_{\theta i}$ désigne la fraction massique du constituant i dans la phase θ . Par conséquent, pour chacune des phases, la contrainte définie par l'équation 2.8 sera applicable.

$$\sum_{i \in \theta} \omega_{\theta i} = 1 \quad (2.8)$$

2.2.1 Modélisation du biofilm

Comme nous l'avons signalé précédemment, la phase biofilm est elle-même hétérogène puisqu'elle est constituée d'un mélange d'eau et de matériaux biologiques intra et extracellulaires. Il est donc nécessaire d'obtenir un modèle de biofilm à l'échelle microscopique permettant de décrire la conservation des quantités physiques dans le biofilm et dérivant des équations de conservation à l'échelle sub-microscopique.

La modélisation des biofilms est assez récente et représente un enjeu important pour la compréhension et l'optimisation d'un nombre important de procédés bio-physico-chimiques. La plupart des modèles de biofilms présente les mêmes inconvénients que ceux exposés pour la modélisation des ISD. Picioreanu and Van Loosdrecht (2003) présentent une synthèse des enjeux que représente la modélisation des biofilms. En effet, les techniques récentes d'imagerie et de mesure comme la CSLM (Confocal Scanning Laser Microscopy) permettent de mettre en évidence que la structure des biofilms est complexe et ne se résume pas uniquement à une couche homogène de bactéries. Bien au contraire, suivant les conditions de développement (présence ou non de nutriments, conditions hydrodynamiques locales, etc ...), le développement des biofilms conduit souvent à une structure 3D complexe et hétérogène. Par exemple, Zhang and Herbert (2001) produisent des images 3-D de biofilms en utilisant un microscope à laser confocal. Ceci leur permet en particulier de mesurer la teneur volumique en polymères extra-cellulaires présents dans les biofilms. Ils obtiennent ainsi des indices sur les processus de formation et de développement des biofilms puisque ces substances sont à l'origine de l'adhésion des bactéries. Ces hétérogénéités de structure ont également un impact fort sur les propriétés de transport local au sein du biofilm. Picioreanu and Van Loosdrecht (2003) divisent les modèles de biofilm en deux grandes familles.

La première famille de modèles (IbM : Individual-based Modelling) s'attache à décrire le biofilm du point de vue de chaque bactérie. Par exemple, Kreft et al. (2001) considèrent

les bactéries comme des sphères de volume et de densité variables auxquelles des lois d'évolution et de réaction sont associées. L'utilisation de ce type de modèle comporte deux étapes : dans une première étape, le problème de croissance des bactéries est résolu et, dans une deuxième étape, le transport des espèces et l'écoulement sont résolus. La répétition de ces deux étapes permet de simuler l'évolution du biofilm. L'avantage de ce type de modèle est qu'ils ont une signification directe d'un point de vue microbiologique. En revanche, ce type d'approche est difficile à utiliser si l'on cherche à modéliser des procédés sur des grandes tailles.

La deuxième famille de modèle (BbM : Biomass-based Modelling) considère le biofilm comme un système multiphasique et l'évolution du biofilm n'est plus décrite par la croissance de chaque bactérie, mais par l'évolution dans chaque volume unitaire de la concentration de bactéries. Par rapport à la taille caractéristique des bactéries, ce type de description est macroscopique. Deux types d'approches se distinguent pour décrire l'évolution du biofilm. La première utilisée par Picioeanu (1996) ou Noguera et al. (1999) consiste à utiliser un modèle de biomasse discret permettant de définir l'évolution du biofilm. La zone occupée par la biomasse est divisée en volumes élémentaires et des règles d'invasion par la biomasse de chaque volume élémentaire sont introduites en fonction de la présence ou non de biomasse dans les volumes adjacents. Cette approche discrète ne permet malheureusement pas de décrire physiquement l'évolution du biofilm. La deuxième approche utilisée par les modèles BbM consiste à considérer la biomasse comme un continuum. Un jeu d'équations de conservation est alors écrit pour la phase biofilm dans sa globalité. Par exemple, les travaux de Suchomel et al. (1998); Murphy and Ginn (2000); Eberl et al. (2000); Tiwari and Bowers (2001); Chen-Charpentier and Kojouharov (2003) décrivent les transferts de masse réactifs et de quantité de mouvement dans une phase biofilm en écrivant les équations de conservation classiques pour une phase continue. L'introduction de termes réactifs et de coefficients de diffusion adaptés (Hinson and Kocher, 1996; Stewart, 1998) est alors nécessaire. Il est néanmoins impossible de justifier rigoureusement la validité de ces modèles puisqu'ils ne découlent pas d'équations de conservation écrites pour un milieu "réellement" continu. Même dans une approche multi échelle proposée par Mysliwiec et al. (2001), les équations de conservation classiques sont appliquées à la phase biofilm. Néanmoins, les auteurs signalent que ces équations proviennent d'une première prise de moyenne sur la phase entière.

A propos de l'évaluation des propriétés effectives de diffusion dans les biofilms, Stewart (1998) présente une revue bibliographique des méthodes de mesure existantes. Il décrit les différentes approches possibles pour évaluer correctement les coefficients de diffusion dans les biofilms. En effet, dans beaucoup de publications, faute de pouvoir mesurer les diffusivités réelles dans la phase biofilm, les auteurs utilisent par défaut les valeurs de diffusivité

dans l'eau. Or il s'avère que des mesures de diffusivité par différentes méthodes montrent que les valeurs obtenues sont très différentes de celles que l'on obtient dans l'eau. Ces différences sont principalement dues, d'une part, aux propriétés physico-chimiques des espèces qui diffusent et, d'autre part, à la densité du biofilm (ou, mieux, aux fractions volumiques des cellules et des polymères extracellulaires). Plusieurs études expérimentales se sont attachées à mesurer les propriétés de diffusion effective de certaines substances chimiques dans des biofilms de compositions et de structures diverses. Par exemple, Beuling et al. (1998) utilisent les propriétés magnétiques de certains traceurs pour mesurer la diffusivité effective de l'eau dans des biofilms "synthétiques", qui sont en réalité des gels. Le même type de mesure est appliquée à des biofilms de culture. La comparaison des deux types d'expérience permet d'appréhender l'influence de la teneur en polymères extra-cellulaires sur les propriétés diffusives des biofilms. Beuling et al. (1998) obtiennent ainsi un modèle de diffusion effective de l'eau et du glucose dans les biofilms. Ce modèle corrèle la diffusion effective avec la diffusion en phase continue, la tortuosité du biofilm ainsi que la teneur en particules imperméables. Ces travaux sont complétés et validés par Beuling et al. (2000). De même, partant du constat que les biofilms ont des structures fortement hétérogènes et qu'ils peuvent présenter des "tunnels", Bryers and Drummond (1998) critiquent l'approche classique utilisée pour déterminer les propriétés de transport dans les biofilms. En effet, cette méthode considère que les biofilms se comportent comme des gels homogènes. Or la structure complexe des biofilms influence fortement les propriétés effectives de transport. Bryers and Drummond (1998) utilisent donc les techniques de fluorescence pour mesurer les propriétés de diffusion locale de macromolécules dans un biofilm. Les résultats obtenus mettent en évidence une variation importante des concentrations locales.

Pour prendre en compte la structure du biofilm, Stewart (1998) considère l'équilibre entre la phase aqueuse du biofilm et chaque constituant cellulaire du biofilm. Il compare ensuite différents modèles de diffusion effective introduisant une résistance à la diffusion due à la présence de la biomasse. Le modèle que développe Hinson and Kocher (1996) semble le plus robuste pour décrire l'ensemble de la banque de données expérimentales étudiée par Stewart (1997). Ce modèle suppose que la résistance à la diffusion due aux cellules et aux matériaux extra-cellulaires est additive. Néanmoins, compte tenu de la complexité structurelle des biofilms, aucun modèle d'évaluation des propriétés de transport n'est encore capable de reproduire le comportement macroscopique observé expérimentalement dans les films biologiques. Enfin, une alternative aux approches de modélisation traditionnelles, consiste à la mise en place de modèles microscopiques issus d'une étape de changement d'échelle pour le biofilm (cf. Figure 2.2). Ceci a été discutée par Wood and Whitaker (1998); Wood et al. (2000, 2002a,b, 2004). Le modèle microscopique ob-

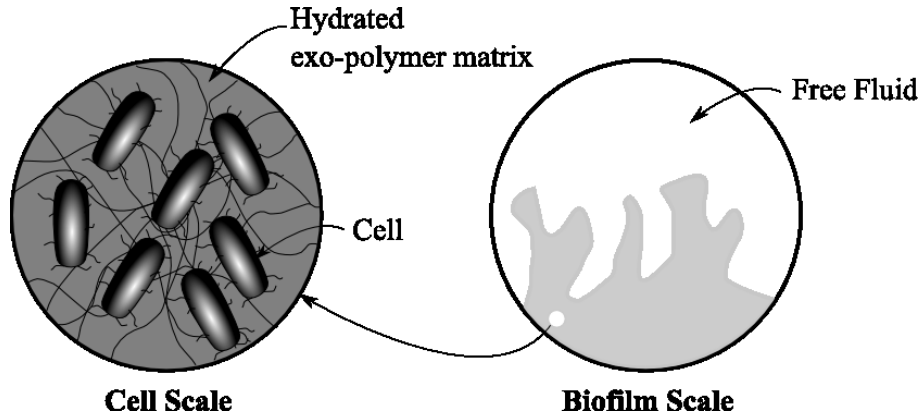


FIG. 2.2 – Changement d'échelle : de l'échelle des cellules à l'échelle du biofilm

tenu considère le biofilm comme une phase continue et introduit des coefficients effectifs de transport au sein de cette phase. Nous nous baserons sur les développements proposés dans ces articles pour définir les équations de conservations microscopiques que nous utiliserons pour décrire la phase biofilm.

2.2.2 Espèces gazeuses

Conservation de masse. Nous considérons ici le modèle microscopique de conservation de masse des espèces gazeuses. Comme nous l'avons mentionné plus haut, ces espèces sont le dioxygène (O_2), le dioxyde de carbone (CO_2), le méthane (CH_4) ainsi que le diazote (N_2). Dans l'ensemble de cette partie, l'indice i désignera indépendamment l'une de ces espèces. Les équations 2.9 et 2.10 décrivent respectivement la conservation de l'espèce i dans la phase gaz et la phase liquide.

$$\frac{\partial \rho_\gamma \omega_{\gamma i}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\gamma \omega_{\gamma i} \underline{v}_\gamma + \underline{j}_{\gamma i}) = 0 \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial \rho_\lambda \omega_{\lambda i}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\lambda \omega_{\lambda i} \underline{v}_\lambda + \underline{j}_{\lambda i}) = 0 \quad (2.10)$$

Nous considérons que la phase biofilm est immobile puisqu'elle est adsorbée sur la surface solide formée par le substrat que nous considérons elle-même immobile. L'équation 2.11 décrit le transport d'une espèce i dissoute dans la phase biofilm et majoritairement présente sous forme gazeuse.

$$\frac{\partial \rho_\beta \omega_{\beta i}}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{j}_{\beta i}) = r_{\beta i} \quad (2.11)$$

Conditions aux interfaces. A chacune des interfaces entre phases, des conditions de flux ou d'équilibre doivent être introduites de façon à compléter le problème. Pour les flux

de masse aux interfaces sont imposées des conditions de conservation de flux (équations 2.12 à 2.14).

$$\underline{n}_{\gamma\lambda} \cdot \left[\rho_{\gamma}\omega_{\gamma i} \left(\underline{v}_{\gamma} - \underline{w}_{\gamma\lambda} \right) + \underline{j}_{\gamma i} \right] = \underline{n}_{\gamma\lambda} \cdot \left[\rho_{\lambda}\omega_{\lambda i} \left(\underline{v}_{\lambda} - \underline{w}_{\gamma\lambda} \right) + \underline{j}_{\lambda i} \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\gamma\lambda} \quad (2.12)$$

$$\underline{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[-\rho_{\beta}\omega_{\beta i}\underline{w}_{\beta\gamma} + \underline{j}_{\beta i} \right] = \underline{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[\rho_{\gamma}\omega_{\gamma i} \left(\underline{v}_{\gamma} - \underline{w}_{\beta\gamma} \right) + \underline{j}_{\gamma i} \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\beta\gamma} \quad (2.13)$$

$$\underline{n}_{\beta\lambda} \cdot \left[-\rho_{\beta}\omega_{\beta i}\underline{w}_{\beta\lambda} + \underline{j}_{\beta i} \right] = \underline{n}_{\beta\lambda} \cdot \left[\rho_{\lambda}\omega_{\lambda i} \left(\underline{v}_{\lambda} - \underline{w}_{\beta\lambda} \right) + \underline{j}_{\lambda i} \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\beta\lambda} \quad (2.14)$$

Enfin, nous considérons que les constituants majoritairement gazeux ne sont impliqués sous aucune forme dans les processus de transfert vers la phase solide. Ceci se traduit par les expressions 2.15 à 2.17.

$$\underline{n}_{\gamma\sigma} \cdot \left[\rho_{\gamma}\omega_{\gamma i} \left(\underline{v}_{\gamma} - \underline{w}_{\gamma\sigma} \right) + \underline{j}_{\gamma i} \right] = 0 \text{ sur } \mathcal{A}_{\gamma\sigma} \quad (2.15)$$

$$\underline{n}_{\lambda\sigma} \cdot \left[\rho_{\lambda}\omega_{\lambda i} \left(\underline{v}_{\lambda} - \underline{w}_{\lambda\sigma} \right) + \underline{j}_{\lambda i} \right] = 0 \text{ sur } \mathcal{A}_{\lambda\sigma} \quad (2.16)$$

$$\underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[-\rho_{\beta}\omega_{\beta i}\underline{w}_{\beta\sigma} + \underline{j}_{\beta i} \right] = 0 \text{ sur } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (2.17)$$

Ensuite, l'équilibre des potentiels chimiques de part et d'autre de l'interface doit être respecté afin d'assurer l'équilibre thermodynamique du système (équations 2.18 à 2.20).

$$\mu_{\gamma i} = \mu_{\lambda i} \text{ condition d'équilibre chimique sur } \mathcal{A}_{\gamma\lambda} \quad (2.18)$$

$$\mu_{\beta i} = \mu_{\gamma i} \text{ condition d'équilibre chimique sur } \mathcal{A}_{\beta\gamma} \quad (2.19)$$

$$\mu_{\beta i} = \mu_{\lambda i} \text{ condition d'équilibre chimique sur } \mathcal{A}_{\beta\lambda} \quad (2.20)$$

2.2.3 Cas de l'eau

Conservation de masse. Nous nous intéressons ici au modèle microscopique de conservation de masse de l'eau. L'eau est le seul constituant que nous considérons qui puisse être présent dans toutes les phases. Les équations 2.21 à 2.24 décrivent la conservation de masse de l'eau dans chaque phase.

$$\frac{\partial \rho_{\gamma}\omega_{\gamma H_2O}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_{\gamma}\omega_{\gamma H_2O}\underline{v}_{\gamma} + \underline{j}_{\gamma H_2O} \right) = 0 \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial \rho_{\lambda}\omega_{\lambda H_2O}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_{\lambda}\omega_{\lambda H_2O}\underline{v}_{\lambda} + \underline{j}_{\lambda H_2O} \right) = 0 \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial \rho_{\beta}\omega_{\beta H_2O}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\underline{j}_{\beta H_2O} \right) = r_{\beta H_2O} \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial \rho_\sigma \omega_{\sigma H_2O}}{\partial t} = 0 \quad (2.24)$$

Conditions aux interfaces. Les conditions de flux d'eau aux interfaces sont données par les équations 2.25 à 2.30

$$\underline{n}_{\gamma\lambda} \cdot \left[\rho_\gamma \omega_{\gamma H_2O} (\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\gamma\lambda}) + \underline{j}_{\gamma H_2O} \right] = \underline{n}_{\gamma\lambda} \cdot \left[\rho_\lambda \omega_{\lambda H_2O} (\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\gamma\lambda}) + \underline{j}_{\lambda H_2O} \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\gamma\lambda} \quad (2.25)$$

$$\underline{n}_{\gamma\sigma} \cdot \left[\rho_\gamma \omega_{\gamma H_2O} (\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\gamma\sigma}) + \underline{j}_{\gamma H_2O} \right] = \underline{n}_{\gamma\sigma} \cdot \left[-\rho_\sigma \omega_{\sigma H_2O} \underline{w}_{\gamma\sigma} \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\gamma\sigma} \quad (2.26)$$

$$\underline{n}_{\lambda\sigma} \cdot \left[\rho_\lambda \omega_{\lambda H_2O} (\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\lambda\sigma}) + \underline{j}_{\lambda H_2O} \right] = \underline{n}_{\lambda\sigma} \cdot \left[-\rho_\sigma \omega_{\sigma H_2O} \underline{w}_{\lambda\sigma} \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\lambda\sigma} \quad (2.27)$$

$$\underline{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[-\rho_\beta \omega_{\beta H_2O} \underline{w}_{\beta\gamma} + \underline{j}_{\beta H_2O} \right] = \underline{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[\rho_\gamma \omega_{\gamma H_2O} (\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\beta\gamma}) + \underline{j}_{\gamma H_2O} \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\beta\gamma} \quad (2.28)$$

$$\underline{n}_{\beta\lambda} \cdot \left[-\rho_\beta \omega_{\beta H_2O} \underline{w}_{\beta\lambda} + \underline{j}_{\beta H_2O} \right] = \underline{n}_{\beta\lambda} \cdot \left[\rho_\lambda \omega_{\lambda H_2O} (\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\beta\lambda}) + \underline{j}_{\lambda H_2O} \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\beta\lambda} \quad (2.29)$$

$$\underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[-\rho_\beta \omega_{\beta H_2O} \underline{w}_{\beta\sigma} + \underline{j}_{\beta H_2O} \right] = \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[\rho_\sigma \omega_{\sigma H_2O} (\underline{v}_\sigma - \underline{w}_{\beta\sigma}) \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (2.30)$$

L'équilibre des potentiels chimiques de l'eau aux différentes interfaces est donné par les équations 2.31 à 2.36.

$$\mu_{\gamma H_2O} = \mu_{\lambda H_2O} \text{ condition d'équilibre chimique sur } \mathcal{A}_{\gamma\lambda} \quad (2.31)$$

$$\mu_{\beta H_2O} = \mu_{\gamma H_2O} \text{ condition d'équilibre chimique sur } \mathcal{A}_{\beta\gamma} \quad (2.32)$$

$$\mu_{\beta H_2O} = \mu_{\lambda H_2O} \text{ condition d'équilibre chimique sur } \mathcal{A}_{\beta\lambda} \quad (2.33)$$

$$\mu_{\gamma H_2O} = \mu_{\sigma H_2O} \text{ condition d'équilibre chimique sur } \mathcal{A}_{\gamma\sigma} \quad (2.34)$$

$$\mu_{\lambda H_2O} = \mu_{\sigma H_2O} \text{ condition d'équilibre chimique sur } \mathcal{A}_{\lambda\sigma} \quad (2.35)$$

$$\mu_{\beta H_2O} = \mu_{\sigma H_2O} \text{ condition d'équilibre chimique sur } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (2.36)$$

L'ensemble de ces équations (2.21 à 2.36) traduit le fait que l'eau peut être présente dans toutes les phases. En particulier, elle peut être présente dans la phase solide, c'est à dire piégée par capillarité dans les micro-porosités présentes dans la phase solide.

2.2.4 Constituants du substrat solide

Conservation de masse. En ce qui concerne les différents constituants du substrat solide (sauf la partie inerte qui n'intervient pas), nous considérons qu'ils peuvent être hydrolysés vers la phase biofilm avant d'y être consommé. Par conséquent, si l'indice b désigne indépendamment le substrat rapidement biodégradable, le substrat lentement biodégradable ou le substrat très lentement biodégradable, les équations de conservation de masse de ces éléments dans les phases solide et biofilm prennent la forme des équations 2.37 et 2.38.

$$\frac{\partial \rho_{\sigma} \omega_{\sigma b}}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\underline{j}_{\sigma b}) = 0 \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial \rho_{\beta} \omega_{\beta b}}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\underline{j}_{\beta b}) = r_{\beta b} \quad (2.38)$$

Conditions aux interface. Comme nous considérons que les éléments présents dans le substrat solide ne peuvent pas être transportés vers les autres phases, à l'exception de la phase biofilm vers laquelle ils sont hydrolysés avant d'être minéralisés, les conditions de flux aux interfaces entre la phase solide et les phases liquide et gaz, ainsi qu'entre la phase biofilm et les phases liquides et gaz, sont des conditions de flux nul. En revanche, une condition de continuité des flux est appliquée à l'interface entre la phase solide et la phase biofilm. L'ensemble de ces conditions sont présentées ci-après (équations 2.39 à 2.43).

$$\underline{n}_{\sigma\lambda} \cdot \left[-\rho_{\sigma} \omega_{\sigma b} \underline{w}_{\sigma\lambda} + \underline{j}_{\sigma b} \right] = 0 \text{ sur } \mathcal{A}_{\sigma\lambda} \quad (2.39)$$

$$\underline{n}_{\sigma\gamma} \cdot \left[-\rho_{\sigma} \omega_{\sigma b} \underline{w}_{\sigma\gamma} + \underline{j}_{\sigma b} \right] = 0 \text{ sur } \mathcal{A}_{\sigma\gamma} \quad (2.40)$$

$$\underline{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[-\rho_{\beta} \omega_{\beta b} \underline{w}_{\beta\gamma} + \underline{j}_{\beta b} \right] = 0 \text{ sur } \mathcal{A}_{\beta\gamma} \quad (2.41)$$

$$\underline{n}_{\beta\lambda} \cdot \left[-\rho_{\beta} \omega_{\beta b} \underline{w}_{\beta\lambda} + \underline{j}_{\beta b} \right] = 0 \text{ sur } \mathcal{A}_{\beta\lambda} \quad (2.42)$$

$$\underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[-\rho_{\beta} \omega_{\beta b} \underline{w}_{\beta\sigma} + \underline{j}_{\beta b} \right] = \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[-\rho_{\sigma} \omega_{\sigma b} \underline{w}_{\beta\sigma} + \underline{j}_{\sigma b} \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (2.43)$$

L'équilibre chimique du constituant b à l'interface entre les phases solide et biofilm est décrit par la relation 2.44.

$$\mu_{\beta b} = \mu_{\sigma b} \text{ condition d'équilibre chimique sur } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (2.44)$$

2.2.5 Equation de continuité pour la phase gaz

Conservation de masse de la phase gazeuse. En sommant les équations 2.9 pour l'ensemble des constituants i présents dans la phase gaz avec l'équation 2.21, on obtient

l'équation de conservation de la masse de gaz totale (2.45).

$$\frac{\partial \rho_\gamma}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\rho_\gamma \underline{v}_\gamma) = 0 \quad (2.45)$$

L'obtention de cette dernière relation est basée sur le fait que la somme des fractions massiques des constituants de la phase gaz est égale à l'unité (cf. condition 2.8) et que la somme de l'ensemble des flux diffusifs pour chacun des constituants de la phase gazeuse est nulle.

Conditions aux interfaces. De la même manière, en sommant sur les N espèces présentes dans le gaz les conditions de flux représentées par les équations 2.12 à 2.17, 2.26 et 2.28, nous obtenons les conditions aux interfaces associées à l'équation 2.45 :

$$\underline{n}_{\gamma\lambda} \cdot (\rho_\gamma \underline{v}_\gamma) = \underline{n}_{\gamma\lambda} \cdot (\rho_\lambda \underline{v}_\lambda) \text{ sur } \mathcal{A}_{\gamma\lambda} \quad (2.46)$$

$$\underline{n}_{\gamma\theta} \cdot (\rho_\gamma \underline{v}_\gamma) = 0 \text{ sur } \mathcal{A}_{\gamma\theta} \text{ pour } \theta = \beta, \sigma \quad (2.47)$$

2.2.6 Equation de continuité pour la phase liquide

Conservation de masse de la phase liquide. Comme nous l'avons fait pour la phase gaz, en sommant les équations 2.10 pour l'ensemble des constituants présents dans la phase liquide avec l'équation 2.22, nous obtenons l'équation de continuité de la phase liquide 2.48

$$\frac{\partial \rho_\lambda}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot (\rho_\lambda \underline{v}_\lambda) = 0 \quad (2.48)$$

Conditions aux interfaces. La condition de continuité des flux entre la phase liquide et gaz est exprimée par l'équation 2.46. Les autres conditions aux interfaces sont résumées par la relation 2.49 qui exprime que les flux de masse depuis la phase liquide vers les phases biofilm et solide sont nuls.

$$\underline{n}_{\lambda\theta} \cdot (\rho_\lambda \underline{v}_\lambda) = 0 \text{ sur } \mathcal{A}_{\lambda\theta} \text{ pour } \theta = \beta, \sigma \quad (2.49)$$

2.2.7 Equation de continuité pour la phase biofilm

Conservation de masse de la phase biofilm. Comme nous avons considéré que la phase biofilm est immobile et est le lieu privilégié de l'ensemble des réactions biologiques, l'équation de continuité de la phase biofilm est la suivante :

$$\frac{\partial \rho_\beta}{\partial t} = \sum_{i \in \beta} r_{\beta i} \quad (2.50)$$

Conditions aux interfaces. Les relations 2.47 et 2.49 traduisent que les flux de masse depuis le biofilm vers les phase gaz et liquide sont globalement nuls. La vitesse du biofilm étant nulle, aucune autre relation avec l'interface solide n'a besoin d'être ajoutée.

2.2.8 Equation de continuité pour la phase solide

Conservation de masse de la phase solide. L'équation de continuité de la phase solide est donnée par la relation 2.51

$$\frac{\partial \rho_\sigma}{\partial t} = 0 \quad (2.51)$$

Conditions aux interfaces. La vitesse de la phase solide étant nulle, les conditions aux interfaces pour la phase solide sont entièrement définies par les relations 2.47 et 2.49.

2.2.9 Quantité de mouvement

Conservation de la quantité de mouvement. Nous nous intéressons ici à la conservation de la quantité de mouvement de chaque phase mobile. Nous considérons que les phases biofilm et solide sont immobiles, par conséquent nous ne considérerons la quantité de mouvement que des phases liquide et gaz. L'équation 2.52 décrit la conservation de la quantité de mouvement de la phase θ , θ représentant l'une des phases mobiles (gaz ou liquide).

$$\frac{\partial \rho_\theta \underline{v}_\theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\theta \underline{v}_\theta \underline{v}_\theta) = -\nabla p_\theta + \rho_\theta \underline{f}_\theta + \eta_\theta \nabla^2 \underline{v}_\theta \quad (2.52)$$

Conditions aux interfaces. Les conditions de continuité des flux aux interfaces sont données par les relations suivantes :

$$\underline{n}_{\gamma\sigma} \cdot \left[\rho_\gamma \underline{v}_\gamma (\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\gamma\sigma}) - \underline{\sigma}_\gamma \right] = \underline{n}_{\gamma\sigma} \cdot \left[\rho_\sigma \underline{v}_\sigma (\underline{v}_\sigma - \underline{w}_{\gamma\sigma}) - \underline{\sigma}_\sigma \right] - 2H_{\gamma\sigma} s_{\gamma\sigma} \underline{n}_{\gamma\sigma} \text{ sur } \mathcal{A}_{\gamma\sigma} \quad (2.53)$$

$$\underline{n}_{\gamma\beta} \cdot \left[\rho_\gamma \underline{v}_\gamma (\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\gamma\beta}) - \underline{\sigma}_\gamma \right] = \underline{n}_{\gamma\beta} \cdot \left[\rho_\beta \underline{v}_\beta (\underline{v}_\beta - \underline{w}_{\gamma\beta}) - \underline{\sigma}_\beta \right] - 2H_{\gamma\beta} s_{\gamma\beta} \underline{n}_{\gamma\beta} \text{ sur } \mathcal{A}_{\gamma\beta} \quad (2.54)$$

$$\underline{n}_{\gamma\lambda} \cdot \left[\rho_\gamma \underline{v}_\gamma (\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\gamma\lambda}) - \underline{\sigma}_\gamma \right] = \underline{n}_{\gamma\lambda} \cdot \left[\rho_\lambda \underline{v}_\lambda (\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\gamma\lambda}) - \underline{\sigma}_\lambda \right] - 2H_{\gamma\lambda} s_{\gamma\lambda} \underline{n}_{\gamma\lambda} \text{ sur } \mathcal{A}_{\gamma\lambda} \quad (2.55)$$

$$\underline{n}_{\lambda\sigma} \cdot \left[\rho_\lambda \underline{v}_\lambda (\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\lambda\sigma}) - \underline{\sigma}_\lambda \right] = \underline{n}_{\lambda\sigma} \cdot \left[\rho_\sigma \underline{v}_\sigma (\underline{v}_\sigma - \underline{w}_{\lambda\sigma}) - \underline{\sigma}_\sigma \right] - 2H_{\lambda\sigma} s_{\lambda\sigma} \underline{n}_{\lambda\sigma} \text{ sur } \mathcal{A}_{\lambda\sigma} \quad (2.56)$$

$$\underline{n}_{\lambda\beta} \cdot \left[\rho_\lambda \underline{v}_\lambda (\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\lambda\beta}) - \underline{\sigma}_\lambda \right] = \underline{n}_{\lambda\beta} \cdot \left[\rho_\beta \underline{v}_\beta (\underline{v}_\beta - \underline{w}_{\lambda\beta}) - \underline{\sigma}_\beta \right] - 2H_{\lambda\beta} s_{\lambda\beta} \underline{n}_{\lambda\beta} \text{ sur } \mathcal{A}_{\lambda\beta} \quad (2.57)$$

$$\left(\underline{\underline{I}} - \underline{n_{\gamma\sigma}} \underline{n_{\gamma\sigma}}\right) \cdot \underline{v_\gamma} = \left(\underline{\underline{I}} - \underline{n_{\gamma\sigma}} \underline{n_{\gamma\sigma}}\right) \cdot \underline{v_\sigma} \text{ condition de non-glissement sur } \mathcal{A}_{\gamma\sigma} \quad (2.58)$$

$$\left(\underline{\underline{I}} - \underline{n_{\gamma\beta}} \underline{n_{\gamma\beta}}\right) \cdot \underline{v_\gamma} = \left(\underline{\underline{I}} - \underline{n_{\gamma\beta}} \underline{n_{\gamma\beta}}\right) \cdot \underline{v_\beta} \text{ condition de non-glissement sur } \mathcal{A}_{\gamma\beta} \quad (2.59)$$

$$\left(\underline{\underline{I}} - \underline{n_{\gamma\lambda}} \underline{n_{\gamma\lambda}}\right) \cdot \underline{v_\gamma} = \left(\underline{\underline{I}} - \underline{n_{\gamma\lambda}} \underline{n_{\gamma\lambda}}\right) \cdot \underline{v_\lambda} \text{ condition de non-glissement sur } \mathcal{A}_{\gamma\lambda} \quad (2.60)$$

$$\left(\underline{\underline{I}} - \underline{n_{\lambda\sigma}} \underline{n_{\lambda\sigma}}\right) \cdot \underline{v_\lambda} = \left(\underline{\underline{I}} - \underline{n_{\lambda\sigma}} \underline{n_{\lambda\sigma}}\right) \cdot \underline{v_\sigma} \text{ condition de non-glissement sur } \mathcal{A}_{\lambda\sigma} \quad (2.61)$$

$$\left(\underline{\underline{I}} - \underline{n_{\lambda\beta}} \underline{n_{\lambda\beta}}\right) \cdot \underline{v_\lambda} = \left(\underline{\underline{I}} - \underline{n_{\lambda\beta}} \underline{n_{\lambda\beta}}\right) \cdot \underline{v_\beta} \text{ condition de non-glissement sur } \mathcal{A}_{\lambda\beta} \quad (2.62)$$

2.2.10 Energie

Conservation de l'énergie. Nous considérons ici la conservation de l'énergie de chacune des phases gaz, liquide, biofilm et solide. L'énergie de chaque phase est exprimée en terme d'enthalpie massique. Ainsi, si l'indice θ désigne indifféremment l'une des quatre phases considérées, et l'indice i désigne l'un des constituants chimiques de la phase θ , alors le terme $h_{\theta i}$ représente l'enthalpie massique du constituant i dans la phase θ . Compte tenu des faibles vitesses mises en jeu dans les ISD, nous pouvons simplifier l'équation de conservation de l'énergie en négligeant les termes de dissipation visqueuse. Les équations 2.63 et 2.64 décrivent la conservation de l'énergie des phases mobiles : gaz et liquide.

$$\frac{\partial \sum_{i \in \gamma} [\rho_\gamma \omega_{\gamma i} h_{\gamma i}]}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left(\sum_{i \in \gamma} [h_{\gamma i} (\rho_\gamma \omega_{\gamma i} \underline{v_\gamma} + \underline{j_{\gamma i}})] \right) = \underline{\nabla} \cdot (\Lambda_\gamma \underline{\nabla} T_\gamma) \quad (2.63)$$

$$\frac{\partial \sum_{i \in \lambda} [\rho_\lambda \omega_{\lambda i} h_{\lambda i}]}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left(\sum_{i \in \lambda} [h_{\lambda i} (\rho_\lambda \omega_{\lambda i} \underline{v_\lambda} + \underline{j_{\lambda i}})] \right) = \underline{\nabla} \cdot (\Lambda_\lambda \underline{\nabla} T_\lambda) \quad (2.64)$$

Comme nous considérons que les phases biofilm et solide sont immobiles et qu'aucune forme de diffusion moléculaire n'est possible au sein de la phase solide, l'expression des équations de conservation de l'énergie de ces deux phases peut être simplifiée (2.65 et 2.66).

$$\frac{\partial \sum_{i \in \beta} [\rho_\beta \omega_{\beta i} h_{\beta i}]}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left(\sum_{i \in \beta} [h_{\beta i} \underline{j_{\beta i}}] \right) = \underline{\nabla} \cdot (\Lambda_\beta \underline{\nabla} T_\beta) + \psi_\beta \quad (2.65)$$

$$\frac{\partial \sum_{i \in \sigma} [\rho_\sigma \omega_{\sigma i} h_{\sigma i}]}{\partial t} = \underline{\nabla} \cdot (\Lambda_\sigma \underline{\nabla} T_\sigma) \quad (2.66)$$

A chacune des interfaces, des conditions de continuité des flux énergétiques doivent être prises en compte. Ces équations sont présentées par les relations 2.67 à 2.72.

$$\begin{aligned} & \underline{n}_{\lambda\gamma} \cdot \left[\sum_{i \in \lambda} \left[\rho_{\lambda} \omega_{\lambda j} h_{\lambda ij} \left(\underline{v}_{\lambda} + \underline{j}_{\lambda j} \right) \right] - \Lambda_{\lambda} \underline{\nabla} T_{\lambda} \right] \\ = & \underline{n}_{\lambda\gamma} \cdot \left[\sum_{i \in \gamma} \left[\rho_{\gamma} \omega_{\gamma j} h_{\gamma ij} \left(\underline{v}_{\gamma} + \underline{j}_{\gamma j} \right) \right] - \Lambda_{\gamma} \underline{\nabla} T_{\gamma} \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\lambda\gamma} \end{aligned} \quad (2.67)$$

$$\begin{aligned} & \underline{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[\sum_{i \in \beta} \left[\rho_{\beta} \omega_{\beta j} h_{\beta ij} \underline{j}_{\beta j} \right] - \Lambda_{\beta} \underline{\nabla} T_{\beta} \right] \\ = & \underline{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[\sum_{i \in \gamma} \left[\rho_{\gamma} \omega_{\gamma j} h_{\gamma ij} \left(\underline{v}_{\gamma} + \underline{j}_{\gamma j} \right) \right] - \Lambda_{\gamma} \underline{\nabla} T_{\gamma} \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\beta\gamma} \end{aligned} \quad (2.68)$$

$$\begin{aligned} & \underline{n}_{\beta\lambda} \cdot \left[\sum_{i \in \beta} \left[\rho_{\beta} \omega_{\beta j} h_{\beta ij} \underline{j}_{\beta j} \right] - \Lambda_{\beta} \underline{\nabla} T_{\beta} \right] \\ = & \underline{n}_{\beta\lambda} \cdot \left[\sum_{i \in \lambda} \left[\rho_{\lambda} \omega_{\lambda j} h_{\lambda ij} \left(\underline{v}_{\lambda} + \underline{j}_{\lambda j} \right) \right] - \Lambda_{\lambda} \underline{\nabla} T_{\lambda} \right] \text{ sur } \mathcal{A}_{\beta\lambda} \end{aligned} \quad (2.69)$$

$$\underline{n}_{\gamma\sigma} \cdot \left[\sum_{i \in \gamma} \left[\rho_{\gamma} \omega_{\gamma j} h_{\gamma ij} \left(\underline{v}_{\gamma} + \underline{j}_{\gamma j} \right) \right] - \Lambda_{\gamma} \underline{\nabla} T_{\gamma} \right] = \underline{n}_{\gamma\sigma} \cdot [\Lambda_{\sigma} \underline{\nabla} T_{\sigma}] \text{ sur } \mathcal{A}_{\gamma\sigma} \quad (2.70)$$

$$\underline{n}_{\lambda\sigma} \cdot \left[\sum_{i \in \lambda} \left[\rho_{\lambda} \omega_{\lambda j} h_{\lambda ij} \left(\underline{v}_{\lambda} + \underline{j}_{\lambda j} \right) \right] - \Lambda_{\lambda} \underline{\nabla} T_{\lambda} \right] = \underline{n}_{\lambda\sigma} \cdot [\Lambda_{\sigma} \underline{\nabla} T_{\sigma}] \text{ sur } \mathcal{A}_{\lambda\sigma} \quad (2.71)$$

$$\underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[\sum_{i \in \beta} \left[\rho_{\beta} \omega_{\beta j} h_{\beta ij} \underline{j}_{\beta j} \right] - \Lambda_{\beta} \underline{\nabla} T_{\beta} \right] = \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot [\Lambda_{\sigma} \underline{\nabla} T_{\sigma}] \text{ sur } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (2.72)$$

Nous introduisons également les conditions d'équilibres thermiques aux interfaces (équations 2.73 à 2.75).

$$T_{\beta} = T_{\sigma} \text{ condition d'équilibre thermique sur } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (2.73)$$

$$T_{\beta} = T_{\lambda} \text{ condition d'équilibre thermique sur } \mathcal{A}_{\beta\lambda} \quad (2.74)$$

$$T_{\beta} = T_{\gamma} \text{ condition d'équilibre thermique sur } \mathcal{A}_{\beta\gamma} \quad (2.75)$$

2.3 Modèle macroscopique

En appliquant la méthode de prise de moyenne volumique au modèle microscopique décrivant les phénomènes de transport réactif de masse et de chaleur à l'échelle du pore, nous allons étudier plus en détail les problèmes liés à la dérivation d'un modèle macroscopique pour un milieu poreux équivalent à l'échelle de Darcy, dans le cas du modèle

conceptuel de stockage que nous avons défini. Ce modèle sera la base sur laquelle sera fondée l'ensemble de la démarche de développement de l'outil de simulation numérique.

2.3.1 Loi de Darcy

La description de la conservation de la quantité de mouvement pour des écoulements diphasiques en milieu poreux à l'échelle de Darcy est largement documentée dans la littérature. Par conséquent, nous ne décrirons pas explicitement le développement d'un nouveau modèle de conservation de quantité de mouvement macroscopique et nous nous baserons sur les modèles classiques disponibles dans la littérature. On admettra ici que les couplages ne viennent pas fortement perturber l'écoulement diphasique, ou, en d'autres termes, que les résultats de changement d'échelle pour un écoulement diphasique simple sont toujours valables. Cela s'appuie sur le fait que, dans les installations de stockage considérées, les temps caractéristiques pour les mécanismes qui pourraient venir perturber le bilan de quantité de mouvement, comme le changement de phase ou les termes sources réactifs, sont très longs par rapport aux temps caractéristiques associés au déplacement des fluides dans le cas de l'injection de lixiviat.

Comme nous l'avons vu dans le Chapitre 1, la loi permettant de décrire les écoulements monophasiques en milieu poreux est appelée *loi de Darcy*, du nom de son inventeur. Cette loi est une loi empirique, mais beaucoup de travaux théoriques ont permis de la valider pour les écoulements monophasiques incompressibles. Par exemple, sous des hypothèses d'incompressibilité, Sanchez-Palencia (1980), Whitaker (1986a) ou Whitaker (1999) appliquent la méthode de prise de moyenne volumique au problème microscopique décrit par les équations 2.52 à 2.62. Les résultats obtenus permettent ainsi de valider théoriquement l'utilisation de la loi de Darcy dans le cas de milieux poreux homogènes et hétérogènes.

Néanmoins, il s'avère que la forme de l'équation de Darcy utilisée pour décrire les écoulements monophasiques n'est pas adaptée pour décrire les écoulements diphasiques en milieu poreux. C'est pourquoi de nombreux travaux ont permis de développer une forme adaptée de l'équation de Darcy qui permet de décrire les écoulements conjoints de deux phases mobiles. Les lois d'écoulements obtenues sont alors appelées *lois de Darcy généralisées*. Pour plus de détails quant au développement théorique de ces lois, on pourra se référer aux travaux de Whitaker (1986b), Auriault (1987), Lasseux et al. (1996), Hassani-zadeh and Gray (1997), Hilfer (1998) ou Wang (2000). Les équations de Darcy généralisées sont présentées par les relations 2.76 pour la phase gaz et 2.77 pour la phase liquide.

$$\epsilon_\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma = -\frac{1}{\eta_\gamma} \underline{k}_\gamma \cdot (\nabla \langle p_\gamma \rangle^\gamma - \rho_\gamma \underline{g}) + \epsilon_\lambda \underline{k}_{\gamma\lambda} \cdot \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda \quad (2.76)$$

$$\epsilon_\lambda \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda = -\frac{1}{\eta_\lambda} \underline{k}_\lambda \cdot (\nabla \langle p_\lambda \rangle^\lambda - \rho_\lambda \underline{g}) + \epsilon_\gamma \underline{k}_{\lambda\gamma} \cdot \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \quad (2.77)$$

Les termes $\epsilon_\lambda \underline{k}_{\gamma\lambda} \cdot \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda$ et $\epsilon_\gamma \underline{k}_{\lambda\gamma} \cdot \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma$ représentent des termes de couplages visqueux entre les deux phases mobiles présentes dans le milieu.

Le principe général utilisé pour obtenir la forme macroscopique des équations d'écoulements diphasiques appelées *lois de Darcy généralisées* consiste à appliquer une méthode de changement d'échelle aux équations de conservation de quantité de mouvement écrite à l'échelle du pore. Par exemple, Hilfer (1998) applique la *théorie du mélange* aux équations de conservation de masse des phases mobiles, de conservation de quantité de mouvement ainsi que de conservation de l'énergie pour obtenir des équations macroscopiques d'écoulement similaires à celles présentées par les équations 2.76-2.77. Les travaux de Hilfer (1998) montrent que les coefficients de pression capillaire et de perméabilité relative ne sont pas uniquement fonction des valeurs des fractions volumiques de chacune des phases considérées. En effet, d'un point de vue théorique, ces coefficients sont fortement dépendants d'autres variables macroscopiques comme la pression, les variables cinétiques, etc ... D'autres méthodes de changement d'échelle permettent d'obtenir le même type de description de la loi de Darcy généralisée. Par exemple Auriault (1987) aboutit au même résultat en utilisant la méthode d'homogénéisation spatiale appliquée aux équations de Stokes. De même, Whitaker (1986b) ou Lasseux et al. (1996) appliquent la méthode de prise de moyenne volumique aux mêmes équations de Stokes décrivant un écoulement diphasique à l'échelle des pores et obtiennent un modèle macroscopique similaire.

Enfin, dans la plupart des cas, les termes de couplages visqueux introduits dans les équations 2.76 et 2.77 sont souvent négligeables et difficiles à observer expérimentalement. Par exemple, Zarcone (1994); Zarcone and Lenormand (1994) montrent que, pour un milieu poreux réel suffisamment complexe (par opposition à des milieux simples comme certains assemblages périodiques), ces termes de couplages visqueux ne sont pas mesurables expérimentalement. Ceci peut s'expliquer par le fait que le fluide le plus mouillant envahit préférentiellement les plus petits pores. Cela implique que, finalement, la surface de contact entre les fluides est faible et que les effets d'entraînement visqueux d'un fluide sur l'autre le sont également. Par conséquent, dans le cas où les couplages visqueux sont négligeables, les équations décrivant les lois de Darcy généralisées sont décrites par les relations 2.78 et 2.79.

$$\epsilon_\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma = -\frac{1}{\eta_\gamma} \underline{k}_\gamma \cdot (\nabla \langle p_\gamma \rangle^\gamma - \rho_\gamma \underline{g}) \quad (2.78)$$

$$\epsilon_\lambda \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda = -\frac{1}{\eta_\lambda} \underline{k}_\lambda \cdot (\nabla \langle p_\lambda \rangle^\lambda - \rho_\lambda \underline{g}) \quad (2.79)$$

Dans ce type de modèle, les tenseurs de perméabilité de chacune des deux phases présentes se décomposent en un produit d'un tenseur de perméabilité intrinsèque au milieu

poreux et d'un coefficient de perméabilité relative (cf. équations 2.80 et 2.81). Les coefficients de perméabilité relative permettent de pénaliser les vitesses d'écoulement de l'une des deux phases en fonction du volume qu'occupe l'autre phase au sein de l'espace poral.

$$\underline{\underline{k}}_\gamma = \underline{\underline{K}} k_{R\gamma} \quad (2.80)$$

$$\underline{\underline{k}}_\lambda = \underline{\underline{K}} k_{R\lambda} \quad (2.81)$$

Ce type de modèle est très couramment utilisé dans le domaine de l'ingénierie pétrolière et de l'hydrologie (voir Aziz and Settari (1979) ou Bastian (1999) par exemple). Néanmoins, il convient de conserver à l'esprit que cette formulation n'est pas nécessairement valable à toutes les échelles (cf. Quintard and Whitaker (1988)). Dans un souci de simplicité et de réalisme, dans notre étude, nous utiliserons préférentiellement le jeu d'équations 2.78 et 2.79 plutôt que 2.76 et 2.77 pour décrire les lois de Darcy généralisée.

2.3.2 Obtention du modèle macroscopique pour un constituant gazeux

La première étape du processus consiste à intégrer les équations 2.9 à 2.11 sur le VER (cf. 2.82 à 2.84).

$$\frac{\partial \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left(\langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \underline{v}_\gamma \rangle + \langle \underline{j}_{\gamma i} \rangle \right) = -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\lambda, \beta, \mathcal{A}_{\gamma\theta}} \int \underline{n}_{\gamma\theta} \cdot \left[\rho_\gamma \omega_{\gamma i} (\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\gamma\theta}) + \underline{j}_{\gamma i} \right] dA \quad (2.82)$$

$$\frac{\partial \epsilon_\lambda \langle \rho_\lambda \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left(\langle \rho_\lambda \omega_{\lambda i} \underline{v}_\lambda \rangle + \langle \underline{j}_{\lambda i} \rangle \right) = -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma, \beta, \mathcal{A}_{\lambda\theta}} \int \underline{n}_{\lambda\theta} \cdot \left[\rho_\lambda \omega_{\lambda i} (\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\lambda\theta}) + \underline{j}_{\lambda i} \right] dA \quad (2.83)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \epsilon_\beta \langle \rho_\beta \omega_{\beta i} \rangle^\beta}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left(\langle \underline{j}_{\beta i} \rangle \right) &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma, \lambda, \mathcal{A}_{\beta\theta}} \int \underline{n}_{\beta\theta} \cdot \left[-\rho_\beta \omega_{\beta i} \underline{w}_{\beta\theta} + \underline{j}_{\beta i} \right] dA \\ &+ \epsilon_\beta \langle r_{\beta i} \rangle^\beta \end{aligned} \quad (2.84)$$

En sommant les équations 2.82 et 2.83, et en utilisant les relations aux interfaces (cf. équations 2.12 à 2.17), nous obtenons la relation 2.85 exprimant la conservation de masse du constituant gazeux i à l'échelle de Darcy.

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma}{\partial t} + \frac{\partial \epsilon_\lambda \langle \rho_\lambda \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left(\langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \underline{v}_\gamma \rangle + \langle \underline{j}_{\gamma i} \rangle \right) + \underline{\nabla} \cdot \left(\langle \rho_\lambda \omega_{\lambda i} \underline{v}_\lambda \rangle + \langle \underline{j}_{\lambda i} \rangle \right) \\
= & -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\gamma\beta}} \underline{n}_{\gamma\beta} \cdot \left[\rho_\gamma \omega_{\gamma i} \left(\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\gamma\beta} \right) + \underline{j}_{\gamma i} \right] dA - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\lambda\beta}} \underline{n}_{\lambda\beta} \cdot \left[\rho_\lambda \omega_{\lambda i} \left(\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\lambda\beta} \right) + \underline{j}_{\lambda i} \right] dA
\end{aligned} \tag{2.85}$$

Dans cette expression, les termes du second membre sont des termes d'échange aux interfaces entre les phases liquide et gaz avec la phase biofilm. Par la suite, nous noterons ces termes de transfert $\dot{m}_{\gamma\beta i}$ et $\dot{m}_{\lambda\beta i}$. Ces termes sont définis de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{\gamma\beta i} &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\gamma\beta}} \underline{n}_{\gamma\beta} \cdot \left[\rho_\gamma \omega_{\gamma i} \left(\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\gamma\beta} \right) + \underline{j}_{\gamma i} \right] dA \\
&= \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \underline{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[-\rho_\beta \omega_{\beta i} \underline{w}_{\beta\gamma} + \underline{j}_{\beta i} \right] dA
\end{aligned} \tag{2.86}$$

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{\lambda\beta i} &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\lambda\beta}} \underline{n}_{\lambda\beta} \cdot \left[\rho_\lambda \omega_{\lambda i} \left(\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\lambda\beta} \right) + \underline{j}_{\lambda i} \right] dA \\
&= \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \underline{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[-\rho_\beta \omega_{\beta i} \underline{w}_{\beta\gamma} + \underline{j}_{\beta i} \right] dA
\end{aligned} \tag{2.87}$$

A l'aide de ces définitions, les expressions 2.85 et 2.84 se réarrangent pour obtenir les équations 2.88 et 2.89.

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma}{\partial t} + \frac{\partial \epsilon_\lambda \langle \rho_\lambda \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left(\langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \underline{v}_\gamma \rangle + \langle \underline{j}_{\gamma i} \rangle \right) + \underline{\nabla} \cdot \left(\langle \rho_\lambda \omega_{\lambda i} \underline{v}_\lambda \rangle + \langle \underline{j}_{\lambda i} \rangle \right) \\
= & \dot{m}_{\gamma\beta i} + \dot{m}_{\lambda\beta i}
\end{aligned} \tag{2.88}$$

$$\frac{\partial \epsilon_\beta \langle \rho_\beta \omega_{\beta i} \rangle^\beta}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left(\langle \underline{j}_{\beta i} \rangle \right) = \epsilon_\beta \langle r_{\beta i} \rangle^\beta - \dot{m}_{\gamma\beta i} - \dot{m}_{\lambda\beta i} \tag{2.89}$$

A ce stade du développement, nous nous intéressons à l'expression des flux diffusifs dans chacune des phases considérées. Dans les phases liquide et biofilm, nous considérons que le constituant principal est l'eau et que tout autre constituant présent dans ces deux phases se comporte comme un traceur. Par conséquent, les flux diffusifs des espèces provenant de la phase gaz sont exprimés à l'aide d'une loi de Fick appliquée à une solution infiniment diluée (cf. équations 2.90 et 2.91).

$$j_{\lambda i} = -\rho_\lambda D_{\lambda i} \underline{\nabla} \omega_{\lambda i} \tag{2.90}$$

$$j_{\beta i} = -\rho_\beta D_{\beta i} \underline{\nabla} \omega_{\beta i} \tag{2.91}$$

Dans la phase gaz, même si initialement, le diazote se comporte comme solvant, il peut exister des zones dans le massif de déchets où une ou plusieurs autres espèces gazeuses sont prédominantes. Dans ce cas, le mélange gazeux ne se comporte plus comme un mélange dilué et les flux diffusifs ne sont plus similaires aux flux calculés pour des mélanges binaires. Nous introduisons donc une matrice de diffusion généralisée de Fick dérivant des équations de Stefan-Maxwell généralisées (Taylor and Krishna, 1993; Quintard et al., 2006). Nous reviendrons en détails sur l'expression de cette matrice dans le Chapitre 3. Le flux diffusif dans la phase gaz s'exprime donc de la façon suivante :

$$\dot{j}_{\gamma i} = -\rho_{\gamma} \sum_{k=1}^{k=N-1} D_{\gamma ik} \underline{\nabla} \omega_{\gamma k} \quad (2.92)$$

En insérant, les expressions 2.90, 2.91 et 2.92 dans les équations 2.88 et 2.89, nous obtenons les relations 2.93 et 2.94.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \epsilon_{\gamma} \langle \rho_{\gamma} \omega_{\gamma i} \rangle^{\gamma}}{\partial t} + \frac{\partial \epsilon_{\lambda} \langle \rho_{\lambda} \omega_{\lambda i} \rangle^{\lambda}}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \langle \rho_{\gamma} \omega_{\gamma i} \underline{v}_{\gamma} \rangle + \underline{\nabla} \cdot \langle \rho_{\lambda} \omega_{\lambda i} \underline{v}_{\lambda} \rangle \\ = & \underline{\nabla} \cdot \left(\sum_{k=1}^{k=N-1} \langle \rho_{\gamma} D_{\gamma ik} \underline{\nabla} \omega_{\gamma k} \rangle + \langle \rho_{\lambda} D_{\lambda i} \underline{\nabla} \omega_{\lambda i} \rangle \right) + \dot{m}_{\gamma \beta i} + \dot{m}_{\lambda \beta i} \end{aligned} \quad (2.93)$$

$$\frac{\partial \epsilon_{\beta} \langle \rho_{\beta} \omega_{\beta i} \rangle^{\beta}}{\partial t} = \langle \rho_{\beta} D_{\beta i} \underline{\nabla} \omega_{\beta i} \rangle + \epsilon_{\beta} \langle r_{\beta i} \rangle^{\beta} - \dot{m}_{\gamma \beta i} - \dot{m}_{\lambda \beta i} \quad (2.94)$$

Compte tenu du fait que les phases biofilm et liquide sont incompressibles, la masse volumique de ces phases est constante sur le VER. On a donc :

$$\langle \rho_{\lambda} \omega_{\lambda i} \rangle^{\lambda} = \rho_{\lambda} \langle \omega_{\lambda i} \rangle^{\lambda} \quad (2.95)$$

$$\langle \rho_{\lambda} \omega_{\lambda i} \underline{v}_{\lambda} \rangle = \rho_{\lambda} \langle \omega_{\lambda i} \underline{v}_{\lambda} \rangle \quad (2.96)$$

$$\langle \rho_{\beta} \omega_{\beta i} \rangle^{\beta} = \rho_{\beta} \langle \omega_{\beta i} \rangle^{\beta} \quad (2.97)$$

De même, nous cherchons à évaluer la moyenne $\langle \rho_{\gamma} \omega_{\gamma i} \rangle^{\gamma}$. Pour ce faire, nous introduisons les déviations spatiales $\tilde{\rho}_{\gamma}$ et $\tilde{\omega}_{\gamma i}$, qui sont définies par les relations 2.98 et 2.99.

$$\rho_{\gamma} = \langle \rho_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \tilde{\rho}_{\gamma} \quad (2.98)$$

$$\omega_{\gamma i} = \langle \omega_{\gamma i} \rangle^{\gamma} + \tilde{\omega}_{\gamma i} \quad (2.99)$$

Comme le présentent Quintard et al. (2006), si les conditions de séparation des échelles sont satisfaites, l'estimation du terme $\langle \rho_{\gamma} \omega_{\gamma i} \rangle^{\gamma}$ peut être exprimée par la relation 2.100. Cette expression est obtenue en négligeant les termes d'ordre élevé dans le développement

en série de Taylor du terme $\langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma$.

$$\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma = \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma + \langle \tilde{\rho}_\gamma \tilde{\omega}_{\gamma i} \rangle^\gamma \quad (2.100)$$

De plus, toujours dans le cas où l'hypothèse de séparation d'échelle est respectée, il est établi que les déviations spatiales $\tilde{\rho}_\gamma$ et $\tilde{\omega}_{\gamma i}$ sont faibles devant les valeurs moyennes $\langle \rho_\gamma \rangle^\gamma$ et $\langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma$. Ceci s'exprime de la façon suivante :

$$\tilde{\rho}_\gamma \ll \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \quad (2.101)$$

$$\tilde{\omega}_{\gamma i} \ll \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \quad (2.102)$$

L'expression 2.100 se simplifie alors pour obtenir l'expression suivante :

$$\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma = \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \quad (2.103)$$

Nous introduisons désormais la déviation spatiale de la vitesse de la phase gazeuse :

$$\underline{v}_\gamma = \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma + \tilde{v}_\gamma \quad (2.104)$$

Nous focalisons désormais notre analyse sur le terme de transport convectif $\langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \underline{v}_\gamma \rangle$. Les termes de déviations spatiales des vitesses sont contraints par la relation suivante :

$$\tilde{v}_\gamma = \mathbf{O} \left(\langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) \quad (2.105)$$

En réalisant un développement en série de Taylor du terme $\langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \underline{v}_\gamma \rangle$, nous obtenons l'expression 2.106 dans laquelle les termes d'ordre élevés ne sont pas présentés.

$$\langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \underline{v}_\gamma \rangle = \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma + \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \tilde{\rho}_\gamma \tilde{v}_\gamma \rangle + \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{v}_\gamma \rangle + \dots \quad (2.106)$$

Nous supposons ensuite que la relation 2.107 est vérifiée. Cette hypothèse est traditionnellement utilisée dans le traitement des phénomènes de dispersion, et se base sur l'idée que la masse volumique du gaz ρ_γ varie moins que la masse volumique des espèces $\rho_\gamma \omega_{\gamma i}$. Néanmoins, un travail théorique important reste à accomplir pour justifier rigoureusement cette hypothèse.

$$\langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \tilde{\rho}_\gamma \tilde{v}_\gamma \rangle \ll \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{v}_\gamma \rangle \quad (2.107)$$

En utilisant les équations 2.106 et 2.107, nous obtenons l'expression suivante du terme de

transport convectif :

$$\langle \rho_\gamma \omega_{\gamma i} \underline{v}_\gamma \rangle = \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma + \langle \rho_\gamma \rangle \langle \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle \quad (2.108)$$

La relation 2.108 est généralisable à la phase liquide. Ainsi en utilisant les relations 2.95, 2.96, 2.97, 2.103 et 2.108 dans les équations 2.93 et 2.94, nous obtenons les relations 2.109 et 2.110.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma}{\partial t} + \frac{\partial \epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda}{\partial t} \\ & + \underline{\nabla} \cdot \left(\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) + \underline{\nabla} \cdot \left(\epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda \right) \\ & + \underline{\nabla} \cdot \left(\langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle \right) + \underline{\nabla} \cdot \left(\rho_\lambda \langle \tilde{\omega}_{\lambda i} \tilde{\underline{v}}_\lambda \rangle \right) \\ & = \underline{\nabla} \cdot \left(\sum_{k=1}^{k=N-1} \langle \rho_\gamma D_{\gamma ik} \underline{\nabla} \omega_{\gamma k} \rangle + \langle \rho_\lambda D_{\lambda i} \underline{\nabla} \omega_{\lambda i} \rangle \right) + \dot{m}_{\gamma \beta i} + \dot{m}_{\lambda \beta i} \end{aligned} \quad (2.109)$$

$$\frac{\partial \epsilon_\beta \rho_\beta \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta}{\partial t} = \underline{\nabla} \cdot \left(\langle \rho_\beta D_{\beta i} \underline{\nabla} \omega_{\beta i} \rangle \right) + \epsilon_\beta \langle r_{\beta i} \rangle^\beta - \dot{m}_{\gamma \beta i} - \dot{m}_{\lambda \beta i} \quad (2.110)$$

Nous nous focalisons désormais sur les termes diffusifs. Nous introduisons la décomposition spatiale des coefficients de diffusion dans le gaz :

$$D_{\gamma ik} = \langle D_{\gamma ik} \rangle^\gamma + \tilde{D}_{\gamma ik} \quad (2.111)$$

En ce qui concerne les coefficients de diffusion dans les phases liquide et biofilm, ceux-ci sont constants (dans le cas où l'on néglige l'effet des gradients de pression et de température) sur le VER puisqu'ils sont assimilés à des coefficients de diffusion binaires :

$$D_{\lambda i} = \langle D_{\lambda i} \rangle^\lambda \quad (2.112)$$

$$D_{\beta i} = \langle D_{\beta i} \rangle^\beta \quad (2.113)$$

Comme le suggère Quintard et al. (2006), nous supposons que les déviations obéissent aux conditions 2.114 et 2.115

$$\tilde{D}_{\gamma ik} \ll \langle D_{\gamma ik} \rangle^\gamma \quad (2.114)$$

$$\underline{\nabla} \tilde{\omega}_{\gamma i} = \mathbf{O}(\underline{\nabla} \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma) \quad (2.115)$$

Ces hypothèses sont justifiées par la disparité des échelles caractéristiques associées à $\tilde{\omega}_{\gamma i}$ et $\langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma$. Ensuite, si nous utilisons le développement proposé par Quintard et al. (2006),

les termes de transport diffusif peuvent être simplifiés comme le présentent les relations 2.116 et 2.117.

$$\begin{aligned}
& \underline{\nabla} \cdot \left(\sum_{k=1}^{k=N-1} \langle \rho_\gamma D_{\gamma ik} \underline{\nabla} \omega_{\gamma i} \rangle + \langle \rho_\lambda D_{\lambda i} \underline{\nabla} \omega_{\lambda i} \rangle \right) \\
= & \underline{\nabla} \cdot \left[\sum_{k=1}^{k=N-1} \left(\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle D_{\gamma ik} \rangle^\gamma \underline{\nabla} \langle \omega_{\gamma k} \rangle^\gamma + \frac{\langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle D_{\gamma ik} \rangle^\gamma}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\lambda, \beta, \not\in \gamma_\theta} \int \underline{n}_{\gamma\theta} \tilde{\omega}_{\gamma k} dA \right) \right] \\
+ & \underline{\nabla} \cdot \left[\epsilon_\lambda \rho_\lambda D_{\lambda i} \underline{\nabla} \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda + \frac{\rho_\lambda D_{\lambda i}}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma, \beta, \not\in \lambda_\theta} \int \underline{n}_{\lambda\theta} \tilde{\omega}_{\lambda k} dA \right] \tag{2.116}
\end{aligned}$$

$$\underline{\nabla} \cdot (\langle \rho_\beta D_{\beta i} \underline{\nabla} \omega_{\beta i} \rangle) = \underline{\nabla} \cdot \left[\epsilon_\beta \rho_\beta D_{\beta i} \underline{\nabla} \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta + \frac{\rho_\beta D_{\beta i}}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma, \lambda, \not\in \beta_\theta} \int \underline{n}_{\beta\theta} \tilde{\omega}_{\beta k} dA \right] \tag{2.117}$$

Si nous injectons l'expression 2.116 et 2.117 dans les équations 2.109 et 2.110, nous obtenons les deux relations exprimant la conservation de masse du constituant i (présent majoritairement sous forme gazeuse) moyennées sur le VER (cf. équation 2.118 et 2.119).

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma}{\partial t} + \frac{\partial \epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda}{\partial t} \\
+ & \underline{\nabla} \cdot (\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma) + \underline{\nabla} \cdot (\epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda) \\
+ & \underline{\nabla} \cdot (\langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{v}_\gamma \rangle) + \underline{\nabla} \cdot (\rho_\lambda \langle \tilde{\omega}_{\lambda i} \tilde{v}_\lambda \rangle) \\
= & \underline{\nabla} \cdot \left[\sum_{k=1}^{k=N-1} \left(\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle D_{\gamma ik} \rangle^\gamma \underline{\nabla} \langle \omega_{\gamma k} \rangle^\gamma + \frac{\langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle D_{\gamma ik} \rangle^\gamma}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\lambda, \beta, \not\in \gamma_\theta} \int \underline{n}_{\gamma\theta} \tilde{\omega}_{\gamma k} dA \right) \right] \\
+ & \underline{\nabla} \cdot \left[\epsilon_\lambda \rho_\lambda D_{\lambda i} \underline{\nabla} \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda + \frac{\rho_\lambda D_{\lambda i}}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma, \beta, \not\in \lambda_\theta} \int \underline{n}_{\lambda\theta} \tilde{\omega}_{\lambda k} dA \right] + \dot{m}_{\gamma\beta i} + \dot{m}_{\lambda\beta i} \tag{2.118}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \epsilon_\beta \rho_\beta \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta}{\partial t} &= \underline{\nabla} \cdot \left[\epsilon_\beta \rho_\beta D_{\beta i} \underline{\nabla} \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta + \frac{\rho_\beta D_{\beta i}}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma, \lambda, \not\in \beta_\theta} \int \underline{n}_{\beta\theta} \tilde{\omega}_{\beta k} dA \right] \\
&+ \epsilon_\beta \langle r_{\beta i} \rangle^\beta - \dot{m}_{\gamma\beta i} - \dot{m}_{\lambda\beta i} \tag{2.119}
\end{aligned}$$

Les équations 2.118 et 2.119 représentent la forme moyenne des équations 2.9, 2.10 et 2.11 sur le VER. Dans ces équations, nous pouvons identifier plusieurs termes faisant intervenir

les déviations spatiales des fractions massiques ou des vitesses des phases mobiles. Ces termes peuvent être analysés comme des filtres puisque l'ensemble de l'information qu'ils contiennent à l'échelle microscopique ne sera pas transmise à l'échelle supérieure.

Comme le présentent Quintard et al. (2006), nous considérons que les coefficients de diffusion binaire sont constants et que la diffusivité dans la phase gaz est uniquement fonction des concentrations locales (cf. 2.120).

$$D_{\gamma ik} = F(\omega_{\gamma 1}, \omega_{\gamma 2}, \dots, \omega_{\gamma N-1}) \quad (2.120)$$

Les travaux de Hager and Whitaker (2002) nous permettent de considérer que la relation 2.120 peut être généralisée à l'échelle macroscopique si les conditions de séparation d'échelles sont respectées. Nous avons donc :

$$\langle D_{\gamma ik} \rangle^\gamma = F(\langle \omega_{\gamma 1} \rangle^\gamma, \langle \omega_{\gamma 2} \rangle^\gamma, \dots, \langle \omega_{\gamma N-1} \rangle^\gamma) \quad (2.121)$$

Problème de fermeture. A ce stade du développement, l'enjeu consiste à évaluer les termes faisant intervenir les déviations spatiales et à les relier aux grandeurs macroscopiques. Pour ce faire, nous devons décrire le système d'équations régissant l'évolution de ces déviations spatiales et le résoudre autant que possible en considérant une géométrie de pore adaptée. Le problème ainsi défini est appelé *problème de fermeture* puisque sa résolution permet de fermer le système d'équations macroscopiques. Comme le mentionnent Quintard et al. (2006), l'expression du problème de fermeture pour la déviation spatiale \tilde{v}_λ est bien connu, en particulier dans le cas des phases incompressibles (cf. Whitaker (1999)). L'expression du problème de fermeture pour le terme \tilde{v}_γ lié à la phase gazeuse compressible peut être généralisé en se basant sur le cas incompressible (cf. Quintard et al. (2006)). Comme nous l'avons vu dans le paragraphe précédent, c'est l'expression de ces problèmes de fermeture ainsi que leur résolution qui nous permet a priori d'utiliser la loi de Darcy généralisée pour décrire l'écoulement conjoint d'une phase liquide et d'une phase gaz dans le milieu poreux que nous considérons.

Focalisons désormais notre étude sur le problème de fermeture pour la quantité $\tilde{\omega}_{\gamma i}$. La démarche utilisée pour développer les problèmes de fermeture pour les variables $\tilde{\omega}_{\lambda i}$ et $\tilde{\omega}_{\beta i}$ est identique à celle que nous développons pour la quantité $\tilde{\omega}_{\gamma i}$. Par conséquent, nous ne la présentons pas ici. Les déviations spatiales $\tilde{\omega}_{\gamma i}$ sont définies par la relation 2.122.

$$\tilde{\omega}_{\gamma i} = \omega_{\gamma i} - \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \quad \text{pour } i = 1, 2, \dots, N - 1 \quad (2.122)$$

Nous n'abordons ici que le problème de fermeture monophasique. Nous supposons que la forme de la fermeture est généralisable à l'ensemble des phases considérées. Néanmoins,

cette hypothèse est une hypothèse forte, puisque le caractère multiphasique des phénomènes considérés peut avoir une influence quantitative certaine sur les paramètres utilisés. Pour plus de détails sur le développement du problème de fermeture dans le cas multiphasique réactif binaire, on pourra se référer aux travaux de Bousquet-Mélou (2000) ou Quintard and Whitaker (1994). Dans le cas plus général de notre problème, des travaux théoriques complémentaires concernant le transport multiphasique et multiconstituants devront être envisagés, afin de justifier la forme complète du modèle fermé. Nous ne développons pas ici le détail des calculs permettant d'écrire les problèmes de fermeture pour les variables $\tilde{\omega}_{\gamma i}$. L'ensemble de ces manipulations est détaillé dans les travaux de Quintard et al. (2006). De façon générale, la démarche utilisée consiste à remplacer les concentrations microscopiques par la somme de leurs valeurs moyennes de leurs déviations dans les équations écrites à l'échelle du pore (cf. équation 2.9). Ensuite, moyennant les hypothèses de séparation d'échelle formulées par Quintard et al. (2006) le problème de fermeture monophasique pour la phase gaz en contact avec une phase solide immobile s'exprime de la façon suivante :

$$\underline{\tilde{v}}_{\gamma} \cdot \underline{\nabla} \langle \omega_{\gamma i} \rangle^{\gamma} + \underline{v}_{\gamma} \cdot \underline{\nabla} \tilde{\omega}_{\gamma i} = \underline{\nabla} \cdot \left[\sum_{k=1}^{k=N-1} \langle D_{\gamma ik} \rangle^{\gamma} \underline{\nabla} \tilde{\omega}_{\gamma k} \right] \text{ pour } i = 1, 2, \dots, N - 1 \quad (2.123)$$

$$\mathbf{CL} \quad \underline{n}_{\gamma\sigma} \cdot \sum_{k=1}^{k=N-1} \langle D_{\gamma ik} \rangle^{\gamma} \underline{\nabla} \tilde{\omega}_{\gamma k} = -\underline{n}_{\gamma\sigma} \cdot \sum_{k=1}^{k=N-1} \langle D_{\gamma ik} \rangle^{\gamma} \underline{\nabla} \langle \omega_{\gamma k} \rangle^{\gamma} \\ \text{pour } i = 1, 2, \dots, N - 1 \text{ sur } A_{\gamma\sigma} \quad (2.124)$$

$$\mathbf{Périodicité} \quad \tilde{\omega}_{\gamma i}(\underline{r} + \underline{l}_j) = \tilde{\omega}_{\gamma i}(\underline{r}), \quad j = 1, 2, 3 \text{ et } i = 1, 2, \dots, N - 1 \quad (2.125)$$

Dans cette équation, \underline{l}_j représente les trois vecteurs unitaires du treillis permettant de décrire la structure périodique du milieu. Comme nous l'avons précisé précédemment, nous supposons que les problèmes de fermeture pour les phases liquide et biofilm ont la même structure.

Nous introduisons ensuite les matrices colonnes représentant l'ensemble des fractions massiques :

$$[\tilde{\omega}_{\gamma}] = \begin{bmatrix} \tilde{\omega}_{\gamma 1} \\ \tilde{\omega}_{\gamma 2} \\ \dots \\ \tilde{\omega}_{\gamma N-1} \end{bmatrix} \quad (2.126)$$

Le problème de fermeture présenté précédemment semble extrêmement compliqué. Il a été simplifié de manière élégante en travaillant dans l'espace des pseudos composants, que nous définissons en introduisant la matrice de passage $[P_{\gamma}]$ (Quintard et al., 2006).

Cette matrice est définie par la relation 2.127.

$$[\tilde{w}_\gamma] = [P_\gamma]^{-1} [\tilde{\omega}_\gamma] \quad (2.127)$$

En suivant les développements proposés par (Quintard et al., 2006), la solution du problème de fermeture dans l'espace des pseudos composants prend la forme suivante :

$$[\tilde{w}_\gamma] = [\underline{b}_\gamma] \cdot [\nabla \langle w_\gamma \rangle^\gamma] \quad (2.128)$$

Ici $[\underline{b}_\gamma]$ est l'opérateur matriciel défini par 2.129 dont les composants obéissent aux problèmes de fermeture classique développés pour les problèmes de dispersion.

$$[\underline{b}_\gamma] = \begin{bmatrix} \underline{b}_{\gamma 1} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \underline{b}_{\gamma 2} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & 0 & \underline{b}_{\gamma N-1} \end{bmatrix} \quad (2.129)$$

A ce stade, nous généralisons le résultat précédent aux phases liquide et biofilm pour obtenir les formes fermées suivantes :

$$[\underline{b}_\lambda] = \begin{bmatrix} \underline{b}_{\lambda 1} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \underline{b}_{\lambda 2} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & 0 & \underline{b}_{\lambda N-1} \end{bmatrix} \quad (2.130)$$

$$[\underline{b}_\beta] = \begin{bmatrix} \underline{b}_{\beta 1} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \underline{b}_{\beta 2} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & 0 & \underline{b}_{\beta N-1} \end{bmatrix} \quad (2.131)$$

Ensuite, la résolution des problèmes de fermeture sur une géométrie donnée permet d'obtenir les valeurs des vecteurs $\underline{b}_{\gamma i}$, $\underline{b}_{\lambda i}$ et $\underline{b}_{\beta i}$. Nous ne présentons pas ici la résolution mathématique de ces problèmes, mais nous nous intéressons à la signification physique de chacun des termes obtenus. En utilisant les développements présentés pour définir la forme des solutions du problème de fermeture, les équations 2.118 et 2.119 sont transformées pour obtenir les équations 2.132 et 2.133.

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma}{\partial t} + \frac{\partial \epsilon_{\lambda \rho \lambda} \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda}{\partial t} \\
& + \underline{\nabla} \cdot \left(\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) + \underline{\nabla} \cdot \left(\epsilon_{\lambda \rho \lambda} \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda \right) \\
& = \underline{\nabla} \cdot \left[\sum_{k=1}^{k=N-1} \left(\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle D_{\gamma ik} \rangle^\gamma \left(\underline{I} + \underline{B}_{\gamma ik} \right) \cdot \underline{\nabla} \langle \omega_{\gamma k} \rangle^\gamma + \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \underline{d}_{\gamma ik} \cdot \underline{\nabla} \langle \omega_{\gamma k} \rangle^\gamma \right) \right] \\
& + \underline{\nabla} \cdot \left[\epsilon_{\lambda \rho \lambda} D_{\lambda i} \left(\underline{I} + \underline{B}_{\lambda i} \right) \cdot \underline{\nabla} \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda + \epsilon_{\lambda \rho \lambda} \underline{d}_{\lambda i} \cdot \underline{\nabla} \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda \right] \\
& + \dot{m}_{\gamma \beta i} + \dot{m}_{\lambda \beta i}
\end{aligned} \tag{2.132}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \epsilon_{\beta \rho \beta} \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta}{\partial t} & = \underline{\nabla} \cdot \left[\epsilon_{\beta \rho \beta} D_{\beta i} \left(\underline{I} + \underline{B}_{\beta i} \right) \cdot \underline{\nabla} \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta \right] \\
& + \epsilon_{\beta \rho \beta} \langle r_{\beta i} \rangle^\beta - \dot{m}_{\gamma \beta i} - \dot{m}_{\lambda \beta i}
\end{aligned} \tag{2.133}$$

où $\underline{B}_{\gamma ik}$ est un tenseur dont chaque élément (en fonction des valeurs des indices i et k) est défini par la matrice $[\underline{B}_\gamma]$.

$$[\underline{B}_\gamma] = \frac{1}{\mathcal{V}_\gamma} \sum_{\theta=\lambda, \beta, \mathcal{A}_{\gamma\theta}} \int n_{\gamma\theta} [P] [\underline{b}_\gamma] [P]^{-1} dA \tag{2.134}$$

de même $\underline{d}_{\gamma ik}$ est un tenseur dont chaque élément (en fonction des valeurs des indices i et k) est défini par la matrice $[\underline{d}_\gamma]$.

$$[\underline{d}_\gamma] = - \left\langle \underline{\tilde{v}}_\gamma [P] [\underline{b}_\gamma] [P]^{-1} \right\rangle^\gamma \tag{2.135}$$

de même $\underline{B}_{\lambda i}$ et $\underline{B}_{\beta i}$ sont définis comme suit :

$$\underline{B}_{\lambda i} = \frac{1}{\mathcal{V}_\lambda} \sum_{\theta=\gamma, \beta, \mathcal{A}_{\lambda\theta}} \int n_{\lambda\theta} \underline{b}_{\lambda i} dA \tag{2.136}$$

$$\underline{B}_{\beta i} = \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \sum_{\theta=\gamma, \lambda, \mathcal{A}_{\beta\theta}} \int n_{\beta\theta} \underline{b}_{\beta i} dA \tag{2.137}$$

Enfin, le tenseur $\underline{d}_{\lambda i}$ est défini comme suit :

$$\underline{d}_{\lambda i} = - \left\langle \underline{\tilde{v}}_\lambda \underline{b}_{\lambda i} \right\rangle^\lambda \tag{2.138}$$

Il est désormais possible d'écrire les équations 2.132 et 2.133 sous une forme compacte

puisque les termes apparus lors du processus de changement d'échelle sont assimilables mathématiquement à des termes de diffusion. Nous introduisons donc des tenseurs de diffusion globaux (en fait des tenseurs de dispersion) $\underline{\underline{D}}_{\gamma ik}^*$, $\underline{\underline{D}}_{\lambda i}^*$ et $\underline{\underline{D}}_{\beta i}^*$ et nous obtenons les relations 2.139 et 2.140.

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma}{\partial t} + \frac{\partial \epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda}{\partial t} \\
& + \nabla \cdot \left(\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) + \nabla \cdot \left(\epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda \right) \\
& = \nabla \cdot \left[\sum_{k=1}^{k=N-1} \left(\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \underline{\underline{D}}_{\gamma ik}^* \cdot \nabla \langle \omega_{\gamma k} \rangle^\gamma \right) \right] \\
& + \nabla \cdot \left[\epsilon_\lambda \rho_\lambda \underline{\underline{D}}_{\lambda i}^* \cdot \nabla \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda \right] \\
& + \dot{m}_{\gamma \beta i} + \dot{m}_{\lambda \beta i}
\end{aligned} \tag{2.139}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \epsilon_\beta \rho_\beta \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta}{\partial t} & = \nabla \cdot \left[\epsilon_\beta \rho_\beta \underline{\underline{D}}_{\beta i}^* \cdot \nabla \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta \right] \\
& + \epsilon_\beta \langle r_{\beta i} \rangle^\beta - \dot{m}_{\gamma \beta i} - \dot{m}_{\lambda \beta i}
\end{aligned} \tag{2.140}$$

Pour les phases mobiles (gaz et liquide), les tenseurs $\underline{\underline{D}}_{\gamma ik}^*$ et $\underline{\underline{D}}_{\lambda i}^*$ se décomposent en deux contributions. Comme le présentent les relations 2.141 et 2.142, la première contribution est une contribution diffusif et la seconde contribution est une contribution dispersif liée aux fluctuations de vitesse à l'échelle du pore.

$$\underline{\underline{D}}_{\gamma ik}^* = \underbrace{\underline{\underline{D}}_{eff\gamma ik}}_{\text{Terme diffusif}} + \underbrace{\underline{\underline{d}}_{\gamma ik}}_{\text{Terme dispersif}} \tag{2.141}$$

$$\underline{\underline{D}}_{\lambda i}^* = \underbrace{\underline{\underline{D}}_{eff\lambda i}}_{\text{Terme diffusif}} + \underbrace{\underline{\underline{d}}_{\lambda i}}_{\text{Terme dispersif}} \tag{2.142}$$

En revanche, la phase biofilm étant immobile, le tenseur de diffusion global dans cette phase ne possède qu'une contribution diffusif :

$$\underline{\underline{D}}_{\beta i}^* = \underbrace{\underline{\underline{D}}_{eff\beta i}}_{\text{Terme diffusif}} \tag{2.143}$$

avec :

$$\underline{\underline{D}}_{eff\gamma ik} = \langle D_{\gamma ik} \rangle^\gamma \left(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{B}}_{\gamma ik} \right) \tag{2.144}$$

$$\underline{\underline{D}}_{eff\lambda i} = D_{\lambda i} \left(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{B}}_{\lambda i} \right) \quad (2.145)$$

$$\underline{\underline{D}}_{eff\beta i} = D_{\beta i} \left(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{B}}_{\beta i} \right) \quad (2.146)$$

Comme le présentent Quintard et al. (2006), dans le cas de régimes purement diffusifs, les termes diffusifs prennent la forme suivante :

$$\underline{\underline{D}}_{eff\gamma ik} = \frac{\langle D_{\gamma ik} \rangle^\gamma}{\tau_\gamma} \underline{\underline{I}} \quad (2.147)$$

$$\underline{\underline{D}}_{eff\lambda i} = \frac{D_{\lambda i}}{\tau_\lambda} \underline{\underline{I}} \quad (2.148)$$

$$\underline{\underline{D}}_{eff\beta i} = \frac{D_{\beta i}}{\tau_\beta} \underline{\underline{I}} \quad (2.149)$$

Ici le terme $\frac{\underline{\underline{I}}}{\tau}$ représente le tenseur de tortuosité dans le cas d'un milieu isotrope et τ représente la tortuosité du milieu isotrope couramment utilisée dans les études de transport en milieu poreux. L'intérêt de ce résultat est qu'il démontre l'existence d'un tenseur de tortuosité unique valable pour l'ensemble des constituants i . Ce résultat est original et permet de justifier les hypothèses simplificatrices utilisées par de nombreux auteurs.

Concernant le terme de dispersion, nous supposons que les régimes dispersifs que nous étudions sont des régimes de dispersion linéaire. Dans ce cas, Quintard et al. (2006) montrent que les termes de dispersion n'interviennent que dans les termes diagonaux de la matrice de diffusion-dispersion. Ceci implique donc les relations 2.144, 2.145 et 2.146.

$$\underline{\underline{D}}_{\gamma ik}^* = \underbrace{\frac{\langle D_{\gamma ik} \rangle^\gamma}{\tau_\gamma} \underline{\underline{I}}}_{\text{Terme diffusif}} + \underbrace{\delta_{ik} \left[\alpha_{T\gamma} \left\| \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \right\| \underline{\underline{I}} + (\alpha_{L\gamma} - \alpha_{T\gamma}) \frac{\langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \times \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma}{\left\| \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \right\|} \right]}_{\text{Terme dispersif}} \quad (2.150)$$

$$\underline{\underline{D}}_{\lambda i}^* = \underbrace{\frac{D_{\lambda i}}{\tau_\lambda} \underline{\underline{I}}}_{\text{Terme diffusif}} + \underbrace{\left[\alpha_{T\lambda} \left\| \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda \right\| \underline{\underline{I}} + (\alpha_{L\lambda} - \alpha_{T\lambda}) \frac{\langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda \times \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda}{\left\| \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda \right\|} \right]}_{\text{Terme dispersif}} \quad (2.151)$$

$$\underline{\underline{D}}_{\beta i}^* = \underbrace{\frac{D_{\beta i}}{\tau_\beta} \underline{\underline{I}}}_{\text{Terme diffusif}} \quad (2.152)$$

Ici δ_{ik} est le symbole de Kronecker qui prend la valeur 1 si $i = k$ et la valeur 0 si $i \neq k$, α_L est le coefficient de dispersion longitudinal et α_T est le coefficient de dispersion transversal.

Enfin, Quintard et al. (2006) ont validé l'ensemble du modèle présenté en comparant les résultats de simulations numériques directes sur un treillis de cellules unitaires avec les

résultats obtenus l'aide du modèle macroscopique développé précédemment. Ils confirment ainsi que la forme du problème de fermeture présentée précédemment est valide dans le cas du milieu modèle utilisé.

Equilibre local. Dans l'équation 2.139, nous nous apercevons que deux variables macroscopiques apparaissent. Ces deux variables sont les concentrations à l'échelle de Darcy de l'espèce i dans la phase gaz, d'une part, $(\langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma)$ et dans la phase liquide, d'autre part, $(\langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda)$. Sans hypothèse particulière, le modèle développé précédemment est un modèle dit à *deux équations* puisqu'il nécessite d'utiliser les deux équations de conservation de la masse du constituant i à l'échelle de Darcy dans les phases gaz et liquide pour obtenir les solutions pour les deux variables $\langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma$ et $\langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda$ a priori indépendantes. Ce type de modèle est appelé modèle de *non-équilibre local* puisque aucune hypothèse n'est utilisée pour introduire une relation de dépendance entre les concentrations macroscopiques dans chacune des phases. La résolution du problème dans ce cas conserve toute sa complexité. C'est pourquoi, beaucoup d'études de transport en milieu poreux supposent que l'hypothèse d'équilibre chimique local est vérifiée de façon à obtenir un modèle plus simple, à *une équation*.

Dans notre modèle, nous supposons que l'hypothèse d'*équilibre local* entre les phases gaz et liquide est applicable. Ceci signifie que les relations d'équilibres chimiques (cf. équations 2.18) valables à l'échelle du pore sont généralisées à l'échelle de Darcy. A l'échelle du pore, l'égalité des potentiels chimiques à l'interface entre les phases gaz et liquide est généralement transformée pour obtenir une relation entre les concentrations locales appelée loi de Henry dans le cas infiniment dilué et loi de Raoult dans le cas infiniment concentré. La relation d'équilibre sur l'interface 2.18 peut donc s'exprimer sous la forme suivante :

$$\omega_{\lambda i} = \Gamma_i \omega_{\gamma i} \quad (2.153)$$

où Γ_i est la constante d'équilibre du constituant i entre les phases gaz et liquide. Il convient ici de noter que les coefficients d'équilibre Γ_i dépendent principalement de la température et de la pression locale.

La généralisation, à l'échelle de Darcy, de la condition d'équilibre chimique à l'interface entre les phases gaz et liquide implique la relation 2.154.

$$\langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda = \Gamma_i \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\lambda \quad (2.154)$$

Si nous reprenons l'équation 2.153 et que nous introduisons la décomposition spatiale des

variables microscopiques $\omega_{\lambda i}$ et $\omega_{\gamma i}$, nous obtenons la relation 2.155

$$\langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda + \tilde{\omega}_{\lambda i} = \Gamma_i \left(\langle \omega_{\gamma i} \rangle^\lambda + \tilde{\omega}_{\gamma i} \right) \quad (2.155)$$

En considérant les équations 2.154 et 2.155, il apparaît que l'hypothèse d'équilibre chimique local est valable lorsque les conditions 2.156 et 2.157 sont respectées.

$$\tilde{\omega}_{\lambda i} \ll \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda \quad (2.156)$$

$$\tilde{\omega}_{\gamma i} \ll \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\lambda \quad (2.157)$$

Les conditions 2.156 et 2.157 signifient que les gradients de concentration du constituant i dans chacune des deux phases dans le VER au voisinage de l'interface doivent être suffisamment faibles. Les questions liées à la notion d'équilibre local ont fait l'objet de nombreux travaux dans la littérature. Historiquement, ces travaux se sont majoritairement focalisés sur l'équilibre thermique local. Dans le cas de transferts thermiques en milieux poreux on se reportera donc à Carbonell and Whitaker (1984), Levec and Carbonell (1985), Quintard and Whitaker (1993), Quintard et al. (1997), Moyne (1997) ou bien encore Quintard and Whitaker (2000). Pour ce qui est de la dispersion active, on peut consulter Quintard and Whitaker (1994), ainsi que les travaux de Coutelie et al. (2006) ou les travaux du groupement CIDISIR (CInétiques de DIssolution des Sites Réels) : Burghoffer et al. (2005)

Dans le cas sans termes sources, i.e., sans réactions chimiques, l'équilibre local dépend de la valeur d'un coefficient d'échange dont la borne inférieure peut être estimée par le coefficient présenté par la relation 2.158.

$$\frac{D_{\theta i}}{l^2} \quad (2.158)$$

Dans le coefficient 2.158, $D_{\theta i}$ représente le coefficient de diffusion du constituant i dans la phase θ (m^2/s) et l est la dimension caractéristique de l'échelle microscopique (m). De la littérature citée précédemment, il nous est possible de dégager les conditions pour lesquelles l'équilibre local est vérifié ou non. Si le coefficient présenté par la relation 2.158 est élevé, il y aura équilibre local, et non équilibre local dans le cas contraire. Dans le cas du stockage de déchets, de cette analyse appuyée sur la littérature citée précédemment, on peut dégager les problèmes suivants :

- l'équilibre local sera favorisé par un coefficient de diffusion élevé, le problème aura donc plus de chances de se poser dans le cas du liquide que dans le cas du gaz
- l'équilibre local sera favorisé par des valeurs petites de l . Il est difficile à ce jour d'estimer dans notre cas une valeur pertinente de ce paramètre, le processus de

remplissage des décharges n'assurant pas un contrôle précis de la charge. On peut cependant imaginer que les grandes hétérogénéités susceptibles d'être présentes dans un casier, de l'ordre du décimètre au mètre par exemple, pourraient induire des effets de non-équilibre local. Cette question sera laissée en suspens dans la thèse, mais doit être gardée à l'esprit pour des analyses futures, et comme explication possible de certaines observations sur sites réels.

En revanche, dans le cas avec terme source, les réactions sont susceptibles d'influencer les champs de concentration. Par exemple, dans leur étude concernant la modélisation des films biologiques, Wood and Whitaker (1998) précisent que les conditions définies par les relations 2.156 et 2.157 ne sont vérifiées que dans des cas particuliers. D'après Wood and Whitaker (1998), plusieurs régimes correspondant au cas d'utilisation de l'hypothèse d'équilibre local peuvent être identifiés. La Figure 2.3 présente ces différents cas.

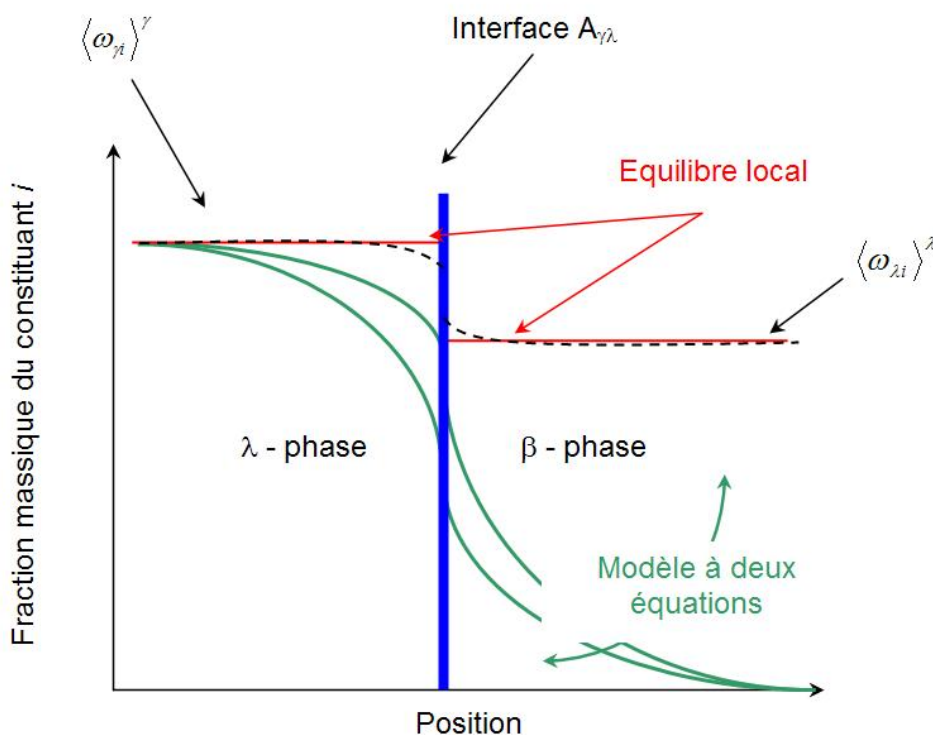


FIG. 2.3 – Équilibre chimique macroscopique : équilibre local ou non-équilibre local

Deux régimes permettant d'obtenir des gradients de concentration faibles existent. Le premier régime est celui décrit plus haut (gradients de concentrations faibles dans les deux phases) et le deuxième régime est le cas particulier où le constituant i est consommé quasi-instantanément dans l'une des phases. Dans ce cas la concentration moyenne dans cette phase est constante et prend une valeur proche de 0. Le modèle obtenu dans ce dernier cas est appelé pseudo modèle à une équation car il ressemble au modèle d'équilibre local

sans en avoir la même signification physique.

Dans le cas réactif, le fait d'avoir des coefficients $D_{\theta i}/l^2$ élevés n'est pas suffisant pour assurer la validité de l'hypothèse d'équilibre local. Introduisons ici les nombres de Péclet et les nombres de Damkohler. Le nombre de Péclet permet de comparer les transferts convectifs et diffusifs (cf. équation 2.159) alors que le nombre de Damkohler (cf. équation 2.160) permet de comparer les flux réactifs et diffusifs.

$$Pe = \frac{l \|\underline{v}_\theta\|}{D_{\theta i}} \quad (2.159)$$

$$Da = \frac{l^2 R_{\theta i}}{D_{\theta i} \rho_\theta} \quad (2.160)$$

Dans les relations 2.159 et 2.160, l est la dimension caractéristique de l'échelle microscopique (m), \underline{v}_θ est le vecteur vitesse de la phase θ à l'échelle microscopique (m/s), $D_{\theta i}$ représente le coefficient de diffusion du constituant i dans la phase θ (m^2/s), $R_{\theta i}$ est le taux de production/ consommation du constituant i dans la phase θ ($\text{kg}/\text{m}^3/\text{s}$) et ρ_θ est la masse volumique de la phase θ (kg/m^3).

En règle générale, lorsque les phénomènes de transport sont couplés à des réactions de consommation ou de production dans l'une des phases considérées, la condition nécessaire et suffisante pour vérifier l'hypothèse d'équilibre local est de se trouver dans la situation où les nombres de Péclet et de Damkohler sont faibles. Néanmoins, dans le cas des ISD, la présence de la phase biofilm ainsi que la complexité des phénomènes biologiques qui gèrent les réactions de biodégradation ne nous permettent pas d'estimer de façon certaine les nombres de Péclet et de Damkohler. Dans notre cas, nous supposons que l'hypothèse d'équilibre local est vérifiée pour l'ensemble des phases. Néanmoins, des mesures a posteriori sont nécessaires pour valider cette hypothèse.

Modèle final. Finalement le modèle mathématique que nous utiliserons pour décrire le transport des constituants majoritairement gazeux sera formé par deux équations. En considérant l'hypothèse d'équilibre local présenté précédemment, la première équation (2.161) décrit la conservation de la masse du constituant i dans les phases mobiles gaz et liquide à l'échelle de Darcy. La deuxième équation (2.162) quant à elle décrit la conservation de la masse du constituant i dans la phase biofilm. Dans ces deux équations, des termes de transferts de masse sont introduits de façon à prendre en compte le transfert de masse du constituant i vers les phases mobiles ou inversement.

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial [(\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma + \epsilon_\lambda \rho_\lambda \Gamma_i) \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma]}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left[(\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma + \epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda \Gamma_i) \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \right] \\
= & \underline{\nabla} \cdot \left[\sum_{k=1}^{k=N-1} (\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \underline{D}_{\gamma ik}^* \cdot \underline{\nabla} \langle \omega_{\gamma k} \rangle^\gamma) \right] + \underline{\nabla} \cdot \left[\epsilon_\lambda \rho_\lambda \Gamma_i \underline{D}_{\lambda i}^* \cdot \underline{\nabla} \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \right] \\
+ & \dot{m}_{\gamma \beta i} + \dot{m}_{\lambda \beta i} \tag{2.161}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \epsilon_\beta \rho_\beta \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta}{\partial t} &= \underline{\nabla} \cdot \left[\epsilon_\beta \rho_\beta \underline{D}_{\beta i}^* \cdot \underline{\nabla} \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta \right] \\
&+ \epsilon_\beta \langle r_{\beta i} \rangle^\beta - \dot{m}_{\gamma \beta i} - \dot{m}_{\lambda \beta i} \tag{2.162}
\end{aligned}$$

Nous verrons à la fin de ce chapitre que l'équation 2.162 nécessite des simplifications supplémentaires liées à un manque de connaissance de la structure globale de la phase biofilm. Néanmoins, le modèle décrit par les équations 2.161 et 2.162 est un modèle complet pour lequel la seule hypothèse simplificatrice utilisée est l'hypothèse d'équilibre local entre les phases gaz et liquide.

2.3.3 Obtention du modèle macroscopique pour les composants b solides

L'objectif de cette partie est de développer le modèle mathématique décrivant la conservation de la masse d'un constituant b provenant du substrat solide. Comme nous l'avons vu dans le Chapitre 1, paragraphe 1.2.4, les constituants provenant du substrat solide peuvent se trouver soit sous forme solide, soit sous forme hydrolysée dans le biofilm. La première étape du processus de changement d'échelle consiste à intégrer les équations 2.37 et 2.38 pour obtenir les équations 2.163 et 2.164.

$$\frac{\partial \epsilon_\sigma \langle \rho_\sigma \omega_{\sigma b} \rangle^\sigma}{\partial t} = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma \beta}} \underline{n}_{\sigma \beta} \cdot \left[-\rho_\sigma \omega_{\sigma b} \underline{w}_{\sigma \beta} \right] dA \tag{2.163}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \epsilon_\beta \langle \rho_\beta \omega_{\beta b} \rangle^\beta}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left(\langle \underline{j}_{\beta b} \rangle \right) &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\beta \sigma}} \underline{n}_{\beta \sigma} \cdot \left[-\rho_\beta \omega_{\beta b} \underline{w}_{\beta \sigma} + \underline{j}_{\beta b} \right] dA \\
&+ \epsilon_\beta \langle r_{\beta b} \rangle^\beta \tag{2.164}
\end{aligned}$$

Dans ces équations, les termes du second membre sont les termes de transfert de masse du constituant b entre les phases solide et biofilm. Ces deux termes sont reliés l'un à l'autre par la relation de continuité des flux à l'interface (cf. équation 2.43). Le terme de transfert

sera noté $\dot{m}_{\sigma\beta b}$ et défini par la relation 2.165.

$$\dot{m}_{\sigma\beta b} = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \underline{n}_{\sigma\beta} \cdot \left[-\rho_{\sigma} \omega_{\sigma b} \underline{w}_{\sigma\beta} \right] dA = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[-\rho_{\beta} \omega_{\beta b} \underline{w}_{\beta\sigma} + \underline{j}_{\beta b} \right] dA \quad (2.165)$$

En utilisant les décompositions spatiales des variables $\omega_{\sigma b}$ et $\omega_{\beta b}$, ainsi que les propriétés d'incompressibilité des phases solide et biofilm, les équations 2.163 et 2.164 se simplifient pour obtenir les relations 2.166 et 2.167.

$$\frac{\partial \epsilon_{\sigma} \rho_{\sigma} \langle \omega_{\sigma b} \rangle^{\sigma}}{\partial t} = \dot{m}_{\sigma\beta b} \quad (2.166)$$

$$\frac{\partial \epsilon_{\beta} \rho_{\beta} \langle \omega_{\beta b} \rangle^{\beta}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\langle \underline{j}_{\beta b} \rangle \right) = -\dot{m}_{\sigma\beta b} + \epsilon_{\beta} \langle r_{\beta b} \rangle^{\beta} \quad (2.167)$$

Enfin le terme de diffusion dans le biofilm est exactement traité de la même manière que dans le Chapitre 2 au paragraphe 2.3.2. Le modèle permettant de décrire la conservation de la masse du constituant b initialement présent sous forme solide est composé des deux équations 2.168 et 2.169.

$$\frac{\partial \epsilon_{\sigma} \rho_{\sigma} \langle \omega_{\sigma b} \rangle^{\sigma}}{\partial t} = \dot{m}_{\sigma\beta b} \quad (2.168)$$

$$\frac{\partial \epsilon_{\beta} \rho_{\beta} \langle \omega_{\beta b} \rangle^{\beta}}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\epsilon_{\beta} \rho_{\beta} \underline{\underline{D}}_{\beta b}^* \cdot \nabla \langle \omega_{\beta b} \rangle^{\beta} \right] - \dot{m}_{\sigma\beta b} + \epsilon_{\beta} \langle r_{\beta b} \rangle^{\beta} \quad (2.169)$$

avec :

$$\underline{\underline{D}}_{\beta b}^* = \underbrace{\frac{D_{\beta b}}{\tau_{\beta}}}_{\text{Terme diffusif}} \underline{\underline{I}} \quad (2.170)$$

2.3.4 Obtention du modèle macroscopique pour l'eau

L'eau est un constituant particulier, puisque c'est le seul qui potentiellement peut être présent dans les quatre phases que nous considérons. La plupart du temps, l'eau constitutive de la phase solide est considérée comme piégée dans cette phase, et elle ne joue donc qu'un faible rôle dans les phénomènes de transfert. Néanmoins, nous développons ici un modèle mathématique qui nous permet de prendre en compte la conservation de l'eau dans les quatre phases avec possibilité d'échange de masse entre le solide et le biofilm d'une part et le biofilm et les phases mobiles d'autre part. La forme moyennée des équations de conservation de la masse d'eau dans chacune des phases est présentée par les équations 2.171 à 2.174. Les différents transferts possibles sont les transferts d'eau de la phase liquide et de la phase biofilm vers la phase gaz par évaporation, et les échanges d'eau de la phase

liquide vers les phases biofilm et solide.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \omega_{\gamma H_2O} \rangle^\gamma}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\langle \rho_\gamma \omega_{\gamma H_2O} \underline{v}_\gamma \rangle + \langle \underline{j}_{\gamma H_2O} \rangle \right) \\ = & -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\lambda, \beta} \int_{\mathcal{A}_{\gamma\theta}} \underline{n}_{\gamma\theta} \cdot \left[\rho_\gamma \omega_{\gamma H_2O} (\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\gamma\theta}) + \underline{j}_{\gamma H_2O} \right] dA \end{aligned} \quad (2.171)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \epsilon_\lambda \langle \rho_\lambda \omega_{\lambda H_2O} \rangle^\lambda}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\langle \rho_\lambda \omega_{\lambda H_2O} \underline{v}_\lambda \rangle + \langle \underline{j}_{\lambda H_2O} \rangle \right) \\ = & -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma, \beta} \int_{\mathcal{A}_{\lambda\theta}} \underline{n}_{\lambda\theta} \cdot \left[\rho_\lambda \omega_{\lambda H_2O} (\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\lambda\theta}) + \underline{j}_{\lambda H_2O} \right] dA \end{aligned} \quad (2.172)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \epsilon_\beta \langle \rho_\beta \omega_{\beta H_2O} \rangle^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\langle \underline{j}_{\beta H_2O} \rangle \right) \\ = & -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma, \lambda, \sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\theta}} \underline{n}_{\beta\theta} \cdot \left[-\rho_\beta \omega_{\beta H_2O} \underline{w}_{\beta\theta} + \underline{j}_{\beta H_2O} \right] dA + \epsilon_\beta \langle r_{\beta H_2O} \rangle^\beta \end{aligned} \quad (2.173)$$

$$\frac{\partial \epsilon_\sigma \langle \rho_\sigma \omega_{\sigma H_2O} \rangle^\sigma}{\partial t} = -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\lambda, \beta} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\theta}} \underline{n}_{\sigma\theta} \cdot \left[-\rho_\sigma \omega_{\sigma H_2O} \underline{w}_{\sigma\theta} \right] dA \quad (2.174)$$

Dans les phase liquide et biofilm, l'eau est le constituant majoritaire et, par conséquent, nous pourrions considérer que les gradients de concentration en eau dans la phase liquide et la phase biofilm sont faibles. Par conséquent, nous négligerons les termes diffusifs dans les équations 2.172 et 2.173 (ie $\underline{j}_{\lambda H_2O} \approx \underline{0}$ et $\underline{j}_{\beta H_2O} \approx \underline{0}$). En revanche, nous considérons un terme de diffusion muticonstituant similaire à celui présenté par l'équation 2.92 dans la phase gaz. Comme nous l'avons fait précédemment, en utilisant la continuité des flux aux interfaces définis à l'échelle du pore par les relations 2.25 à 2.30, nous introduisons les termes de transfert interfaciaux suivants :

$$\begin{aligned} \dot{m}_{\lambda\gamma H_2O} &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\gamma\lambda}} \underline{n}_{\gamma\lambda} \cdot \left[\rho_\gamma \omega_{\gamma H_2O} (\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\gamma\lambda}) + \underline{j}_{\gamma H_2O} \right] dA \\ &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\gamma\lambda}} \underline{n}_{\gamma\lambda} \cdot \left[\rho_\lambda \omega_{\lambda H_2O} (\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\gamma\lambda}) \right] dA \end{aligned} \quad (2.175)$$

$$\begin{aligned} \dot{m}_{\lambda\sigma H_2O} &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\lambda\sigma}} \underline{n}_{\lambda\sigma} \cdot \left[\rho_\lambda \omega_{\lambda H_2O} (\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\lambda\sigma}) \right] dA \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\lambda\sigma}} \underline{n}_{\lambda\sigma} \cdot \left[-\rho_\sigma \omega_{\sigma H_2O} \underline{w}_{\lambda\sigma} \right] dA \end{aligned} \quad (2.176)$$

$$\dot{m}_{\beta\gamma H_2O} = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\gamma}} \underline{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[-\rho_\beta \omega_{\beta H_2O} \underline{w}_{\beta\gamma} \right] dA$$

$$= \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\gamma}} \underline{n}_{\beta\gamma} \cdot \left[\rho_\gamma \omega_{\gamma H_2O} (\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\beta\gamma}) + \underline{j}_{\gamma H_2O} \right] dA \quad (2.177)$$

$$\begin{aligned} \dot{m}_{\beta\lambda H_2O} &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\lambda}} \underline{n}_{\beta\lambda} \cdot \left[-\rho_\beta \omega_{\beta H_2O} \underline{w}_{\beta\lambda} \right] dA \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\lambda}} \underline{n}_{\beta\lambda} \cdot \left[\rho_\lambda \omega_{\lambda H_2O} (\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\beta\lambda}) \right] dA \end{aligned} \quad (2.178)$$

$$\begin{aligned} \dot{m}_{\beta\sigma H_2O} &= -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[-\rho_\beta \omega_{\beta H_2O} \underline{w}_{\beta\sigma} \right] dA \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \underline{n}_{\beta\sigma} \cdot \left[-\rho_\sigma \omega_{\sigma H_2O} \underline{w}_{\beta\sigma} \right] dA \end{aligned} \quad (2.179)$$

En utilisant la même démarche que celle présentée pour les constituants majoritairement gazeux et pour les constituants du substrat solide, le modèle mathématique à l'échelle de Darcy permettant de décrire la conservation de l'eau dans l'ensemble du système est constitué des quatre équations 2.180, 2.181, 2.182 et 2.183.

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma H_2O} \rangle^\gamma}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left(\epsilon_\gamma \rho_\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma H_2O} \rangle^\gamma \right) \\ &= \underline{\nabla} \cdot \left[\sum_{k=1}^{k=N-1} \left(\epsilon_\gamma \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \underline{D}_{\gamma H_2O k}^* \cdot \underline{\nabla} \langle \omega_{\gamma k} \rangle^\gamma \right) \right] - \dot{m}_{\beta\gamma H_2O} - \dot{m}_{\lambda\gamma H_2O} \end{aligned} \quad (2.180)$$

$$\frac{\partial \epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \omega_{\lambda H_2O} \rangle^\lambda}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \left(\epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda \langle \omega_{\lambda H_2O} \rangle^\lambda \right) = \dot{m}_{\lambda\sigma H_2O} + \dot{m}_{\lambda\gamma H_2O} - \dot{m}_{\beta\lambda H_2O} \quad (2.181)$$

$$\frac{\partial \epsilon_\beta \rho_\beta \langle \omega_{\beta H_2O} \rangle^\beta}{\partial t} = +\dot{m}_{\beta\gamma H_2O} + \dot{m}_{\beta\lambda H_2O} + \dot{m}_{\beta\sigma H_2O} + \epsilon_\beta \langle r_{\beta H_2O} \rangle^\beta \quad (2.182)$$

$$\frac{\partial \epsilon_\sigma \rho_\sigma \langle \omega_{\sigma H_2O} \rangle^\sigma}{\partial t} = -\dot{m}_{\beta\sigma H_2O} - \dot{m}_{\lambda\sigma H_2O} \quad (2.183)$$

avec :

$$\underline{D}_{\gamma H_2O k}^* = \underbrace{\frac{\langle D_{\gamma H_2O k} \rangle^\gamma}{\tau_\gamma} \underline{I}}_{\text{Terme diffusif}} + \underbrace{\delta_{H_2O k} \left[\alpha_{T\gamma} \left\| \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \right\| \underline{I} + (\alpha_{L\gamma} - \alpha_{T\gamma}) \frac{\langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \times \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma}{\left\| \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \right\|^2} \right]}_{\text{Terme dispersif}} \quad (2.184)$$

Enfin, il convient de signaler que l'hypothèse d'équilibre local entre les phases gaz et liquide sera également appliquée dans le cas de l'eau. L'eau étant un constituant infiniment concentré dans la phase liquide, la concentration de la vapeur en contact avec l'eau liquide sera imposée par les conditions de température et de pression via la pression de vapeur saturante de l'eau. La relation permettant de calculer la fraction massique d'eau dans la phase gaz est couramment appelée *loi de Raoult* et relie directement la fraction massique d'eau gazeuse à la pression de vapeur saturante.

2.3.5 Obtention du modèle macroscopique pour l'énergie

L'enjeu de cette partie est d'obtenir le modèle mathématique permettant de décrire la conservation de l'énergie du système. Comme nous l'avons présenté précédemment pour les équations de transport, nous adoptons une approche multi-constituant pour décrire le transport de la chaleur dans chacune des phases. L'approche " multi-constituant " est récente dans le développement de ce type d'équations. En effet, dans la littérature seule une approche multiphasique est adoptée et l'aspect multi-constituants est inexistant. Ceci pose un certain nombre de problèmes puisque les propriétés thermodynamiques de chacune des phases dépendent fortement de leur composition. On tentera donc de développer un modèle macroscopique de conservation de l'énergie en prenant en compte cet aspect multiphasique et multi-constituant. L'originalité de cette démarche est donc de présenter le développement d'une équation de conservation de l'énergie en tenant compte de la composition de chaque phase. La démarche utilisée consiste à appliquer la méthode de prise de moyenne volumique aux équations 2.63 à 2.66.

La démarche de prise de moyenne est présentée pour l'équation de conservation de l'énergie pour la phase gaz. Elle sera reprise pour les autres phases. En utilisant les théorèmes de changement d'échelle, ainsi que la décomposition spatiale des variables pour la phase gaz, on obtient l'équation moyenne de conservation de l'énergie de la phase gaz (cf. équation 2.185). Dans cette équation, nous avons regroupé les termes de structure similaires et nous avons utilisé l'équation de conservation de la masse de constituant i en phase gazeuse développée dans le Chapitre 2 au paragraphe 2.3.2 pour faire apparaître le terme de transfert de masse de ce constituant de la phase gaz vers les phases liquide et biofilm ($\dot{m}_{\gamma\lambda i}$ et $\dot{m}_{\gamma\beta i}$).

$$\begin{aligned}
& \sum_{i \in \gamma} \left[\rho_\gamma \epsilon_\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \frac{\partial \langle h_{\gamma i} \rangle^\gamma}{\partial t} + \left(\epsilon_\gamma \rho_\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma + \epsilon_\gamma \langle \underline{j}_{\gamma i} \rangle^\gamma + \epsilon_\gamma \rho_\gamma \langle \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma \right) \cdot \underline{\nabla} \langle h_{\gamma i} \rangle^\gamma \right] \\
& \quad + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\lambda, \beta, \sigma} \sum_{i \in \gamma, \mathcal{A}_{\gamma\theta}} \int \underline{n}_{\gamma\theta} \cdot \left(\left[h_{\gamma i} \left(\rho_\gamma \omega_{\gamma i} \left(\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\gamma\theta} \right) + \underline{j}_{\gamma i} \right) \right] - \Lambda_\gamma \underline{\nabla} T_\gamma \right) dA \\
& + \sum_{i \in \gamma} \left[\frac{\partial \rho_\gamma \epsilon_\gamma \langle \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{h}_{\gamma i} \rangle^\gamma}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot \epsilon_\gamma \rho_\gamma \left(\langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma + \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma + \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{\omega}_{\gamma i} \rangle^\gamma \right) \right. \\
& \quad \left. + \underline{\nabla} \cdot \epsilon_\gamma \langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{\underline{j}}_{\gamma i} \rangle^\gamma \right] \\
& = \underline{\nabla} \cdot \left(\Lambda_\gamma \epsilon_\gamma \underline{\nabla} \langle T_\gamma \rangle^\gamma \right) + \underline{\nabla} \cdot \left(\Lambda_\gamma \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\lambda, \beta, \sigma} \int \underline{n}_{\gamma\theta} \tilde{T}_\gamma dA \right) - \sum_{\theta=\lambda, \beta} \sum_{i \in \gamma} [\langle h_{\gamma i} \rangle^\gamma \dot{m}_{\gamma\theta i}]
\end{aligned} \tag{2.185}$$

Une analyse des ordres de grandeur va nous permettre de simplifier cette équation. En supposant toujours que les conditions de séparation des échelles sont respectées, nous pouvons comparer les ordres de grandeur des différents termes de l'équation 2.185. En introduisant l'expression classique de l'enthalpie $h_{\gamma i} = C_{P\gamma i} T_\gamma$, on a par exemple :

$$\langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma = C_{P\gamma i} \mathbf{O} \left(\frac{l^2}{L^2} \langle T_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma \right) \tag{2.186}$$

$$\langle \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma \langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{\omega}_{\gamma i} \rangle^\gamma = C_{P\gamma i} \mathbf{O} \left(\frac{l^2}{L^2} \langle T_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma \right) \tag{2.187}$$

$$\langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma = C_{P\gamma i} \mathbf{O} \left(\frac{l}{L} \langle T_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma \right) \tag{2.188}$$

Or les dimensions caractéristiques utilisées pour le changement d'échelle sont telles que $\frac{l}{L} \ll 1$. Ceci implique les inégalités suivantes :

$$\langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma \ll \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma \tag{2.189}$$

$$\langle \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma \langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{\omega}_{\gamma i} \rangle^\gamma \ll \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{\underline{v}}_\gamma \rangle^\gamma \tag{2.190}$$

De la même manière, on a :

$$\frac{\partial \rho_\gamma \epsilon_\gamma \langle \tilde{\omega}_{\gamma j} \tilde{h}_{\gamma j} \rangle^\gamma}{\partial t} \ll \rho_\gamma \epsilon_\gamma \langle \omega_{\gamma j} \rangle^\gamma \frac{\partial \langle h_{\gamma j} \rangle^\gamma}{\partial t} \tag{2.191}$$

Enfin, en supposant que les flux de diffusion sont fickiens (cf. équation 2.92), nous pouvons

évaluer les ordres de grandeur des termes liés à la diffusion moléculaire :

$$\underline{\nabla} \cdot \epsilon_\gamma \langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{j}_{\gamma i} \rangle^\gamma = \mathbf{O} \left(-\rho_\gamma D_{\gamma ii} \epsilon_\gamma C_{P\gamma j} \frac{l^2}{L^4} \langle T_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \right) \quad (2.192)$$

$$\left(\epsilon_\gamma \langle \underline{j}_{\gamma i} \rangle^\gamma \right) \cdot \underline{\nabla} \langle h_{\gamma i} \rangle^\gamma = \mathbf{O} \left(-\rho_\gamma D_{\gamma ii} \epsilon_\gamma C_{P\gamma i} \frac{l}{L^2} \langle T_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \right) \quad (2.193)$$

Nous obtenons donc la relation :

$$\underline{\nabla} \cdot \epsilon_\gamma \langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{j}_{\gamma i} \rangle^\gamma \ll \left(\epsilon_\gamma \langle \underline{j}_{\gamma i} \rangle^\gamma \right) \cdot \underline{\nabla} \langle h_{\gamma i} \rangle^\gamma \quad (2.194)$$

L'analyse de ces ordres de grandeur nous permet de simplifier l'équation 2.185 pour obtenir l'expression 2.195

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in \gamma} \left[\underbrace{\rho_\gamma \epsilon_\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \frac{\partial \langle h_{\gamma i} \rangle^\gamma}{\partial t}}_{\text{Terme d'accumulation}} + \underbrace{\left(\epsilon_\gamma \rho_\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma + \epsilon_\gamma \langle \underline{j}_{\gamma i} \rangle^\gamma + \epsilon_\gamma \rho_\gamma \langle \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) \cdot \underline{\nabla} \langle h_{\gamma i} \rangle^\gamma}_{\text{Terme de transport advectif et diffusif}} \right] \\ & + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\lambda,\beta,\sigma} \sum_{i \in \gamma} \int_{\mathcal{A}_{\gamma\theta}} \underline{n}_{\gamma\theta} \cdot \left(\left[h_{\gamma i} \left(\rho_\gamma \omega_{\gamma i} \left(\underline{v}_\gamma - \underline{w}_{\gamma\theta} \right) + \underline{j}_{\gamma i} \right) \right] - \Lambda_\gamma \underline{\nabla} T_\gamma \right) dA \\ & \underbrace{\hspace{15em}}_{\text{Terme d'échange interfacial d'enthalpie}} \\ & + \underbrace{\sum_{i \in \gamma} \left[\underline{\nabla} \cdot \epsilon_\gamma \rho_\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{v}_\gamma \rangle^\gamma \right]}_{\text{Terme dispersif}} + \underbrace{\sum_{\theta=\lambda,\beta} \sum_{i \in \gamma} \left[\langle h_{\gamma i} \rangle^\gamma \dot{m}_{\gamma\theta i} \right]}_{\text{Terme d'échange massique}} \\ & = \underbrace{\underline{\nabla} \cdot (\Lambda_\gamma \epsilon_\gamma \underline{\nabla} \langle T_\gamma \rangle^\gamma)}_{\text{Terme de conduction}} + \underbrace{\underline{\nabla} \cdot \left(\Lambda_\gamma \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\lambda,\beta,\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\gamma\theta}} \underline{n}_{\gamma\theta} \tilde{T}_\gamma dA \right)}_{\text{Terme de tortuosité}} \quad (2.195) \end{aligned}$$

L'équation 2.195 fait apparaître plusieurs termes, dont la signification physique est présentée ci-dessus. Ce type d'équation peut être écrite pour chacune des phases. Ainsi les équations 2.196, 2.197 et 2.198 représentent les équations de conservation de l'énergie des phases liquide, biofilm et solide moyennées sur le VER.‘

$$\begin{aligned}
& \sum_{i \in \lambda} \left[\underbrace{\rho_\lambda \epsilon_\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda \frac{\partial \langle h_{\lambda i} \rangle^\lambda}{\partial t}}_{\text{Terme d'accumulation}} + \underbrace{\left(\epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle v_\lambda \rangle^\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda + \epsilon_\lambda \langle j_{\lambda i} \rangle^\lambda + \epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \tilde{\omega}_{\lambda i} \tilde{v}_\lambda \rangle^\lambda \right) \cdot \nabla \langle h_{\lambda i} \rangle^\lambda}_{\text{Terme de transport advectif et diffusif}} \right] \\
& + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma,\beta,\sigma} \sum_{i \in \lambda} \int_{\mathcal{A}_{\lambda\theta}} \underline{n}_{\lambda\theta} \cdot \left([h_{\lambda i} (\rho_\lambda \omega_{\lambda i} (\underline{v}_\lambda - \underline{w}_{\lambda\theta}) + \underline{j}_{\lambda i})] - \Lambda_\lambda \nabla T_\lambda \right) dA \\
& \quad \underbrace{\hspace{15em}}_{\text{Terme d'echange interfacial d'enthalpie}} \\
& + \sum_{i \in \lambda} \left[\underbrace{\nabla \cdot \epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda \langle \tilde{h}_{\lambda i} \tilde{v}_\lambda \rangle^\lambda}_{\text{Terme dispersif}} \right] + \underbrace{\sum_{\theta=\gamma,\beta} \sum_{i \in \lambda} [\langle h_{\lambda i} \rangle^\lambda \dot{m}_{\lambda\theta i}]}_{\text{Terme d'echange massique}} \\
& = \underbrace{\nabla \cdot (\Lambda_\lambda \epsilon_\lambda \nabla \langle T_\lambda \rangle^\lambda)}_{\text{Terme de conduction}} + \underbrace{\nabla \cdot \left(\Lambda_\lambda \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma,\beta,\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\lambda\theta}} \underline{n}_{\lambda\theta} \tilde{T}_\lambda dA \right)}_{\text{Terme de tortuosite}} \tag{2.196}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{i \in \beta} \left[\underbrace{\rho_\beta \epsilon_\beta \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta \frac{\partial \langle h_{\beta i} \rangle^\beta}{\partial t}}_{\text{Terme d'accumulation}} + \underbrace{\left(\epsilon_\beta \langle j_{\beta i} \rangle^\beta \right) \cdot \nabla \langle h_{\beta i} \rangle^\beta}_{\text{Terme de transport advectif et diffusif}} \right] + \underbrace{\sum_{\theta=\gamma,\lambda,\sigma} \sum_{i \in \beta} [\langle h_{\beta\theta i} \rangle^\beta \dot{m}_{\beta i}]}_{\text{Terme d'echange massique}} \\
& + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma,\lambda,\sigma} \sum_{i \in \beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\theta}} \underline{n}_{\beta\theta} \cdot \left([h_{\beta i} (-\rho_\beta \omega_{\beta i} \underline{w}_{\beta\theta} + \underline{j}_{\beta i})] - \Lambda_\beta \nabla T_\beta \right) dA \\
& \quad \underbrace{\hspace{15em}}_{\text{Terme d'echange interfacial d'enthalpie}} \\
& = \underbrace{\nabla \cdot (\Lambda_\beta \epsilon_\beta \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta)}_{\text{Terme de conduction}} + \underbrace{\nabla \cdot \left(\Lambda_\beta \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma,\lambda,\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\theta}} \underline{n}_{\beta\theta} \tilde{T}_\beta dA \right)}_{\text{Terme de tortuosite}} + \underbrace{\epsilon_\beta \langle \psi \rangle^\beta}_{\text{Terme de consommation/production}} \tag{2.197}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{i \in \sigma} \left[\underbrace{\rho_\sigma \epsilon_\sigma \langle \omega_{\sigma i} \rangle^\sigma \frac{\partial \langle h_{\sigma i} \rangle^\sigma}{\partial t}}_{\text{Terme d'accumulation}} \right] + \underbrace{\sum_{i \in \sigma} [\langle h_{\sigma\beta i} \rangle^\sigma \dot{m}_{\sigma i}]}_{\text{Terme d'echange massique}} \\
& + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma,\lambda,\beta} \sum_{i \in \sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\theta}} \underline{n}_{\sigma\theta} \cdot \left([h_{\sigma i} (-\rho_\sigma \omega_{\sigma i} \underline{w}_{\sigma\theta})] - \Lambda_\sigma \nabla T_\sigma \right) dA \\
& \quad \underbrace{\hspace{15em}}_{\text{Terme d'echange interfacial d'enthalpie}} \\
& = \underbrace{\nabla \cdot (\Lambda_\sigma \epsilon_\sigma \nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma)}_{\text{Terme de conduction}} + \underbrace{\nabla \cdot \left(\Lambda_\sigma \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma,\lambda,\beta} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\theta}} \underline{n}_{\sigma\theta} \tilde{T}_\sigma dA \right)}_{\text{Terme de tortuosite}} \tag{2.198}
\end{aligned}$$

En sommant les équations 2.195, 2.196, 2.197 et 2.198, les termes de transferts interfaciaux s'annulent deux à deux pour obtenir la relation 2.199

$$\begin{aligned}
& \sum_{i \in \gamma} \left[\rho_\gamma \epsilon_\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \frac{\partial \langle h_{\gamma i} \rangle^\gamma}{\partial t} + \left(\epsilon_\gamma \rho_\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma + \epsilon_\gamma \langle \underline{j}_{\gamma i} \rangle^\gamma + \epsilon_\gamma \rho_\gamma \langle \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) \cdot \underline{\nabla} \langle h_{\gamma i} \rangle^\gamma \right] \\
& + \sum_{i \in \lambda} \left[\rho_\lambda \epsilon_\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda \frac{\partial \langle h_{\lambda i} \rangle^\lambda}{\partial t} + \left(\epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda + \epsilon_\lambda \langle \underline{j}_{\lambda i} \rangle^\lambda + \epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \tilde{\omega}_{\lambda i} \tilde{v}_\lambda \rangle^\lambda \right) \cdot \underline{\nabla} \langle h_{\lambda i} \rangle^\lambda \right] \\
& + \sum_{i \in \beta} \left[\rho_\beta \epsilon_\beta \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta \frac{\partial \langle h_{\beta i} \rangle^\beta}{\partial t} + \left(\epsilon_\beta \langle \underline{j}_{\beta i} \rangle^\beta \right) \cdot \underline{\nabla} \langle h_{\beta i} \rangle^\beta \right] + \sum_{i \in \sigma} \left[\rho_\sigma \epsilon_\sigma \langle \omega_{\sigma i} \rangle^\sigma \frac{\partial \langle h_{\sigma i} \rangle^\sigma}{\partial t} \right] \\
& + \sum_{\theta=\gamma,\lambda,\sigma} \sum_{i \in \beta} \left[\langle h_{\beta i} \rangle^\beta \dot{m}_{\beta \theta i} \right] + \sum_{i \in \sigma} \left[\langle h_{\sigma i} \rangle^\sigma \dot{m}_{\sigma \beta i} \right] + \sum_{\theta=\lambda,\beta} \sum_{i \in \gamma} \left[\langle h_{\gamma \theta i} \rangle^\gamma \dot{m}_{\gamma i} \right] + \sum_{\theta=\gamma,\beta} \sum_{i \in \lambda} \left[\langle h_{\lambda i} \rangle^\lambda \dot{m}_{\lambda \theta i} \right] \\
& + \sum_{i \in \gamma} \left[\underline{\nabla} \cdot \epsilon_\gamma \rho_\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma \langle \tilde{h}_{\gamma i} \tilde{v}_\gamma \rangle^\gamma \right] + \sum_{i \in \lambda} \left[\underline{\nabla} \cdot \epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda \langle \tilde{h}_{\lambda i} \tilde{v}_\lambda \rangle^\lambda \right] \\
& = \underline{\nabla} \cdot \left(\Lambda_\gamma \epsilon_\gamma \underline{\nabla} \langle T_\gamma \rangle^\gamma \right) + \underline{\nabla} \cdot \left(\Lambda_\gamma \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\lambda,\beta,\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\gamma\theta}} \underline{n}_{\gamma\theta} \tilde{T}_\gamma dA \right) \\
& + \underline{\nabla} \cdot \left(\Lambda_\lambda \epsilon_\lambda \underline{\nabla} \langle T_\lambda \rangle^\lambda \right) + \underline{\nabla} \cdot \left(\Lambda_\lambda \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma,\beta,\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\lambda\theta}} \underline{n}_{\lambda\theta} \tilde{T}_\lambda dA \right) \\
& + \underline{\nabla} \cdot \left(\Lambda_\beta \epsilon_\beta \underline{\nabla} \langle T_\beta \rangle^\beta \right) + \underline{\nabla} \cdot \left(\Lambda_\beta \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma,\lambda,\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\theta}} \underline{n}_{\beta\theta} \tilde{T}_\beta dA \right) + \epsilon_\beta \langle \psi \rangle^\beta \\
& + \underline{\nabla} \cdot \left(\Lambda_\sigma \epsilon_\sigma \underline{\nabla} \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) + \underline{\nabla} \cdot \left(\Lambda_\sigma \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\theta=\gamma,\lambda,\beta} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\theta}} \underline{n}_{\sigma\theta} \tilde{T}_\sigma dA \right) \tag{2.199}
\end{aligned}$$

A ce stade, nous considérons que le seul terme de changement de phase qui s'accompagne d'un "saut" d'enthalpie est la vaporisation de l'eau liquide vers la phase gaz ou la condensation de l'eau gaz vers la phase liquide. En effet, les autres changements de phase se font via des mécanismes de dissolution des espèces gazeuses vers la phase liquide ou des espèces solides vers la phase biofilm, et il s'avère que ces mécanismes sont très peu énergétiques. Nous simplifions donc les termes de changement de phase comme le présente l'équation 2.200.

$$\begin{aligned}
& \sum_{\theta=\gamma,\lambda,\sigma} \sum_{i \in \beta} [\langle h_{\beta i} \rangle^\beta \dot{m}_{\beta \theta i}] + \sum_{i \in \sigma} [\langle h_{\sigma i} \rangle^\sigma \dot{m}_{\sigma \beta i}] \\
+ & \sum_{\theta=\lambda,\beta} \sum_{i \in \gamma} [\langle h_{\gamma \theta i} \rangle^\gamma \dot{m}_{\gamma i}] + \sum_{\theta=\gamma,\beta} \sum_{i \in \lambda} [\langle h_{\lambda i} \rangle^\lambda \dot{m}_{\lambda \theta i}] \\
= & \dot{m}_{\gamma \lambda H_2O} \left(\langle h_{\gamma H_2O} \rangle^\gamma - \langle h_{\lambda H_2O} \rangle^\lambda \right) = \dot{m}_{\gamma \lambda H_2O} L v_{H_2O} \quad (2.200)
\end{aligned}$$

Dans cette équation $L v_{H_2O}$ représente la chaleur latente de vaporisation de l'eau.

Equilibre thermique local. Comme dans beaucoup d'études de transfert thermique en milieu poreux, nous généralisons, à l'échelle de Darcy, les conditions d'équilibres thermiques aux différentes interfaces présentées par les équations 2.73 à 2.75 valables à l'échelle du pore. Nous utilisons donc l'hypothèse d'équilibre thermique local, tout comme nous avons utilisé l'hypothèse d'équilibre chimique local entre les phases liquide et gaz. Introduire cette hypothèse nous permet de considérer un seul champ de température macroscopique (cf. équation 2.201).

$$\langle T \rangle = \langle T_\gamma \rangle^\gamma = \langle T_\lambda \rangle^\lambda = \langle T_\beta \rangle^\beta = \langle T_\sigma \rangle^\sigma \quad (2.201)$$

Tout comme nous avons pu le montrer pour l'hypothèse d'équilibre chimique local, l'hypothèse d'équilibre thermique local est valable lorsque les gradients thermiques sont faibles dans chaque phase en contact thermique. Les travaux de Quintard and Whitaker (1993) ou Gobbé and Quintard (1994) permettent de développer les conditions dans lesquelles l'utilisation de l'hypothèse d'équilibre thermique local est justifiée. Nous ne développons pas ici les conditions détaillées d'utilisation de l'hypothèse d'équilibre thermique local, mais compte tenu du fait qu'en règle générale, les temps caractéristiques des phénomènes de transfert de masse sont plus long que les temps associés au transport de chaleur, nous pouvons considérer que le transfert de chaleur est quasi-instantané par rapport au transfert de masse, ce qui justifie l'utilisation de l'hypothèse d'équilibre thermique local.

Fermeture. Le problème de fermeture consiste à fermer le système d'équations en reliant la déviation de la température \tilde{T} à la valeur moyenne ou à ses dérivées. L'étude des problèmes de fermeture pour les transferts de chaleur en milieu poreux multiphasique est largement documentée. On pourra par exemple se référer à la discussion présentée par Duval et al. (2004). Dans le cas multiphasique avec équilibre local, la variable de fermeture

peut être estimée sous la forme suivante :

$$\tilde{T} = \underline{b}_T \cdot \underline{\nabla} \langle T \rangle \quad (2.202)$$

Ce type de problème a été résolu pour de nombreuses structures, et permet d'obtenir des valeurs des propriétés effectives. Compte tenu du manque de connaissances sur la structure porale pour nos matériaux, nous ne résolvons pas le problème de fermeture mais nous considérons que la forme introduite par l'équation 2.202 est valable. L'équation 2.199 prend donc la forme suivante :

$$\begin{aligned} \langle \rho C_P \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \langle \underline{U} \rangle \cdot \underline{\nabla} \langle T \rangle + \dot{m}_{\gamma \lambda H_2O} L v_{H_2O} \\ = \underline{\nabla} \cdot \left(\underline{\underline{\Lambda}}_{eff} \cdot \underline{\nabla} \langle T \rangle \right) + \epsilon_\beta \langle \psi \rangle^\beta \end{aligned} \quad (2.203)$$

avec :

$$\begin{aligned} \langle \rho C_P \rangle &= \sum_{i \in \gamma} \rho_\gamma \epsilon_\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma C_{P\gamma i} + \sum_{i \in \lambda} \rho_\lambda \epsilon_\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda C_{P\lambda i} + \sum_{i \in \beta} \rho_\beta \epsilon_\beta \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta C_{P\beta i} \\ &+ \sum_{i \in \sigma} \rho_\sigma \epsilon_\sigma \langle \omega_{\sigma i} \rangle^\sigma C_{P\sigma i} \end{aligned} \quad (2.204)$$

$$\begin{aligned} \langle \underline{U} \rangle &= \sum_{i \in \gamma} C_{P\gamma i} \left(\epsilon_\gamma \rho_\gamma \langle \underline{v}_\gamma \rangle^\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma + \epsilon_\gamma \rho_\gamma \langle \tilde{\omega}_{\gamma i} \tilde{v}_\gamma \rangle^\gamma \right) \\ &+ \sum_{i \in \lambda} C_{P\lambda i} \left(\epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \underline{v}_\lambda \rangle^\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda + \epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \tilde{\omega}_{\lambda i} \tilde{v}_\lambda \rangle^\lambda \right) \\ &+ \sum_{i \in \beta} C_{P\beta i} \left(\epsilon_\beta \rho_\beta \langle \underline{v}_\beta \rangle^\beta \langle \omega_{\beta i} \rangle^\beta \right) \end{aligned} \quad (2.205)$$

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\Lambda}}_{eff} &= (\Lambda_\gamma \epsilon_\gamma + \Lambda_\lambda \epsilon_\lambda + \Lambda_\beta \epsilon_\beta + \Lambda_\sigma \epsilon_\sigma) \underline{\underline{I}} + \Lambda_\gamma \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\alpha=\lambda, \beta, \sigma} \int_{\mathcal{A}_{\gamma\alpha}} n_{\gamma\alpha} \vec{b}_T dA \\ &+ \Lambda_\lambda \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\alpha=\gamma, \beta, \sigma} \int_{\mathcal{A}_{\lambda\alpha}} n_{\lambda\alpha} \vec{b}_T dA + \Lambda_\beta \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\alpha=\gamma, \lambda, \sigma} \int_{\mathcal{A}_{\beta\alpha}} n_{\beta\alpha} \vec{b}_T dA + \Lambda_\sigma \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\alpha=\gamma, \lambda, \beta} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\alpha}} n_{\sigma\alpha} \vec{b}_T dA \\ &- \sum_{j=1}^5 \left[\epsilon_\gamma \rho_\gamma \langle \omega_{\gamma i} \rangle^\gamma C_{P\gamma i} \langle \vec{b}_T \tilde{v}_\gamma \rangle^\gamma \right] - \sum_{j=1}^4 \left[\epsilon_\lambda \rho_\lambda \langle \omega_{\lambda i} \rangle^\lambda C_{P\lambda i} \langle \vec{b}_T \tilde{v}_\lambda \rangle^\lambda \right] \end{aligned} \quad (2.206)$$

L'équation (2.6-10) prend donc une forme générique, mais elle a l'avantage de prendre en compte les variations de composition des différentes phases. Ceci est original et nécessaire dans notre cas puisque la composition de la phase gazeuse est susceptible de varier de façon conséquente au cours des différentes phases de la vie de la décharge.

2.4 Modèle mathématique final

Nous avons développé un modèle mathématique complexe permettant de décrire les transferts couplés de masse et de chaleur à l'échelle de Darcy dans un milieu poreux réactif. Ce milieu poreux est constitué de la matrice solide formée par les OM. Le modèle mathématique obtenu permet de prendre en compte le caractère multi-consituant des transferts intervenant dans les ISD. Il intègre également la description de deux phases mobiles via l'utilisation de lois de Darcy généralisées pour les écoulements de gaz et de liquide. Dans cette partie, nous présentons la synthèse du modèle mathématique développé précédemment et introduisons quelques relations supplémentaires nous permettant de réarranger le système.

2.4.1 Relations supplémentaires

Avant de définir le système d'équations que nous utiliserons pour développer notre outil de simulation numérique, il nous faut introduire des relations supplémentaires qui nous seront utiles pour obtenir une forme plus facile à manipuler du système d'équations.

Variables macroscopiques. Dans la suite du document, de façon à s'affranchir de certaines écritures assez lourdes, nous allons renommer les variables macroscopiques utilisées pour décrire le système à l'échelle de Darcy. Nous introduisons donc les variables suivantes :

$$\mathcal{T} = \langle T \rangle \quad (2.207)$$

$$\rho_\gamma \approx \langle \rho_\gamma \rangle^\gamma \quad (2.208)$$

$$\Omega_{\theta i} = \langle \omega_{\theta i} \rangle^\theta \quad (2.209)$$

$$\underline{V}_\theta = \epsilon_\theta \langle v_\theta \rangle^\theta \quad (2.210)$$

$$R_{\beta i} = \langle r_{\beta i} \rangle^\beta \quad (2.211)$$

$$\Psi_\beta = \langle \psi \rangle^\beta \quad (2.212)$$

$$\epsilon = \epsilon_\gamma + \epsilon_\lambda \quad (2.213)$$

$$S = \frac{\epsilon_\lambda}{\epsilon_\gamma + \epsilon_\lambda} \quad (2.214)$$

Il convient également de noter que pour une phase donnée, la somme des fractions massiques est égale à l'unité. Ceci est exprimée par la relation 2.215.

$$\sum_{i \in \theta} \Omega_{\theta i} = 1 \text{ pour } \theta = \gamma, \lambda, \beta \text{ ou } \sigma \quad (2.215)$$

Equations de continuité. Nous avons vu dans le Chapitre 2 aux paragraphes 2.2.5, 2.2.6, 2.2.7 et 2.2.8 que la somme des équations de conservation de la masse à l'échelle du pore pour tous les constituants d'une phase permet d'obtenir l'équation de continuité de la phase considérée (cf. équations 2.45, 2.48, 2.50 et 2.51). Il en est de même pour les équations à l'échelle de Darcy. Il est donc aisé d'obtenir les équations de continuité à l'échelle de Darcy pour les phases gaz (cf. équation 2.216), liquide (cf. équation 2.217), biofilm (cf. équation 2.218) et solide (cf. équation 2.219).

$$\frac{\partial \epsilon (1 - S) \rho_\gamma}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{V}_\gamma) = \sum_{i \in \gamma} (\dot{m}_{\gamma\lambda i} + \dot{m}_{\gamma\beta i}) \quad (2.216)$$

$$\frac{\partial \epsilon S \rho_\lambda}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{V}_\lambda) = \sum_{i \in \lambda} (-\dot{m}_{\gamma\lambda i} + \dot{m}_{\lambda\beta i}) \quad (2.217)$$

$$\frac{\partial \epsilon_\beta \rho_\beta}{\partial t} = \sum_{i \in \beta} (-\dot{m}_{\gamma\beta i} - \dot{m}_{\lambda\beta i} - \dot{m}_{\sigma\beta i} + \epsilon_\beta R_{\beta i}) \quad (2.218)$$

$$\frac{\partial \epsilon_\sigma \rho_\sigma}{\partial t} = \sum_{i \in \sigma} (\dot{m}_{\sigma\beta i}) \quad (2.219)$$

Pression capillaire. Dans les milieux poreux, les écoulements conjoints de gaz et de liquides sont fortement liés. En effet, la présence des pores engendre la création d'interfaces courbes entre les phases liquide et gaz. La tension interfaciale qui agit pour maintenir cette courbure engendre une légère différence de pression sur l'interface entre les phases liquides et gazeuses. On conçoit que cette différence microscopique peut générer une différence des pressions macroscopiques, que nous appellerons pression capillaire. Dans notre modèle on appellera P_c la pression capillaire dans le milieu définie par la relation 2.220.

$$P_c = P_\gamma - P_\lambda \quad (2.220)$$

La pression capillaire est principalement fonction de la saturation S , c'est à dire de la répartition volumique des phases dans l'espace poral. La courbe $P_c(S)$ est donc caractéristique du milieu poreux étudié. Néanmoins, cette courbe présente un phénomène d'hystérésis puisqu'elle n'est pas identique suivant que l'expérience visant à la caractériser se fait en imbibition (injection du fluide mouillant) ou en drainage (injection du fluide non-mouillant). En première approche nous ne considérerons pas d'hystérésis. Nous verrons dans le Chapitre 3 que pour le milieu poreux formé par les OM, la pression capillaire est difficile à mesurer du fait de la variabilité temporelle et spatiale de la géométrie porale et de la répartition granulométrique. Néanmoins, nous présenterons des résultats de mesure de cette pression capillaire.

Loi des gaz parfaits. Les fractions molaires des différentes espèces composant la phase gaz sont relativement faibles. La température du système ainsi que sa pression sont également relativement faibles. En première approche, nous supposons donc que l'on peut considérer que le mélange gazeux que nous considérons est un gaz parfait. La loi d'état des gaz parfait nous permet donc de relier la masse volumique ρ_γ du gaz aux variables du système \mathcal{T} , P_γ et $\Omega_{\gamma i}$ via la relation 2.221.

$$\rho_\gamma = \frac{P_\gamma}{RT \sum_{i \in \gamma} \frac{\Omega_{\gamma i}}{M_i}} \quad (2.221)$$

Cette expression sera ensuite introduite dans les équations concernant la conservation des espèces gazeuses.

Hypothèses concernant le biofilm. Comme nous l'avons vu précédemment, le biofilm est un milieu complexe dont la structure et les propriétés intrinsèques sont encore peu connues. En particulier, nous avons pu voir dans le Chapitre 2 au paragraphe 2.2.1 que les propriétés effectives de diffusion dans les biofilms sont très difficiles à estimer. Cette estimation est rendue encore plus difficile lorsque la structure du biofilm n'est pas homogène. Or la plupart des expériences de visualisation de biofilms mettent en évidence des structures très hétérogènes, avec par exemple la formation de "tunnels" au sein du biofilm, qui représentent des zones "percolantes" qui permettent aux fluides environnant d'y être transportés. Néanmoins, compte tenu de la faible fraction volumique des biofilms dans les milieux poreux que nous considérons, nous supposons que les équations 2.162, 2.169, 2.182 et 2.218 peuvent être simplifiées et remplacées respectivement par les équations 2.222, 2.223, 2.224 et 2.225.

$$\forall i \in \gamma, \epsilon_\beta R_{\beta i} = \dot{m}_{\gamma \beta i} + \dot{m}_{\lambda \beta i} \quad (2.222)$$

$$\forall b \in \sigma, \epsilon_\beta R_{\beta b} = \dot{m}_{\sigma \beta b} \quad (2.223)$$

$$\epsilon_\beta R_{\beta H_2O} = -\dot{m}_{\beta \gamma H_2O} - \dot{m}_{\beta \lambda H_2O} - \dot{m}_{\beta \sigma H_2O} \approx -\dot{m}_{\beta \sigma H_2O} \quad (2.224)$$

$$\sum_{i \in \beta} \epsilon_\beta R_{\beta i} = \sum_{i \in \beta} (\dot{m}_{\gamma \beta i} + \dot{m}_{\lambda \beta i} + \dot{m}_{\sigma \beta i}) \quad (2.225)$$

Ceci est une première approche qui nous permet de traiter la phase biofilm comme le lieu de l'ensemble des mécanismes biologiques, mais qui nous permet également de simplifier le transport au sein de cette phase qui reste pour le moment peu connu. On considère en particulier que la masse volumique du biofilm ne varie pas au cours du temps et que l'ensemble des réactifs ou des produits intervenant dans les processus de biodégradation sont instantanément transférés vers les autres phases. Les approximations présentées par

les équations 2.222, 2.223, 2.224 et 2.225 sont fortes et devront être reconsidérées lorsque les connaissances sur les biofilms dans les procédés de traitement des déchets en ISD seront plus développées. Le modèle présenté précédemment pourra alors aisément intégrer les données liées au transport de masse au sein des biofilms.

2.4.2 Equations utilisées dans le modèle numérique

Dans ce chapitre, nous avons développé un modèle mathématique décrivant le transport couplé de masse et de chaleur dans les ISD. Le modèle mathématique intègre la conservation de 5 espèces majoritairement gazeuses ainsi que de 4 constituants provenant du substrat solide répartis dans 4 phases. Il intègre également le mouvement des phases gaz et liquide ainsi que l'action des micro-organismes responsables des processus de biodégradation dans le biofilm. Enfin, le modèle mathématique intègre également la conservation de l'énergie du système. Les variables que nous avons introduites pour décrire le système sont au nombre de 13 :

- la pression de la phase gaz P_γ
- la saturation S qui correspond à la fraction massique d'eau liquide
- les fractions massiques de la phase gaz $\Omega_{\gamma i}$ pour $i = N_2, O_2, CH_4, CO_2, H_2O$
- les fractions massiques de la phase solide $\Omega_{\gamma b}$ pour $b = \text{rapidement biodegradable, lentement biodegradable, tres lentement biodegradable, inerte, } H_2O$
- la température \mathcal{T}

A chacune de ces variables, nous associons une équation de façon à obtenir un système de 13 équations. L'ensemble de ces équations sont présentées ci-après et forment le système d'équations que nous cherchons à résoudre.

Equation pour la pression P_γ . L'équation que nous utilisons pour décrire l'évolution de la pression dans la phase gaz est obtenue en sommant les deux équations 2.216 et 2.217 qui décrivent la continuité des phases gaz et liquide. Dans ces équations, les vitesses de filtration \underline{V}_γ et \underline{V}_λ sont évaluées à l'aide des lois de Darcy généralisées introduites par les équations 2.76 2.77. La pression de la phase liquide est reliée à la phase gaz via la pression capillaire définie par la relation 2.220 et les termes de transfert vers le biofilm sont reliés à la phase biofilm par les termes réactionnels. On obtient donc la relation 2.226.

$$\begin{aligned}
& (\rho_\lambda - \rho_\gamma) \epsilon \frac{\partial S}{\partial t} + \epsilon (1 - S) \frac{\partial \rho_\gamma}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_\gamma \left(-\frac{1}{\eta_\gamma} \underline{k}_\gamma \cdot (\nabla P_\gamma - \rho_\gamma \underline{g}) \right) \right) \\
& + \nabla \cdot \left(\rho_\lambda \left(-\frac{1}{\eta_\lambda} \underline{k}_\lambda \cdot \left(\nabla P_\gamma - \frac{\partial P_c}{\partial S} \nabla S - \frac{\partial P_c}{\partial T} \nabla T - \rho_\lambda \underline{g} \right) \right) \right) \\
& = \epsilon_\beta \sum_i R_{\beta i}
\end{aligned} \tag{2.226}$$

Equation pour la saturation S . Pour décrire l'évolution de la saturation en phase liquide S , nous utilisons l'équation de continuité de la phase liquide 2.217, dans laquelle nous évaluons la vitesse de filtration \underline{V}_λ grâce à la relation 2.77. Tout comme dans l'équation 2.226, nous relient la pression de la phase liquide à la pression gaz via la pression capillaire. Nous considérons que les seuls transferts possibles d'eau sont des transferts de la phase liquide vers la phase gaz (ou inversement) via un processus d'évaporation ou bien un transfert d'eau liquide vers la phase solide via un processus d'absorption capillaire. L'équation qui nous permet de décrire l'évolution du champ de saturation S est donc la suivante :

$$\begin{aligned} & \rho_\lambda \epsilon \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_\lambda \left(-\frac{1}{\eta_\lambda} k_\lambda \cdot \left(\nabla P_\gamma - \frac{\partial P_c}{\partial S} \nabla S - \frac{\partial P_c}{\partial T} \nabla T - \rho_\lambda \underline{g} \right) \right) \right) \\ & = \dot{m}_{\lambda\gamma H_2O} + \dot{m}_{\lambda\sigma H_2O} \end{aligned} \quad (2.227)$$

Dans un premier temps les processus d'absorption de l'eau liquide vers la phase solide seront négligés. En revanche, les transferts d'eau liquide par vaporisation vers la phase gaz seront évalués à l'aide de l'équation de conservation de l'eau dans la phase gaz (cf. 2.180). L'expression de ce terme de transfert sera donc évaluée à l'aide de la relation 2.228.

$$\begin{aligned} \dot{m}_{\lambda\gamma H_2O} & = -\frac{\partial \epsilon_\gamma \rho_\gamma \Omega_{\gamma H_2O}}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\rho_\gamma \underline{V}_\gamma \Omega_{\gamma H_2O} \right) \\ & + \nabla \cdot \left[\sum_{k=1}^{k=N-1} \left(\epsilon_\gamma \rho_\gamma \underline{D}_{\gamma H_2O k}^* \cdot \nabla \Omega_{\gamma k} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.228)$$

Equation pour les fractions massiques des constituants gazeux $\Omega_{\gamma i}$. Nous considérons plusieurs catégories de constituants gazeux. Pour les constituants, O_2 , CH_4 , CO_2 , nous utilisons les équations 2.161 et 2.162 que nous simplifions à l'aide des hypothèses que nous avons formulées précédemment pour obtenir la relation 2.229.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial [(\epsilon(1-S)\rho_\gamma + \epsilon S \rho_\lambda \Gamma_i) \Omega_{\gamma i}]}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\left(\rho_\gamma \underline{V}_\gamma + \rho_\lambda \underline{V}_\lambda \Gamma_i \right) \Omega_{\gamma i} \right] \\ & = \nabla \cdot \left[\sum_{k=1}^{k=N-1} \left(\epsilon_\gamma \rho_\gamma \underline{D}_{\gamma i k}^* \cdot \nabla \Omega_{\gamma k} \right) \right] + \nabla \cdot \left[\epsilon_\lambda \rho_\lambda \Gamma_i \underline{D}_{\lambda i}^* \cdot \nabla \Omega_{\gamma i} \right] + \epsilon_\beta R_{\beta i} \end{aligned} \quad (2.229)$$

Comme nous l'avons exposé dans le Chapitre 2 au paragraphe 2.3.2, nous supposons que la phase gaz est en équilibre local avec la phase liquide et qu'aucun mécanisme de séchage n'intervient dans les conditions standards d'exploitation. Par conséquent, nous supposons la présence permanente de la phase liquide et la concentration en vapeur d'eau dans la phase gaz en contact est donc imposée par les conditions locales de température et de

pression. La fraction massique en eau vapeur sera donc calculée grâce à la relation 2.230.

$$\Omega_{\gamma H_2O} = M_{H_2O} \frac{P_{sat}}{P_{\gamma}} \sum_{i \in \gamma} \frac{\Omega_{\gamma i}}{M_i} \quad (2.230)$$

Enfin, comme nous considérons que le diazote est le solvant pour la phase gaz, la fraction massique de N_2 dans le gaz sera calculée à l'aide de l'expression 2.231.

$$\Omega_{\gamma N_2} = 1 - (\Omega_{\gamma O_2} + \Omega_{\gamma CO_2} + \Omega_{\gamma CH_4} + \Omega_{\gamma H_2O}) \quad (2.231)$$

Equation pour les fractions massiques des constituants gazeux $\Omega_{\sigma i}$. Pour l'ensemble des éléments présents dans le solide excepté la phase liquide, nous utilisons les équations de conservation décrites de façon générique par les relations 2.168 et 2.169. La combinaison de ces deux relations ainsi que les hypothèses formulées quant au traitement du biofilm nous permettent d'obtenir la relation 2.232

$$\forall i \in \sigma, \frac{\partial \epsilon_{\sigma} \rho_{\sigma} \Omega_{\sigma b}}{\partial t} = \epsilon_{\beta} R_{\beta b} \quad (2.232)$$

En revanche, pour l'eau absorbée dans la matrice solide, nous considérons dans une première approche que celle-ci n'intervient pas dans les transferts, et que sa fraction massique ne varie pas. On considérera donc la relation suivante : 2.232

$$\frac{\partial \epsilon_{\sigma} \rho_{\sigma} \Omega_{\sigma H_2O}}{\partial t} = 0 \quad (2.233)$$

Equation pour la température \mathcal{T} . L'équation que nous utilisons pour décrire l'évolution de la température des ISD est l'équation 2.203.

Chapitre 3

Evaluation des propriétés du matériau

Dans le Chapitre 2, nous avons développé le modèle mathématique que nous utilisons pour décrire les phénomènes de transport de masse et de chaleur au sein des ISD. Le modèle intègre deux phases mobiles (liquide et gaz), une phase biofilm qui est le lieu de l'ensemble des processus de biodégradation ainsi qu'une phase solide formée par la matrice déchet. Le développement de ce modèle a permis d'obtenir un système d'équation décrivant l'évolution physico-chimique du système. Ce système d'équations fait apparaître un grand nombre de paramètres qu'il est nécessaire d'évaluer si l'on veut pouvoir simuler correctement le comportement des ISD. L'objectif de ce chapitre est donc de présenter l'ensemble des paramètres que nous avons introduits dans le modèle ainsi que de présenter les méthodes d'évaluation de ces propriétés.

Nous tenons à préciser que les notations introduites dans ce chapitre ne sont pas insérées dans la nomenclature puisqu'elles n'ont qu'une signification interne au chapitre. En revanche, l'ensemble des termes introduits dans le Chapitre 2 et rassemblés dans la nomenclature conservent leurs significations.

3.1 Bilan sur les propriétés à évaluer

Les paramètres introduits lors du développement du modèle sont nombreux. Nous les présentons ici en les divisant en différentes catégories suivant l'équation dans laquelle ils interviennent.

3.1.1 Paramètres décrivant l'écoulement dans le milieu poreux

Pour décrire la conservation de masse des deux phases mobiles à l'échelle de Darcy, nous avons introduit les équations 2.227 et 2.226. Ces équations font apparaître plusieurs paramètres dont l'évaluation est primordiale pour décrire correctement l'écoulement des

deux phases mobiles au sein du massif. Ces paramètres sont regroupés dans le Tableau 3.1.

TAB. 3.1 – Paramètres relatifs aux écoulements

Paramètres	Symbole	Provenance/signification	Unité
Tenseur de perméabilité au gaz	\underline{k}_γ souvent décomposé comme le présente l'équation 2.80	Loi de Darcy généralisée pour la phase gaz	m ²
Tenseur de perméabilité au liquide	\underline{k}_λ souvent décomposé comme le présente l'équation 2.81	Loi de Darcy généralisée pour la phase liquide	m ²
Porosité du milieu poreux	ϵ	Ensemble des équations moyennes	%
Viscosité de la phase gaz	η_γ	Loi de Darcy généralisée pour la phase gaz	kg/m/s
Viscosité de la phase liquide	η_λ	Loi de Darcy généralisée pour la phase liquide	kg/m/s

3.1.2 Propriétés de transport

Le transport des constituants chimiques dans un ISD peut se faire via plusieurs mécanismes. Le premier mode de transport des espèces chimiques est le transport convectif. C'est le transport lié au mouvement des phases mobiles. Ce type de transport est directement proportionnel à la vitesse de la phase mobile considérée. Les paramètres qui régissent le transport convectif ont été présentés dans le Tableau 3.1. L'autre mode de transport des constituants chimiques est le transport par diffusion/dispersion. L'ensemble des paramètres régissant ce mode de transport est présenté dans le Tableau 3.2.

TAB. 3.2 – Paramètres relatifs au transport par diffusion/dispersion

Paramètres	Symbole	Provenance/signification	Unité
Masse volumique de la phase gaz	ρ_γ	Conservation de masse de la phase gaz	kg/m ³
Masse volumique de la phase liquide	ρ_λ	Conservation de masse de la phase liquide	kg/m ³
Éléments de la matrice de diffusion de Maxwell-Stefan	$\langle D_{\gamma ik} \rangle^\gamma$	Conservation de masse du constituant i dans la phase gaz	m ² /s
Coefficient de diffusion du constituant i dans la phase liquide	$D_{\lambda i}$	Conservation de masse du constituant i dans la phase liquide	m ² /s

Paramètres	Symbole	Provenance/signification	Unité
Tortuosité à la phase gaz	τ_γ	Conservation de masse du constituant i dans la phase gaz	%
Tortuosité à la phase liquide	τ_λ	Conservation de masse du constituant i dans la phase liquide	%
Coefficient de dispersion longitudinale pour la phase gaz	$\alpha_{L\gamma}$	Conservation de masse du constituant i dans la phase gaz	1/m
Coefficient de dispersion transversale pour la phase gaz	$\alpha_{T\gamma}$	Conservation de masse du constituant i dans la phase gaz	1/m
Coefficient de dispersion longitudinale pour la phase liquide	$\alpha_{L\lambda}$	Conservation de masse du constituant i dans la phase liquide	1/m
Coefficient de dispersion transversale pour la phase liquide	$\alpha_{T\lambda}$	Conservation de masse du constituant i dans la phase liquide	1/m
Coefficient d'équilibre entre phases gaz et liquide pour le constituant i	Γ_i	Conservation de masse du constituant i dans la phase liquide	%
Masse molaire du constituant i	M_i	Conservation de masse du constituant i	kg/mol
Pression de vapeur saturante de l'eau	P_{sat}	Equilibre local pour l'eau entre la phase liquide et la phase gaz	Pa

3.1.3 Paramètres du bilan d'énergie

Dans l'équation 2.203 que nous avons développé pour décrire la conservation de l'énergie totale du système dans le cadre de l'hypothèse d'équilibre thermique local, plusieurs paramètres effectifs de transport de l'énergie apparaissent. Le Tableau 3.3 résume les éléments dont nous avons besoin pour évaluer ces paramètres.

TAB. 3.3 – Paramètres relatifs au transport de chaleur

Paramètres	Symbole	Provenance/signification	Unité
Capacité calorifique massique du constituant i dans la phase θ	$C_{P\theta i}$	Conservation de l'énergie du constituant i dans la phase θ	J/kg/K

Paramètres	Symbole	Provenance/signification	Unité
Conductivité thermique de la phase θ	Λ_θ	Conservation de l'énergie du système	J/s/m/K

Nous verrons par la suite que, dans un premier temps, nous négligeons les termes de dispersion d'énergie dans les phases mobiles.

3.1.4 Biofilm/Biodégradation

Nous avons vu dans le Chapitre 2 que nous avons simplifié le modèle de biofilm. Ces simplifications impliquent que les seuls termes que nous devons évaluer dans notre modèle sont les termes macroscopiques de consommation de substrat et d'oxygène et de production d'eau, de méthane et de dioxyde de carbone ainsi que le terme de production d'énergie. Dans le cas où l'on souhaiterait revenir vers un modèle de biofilm plus complet, il serait également nécessaire d'évaluer les paramètres de transport de masse et de chaleur pour la phase biofilm. Le Tableau 3.4 présente l'ensemble des termes puits/sources que nous devons évaluer.

TAB. 3.4 – Paramètres relatifs aux termes réactifs

Paramètres	Symbole	Provenance/signification	Unité
Production ou consommation du constituant i dans la phase biofilm	R_{β_i}	Conservation de masse du constituant i dans la phase biofilm	kg/m ³ /s
Production ou consommation d'énergie	Ψ_β	Conservation de l'énergie du système	J/m ³ /s

3.1.5 Conclusion

Le modèle que nous avons adopté pour décrire les écoulements couplés de masse et de chaleur nous impose d'évaluer un nombre de paramètres relativement important. Compte tenu du fait que nous souhaitons modéliser des dispositifs de type bioréacteurs dans lesquels la réinjection de lixiviats est utilisée pour améliorer les processus de biodégradation et de production de biogaz, une attention particulière sera apportée aux propriétés relatives aux écoulements de gaz et de liquide et aux paramètres relatifs aux termes réactifs.

3.2 Ecoulements

Dans les ISD, les écoulements de gaz et de lixiviats font l'objet d'un suivi permanent puisque les normes en vigueur imposent aux exploitants de capter et de traiter le biogaz et les lixiviats. Le suivi, la prédiction ainsi que la compréhension des phénomènes qui gèrent ces écoulements conjoints de gaz et de liquide dans le milieu poreux formé par les déchets ménagers sont même primordiaux dans le cas des installations de type bioréacteurs, puisque le dimensionnement de ce procédé y est lié. Comme nous l'avons vu précédemment, les paramètres qui gèrent les écoulement diphasiques dans le massif de déchet sont des paramètres macroscopiques tels que les tenseurs de perméabilité, la porosité, la pression capillaire. La seule approche viable pour déterminer les valeurs de ces paramètres consiste à essayer de les mesurer expérimentalement. Néanmoins, la matrice solide que constitue le déchet est fortement hétérogène. De ce fait, la validité des mesures expérimentales pourra fortement dépendre de la dimension du dispositif utilisé. En effet, dans le cas de matériaux hétérogènes, il est aisé d'imaginer que des mesures sur des échantillons de quelques centimètres de taille caractéristique pourront donner des résultats différents par rapport à des mesures sur site réel. De plus, la composition des déchets peut fortement varier d'un site à l'autre. Il est donc assez difficile d'extrapoler les résultats obtenus expérimentalement pour l'ensemble des ISD. Néanmoins, les essais expérimentaux pour déterminer ces paramètres étant relativement rares, nous avons choisi de les décrire de la façon la plus exhaustive possible.

3.2.1 Pression capillaire

Dans le modèle présenté dans le Chapitre 2, nous avons relié la pression des deux phases mobiles via un terme de pression capillaire. Nous ne considérons pas de phénomène d'hystérésis, et la pression capillaire est définie par la relation 2.220. Nous considérerons donc que la courbe $P_c(S)$ qui représente l'évolution de la pression capillaire en fonction de la saturation en lixiviats S est caractéristique du matériau poreux que nous considérons. La courbe de pression capillaire $P_c(S)$ est un élément que l'on trouve dans bon nombre d'études concernant la modélisation des ISD. Néanmoins, dans la plupart de ces modèles, la pression capillaire est soit considérée nulle (Oldenburg et al., 2002), soit évaluée avec des modèles théoriques tirés de travaux concernant les sols (Vigneault et al., 2004; Kindlein et al., 2006). Les modèles les plus connus sont ceux de Van Genuchten (Van Genuchten, 1980) et de Brooks et Corey (Brooks and Corey, 1966). Ces deux modèles permettent de relier la pression capillaire à la saturation en liquide via des lois "puissance".

$$P_c = S e^{1/\theta} \quad (3.1)$$

$$P_c = \frac{1}{\alpha} [Se^{-1/m}]^{(1-m)} \quad (3.2)$$

Dans ces équations, Se représente la saturation efficace en liquide définie par la relation 3.3, alors que ϑ , α ou m sont des paramètres des modèles.

$$Se = \frac{S - S_R}{S_m - S_R} \quad (3.3)$$

Dans l'expression 3.3, S_R représente la saturation irréductible en lixiviat et $1 - S_m$ représente la saturation irréductible en gaz. Il convient néanmoins ici de noter que la signification de ces saturations est difficile à introduire et que la plupart du temps, elles ne représentent qu'une vision conceptuelle et ne peuvent pas être précisément mesurées.

L'utilisation des modèles de type Van Genuchten ou Brooks et Corey suppose donc que l'on dispose de mesures expérimentales qui permettent par identification de déterminer les valeurs des paramètres introduits par ces modèles. Peu de travaux expérimentaux sont présentés dans la littérature. Néanmoins, dans leurs thèses Lanini (1998) et Aran (2001) (cf. Figure 3.1) proposent un système de mesure simple des courbes de pression capillaire en fonction de la teneur en eau ($P_c(S)$) sur des échantillons de déchet de faibles volumes (environ 50 cm³).

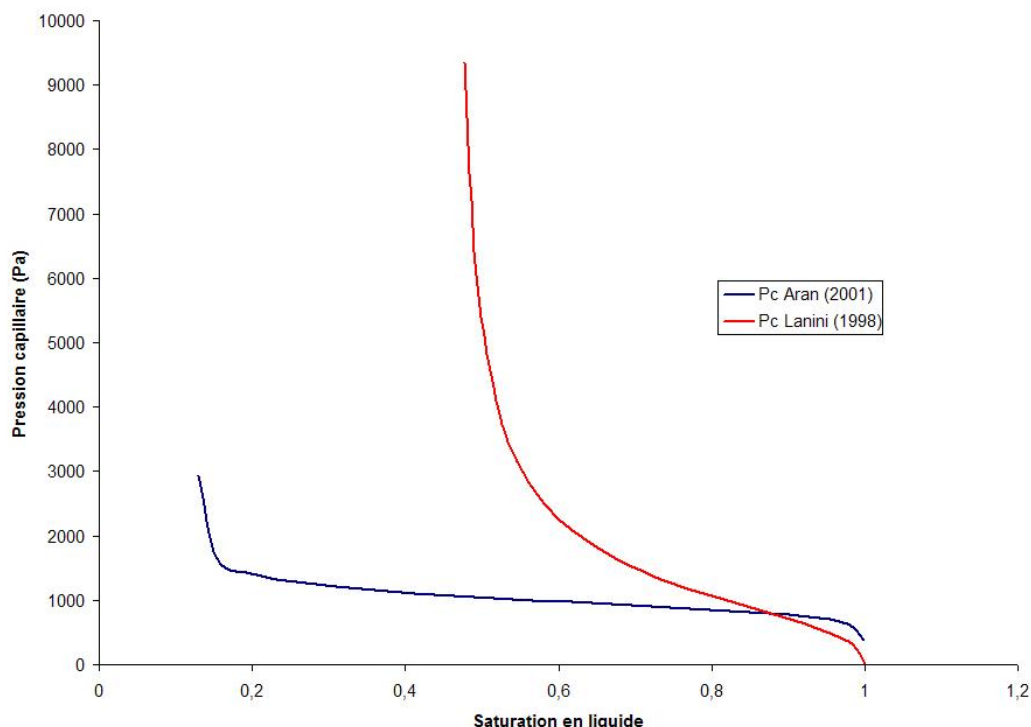


FIG. 3.1 – Pression capillaire d'échantillons de déchets mesurés par Lanini (1998) et Aran (2001)

Ces expériences sont des expériences de drainage sous conditions de pression de la phase gaz imposée à une extrémité de l'échantillon et de pression liquide constante à l'autre extrémité de l'échantillon. La pression de la phase gaz est augmentée par paliers, puis une fois l'équilibre atteint, la mesure de la quantité d'eau drainée à chaque palier de pression donne accès à la teneur en eau pondérale du déchet à chaque état d'équilibre et donc à la courbe $Pc(S)$. Les expériences réalisées par Lanini (1998) et Aran (2001) permettent d'obtenir les courbes présentées sur la Figure 3.1.

Les pressions capillaires présentées sur la Figure 3.1 sont mesurées sur des échantillons de déchets non compactés. Par conséquent, la porosité entre les deux essais varie grandement (65% dans le cas de Lanini (1998) et 89% dans le cas de Aran (2001)). Il est donc difficile de comparer ces résultats.

Compte tenu de la difficulté que nous avons rencontré pour obtenir des mesures de pression capillaire, nous avons engagé un programme expérimental visant à mesurer la pression capillaire de divers échantillons de déchets sous contrainte. Ce programme expérimental a été développé au LIRIGM/LTHE à Grenoble en collaboration avec l'IMFT. Les résultats obtenus lors de ce programme expérimental sont regroupés dans le rapport d'avancement de Stoltz (2007).

L'un des volets de ce programme expérimental consiste à mesurer l'évolution de la pression capillaire d'échantillons de déchets. Le déchet utilisé est un déchet provenant de l'ISD bioréacteur de La Vergne et récupéré par excavation lors de la réalisation de forages. La composition détaillée de ce déchet est présentée dans Stoltz (2007). Le dispositif expérimental est composé d'un cylindre en inox dans lequel on dispose l'échantillon au dessus d'une plaque céramique (cf. Figure 3.2).

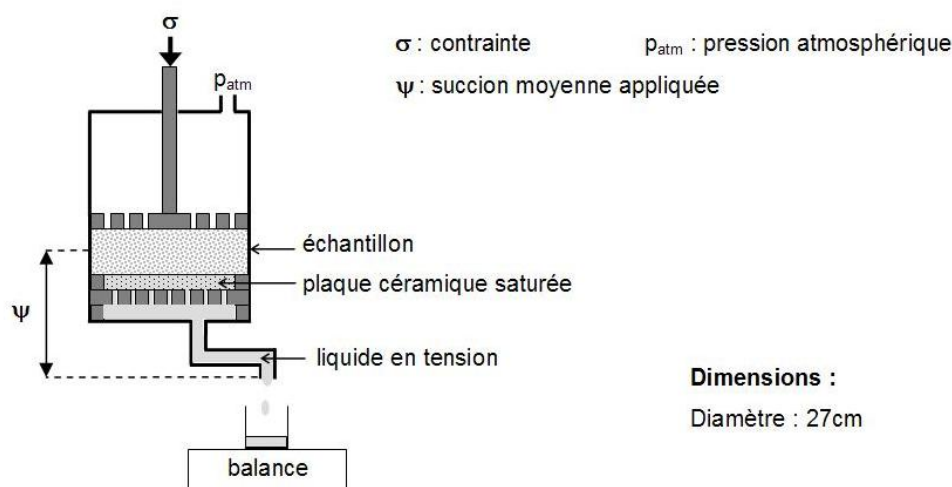


FIG. 3.2 – Dispositif de mesure de pression capillaire

La plaque céramique est saturée en eau et reste saturée même pour des pressions élevées. Le déchet est, quant à lui, partiellement saturé et un tuyau relié au bas de la cellule communique avec une éprouvette déplaçable verticalement afin de permettre d'appliquer une succion variable au liquide présent dans l'échantillon. La partie supérieure du déchet est, quant à elle, en contact avec l'air ambiant. L'application de différents paliers de succion à l'échantillon et la pesée de la masse d'eau recueillie pour chaque palier permet d'obtenir la courbe de pression capillaire du matériau.

Les mesures de pression capillaire sur le déchet de La Vergne sont réalisés sous différentes contraintes. La Figure 3.3 présente les résultats obtenus.

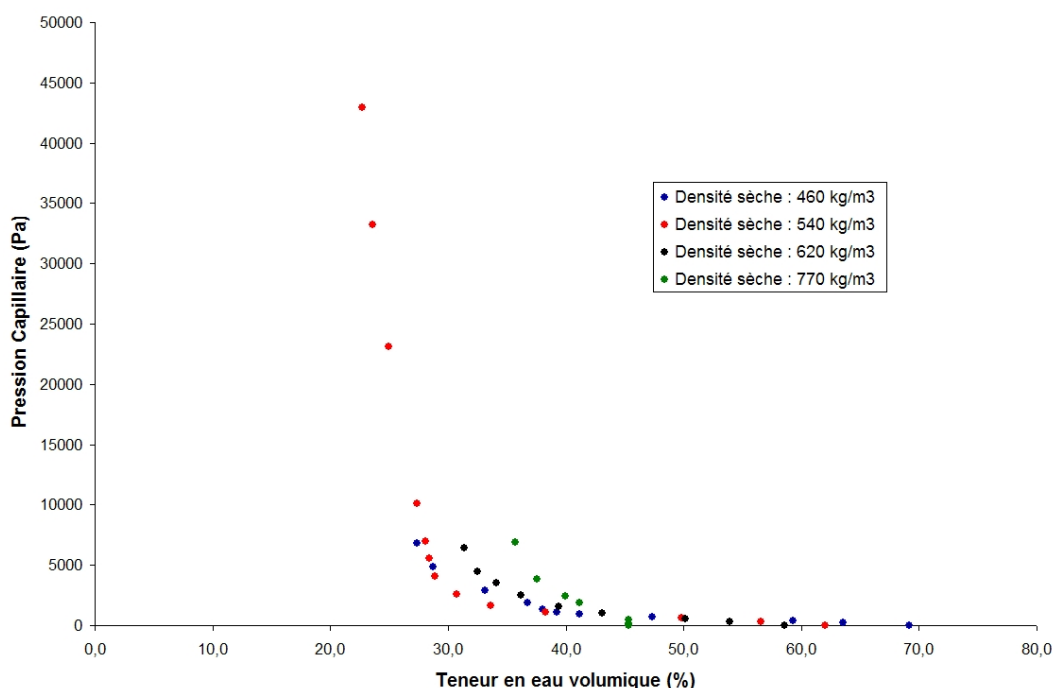


FIG. 3.3 – Résultats des mesures de pression capillaire réalisées par Stoltz (2007)

Nous constatons que les résultats pour les échantillons faiblement comprimés sont similaires à ceux présentés par Lanini (1998) ou Aran (2001), c'est à dire avec une frange capillaire très peu marquée. En revanche, plus on comprime le matériau, plus la porosité du matériau (teneur en eau à saturation) diminue.

Si nous traçons l'évolution de la pression capillaire en terme de saturation, nous constatons que le comportement capillaire du milieu évolue fortement avec la compression (cf. Figure 3.4). On peut constater en particulier que la saturation irréductible en lixiviat semble augmenter avec la contrainte. Ceci peut s'expliquer par le fait que lorsque l'on comprime le déchet, on diminue la taille des pores. Or la force de succion nécessaire pour mobiliser le lixiviat piégé dans les petits pores est plus importante que la succion nécessaire pour mobiliser le lixiviat présent dans les plus gros pores. Néanmoins, la gamme de

succion que nous avons imposée aux échantillons est relativement restreinte (7000 kPa) et il aurait fallu imposer des succions plus importantes à chaque échantillon (comme cela a été réalisé pour l'échantillon de masse volumique 540 kg/m^3) afin de confirmer ces tendances.

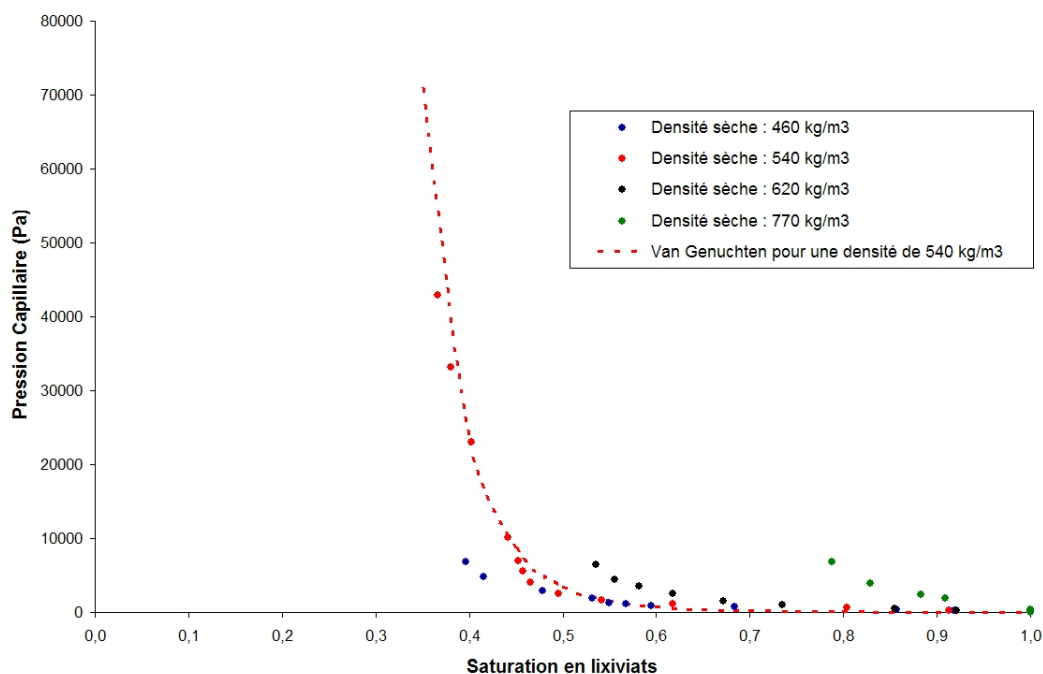


FIG. 3.4 – Résultats des mesures de pression capillaire en fonction de la saturation

Compte tenu de la faible quantité de données dont nous disposons, il est difficile de prendre en compte l'évolution de la pression capillaire avec la profondeur (contrainte). Nous prendrons donc comme référence l'évolution de la pression capillaire de l'échantillon de masse volumique 540 kg/m^3 . Pour modéliser, l'évolution de la pression capillaire en fonction de la saturation du milieu en lixiviat, nous utiliserons le modèle de Van Genuchten (1980) présenté par l'équation 3.1 avec les paramètres listés dans le Tableau 3.5.

TAB. 3.5 – Paramètres utilisés pour modéliser la courbe de pression capillaire avec le modèle de Van Genuchten (1980)

Paramètres de Van Genuchten	Valeur
S_m	1
S_R	0,2
α	$0,158 \cdot 10^{-1}$
m	0,196

Il convient ici de noter que la répétition de ce type de tests sur différents échantillons de déchet pourrait permettre de développer une méthode d'estimation complète de la

pression capillaire des déchets et d'intégrer son évolution en fonction de la profondeur du massif.

3.2.2 Porosité du déchet

La porosité du déchet est un élément clé dans la description des écoulements de liquide et de gaz au sein des ISD. En effet, la porosité quantifie le volume occupé par les vides au sein du milieu poreux. C'est la connexion de ces vides qui permet aux phases mobiles de se déplacer au sein du massif de déchet. La composition complexe des déchets ménagers ne permet pas de définir simplement la porosité des déchets. En effet, comme le présente Olivier (2003) dans sa thèse, le matériau poreux formé par les OM présente plusieurs formes de vides et la porosité ne peut se définir aussi simplement que pour un sol. Dans la littérature, de nombreuses valeurs de porosité sont utilisées sans que l'on sache précisément comment elle est définie. Par exemple, dans leurs travaux de simulation numérique du comportement des ISD, Vigneault et al. (2004) utilisent une porosité de 40% alors que Kindlein et al. (2006) évaluent cette même porosité à 60%. Il y a donc une grande disparité des valeurs utilisées. Afin de bien comprendre ce que représente la porosité du déchet, nous reprenons les définitions proposées par Olivier (2003). Nous introduisons trois porosités différentes : ϵ_T qui est la porosité totale, ϵ_O qui représente la porosité ouverte et ϵ_E définie comme la porosité efficace ou porosité de drainage (cf. Figure 3.5).

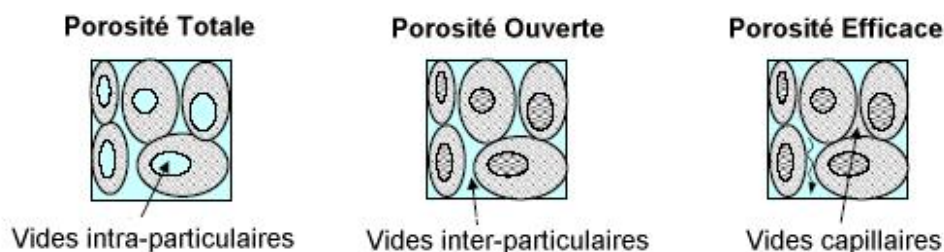


FIG. 3.5 – Définition des différentes porosités introduites par Olivier (2003)

La porosité ϵ telle que nous l'avons introduite dans la Chapitre 2 est définie comme le rapport entre le volume des vides et le volume de l'échantillon de déchet :

$$\epsilon = \epsilon_O = \frac{\mathcal{V} - \mathcal{V}_\sigma}{\mathcal{V}} \quad (3.4)$$

Dans l'expression 3.4, \mathcal{V} représente le volume de l'échantillon et \mathcal{V}_σ le volume de la phase solide.

Malheureusement, la plupart des expériences de laboratoire visant à déterminer la

porosité des OM ne permet pas d'obtenir la valeur de la porosité ouverte ϵ mais la valeur de la porosité efficace ϵ_E . En effet, la méthode expérimentale utilisée pour déterminer la porosité est une succession de phase d'imbibition et de drainage d'un échantillon de déchet placé dans une cellule expérimentale similaire à celle présentée sur la Figure 3.2. L'imbibition du matériau par le dessous de la cuve permet de saturer le déchet en eau. Malheureusement, dans la plupart des cas, même si l'imbibition est très lente, des poches de gaz peuvent rester piégées par capillarité dans le milieu. Le déchet ne doit pas être séché avant cette expérience, afin de conserver l'eau présente dans les vides intra-particulaires. Ensuite, le massif est drainé sous l'effet de la gravité et le volume d'eau drainé est mesuré. La différence entre le volume d'eau injecté lors de l'imbibition et le volume d'eau drainé permet d'obtenir la porosité efficace du déchet ϵ_O . C'est ce type de résultats que présentent Beaven and Powrie (1995); Jang et al. (2002) ou Olivier (2003).

Les travaux expérimentaux présentés dans le paragraphe précédent et visant à déterminer expérimentalement la pression capillaire des OM nous permettent également d'évaluer la porosité de drainage. En effet, les teneurs en eau volumiques obtenues pour les pressions capillaires nulles correspondent en réalité à la porosité efficace. Les résultats de différents travaux concernant la détermination de la porosité des OM sont présentés dans le Tableau 3.6.

TAB. 3.6 – Valeurs de porosité efficace

Auteur	Protocole expérimental	Valeurs obtenues
Beaven and Powrie (1995)	Cellule de compression de 2 m de diamètre et de 3 m de hauteur dans laquelle on réalise successivement une étape d'imbibition puis de drainage	de 2% à 35,5% pour une charge moyenne variant entre 40 et 600 kPa
Jang et al. (2002)	Colonne de laboratoire de 7,2 cm de diamètre et de 12 cm de hauteur dans laquelle on réalise successivement une étape d'imbibition puis de drainage	de 28% à 51 % pour des taux de compaction compris entre 80% et 120%
Olivier (2003)	Cellule de compression de section carrée et 1 m de côté pour 1 m de hauteur dans laquelle on réalise successivement une étape d'imbibition puis de drainage	de 0,3% à 0,8% pour une charge de 130 kPa
Stoltz (2007)	Oedomètre de section circulaire de diamètre 27 cm dans lequel on réalise successivement une étape d'imbibition puis de drainage	de 45% à 69% pour une densité solide en base sèche variant de 460 kg/m ³ à 770 kg/m ³

Dans le Tableau 3.6 nous pouvons d'abord remarquer que les valeurs de porosité obtenue par Olivier (2003) ne semblent pas réalistes. Ensuite, il convient de préciser que les très faibles porosités obtenues par Beaven and Powrie (1995) correspondent à des essais sous forte contrainte (600kPa) sur un matériau broyé finement (maille inférieure au cm). La diminution de la taille caractéristique des éléments solides par broyage entraîne donc une forte diminution de la porosité efficace du déchet. Au contraire les porosités efficaces obtenues par Jang et al. (2002) et Stoltz (2007) sont relativement élevées, mais présente un comportement générale concordant avec les résultats de Beaven and Powrie (1995) puisque la porosité diminue avec la contrainte imposée à l'échantillon. En terme de comportement avec l'évolution de la contrainte, il est difficile de comparer les résultats présentés dans le Tableau 3.6 puisque les données sur la contrainte ne sont pas exploitables si l'on ne connaît pas les propriétés mécaniques effectives du milieu étudié. La disparité des résultats présentés dans le Tableau 3.6 ne permet pas de déterminer quelle valeur de porosité doit être utilisée dans les codes de calcul et quelle corrélation nous devons utiliser pour prendre en compte l'évolution de la porosité avec la profondeur du massif.

Afin de déterminer avec plus de précision la porosité ouverte des massifs de déchets ménagers, d'autres dispositifs expérimentaux doivent être imaginés. On pourra notamment tester les dispositifs de mesure de porosité en utilisant une phase gaz plutôt qu'une phase liquide. En effet, en injectant de faibles quantités d'azote par exemple dans un échantillon de déchet de volume fixé, il est possible via des mesures de pression de déterminer la porosité de l'échantillon de déchet en utilisant l'équation d'état de la phase gaz (loi des gaz parfaits). C'est le principe des pycnomètres à gaz. L'intérêt de l'utilisation d'une phase gaz est qu'elle permet de pénétrer les pores les plus fins. Si l'on imagine que l'échantillon de déchet est mis en place à sa teneur en eau constitutive (la porosité intra-particulaire est mobilisée par la phase liquide), la détermination de la porosité par la méthode du pycnomètre à gaz permet directement de déterminer la porosité ouverte.

Dans un premier temps, nous considérerons que le déchet présente une porosité de 50%, comme le suggère les mesures réalisées par Stoltz (2007). Nous pourrions considérer ensuite une évolution de la porosité avec la profondeur comme celle que propose Beaven and Powrie (1995).

Enfin, dans le Chapitre 4 nous présenterons comment nous prenons en compte l'action des vides intra-cellulaires sur les écoulements de lixiviats dans les ISD en introduisant un modèle à double porosité.

3.2.3 Perméabilité

Comme nous l'avons décrit précédemment, nous utilisons la loi de Darcy généralisée pour décrire les écoulements des phases gaz et liquide (cf. équations 2.78 et 2.79). Ces deux équations font apparaître les tenseurs de perméabilité à la phase gaz \underline{k}_γ et à la phase liquide \underline{k}_λ . Nous devons donc évaluer les valeurs des différentes composantes des deux tenseurs de perméabilité introduits. Plusieurs approches sont possibles. La première consiste à garder la formulation tensorielle telle quelle et à déterminer expérimentalement l'ensemble des composantes des tenseurs de perméabilité. La difficulté de ce type d'approche réside dans le fait que la valeur des composantes de ces tenseurs est fortement dépendante de la saturation du milieu en chacune des phases. La deuxième approche consiste à décomposer ces tenseurs de perméabilité en un produit tensoriel d'un tenseur de perméabilité dit "intrinsèque" au milieu au sein duquel les écoulements ont lieu et d'un coefficient de perméabilité "relative" décrivant la spécificité de l'écoulement multiphasique (cf. équations 2.80 et 2.81). Ce type d'approche a été principalement développé dans le secteur pétrolier. La validité de ce type de description a été discutée dans le chapitre précédent. Dans notre modèle, nous considérons que la décomposition proposée par les relations 2.80 et 2.81 est adaptée.

Dans les décharges, les déchets sont classiquement compactés par couches successives. Ceci permet de gérer de façon optimale l'arrivée journalière des déchets ménagers sur l'ensemble de la surface de l'alvéole en exploitation. De cette façon, il paraît légitime de considérer que l'entassement des déchets forme des "strates" dont les propriétés physiques sont identiques dans le plan horizontal. Le schéma 3.6 présente cette stratification du matériau.

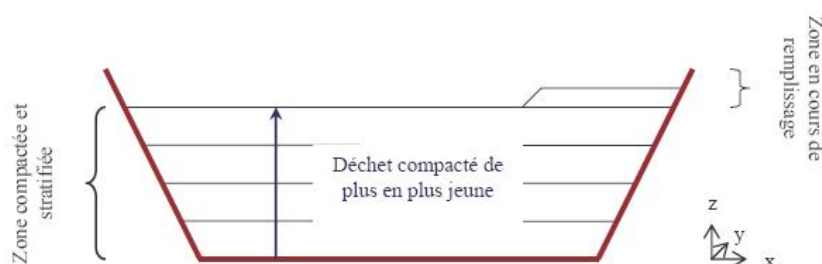


FIG. 3.6 – Stratification des déchets dans les ISD

De cette hypothèse, nous pouvons tout d'abord déduire que les tenseurs de perméabilité sont diagonaux puisque les directions principales d'écoulement sont parallèles aux vecteurs unitaires définissant la base cartésienne. Nous décomposerons donc les tenseurs

de perméabilité de la façon suivante :

$$\underline{k}_{\gamma} = k_{R\gamma} \begin{bmatrix} K_{I\gamma x} & 0 & 0 \\ 0 & K_{I\gamma y} & 0 \\ 0 & 0 & K_{I\gamma z} \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

$$\underline{k}_{\lambda} = k_{R\lambda} \begin{bmatrix} K_{I\lambda x} & 0 & 0 \\ 0 & K_{I\lambda y} & 0 \\ 0 & 0 & K_{I\lambda z} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

De plus, dans le plan horizontal, il n'est pas possible de distinguer une quelconque anisotropie des propriétés physiques suivant les directions x et y . Par conséquent, les deux premiers coefficients du tenseur de perméabilité intrinsèque seront considérés égaux. De plus, par définition, les composantes du tenseur de perméabilité intrinsèque sont considérées indépendantes du fluide considéré. On aura donc :

$$\underline{k}_{\gamma} = k_{R\gamma} \begin{bmatrix} K_{Ix} & 0 & 0 \\ 0 & K_{Ix} & 0 \\ 0 & 0 & K_{Iz} \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

$$\underline{k}_{\lambda} = k_{R\lambda} \begin{bmatrix} K_{Ix} & 0 & 0 \\ 0 & K_{Ix} & 0 \\ 0 & 0 & K_{Iz} \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

Il convient donc, d'une part, d'évaluer les composantes K_{Ix} et K_{Iz} du tenseur de perméabilité intrinsèque ainsi que, d'autre part, la forme des coefficients de perméabilité relative $k_{R\gamma}$ et $k_{R\lambda}$.

3.2.3.1 Tenseur de perméabilité intrinsèque

Lorsque l'on veut étudier les écoulements de fluides dans un milieu poreux, le paramètre essentiel à déterminer est la perméabilité intrinsèque du milieu. Dans le cas de milieux poreux parfaitement isotropes, un seul et unique paramètre de perméabilité intrinsèque doit être déterminé, alors que dans notre cas la stratification du milieu nous impose d'évaluer une perméabilité intrinsèque verticale K_{Ix} et une perméabilité intrinsèque horizontale K_{Iz} . Cependant, l'étude expérimentale des paramètres hydrologiques des matériaux complexes comme les déchets est difficile à mettre en place du fait de l'hétérogénéité à la fois spatiale et temporelle des déchets solides. De plus, historiquement, les ISD sont habituellement considérés par une approche "systémique", et leur description ne fait intervenir qu'une "fonction de transfert" plus ou moins réaliste. Néanmoins, quelques

études récentes concernant la détermination des paramètres de perméabilité intrinsèque des OM permettent d'obtenir un ordre de grandeur de ces paramètres.

On distingue principalement deux types d'approches. Le premier type d'approche consiste à mesurer la perméabilité d'un déchet à l'aide de dispositifs de laboratoire de plus ou moins grande dimension, alors que la deuxième approche consiste à mesurer la perméabilité intrinsèque du déchet sur site. Cette dernière procédure, qui a l'avantage de considérer le système réel, pose néanmoins des problèmes d'interprétation des mesures liés au caractère fortement hétérogène du milieu.

Mesure en laboratoire. Les mesures de perméabilité intrinsèque en laboratoire consistent à prélever un échantillon de déchet, et à le placer dans un contenant de volume fixe (souvent une cuve cylindrique). Une fois le déchet mis en place, on le sature en eau ou en air avant de soumettre l'échantillon à un débit d'eau ou d'air (selon les cas) unidirectionnel Q . On mesure alors la différence de pression entre l'entrée et la sortie de l'échantillon de déchet afin de mesurer la perméabilité. La loi de Darcy monophasique dans le cas unidirectionnel nous donne alors la relation 3.9. La Figure 3.7 présente le principe de ce type de dispositif expérimental.

$$K_{Ix} = \frac{\eta_{\theta} Q \Delta x}{S \Delta P} \text{ pour } \theta = \lambda, \gamma \quad (3.9)$$

Ici Δx représente la dimension de l'échantillon suivant la direction parallèle à l'écoulement de la phase θ , S représente la section de l'échantillon alors que ΔP représente la perte de charge à travers l'échantillon.

Nous introduisons ici la définition de la conductivité hydraulique à la phase θ qui nous sera utile par la suite. La conductivité hydraulique est définie par la relation 3.10.

$$\kappa_{\theta} = \frac{\rho_{\theta} g K_{Ix}}{\eta_{\theta}} \quad (3.10)$$

Les principales études de laboratoire visant à déterminer la perméabilité des déchets sont celles de Beaven and Powrie (1995). Lors de leur campagne expérimentale, ils ont mesuré les perméabilités intrinsèques verticales et horizontales à la phase liquide dans une cellule de compression. Ceci a permis de déterminer une relation empirique entre la compression du massif de déchet et la perméabilité intrinsèque, et, par suite, entre la profondeur du massif et la perméabilité intrinsèque. Ces études ont été complétées ensuite par les travaux de Hudson et al. (1999) qui comparent les résultats expérimentaux obtenus dans la cellule de compression à des résultats de simulation numérique afin de confirmer les valeurs obtenues. Ils développent également une relation entre les perméabilités intrin-

sèques à la phase liquide horizontale et verticale. L'ensemble de ces travaux entrent dans le cadre d'un programme global d'étude des propriétés hydraulique des ISD Powrie et al. (2000) synthétisent d'ailleurs de façon concise la majeure partie des résultats obtenus sur la cellule de compression dans un rapport de l'E.S.R.F.C.

Münnich et al. (2005) utilisent un oedomètre leur permettant de mesurer à la fois la perméabilité verticale et la perméabilité horizontale d'un échantillon de déchet pré-traité par MBT (Mechanical and biological treatment). Tout comme Hudson et al. (1999), Münnich et al. (2005) obtiennent une relation entre les perméabilités horizontale et verticale. Cela leur permet également de faire évoluer cette relation avec la charge appliquée sur l'échantillon et d'en tirer ainsi une loi empirique. Suivant la charge et la modalité de pré-traitement de l'échantillon, le ratio entre la perméabilité horizontale et la perméabilité verticale varie entre 10 et 250.

Dans le même objectif de détermination de la perméabilité intrinsèque, Zanetti and Genon (1999) utilisent un perméamètre de laboratoire. L'inconvénient de ce type de mesure est qu'il nécessite une forte diminution de la taille caractéristique de la matrice solide, ce qui rend la mesure peu réaliste.

En ce qui concerne les comparaisons d'échelles, Durmusoglu et al. (2005, 2006) comparent les résultats de perméabilités hydrauliques obtenues dans des petits pilotes et dans des grands pilotes de laboratoire. Dans ces travaux, les auteurs en profitent pour faire une revue bibliographique sur le sujet. Ils en concluent que, suivant les études et la méthode de mesure utilisée, l'ordre de grandeur obtenu pour la conductivité hydraulique de la phase liquide varie entre 10^{-4} et 10^{-6} m/s. La conclusion de leur étude est qu'il n'existe pas de relation linéaire entre les valeurs de perméabilité obtenues dans les petits et dans les grands pilotes de laboratoire.

Jang et al. (2002) étudient en détails le C.S.D. de Kimpo en Corée du sud. Pour déterminer la conductivité hydraulique du déchet, ils prélèvent un échantillon et le placent dans une cuve cylindrique de 72 mm de diamètre et de 120 mm de hauteur. Des expériences de drainage sont réalisées sur ce dispositif. Elles permettent aux auteurs de déterminer la conductivité hydraulique du déchet mis en place. Ils utilisent ensuite une relation de Green-Corey pour interpoler les données expérimentales.

Enfin, dans sa thèse, Olivier (2003) présente des mesures de perméabilité dans des cuves de section carrée de dimension $1\text{m} \times 1\text{m}$. Ces cuves sont équipées d'un système de compression permettant de mettre l'échantillon de déchet sous contrainte. Des essais sur un déchet recirculé et mis en place pendant 10 mois sous une contrainte de 130 kPa ont permis à Olivier (2003) de déterminer des conductivités hydrauliques comprises entre $1,3 \cdot 10^{-7}$ m/s et $6,5 \cdot 10^{-7}$ m/s.

Le Tableau 3.7 présente l'ensemble des mesures de perméabilité intrinsèque des OM

réalisées dans les travaux cités précédemment.

TAB. 3.7 – Valeurs de perméabilités intrinsèques

Auteur	Protocole expérimental	Valeurs obtenues
Beaven and Powrie (1995), Powrie et al. (2000) et Hudson et al. (1999)	Cellule de compression de 2 m de diamètre et de 3 m de hauteur	$1,7 \cdot 10^{-11}$ à $1,0 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$ pour une charge moyenne variant entre 40 et 600 kPa
Chen and Chynoweth (1995)	Colonne de laboratoire de diamètre 38,1 cm et de hauteur 122 cm avec possibilité de comprimer l'échantillon	$9,8 \cdot 10^{-9}$ à $4,8 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$ pour des densités d'échantillon variant entre 160 et 480 kg/m^3
Münnich et al. (2005)	Colonne de laboratoire de section carrée de 30 cm de côté et de hauteur 50 cm	Perméabilité verticale comprise entre $1 \cdot 10^{-12}$ à $1 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$ et perméabilité horizontale comprise entre $1 \cdot 10^{-11}$ à $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$ pour des densités d'échantillon variant de 800 et 1650 kg/m^3
Durmusoglu et al. (2005, 2006)	Deux colonnes de laboratoire de diamètre 6,35 cm et de hauteur 2,54 cm pour l'un et de diamètre 71,12 et de hauteur 55,88 pour l'autre	$1 \cdot 10^{-11}$ à $1 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2$ pour des densités d'échantillon variant entre 1000 et 3000 kg/m^3
Jang et al. (2002)	Colonne de laboratoire de 7.2 cm de diamètre et de 12 cm de hauteur	$3 \cdot 10^{-10}$ à $2,9 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$ pour des taux de compaction compris entre 80% et 120%
Olivier (2003)	Cellule de compression de section carrée et 1 m de côté pour 1 m de hauteur	$1,3 \cdot 10^{-14}$ à $6,4 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$

Le Tableau 3.7 met en évidence que la perméabilité des massifs d'OM diminue avec la charge appliquée. Ceci se traduit sur site par une diminution de la perméabilité avec la profondeur dans le massif (Beaven and Powrie, 1995). Néanmoins, même si cette tendance est commune à l'ensemble des travaux considérés, l'évolution quantitative de la perméabilité en fonction de la profondeur du massif présentée dans ces différents travaux est sensiblement différente.

Enfin, Beaven and Powrie (1995), Hudson et al. (1999) ou Powrie et al. (2000) mettent en évidence le caractère anisotrope de la perméabilité intrinsèque des déchets ménagers. En effet, le dispositif expérimental qu'ils mettent en place (cellule Pitsea) permet à la fois de mesurer la perméabilité verticale et la perméabilité horizontale (composante orthogonale à l'accélération de pesanteur). Les résultats obtenus montrent que la perméabilité

horizontale est supérieure d'un facteur 2 à 10 à la perméabilité verticale suivant le niveau de compression et la nature du déchet.

Mesure sur site de la perméabilité intrinsèque. Une autre technique permettant d'obtenir la perméabilité des déchets est la méthode utilisant des "tests de puits". A la différence des mesures de laboratoire que nous avons présentées précédemment cette technique est une technique "in situ", c'est à dire qu'elle permet d'obtenir une estimation de la perméabilité du déchet directement sur le substrat mis en place sur un site de stockage. Ce type de méthode est utilisé par Jain et al. (2005) sur un ISD installé en Floride. Jain et al. (2005) utilisent un réseau de 134 puits verticaux disposés à différentes profondeurs dans le massif grâce auxquels l'air atmosphérique est injecté dans une gamme de débits compris entre 0,14 et 1,4 m³/min. Le principe de ces mesures est relativement simple et consiste à mesurer dans chaque puits d'injection l'évolution temporelle du débit injecté et de la pression dans le puits. L'analyse des données obtenues consiste à utiliser l'équation de Baehr and Hult (1991) pour retrouver les couples pression/débit obtenus lors des campagnes expérimentales. La démarche utilisée par Jain et al. (2005) consiste donc à simuler numériquement le comportement de l'injection d'air dans un milieu poreux modélisant le massif de déchet en utilisant l'approche de Baehr and Hult (1991) et à optimiser les paramètres utilisés (en particulier la perméabilité) de façon à simuler le plus proprement possible le comportement réel du casier de stockage. Le processus est donc un processus itératif d'optimisation du paramètre perméabilité. La formulation développée par Baehr and Hult (1991) pour décrire l'injection d'air dans un milieu poreux via un puits d'injection vertical suppose que la perméabilité du milieu est anisotrope et que la perméabilité radiale (dans le plan horizontal) soit plus importante que la perméabilité dans la direction verticale. Cette hypothèse est similaire à celle présentée par la relation 3.7. Le Tableau 3.8 présente les résultats obtenus par Jain et al. (2005) en fonction de la valeur supposée du rapport K_{Ix}/K_{Iz} et de la profondeur du puits.

Les travaux présentés par Jain et al. (2005) indiquent que la perméabilité des déchets diminue avec la profondeur. Ceci s'explique par le fait que la contrainte appliquée sur les couches de déchets les plus profondes est plus importante que celle appliquée sur les couches supérieures du déchet. C'est ainsi que la porosité du déchet diminue et provoque également une diminution de la perméabilité au gaz. De plus comme le mentionnent Beaven and Powrie (1995) ou Powrie et al. (2000), Jain et al. (2005) supposent que la perméabilité horizontale d'une couche de déchet est plus importante que la perméabilité verticale. Néanmoins, le rapport entre les perméabilités horizontales et verticales K_{Ix}/K_{Iz} n'est pas déterminé expérimentalement et est supposé pouvoir varier entre 1 et 100. La gamme de perméabilité évaluée par Jain et al. (2005), comprise entre $19.4 \cdot 10^{-12}$ et 4.0

TAB. 3.8 – Perméabilité horizontale à la phase gaz évaluée par Jain et al. (2005) par la technique des tests de puits

Profondeurs	Valeurs du rapport K_{Ix}/K_{Iz}	Valeurs obtenues
Couche supérieure (3-6 mètres de profondeur)	1	$13 \cdot 10^{-12} \pm 7,1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$
	10	$16,3 \cdot 10^{-12} \pm 8,8 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$
	100	$19,4 \cdot 10^{-12} \pm 10,4 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$
Couche intermédiaire (6-12 mètres de profondeur)	1	$6,4 \cdot 10^{-12} \pm 3,2 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$
	10	$8,0 \cdot 10^{-12} \pm 4,0 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$
	100	$9,4 \cdot 10^{-12} \pm 4,7 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$
Couche inférieure (12-18 mètres de profondeur)	1	$4,0 \cdot 10^{-12} \pm 2,3 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$
	10	$4,9 \cdot 10^{-12} \pm 2,8 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$
	100	$5,8 \cdot 10^{-12} \pm 3,3 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$

10^{-12} m^2 , laisse supposer que le déchet étudié est relativement peu compacté et de densité élevée. La gamme de perméabilités obtenue par mesure sur site est cohérente avec celle obtenu grâce à des essais de laboratoire.

Mesure expérimentale de perméabilité intrinsèque (Stoltz, 2007). Les valeurs de perméabilité de la matrice poreuse formée par les déchets ménagers varient grandement suivant les conditions dans lesquelles le déchet est mis en place dans les ISD. Afin de confirmer les valeurs de perméabilité intrinsèque, nous avons développé un programme expérimental de mesure de perméabilité intrinsèque de la matrice déchet. Ce programme a été réalisé dans le cadre du second volet du partenariat entre l'IMFT et le LIRIGM/LTHE à Grenoble. Les résultats de ce programme sont résumés dans Stoltz (2007).

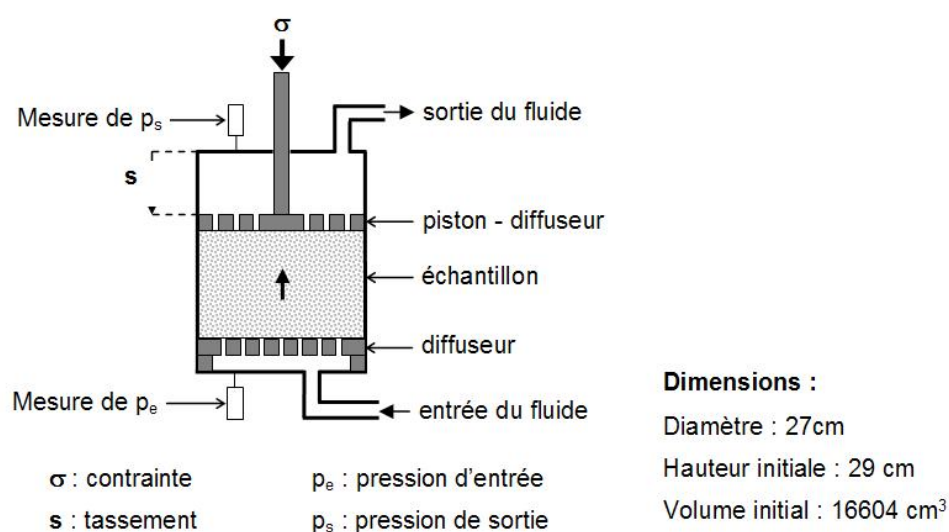


FIG. 3.7 – Dispositif de mesure de la perméabilité au gaz

Le dispositif expérimental est constitué d'un cylindre en inox de diamètre 27 cm dans lequel un échantillon de déchet est placé entre deux diffuseurs. Un piston permet de comprimer l'échantillon de déchet sous une contrainte fixée. La Figure 3.7 présente une vision schématique du dispositif expérimental.

A la différence des dispositifs expérimentaux utilisés pour obtenir les résultats regroupés dans le Tableau 3.7, les mesures de perméabilité sont ici réalisées avec une phase gaz. Le gaz utilisé est le diazote. La Figure 3.8 présente les résultats de perméabilité au gaz obtenus pour différents paliers de contrainte. L'humidité volumique initiale de l'échantillon est de 27%.

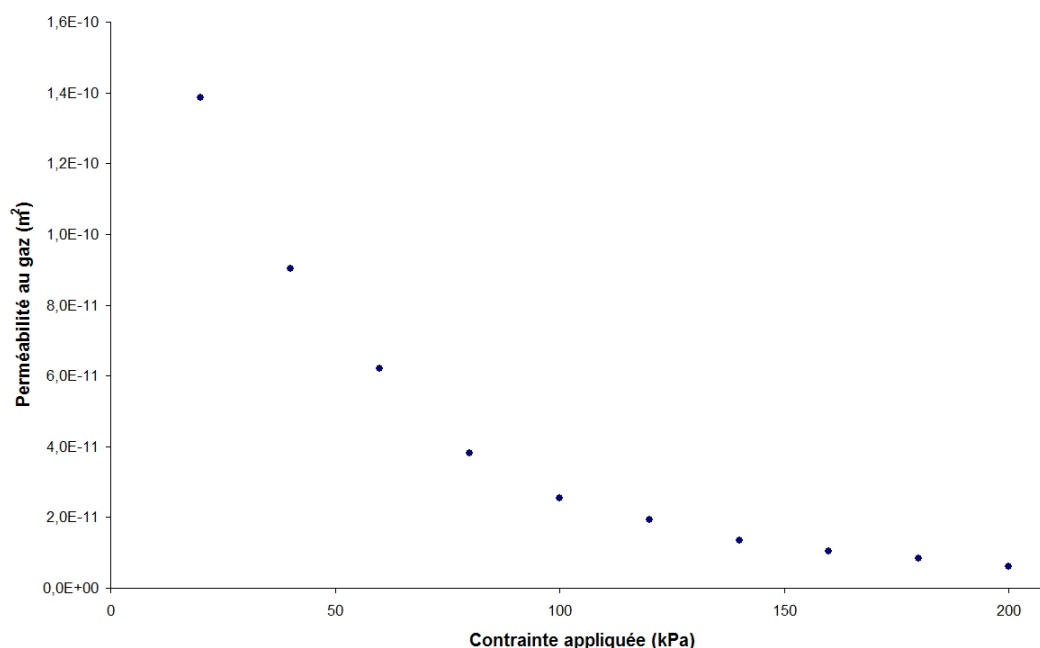


FIG. 3.8 – Résultats des mesures de perméabilité au gaz réalisées par Stoltz (2007)

La perméabilité obtenue varie entre 10^{-10} et 10^{-11} m^2 suivant la contrainte appliquée à l'échantillon. La perméabilité diminue lorsque la contrainte appliquée augmente. Ceci peut s'expliquer par deux phénomènes. Le premier est la diminution de la taille des pores avec la contrainte qui rend plus difficile le passage de la phase mobile. La seconde s'explique par le fait que lorsque l'on comprime le déchet, sa teneur en eau volumique augmente puisque le volume de l'échantillon diminue. Il ne nous est malheureusement pas possible de distinguer chacun de ces deux effets. Si l'eau présente initialement dans l'échantillon reste adsorbée dans la matrice solide, elle aura le même impact sur l'écoulement pour chaque palier de contrainte. La quantification des transferts éventuels de l'eau initialement adsorbée sur la phase solide vers l'espace poral n'a pas été possible. C'est dans le souci de pouvoir décrire cette problématique que nous introduisons dans le Chapitre 4 un modèle de *double milieu*.

Valeur de perméabilité intrinsèque utilisée. Compte tenu de la disparité des éléments quantitatifs présentés précédemment, nous utiliserons les résultats des mesures réalisées dans le cadre du programme expérimental développé par l'IMFT et le LIRIGM/LTHE. Nous utilisons donc une perméabilité intrinsèque de 10^{-11} m^2 . Les tests numériques pourront également être utilisés pour tester l'impact de l'introduction d'une relation permettant de relier les perméabilités horizontales et verticales via un coefficient d'anisotropie comme le présentent par exemple Powrie et al. (2000).

3.2.3.2 Coefficients de perméabilité relative

Comme nous l'avons présenté dans le Chapitre 2, la description des écoulements conjoints de deux phases mobiles nécessite l'utilisation de coefficients de perméabilités relatives pour chacune des deux phases mobiles. Ces coefficients prennent en compte le fait que la présence de l'une des deux phases dans l'espace poral engendre une diminution de la perméabilité effective de l'autre phase.

Ces coefficients de perméabilités relatives sont en général déterminés à l'aide de relations empiriques développées historiquement lors de l'étude de sol relativement homogène (sable par exemple). L'approche la plus classique pour modéliser les coefficients de perméabilités relatives est celle présentée par Brooks and Corey (1964), qui donne les relations suivantes :

$$k_{R\lambda} = (S_e)^{n_\lambda} \quad (3.11)$$

$$k_{R\gamma} = (1 - S_e)^{n_\gamma} \quad (3.12)$$

Dans ces équations, S_e représente la saturation efficace en liquide définie par la relation 3.13, alors que n_λ et n_γ sont les paramètres de Brooks and Corey (1964) qu'il est nécessaire de déterminer expérimentalement.

$$S_e = \frac{S - S_R}{S_m - S_R} \quad (3.13)$$

Il existe dans la littérature de nombreuses autres corrélations permettant de relier les coefficients de perméabilités relatives aux saturations en phases mobiles. Ce type de relation a notamment été développé sous l'impulsion des industriels du secteur pétrolier pour lesquels ces informations sont capitales pour dimensionner correctement les installations de récupération d'huile. On pourra citer par exemple les travaux de Honarpour (1986) concernant la détermination des perméabilités relatives dans le cas des réservoirs pétroliers.

L'utilisation des corrélations comme celles présentées par les relations 3.11 et 3.12 sup-

pose que l'on dispose de mesures expérimentales permettant de déterminer les coefficients introduits pour modéliser les perméabilités relatives. Or, la mise en place de tels dispositifs est complexe et l'interprétation des données relativement difficile à mettre en oeuvre. En effet, dans la plupart des cas, l'estimation des coefficients de perméabilité relative nécessite d'une part d'avoir préalablement déterminé la perméabilité intrinsèque du milieu ainsi que la courbe de pression capillaire et d'autre part de réaliser ensuite des expériences d'injection des deux fluides dans le milieu de type co-courant ou contre-courant et d'être capable de mesurer localement la teneur en liquide. Dans le cas des déchets ménagers, peu de dispositifs de mesure de teneur en eau non destructifs sont fiables. Dans le cadre de la collaboration entre l'IMFT et le LIRIGM/LTHE, la calibration de sondes TDR gainées est en cours de réalisation. Enfin, l'interprétation par résolution de problèmes inverses d'expériences de type injection co-courant ou contre-courant est complexe. La structure hétérogène des matériaux comme le déchet ménager ne se prête pas facilement à la mise en place de ce type de dispositif expérimental. C'est sans doute pour cette raison qu'aucun travaux concernant la détermination des paramètres de perméabilités relatives des déchets ménagers n'a pour le moment été publié. La poursuite de la collaboration entre l'IMFT et le LIRIGM/LTHE sera l'occasion d'éclaircir ce point.

Dans un premier temps, nous utiliserons donc des valeurs standards des paramètres n_λ et n_γ : $n_\lambda = 3$ et $n_\gamma = 3$.

3.2.4 Viscosité de la phase gaz

Viscosité du mélange. Nous considérons que la phase gaz est composée d'un mélange de cinq espèces chimiques (N_2 , CO_2 , CH_4 , O_2 et H_2O) dont les proportions peuvent varier au cours du temps. Par conséquent, il convient de savoir évaluer la viscosité de la phase gaz en fonction de sa composition ainsi que de la température du milieu. De nombreux travaux concernant la théorie cinétique des gaz permettent de définir des méthodes de calcul analytiques de la viscosité des mélanges gazeux en fonction de la viscosité des gaz purs qui composent le mélange. L'ouvrage de Reid et al. (1987) présente une revue complète de différentes méthodes. Dans notre cas, nous nous basons sur les travaux de Brokaw (1968) ou Brokaw (1969). Dans ces travaux, la viscosité d'un mélange gazeux est exprimée à l'aide de l'équation 3.14.

$$\eta_\gamma = \sum_{k=1}^{k=5} \frac{1}{1 + \sum_{j=1, j \neq k}^{j=5} \Phi_{kj} \frac{\Omega_j M_k}{\Omega_k M_j}} \quad (3.14)$$

Dans cette expression, Φ_{kj} est un terme qui dépend directement des viscosités des gaz purs :

$$\Phi_{kj} = S_{kj} A_{kj} \left(\frac{\eta_{\gamma k}}{\eta_{\gamma j}} \right)^{1/2} \quad (3.15)$$

Les coefficients S_{kj} et A_{kj} sont calculés à l'aide des relations 3.16 et 3.18.

$$A_{kj} = C_{kj} \left(\frac{M_j}{M_k} \right)^{1/2} \left[1 + \frac{\frac{M_k}{M_j} - \left(\frac{M_k}{M_j} \right)^{0.45}}{2 \left(1 + \frac{M_k}{M_j} \right) + \frac{1 + \left(\frac{M_k}{M_j} \right)^{0.45}}{1 + C_{kj}} C_{kj}} \right] \quad (3.16)$$

$$\text{avec } C_{kj} = \left[\frac{4M_j M_k}{(M_j + M_k)^2} \right]^{1/4} \quad (3.17)$$

$$S_{kj} = S_{jk} = \frac{1 + (\mathcal{T}_k^* \mathcal{T}_j^*)^{1/2} + \frac{\delta_k \delta_j}{4}}{\left[1 + \mathcal{T}_k^* + \frac{\delta_k^2}{4} \right]^{1/2} \left[1 + \mathcal{T}_j^* + \frac{\delta_j^2}{4} \right]^{1/2}} \quad (3.18)$$

Dans cette expression, \mathcal{T}_i^* désigne la température réduite définie par la relation 3.19 (Brokaw, 1969).

$$\mathcal{T}_i^* = \frac{k_B \mathcal{T}}{e_i} \quad (3.19)$$

Dans cette expression, k_B représente la constante de Boltzmann, et e_i représente la profondeur d'attraction du potentiel de Lennard-Jones de l'espèce i et δ_i le coefficient de polarité de l'espèce i . Pour les gaz purs, le coefficients $\frac{k_B}{e_i}$ peut être déterminé à l'aide des données concernant la température d'ébullition (\mathcal{T}_{b_i} exprimée en K). En effet, selon Svehla (1962), on a la relation suivante :

$$\frac{k_B}{e_i} = 1,18 \mathcal{T}_{b_i} \quad (3.20)$$

Enfin, M_j désigne la masse molaire du constituant j .

Viscosité des corps purs. Comme nous l'avons vu précédemment, pour calculer la viscosité des mélanges gazeux, nous avons besoin de calculer la viscosité des gaz purs qui constituent le mélange. Pour calculer la viscosité des gaz purs, nous utilisons une corrélation fournie par le logiciel Component Plus[®] basée sur la théorie cinétique des gaz et développée par Chapman and Cowling (1939). Cette expression prend la forme

générique suivante :

$$\eta_{\gamma i} = \frac{AT^B}{1 + \frac{C}{T} + \frac{D}{T^2}} \text{ pour } i = N_2, CO_2, CH_4, O_2, H_2O \quad (3.21)$$

Les valeurs des coefficients A , B , C et D nécessaire à l'évaluation des viscosités des gaz purs sont présentées dans le Tableau 3.9.

TAB. 3.9 – Coefficients utilisés pour évaluer la viscosité des gaz purs grâce à l'équation 3.21

Gaz considéré	A	B	C	D
N_2	$6,56 \cdot 10^{-7}$	0,61	54,7	0
O_2	$1,10 \cdot 10^{-6}$	0,56	96,3	0
CO_2	$2,14 \cdot 10^{-6}$	0,46	290	0
CH_4	$5,25 \cdot 10^{-7}$	0,590	105	0
H_2O	$6,18 \cdot 10^{-7}$	0,677	847	-73930

3.2.5 Viscosité de la phase liquide

Nous considérons que la phase liquide est majoritairement composée d'eau liquide. L'eau joue donc le rôle de solvant liquide et la viscosité de la phase liquide est assimilable à la viscosité de l'eau liquide. Bien entendu ceci est une approximation puisque nous ne considérons pas la possibilité d'avoir une charge organique importante dissoute dans le lixiviat, ce qui peut en affecter la viscosité. En réalité, la composition des lixiviats est complexe (voir par exemple Lornage (2006)), et propre à chaque site de stockage. Elle évolue également fortement au cours du temps. Par conséquent, il est impossible de décrire parfaitement la viscosité de la phase liquide, d'où l'approximation proposée. La viscosité de l'eau liquide dépend principalement de sa température. De nombreuses corrélations existent dans la littérature pour décrire l'évolution de la viscosité de l'eau en fonction de la température. Nous nous basons sur la corrélation fournie par le logiciel Component Plus[®] et développée par Missenard (1965). Cette expression est la suivante :

$$\eta_{\lambda} = \exp A + \frac{B}{T} + C \log T + DT^E \quad (3.22)$$

Les valeurs des coefficients A , B , C , D et E nécessaires à l'évaluation de la viscosité de la phase liquide sont présentées dans le Tableau 3.10.

TAB. 3.10 – Coefficients utilisés pour évaluer la viscosité de la phase liquide grâce à l'équation 3.22

Liquide considéré	A	B	C	D	E
H_2O	52,84	3703	5,866	$-5,87 \cdot 10^{-29}$	10

3.3 Transport

Compte tenu du fait que l'un des objectifs principaux de nos travaux de modélisation consiste à pouvoir suivre la production et la migration du biogaz au sein des massifs de déchets ménagers, l'évaluation des propriétés de transport des constituants (que se soit en phase liquide ou en phase gaz) est essentielle pour obtenir une description la plus précise possible du transport des éléments chimiques que nous désirons suivre.

3.3.1 Masse volumique du gaz

Comme nous l'avons présenté grâce à l'équation 2.221, nous considérons que le mélange de gaz que nous traitons se comporte comme un gaz parfait. Cette hypothèse est d'autant plus valable que la température et la pression sont basses et que la masse molaire des gaz est faible. Si nous considérons un mélange des cinq espèces gazeuses N_2 , CO_2 , CH_4 , O_2 et H_2O , la loi des gaz parfaits nous permet de décrire l'évolution de la masse volumique de la phase gaz en fonction des fractions massiques de chacun des constituants, de la pression, et de la température (cf. relation 2.221).

3.3.2 Masse volumique de la phase liquide

Nous considérons que la phase liquide est majoritairement constituée d'eau liquide dans laquelle les éléments provenant de la phase gaz se retrouvent dissous. Par conséquent, nous considérons que la masse volumique de la phase gaz est identique à celle de l'eau pure. De plus, compte tenu de la gamme restreinte de températures que nous considérons, nous ne prenons en compte aucune variation de la masse volumique de la phase liquide avec la température. La phase liquide est également considérée incompressible, et aucune dépendance à la pression n'est prise en compte dans le calcul de la masse volumique de la phase liquide. Par conséquent, comme le présente l'équation 3.23, nous considérons que la masse volumique de la phase liquide est constante.

$$\rho_\lambda = 1000 \text{ kg/m}^3 \quad (3.23)$$

3.3.3 Matrice de diffusion de Fick pour la phase gaz

Comme nous l'avons énoncé précédemment, nous considérons que la phase gaz est composée des éléments chimiques suivants : N_2 , CO_2 , CH_4 , O_2 et H_2O . Nous sommes donc dans le cas de mélanges gazeux. La concentration de chaque espèce peut varier au cours du temps, et aucun de ces gaz ne joue le rôle de solvant gazeux sur l'ensemble de la durée des simulations. Par conséquent, comme le présentent Krishna and Wesselingh (1996) dans une revue bibliographique sur l'approche de Stefan-Maxwell, il convient d'adapter la loi de Fick généralement utilisée pour décrire la diffusion dans le cas des mélanges binaires afin de la rendre utilisable dans le cas de l'ensemble des mélanges gazeux. La généralisation de la loi de Fick au cas des mélanges multi-constituants passe par l'introduction d'une matrice de diffusion de Fick, dont les coefficients sont évalués à l'aide de l'approche de Stefan-Maxwell (Taylor and Krishna, 1993; Krishna and Wesselingh, 1996; Quintard et al., 2006). Cette dernière approche permet de décrire la diffusion de chaque constituant dans le mélange à partir des coefficients de diffusion binaires.

3.3.3.1 Diffusion multiconstituant

Comme nous l'avons évoqué dans le Chapitre 2 au paragraphe 2.3.2, nous considérons que la diffusion dans le gaz s'exprime grâce à une loi de Fick généralisée faisant intervenir une matrice de diffusion multiconstituant de Stefan-Maxwell (cf. équation 2.92). Comme nous l'avons déjà introduit dans le Chapitre 1 au paragraphe 1.2.3.2, il convient de prendre garde à l'expression des flux diffusifs de masse que l'on utilise. En effet, la plupart des travaux concernant les phénomènes de transports diffusifs s'intéressent aux flux molaires. Or, dans notre bilan de masse présenté par la relation 2.229, c'est bien le flux diffusif massique que nous cherchons à déterminer. L'objectif du développement qui suit est de présenter la démarche nous permettant à la fois de relier les approches de Fick et de Stefan-Maxwell pour exprimer les flux diffusifs et de relier les flux diffusifs exprimés dans la référence des vitesses molaires et des vitesses barycentriques.

Dans la suite nous supposerons que le nombre de constituants N vaut 5 et que le N^{ieme} constituant est l'azote (N_2). L'azote a été choisi car il est le moins réactif des constituants impliqués dans notre système.

Expression des flux diffusifs molaires de Stefan-Maxwell. Notons $[\underline{J}^*]$ la matrice colonne définissant les flux diffusifs molaires des $N - 1$ (soit 4) constituants présents dans la phase gaz ($\text{kmol}/\text{m}^2/\text{s}$). Ces flux diffusifs sont définis explicitement par Bird et al. (2002). D'après le développement proposé par Quintard et al. (2006), $[\underline{J}^*]$ s'exprime de la

façon suivante :

$$[\underline{J}^*] = -c_\gamma [B]^{-1} [\Upsilon] [\underline{\nabla}X] \quad (3.24)$$

Dans cette relation, c_γ représente la concentration totale dans la phase gaz (kmol/m³), $[\underline{\nabla}X]$ représente le gradient des fractions molaires des $N - 1$ constituants (1/m), et la matrice 4×4 $[B]$ est représentée de la façon suivante :

$$[B] = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & B_{14} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & B_{24} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} & B_{34} \\ B_{41} & B_{42} & B_{43} & B_{44} \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

Les coefficients B_{ij} s'expriment en s/m² sont reliés aux coefficients de diffusion binaire $\mathcal{D}_{\gamma ij}$ par les relations 3.26 et 3.27.

$$B_{ii} = \frac{X_{\gamma i}}{\mathcal{D}_{\gamma i5}} + \sum_{k=1, k \neq i}^{k=4} \frac{X_{\gamma k}}{\mathcal{D}_{\gamma ik}} \text{ pour } i = 1, 2, \dots, 4 \quad (3.26)$$

$$B_{ij} = -X_{\gamma i} \left(\frac{1}{\mathcal{D}_{\gamma ij}} - \frac{1}{\mathcal{D}_{\gamma i5}} \right) \text{ pour } i = 1, 2, \dots, 4 \text{ et } i \neq j \quad (3.27)$$

Dans les expressions 3.26 et 3.27, les coefficients $X_{\gamma k}$ désignent les fractions molaires du constituant k dans la phase gaz. Enfin, dans l'expression 3.24 $[\Upsilon]$ représente une matrice composée de facteurs thermodynamiques fonctions des activités et des fugacités de chacune des espèces chimiques présentes dans le gaz (Taylor and Krishna (1993); Quintard et al. (2006)). Dans le cas de mélanges idéaux, comme le sont les mélanges de gaz parfaits, cette matrice sera égale à la matrice identité : $[\Upsilon] = [Id]$.

Expression des flux diffusifs molaires de Fick. Dans le cas où l'on considère les flux de diffusion molaires, l'expression 3.24 représente la loi de Fick généralisée qui s'exprime de la façon suivante :

$$[\underline{J}^*] = -c_\gamma [D_{mol}] [\underline{\nabla}X] \quad (3.28)$$

Dans l'expression 3.28, la matrice $[D_{mol}]$ est la matrice de diffusion de Fick molaire (m²/s). Par analogie avec la relation 3.24, on en déduit la relation entre la matrice $[D_{mol}]$ et les matrices $[B]$ et $[\Upsilon]$:

$$[D_{mol}] = [B]^{-1} [\Upsilon] \quad (3.29)$$

L'intérêt de cette dernière équation réside dans le fait que l'introduction de l'approche de Stefan-Maxwell permet de calculer chaque coefficient de la matrice de diffusion de Fick $[D_{mol}]$ à partir de la connaissance des coefficients de diffusion binaires $\mathcal{D}_{\gamma ij}$.

Expression des flux diffusifs massifs de Stefan-Maxwell. Nous cherchons ici à utiliser l'approche de Stefan-Maxwell pour décrire les flux diffusifs massifs. En effet, les équations de conservation que nous avons présentées dans le Chapitre 2 font intervenir la vitesse barycentrique (massique) et non la vitesse molaire. Ce choix a été dicté par le fait que c'est la vitesse pertinente pour exprimer les bilans de quantité de mouvement. Si nous utilisons le développement exposé dans les travaux de Quintard et al. (2006), la matrice colonne définissant les flux diffusifs massifs $[j]$ pour les $N - 1$ (soit 4) constituants présents dans la phase gaz s'exprime comme le présente l'équation 3.30. Elle s'exprime en $\text{kg}/\text{m}^2/\text{s}$.

$$[j] = \frac{\rho_\gamma}{c_\gamma} [G] [\Omega] [X]^{-1} [\underline{J}^*] \quad (3.30)$$

Dans cette expression les matrices $[\Omega]$ et $[X]$ sont les matrices diagonales contenant sur leurs diagonales respectivement les valeurs de fractions massiques (%) et de fractions molaires (%) de chaque constituant (cf. 3.31 et 3.32).

$$[\Omega] = \begin{bmatrix} \Omega_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Omega_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Omega_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Omega_4 \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

$$[X] = \begin{bmatrix} X_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & X_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & X_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & X_4 \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

La matrice $[G]$ est la matrice qui permet le passage entre le référentiel massique et le référentiel mixte introduit par Bird et al. (2002). Les éléments de la matrice $[G]$ sont sans unité et sont calculés d'après l'équation 3.33.

$$G_{ij} = \delta_{ij} - \Omega_{\gamma i} \left(1 - \frac{\Omega_{\gamma 4} X_{\gamma j}}{X_{\gamma 4} \Omega_{\gamma j}} \right) \text{ pour } i = 1, 2, \dots, 4 \text{ avec } \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (3.33)$$

En combinant les expressions 3.28 et 3.30, on obtient l'expression des flux diffusifs

massiques définis par la relation 3.34

$$[j] = -\rho_\gamma [G] [\Omega] [X]^{-1} [D_{mol}] [\nabla X] \quad (3.34)$$

De plus la relation entre les gradients de fractions molaires et les gradients de fractions massiques est donnée par la relation suivante :

$$[\nabla X] = [X] [\Omega]^{-1} [G]^{-1} [\nabla \Omega] \quad (3.35)$$

Les flux diffusifs exprimés en termes de fractions massiques s'expriment donc de la façon suivante :

$$[j] = -\rho_\gamma [G] [\Omega] [X]^{-1} [D_{mol}] [X] [\Omega]^{-1} [G]^{-1} [\nabla \Omega] \quad (3.36)$$

Cette dernière expression nous permet donc de relier les flux diffusifs massiques à la matrice de diffusion de Fick exprimée en termes de fractions molaires.

Expression des flux diffusifs massiques de Fick. On s'aperçoit aisément que l'expression 3.36 exprime les flux diffusifs sous forme fickienne. En introduisant une matrice de diffusion de Fick généralisée exprimée en termes de fractions massiques $[D_{mass}]$ (m^2/s), la relation 3.37 donne la forme fickienne des flux diffusifs massiques.

$$[j] = -\rho_\gamma [D_{mass}] [\nabla \Omega] \quad (3.37)$$

En comparant les relations 3.36 et 3.37, nous obtenons l'équation 3.38 qui exprime la relation entre la matrice $[D_{mass}]$ et la matrice $[D_{mol}]$ introduite précédemment.

$$[D_{mass}] = [G] [\Omega] [X]^{-1} [D_{mol}] [X] [\Omega]^{-1} [G]^{-1} \quad (3.38)$$

Cette dernière relation est celle que nous utilisons dans l'outil de simulation numérique que nous avons développé. Elle nous permet de calculer les matrices de diffusion de Fick dans le référentiel des vitesses barycentriques à partir des valeurs des coefficients de diffusion binaire molaires. Ces matrices nous permettent de prendre en compte le caractère multiconstituant du mélange via les termes non-diagonaux de cette matrice. Dans le cas que nous étudions, les termes extra-diagonaux de cette matrice sont souvent négligeables, mais il existe des configurations (forts contrastes de concentration) dans lesquelles ces coefficients peuvent avoir un impact non négligeable.

3.3.3.2 Evaluation des coefficients de diffusion binaire en phase gaz

Comme nous l'avons vu précédemment, le calcul des matrices de diffusion présenté par la relation 3.38 nécessite de connaître les coefficients de diffusion binaires molaires des espèces présentes dans le gaz. Dans la littérature, un nombre important de travaux concernant les propriétés de diffusion dans les gaz définissent une quantité non moins importante de corrélations permettant de déterminer les coefficients de diffusion binaires. Dans leur ouvrage, Reid et al. (1987) présentent différentes techniques permettant d'évaluer les coefficients de diffusion dans le cas du mélange binaire de deux constituants gazeux.

La première approche pour évaluer ces coefficients est une approche théorique basée sur la théorie cinétique des gaz et plus particulièrement sur une approximation de la solution de l'équation de Boltzmann. Le coefficient de diffusion binaire est alors décrit par la relation 3.39.

$$\mathcal{D}_{\gamma ij} = \frac{3}{16} \frac{(4\pi k_B \mathcal{T} / M_{ij})^{1/2}}{n\pi\sigma_{ij}^2 W_D} f_D \quad (3.39)$$

$$\text{avec : } M_{ij} = 2 \left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right)^{-1} \quad (3.40)$$

Dans cette expression, k_B est la constante de Boltzmann, n est la densité de particule calculée à l'aide de la loi des gaz parfaits, f_D est une constante que l'on considérera égale à l'unité (Reid et al., 1987) et W_D représente l'intégrale de collision entre les particules. Cette intégrale de collision est principalement fonction de la température (cf. équation 3.43). Les valeurs de σ_{ij} et de e_{ij} sont calculées à l'aide des potentiels de Lennard-Jones σ_i , σ_j , e_i et e_j des constituants i et j (cf. Reid et al. (1987)). Le potentiel de Lennard-Jones relie l'énergie d'un couple de molécules à la distance qui les sépare.

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad (3.41)$$

$$e_{ij} = (e_i e_j)^{1/2} \quad (3.42)$$

$$W_D = \frac{A^B}{\mathcal{T}^*} + \frac{C}{\exp(D\mathcal{T}^*)} + \frac{E}{\exp(F\mathcal{T}^*)} + \frac{G}{\exp(H\mathcal{T}^*)} \quad (3.43)$$

Ici \mathcal{T}^* est la température réduite définie par la relation 3.19.

D'autres approches existent pour évaluer les coefficients de diffusion binaires. Ces approches sont majoritairement expérimentales. Chacune des approches présentées par Reid et al. (1987) présente une gamme de validité en température ou en pression particulière. Enfin, la corrélation que nous utilisons pour calculer les coefficients de diffusion binaires

est celle présentée par Bird et al. (2002) (p. 521) et s'exprime de la manière suivante :

$$\frac{p\mathcal{D}_{\gamma ij}}{(P_{\gamma Ci}P_{\gamma Cj})^{1/3}(\mathcal{T}_{Ci}\mathcal{T}_{Cj})^{5/12}\left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j}\right)^{1/2}} = a \left(\frac{\mathcal{T}}{\sqrt{\mathcal{T}_{Ci}\mathcal{T}_{Cj}}} \right)^b \quad (3.44)$$

Dans cette expression, a et b sont des coefficients dont la valeur change suivant que le couple de gaz i et j est non polaire ou que le couple de gaz i et j est composé de l'eau vapeur (polaire) et d'un gaz non polaire. Les valeurs des coefficients a et b sont tabulées dans la littérature. Les coefficients de pression critique $P_{\gamma Ci}$ et de température critique \mathcal{T}_{Ci} sont des données spécifiques à chaque constituant, dont les valeurs sont des valeurs tabulées.

L'intérêt d'utiliser la relation 3.44 réside dans le fait qu'elle intègre une dépendance vis-à-vis de la température et de la pression et que les valeurs de pression critique et température critique sont aisément disponibles dans la littérature pour une quantité variée d'espèces chimiques.

3.3.4 Coefficients de diffusion dans la phase liquide

Comme nous l'avons exposé précédemment, dans notre modèle, nous considérons que la phase liquide est majoritairement composée d'eau liquide dans laquelle les espèces chimiques présentes sous forme gazeuse peuvent être dissoutes. Par conséquent, en terme de diffusion, nous considérons que la diffusion des espèces N_2 , CO_2 , CH_4 et O_2 dans la phase liquide est assimilable à la diffusion de ces mêmes éléments dans un mélange infiniment concentré en eau. En d'autres termes, compte tenu des faibles concentrations dans la phase liquide des espèces N_2 , CO_2 , CH_4 et O_2 , la probabilité que la diffusion de chacune de ces molécules dans l'eau soit influencée par une autre est négligeable. Pour chacune de ces molécules, le mélange se comporte donc comme un mélange binaire. Nous considérons donc que la matrice de diffusion de Fick dans la phase liquide est diagonale et que les diagonales sont composées des coefficients de diffusion binaire (cf. 3.45).

$$D_{\lambda i} \approx \mathcal{D}_{\lambda i} \text{ pour } i = N_2, CO_2, CH_4, O_2 \quad (3.45)$$

Nous ne considérons pas de dépendance de ces coefficients aux variables environnementales. Nous considérons donc que les coefficients de diffusion de Fick dans la phase liquide sont constants. Les valeurs que nous utilisons pour ces coefficients sont rassemblées dans le Tableau 3.11.

TAB. 3.11 – Coefficients de diffusion binaires dans la phase liquide

Espèce	Coefficient	Valeur en m^2/s	Référence
N_2	$\mathcal{D}_{\lambda N_2}$	$1,15 \cdot 10^{-9}$ à $\mathcal{T} = 298K$	Reid et al. (1987)
O_2	$\mathcal{D}_{\lambda O_2}$	$1,6 \cdot 10^{-9}$ à $\mathcal{T} = 298K$	Stoke-Einstein
CH_4	$\mathcal{D}_{\lambda CH_4}$	$3,55 \cdot 10^{-9}$ à $\mathcal{T} = 333K$	Reid et al. (1987)
CO_2	$\mathcal{D}_{\lambda CO_2}$	$2,0 \cdot 10^{-9}$ à $\mathcal{T} = 298K$	Reid et al. (1987)

3.3.5 Tortuosité

Dans le Chapitre 2, nous avons introduit deux coefficients de tortuosité τ_γ et τ_λ . Ces coefficients traduisent le fait que la diffusion des espèces chimiques dans chacune des phases gaz et liquide est influencée par la structure du milieu poreux. En effet, conceptuellement, la présence d'obstacles formés par les autres phases que celle considérée augmente le parcours moyen de chaque molécule, ce qui se traduit en général par une diminution du coefficient de diffusion effectif. Par conséquent la tortuosité est un coefficient supérieur ou égal à l'unité qui pénalise les processus de diffusion par rapport au cas diffusion libre. La mesure de ces coefficients de tortuosité se fait en règle générale grâce à des expériences de traçage. Dans le cas des déchets solides, il n'existe à notre connaissance aucune étude publiée qui nous permette d'affecter une valeur empirique aux coefficients de tortuosité. Seules des corrélations reliant le coefficient de tortuosité au diamètre des particules sont présentées par Miller and Clesceri (2003) dans le cas des systèmes à lits fluidisés. Ces corrélations s'avèrent être inutilisables dans le cas des matrices poreuses comme les déchets ménagers. Par conséquent, dans un premier temps nous considérerons que les coefficients de tortuosité pour les phases gaz et liquide sont identiques ($\tau_\gamma = \tau_\lambda$). Les seules valeurs dont nous disposons proviennent d'expériences réalisées par Kallel et al. (2004) sur des déchets broyés. Ils obtiennent des coefficients de tortuosité compris entre 3 et 5 pour ce type de déchets. Nous fixerons donc dans une première approche une valeur de tortuosité égale à 5. En effet, les dimensions caractéristiques des éléments solides que nous considérons sont plus importantes du fait que ce sont des OM non-broyées, ce qui nous incite à considérer la borne supérieure des valeurs de tortuosités mesurées par Kallel et al. (2004) sur un déchet broyé. Néanmoins, il conviendra de garder à l'esprit que seules des expériences de traçage sur site peuvent permettre d'obtenir des valeurs cohérentes de ces paramètres de tortuosité.

3.3.6 Coefficients de dispersion

L'évaluation des coefficients de dispersion dans le cas de l'étude des transferts dans les massifs de déchets ménagers souffre du même manque de mesures expérimentales que l'évaluation des coefficients de tortuosité. Nous simplifions donc ces coefficients en

supposant que les coefficients de dispersion sont identiques pour la phase liquide et pour la phase gaz. On aura donc :

$$\alpha_{L\gamma} = \alpha_{L\lambda} \text{ et } \alpha_{T\gamma} = \alpha_{T\lambda} \quad (3.46)$$

On considère également généralement que les coefficients de dispersion longitudinaux et transversaux sont reliés par la relation suivante :

$$\alpha_{T\gamma} = \frac{\alpha_{L\gamma}}{10} \quad (3.47)$$

En règle générale, le coefficient de dispersion longitudinal est de l'ordre de grandeur de l'échelle des hétérogénéités locales. Dans notre cas nous considérons que ces hétérogénéités sont de l'ordre du centimètre et nous utilisons la relation 3.48.

$$\alpha_{L\gamma} = 0,1 \text{ mètres} \quad (3.48)$$

Il convient de garder à l'esprit que les simplifications que nous proposons pour les coefficients de dispersion ne sont basées sur aucun résultat expérimental et que seule la mise en place d'un programme expérimental visant à évaluer les coefficients de dispersion dans les OM permettrait l'évaluation correcte de ces coefficients de dispersion.

3.3.7 Coefficients d'équilibre entre phases gaz et liquide

Dans le modèle que nous avons développé, nous supposons que l'hypothèse d'équilibre local entre les phases gaz et liquide est vérifiée. Par conséquent, pour chacun des constituants pouvant être présent sous forme dissoute dans la phase liquide (N_2 , CO_2 , CH_4 et O_2), nous avons introduit un coefficient d'équilibre Γ_i permettant de relier la fraction massique du constituant considéré dans la phase gaz à sa fraction massique dans la phase liquide. Pour les constituants N_2 , CO_2 , CH_4 et O_2 , les équilibres entre la phase gaz et la phase liquide sont calculés à l'aide de la loi de Henry. Les données que nous utilisons sont tirées de Lide (1995). La loi de Henry présentée dans cet ouvrage permet d'obtenir la composition molaire dans la phase liquide en équilibre avec un gaz dont on connaît la composition. La relation entre les fractions molaires s'écrit alors :

$$X_{\lambda i} = X_{\gamma i} \exp\left(\frac{A_i}{T} + \log(kh_{0i}) - \frac{A_i}{298.15}\right) P_{\gamma} M_{H_2O} \text{ pour } i = N_2, CO_2, CH_4, O_2 \quad (3.49)$$

Par conséquent, en termes de fractions massiques, la loi de Henry s'exprime de la façon

suivante :

$$\Omega_{\lambda i} = \frac{\Omega_{\gamma i}}{\sum_{j \in \gamma} \Omega_{\gamma j} / M_j} \exp \left(\frac{A_i}{T} + \log(kh_{0i}) - \frac{A_i}{298.15} \right) P_{\gamma} \text{ pour } i = N_2, CO_2, CH_4, O_2 \quad (3.50)$$

De la relation 3.50, on déduit la forme du coefficient d'équilibre Γ_i :

$$\Gamma_i = \frac{1}{\sum_{j \in \gamma} \Omega_{\gamma j} / M_j} \exp \left(\frac{A_i}{T} + \log(kh_{0i}) - \frac{A_i}{298.15} \right) P_{\gamma} \text{ pour } i = N_2, CO_2, CH_4, O_2 \quad (3.51)$$

Les valeurs que nous utilisons pour les coefficients A_i et kh_{0i} sont celles tabulées dans le "Handbook of Chemistry and Physics" (cf. Lide (1995)) et sont présentées dans le Tableau 3.12.

TAB. 3.12 – Coefficients nécessaires au calcul des équilibres gaz/liquide

Espèce	Valeur de A_i (en K)	Valeur de kh_{0i} (en mol/kg/Pa)
N_2	$6,0 \cdot 10^{-10}$	1300
O_2	$1,3 \cdot 10^{-8}$	1500
CH_4	$1,4 \cdot 10^{-8}$	1600
CO_2	$3,5 \cdot 10^{-7}$	2400

3.3.8 Loi de Raoult et pression de vapeur saturante

A l'inverse des constituants N_2 , CO_2 , CH_4 et O_2 , l'eau est le constituant majoritaire (solvant) dans la phase liquide. Par conséquent, c'est la concentration en eau dans la phase liquide qui influence la concentration en vapeur d'eau de la phase gaz en contact avec la phase liquide. C'est la pression de vapeur saturante de l'eau qui va donc imposer la concentration en eau dans la phase gaz. La relation qui permet d'obtenir la fraction massique d'eau vapeur présente dans le gaz en équilibre avec la phase liquide est appelée loi de Raoult et est présentée par l'équation 3.52.

$$\Omega_{\gamma H_2O} = M_{H_2O} \sum_{j \in \gamma} \Omega_{\gamma j} / M_j \frac{P_V}{P_{\gamma}} \quad (3.52)$$

Dans cette relation, P_V représente la pression de vapeur saturante de l'eau vapeur. La pression de vapeur saturante dépend fortement de la température. Nous nous baserons sur une corrélation disponible dans le logiciel Component Plus[®]. Cette expression est la

suivante :

$$P_V = \exp A + \frac{B}{T} + C \log T + DT^E \quad (3.53)$$

Les valeurs des coefficients A , B , C , D et E nécessaire à l'évaluation de la pression de vapeur saturante de l'eau liquide sont présentées dans le Tableau 3.3.8.

TAB. 3.13 – Coefficients utilisés pour évaluer la pression de vapeur saturante de l'eau liquide grâce à l'équation 3.52

Liquide considéré	A	B	C	D	E
H_2O	73.64	-7258.2	-7.303	$4.165 \cdot 10^{-6}$	2

3.4 Propriétés énergétiques

Dans cette partie, nous présentons les données nécessaires à l'évaluation des paramètres effectifs de transport de la chaleur dans les ISD. Nous avons vu précédemment que les principaux paramètres à évaluer sont la conductivité thermique effective du milieu, les capacités calorifiques de chacune des phases et les paramètres de dispersion thermique.

3.4.1 Evaluation des propriétés d'emménagement de la chaleur

Le modèle de transfert de chaleur dans les ISD que nous avons présenté sur l'équation 2.203 nécessite l'évaluation des capacités calorifiques massiques de chaque phase. Nous nous attachons ici à obtenir des valeurs cohérentes des capacités calorifiques massiques de chacune des phases que nous considérons.

Capacité calorifique massique de la phase gaz. Comme nous l'avons présenté avec l'équation 2.204, la capacité calorifique du mélange gazeux s'exprime en fonction de la capacité calorifique des différents constituants qui le composent. Dans le cas de la capacité calorifique massique, la loi de mélange permettant d'obtenir la capacité calorifique du mélange gazeux $C_{P\gamma}$ est relativement simple et s'exprime comme une somme de capacités calorifiques massiques pondérée par la fraction massique de chacun des constituants (cf. équation 3.54).

$$C_{P\gamma} = \sum_{i \in \gamma} \Omega_{\gamma i} C_{P\gamma i} \quad (3.54)$$

Il est donc nécessaire de savoir calculer les capacités calorifiques massiques de chacun des constituants de la phase gaz afin d'évaluer la capacité calorifique du mélange. Pour ce

faire, nous utilisons une corrélation fournie par le logiciel Component Plus[®]. La forme générique de la capacité calorifique massique du constituant i sous forme gazeuse en fonction de la température s'écrit donc de la façon suivante :

$$C_{P\gamma i} = \left(A + B \left(\frac{C/T}{\sinh(C/T)} \right)^2 + D \left(\frac{E/T}{\cosh(E/T)} \right)^2 \right) \frac{M_i}{1000} \quad (3.55)$$

Les valeurs des paramètres A , B , C , D et E sont spécifiques à chaque espèce présente dans le mélange gazeux. Les valeurs de ces différents paramètres sont regroupées dans le Tableau 3.14.

TAB. 3.14 – Coefficients utilisés pour évaluer la capacité calorifique massique des gaz purs grâce à l'équation 3.55

Gaz considéré	A	B	C	D	E
N_2	29105	8614,9	1701,6	103,47	909,79
O_2	29103	10040	2526,5	9356	1153,8
CO_2	29370	34540	1428	26400	588
CH_4	33298	79933	2086,9	41602	991,96
H_2O	33363	26790	2610,5	8896	1169

Capacité calorifique massique de la phase liquide. Nous considérons que l'eau est le constituant majoritaire de la phase liquide (solvant). Par conséquent, la capacité calorifique massique de la phase liquide est assimilable à celle de l'eau liquide. Or la capacité calorifique massique de l'eau liquide varie en fonction de la température comme le présente l'équation 3.56.

$$C_{P\lambda} = (A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4) \frac{M_i}{1000} \quad (3.56)$$

Cette formule est tirée du logiciel Component Plus[®]. L'estimation des coefficients A , B , C , D et E nécessaires à l'évaluation de la capacité calorifique de la phase liquide est présentée dans le Tableau 3.15.

TAB. 3.15 – Coefficients utilisés pour évaluer la capacité calorifique massique de l'eau liquide grâce à l'équation 3.56

Liquide considéré	A	B	C	D	E
H_2O	276370	-2090,1	8,125	-0,0141	$9,37 \cdot 10^{-6}$

Capacité calorifique massique de la phase biofilm. Nous considérons que le comportement du biofilm vis-à-vis- du transport de chaleur est similaire à celui de l'eau liquide.

En effet, les biofilms de par la structure cellulaire et extra-cellulaire des bactéries qui les composent sont majoritairement composés d'eau. Par conséquent, nous considérons que la capacité calorifique massique du biofilm est identique à celle de la phase liquide (cf. équation 3.56).

Capacité calorifique massique de la phase solide. Concernant la phase solide, nous considérons qu'elle est composée d'un mélange d'éléments solides et d'eau constitutive. Nous considérons donc que la capacité calorifique massique de la phase solide suit une loi de mélange de la forme proposée par l'équation 3.57

$$C_{P\sigma} = \sum_{i \in \sigma} \Omega_{\sigma i} C_{P\sigma i} \quad (3.57)$$

Il nous faut alors évaluer la capacité calorifique massique des différents éléments du déchet, soit la partie déshydratée de la fraction fermentescible, la fraction papier/carton, la fraction très lentement biodégradable ainsi que la fraction inerte et l'eau constitutive. Le Tableau 3.16 présente les valeurs des capacités calorifiques massiques que nous utilisons pour calculer la capacité calorifique équivalente de la phase solide.

Fractions du déchet	Capacité calorifique massique (J/kg/K)
Fraction rapidement biodégradable (fermentescible)	3000
Fraction lentement biodégradable (Papier/carton)	1340
Fraction très lentement biodégradable	2100
Eau constitutive	cf. équation 3.56
Fraction inerte (plastique, verre, métaux, etc...)	600-1700 (une valeur moyenne de 1200 J/kg/K sera utilisée)

Ces valeurs sont celles présentées par Miller and Clesceri (2003) concernant les propriétés des matériaux qui composent les OM. Ces valeurs sont, bien entendu, indicatives puisque la composition même des fractions que nous avons définies peut être variable.

3.4.2 Évaluation de la conductivité thermique des déchets

Nous cherchons ici à évaluer le tenseur de conductivité thermique effectif pour le déchet. Comme nous l'avons montré lors du développement du modèle mathématique de transport de chaleur, le tenseur de conductivité thermique effectif est composé d'une

contribution liée à la tortuosité du milieu et d'une contribution dispersive liée aux fluctuations des vitesses des phases mobiles autour de la valeur moyenne. Le tenseur de conductivité thermique est le paramètre clé si l'on veut décrire correctement les transferts de chaleurs dans les ISD. En effet, hormis pendant les périodes de réinjection de lixiviats, les effets de transport de chaleur par convection sont négligeables face aux effets de conduction. La répartition de la chaleur au sein du massif est alors uniquement liée au tenseur de conductivité thermique du milieu.

Dispersion thermique. Dans l'équation 2.203, nous pouvons remarquer des termes de dispersion thermique liés à la déviation des vitesses des phases mobiles. Néanmoins, la dispersion thermique pourra être considérée négligeable par rapport aux termes de conduction thermique pure. En effet, comme le présentent Quintard et al. (1997) dans leurs travaux sur les modèles de non-équilibre thermique local, pour des nombres de Péclet thermiques inférieurs à 10, les termes de dispersion thermique sont négligeables par rapport aux termes de conduction. Le nombre de Péclet thermique pour une phase mobile θ est défini par la relation suivante :

$$Pe_{th\theta} = \frac{\rho_{\theta} C_{P\theta} \|\underline{V}_{\theta}\| l}{\Lambda_{\theta}} \quad (3.58)$$

Dans cette expression, l représente la dimension caractéristique des pores.

L'évaluation du nombre de Péclet thermique va nous permettre d'évaluer la nécessité de conserver ou non les termes de dispersion thermique dans le calcul de la conductivité thermique effective. Nous distinguons plusieurs cas de figure. Le premier cas est le cas pendant lequel il n'y a pas de réinjection de lixiviats sous pression. Dans ce cas, nous pouvons estimer que les vitesses des phases mobiles gaz et liquide sont principalement gérées par la force gravitaire et ces vitesses sont du même ordre de grandeur ($\|\underline{V}_{\gamma}\| \approx \|\underline{V}_{\lambda}\| \approx 1 \cdot 10^{-4}$ m/s). Si l'on considère dans ce cas que $\rho_{\gamma} \approx 1$ kg/m³, $C_{P\gamma} \approx 1000$ J/kg/K, $l \approx 0,01$ m et $\Lambda_{\gamma} \approx 0,03$ J/s/m/K et que $\rho_{\lambda} \approx 1000$ kg/m³, $C_{P\lambda} \approx 3000$ J/kg/K, et $\Lambda_{\lambda} \approx 0,03$ J/s/m/K, nous avons :

$$Pe_{th\gamma} \approx 10^{-2} \quad (3.59)$$

$$Pe_{th\lambda} \approx 1 \quad (3.60)$$

Dans le cas où l'on n'injecte pas de lixiviats, les nombres de Péclet thermiques sont donc tels que les termes de dispersion peuvent être négligés puisque, d'après Quintard et al. (1997), les termes de dispersion thermique n'ont d'impact sur les transferts thermiques que pour des nombres de Péclet thermiques supérieurs à 10.

L'autre cas de figure est le cas de l'injection de lixiviats. Lors des périodes de réinjection, il n'est pas rare que les débits injectés, et par conséquent les vitesses mises en jeu, soient importants (entre 5 et 50 m³/h). Nous considérons par exemple une vitesse d'injection de lixiviats de 10⁻¹ m/s. Le nombre de Péclet thermique de la phase liquide étant le plus contraignant, nous ne calculons que celui-ci. On a :

$$Pe_{th\lambda} \approx 100 \quad (3.61)$$

Le nombre de Péclet thermique de la phase liquide est donc supérieur à 10 pendant les périodes d'injection. Il est donc théoriquement nécessaire de prendre en compte la dispersion thermique. Néanmoins, les périodes de réinjection utilisant de forts débits sont relativement courtes. De plus, et surtout, nous ne disposons d'aucune donnée quantitative pour évaluer les termes de dispersion thermique. Par conséquent, les termes de dispersion thermique seront négligés dans une première approche.

Tenseur de conductivité thermique effectif. Le tenseur de conductivité thermique est relativement difficile à obtenir pour des matrices poreuses complexes comme les OM. Tout d'abord, nous considérons qu'il n'existe pas d'anisotropie des propriétés de conductivité thermique et le tenseur de conductivité thermique se réduit alors à un seul coefficient scalaire (cf. 3.62). En effet, même si, comme nous l'avons présenté avec la Figure 3.6, le milieu poreux formé par les OM stockées en ISD présente une anisotropie de ses propriétés physiques entre les directions verticales et horizontales, les contrastes des propriétés de conductivité thermique sont beaucoup moins marqués que les contrastes de perméabilité par exemple. C'est pourquoi nous considérons que le milieu est isotrope du point de vue de ses propriétés thermiques.

$$\underline{\underline{\Lambda_{eff}}} = \begin{pmatrix} \Lambda_{eff} & 0 & 0 \\ 0 & \Lambda_{eff} & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda_{eff} \end{pmatrix} \quad (3.62)$$

Contrairement à d'autres propriétés, il est relativement compliqué d'évaluer la conductivité thermique des OM au sein des ISD puisque la répartition des phases est fortement variable et que la composition du matériau solide l'est aussi. Comme le présente Aran (2001), il existe diverses méthodes permettant de calculer la conductivité thermique des déchets. Les plus répandues sont les méthodes "série" et "parallèle". La première consiste à évaluer la conductivité équivalente en considérant que le déchet est composé d'une succession de couches de solide, de liquide, de gaz et de biofilm et que le flux de chaleur est perpendiculaire à l'empilement ainsi créé. La seconde consiste à considérer que le déchet

est formé du même empilement, mais que le flux de chaleur est cette fois ci parallèle à l'empilement (Yoshida et al., 1997). Ces modèles fournissent des bornes supérieures et inférieures à la conductivité réelle du système (Wiener, 1912). Cependant, la conductivité réelle peut être significativement éloignée de ces bornes, et la seule méthode efficace pour déterminer la conductivité thermique des déchets ménagers est de la mesurer directement via la mise en place d'un dispositif expérimental.

Dans sa thèse, Aran (2001) présente des résultats de mesure de conductivité thermique de deux types de déchets (déchet jeune et déchet âgé) en fonction de la teneur en eau pondérale du déchet. La méthode utilisée pour mesurer la conductivité thermique du déchet est la méthode de la sonde à choc thermique. Les résultats obtenus permettent de porter deux conclusions distinctes. La première est que, quel que soit l'"âge" du déchet, la conductivité thermique augmente avec la teneur en eau. Ceci est logique puisque l'eau possède un fort pouvoir conducteur de chaleur par rapport aux autres constituants. La deuxième conclusion est que les déchets âgés sont moins conducteurs que les déchets jeunes. Ceci paraît étonnant puisque, d'après Miller and Clesceri (2003), les éléments qui composent les fractions rapidement et lentement biodégradables du déchet sont également ceux qui possèdent les conductivités thermiques les plus faibles. La disparition de ces éléments devrait donc conduire à l'augmentation de la conductivité thermique. Une réorganisation avec le temps du déchet peut conduire à une augmentation de la tortuosité thermique, mais des expériences complémentaires sont nécessaires pour confirmer ou invalider cette tendance. Ces mesures nous permettent néanmoins d'obtenir un ordre de grandeur de la conductivité thermique. Celle-ci varie globalement de 0.1 à 1 W.m⁻¹.K⁻¹. Aran (2001) compare ces résultats expérimentaux à la moyenne arithmétique des approches théoriques "série" et "parallèle" et conclut que les résultats obtenus sont finalement assez cohérents.

Dans notre modèle, compte tenu de la faible quantité de mesures de conductivité thermique en fonction de la composition du déchet disponibles dans la littérature, nous utiliserons un modèle de type moyenne arithmétique des conductivités thermiques séries et parallèles (Yoshida et al., 1997). Appelons Λ_{ser} la conductivité thermique équivalente en série et Λ_{par} la conductivité thermique équivalente en parallèle, nous avons :

$$\Lambda_{ser} = (1 - \epsilon - \epsilon_{\beta}) \Lambda_{\sigma} + \epsilon_{\beta} \Lambda_{\beta} + \epsilon S \Lambda_{\lambda} + \epsilon (1 - S) \Lambda_{\gamma} \quad (3.63)$$

$$\Lambda_{par} = \frac{1}{\frac{1-\epsilon-\epsilon_{\beta}}{\Lambda_{\sigma}} + \frac{\epsilon_{\beta}}{\Lambda_{\beta}} + \frac{\epsilon S}{\Lambda_{\lambda}} + \frac{\epsilon(1-S)}{\Lambda_{\gamma}}} \quad (3.64)$$

La conductivité effective Λ_{eff} s'exprime alors de la manière suivante :

$$\Lambda_{eff} = \frac{\Lambda_{ser} + \Lambda_{par}}{2} \quad (3.65)$$

L'utilisation de cette formule nécessite de connaître la conductivité thermique de chacune des phases que nous considérons. C'est l'évaluation de la conductivité thermique de chacune de ces phases que nous présentons par la suite.

Conductivité thermique de la phase gaz. La phase gaz est elle-même un mélange de constituants. L'évaluation des propriétés de transport de chaleur pour les mélanges gazeux est relativement bien décrite dans la littérature et se base sur la théorie cinétique des gaz (Reid et al., 1987). Pour calculer la viscosité du mélange gazeux, nous utilisons l'approche proposée initialement par Wassiljewa (1904) reprise ensuite par de nombreux auteurs comme Mason and Saxena (1958). La formule utilisée pour calculer la conductivité thermique de la phase gaz en fonction de la conductivité thermique des gaz purs est présentée par la relation 3.66.

$$\Lambda_{\gamma} = \frac{\sum_{k=1}^{k=5} \frac{\Lambda_{\gamma k} \Omega_{\gamma k} / M_k}{\sum_{j=1} \Omega_{\gamma j} / M_j A_{ki}} \quad (3.66)$$

$$\text{avec } A_{ki} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_{\gamma k}}{\eta_{\gamma j}} \right)^{1/2} \left(\frac{M_k}{M_i} \right)^{-1/4} \right]^2}{\left[8 \left(1 + \frac{M_k}{M_i} \right) \right]^{1/2}} \quad (3.67)$$

Nous remarquons que cette expression nous permet d'obtenir la conductivité thermique d'un mélange gazeux en fonction de la viscosité $\eta_{\gamma k}$ et des conductivités thermiques $\Lambda_{\gamma k}$ des gaz purs qui composent le mélange. La méthode permettant d'évaluer la viscosité des gaz purs a été présentée précédemment. Il nous reste donc à présenter la méthode par laquelle nous évaluons la conductivité thermique des gaz purs.

Conductivité thermique des gaz purs. La corrélation que nous utilisons pour calculer la conductivité thermique des gaz purs en fonction de la température est celle qui est utilisée par le logiciel Component Plus[®] et qui est basée sur la méthode de Ely and Hanley (1983). Cette corrélation s'exprime de la façon suivante :

$$\Lambda_{\gamma i} = \frac{AT^B}{1 + \frac{C}{T} + \frac{D}{T^2}} \text{ pour } i = N_2, CO_2, CH_4, O_2, H_2O \quad (3.68)$$

Les coefficients A , B , C et D sont spécifiques au gaz pur considéré. Les valeurs de ces coefficients sont données dans le Tableau 3.17.

Conductivité thermique de la phase liquide. Nous considérons que la phase liquide est majoritairement composée d'eau. Nous considérons donc que la conductivité

TAB. 3.17 – Coefficients utilisés pour évaluer la conductivité thermique des gaz purs grâce à l'équation 3.68

Gaz considéré	A	B	C	D
N_2	$3,31 \cdot 10^{-4}$	0,772	16,3	373,7
O_2	$4,45 \cdot 10^{-4}$	0,745	56,7	0
CO_2	3,69	-0,384	964	$1,86 \cdot 10^6$
CH_4	6325	0,43	$7,7 \cdot 10^8$	$-3,872 \cdot 10^{10}$
H_2O	$2,16 \cdot 10^{-3}$	0,768	3940	-445340

thermique de la phase liquide est assimilable à celle de l'eau liquide. Pour calculer la conductivité thermique de la phase liquide, nous utilisons la formule introduite dans le logiciel Component Plus[®] et qui permet de calculer la conductivité thermique de l'eau liquide en fonction de la température (cf. 3.69).

$$\Lambda_\lambda = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 \quad (3.69)$$

L'estimation des coefficients A , B , C , D et E nécessaires à l'évaluation de la conductivité thermique de la phase liquide est présentée dans le Tableau 3.18.

TAB. 3.18 – Coefficients utilisés pour évaluer la conductivité thermique de l'eau liquide grâce à l'équation 3.69

Liquide considéré	A	B	C	D	E
H_2O	-0,432	$5,72 \cdot 10^{-3}$	$-8,07 \cdot 10^{-6}$	$1,86 \cdot 10^{-9}$	0

Conductivité thermique de la phase biofilm. Comme nous l'avons vu précédemment, la phase biofilm est elle aussi majoritairement composée d'eau. Par conséquent, nous considérons que le comportement de la phase biofilm vis-à-vis du transport de chaleur est assimilable à celui de l'eau liquide. La conductivité thermique de la phase biofilm sera donc la même que celle de l'eau liquide.

Conductivité thermique de la phase solide. Pour évaluer la conductivité thermique de la phase solide, Miller and Clesceri (2003) signalent, qu'en première approche, compte tenu du fait qu'aucune information locale sur l'arrangement des particules n'est disponible, il est légitime de considérer que la conductivité thermique de la phase solide est la moyenne de la conductivité thermique de chaque constituant pondérée par la fraction massique de chacun des constituants de la phase solide (cf. équation 3.70).

$$\Lambda_\sigma = \sum_{i \in \sigma} \Omega_{\sigma i} \Lambda_{\sigma i} \quad (3.70)$$

Il nous faut alors évaluer la conductivité thermique des différents éléments du déchet, soit la partie déshydratée de la fraction fermentescible, la fraction papier/carton, la fraction très lentement biodégradable ainsi que la fraction inerte et l'eau constitutive. Le Tableau 3.19 présente les gammes de valeurs que peut prendre la conductivité thermique de chacune des fractions de déchet.

TAB. 3.19 – Conductivité thermique des différents composants de la fraction solide

Fractions du déchet	Conductivité thermique (J/s/m/K)
Fraction rapidement biodégradable (fermentescible)	0,05
Fraction lentement biodégradable (Papier/carton)	0,14
Fraction très lentement biodégradable	0,15-0,3
Eau constitutive	cf. équation 3.69
Fraction inerte (plastique, verre, métaux, etc...)	0,77 (plastiques) - 192 (aluminium)

Les valeurs présentées dans le Tableau 3.19 sont tirées de Miller and Clesceri (2003).

En conclusion, la compréhension détaillée du fonctionnement thermique des déchets ménagers nécessite de réaliser des campagnes de mesures plus systématiques de façon à collecter des données en quantité nécessaire à l'évaluation correcte des coefficients qui gèrent le transport de chaleur au sein des ISD.

3.5 Biodégradation

Compte tenu des objectifs que nous avons fixés lors du développement du modèle conceptuel (cf. Chapitre 1), les termes qui décrivent à la fois la consommation du substrat solide, la consommation de l'oxygène présent dans le milieu ainsi que la production du biogaz (mélange de CO_2 et de CH_4) sont des éléments clés pour la description des ISD. Comme nous l'avons vu dans le Chapitre 1 au paragraphe 1.2.3, une multitude de schémas cinétiques existent pour décrire les processus de biodégradation aérobie et anaérobie, allant du plus simple au plus complexe. Soucieux de simplifier les schémas réactionnels afin d'obtenir un modèle de cinétique de biodégradation le moins contraignant possible du point de vue de l'implémentation numérique, mais également de conserver un niveau minimal de complexité de façon à ne pas utiliser des schémas du type "intégrale première du temps" (cf. Chapitre 1, paragraphe 1.2.3), nous avons pris le parti de mettre en place un programme expérimental (collaboration entre le CRPE, l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse et l'Institut National des Sciences Appliquées) visant à déterminer un

modèle cinétique répondant aux critères que nous venons d'énoncer, et surtout permettant de déterminer l'impact de la teneur en eau locale sur les cinétiques de biodégradation.

3.5.1 Modèles prenant en compte l'effet de la teneur en eau

La motivation principale de ce programme expérimental est le manque de données qualitatives concernant l'influence de la teneur en eau sur les cinétiques de biodégradation aérobies et anaérobies. En effet, même si l'influence de la teneur en eau sur l'activité biologique a largement été mentionnée dans la littérature (cf. Chapitre 1), très peu de modèles de cinétique de biodégradation prennent en compte l'impact de la teneur en eau et les modèles qui intègrent une telle dépendance ne le font pas sur la base de résultats expérimentaux quantitatifs. Nous présentons ici une revue rapide de l'état de l'art concernant l'intégration d'une dépendance à la teneur en eau des modèles de biodégradation aérobies et anaérobies.

Aérobic. Les deux principaux facteurs environnementaux qui influencent l'activité des micro-organismes aérobies sont la température et la teneur en eau du milieu (Liang et al., 2003). Les effets de la température sur les cinétiques de biodégradation aérobies sont bien connus et différentes dépendances à la température sont introduites dans les modèles de biodégradation aérobies présentés dans la littérature. Le lecteur pourra par exemple se référer aux travaux de Saucedo-Castaneda et al. (1990) ou Kaiser (1996). En revanche, comme le présente Mason (2006) dans sa revue concernant la modélisation des cinétiques de biodégradation aérobies, très peu de modèles considèrent l'impact de la teneur en eau sur la biodégradation de la matière organique aérobies. Ceci est dû au fait que l'étape de biodégradation aérobies est en général relativement courte dans les ISD (au plus quelques jours) et que, durant cette période, c'est la fraction rapidement biodégradable du déchet qui est dégradée principalement. Or c'est cette fraction qui est en général la plus humide initialement. Par conséquent, à première vue, il semble souvent que la teneur en eau locale n'a pas d'impact sur la biodégradation aérobies de la matière organique. Nous verrons par la suite, grâce aux résultats expérimentaux que nous présentons, que la teneur en eau a un impact important sur les cinétiques de biodégradation aérobies.

Anaérobic. Concernant les cinétiques de biodégradation anaérobies, nous avons vu dans le Chapitre 1 au paragraphe 1.2.3, que l'influence positive de la teneur en eau locale sur l'activité biologique anaérobies est un facteur clé dans le développement des procédés de type bioréacteur. Néanmoins, comme le présente Pommier et al. (2006), peu de modèles de biodégradation anaérobies prennent en compte la dépendance de la cinétique à la teneur en eau locale. Seuls Mora-Naranjo et al. (2004) analysent l'impact de la teneur en eau sur

l'activité de la biomasse pour des échantillons d'ordures ménagères excavés d'une ISD. Ils ont proposé une dépendance linéaire du taux de croissance spécifique des bactéries méthanogènes à la teneur en eau dans une gamme allant de 15 % à 84% (masse d'eau / masse totale de déchet). Étonnamment, tous les autres paramètres concernant, par exemple, l'étape d'hydrolyse ou de croissance de la population acidogène ne sont pas affectés par la teneur en eau dans ce modèle.

3.5.2 Protocole expérimental et résultats expérimentaux

Le constat que nous avons dressé précédemment nous a incité à mettre en place un programme expérimental visant à déterminer l'impact de la teneur en eau sur les cinétiques de biodégradation des deux classes de déchets rapidement biodégradable et lentement biodégradable définies dans le Tableau 1.2 en conditions aérobie et anaérobie. Ce programme expérimental a été réalisé dans le cadre d'une collaboration entre le CRP, l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse et l'Institut National des Sciences Appliquées. Les expériences ont été réalisées à l'INSA sous le pilotage de X. Lefebvre. La démarche expérimentale ainsi que les résultats bruts sont présentés ci-après. Les résultats de cette collaboration ont fait l'objet de deux publications : Pommier et al. (2007) et Pommier et al. (2006)

3.5.2.1 Caractérisation du déchet

Le programme expérimental est un programme dont la durée initiale est de 1 an. Par conséquent, compte tenu de la lenteur des cinétiques de biodégradation de la fraction très lentement biodégradable, seules les fractions rapidement et lentement biodégradables sont étudiées. L'objectif du programme expérimental étant de rester le plus cohérent possible vis-à-vis des conditions d'exploitation des ISD, le substrat solide qui est utilisé dans les expériences de biodégradation est un déchet réel que l'on a trié. En effet, de façon à respecter une certaine représentativité, les échantillons des fractions rapidement et moyennement biodégradables sont issues d'un tri MODECOM sur un déchet brut entrant sur un site recevant des OM en mars 2005. Le principe de tri et les résultats détaillés sont présentés en Annexe A. La composition massique du déchet trié est présentée sur la figure 3.9. Les fractions papier/carton et fermentescible récupérées sont broyées sous maille de 10 cm. Malheureusement, compte tenu de la structure physique très humide de la fraction fermentescible, le broyat a adhéré aux parois du broyeur industriel et il n'a pas été possible de le récupérer. En revanche, un échantillon de 10L de broyat de la fraction moyennement biodégradable a été préparé et a été utilisé pour les expériences. Toujours dans un souci de représentativité et pour palier à la perte de l'échantillon de fraction

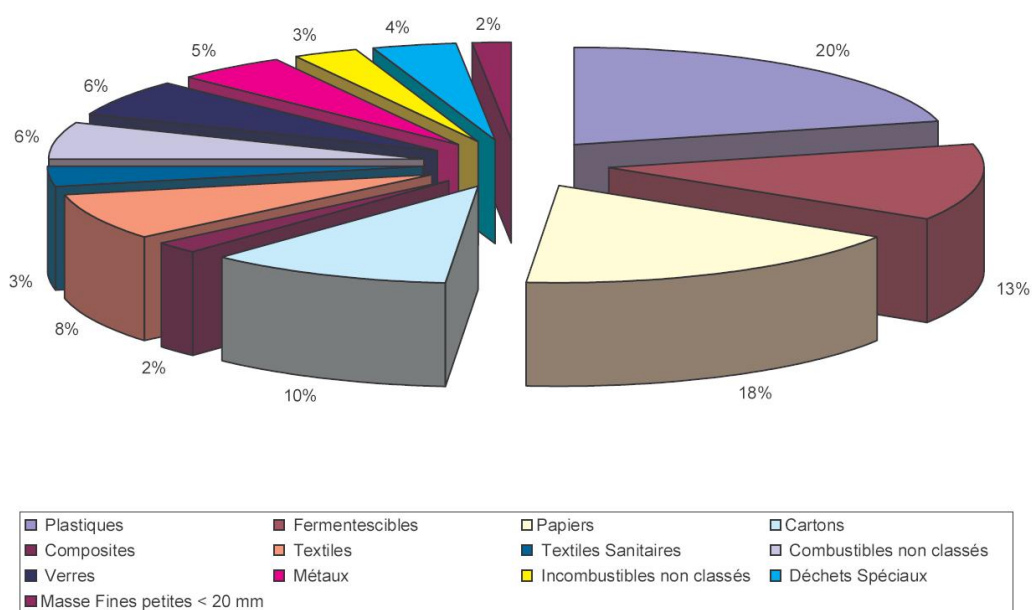


FIG. 3.9 – Répartition des différentes catégories de déchets (% en base humide)

rapidement biodégradable trié sur le site d'Auquemenil, un échantillon de substitution a été préparé en mélangeant de façon équimassique un broyat de déchet alimentaire provenant du restaurant universitaire de l'INSA de Toulouse et un broyat de déchets verts provenant de la plateforme de compostage de Toulouse.

3.5.2.2 Méthode

La démarche expérimentale présente deux volets. Le premier consiste à tester l'impact de la teneur en eau du déchet sur les cinétiques de biodégradation en condition aérobie. Le deuxième consiste, quant à lui, à tester cet impact en condition de biodégradation anaérobie.

Préparation des échantillons. Que ce soit en conditions aérobie ou anaérobie, deux types de substrats solides sont testés :

- fraction fermentescible
- fraction papier/carton

La préparation des échantillons de chacune de ces fractions consiste en une étape de broyage suivie d'un tamisage sous maille de 10 millimètres pour obtenir des échantillons de 10 à 50 grammes homogènes en composition. L'homogénéité de chaque échantillon a été vérifiée en examinant la variation des résultats de l'analyse de la DBO pour 2 échantillons identiques. La différence relative maximale des analyses de DBO pour deux échantillons préparés de la même façon est de 9%, ce qui confirme que la méthode utilisée fournit des

échantillons dont la composition en matière biodégradable varie peu. Les caractéristiques principales des échantillons sont données dans le Tableau 3.20.

TAB. 3.20 – Caractéristiques des échantillons de déchet utilisés dans les expériences aérobies et anaérobies

Fraction de déchet considérée	Alimentaire	Déchets verts	Papier / Carton
Humidité (g / g de déchets)	79	37	19
Capacité au champ (g / g de déchets)	72		66
Acide gras volatiles (g / g de matière sèche)	96	60	66
Cendres (g / g de matière sèche)	4	40	78
DCO (g / g de matière sèche)	1,137	0,541	0,956
DBO ultime (g / g de matière sèche)	0,49	0,49	0,35
COD consommée (%)	60	60	37

Les méthodes de mesure utilisées pour obtenir les données présentées dans le Tableau 3.20 sont détaillées dans Pommier et al. (2007) et Pommier et al. (2006). La capacité au champ correspond à la masse d'eau piégée dans le déchet après imbibition puis drainage gravitaire et la DBO ultime correspond à la fraction de la matière organique qui est biodégradable, alors que la DCO représente la quantité totale de matière organique présente dans l'échantillon (qu'elle soit biodégradable ou non).

Protocole expérimental aérobie. La démarche adoptée est semblable à celle présentée par Kallel et al. (2003) qui comparent la consommation d'oxygène (mesure de la DBO) de déchets jeunes et de déchets anciens à l'aide de tests de laboratoire. Chacun des échantillons de substrat est séché en étuve à 40°C jusqu'à l'obtention d'une teneur en eau massique de 15%. Au cours du séchage, chaque échantillon est régulièrement mélangé afin de favoriser une évaporation uniforme. La température de séchage de 40°C a été choisie de façon à ne pas détruire l'activité biologique indigène de l'échantillon. Au cours de ce séchage, une quantité de matière organique peut être dégradée. Celle-ci est évaluée par un test témoin sans séchage préalable réalisé à une teneur en eau égale à la capacité de rétention. Une fois le séchage réalisé, une masse d'eau est ajoutée pour obtenir des échantillons dont la teneur en eau massique est respectivement de 15%, 33%, 46% et 68% dans le cas des échantillons de déchet rapidement biodégradable et 16%, 28%, 48%, 58% et 69% dans le cas du mélange papier/carton (lentement biodégradable). Ces teneurs en eau sont exprimées en masse d'eau par masse de déchet humide. La solution aqueuse

utilisée contient des nutriments (azote et phosphore) de façon à éviter toute limitation de l'activité biologique par l'apport en nutriments. Chaque échantillon obtenu est divisé en trois parties. La première est utilisée pour mesurer la teneur en eau initiale et les deux autres pour les analyses de DBO.

Les analyses de DBO consistent en une batterie de tests respirométriques. Le principe de ces tests est simple : les différents échantillons de déchet sont placés dans des fioles étanches et thermostatées à 20°C. L'alimentation en oxygène de chaque fiole est contrôlée en temps réel à l'aide d'un appareil de type SAPROMAT® (IBUK Königsbronn, Germany, cf. figure 3.10). Ce type d'appareillage permet donc d'accéder aux cinétiques de



FIG. 3.10 – Appareil SAPROMAT

consommation d'oxygène en mesurant la quantité cumulée d'oxygène consommée lors des réactions de biodégradation du substrat présent dans chacune des fioles. Néanmoins, cette technique impose de travailler avec des échantillons de masse réduite (<40g), d'où la nécessité de préparer des échantillons relativement homogènes (tamisage et broyage) sans altérer de manière significative la cinétique de dégradation. Nous tenons ici à mentionner que la taille caractéristique des déchets, la granulométrie ou tout autre paramètre géométrique peut avoir un impact non négligeable sur les résultats obtenus. Néanmoins, nous n'avons pas réalisé d'étude de sensibilité sur ces paramètres.

Anaérobie. Dans les essais anaérobies, nous considérons les mêmes substrats que ceux que nous avons utilisés pour les essais aérobies. Des échantillons de teneur en eau variable sont préparés par la même méthode que celle présentée précédemment pour chacun des deux substrats. Les teneurs en eau retenues sont 12%, 25%, 39% et 70% pour la fraction fermentescible et 40%, 50%, 60%, 70% et 94% (saturation) pour la fraction papier/carton. Afin de nous placer en conditions non limitantes vis-à-vis de la colonisation bactérienne,

l'apport en eau du déchet est réalisé avec un lixiviat de décharge préalablement stabilisé, c'est-à-dire épuisé de son potentiel méthanogène. Cette stabilisation du lixiviat permet de ne pas "polluer" les mesures de production de biogaz avec l'apport de matière organique éventuellement dissoute dans le lixiviat. La cinétique de dégradation de la matière organique est analysée à travers la cinétique de production de biogaz. La quantité totale de biogaz produite au cours du temps est évaluée à l'aide de l'augmentation de pression dans chaque fiole. Les teneurs en méthane et en dioxyde de carbone dans le biogaz sont, quant à elles, mesurées par analyse chromatographique d'un échantillon de biogaz.

3.5.2.3 Résultats

Dans cette partie, nous présentons les résultats bruts et nous discutons du comportement global des différents échantillons. Dans le cas des tests en condition aérobie, nous nous intéressons à l'évolution de la DBO en fonction du temps alors que dans le cas des tests en condition anaérobie, nous nous intéressons à l'évolution de la production de méthane au cours du temps.

Aérobie.

a) Dégradation aérobie de la fraction papier/carton

La Figure 3.11 représente l'évolution de la demande biologique en oxygène de l'échantillon papier/carton en conditions aérobies. Ces courbes traduisent la consommation d'oxygène par les bactéries présentes dans le déchet au cours du temps.

La première remarque que l'on peut faire est que l'échantillon à 33% d'eau présente un comportement atypique. Il sera donc écarté lors de l'interprétation des résultats.

La deuxième remarque que l'on peut formuler concernant les résultats présentés Figure 3.11 est que chacune des courbes comporte deux périodes d'accélération de la DBO qui ne semblent pas explicables avec les modèles classiques de digestion qui décrivent simplement l'hydrolyse de la matière organique avec une cinétique du premier ordre. En effet, ce type de modèle ne permet pas de prédire la deuxième période d'accélération des cinétiques de biodégradation.

Le contexte particulier du stockage des déchets, nous permet de supposer que le temps de contact d'une couche de déchet (temps de transport compris) avec l'air ambiant est inférieur à 15 jours. En effet, la disposition des déchets dans les alvéoles de stockage se fait par couches successives. De plus, si par hasard l'entrée des déchets sur site venait à être interrompue, les exploitants utilisent généralement une couverture provisoire d'argile (ou autre matériau). Nous considérons donc que 15 jours est la période maximum pendant laquelle les OM stockées en ISD sont en contact avec

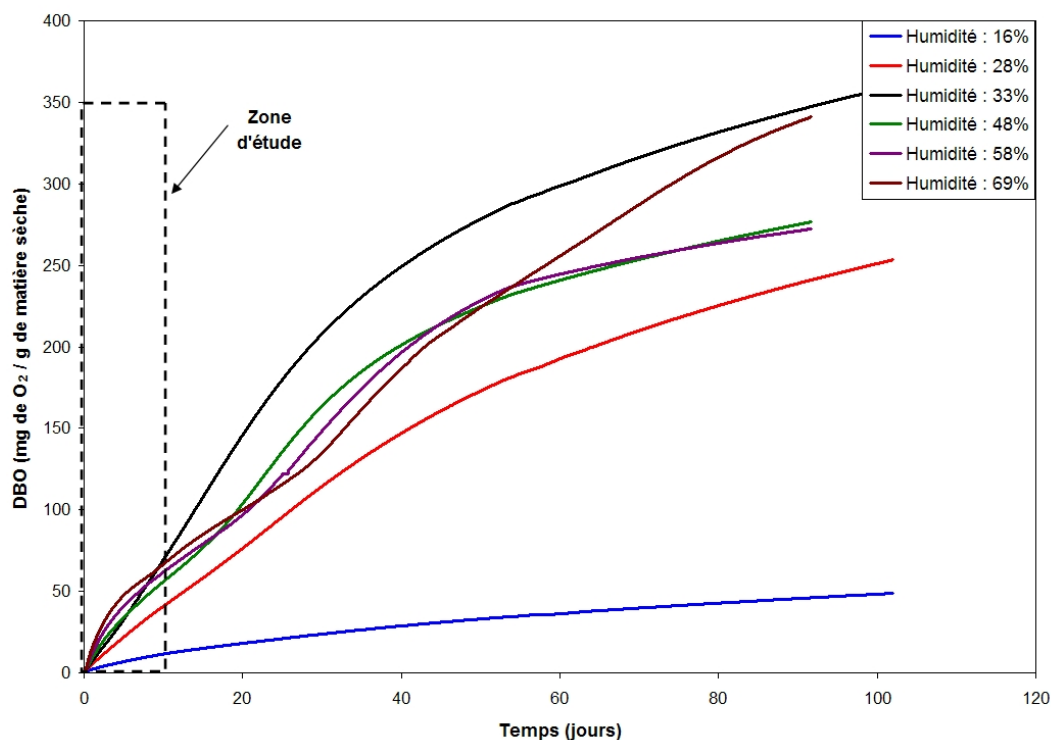


FIG. 3.11 – Tests respirométriques sur la fraction papier/carton pour différentes teneurs en eau

l'oxygène atmosphérique. Par conséquent, l'exploitation des résultats et l'identification des modèles de biodégradation aérobie ne prendront en compte que les données des 15 premiers jours d'expérience. Les données considérées sont présentées sur la Figure 3.11 dans l'encadré décrivant les premiers jours d'expérience.

Sur les 15 premiers jours d'expérience, il convient de remarquer que la cinétique de consommation de l'oxygène augmente avec la teneur en eau de l'échantillon. La teneur en eau initiale a donc un impact positif sur la cinétique de biodégradation.

b) Dégradation aérobie de la fraction fermentescible

La Figure 3.12 présente l'évolution de la consommation d'oxygène (exprimée en DBO) en condition aérobie des différents échantillons de la fraction fermentescible. Seuls trois échantillons ont pu être suivis pour cause de panne de l'un des appareils SAPROMAT[®]. Néanmoins, il convient de remarquer que l'allure des courbes est sensiblement différente de celle obtenue pour la fraction papier/carton puisqu'elles ne présentent pas de point d'inflexion et donc de seconde "accélération" de consommation d'oxygène. De plus, les fractions papier/carton et fermentescible ont des comportements distincts puisqu'en 10 jours, 40% de la fraction fermentescible est dégradée, alors que seulement 10% de la fraction papier/carton l'est.

L'effet de la teneur en eau sur la fraction fermentescible est assez net sur les pre-

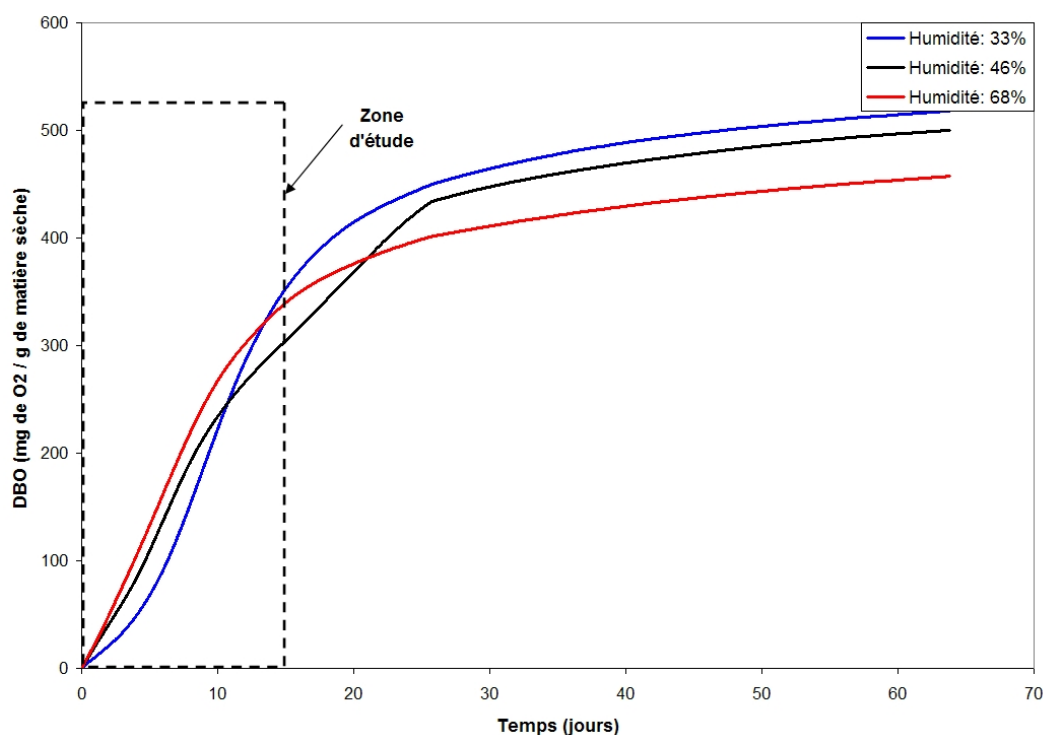


FIG. 3.12 – Tests respirométriques sur la fraction fermentescible

miers jours de test et l'on peut remarquer qu'une augmentation de la teneur en eau engendre à la fois une accélération des cinétiques et de la quantité de matière organique dégradée. Ceci traduit le fait que l'augmentation de la teneur en eau locale engendre une accélération des cinétiques de biodégradation aérobie de la fraction fermentescible. Ensuite, après environ une dizaine de jours, cet effet s'estompe et il n'est plus possible de conclure quant à l'effet de la teneur en eau initiale sur la biodégradation à long terme sur le substrat fermentescible.

Anaérobie.

c) Dégradation anaérobie de la fraction papier/carton

Pour la fraction papier/carton, nous disposons de 7 séries d'essais pour lesquelles la teneur en eau varie : 20%, 30%, 40%, 50%, 60%, 70% et saturation (cas du fond de casier). La cinétique de dégradation de la matière organique est analysée à travers la cinétique de production de méthane. La production de méthane associée à l'inoculum (lixiviat) utilisé pour humidifier le substrat est inférieure à 2% de la production liée à la biodégradation de la matière organique de l'échantillon du déchet. Les résultats présentés sur la Figure 3.13 donnent l'évolution de la production de méthane pour les échantillons de papier/carton dont les teneurs en eau initiales sont 40%, 50%, 60%, 70% et saturation. Le comportement des échantillons dont la teneur en eau

initiale est de 20% et 30% n'est pas présenté puisqu'aucune production de méthane n'a été détectée pour ces échantillons.

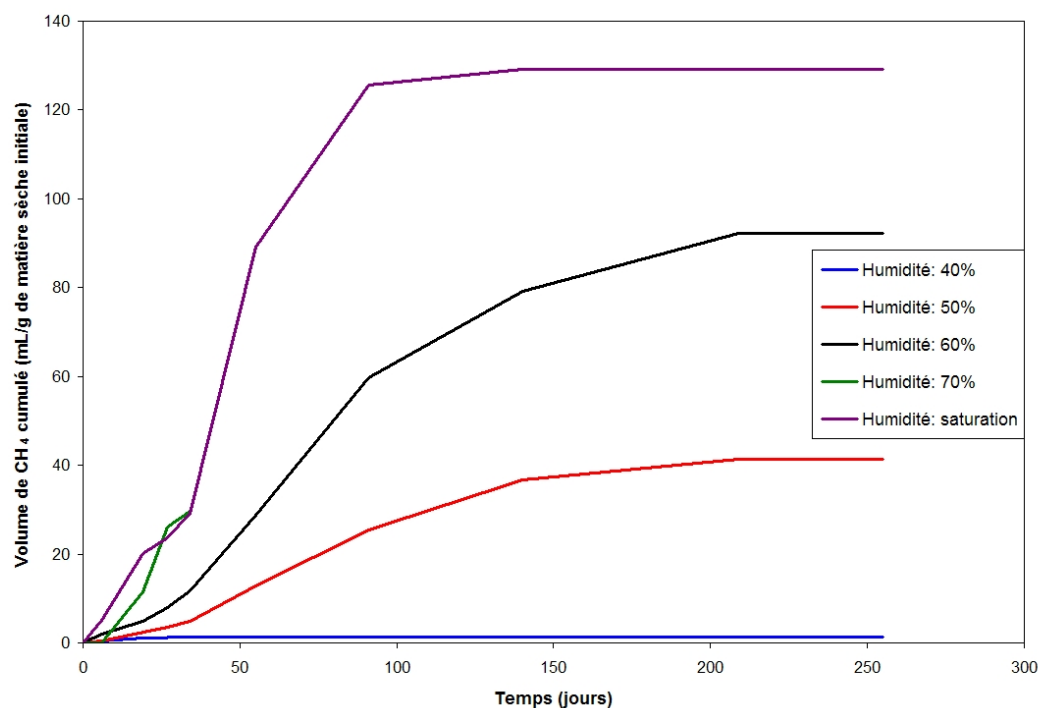


FIG. 3.13 – Effet de l'humidité sur la cinétique de production cumulée de méthane pour la fraction papier /carton

On constate un effet positif de la teneur en eau sur les cinétiques de production de biogaz. En condition saturée, la totalité du substrat biodégradable est consommée en 100 jours. L'impact supposé de la teneur en eau sur l'accélération de la biodégradation anaérobie (cf. Chapitre 1) est donc confirmé par les résultats expérimentaux que nous présentons.

d) Dégradation anaérobie de la fraction fermentescible

Dans le cas de la fraction fermentescible, nous ne disposons pas de données de biodégradation anaérobie. En effet, les essais sur la fraction fermentescible en condition anaérobie posent des problèmes d'acidification. Le pH des échantillons chute rapidement sous l'effet de l'action des bactéries acidogènes ($\text{pH} \approx 5$), ce qui cause l'inhibition de la production de méthane. La durée actuelle des essais est de 140 jours et aucune production de méthane n'est détectée. Ceci s'explique par le fait que, pour la fraction fermentescible du déchet, l'hydrolyse et l'acidogénèse sont très rapides car elles ne sont pas limitées par la disponibilité de la matière organique alors que la méthanogénèse est plus lente. Ceci engendre une accumulation d'acide dans le biofilm. Il s'en suit une inhibition par le pH de l'activité acidogène. Seul un lessi-

vage par une solution tampon ou l'abatement de la quantité de matière organique dans l'échantillon de fraction fermentescible avant la phase anaérobie permettrait de donner des conditions favorables à la reprise de l'activité méthanogène. Nous verrons par la suite que nous prendrons en compte ce type d'inhibition en limitant l'activité anaérobie lorsque des quantités trop importantes de fraction rapidement biodégradable est présente dans le milieu. Ceci traduit le fait que cette fraction est rapidement hydrolysée en acides solubles et favorise ainsi la diminution du pH. Le pH du milieu peut donc être relié à la quantité résiduelle de fraction rapidement biodégradable dans le milieu.

Discussion. Les résultats que nous avons présentés précédemment mettent en évidence une influence globalement positive de la teneur en eau sur la biodégradation aérobie ou anaérobie. Néanmoins, il convient ici d'introduire certains éléments de discussion quant à la validité des résultats obtenus. En effet, les expériences de biodégradation ont eu lieu sur un substrat solide broyé. Or le fait de broyer le substrat peut modifier les propriétés locales (surface spécifique par exemple) de celui-ci et ainsi modifier les cinétiques de biodégradation. Malheureusement, il est assez difficile de mettre en place des dispositifs expérimentaux qui permettent de contrôler de façon précise l'influence de la dimension caractéristique du substrat que l'on considère. C'est pourquoi, par manque d'informations, nous avons considéré ici que la dimension caractéristique du substrat n'a pas d'influence sur les cinétiques de biodégradation.

Un deuxième élément de discussion concerne la répartition de la teneur en eau dans les déchets. En effet, nous avons supposé que la teneur en eau mesurée au début de chacune des expériences de biodégradation donne une indication sur la teneur en eau locale sur l'ensemble de l'échantillon. Ceci suppose que la teneur en eau est répartie de façon homogène au sein du substrat. Or la composition fortement hétérogène des déchets ménagers nous amène à nous interroger sur la validité de cette hypothèse. En particulier, si nous considérons deux substrats homogènes de déchets à teneur en eau identique, qu'advient-il de la teneur en eau locale si l'on met ces deux échantillons en contact ? La teneur en eau moyenne du mélange est alors identique à la teneur en eau initiale de chacun des échantillons, mais il est possible que des différences dans les valeurs de l'activité de l'eau ou de la pression capillaire dans chacun des échantillons aient engendré une migration de l'eau initialement présente dans l'un des échantillons vers le second. Ces questions sont peu abordées dans la littérature et il est pour le moment impossible d'avoir une idée précise sur le comportement de ces matériaux hétérogènes. C'est pourquoi des programmes de recherche sur ce type de problématiques sont actuellement envisagés dans le cadre d'une ANR (BIOPTIME, démarrage en 2007).

3.5.3 Modèle de biodégradation

Les résultats expérimentaux que nous avons présentés précédemment montrent l'impact de la teneur en eau sur l'activité des micro-organismes aérobies et anaérobies. En première approche, il semble que la teneur en eau ait un effet positif à la fois sur la consommation d'oxygène en condition aérobie et sur la production de biogaz en condition anaérobie. Nous souhaitons formaliser ce constat via le développement d'un modèle de biodégradation complet aérobie et anaérobie pour chacune des fractions considérées. L'obtention d'un tel modèle est décrite en détails dans Pommier et al. (2007, 2006); Pommier and Lefebvre (2006a,b).

3.5.3.1 Identification des paramètres

Dans le cas des fractions pour lesquelles nous possédons des données, c'est à dire les fractions fermentescibles et papier/carton dans le cas de la biodégradation aérobie, et la fraction papier/carton uniquement dans le cas de la biodégradation anaérobie, nous développons des modèles de biodégradation à l'aide d'une méthode d'identification paramétrique. Comme le présentent Pommier et al. (2007, 2006), cette méthode consiste à supposer la forme d'un ou plusieurs modèles mathématiques susceptibles de reproduire le comportement des échantillons. Le choix des modèles à tester se fait par l'interprétation des résultats expérimentaux ainsi que par l'analyse des travaux disponibles dans la littérature. Une fois le choix des modèles à tester effectué, il s'agit d'estimer leurs paramètres du modèle mathématique afin qu'ils reproduisent le plus fidèlement possible les résultats expérimentaux. Il s'agit donc d'une approche inverse, puisque l'on cherche à identifier les paramètres constitutifs du modèle descriptif à partir du comportement expérimental des échantillons. L'ensemble des modèles testés en conditions aérobie et anaérobie ainsi que les paramètres qui leurs sont associés sont présentés dans Pommier et al. (2007, 2006).

Soit $Y_{exp}(t)$ la mesure expérimentale de la DBO, ou de la production de méthane suivant le cas, à un instant t de mesure. Soit $\mathbf{Y}_{exp} = \{Y_{exp}(t_1), \dots, Y_{exp}(t_n), \dots, Y_{exp}(t_{n_p})\}$ un certain nombre n_p d'observations $Y_{exp}(t_n)$. Dans notre cas, n_p représente le nombre de points de mesure pour chacune des fioles étudiées. Soit $\mathbf{P} = \{P_1, \dots, P_N\}$ l'ensemble des N paramètres d'entrée du modèle d'équations aux dérivées partielles que nous avons choisi pour décrire conceptuellement les observations $Y_{exp}(t)$. Soit $Y_{sim}^{\Pi}(t_n)$ une solution du système d'équations différentielles aux dérivées partielles du modèle mathématique pour les valeurs de paramètres définis par $\mathbf{P}^{\Pi} = \{P_1^{\Pi}, \dots, P_N^{\Pi}\}$. Le principe de la méthode inverse consiste à évaluer le jeu de paramètres optimal $\mathbf{P}^{\Pi} = \mathbf{P}^{opt}$ à partir des observations expérimentales \mathbf{Y}_{exp} . Cela équivaut à tester un grand nombre de valeurs de Π , jusqu'à en obtenir la valeur optimale. On définit alors une fonction critère que l'on cherche à

minimiser pour définir le jeu de paramètres optimal du modèle. Dans notre cas cette fonction C est définie de la manière suivante :

$$C = \sqrt{\frac{1}{n_{exp}} \sum_{i=1}^{n_{exp}} \left[\frac{1}{n_p(i)} \sum_{i=1}^{n_p(i)} (Y_{exp}(t_i) - Y_{sim}^{\Pi}(t_i))^2 \right]} \quad (3.71)$$

Dans cette expression, n_{exp} représente le nombre de séries d'observations expérimentales dont nous disposons, c'est à dire le nombre de fioles dont les conditions initiales en teneur en eau varient. Il convient ici de noter que, dans notre cas, nous disposons de la seule mesure de DBO dans le cas des expériences aérobies et de production de méthane dans le cas des expériences anaérobies. Or le nombre de degrés de liberté des modèles que nous souhaitons identifier, c'est à dire le nombre de paramètres à identifier est important. Le problème inverse à résoudre est donc largement sur-paramétré. Pour pallier à ce problème, nous avons simplifié le problème d'identification en fixant certains paramètres à l'aide de valeurs connues extraites de la littérature.

Une fois la fonction critère C définie, nous devons utiliser un algorithme d'optimisation afin d'obtenir le jeu de paramètre optimal \mathbf{P}^{opt} . Une grande variété de méthodes numériques d'optimisation existe. Nous ne les détaillons pas ici. Pour traiter le problème d'optimisation, nous utilisons le logiciel Matlab[®] qui dispose de méthodes d'optimisation de type simplex et SQP (Sequential Quadratic Programming) dans sa bibliothèque de fonctions. Pour plus de détails sur ces méthodes, le lecteur pourra se référer à la documentation spécifique des outils d'optimisation de Matlab[®]. Dans notre cas, nous avons choisi la méthode SQP pour résoudre nos problèmes d'optimisation. Les conditions initiales pour l'optimisation sont choisies dans la gamme de valeurs de chaque paramètre que nous espérons obtenir. L'unique contrainte sur les valeurs des paramètres que nous fixons est un encadrement qui traduit leur "réalisme" physique. L'ensemble des résultats d'identification de paramètres peut être consulté dans les références suivantes Pommier et al. (2007, 2006); Pommier and Lefebvre (2006a,b).

3.5.3.2 Description du modèle de biodégradation

Nous présentons ici le modèle mathématique de biodégradation complet. Les modèles de biodégradation aérobie de la fraction fermentescible et de la fraction papier/carton et de biodégradation anaérobie de la fraction papier/carton sont issus du processus d'identification décrit précédemment. En revanche, le modèle de biodégradation de la fraction très lentement biodégradable en conditions aérobie et anaérobie ainsi que le modèle de biodégradation de la fraction fermentescible en condition anaérobie sont des modèles que nous supposons représentatifs et pour lesquels les paramètres sont évalués à partir des

données disponibles dans la littérature. En effet, du fait du manque de données expérimentales concernant ces fractions, aucun processus d'optimisation n'a permis d'identifier les paramètres optimaux des modèles de biodégradation pour ces fractions. Le modèle complet que nous présentons ici est détaillé dans Pommier and Lefebvre (2006b).

Fractionnement du déchet. Nous avons vu dans le Tableau 1.2 que le déchet est fractionné en quatre fractions. Il convient de noter que les fractions organiques rapidement biodégradable, lentement biodégradable et très lentement biodégradable ne sont pas composées à 100% de matière dégradable. En effet, dans chacune de ces fractions, une partie de la matière organique est elle-même inerte biologiquement. Par conséquent, seulement une fraction de la masse de déchet trié est accessible à la biodégradation pour chacune des catégories. Ceci est présenté sur la Figure 3.14. Sur cette figure, X_{RB} représente la fraction

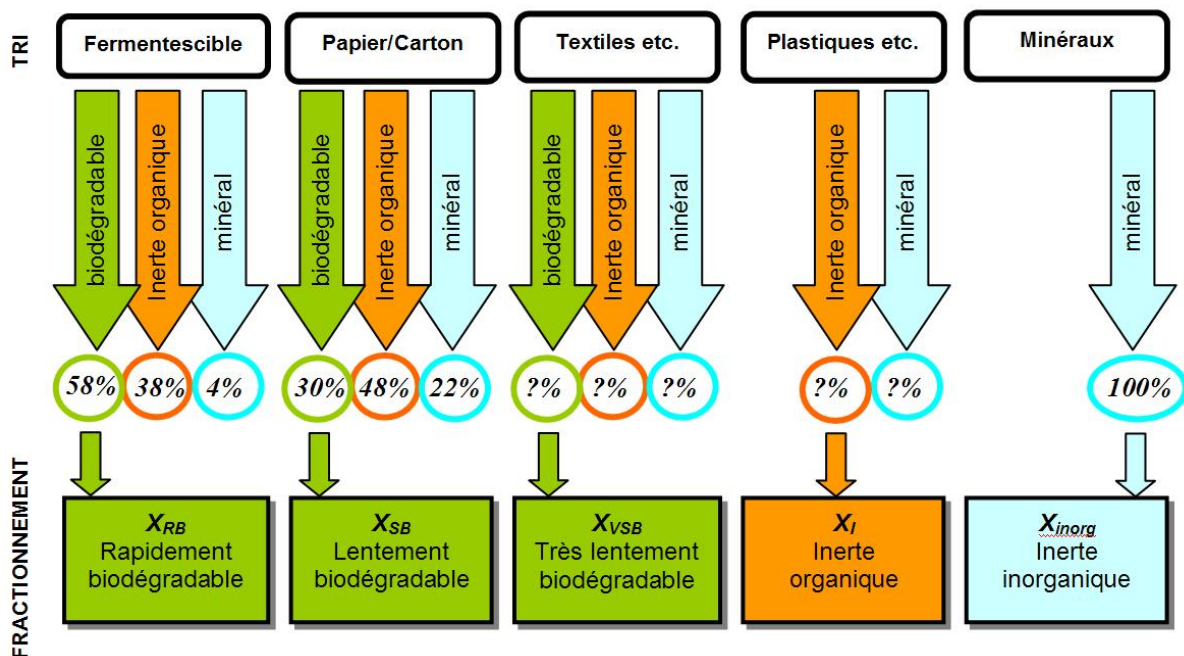


FIG. 3.14 – Obtention du fractionnement de la matière d'après le tri des déchets (base matière sèche)

solide rapidement biodégradable, X_{SB} la fraction du substrat solide lentement biodégradable, X_{VSB} la fraction très lentement biodégradable, et X_I et X_{inorg} représentent les fractions cumulées inertes organiques et inertes minérales. Nous considérerons dans un premier temps que la proportion de matière biodégradable et inerte de la catégorie de tri "Textile, etc..." est la même que celle de la fraction papier/carton.

Modèle retenu. Nous présentons ici le résultat des travaux d'identification et de conceptualisation mathématique du modèle de biodégradation. Ces résultats sont présentés dans

Pommier and Lefebvre (2006b) et nous les adaptions ici de façon à rendre le modèle de biodégradation utilisable dans notre outil de simulation numérique.

En effet, l'interprétation de ces résultats n'est pas triviale puisque la métrologie mise en place dans les dispositifs expérimentaux présentés précédemment ne nous permet pas de distinguer les différents phénomènes qui interviennent dans les différentes phases. Ayant introduit des termes réactifs issus d'un processus de prise de moyenne volumique et compte tenu de la métrologie "globale" mise en place lors des expériences, nous allons considérer que les termes réactifs que nous avons identifiés sont directement assimilables aux termes de production et de consommation moyens.

Les variables d'état prises en compte ici sont les masses volumiques des différents substrats solides. Nous considérons également la masse volumique d'une population de bactéries aérobies et d'une population de bactéries anaérobies. Toutes deux sont supposées adsorbées à la surface de la phase solide via la phase biofilm. Nous considérons également la présence d'eau absorbée au sein de la matrice solide. Nous considérons d'ailleurs que l'eau produite lors de la biodégradation aérobie de la matière organique est absorbée dans la phase solide. Cette eau est non mobile dans un premier temps mais participe pleinement à l'activation ou la désactivation des processus de biodégradation. Les termes de production et de consommation des espèces gazeuses sont directement reliés aux termes de consommation du substrat via la stoechiométrie des réactions de biodégradation. L'ensemble des variables que nous traitons est représentée dans le Tableau 3.21.

TAB. 3.21 – Liste des variables d'état à considérer dans le modèle global de biodégradation

Nom de la variable	Unité	Signification
$\hat{\rho}_{RB}$	(kg/m ³)	Masse volumique du substrat organique solide rapidement biodégradable
$\hat{\rho}_{SB}$	(kg/m ³)	Masse volumique du substrat organique solide lentement biodégradable
$\hat{\rho}_{VSB}$	(kg/m ³)	Masse volumique du substrat organique solide très lentement biodégradable
$\hat{\rho}_I$	(kg/m ³)	Masse volumique des particules inertes organiques
$\hat{\rho}_a$	(kg/m ³)	Masse volumique de la population aérobie hétérotrophe
$\hat{\rho}_m$	(kg/m ³)	Masse volumique de la population anaérobie
$\hat{\rho}_R$	(kg/m ³)	Masse volumique du substrat organique soluble rapidement biodégradable
$\hat{\rho}_{H_2O}$	(kg/m ³)	Masse volumique de l'eau solide

Dans le modèle de biodégradation retenu, le devenir de chaque fraction du substrat organique solide introduit dans le centre de stockage est modélisé par un schéma simplifié comprenant 11 processus élémentaires (cf. Figure 3.15) que l'on peut regrouper en deux

catégories distinctes :

- Les processus aérobies, actifs lorsque le déchet est en contact avec l'oxygène de l'air ambiant (essentiellement pendant les premiers jours lorsqu'il n'est pas recouvert par une nouvelle couche de déchets)
- Les processus anaérobies, actifs lorsque le déchet est privé d'oxygène (une fois qu'il est recouvert par une nouvelle couche de déchets)

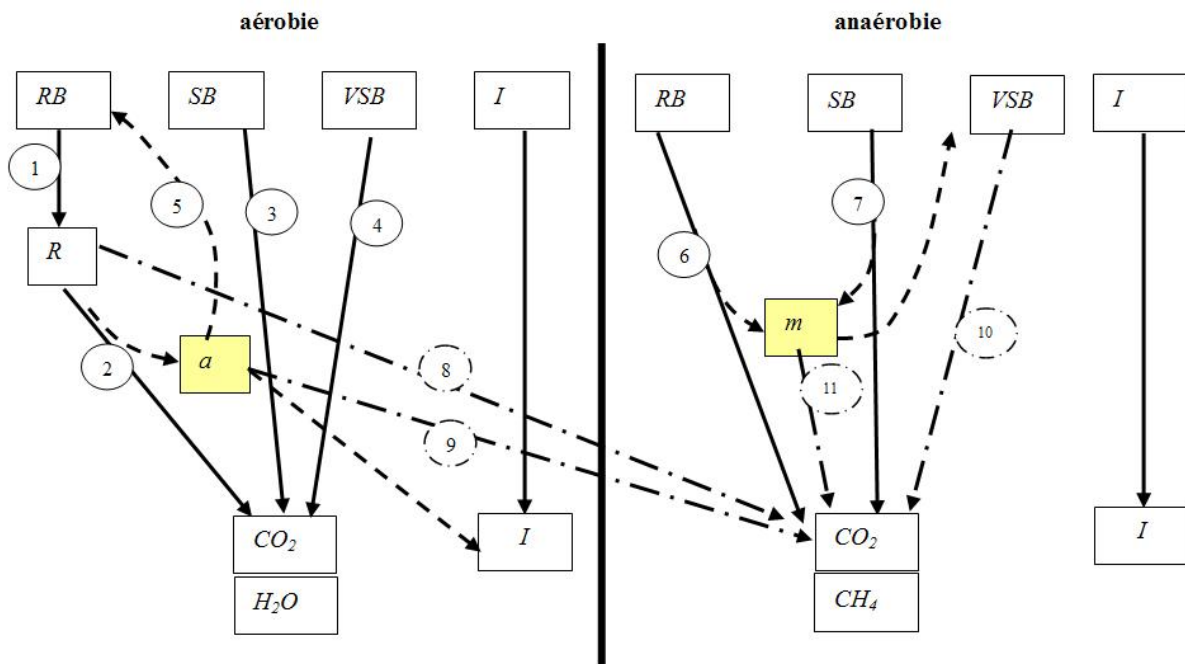


FIG. 3.15 – Schéma réactif de l'ensemble des processus de biodégradation considérés

Le modèle proposé pour décrire la phase aérobie s'appuie sur des expériences de biodégradation réalisées à l'INSA de Toulouse, sur des échantillons de déchets organiques fermentescibles représentatifs de la fraction rapidement biodégradable (déchets fermentescibles) et de la fraction lentement biodégradable (papier/carton). Le modèle identifié à partir de ces expériences est présenté et discuté dans Pommier et al. (2007). Ces travaux insistent particulièrement sur l'influence de l'humidité du déchet sur les cinétiques observées.

La cinétique de dégradation de la fraction fermentescible (c'est-à-dire rapidement biodégradable) est représentée par un modèle en deux étapes : d'abord une hydrolyse du substrat solide RB (cinétique d'ordre 1 par rapport au substrat, cf. processus 1 sur la Figure 3.15), puis une croissance microbienne utilisant le substrat soluble R produit par l'hydrolyse (processus 2 sur la Figure 3.15, mettant en jeu une population microbienne a). Le déclin de la population aérobie est pris en compte (processus 5 sur la Figure 3.15) et la biomasse "morte" est supposée avoir les caractéristiques d'un substrat solide rapidement

biodégradable RB .

La croissance microbienne est supposée non limitante et négligeable pour la biodégradation aérobie des fractions lentement (SB) et très lentement biodégradables (VSB). Par conséquent, la population microbienne aérobie, a , n'intervient pas dans les bilans pour ces processus. Ils sont modélisés par une simple hydrolyse d'ordre 1 par rapport au substrat considéré (processus 3 et 4 sur la Figure 3.15). Les cinétiques diffèrent par la valeur de leur constante d'hydrolyse, plus élevée pour la fraction SB que pour la fraction VSB . Cela suggère également que la croissance de la population a consommant la fraction rapidement biodégradable n'influencera pas les cinétiques de dégradation de SB et VSB .

En ce qui concerne la modélisation des processus de biodégradation anaérobie, la plupart des modèles de digestion anaérobie tentent de donner une description détaillée des mécanismes de bioconversion de la matière, considérant de nombreuses populations microbiennes et de multiples produits réactionnels intermédiaires (cf. Chapitre 1, paragraphe 1.2.3). Cependant, le nombre de données expérimentales sur les processus considérés par ces modèles est très limité et ne permet pas une identification paramétrique fiable. Ces modèles sont ainsi globalement surparamétrés et par conséquent difficiles à mettre en place et à manipuler. Un modèle logistique a été testé et validé, conciliant le niveau de description des principaux phénomènes et l'identifiabilité des paramètres. Le modèle logistique est un modèle mathématique très connu et très développé en biologie pour décrire les dynamiques des populations en interaction. Il traduit en particulier le double paradigme de la croissance exponentielle des populations et de son impossibilité à long terme introduit par le célèbre Thomas Robert Malthus en 1798. Le premier à formaliser ce type de modèle et à l'appliquer aux populations biologiques est Verhulst (1845). Ces résultats sont présentés dans Pommier et al. (2006). Ce modèle a été développé dans l'objectif de fournir de bonnes prédictions des quantités de biogaz produit et de matière organique consommée au cours de la phase de biodégradation anaérobie, en prenant en compte l'humidité et la température du déchet considéré. Il propose une approche simplifiée des mécanismes, permettant de limiter le nombre de paramètres à identifier. Il est basé sur les hypothèses suivantes :

- 1) Une seule population microbienne anaérobie (m) est responsable de la biotransformation du déchet en biogaz (processus 6 et 7 sur la Figure 3.15)
- 2) Le taux de croissance de cette population tient compte implicitement de différents mécanismes limitants (hydrolyse des substrats solides, production de produits intermédiaires variés tels les acides gras volatils ou l'hydrogène, etc...)
- 3) On néglige l'activité endogène de la population considérée, en raison du faible rendement de production de biomasse au cours des processus anaérobies (autour de 5%) et de la très faible constante de décès associée au processus de lyse bactérienne.

Le taux de croissance spécifique de la population anaérobie est supposé identique quel que soit le substrat considéré (les seules données expérimentales proviennent de la fraction papier/carton). En effet les essais menés sur la fraction fermentescible ont, quelles que soient les conditions, mis en évidence l'apparition immédiate de toxicité par acidification.

Pour la fraction très lentement biodégradable (*VSB*), on considère que la croissance n'est pas limitante. On ne fait par conséquent pas intervenir de population microbienne, mais on modélise la dégradation anaérobie de cette fraction par un simple terme d'hydrolyse d'ordre 1 (processus 10 sur la Figure 3.15).

La dégradation du substrat organique soluble *R* éventuellement accumulé pendant la phase aérobie est représentée par un modèle cinétique de type Monod, considérant une limitation par le substrat *R* (processus 9 sur la Figure 3.15).

Dans un souci de cohérence du modèle, un terme de déclin de la population anaérobie de type hydrolyse d'ordre 1 a été inséré (processus 11 sur la Figure 3.15). En pratique, la valeur de la constante d'hydrolyse associée à ce processus doit être choisie très faible (inférieure à 10^{-4} jour $^{-1}$).

3.5.3.3 Mise en équation du modèle retenu

Dans cette partie, nous présentons la forme des termes réactifs que nous introduisons dans le modèle. Les équations obtenues sont basées sur le modèle de biodégradation décrit dans le paragraphe précédent. Pour obtenir ces relations en utilisant le formalisme présenté dans Pommier and Lefebvre (2006b), nous supposons que les substrats solides *RB*, *SB*, *VSB* sont assimilés à de la cellulose et que l'intermédiaire soluble *R* est assimilé à du glucose. L'ensemble des paramètres que nous introduisons ici sera explicité par la suite. Les valeurs de l'ensemble des facteurs introduits dans les relations que nous présentons par la suite sont réunies en Annexe B.

Biodégradation du substrat rapidement biodégradable *RB*. La relation 3.72 présente le terme de consommation de la fraction rapidement biodégradable du substrat solide.

$$\begin{aligned} \epsilon_{\beta} R_{\beta RB} = & - \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^R k_{H,R} \hat{\rho}_{RB} + (1 - f_{I,aero}) \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^a b \frac{0,844}{0,706} \hat{\rho}_a \\ & - \frac{1}{Y_m} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^R \psi_{RB} \mu_{max, RB}^m \frac{0,844}{0,706} \hat{\rho}_m \left(1 - \frac{\hat{\rho}_{RB0} - \hat{\rho}_{RB}}{\tau_m^R \hat{\rho}_{RB0}} \right) \end{aligned} \quad (3.72)$$

Biodégradation du substrat lentement biodégradable SB . La relation 3.73 présente le terme de consommation de la fraction lentement biodégradable du substrat solide.

$$\begin{aligned} \epsilon_\beta R_{\beta SB} = & - \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^{SB} k_{H,S} \hat{\rho}_{SB} \\ & - \frac{1}{Y_m} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{SB} \psi_{RB} \mu_{max,SB}^m \frac{0,844}{0,706} \hat{\rho}_m \left(1 - \frac{\hat{\rho}_{SB0} - \hat{\rho}_{SB}}{\tau_m^{SB} \hat{\rho}_{SB0}} \right) \end{aligned} \quad (3.73)$$

Biodégradation du substrat très lentement biodégradable VSB . La relation 3.74 présente le terme de consommation de la fraction très lentement biodégradable du substrat solide.

$$\begin{aligned} \epsilon_\beta R_{\beta VSB} = & - \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^{VSB} k_{H,VS} \hat{\rho}_{VSB} \\ & - \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{VSB} \psi_{RB} k_{Han,VSB} \hat{\rho}_{VSB} \end{aligned} \quad (3.74)$$

Création aérobie et anaérobie de matière solide organique inerte. La relation 3.75 présente le terme que nous utilisons afin de prendre en compte qu'une partie de la mortalité des bactéries aérobies et anaérobies conduit à la formation de matière inerte.

$$\begin{aligned} \epsilon_\beta R_{\beta I} = & f_{I,aero} \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^a b \frac{0.844}{0.706} \hat{\rho}_a \\ & + f_{I,anaero} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{VSB} \psi_{RB} k_{Han,VSB} \hat{\rho}_{VSB} \\ & + f_{I,anaero} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^m \psi_{RB} k_{Han,X_m} \frac{0,844}{0,706} \hat{\rho}_m \end{aligned} \quad (3.75)$$

Croissance de la population aérobie. Le terme de croissance de la population aérobie est présenté par l'équation 3.76.

$$\begin{aligned} \epsilon_\beta R_{\beta a} = & \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^R \mu_{max}^a \frac{\hat{\rho}_R}{0.9375 \rho_{IDM} K_{SR} + \hat{\rho}_R} \hat{\rho}_a - \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^a b \hat{\rho}_a \\ & - \frac{1}{Y_m} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{X_a} \psi_{RB} \mu_{max,X_a}^m \hat{\rho}_m \left(1 - \frac{\hat{\rho}_{a0} - \hat{\rho}_a}{\tau_m^{X_a} \hat{\rho}_{a0}} \right) \end{aligned} \quad (3.76)$$

Croissance de la population anaérobie. Le terme de croissance de la population anaérobie est présenté par l'équation 3.77.

$$\begin{aligned} \epsilon_\beta R_{\beta m} = & \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^R \psi_{RB} \mu_{max,RB}^m \hat{\rho}_m \left(1 - \frac{\hat{\rho}_{RB0} - \hat{\rho}_{RB}}{\tau_m^R \hat{\rho}_{RB0}} \right) \\ & + \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{SB} \psi_{RB} \mu_{max,SB}^m \hat{\rho}_m \left(1 - \frac{\hat{\rho}_{SB0} - \hat{\rho}_{SB}}{\tau_m^{SB} \hat{\rho}_{SB0}} \right) \\ & + \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{X_a} \psi_{RB} \mu_{max,X_a}^m \hat{\rho}_m \left(1 - \frac{\hat{\rho}_{a0} - \hat{\rho}_a}{\tau_m^{X_a} \hat{\rho}_{a0}} \right) \\ & - \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^m \psi_{RB} k_{Han,X_m} \hat{\rho}_m \end{aligned} \quad (3.77)$$

Formation et consommation de substrat organique soluble. Le terme décrivant la formation et la consommation du substrat organique soluble R est présenté par l'équation 3.78.

$$\begin{aligned} \epsilon_{\beta} R_{\beta R} = & \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^R k_{H,R} \frac{0.9375}{0.844} \hat{\rho}_{RB} \\ & - \frac{1}{Y_a} \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^R \mu_{max}^a \frac{\hat{\rho}_R}{0.9375 \rho_{IDM} K_{S_R} + \hat{\rho}_R} \frac{0.9375}{0.706} \hat{\rho}_a \\ & - \frac{1}{Y_m} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{SR} \psi_{RB} \mu_{max,SR}^m \frac{0.9375}{0.706} \hat{\rho}_m \frac{\hat{\rho}_R}{0.9375 \rho_{IDM} K_{m,S_R} + \hat{\rho}_R} \end{aligned} \quad (3.78)$$

Consommation d'oxygène en phase aérobie. La consommation d'oxygène présent dans le milieu poreux est décrite par la relation 3.79

$$\begin{aligned} \epsilon_{\beta} R_{\beta O_2} = & - \frac{1 - Y_a}{Y_a} \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^R \mu_{max}^a \frac{\hat{\rho}_R}{0.9375 \rho_{IDM} K_{S_R} + \hat{\rho}_R} \frac{1}{0.706} \hat{\rho}_a \\ & - \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^{SB} k_{H,S} \frac{1}{0.844} \hat{\rho}_{SB} \\ & - \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^{VSB} k_{H,VS} \frac{1}{0.844} \hat{\rho}_{VSB} \end{aligned} \quad (3.79)$$

Production d'eau en phase aérobie. Le terme de production d'eau s'exprime de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \epsilon_{\beta} R_{\beta H_2O} = & \frac{Y_{\omega/S_R}}{Y_a} \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^R \mu_{max}^a \frac{\hat{\rho}_R}{0.9375 \rho_{IDM} K_{S_R} + \hat{\rho}_R} \frac{1}{0.706} \hat{\rho}_a \\ & + Y_{\omega/X_{SB}} \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^{SB} k_{H,S} \frac{1}{0.844} \hat{\rho}_{SB} \\ & + Y_{\omega/X_{VSB}} \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^{VSB} k_{H,VS} \frac{1}{0.844} \hat{\rho}_{VSB} \end{aligned} \quad (3.80)$$

Production de méthane en phase anaérobie. Le terme de production de méthane s'exprime de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \epsilon_{\beta} R_{\beta CH_4} = & \frac{1 - Y_m}{Y_m} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^R \psi_{RB} \mu_{max,RB}^m \frac{0,25}{0,706} \hat{\rho}_m \left(1 - \frac{\hat{\rho}_{RB0} - \hat{\rho}_{RB}}{\tau_m^R X \hat{\rho}_{RB0}} \right) \\ & + \frac{1 - Y_m}{Y_m} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{SB} \psi_{RB} \mu_{max,SB}^m \frac{0,25}{0,706} \hat{\rho}_m \left(1 - \frac{\hat{\rho}_{SB0} - \hat{\rho}_{SB}}{\tau_m^{SB} \hat{\rho}_{SB0}} \right) \\ & + \frac{1 - Y_m}{Y_m} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{X_a} \psi_{RB} \mu_{max,X_a}^m \frac{0,25}{0,706} \hat{\rho}_m \left(1 - \frac{\hat{\rho}_{a0} - \hat{\rho}_a}{\tau_m^{X_a} \hat{\rho}_{a0}} \right) \\ & + \frac{1 - Y_m}{Y_m} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{SR} \psi_{RB} \mu_{max,SR}^m \frac{0,25}{0,706} \hat{\rho}_m \frac{\hat{\rho}_R}{0,9375 \rho_{IDM} K_{m,S_R} + \hat{\rho}_R} \\ & + (1 - f_{I,anaero}) \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{VSB} \psi_{RB} k_{Han,VSB} \frac{0,25}{0,844} \hat{\rho}_{VSB} \end{aligned}$$

$$+ (1 - f_{I,anaero}) \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^m \psi_{RB} k_{Han,X_m} \frac{0,25}{0,706} \hat{\rho}_m \quad (3.81)$$

Production de dioxyde de carbone pendant les périodes aérobies et anaérobies.

Le terme de production de dioxyde de carbone est présenté par l'équation 3.82.

$$\begin{aligned} \epsilon_\beta R_\beta CO_2 = & \frac{Y_{CO_2/S_R}}{Y_a} \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^R \mu_{max}^a \frac{\hat{\rho}_R}{0,9375 \rho_{IDM} K_{S_R} + \hat{\rho}_R} \frac{1}{0,706} \hat{\rho}_a \\ & + Y_{CO_2/X_{SB}} \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^{SB} k_{H,S} \frac{1}{0,844} \hat{\rho}_{SB} \\ & + Y_{CO_2/X_{VSB}} \varphi_{O_2} \gamma_T^a \tau_a^{VSB} k_{H,VS} \frac{1}{0,844} \hat{\rho}_{VSB} \\ & + Y_{CO_2/CH_4}^{RB} \frac{1 - Y_m}{Y_m} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^R \psi_{RB} \mu_{max,RB}^m \frac{1}{0,706} \hat{\rho}_m \left(1 - \frac{\hat{\rho}_{RB0} - \hat{\rho}_{RB}}{\tau_m^R \hat{\rho}_{RB0}} \right) \\ & + Y_{CO_2/CH_4}^{SB} \frac{1 - Y_m}{Y_m} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{SB} \psi_{RB} \mu_{max,SB}^m \frac{1}{0,706} \hat{\rho}_m \left(1 - \frac{\hat{\rho}_{SB0} - \hat{\rho}_{SB}}{\tau_m^{SB} \hat{\rho}_{SB0}} \right) \\ & + Y_{CO_2/CH_4}^{X_a} \frac{1 - Y_m}{Y_m} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{X_a} \psi_{RB} \mu_{max,X_a}^m \frac{1}{0,706} \hat{\rho}_m \left(1 - \frac{\hat{\rho}_{a0} - \hat{\rho}_a}{\tau_m^{X_a} \hat{\rho}_{a0}} \right) \\ & + Y_{CO_2/CH_4}^{SR} \frac{1 - Y_m}{Y_m} \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{SR} \psi_{RB} \mu_{max,SR}^m \frac{1}{0,706} \hat{\rho}_m \frac{\hat{\rho}_R}{0,9375 \rho_{IDM} K_{m,S_R} + \hat{\rho}_R} \\ & + Y_{CO_2/CH_4}^{VSB} (1 - f_{I,anaero}) \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^{VSB} \psi_{RB} k_{Han,VSB} \frac{1}{0,844} \hat{\rho}_{VSB} \\ & + Y_{CO_2/CH_4}^m (1 - f_{I,anaero}) \eta_{O_2} \gamma_T^m \tau_m^m \psi_{RB} k_{Han,X_m} \frac{1}{0,706} \hat{\rho}_m \quad (3.82) \end{aligned}$$

Production de chaleur pendant les périodes aérobies et anaérobies. Le terme de production d'énergie au cours des processus de biodégradation est représenté par l'équation 3.83.

$$\epsilon_\beta \langle \psi \rangle^\beta = -460.10^3 \frac{\epsilon_\beta R_\beta O_2}{M_{O_2}} + 45.10^3 \frac{\epsilon_\beta R_\beta CH_4}{M_{CH_4}} \quad (3.83)$$

Cette équation traduit le fait que les réactions de biodégradation sont exothermiques (principalement en conditions aérobies). Selon Aguilar-Juarez (2000), la production de chaleur est évaluée à 460 kJ par mole d'oxygène consommée dans le cas de la biodégradation aérobie et à 45 kJ par mole de méthane produite dans le cas de la biodégradation anaérobie.

3.5.3.4 Explicitation des termes de limitation

Nous explicitons dans cette partie l'ensemble des termes de limitation des cinétiques de biodégradation que nous avons introduits dans les relations 3.72 à 3.82.

Limitation des processus aérobies par la raréfaction de l'oxygène ambiant.

L'influence de la quantité d'oxygène disponible sur la cinétique de biodégradation aérobie est représentée par le facteur correctif φ_{O_2} (cf. Aguilar-Juarez (2000)). L'expression de ce terme correctif est présentée par l'équation 3.84.

$$\varphi_{O_2} = \frac{P_{\gamma O_2}}{K_{O_2} + P_{\gamma O_2}} \quad (3.84)$$

Dans cette expression, $P_{\gamma O_2}$ représente la pression partielle en oxygène et s'exprime en Pa et K_{O_2} représente la constante d'affinité apparente de la population aérobie pour l'oxygène et s'exprime également en Pa. La fonction φ_{O_2} permet de décrire une décroissance progressive et continue de l'activité aérobie lors de la raréfaction de l'oxygène présent. Le facteur de limitation par l'oxygène, φ_{O_2} , s'applique à tous les processus aérobies. Dans les travaux de Aguilar-Juarez (2000), la constante K_{O_2} a été évaluée à $2 \cdot 10^3$ Pa dans les conditions normales de température et de pression.

Inhibition des processus anaérobies par la présence d'oxygène. Les processus anaérobies n'interviennent pas en présence d'oxygène. Cette inhibition est prise en compte par le terme η_{O_2} . Celui-ci permet de prendre en compte une inhibition progressive des processus anaérobies en fonction de la concentration locale en oxygène. La fonction η_{O_2} est appliquée à tous les processus élémentaires anaérobies. La fonction η_{O_2} s'exprime de la façon suivante :

$$\eta_{O_2} = \begin{cases} 1 & \text{si } P_{\gamma O_2} < P_{\gamma O_2, max} \\ \frac{K_{I, O_2}}{K_{I, O_2} + (P_{\gamma O_2} - P_{\gamma O_2, max})} & \text{si } P_{\gamma O_2} \geq P_{\gamma O_2, max} \end{cases} \quad (3.85)$$

Dans cette expression, $P_{\gamma O_2}$ représente la pression partielle en oxygène et s'exprime en Pa, $P_{\gamma O_2, max}$ représente la fraction partielle en oxygène maximale en deçà de laquelle la présence d'oxygène n'inhibe pas la biodégradation anaérobie et K_{I, O_2} représente la constante d'inhibition par l'oxygène des processus anaérobies et s'exprime également en Pa.

Impact de l'humidité du déchet. Comme on a pu le voir sur les résultats expérimentaux présentés dans les paragraphes précédents, la teneur en eau locale joue un rôle primordial dans l'efficacité des processus biologiques de dégradation, tant en condition aérobie qu'en condition anaérobie. Ceci s'explique par le fait que l'eau est l'un des éléments fondamentaux nécessaires à l'activité microbienne. Comme le présente Pommier and Lefebvre (2006b), on choisit de caractériser l'humidité du déchet considéré par la teneur relative en eau, θ , c'est à dire la masse d'eau par rapport à la masse de solide sec.

θ s'exprime de la façon suivante :

$$\theta = \frac{\hat{\rho}_{H_2O}}{\hat{\rho}_{RB} + \hat{\rho}_{SB} + \hat{\rho}_{VSB} + \hat{\rho}_I + \hat{\rho}_a + \hat{\rho}_m + \hat{\rho}_R} \quad (3.86)$$

Ici θ s'exprime en $g(H_2O)/g(\text{matière sèche})$.

La teneur en eau est susceptible d'évoluer par deux phénomènes distincts : la production biologique d'eau au cours des processus biologiques aérobies et l'apport d'eau lié à la recirculation forcée de lixiviats au sein du bioréacteur.

Les réactions de dégradation aérobies s'accompagnent d'une production d'eau. Les molécules organiques biodégradables d'un déchet sont souvent assimilées à la cellulose ou au glucose. Un bilan stoechiométrique nous permet donc de déterminer la quantité d'eau produite lors de la consommation d'oxygène. On considérera que la biodégradation aérobie produit 0,47 gramme d'eau par gramme d'oxygène consommé (cf. Annexe B). Cette valeur a été validée par des bilans de masse sur les essais de biodégradation de la fraction papier/carton et sur la fraction fermentescible en condition aérobie (Pommier et al., 2007).

L'impact de la teneur en eau sur les cinétiques de réaction est largement discuté dans les travaux de Pommier et al. (2006, 2007). La cinétique de chaque processus est pondérée par un facteur τ_i^j traduisant l'influence de la teneur en eau sur les processus de biodégradation.

Pour chaque fraction biodégradable j et pour les phases aérobies ($i = a$) et anaérobie ($i = m$), la forme du coefficient de pondération en fonction de la teneur relative en eau est représentée par la relation 3.87 (voir aussi Figure 3.16).

$$\tau_i^j = \begin{cases} 0 & \text{si } \theta < \theta_{\min}^{i,j} \\ \frac{\theta - \theta_{\min}^{i,j}}{\theta_R^j - \theta_{\min}^{i,j}} & \text{si } \theta_R^j > \theta > \theta_{\min}^{i,j} \\ 1 & \text{si } \theta \geq \theta_R^j \end{cases} \quad (3.87)$$

Dans cette équation, $\theta_{\min}^{i,j}$ est la teneur en eau minimale en dessous de laquelle aucune activité n'est possible et θ_R^j est la capacité de rétention du substrat solide, c'est-à-dire la teneur maximale en eau au-delà de laquelle l'activité est constante et maximale.

Le facteur τ_i^j intervient sur la cinétique des processus, et il modifie également le potentiel maximal de production de biogaz (effet sur la quantité maximale de biogaz produit).

Les valeurs critiques d'humidité sont présentées dans le Tableau 3.22

Dans le cadre de nos travaux, nous proposons les simplifications suivantes : $\theta_{\min}^{a,SB} = \theta_{\min}^{a,VSB}$, $\theta_{\min}^{a,R} = \theta_{\min}^{a,a}$ et $\theta_{\min}^{m,SB} = \theta_{\min}^{m,VSB} = \theta_{\min}^{m,a} = \theta_{\min}^{m,m}$

De plus, les valeurs critiques pour le substrat soluble R sont prises égales à celles du

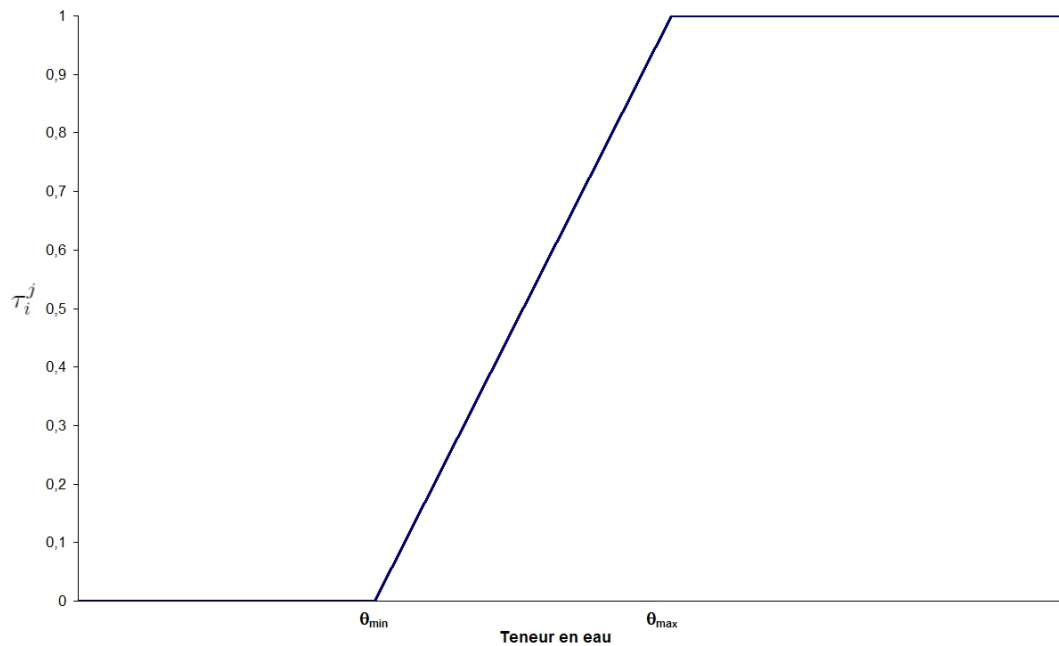


FIG. 3.16 – Limitation de l'activité bactérienne par la teneur en eau

TAB. 3.22 – Valeurs utilisées pour les humidités critiques dans le modèle de biodégradation

Substrat	RB	SB	VSB	a	m	R
Aérobic	mini : $\theta_{\min}^{a,R}$ maxi : θ_R^R	mini : $\theta_{\min}^{a,SB}$ maxi : θ_R^{SB}	mini : $\theta_{\min}^{a,VSB}$ maxi : θ_R^{VSB}	mini : $\theta_{\min}^{a,a}$ maxi : θ_R^a	-	mini : $\theta_{\min}^{a,R}$ maxi : θ_R^R
Anaérobic	mini : $\theta_{\min}^{m,R}$ maxi : θ_R^R	mini : $\theta_{\min}^{m,SB}$ maxi : θ_R^{SB}	mini : $\theta_{\min}^{m,VSB}$ maxi : θ_R^{VSB}	mini : $\theta_{\min}^{m,a}$ maxi : θ_R^a	mini : $\theta_{\min}^{m,m}$ maxi : θ_R^m	mini : $\theta_{\min}^{m,R}$ maxi : θ_R^R

substrat rapidement biodégradable X_{RB} . Les valeurs des différents paramètres introduits dans le Tableau 3.22 sont réunies en Annexe B.

Influence de la température du milieu sur les processus de biodégradation.

L'impact de la température sur les cinétiques de biodégradation est généralement prise en compte par des lois de type Arrhenius. Aguilar-Juarez (2000) intègre deux lois de type Arrhenius : l'une pour décrire l'activation des processus et la seconde pour décrire l'inhibition de ceux-ci par des niveaux thermiques trop élevés. Néanmoins, nous avons opté pour une pondération γ_T des processus biologiques par une fonction de type cardinal (cf. Rosso et al. (1995)). Ce type de loi fait intervenir une température minimale T_{\min} en deçà de laquelle aucune activité biologique ne peut avoir lieu, une température maximale T_{\max} au dessus de laquelle aucune activité biologique n'est possible et une température

T_{opt} pour laquelle $\gamma_T = 1$. L'équation 3.88 traduit la forme de cette fonction.

$$\gamma_T = \begin{cases} 0 & \text{si } T < T_{min} \\ \frac{(\mathcal{T}-T_{max})(\mathcal{T}-T_{min})^2}{(\mathcal{T}_{opt}-T_{min})[(\mathcal{T}_{opt}-T_{min})(\mathcal{T}-\mathcal{T}_{opt})-(\mathcal{T}_{opt}-T_{max})(\mathcal{T}_{opt}+T_{min}-2\mathcal{T})]} & \text{si } T_{min} < T < T_{max} \\ 0 & \text{si } T > T_{max} \end{cases} \quad (3.88)$$

Inhibition par accumulation de métabolites intermédiaires. Les inhibitions par produits d'acidogénèse en phase anaérobie sont prises en compte de manière globale en évaluant la quantité de substrat RB résiduelle, au travers d'un facteur d'inhibition ψ_{RB} .

Le phénomène est simplifié : on considère que la méthanogénèse est bloquée lorsque la quantité résiduelle de substrat rapidement biodégradable en fin de phase aérobie est trop importante. L'activité n'est pas inhibée tant qu'une valeur seuil de substrat résiduel n'est pas dépassée.

L'inhibition modélisée concerne à la fois l'auto-inhibition de la dégradation du substrat RB et une inhibition croisée liée à la présence de substrat RB sur la fraction SB , avec l'hypothèse d'un mélange parfait entre les fractions.

Afin de tenir compte de la "dilution" de la fraction organique fermentescible au sein des autres fractions solides, on choisit de définir le seuil d'inhibition par rapport à la variable ξ_{RB} exprimant la proportion de substrat rapidement biodégradable dans le solide résiduel.

$$\xi_{RB} = \frac{\hat{\rho}_{RB}}{\hat{\rho}_{RB} + \hat{\rho}_{SB}X_{SB} + \hat{\rho}_{VSB} + \hat{\rho}_I} \quad (3.89)$$

La façon dont est prise en compte l'inhibition par la présence du substrat rapidement biodégradable en trop grande concentration est présentée par la relation 3.90

$$\psi_{RB} = \begin{cases} 1 & \text{si } \xi_{RB} < \xi_{RB}^{lim} \\ \frac{K_{I,RB}}{K_{I,RB} + (\xi_{RB} - \xi_{RB}^{lim})} & \text{si } \xi_{RB} \geq \xi_{RB}^{lim} \end{cases} \quad (3.90)$$

Le facteur d'inhibition ψ_{RB} fait apparaître la concentration seuil en substrat rapidement biodégradable ξ_{RB}^{lim} exprimée en g/g. Des expériences menées à l'INSA de Toulouse ont permis d'évaluer le seuil ξ_{RB}^{lim} à environ 0,15 g/g. La forme de la fonction ψ_{RB} est présentée sur la Figure 3.17.

La constante d'inhibition $K_{I,RB}$ (g/g) représente le dépassement du seuil de concentration engendrant un facteur d'inhibition de 0,5. Elle a été fixée arbitrairement à 0,003 g/g d'après des tests de simulation sur un substrat rapidement biodégradable pour lesquels on obtient une levée totale d'inhibition en 200 jours environ.

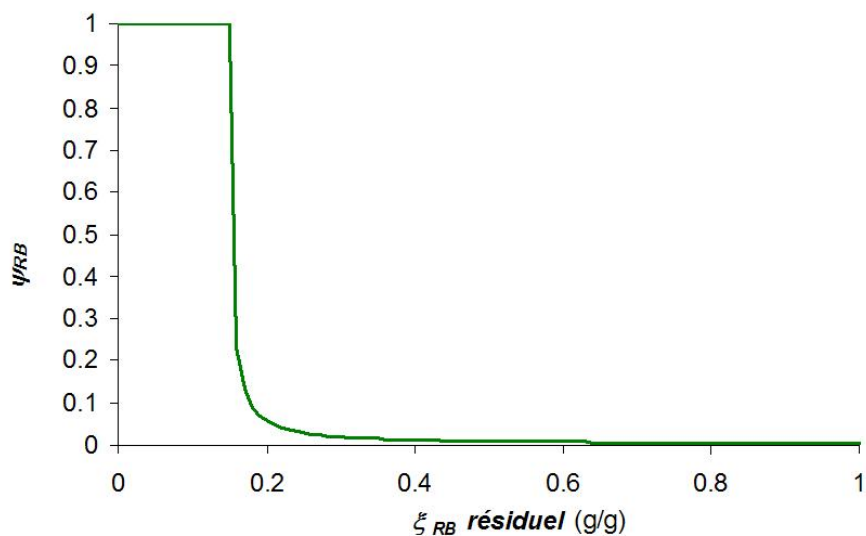


FIG. 3.17 – Limitation de l'activité anaérobie par l'excès de substrat

L'intérêt de la fonction proposée est qu'elle autorise un très lent démarrage des réactions anaérobies au fur et à mesure que la fraction RB est consommée. La durée nécessaire pour lever l'inhibition sera d'autant plus importante que la constante $K_{I,RB}$ sera faible.

L'ensemble des valeurs des paramètres que nous utilisons dans le modèle de biodégradation est présenté en Annexe B.

Chapitre 4

Développement du modèle MATAABIO et validation

Après avoir présenté les enjeux liés à la modélisation des ISD et développé un nouveau modèle mathématique décrivant les transferts réactifs de masse et de chaleur au sein des ISD dans les Chapitre 1 et Chapitre 2, puis présenté les méthodes d'évaluation des différentes propriétés du matériau dans le Chapitre 3, l'objectif de cette partie est de décrire l'approche que nous adoptons pour résoudre le système d'équations aux dérivées partielles, de présenter les résultats de validation de notre approche ainsi que le comportement du code de calcul. Le code de calcul développé sur la base du modèle mathématique présenté dans le Chapitre 2 sera nommé par la suite MATAABIO . Cet acronyme est utilisé en lieu et place de "Modélisation Avancée du Transport Aérobie et Anaérobie dans les ISD BIORéacteurs". Il a également l'avantage de faire référence à un quartier de Toulouse (lieu de sa conception).

4.1 Enjeux numériques

Nous avons vu dans le Chapitre 2 que le modèle mathématique que nous utilisons est composé de 8 équations aux dérivées partielles non linéaires correspondant aux 5 variables indépendantes que nous utilisons pour décrire le système. Nous devons ajouter à ce système les 8 équations différentielles non linéaires correspondants aux variables que nous avons introduites lors du processus d'identification du modèle de biodégradation.

La méthode que nous utilisons pour résoudre numériquement le système d'équations est la méthode des volumes finis qui consiste à intégrer les équations de conservation sur des volumes élémentaires de formes simples. Cette méthode fournit ainsi de manière naturelle des formulations discrètes conservatives des équations que nous traitons et est donc particulièrement adaptée aux équations de la mécanique des fluides (conservation de

masse, de quantité de mouvement et d'énergie). Sa mise en œuvre est relativement simple, mais les enjeux numériques auxquels il faut faire face n'en sont pas moins nombreux. Le maillage structuré que nous utilisons est un maillage régulier cartésien.

Les enjeux lors du traitement numérique de systèmes d'équations aux dérivées partielles couplées sont nombreux. En premier lieu, le couplage lui-même rend la résolution du problème complexe. Ceci oblige en particulier, si l'on choisit une discrétisation implicite de l'ensemble des équations du système, à utiliser des méthodes de résolution extrêmement coûteuses en temps de calcul. C'est pourquoi, il peut être nécessaire de considérer d'autres méthodes permettant une résolution plus rapide du système d'équations. Nous présenterons dans cette partie, différentes techniques de traitements des équations, que ce soit en terme de discrétisation temporelle (implicite, explicite, ou mixte) ou bien en terme d'algorithme de résolution ("splitting" d'opérateur, découplage des différents phénomènes, etc ...).

De plus, certaines équations de transport paraboliques peuvent dégénérer et prendre un caractère hyperbolique suivant les conditions locales. En particulier, le système formé par les équations de conservation de la masse des deux phases mobiles (équations 2.226 et 2.227) est globalement parabolique lorsque la pression capillaire est non nulle et dégénère vers un système hyperbolique lorsque la pression capillaire tend vers une valeur nulle. En particulier, l'équation 2.227 perd son caractère parabolique pour devenir hyperbolique. Dans le cas des OM, nous avons vu que la pression capillaire est relativement faible (cf. Chapitre 3), en particulier pour les saturations en phase liquide supérieures à 50%. Dans ce cas, le système formé par les équations de conservation de la masse des deux phases mobiles devient hyperbolique.

Dans le cas particulier des équations hyperboliques, des méthodes numériques adaptées (discrétisation spatiale) doivent être mise en place afin de prédire correctement la propagation de "chocs" ou de "fronts" dans le milieu. Nous présentons dans cette partie certaines méthodes utilisées fréquemment dans les outils de simulation du transport multiphasique en milieu poreux.

Enfin le caractère non linéaire des équations de transport que nous avons présenté dans le Chapitre 2 nécessite un traitement particulier.

4.1.1 Discrétisation temporelle

Comme nous considérons un système d'équations instationnaire, le premier enjeu numérique auquel nous devons faire face concerne la discrétisation temporelle des équations de transport de masse et de chaleur. En effet, il existe plusieurs méthodes permettant de discrétiser temporellement ce type de système. On distingue principalement les schémas

dits implicites et les schémas dits explicites.

Schémas implicites. Le principe des schémas implicites en temps est de considérer l'ensemble des variables présentes dans l'équation considérée au temps $k + 1$ (temps de calcul), plutôt qu'au temps k (temps de l'itération précédente pour laquelle la solution est connue). L'utilisation d'un schéma implicite en temps pour résoudre une équation aux dérivées partielles permet de s'assurer une stabilité inconditionnelle de la solution. Néanmoins, l'utilisation de schémas implicites introduit de la diffusion artificielle appelée diffusion numérique des grandeurs physiques que nous calculons. Dans le cas où l'on considère un système d'équations aux dérivées partielles et que l'ensemble du système est implicite en temps, la résolution du système requiert l'inversion d'une matrice $[A]$ de grande dimension (Nombre de points de maillage*Nombre de variables \times Nombre de points de maillage*Nombre de variables), puisque le système s'écrit alors :

$$[A] [X]^{k+1} = [RHS (X_j^k)] \quad (4.1)$$

L'inversion de la matrice $[A]$ est dans ce cas l'élément limitant en terme de puissance de calcul et de temps de calcul. Les schémas implicites sont donc gourmands en terme de ressource informatique, mais garantissent la stabilité du calcul.

Schémas explicites. Comme son nom l'indique, un schéma explicite en temps permet d'obtenir une solution explicite de l'équation que l'on cherche à résoudre. Pour ce faire, l'ensemble des variables intervenant dans l'équation à résoudre est considéré au pas de temps k de l'itération précédent le calcul en cours. L'utilisation de ce type de schéma permet d'avoir une résolution rapide et simple de l'équation considérée. Néanmoins, la stabilité de ce type de schéma n'est pas assurée pour l'ensemble des valeurs de pas de temps et de pas d'espace considérées. En règle générale, l'utilisation de tels schémas nécessite d'utiliser des pas de temps très faibles en comparaison de ceux que l'on peut utiliser avec les schémas implicites. Dans le cas où l'on considère un système d'équation aux dérivées partielles dont chaque équation est discrétisée selon un schéma explicite en temps, la résolution de celui-ci est obtenue simplement en multipliant le vecteur $[X]^k$ par une matrice $[B]$ caractéristique du système et de dimension Nombre de points de maillage*Nombre de variables \times Nombre de points de maillage*Nombre de variables :

$$[X]^{k+1} = [B] [X]^k \quad (4.2)$$

L'avantage de ce type de schéma est que le calcul de la solution du système d'équation aux dérivées partielles considéré est rapide puisqu'il ne nécessite pas d'opération complexe.

En revanche, les contraintes imposées par les conditions de stabilité rendent l'utilisation de ce type de schéma relativement contraignante en terme de pas de temps.

Schémas hybrides. Les schémas implicites et explicites ont donc chacun des avantages (stabilité pour l'un, rapidité de calcul de la solution pour l'autre). Dans le cas où le système à résoudre est composé de plusieurs équations couplées, il est possible de concevoir des approches alternatives aux schémas complètement implicites ou complètement explicites. En effet, il est possible de "mélanger" les deux approches en utilisant des schémas implicites pour certaines équations du système et des schémas explicites pour les autres. Ce type d'approche a largement été développé dans le domaine pétrolier depuis le début des années 70.

C'est, en particulier, l'attention croissante des industriels du secteur pétrolier pour la simulation des écoulements diphasiques en milieu poreux (eau/huile) qui a motivé le développement de ce type d'approche. En effet, l'ensemble des techniques de récupération d'huile se base sur l'injection d'un fluide dans le champ pétrolifère afin d'en chasser l'huile initialement présente. Or, pour simuler ce type de problèmes, il faut résoudre deux équations de conservation de masse couplées. Comme le présentent Wu and Forsyth (2001), dans ce cas les deux variables primaires qui sont utilisées sont généralement la saturation en liquide S et la pression de la phase gaz P_γ .

Si l'on utilise des schémas implicites purs (FIM), les deux équations couplées sont résolues simultanément lors de la même itération temporelle (Aziz and Settari, 1979; Cao, 2002). L'avantage de ce type de méthode est qu'elle assure la stabilité du système. Néanmoins, l'inversion de la matrice résultant de la discrétisation du problème peut s'avérer très coûteuse en temps de calcul (Allen, 1985). Comme le présentent Aziz and Settari (1979), il existe plusieurs variantes de ce type de modèle suivant que l'on conserve implicite l'ensemble des termes présents dans les équations de conservation de masse des phases mobiles ou que l'on en explicite certains (termes gravitaires par exemple).

Dans le cas des écoulements diphasiques, on peut aussi décider d'utiliser un schéma de discrétisation différent pour chacune des deux équations : l'une sera explicite en temps et l'autre sera implicite en temps. Ce type de schéma est généralement appelé IMPES (IMplicite Pressure and Explicite Saturation). Le principe de cette méthode est de discrétiser l'équation que l'on résout pour la variable pression de façon implicite et l'équation que l'on résout pour la variable saturation de façon explicite. Il faut également faire l'hypothèse que le terme de pression capillaire intervenant dans le terme de flux de gaz est invariant au cours d'un pas de temps, c'est à dire qu'il faut le rendre explicite (Aziz and Settari, 1979). La première étape du processus de résolution consiste donc à calculer la pression dans la phase gazeuse en utilisant les valeurs des saturations obtenues au pas

de temps k . Ensuite, la saturation est explicitement calculée en utilisant les valeurs de pression calculées implicitement. Enfin, la pression capillaire est mise à jour en utilisant la valeur de la saturation. La stabilité des méthodes IMPES est contraignante du point de vue des pas de temps et d'espace qu'il est possible d'utiliser. En effet, le caractère explicite de l'équation pour la saturation rend le schéma instable dans certaines conditions. Il est d'ailleurs possible de déterminer un critère de stabilité de ce type de schéma, dans le cas de fluides compressibles et incompressibles (cf. Aziz and Settari (1979) par exemple). La condition de stabilité de ce type de méthode devient en particulier extrêmement contraignante dans les zones où de forts contrastes spatiaux de saturation peuvent apparaître. Ceci est en particulier le cas lorsque l'on cherche à injecter une phase mobile (liquide par exemple) dans un milieu poreux dont les pores sont entièrement ou partiellement occupés par une autre phase mobile (gaz par exemple). Partant de ce constat, Chen et al. (2004) développent une méthode IMPES améliorée afin de profiter à la fois de la stabilité garantie par le caractère implicite de l'équation pour la pression et de la rapidité de calcul garantie par le caractère explicite de l'équation pour la saturation. Cette méthode IMPES améliorée consiste simplement à résoudre implicitement la pression sur un pas de temps dt grand et de résoudre explicitement la saturation sur des pas de temps plus petits dt/N permettant de garantir la stabilité du système. Les tests menés par Chen et al. (2004) mettent en évidence que la méthode IMPES améliorée est aussi précise que les méthodes FIM mais avec des temps de calcul beaucoup plus faibles. De plus, le fait d'adopter des pas de temps plus faibles pour résoudre la saturation permet de conserver la stabilité du schéma. Nous ne présentons pas ici les méthodes complètement explicites pour les écoulements diphasiques en milieu poreux puisque ces méthodes sont peu développées.

Dans le cas où l'on considère un système d'équations de dimension plus importante, par exemple dans le cas d'écoulements diphasiques en présence de transport d'espèces chimiques, il est possible de développer le même type d'approche. On appellera alors FIM les méthodes où l'ensemble des équations du système sont traitées implicitement et IMPES les méthodes où seule l'équation pour la pression est traitée implicitement. Il est également possible de "moduler" le degré d' "implicité" du schéma utilisé. En effet, pour un système de dimension NB , le nombre de variables que l'on résoudra de façon implicite peut varier de 0 à NB . Dans sa thèse, Cao (2002) développe un outil de simulation numérique permettant de choisir le degré d' "implicité" du système. Il conclut d'ailleurs, que le meilleur compromis entre stabilité et temps de calcul est le schéma IMPSAT (Implicite Pressure and SATuration). Ce schéma se construit comme le schéma IMPES mais en résolvant implicitement les équations liées à la pression et à la saturation et en calculant explicitement les autres variables (composition, température).

Comme le présentent Russell and Young (1993), et comme cela a été repris de fa-

çon permanente dans le domaine de la simulation de réservoirs pétroliers, il est possible d'utiliser l'une ou l'autre des méthodes de discrétisation temporelle à différents points du maillage. En effet, le besoin d' "implicité" du schéma dépend grandement de la localisation du point de calcul dans l'espace et dans le temps. Il est donc possible de développer des schémas appelés AIM (Adaptive Implicite Method), pour lesquels on utilise par exemple un schéma de type FIM à certains points cruciaux où le risque d'instabilité est élevé et un schéma de type IMPES aux points du domaine où ce risque est restreint. Russell and Young (1993) développent un critère de choix entre les méthodes FIM et IMPES basé à la fois sur des critères de stabilité et de variation des variables de pression et de saturation. Dans sa thèse, Cao (2002) propose quant à lui un nouveau schéma de type AIM qui mélange les approches IMPSAT et FIM.

Choix du schéma utilisé Nous avons pris le parti de développer un outil de simulation robuste, c'est pourquoi, dans un premier temps, nous avons choisi d'utiliser une approche de type FIM de façon à garantir une stabilité maximum du code de calcul. Néanmoins, suivant les recommandations fournies par Cao (2002) il sera intéressant dans le futur d'implémenter un schéma de type IMPSAT afin d'obtenir éventuellement un meilleur compromis entre temps de calcul et stabilité.

4.1.2 Discrétisation spatiale

La discrétisation spatiale du système d'équations formé par les relations 2.226 à 2.233 et de l'équation 2.203 est le second enjeu d'importance que nous devons traiter. Nous distinguerons deux approches différentes suivant les termes que nous considérons.

Considérons tout d'abord la discrétisation des équations de transport des espèces et de l'énergie. En ce qui concerne les termes diffusifs, nous utilisons des schémas centrés d'ordre 2 particulièrement adaptés pour traiter ce type d'opérateur. Ce type de schéma présente l'avantage d'être précis et est utilisé dans la plupart des codes de calculs basés sur la méthode des volumes finis. En revanche, en ce qui concerne les termes hyperboliques (termes convectifs), on utilisera des schémas amonts d'ordre 1 (cf. Patankar (1980)) plutôt que des schémas centrés. En effet, ce type de schéma est stable et permet de récupérer plus précisément la position des "fronts" de concentration ou de température lorsque l'on introduit des discontinuités locales des champs de concentration et de température. Néanmoins, ce type de schéma introduit de la diffusion artificielle. Cette diffusion artificielle ou diffusion numérique est d'autant plus importante que le pas d'espace considéré est grand. La diffusion numérique est due au fait que les schémas d'ordre 1 comme le schéma amont sont intrinsèquement diffusifs. Néanmoins, les schémas d'ordre supérieur

(comme par exemple le schéma centré d'ordre 2) sont sujets à produire des oscillations en particulier au niveau des discontinuités.

Depuis le début des années 80, des alternatives aux schémas classiques amont d'ordre 1 et centré d'ordre 2 ont été développées afin à la fois de suivre correctement les "fronts" et de diminuer la diffusion numérique. On citera en particulier les schémas de type TVD (Total Variation Diminishing). Les travaux fondateurs sont dus à Harten (1983), Harten (1984) et Sweby (1984) et ont ensuite été poursuivis et améliorés par de nombreux auteurs (Cox and Nishikawa, 1991). Ces travaux ont mené à la mise au point d'une classe de méthodes numériques qui produit des résultats non oscillatoires au voisinage des discontinuités et précises au moins au second ordre hors des fronts. Une méthode de résolution est dite TVD si elle garantit le respect de la monotonie de la solution ce qui permet de garantir la stabilité du schéma, y compris dans les zones de fortes variations des gradients. Le caractère TVD d'un schéma est lié à l'existence d'une quantité minimale de *viscosité numérique* nécessaire dans ce schéma. Les fondements théoriques des méthodes TVD ont été développés pour les problèmes scalaires unidimensionnels. En pratique, l'expérience accumulée dans de nombreuses applications à des problèmes non linéaires et/ou multidimensionnels, a montré que la théorie unidimensionnelle scalaire peut servir de ligne de conduite pour étendre ces schémas. Les méthodes permettant de déterminer ce coefficient de *viscosité numérique* sont de deux types :

- Les méthodes à limitation de pente.
- Les méthodes à limitation de flux.

Un grand nombre de limiteurs ont été mis au points (Roe, 1983; Van Leer, 1973). Nous ne les décrivons pas en détail ici. Historiquement, les méthodes TVD ont été presque exclusivement appliquées à des schémas à haute précision de type upwind (cf. Wu and Forsyth (2006) par exemple).

Enfin, d'autres méthodes numériques encore plus performantes dites ENO (Essentially Non Oscillatory) ou encore UNO, WNO mènent à des ordres de précisions supérieurs à 2 (Nessyahu and Tadmor, 1990; Kurganov and Tadmor, 2000). Nous ne les développerons pas ici.

L'ensemble des méthodes proposées ci-dessus est valable pour traiter les termes hyperboliques, qu'ils interviennent dans les équations de transport de masse ou dans l'équation de transport de la chaleur. Néanmoins, comme nous l'avons présenté dans l'introduction de cette partie, le système formé par les équations 2.226 et 2.227 présente la particularité d'être globalement parabolique, mais il peut dégénérer vers un système hyperbolique dans certaines conditions de saturation. C'est pourquoi nous nous intéressons en particulier au système formé par les équations 2.226 et 2.227.

La résolution numérique de ce système a été étudiée en détails dans le domaine pétro-

lier. On pourra notamment se reporter aux travaux de Aziz and Settari (1979), Brenier and Jaffre (1989) ou plus récemment Eymard and Sonier (1994) ou Ewing (1997). Comme le mentionnent Aziz and Settari (1979) c'est le caractère non linéaire introduit par les termes de perméabilités relatives qui rend la résolution des équations couplées 2.226 et 2.227 complexe. De ce point de vue, Aziz and Settari (1979) distinguent les non linéarités "faibles" et les non linéarités "fortes". Les non linéarités dites faibles concernent les variables qui ne dépendent que de la pression de l'une des phases. Dans ce cas, un schéma centré d'ordre 2 peut être utilisé, la valeur de la fonction à la frontière aval (indice $i + 1/2$) peut être calculée en prenant la moyenne harmonique ou arithmétique de la fonction considérée entre les point d'indice i et $i + 1$ (cf. équation 4.3).

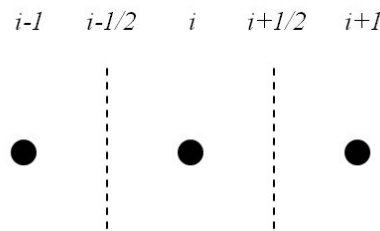


FIG. 4.1 – Représentation 1D du maillage utilisé

$$f_{i+1/2}(S) = \frac{f(S_i) + f(S_{i+1})}{2} \quad (4.3)$$

Les non linéarités fortes correspondent aux variables qui dépendent fortement de la saturation. C'est en particulier le cas des fonctions de perméabilité relative et de pression capillaire lorsque l'on considère deux phases mobiles. Les termes de transport advectifs présentent alors des non linéarités fortes. Dans ce cas si l'on utilise l'équation 4.4 pour calculer la valeur de la fonction $f(S)$ au point d'indice $i + 1/2$, le schéma est instable. Comme le présente Aziz and Settari (1979), il convient alors d'utiliser un schéma amont pour évaluer ces fonctions ($k_R(S)$ ou $P_C(S)$) au point de coordonnée $i + 1/2$. Le décentrement de ces fonctions dépend alors du signe de la vitesse du fluide considéré.

$$f_{i+1/2}(S) = \begin{cases} f(S_i) & \text{si } V_{\lambda;x;i+1/2} > 0 \\ f(S_{i+1}) & \text{si } V_{\lambda;x;i+1/2} < 0 \end{cases} \quad (4.4)$$

Dans leurs travaux Brenier and Jaffre (1989) montrent que le schéma dit "schéma des pétroliers" et introduit par Aziz and Settari (1979) est consistant et converge dans le cas d'écoulements diphasiques. Les propriétés de ce type de schéma sont comparables à celle du schéma de Godunov, plus complexe à mettre en oeuvre. Enfin, Brenier and Jaffre (1989) proposent une méthode simple permettant d'augmenter l'ordre du "schéma

des pétroliers" en 1D. Le schéma proposé possède des propriétés TVD et permet donc de diminuer l'effet de la diffusion numérique introduite par ce type de schéma amont.

Depuis les années 80 de nombreuses études ont d'ailleurs permis de développer un grand nombre de schémas de type TVD ou d'ordres plus élevés permettant d'obtenir des solutions précises (peu de diffusion numérique) et stable pour résoudre les systèmes décrivant les écoulements couplés de deux phases mobiles en milieu poreux. On pourra se référer en particulier aux travaux de Bastian (1999), Ewing (1997), Geiger et al. (2004) ou encore Chen (2003); Chen et al. (2006).

Choix du schéma utilisé Dans le code de calcul MATAABIO, nous utilisons un schéma centré d'ordre 2 pour discrétiser les opérateurs de type diffusifs. Nous utiliserons en revanche un schéma décentré amont pour les termes non linéaires de transport convectif, afin de garantir la stabilité de la méthode. Dans le cas particulier des équations 2.226 et 2.227, nous utilisons le schéma amont dit "schéma des pétroliers" qui présente l'avantage d'être stable. Néanmoins, comme nous le verrons par la suite, le caractère non-linéaire introduit dans ces équations par les termes de perméabilité relative impose une condition de CFL sur les pas de temps et d'espace.

4.1.3 Splitting d'opérateurs/Traitements des termes réactifs

Dans les différentes équations qui composent le système différentiel que nous devons résoudre, il est à noter que les temps caractéristiques des différents opérateurs de transport convectif, de transport diffusif et de réaction ne sont pas forcément du même ordre. En particulier, dans le cas de la biodégradation, les cinétiques de production de biogaz sont particulièrement lentes vis-à-vis du transport convectif ou diffusif. Il peut donc être intéressant dans ce cas de considérer l'utilisation des méthodes de séparation (splitting) d'opérateurs. Cela permet en particulier d'améliorer le temps de calcul au sein même d'une itération temporelle.

Comme leur nom l'indique, les méthodes de séparation d'opérateurs sont des méthodes qui consistent à résoudre de façon séparée les termes de transport convectif, de transport diffusif et les termes de production/consommation qui peuvent intervenir dans une même équation aux dérivées partielles. Ce type de méthode est donc principalement utilisé pour traiter les équations de transport des espèces (Barry et al., 1996, 1997), néanmoins, on peut également imaginer appliquer ce type de méthodes aux équations décrivant les écoulements des phases mobiles (cf. Ciegis et al. (2000)). Il existe un grand nombre de méthode de séparation d'opérateurs. Elles se distinguent les unes des autres suivant que les différents opérateurs sont résolus explicitement ou implicitement ou que la résolution des différents opérateurs est itérative ou non.

Kanney et al. (2003b) et Kanney et al. (2003a) développent des tests numériques sur les opérateurs de splitting appliqués au cas du transport réactif non linéaire. Les conclusions de ces tests mettent en évidence l'intérêt des méthodes de splitting d'opérateur, mais également les difficultés que représente l'évaluation théorique de l'erreur commise lors de l'évaluation de telles méthodes. Il est d'ailleurs finalement assez difficile de trouver dans la littérature des critères de choix précis quant à la méthode à utiliser suivant la classe de problème que l'on souhaite traiter.

Carrayrou et al. (2004) proposent une revue exhaustive des procédures de splitting d'opérateurs dans le cadre du transport réactif en milieu poreux. Les méthodes de splitting d'opérateur se décomposent principalement en quatre grandes familles. La plus simple des méthodes de séparation d'opérateurs est la méthode SNI standard (Standard sequential Non-Iterative scheme). Cette méthode consiste à résoudre l'équation de transport des espèces en deux étapes : une première étape de transport non réactif suivi d'une étape de réaction en batch sans transport. La solution de la première étape sert de condition initiale à la seconde. Cette méthode suppose que les deux étapes sont complètement découplées et qu'elles interviennent de façon additive sans interaction l'une sur l'autre au cours d'un pas de temps.

La seconde famille de méthodes de séparation d'opérateur est la méthode Strang-splitting SNI, qui est une variante de la méthode SNI. Le principe de cette méthode est de résoudre dans un premier temps l'équation de transport non réactif sur un demi pas de temps, puis de résoudre les termes de réaction sans transport sur un pas de temps entier et de finir le processus par la résolution d'une étape de transport non réactif sur le demi pas de temps restant. Ici encore, la solution obtenue à la fin de l'une des trois étapes décrites précédemment pour la variable considérée en une position donnée du maillage est utilisée comme condition initiale de l'étape suivante. Le calcul du transport en deux étapes entrecoupées d'une étape de réaction permet d'utiliser la méthode Strang-splitting SNI dans des cas où les temps caractéristiques des phénomènes de transports et de réaction sont beaucoup plus proches que ceux que l'on peut utiliser avec la méthode SNI standard.

La troisième famille de méthodes de découplage d'opérateur est basée sur la méthode SI (Standard Sequential Iterative scheme). Comme son nom l'indique, cette classe de méthodes de découplage est itérative. Son principe consiste à résoudre lors d'une première étape l'équation de transport réactif complète avec un terme source évalué à l'aide des conditions initiales. La solution obtenue permet de réévaluer le terme réactif. On recalcule alors la solution de l'équation de transport puis le terme réactif et ce jusqu'à ce que le critère de convergence de la méthode soit atteint (cf. Carrayrou et al. (2004)).

Enfin, la dernière famille de méthodes de splitting d'opérateurs correspond aux méthodes SI symétriques. Ces méthodes sont également itératives et consistent à utiliser

symétriquement deux découplage de type SI. La première est l'équation de transport avec terme de puits/source lié aux réactions, la seconde est l'équation sans transport mais avec réaction dans laquelle on insère un terme puits/source lié à l'opérateur de transport. Le processus itératif prend fin lorsque le critère de convergence est atteint (cf. Carrayrou et al. (2004)). Ce type de méthode est particulièrement adapté aux cas où les temps caractéristiques des opérateurs de transport et de réaction sont proches. En effet, le fait de rendre la méthode SI symétrique permet de prendre en compte de façon systématique l'impact des réactions sur les transferts et inversement.

Carayrou et al. (2004) comparent l'efficacité de différentes méthodes de splitting itératives et non itératives et concluent en ordonnant les différentes méthodes selon leur efficacité. D'après Carayrou et al. (2004), la méthode qui introduit le moins d'erreur sur le calcul des fractions massiques est la méthode SI symétrique dans le cas où l'on s'intéresse au découplage des opérateurs de transport et de réaction.

Les méthodes de splitting d'opérateurs présentées ici décrivent le découplage des opérateurs de transport avec les opérateurs de production/consommation liés aux réactions chimiques ou biologiques. Des méthodes similaires permettant de découpler les opérateurs de transport diffusifs et convectifs ont été développées. On pourra en particulier se référer aux travaux de Karlsen and Risebro (1997) ou Lie et al. (1998).

Dans le cas des ISD bioréacteurs, les temps caractéristiques des réactions de biodégradation sont extrêmement lents en comparaison des temps caractéristiques de transfert. Par conséquent, nous pouvons considérer que les phénomènes de transport et les phénomènes réactifs sont entièrement découplés. Par conséquent, la méthode que nous utilisons pour résoudre le transport réactif est une méthode explicite. Dans une première étape nous évaluons les termes réactifs à l'aide de la solution du système au pas de temps précédent. Ensuite nous résolvons explicitement les ODE non linéaires décrivant la consommation du substrat et la production de la biomasse à l'aide d'une méthode d'Euler d'ordre 1. Enfin, on résout implicitement le système formé par les équations 2.226 à 2.233 et l'équation 2.203.

4.1.4 Conditions aux limites et gestion des puits d'injection et de production

Dans le code de calcul MATAABIO, plusieurs types de conditions à la limite ont été implémentés. Le premier type de conditions à la limite correspond aux conditions de Dirichlet. Ce sont les plus simples à prendre en compte. Elles consistent à imposer les valeurs des variables à la frontière du domaine. Le second type de condition à la limite correspond aux conditions de flux imposé à la frontière (condition de type Neumann).

Pour obtenir ce type de condition aux frontières, on intègre l'équation de conservation sur la première 1/2 maille afin d'obtenir une relation entre le flux imposé et la valeur des variables au point d'indice 2.

Il nous faudra prendre garde à bien choisir les conditions aux limites que nous utilisons, en particulier en ce qui concerne les conditions que nous imposons pour les variables liées aux écoulements diphasiques, c'est-à-dire la pression gaz et la saturation. Seules certaines combinaisons de conditions aux limites pour ces variables ont un sens. On peut alors décider de fixer :

1. Le débit de liquide. Dans ce cas il faut également fixer le débit de gaz entrant. En revanche, dans ce cas on ne peut pas fixer la pression de la phase gaz, car l'équation décrivant les transferts de la phase gaz dégénère et fixer la pression gaz n'a donc pas de sens.
2. Le débit de gaz. Dans ce cas on peut fixer soit la saturation résiduelle en liquide, soit le débit de liquide.
3. Des conditions de Dirichlet pour la pression gaz (pression atmosphérique par exemple), et pour la saturation.

En ce qui concerne les conditions aux limites utilisées pour les quantités transportées (fractions massiques et chaleur) on imposera principalement des conditions de Dirichlet ou des conditions de flux nul. Lorsque l'on injecte ponctuellement l'une des deux phases mobiles, on pourra imposer des conditions de Dirichlet sur les fractions massiques et la température afin de donner la composition et la température de la phase injectée.

D'autres conditions à la limite doivent être considérées. Ce sont les conditions liées à l'introduction dans le milieu des dispositifs d'injection de lixiviats. En règle générale, la dimension des mailles que nous utilisons pour résoudre le système d'équations aux dérivées partielles est de dimension très supérieure à la dimension des drains utilisés, dont le diamètre est de l'ordre de la dizaine de centimètres. Par conséquent, il ne nous est pas possible de prendre en compte les écoulements de fluide dans ces dispositifs. Pour pallier à ce problème, les industriels du secteur pétrolier ont développé des modèles que l'on appelle "modèles de puits" et qui permettent de relier le débit injecté en un nœud du maillage à la différence de pression entre le dispositif d'injection et le milieu poreux environnant. Ce type de relation a été introduit par Peaceman (1983) et est présenté par l'équation 4.5.

$$q_{w,i} = -T_{w,i} (p_{w,i} - p_{w,bhp}) \quad (4.5)$$

Dans la relation 4.5, $q_{w,i}$ représente le débit du puits w dans la maille i , $T_{w,i}$ représente la transmissivité autour du puits w , $p_{w,i}$ représente la pression de fluide dans la maille i et $p_{w,bhp}$ la pression dans le puits. La transmissivité est calculée par une relation semi-

analytique proposée par Peaceman (1983). Dans cette relation, la transmissivité dépend à la fois des propriétés physiques du milieu poreux, des dimensions de la maille d'injection, ainsi que d'un facteur prenant en compte un *effet de peau*. En effet, la plupart des puits sont issus de forages. Lors de ces forages, la région proche du puits est modifiée dans sa structure. Par exemple, on peut retrouver des amas de particules fines introduites lors du forage ou bien au contraire une déformation du massif favorisant l'apparition de zone de porosité plus importante. Par conséquent, la perméabilité locale peut être diminuée ou augmentée. Cet effet est appelé *effet de peau* (skin), car il concerne une zone restreinte autour du puits. L'introduction d'un tel modèle consiste à considérer une zone de dimension finie autour du puits pour laquelle la perméabilité est changée. Le diamètre d'une telle zone peut être estimé à l'aide de tests de puits par exemple.

La relation proposée par Peaceman (1983) suppose des flux uniformes et un écoulement radial autour du puits. Ceci est valable lorsque les dimensions des mailles sont bien plus importantes que la dimension du système d'injection. Ceci n'est malheureusement pas le cas pour les simulations des ISD que nous réalisons. Néanmoins, les tubes utilisés pour injecter les lixiviats dans les ISD sont de longueur relativement restreinte au regard des tubes utilisés dans l'industrie pétrolière. La zone crépinée est elle aussi relativement restreinte (1 mètre environ), par conséquent la perte de charge entre l'entrée et la sortie de la zone crépinée peut être négligée. La pression dans le milieu poreux au voisinage du dispositif d'injection peut également être considérée relativement uniforme. Par conséquent, nous pouvons simplifier le modèle de puits proposé par Peaceman (1983) et le remplacer par la relation 4.6.

$$q_{w,i} = \text{constante} \quad (4.6)$$

La relation 4.6 traduit le fait que la totalité du débit injecté est réparti de façon uniforme sur l'ensemble de la zone crépinée. Cette relation sera utilisée en première approximation pour décrire l'injection de lixiviats dans les ISD bioréacteurs. Le traitement de ce type de condition à la limite consistera à introduire un terme source explicite dans les équations de transport.

4.1.5 Méthode de résolution du système

Résolution du système Le système que l'on obtient une fois l'ensemble des équations discrétisées (que ce soit en FIM ou en IMPSAT) est formé d'une matrice creuse de grande dimension. Une inversion directe de ce type de système peut s'avérer relativement coûteuse en terme de temps de calcul. En effet, la méthode la plus classique d'inversion d'un système linéaire est la méthode d'élimination de Gauss. Cette méthode devient vite très coûteuse quand la dimension du système à résoudre est trop grande car elle ne permet pas

de prendre en compte de manière avantageuse le caractère creux de la matrice. On choisira donc une méthode de résolution du système linéaire en fonction du type de matrice que l'on obtient. En effet, la matrice pourra être caractérisée par sa structure (creuse, diagonale, bande, matrice par blocs, triangulaire, etc...) ou par d'autres propriétés particulières (symétrique, définie positive, semi-définie positive, matrice de Hankel, de Vandermonde, etc...). Dans notre cas, la matrice est creuse et de dimension élevée. Elle comporte donc un nombre important de valeurs nulles. Une première étape consiste donc à stocker la matrice sous une forme plus adaptée, nous permettant de supprimer les valeurs nulles. Le stockage que nous choisissons est appelé C.S.R. (Compressed Sparse Row). Il permet de stocker la matrice creuse en trois vecteurs. Le premier de dimension NNZ (nombre de valeurs non nulles) stocke l'ensemble des valeurs non nulles de la matrice à inverser. Le second vecteur est de dimension NNZ et donne l'indice (j) de la colonne de l'élément a_{ij} stocké dans le premier vecteur. Enfin, le troisième vecteur de dimension N+1 (nombre de colonne + 1) contient les pointeurs donnant l'indice de début des lignes réelles dans les deux précédents vecteurs. Il indiquera donc l'ensemble des indices des deux vecteurs précédents correspondant à un "saut" de ligne dans la matrice réelle. Cette méthode de stockage permet d'utiliser un espace mémoire limité.

Dans le cas des matrices creuses, les méthodes d'inversion directes effectuent un grand nombre d'opérations redondantes du fait qu'elles impliquent des coefficients de valeur nulle. Il est possible d'adapter les méthodes directes à la structure creuse du système, mais cela n'est pas trivial. Par conséquent, nous utiliserons des méthodes itératives de type BiGradient Conjugué Stabilisé (BICGSTAB) ou GMRES. Ces méthodes itératives procèdent simplement à des produits matrice-vecteur, et il devient aisé de programmer ce produit de sorte à éviter des opérations redondantes impliquant des éléments nuls de la matrice. Ces méthodes sont relativement classiques et se basent sur une série d'approximations de la solution (cf Saad (2000)). Leur efficacité dépend donc de la vitesse avec laquelle l'approximation converge vers la solution. Afin d'accélérer la convergence de ces méthodes, nous utilisons une méthode de préconditionnement de la matrice à inverser basée sur la factorisation LU incomplète. Ceci permet de restructurer la matrice avant de l'inverser afin de lui donner une structure plus favorable. Nous ne décrivons pas en détail l'ensemble de ces méthodes. Pour plus d'informations, on pourra se référer à l'ouvrage de Saad (2000). Nous utilisons la bibliothèque SPARSKIT2 pour mettre en oeuvre ces méthodes (Saad, 1994).

Résolution temporelle Du fait des non linéarités du système, nous avons linéarisé le système avant inversion et nous utilisons un algorithme de type "Picard" pour obtenir la solution du système au pas de temps n+1. D'autres méthodes sont très couramment

utilisées dans les outils de simulation numérique, en particulier l'algorithme de Newton-Raphson. Ces deux algorithmes itératifs (Picard et Newton-Raphson) utilisent le théorème du "point fixe" pour faire converger la solution du système. Dans le code de calcul MATAABIO, nous utilisons un algorithme de Picard. Ce type d'algorithme est extrêmement simple à mettre en oeuvre et est souvent plus robuste que l'algorithme de Newton-Raphson pour des performances équivalentes. Pour une comparaison des performances de ces deux types d'algorithmes dans le cas de problèmes d'écoulements diphasiques en milieu poreux, on pourra se référer aux travaux de Lehmann and Ackerer (1998).

Algorithme utilisé par le code calcul MATAABIO Finalement, l'algorithme utilisé par le code de calcul MATAABIO est présenté sur la figure 4.2.

Cet algorithme est évolutif et le développement futur du code de calcul pourra nous amener à reconsidérer la structure des différentes étapes de l'algorithme.

4.2 Tests et validation

Dans cette partie, nous allons présenter le comportement du code de calcul MATAABIO sur des cas simples afin de mettre en évidence la validité et l'intérêt que représente ce code de calcul. La validation théorique des écoulements diphasiques est présentée via le test de Buckley-Leverett. En effet, les développements théoriques liés à la description des écoulements conjoints de deux phases dans un milieu poreux (Quintard and Whitaker, 1988, 1990, 1999) mettent en évidence que le traitement numérique de ces écoulements n'est pas évident et nécessite la plus grande attention. En effet, la physique de ces phénomènes est complexe et leur description mathématique et numérique souvent contraignante. C'est pourquoi nous nous attachons dans cette partie à présenter le comportement du code de calcul en présence d'écoulements diphasiques.

4.2.1 Ecoulements diphasiques

L'objectif de cette section est de présenter la validation du comportement de MATAABIO pour des écoulements diphasiques en milieux poreux. La description correcte des écoulements diphasiques insaturés est primordiale puisque dans le cas des centres de stockage de déchets, l'écoulement de la phase liquide (injectée ou infiltrée) intervient en condition insaturée. La résolution couplée des équations de transport de la phase liquide et de la phase gazeuse (équations 2.226 et 2.227) représente donc un enjeu d'importance si l'on veut décrire correctement les cycles de réinjection ainsi que le captage du biogaz sous diverses conditions de teneur en eau.

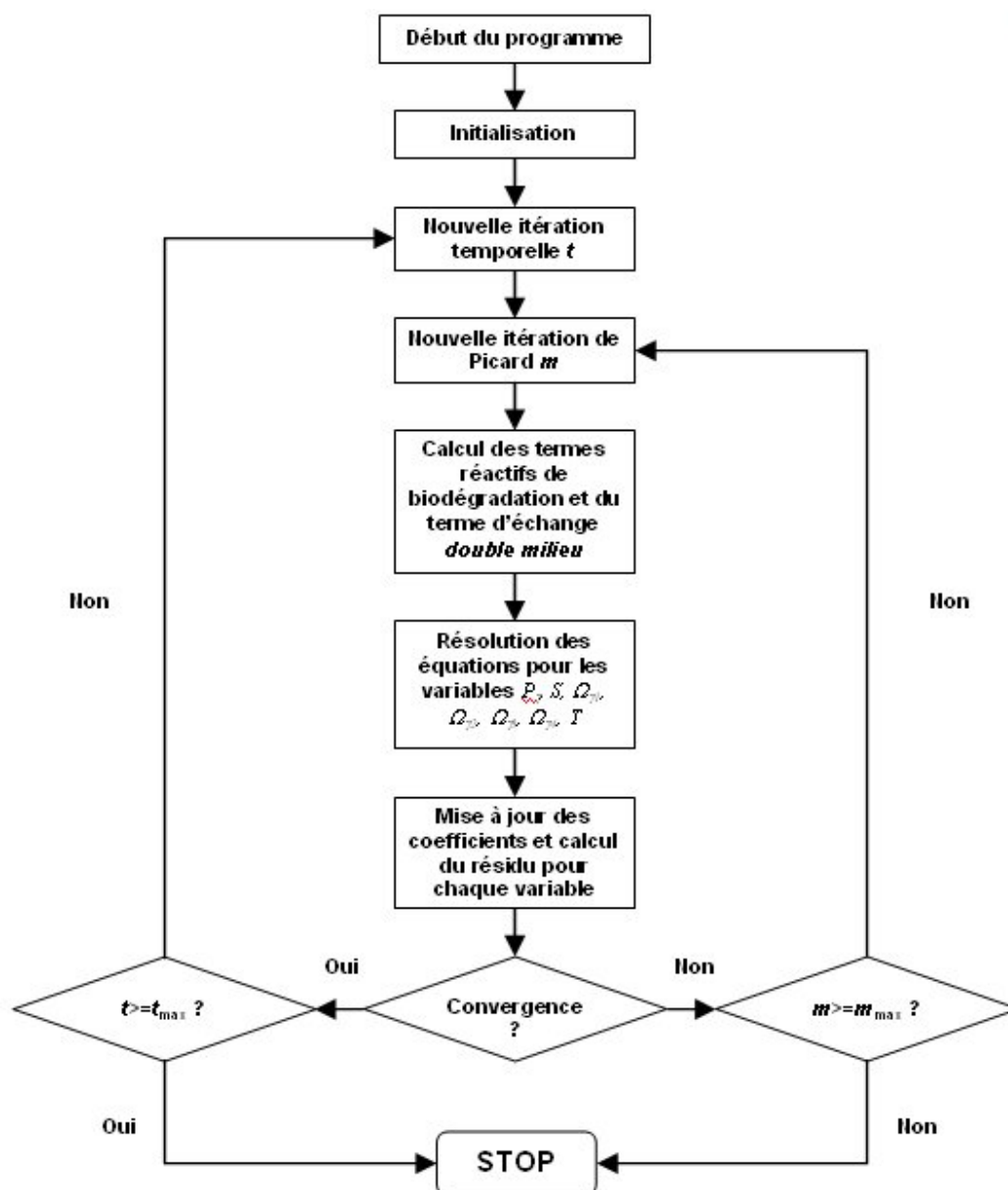


FIG. 4.2 – Algorithme utilisé dans le code MATAABIO

Pour tester le comportement du code de calcul MATAABIO dans des conditions d'injection de phase liquide dans un milieu partiellement saturé, nous allons nous appuyer sur un test classique appelé test de Buckley-Leverett

Test de Buckley-Leverett Le test dit de Buckley-Leverett permet de prédire l'évolution d'un front de saturation monodirectionnel en milieu poreux insaturé. L'intérêt de ce test est qu'il permet de calculer une solution semi-analytique décrivant la position du "choc" (front) de saturation lié à l'injection de la phase liquide dans un milieu insaturé. Bien entendu, ce test présente des limites puisqu'il suppose en particulier que la pression capillaire du milieu est négligeable et que les deux phases mobiles sont incompressibles. Le détail du développement de la solution théorique ainsi que les hypothèses utilisées sont fournis en Annexe C. Les équations 2.226 et 2.227 sont donc simplifiées de façon à adapter le système d'équations au problème que nous souhaitons traiter.

Nous considérons tout d'abord l'injection d'eau à vitesse constante $V_{\lambda inj}$ dans un milieu poreux saturé en air ($S = 0,001$). L'injection est monodirectionnelle et l'écoulement est monodimensionnel. Le domaine considéré mesure 1 mètre et la Figure 4.3 présente de façon schématique le dispositif que l'on utiliserait pour simuler ce test expérimentalement.

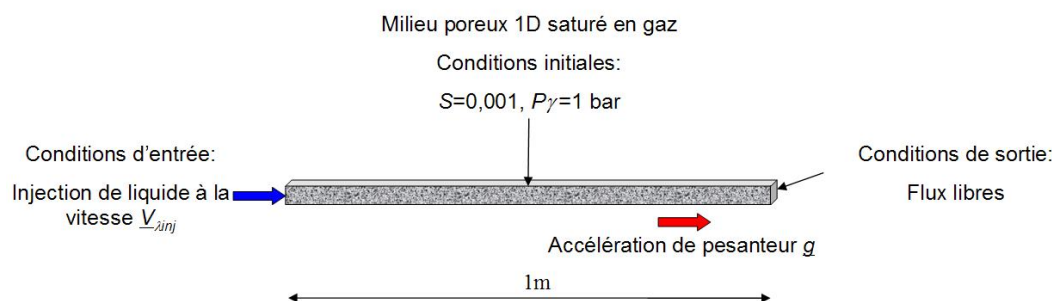


FIG. 4.3 – Représentation schématique du test de Buckley-Leverett

Les propriétés du milieu considéré sont données dans le Tableau 4.1.

Le développement théorique présenté en Annexe C met en évidence qu'il faut distinguer deux cas. Le premier cas est celui où l'injection de la phase liquide dans le milieu poreux ne subit aucune accélération gravitaire. La seule force qui permet au liquide d'envahir le milieu est la force générée par la surpression liée à l'injection du fluide. Dans ce cas la propagation de l'onde de saturation dans le milieu est toujours prédite de la même façon et aucun régime particulier ne doit être distingué. En revanche, dans le cas où l'injection de la phase liquide dans le milieu poreux se fait dans le sens de l'accélération, la théorie de Buckley-Leverett développée en Annexe C met en évidence deux régimes. Le premier

TAB. 4.1 – Propriétés physiques du milieu et des fluides utilisées pour réaliser le test de Buckley-Leverett

$\rho_\gamma = 1 \text{ kg/m}^3$	$\mu_\gamma = 17,6 \cdot 10^{-6} \text{ Pa.s}$
$\rho_\lambda = 1000 \text{ kg/m}^3$	$\mu_\lambda = 1,0 \cdot 10^{-3} \text{ Pa.s}$
$k_{r\gamma} = (1 - S_\lambda)^{n_\gamma}$	$k_{r\lambda} = (S_\lambda)^{n_\lambda}$
$S \in [0,001 - 0,999]$	$S_R = 0$
$k_{r\gamma}^0 = 1$	$k_{r\lambda}^0 = 1$
$n_\gamma = 3$	$n_\lambda = 3$
$K = 10^{-11} \text{ m}^2$	$\epsilon = 0,5$

régime que nous appelons *régime gravitaire* est entièrement contrôlé par l'accélération de pesanteur. En effet, si la vitesse d'injection de la phase liquide $\underline{V}_{\lambda inj}$ ne dépasse pas une vitesse limite que l'on appelle $\underline{V}_{\lambda inj limite}$, la force engendrée par la pression d'injection est inférieure à la force de pesanteur et le drainage de la phase liquide dans le milieu est un drainage uniquement gravitaire. En revanche, dans le cas où la vitesse d'injection est supérieure à la vitesse $\underline{V}_{\lambda inj limite}$, la progression de la phase liquide dans le milieu poreux n'est plus contrôlée uniquement par la pesanteur, mais par la surpression engendrée par l'injection de la phase liquide. Le développement théorique présenté en Annexe C décrit comment la position du front de saturation ainsi que la saturation en amont du front sont calculées selon que le régime d'écoulement est *gravitaire* ou non.

Sauf indications contraires, les résultats que nous présentons dans ces parties sont obtenus à l'aide du code de calcul MATAABIO en utilisant des pas d'espace δx de 2,56 cm et des pas de temps δt de 1 seconde.

Test de Buckley-Leverett sans effet de gravité Nous présentons ici le test de Buckley-Leverett sans effet de gravité. L'accélération de pesanteur est donc considérée nulle ($g_x = 0 \text{ m/s}^2$) et la vitesse d'injection que nous utilisons est $\underline{V}_{\lambda inj} = 1 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$. Comme nous l'avons mentionné plus haut, dans ce cas il n'existe pas de vitesse limite et le champ de saturation dans le milieu est prédit par la théorie de Buckley-Leverett. La Figure 4.4 présente les résultats obtenus avec le code de calcul et les compare avec la solution analytique déduite de la théorie de Buckley-Leverett.

On constate sur la Figure 4.4 que le code de calcul permet bien de prédire la position du front de saturation, ainsi que la valeur de la saturation au front. En revanche, on constate également que le front est plus "étalé" dans le cas du calcul numérique. En effet, ceci est dû au schéma amont implicite "des pétroliers" que nous avons introduit afin de pouvoir capturer les "chocs". Ce type de schéma introduit de la "diffusion numérique" autour des discontinuités (cf. Aziz and Settari (1979)). En revanche, ce schéma n'introduit pas d'oscillations et nous permet de suivre efficacement la position des fronts de saturation

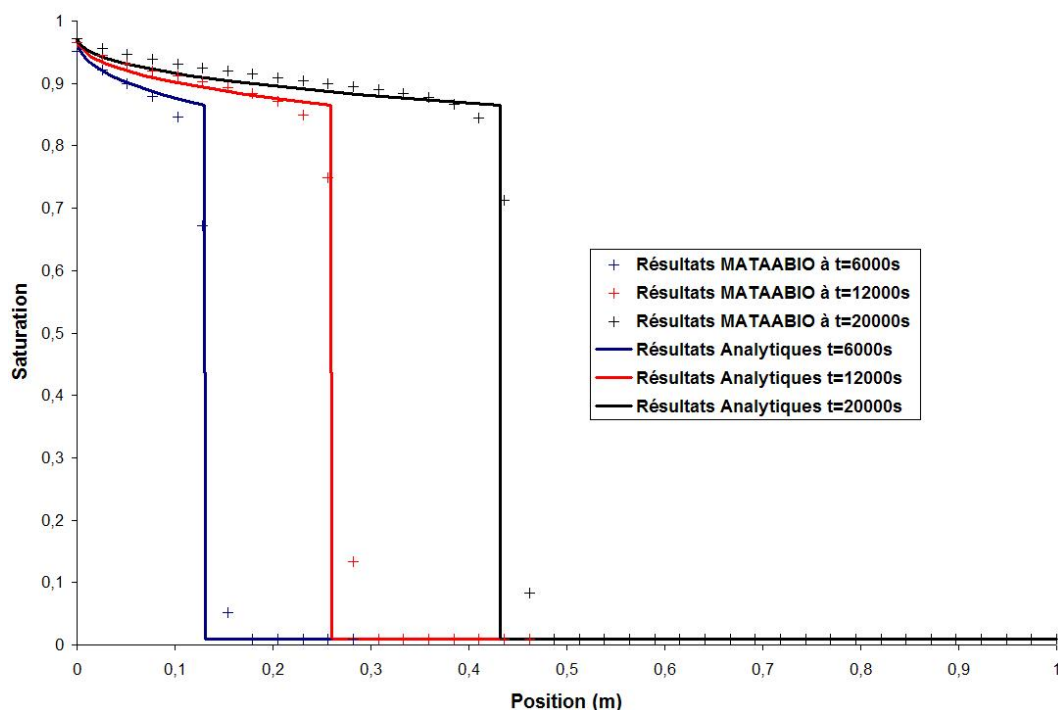


FIG. 4.4 – Test de Buckley-Leverett sans effet de gravité $\underline{V}_{\lambda inj} = 1 \cdot 10^{-5}$ m/s

dans le domaine. Néanmoins, cette "diffusion numérique" est faible pour nos applications et diminue avec le pas d'espace.

Test de Buckley-Leverett avec effet de gravité Les tests présentés ici prennent en compte l'effet de la gravité sur les résultats du test de Buckley-Leverett. Nous considérons que l'accélération de pesanteur agit dans la même direction que l'injection de la phase liquide ($g_x = 9,81$ m/s²). Nous considérons également une vitesse d'injection $\underline{V}_{\lambda inj} = 1 \cdot 10^{-5}$ m/s.

Comme cela est expliqué en Annexe C, dans le cas où l'on prend en compte les effets de la gravité, il est nécessaire de calculer la vitesse limite admissible d'injection en deçà de laquelle la théorie de Buckley-Leverett "classique" ne peut s'appliquer, et une solution de Buckley-Leverett "limite" doit être introduite. On applique donc la démarche présentée en Annexe et l'on commence par calculer la valeur de la saturation au front donnée par la théorie de Buckley-Leverett. Pour les conditions que nous imposons, nous obtenons une saturation au front $S_F = 0,659$ calculée par la théorie de Buckley-Leverett. Pour cette valeur de saturation nous pouvons calculer la vitesse limite admissible : $\underline{V}_{\lambda inj limite} = 7,584 \cdot 10^{-5}$ m/s. Or cette vitesse est supérieure à la vitesse d'injection que l'on impose en entrée du domaine. Par conséquent la théorie de Buckley-Leverett n'est pas adaptée pour décrire l'évolution de la saturation dans le domaine, puisque le mouvement de la

phase liquide dans le domaine est entièrement géré par le drainage gravitaire. Néanmoins, comme nous le présentons en Annexe C, la saturation au front ainsi que la position du front peuvent être calculées d'après les conditions initiales. On obtient une saturation au front $S_F = 0,335$ et une vitesse du front $\underline{V}_{\lambda F} = 9,9410^{-5} \text{m/s}$. Ceci nous permet de construire la solution analytique et de la comparer avec les résultats obtenus avec le code de calcul MATAABIO (cf. Figure 4.5).

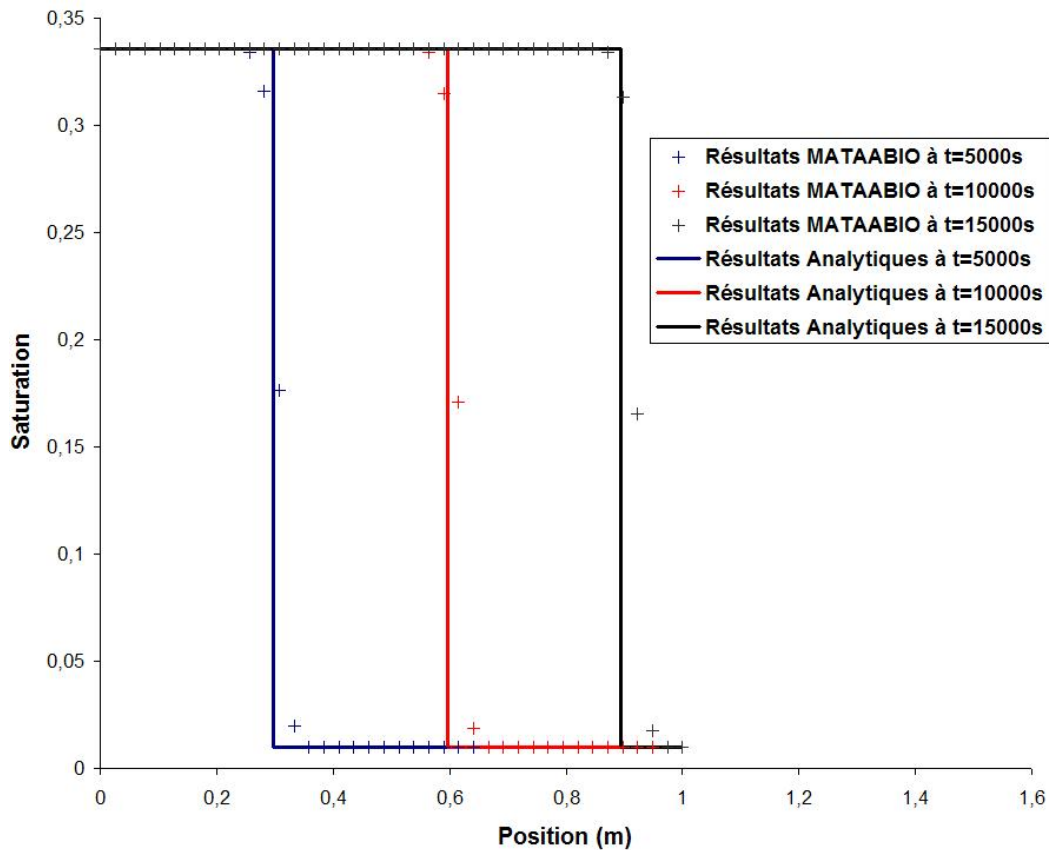


FIG. 4.5 – Test de Buckley-Leverett avec effet de gravité. $\underline{V}_{\lambda inj} = 1 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$

Nous testons ensuite le cas où la vitesse d'injection est supérieure à la vitesse limite en deçà de laquelle l'écoulement de la phase liquide dans le milieu est entièrement géré par drainage gravitaire. Nous avons donc utilisé une vitesse d'injection $\underline{V}_{\lambda inj} = 10^{-3} \text{ m/s}$ de façon à être dans les conditions telles que $V_{\lambda inj} > \underline{V}_{\lambda inj limite}$. Dans ce cas, comme nous l'avons développé en Annexe C, l'évolution de la saturation en phase liquide au sein du milieu est prédite par la théorie de Buckley-Leverett. La Figure 4.6 présente les résultats obtenus avec le code de calcul MATAABIO comparés avec la solution analytique donnée par la théorie de Buckley-Leverett.

Nous constatons sur les deux Figures 4.5 et 4.6 que les résultats sont bien différents suivant que l'on impose une vitesse d'injection supérieure ou inférieure à $\underline{V}_{\lambda inj limite}$. Dans

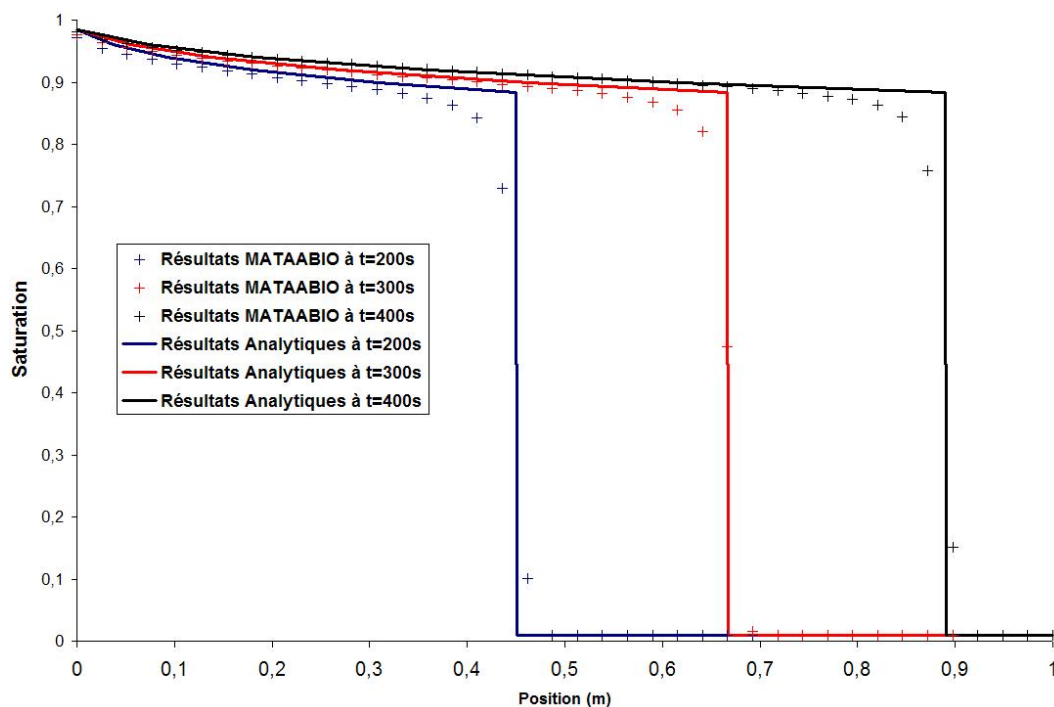


FIG. 4.6 – Test de Buckley-Leverett avec effet de gravité. $\underline{V}_{\lambda inj} = 1 \cdot 10^{-3}$ m/s

le cas où la vitesse d'injection est inférieure à $\underline{V}_{\lambda inj limite}$, le liquide ne s'accumule pas dans la zone d'injection et est évacué sous l'effet de la gravité. Ceci impose une saturation constante derrière le front. En revanche, lorsque la vitesse d'injection est supérieure à $\underline{V}_{\lambda inj limite}$, le liquide s'accumule à l'entrée avant d'être transporté vers la sortie du domaine. La décroissance de la saturation jusqu'au front peut être calculée par la théorie de Buckley-Leverett. Dans les deux cas, on constate que le code de calcul permet de prédire l'évolution de la saturation dans le domaine, avec toujours un phénomène de "diffusion numérique" au niveau du front.

Comme dans le cas où l'on néglige l'effet de la gravité, lorsque l'on utilise des pas d'espace plus faible, l'effet de diffusion numérique diminue. Cependant, il n'est pas possible d'utiliser n'importe quel pas d'espace. En effet, il existe une relation entre le pas de temps et le pas d'espace garantissant la stabilité du schéma numérique. Cette relation est souvent appelée condition de Courant-Friedrich-Levy (CFL). En effet, dans le schéma que nous utilisons le fait d'avoir linéarisé les termes dépendants de la saturation lors de la discrétisation des équations 2.227 et 2.226 diminue la stabilité du système et impose une condition de stabilité. Dans le cas de transport couplé de plusieurs quantités (comme dans le cas des écoulements diphasiques en milieu poreux), il n'existe pas de condition de CFL simple à exprimer. La détermination d'une condition de CFL est également rendue difficile par le caractère non linéaire des équations décrivant le transfert des deux phases mobiles

au sein du milieu poreux. Néanmoins, il nous est possible d'exprimer un estimateur pour cette CFL. Pour ce faire, nous utilisons le développement proposé en Annexe C et nous évaluons la vitesse V_{CFL} intervenant dans la condition de CFL grâce à la relation 4.7.

$$V_{CFL} = \frac{\|V_{\lambda inj}\|}{\epsilon} \frac{\partial f_{\lambda}}{\partial S} \quad (4.7)$$

$$\text{avec } f_{\lambda} = \frac{k_{R\lambda}}{\mu_{\lambda}} \left(\frac{k_{R\lambda}}{\mu_{\lambda}} + \frac{k_{R\gamma}}{\mu_{\gamma}} \right)^{-1} \left(1 + \frac{K \frac{k_{R\gamma}}{\mu_{\gamma}} g_x (\rho_{\gamma} - \rho_{\lambda})}{\|V_{\lambda inj}\|} \right) \quad (4.8)$$

Par conséquent, le "pseudo" critère de stabilité du schéma peut s'exprimer de la façon suivante :

$$\frac{\delta x}{\delta t} \geq \frac{\|V_{\lambda inj}\|}{\epsilon} \frac{\partial f_{\lambda}}{\partial S} \quad (4.9)$$

Si nous calculons la vitesse CFL au niveau du front, nous obtenons la condition de CFL présentée par la relation 4.10.

$$\delta x \geq 1,8 \cdot 10^{-2} \delta t \quad (4.10)$$

Si nous calculons la valeur du rapport $\delta x/\delta t$ pour les résultats que nous avons présentés sur la Figure 4.6, nous obtenons une valeur de $\delta x/\delta t = 2,56 \cdot 10^{-2}$. La condition de CFL est donc respecté et le schéma utilisé est donc stable. Ceci est confirmé par les résultats présentés sur la Figure 4.6 puisqu'aucune oscillation n'y apparaît. En réalité, ce critère n'est pas exact, et il est nécessaire de prendre une certaine marge de sécurité par rapport à la valeur calculée afin d'assurer la stabilité du schéma. Nous avons testé plusieurs valeurs du rapport $\delta x/\delta t$ dans le cas du test de Buckley-Leverett avec effet de la gravité et une vitesse d'injection de $V_{\lambda inj} = 1 \cdot 10^{-3}$ m/s telle que $V_{\lambda inj} > V_{\lambda inj \text{ limite}}$.

Nous avons pu constater que pour des valeurs de δt supérieures à 5 secondes les calculs deviennent instables. Ceci est logique avec la condition de CFL que nous avons développée précédemment, puisque dans ce cas, on a $\frac{\delta x}{\delta t} = 5,12 \cdot 10^{-3}$ et la condition de CFL n'est pas respectée.

Discussion quant à l'utilisation de l'équation de Richards La résolution du problème de Buckley-Leverett que nous venons de présenter nous incite à revenir sur la validité de l'équation de *Richards* utilisée très souvent pour décrire le déplacement d'un front d'infiltration de liquide dans un milieu partiellement saturé. Comme nous l'avons présenté dans le Chapitre 1, l'utilisation de ces équations n'est pas adaptée pour décrire les écoulements diphasiques dans les CSD. En effet, du fait que nous nous intéressons à la production de biogaz et à sa migration dans les CSD, nous avons besoin de déterminer la vitesse de filtration de la phase gaz à chaque pas de temps, puisque cette vitesse joue un

rôle primordial dans le transport du méthane et du dioxyde de carbone. Par conséquent, nous devons résoudre l'équation de conservation de la phase gaz afin de pouvoir déterminer les gradients de pression au sein de cette phase et d'en déduire ensuite sa vitesse. Or, l'équation de *Richards* suppose que le gradient de pression dans la phase gaz est nul à tout instant et le transport des constituants présents dans la phase gaz ne peut être estimé dans ce modèle qu'en prenant en compte l'effet de la diffusion moléculaire. Nous écartons donc l'utilisation éventuelle de ce type d'approche pour une raison pratique. Des éléments complémentaires à cette discussion peuvent être trouvés dans Jaffre et al. (2006).

D'autre part, même si on ne s'intéressait pas au transport des constituants dans la phase gaz par convection, on montre ci-dessous que le modèle de Richards ne serait pas adapté à une modélisation précise de la réinjection des lixiviats dans ces milieux très perméables et peu capillaires que sont les stockages. Par exemple, le fait d'utiliser l'équation de *Richards* ne permet pas de valider le test de Buckley-Leverett. Or il est primordial que le modèle utilisé pour décrire les écoulements diphasiques puisse décrire (au minimum) de manière correcte la position du front de saturation. C'est pourquoi nous avons comparé le comportement d'un modèle se rapprochant de l'équation de *Richards* avec notre modèle décrivant les écoulements diphasiques. L'élément de comparaison auquel nous nous intéressons est la position du front de saturation indiqué par chacun des deux modèles.

Afin de simuler le comportement d'un modèle d'écoulement se rapprochant de l'équation de *Richards*, nous avons utilisé le code de calcul MATAABIO en divisant la viscosité de la phase gaz μ_γ par 100. Nous diminuons ainsi les gradients de pression dans la phase gaz qui peuvent se former en particulier lors des période d'injection. Nous appellerons ce modèle "pseudo Richards" dans la suite de la discussion, car il n'est pas basé sur la connaissance d'une relation de pression capillaire, inhérente au modèle de Richards, par contre il s'appuie sur la valeur faible de la viscosité du gaz invoquée comme justification au modèle de Richards. La comparaison des résultats en terme de saturation pour le cas du régime non gravitaire ($V_{\lambda inj} > \underline{V}_{\lambda inj limite}$) est présenté sur la Figure 4.7. La Figure 4.8 compare quant à elle les résultats en terme de pression de la phase gaz, toujours dans le cas du régime non gravitaire.

La Figure 4.8 montre que, dans le cas de l'approche "pseudo Richards", les gradients de pression sont plus faibles que dans le cas où l'on utilise la loi de Darcy généralisée pour décrire les écoulements des deux phases mobiles (modèle utilisé dans MATAABIO). Ceci a un impact direct sur la position du front de saturation dans le milieu (cf. Figure 4.7). En effet, le modèle "pseudo Richards" sous-estime l'avancée du front de saturation dans le milieu et décrit mal la valeur de la saturation en phase liquide en amont du front.

En revanche, dans le cas gravitaire, même si le champ de pression est mal prédit par le modèle "pseudo Richards", comme l'écoulement est principalement régit par l'accé-

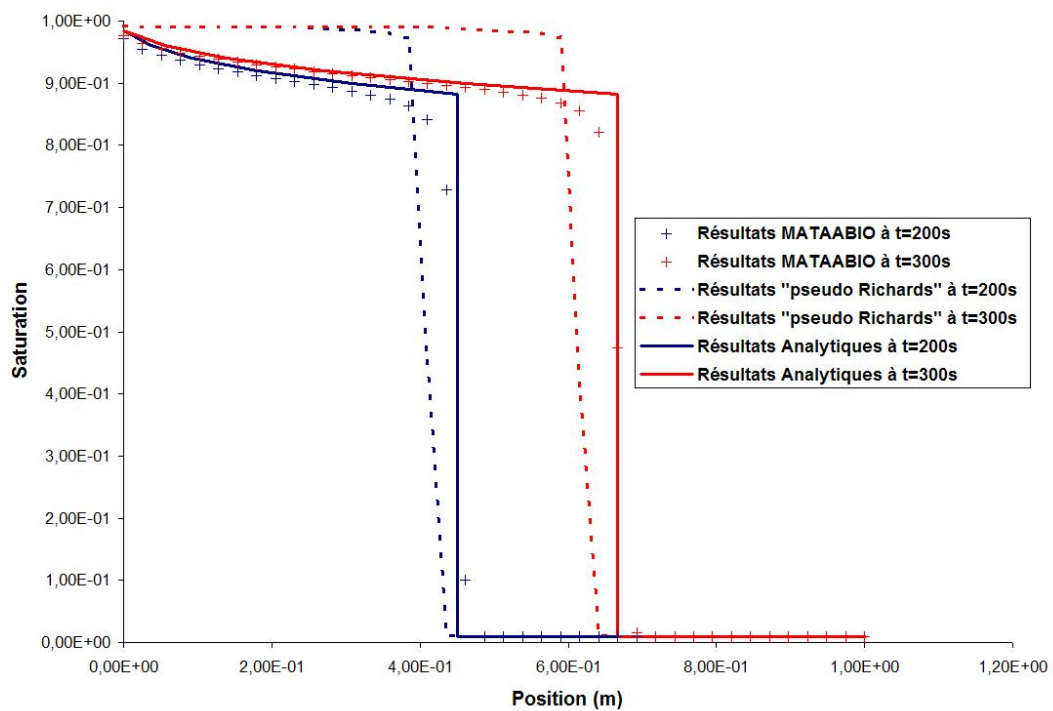


FIG. 4.7 – Champs de saturation obtenus par les approches de type "Darcy" ou "pseudo Richards" en régime non gravitaire

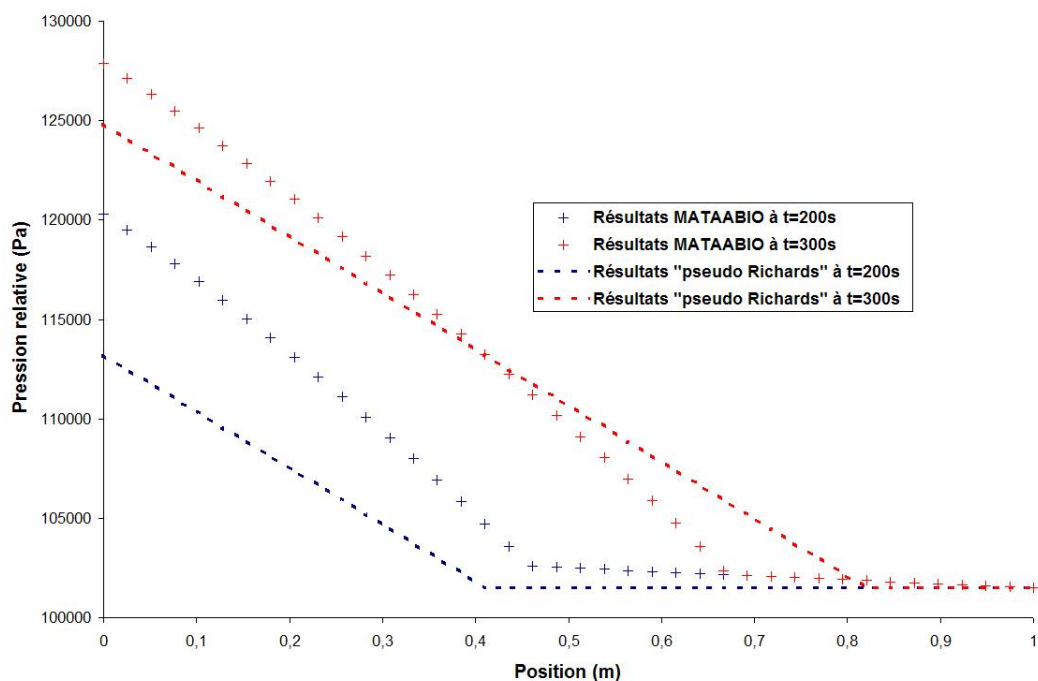


FIG. 4.8 – Champs de pression obtenus par les approches de type "Darcy" ou "pseudo Richards" en régime non gravitaire

lération de pesanteur, les champs de saturation sont quant à eux bien décrits. Sur la Figure 4.9, nous ne pouvons d'ailleurs remarquer aucune différence entre les champs de saturation prédits par le modèle de Darcy généralisé utilisé par MATAABIO et le modèle "pseudo Richards" (rappelons ici que le vrai modèle de Richards poserait des problèmes d'utilisation dans ce cas avec pression capillaire nulle).

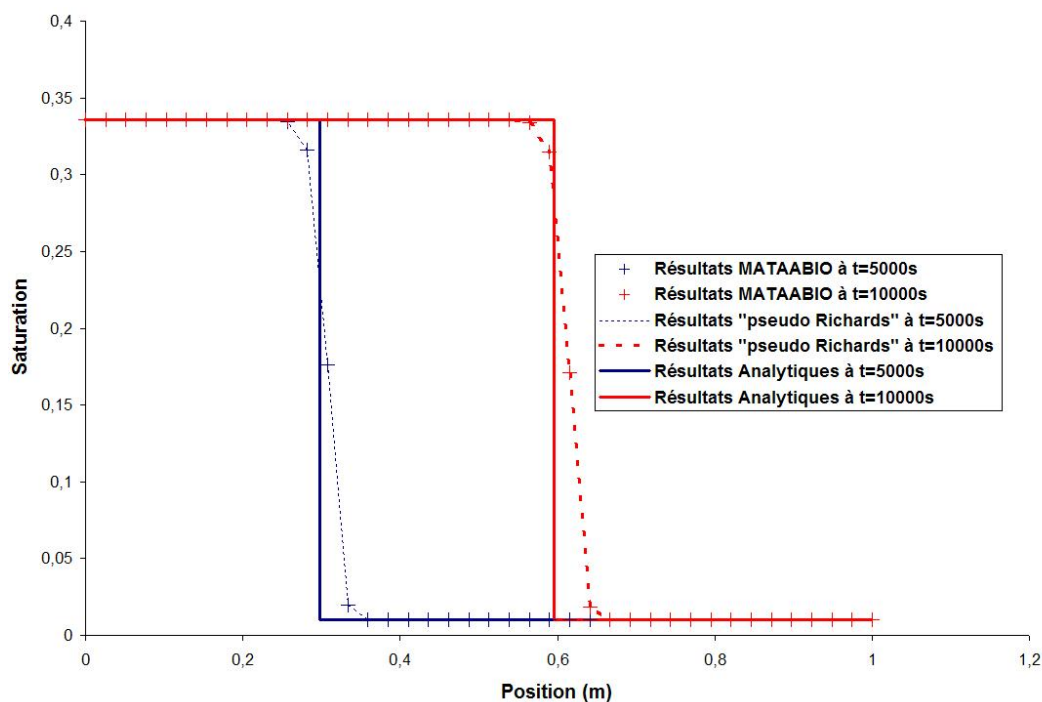


FIG. 4.9 – Champs de pression obtenus par les approches de type "Darcy" ou "pseudo Richards" en régime gravitaire

En conclusion, les résultats que nous avons présentés nous permettent de conclure que l'équation de Richards pourrait à la rigueur être utilisable pour prédire les champs de saturation dans le cas du régime gravitaire, à condition d'arriver à résoudre le problème pour une valeur de la courbe de pression capillaire qui ne génère pas de diffusion marquée. Elle ne permet néanmoins pas d'obtenir les champs de pression dans la phase gaz. Elle ne permet pas non plus de prédire les champs de saturation correctement dans le cas du régime non gravitaire, qui correspond à la majorité des configurations de réinjection. C'est pourquoi, l'équation de Richards n'est pas adaptée pour décrire les écoulements de gaz et de liquide dans les ISD bioréacteurs.

Discussion quant à la stratégie intuitive d'injection Les résultats que nous avons présentés dans cette partie nous permettent d'imaginer de façon intuitive les stratégies de réinjection les plus adaptées. En effet, l'objectif de la réinjection des lixiviats dans les ISD bioréacteurs est d'obtenir une teneur en eau locale optimale pour l'activité biologique

anaérobie. Comme nous l'avons présenté dans le Chapitre 3 au paragraphe 3.5.2.3, la biodégradation anaérobie dépend fortement de la saturation locale en phase liquide. Nous cherchons ici à savoir s'il est avantageux de se trouver dans le cas du *régime gravitaire* ou non en terme de biodégradation. Considérons toujours le cas 1D présenté précédemment pour tester le problème de Buckley-Leverett. Nous avons vu que si nous nous trouvons en régime *gravitaire*, la saturation au front et en amont du front vaut $S = 0,33$ et la vitesse de front gravitaire est de l'ordre de $\underline{V}_{\lambda F} = 1 \cdot 10^{-4}$ m/s. En revanche, lors d'une injection sous pression comme cela est le cas lorsque l'on injecte à $\underline{V}_{\lambda inj} = 10^{-3}$ m/s, nous pouvons considérer que la saturation en amont du front est rapidement de l'ordre de l'unité et que la vitesse de front vaut $\underline{V}_{\lambda F} = 2,1 \cdot 10^{-3}$ m/s. Par conséquent, dans le cas du régime *gravitaire*, le front de saturation est 20 fois moins rapide qu'en régime non gravitaire. Or, si l'on considère un déchet dont la masse volumique est de 750 kg/m^3 dont 32% d'eau adsorbée, d'après le modèle de biodégradation que nous utilisons, le taux de production de méthane est 2 fois plus important dans le cas où $S = 0,33$ que dans le cas où $S = 1$. Or la vitesse du front étant 20 fois plus faible dans le cas du régime *gravitaire*, pour une même quantité d'eau injectée, on produira environ 10 fois plus de méthane dans le cas du régime *gravitaire*.

Ce calcul est bien entendu indicatif et se base sur les expériences d'injection 1D que nous avons présentées précédemment. Néanmoins, cela nous permet de définir intuitivement les méthodes d'injection les plus efficaces. On préférera en particulier injecter le lixiviat dans un plan horizontal couvrant une grande surface et à un débit tel que le régime soit *gravitaire* plutôt que d'injecter ponctuellement le lixiviat à débit élevé.

4.2.2 Diffusion multi constituant

L'objectif de cette partie est de vérifier l'influence de la diffusion multi-constituant sur le comportement du mélange gazeux que nous considérons. Prenons, par exemple, le cas du mélange de quatre constituants : N_2 , O_2 , CH_4 et CO_2 . Nous allons nous attacher à tester l'impact des coefficients extra-diagonaux de la matrice de diffusion de Stefan-Maxwell sur les champs de fractions massiques. Pour ce faire, nous considérons un mélange gazeux dans des conditions de diffusion pure. Le domaine considéré est un domaine 1-D de 1 mètre, aux bornes duquel nous imposons des conditions de Dirichlet pour les fractions massiques de chacun des constituants. Le schéma du dispositif est représenté sur la Figure 4.10.

Dans ce cas, initialement la matrice de diffusion massique de Stefan-Maxwell pour

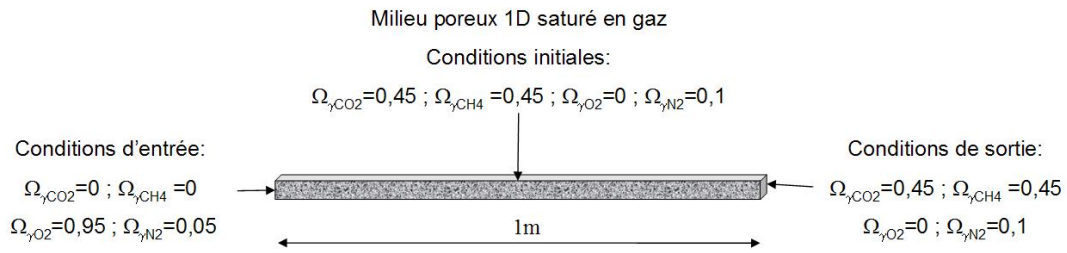


FIG. 4.10 – Dispositif "modèle" utilisé pour tester la diffusion multi-constituant dans un mélange gazeux

chaque constituant se présente de la manière suivante :

$$[\langle D_\gamma \rangle^\gamma] = \begin{bmatrix} 2,29 \cdot 10^{-5} & -5,14 \cdot 10^{-10} & 7,3 \cdot 10^{-10} \\ 8,03 \cdot 10^{-8} & 2,14 \cdot 10^{-5} & 8,46 \cdot 10^{-7} \\ -2,07 \cdot 10^{-8} & -7,07 \cdot 10^{-7} & 2,16 \cdot 10^{-5} \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

Pour calculer la matrice 4.11, nous avons considéré que le premier constituant est l'oxygène (O_2), le second le dioxyde de carbone (CO_2), le troisième le méthane (CH_4) et le dernier le diazote (N_2). Nous pouvons remarquer sur la matrice 4.11 que l'ensemble des termes extra-diagonaux sont au minimum d'un ordre de grandeur inférieurs aux éléments de la diagonale. Ils auront donc un impact moindre sur la diffusion des espèces dans le gaz. Ceci signifie que les termes de diffusion croisés dans le cas du mélange que nous considérons sont probablement d'une importance négligeable. C'est ce que nous chercherons à vérifier par la suite.

Les résultats obtenus dans chacun des deux cas considérés (matrice de diffusion diagonale et matrice de diffusion complète) après un temps de diffusion de 10000 secondes sont présentés sur la Figure 4.11.

Nous pouvons constater sur la Figure 4.11 que les différences entre les champs de fractions massiques obtenus lors des simulations utilisant la matrice de diffusion de Stefan-Maxwell complète, d'une part, et lors des simulations utilisant une matrice de diffusion de Stefan-Maxwell diagonale, d'autre part, sont faibles. L'écart maximal est obtenu pour les fractions massiques d'oxygène en position $x=2,05$ cm avec un écart de 1,88% entre les deux types de simulations.

Dans le cas que nous venons de présenter, il n'est donc pas nécessaire de conserver les éléments non-diagonaux de la matrice de diffusion de Stefan-Maxwell pour décrire correctement la diffusion des différents éléments présents dans la phase gaz. Néanmoins, même si dans l'ensemble des configurations simples que nous avons testé, nous avons

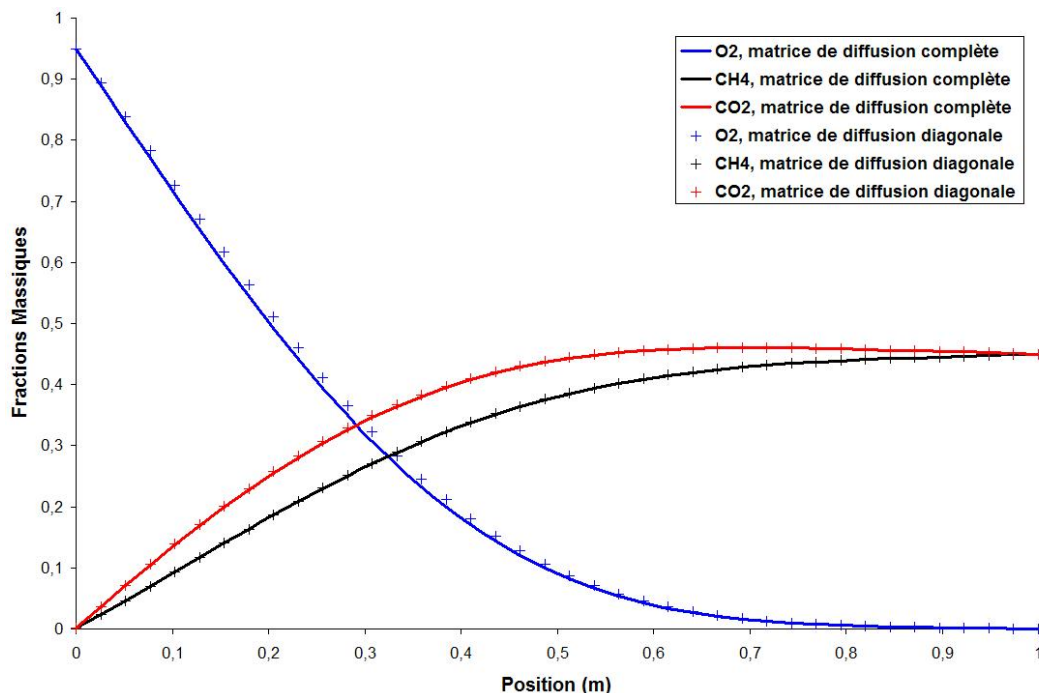


FIG. 4.11 – Diffusion multi-constituant dans un mélange gazeux

retrouvé la même tendance, ce résultat ne peut pas directement être généralisé. En effet, nous n'avons pas, par exemple, testé de situation où le phénomène de rétro-diffusion peut jouer un rôle non négligeable. Nous conserverons donc la description exacte de la matrice de diffusion de Stefan-Maxwell tout en conservant à l'esprit que dans beaucoup de situations concrètes, cette matrice peut être remplacée par sa diagonale.

De plus, nous tenons à mentionner que le calcul de la matrice de Stefan-Maxwell est nécessaire, même si l'on ne considère que sa diagonale, puisque les coefficients diagonaux de la matrice de diffusion de Stefan-Maxwell ne sauraient être calculés indépendamment (cf. Chapitre 3, paragraphe 3.3.3).

4.2.3 Comportement du modèle : impact de la recirculation de lixiviats sur la production de biogaz

Le modèle que nous avons développé est un modèle complexe qui couple les transferts réactifs de masse et de chaleur au sein des ISD. Nous nous intéressons ici au couplage entre la réinjection de lixiviat dans une alvéole de stockage modèle avec la biodégradation de la matière organique et la production de biogaz. Le domaine que nous considérons est un domaine 3D de 20 mètres de hauteur, 10 mètres de profondeur et de 5 mètres de largeur (cf. Figure 4.12).

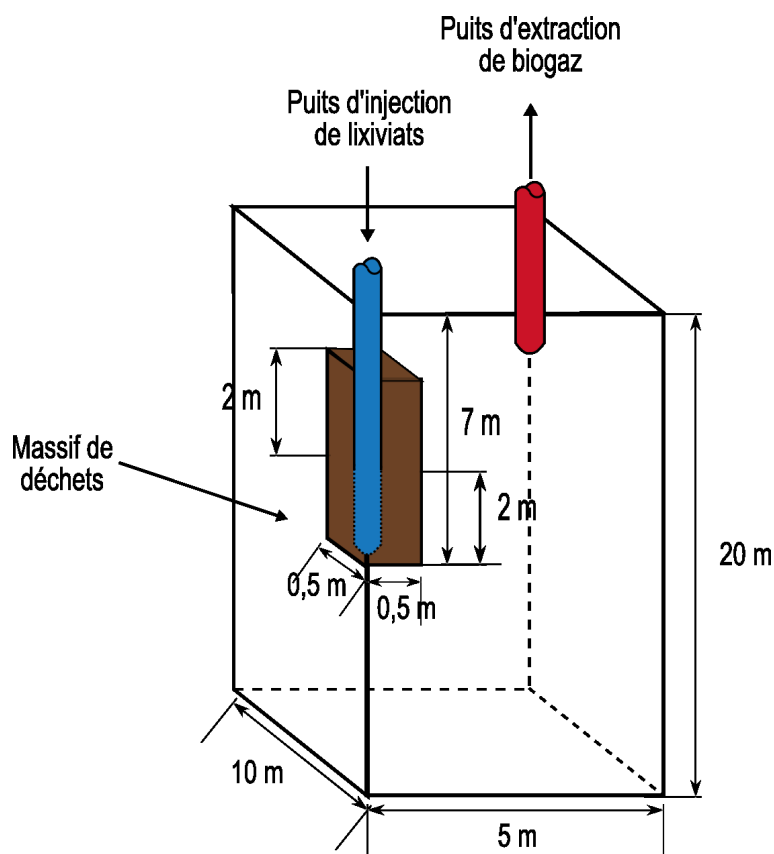


FIG. 4.12 – Alvéole de stockage modèle

Le dispositif d'injection considéré est un drain vertical positionné en $x = 0 \text{ m}$, $y = 0 \text{ m}$ et crépiné sur 2 mètres entre la hauteur $z = -5 \text{ m}$ et la hauteur $z = -7 \text{ m}$. L'installation d'injection est insérée dans un matériau drainant de perméabilité intrinsèque 10^{-9} m^2 de façon à drainer le liquide injecté. Ce matériau drainant est inséré dans la zone définie par les coordonnées suivantes : $0 \leq x \leq 0,5 \text{ m}$, $0 \leq y \leq 0,5 \text{ m}$, $3 \leq z \leq 7 \text{ m}$ (cf. Figure 4.12). Le débit injecté dans le massif est de $15 \text{ m}^3/\text{h}$ et l'injection de la phase liquide dure 1 heure. La composition du déchet est une composition de référence analogue à celle du MODECOM 93 (MODECOM de référence). La fraction massique initiale d'oxygène dans le domaine est de 21% contre 78% de diazote. L'essai est isotherme et se déroule à 350 K.

La répartition de la saturation dans le domaine au cours de la première semaine d'injection est présenté sur la Figure 4.13. La Figure 4.13 représente en réalité une coupe du domaine dans le plan $y = 0 \text{ m}$ afin de rendre les résultats plus lisibles.

Sur la Figure 4.13 nous constatons tout d'abord que pendant la phase d'injection, il y a création d'un "panache" de saturation au voisinage du système d'injection. On définit le rayon d'action du dispositif d'injection comme étant la dimension de la zone du domaine voisine du dispositif d'injection où la saturation est supérieure à 50%. A la fin de la période d'injection, nous pouvons évaluer le rayon d'action du dispositif d'injection à environ 2

mètres. Il convient de mentionner ici qu'aucune anisotropie des propriétés physiques du matériau n'a été introduite. Si la perméabilité intrinsèque horizontale du déchet avait été plus importante que sa perméabilité verticale, le rayon d'action du dispositif d'injection aurait été plus important.

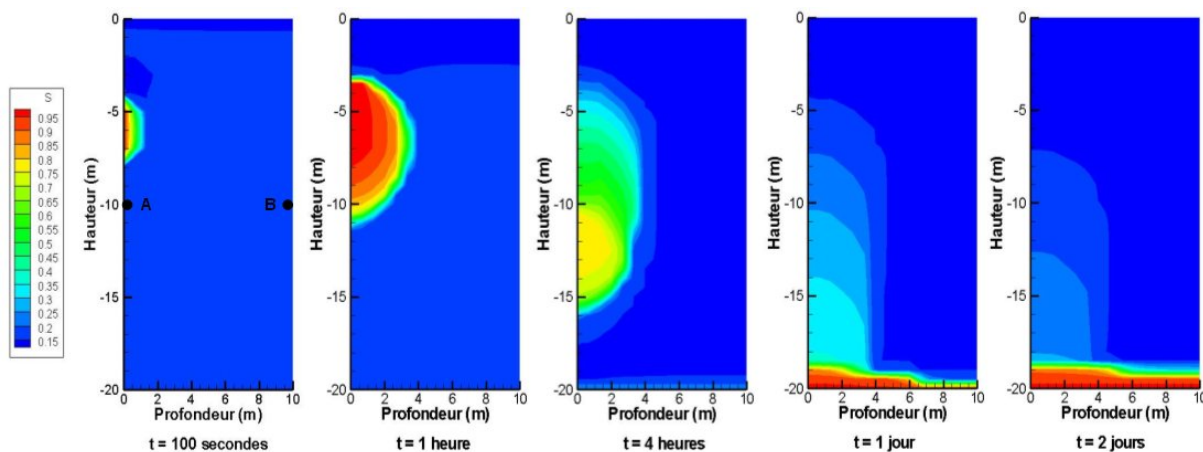


FIG. 4.13 – Répartition de la saturation dans le domaine

Si nous considérons les deux points **A** et **B** (cf. Figure 4.13) définis par les coordonnées ($x=0$; $y=0$; $z=-10$) et ($x=10$; $y=0$; $z=-10$), nous pouvons nous apercevoir sur la Figure 4.13 que le point **A** se situe au droit du système d'injection et est soumis à de fortes variations de saturation au cours du temps puisque la phase liquide injectée pendant la phase d'injection est ensuite transportée verticalement sous l'effet de la gravité. En revanche, le point **B** ne subit que de faibles variations de saturations liées au drainage gravitaire de la saturation initiale (cf. Figure 4.13). La comparaison de l'évolution des fractions massiques de méthane et de dioxyde de carbone au cours du temps entre ces deux points nous donne donc une indication précise de l'impact de la recirculation sur la biodégradation des OM. La Figure 4.14 met en évidence que la production de biogaz au point **A** s'accélère au moment où le "panache" de saturation arrive en ce point. En parallèle, même si le point **B** se situe à la même hauteur dans le massif, la production de biogaz en ce point n'accélère que bien plus tard, car aucune variation de teneur en eau locale n'intervient. L'impact de la teneur en eau locale sur la production de biogaz est donc très nette lorsque l'on compare le comportement temporel des variables du système aux points **A** et **B**. Nous remarquons d'ailleurs que lorsque le "panache" de saturation est drainé par gravité et que la saturation au point **A** diminue, la production de biogaz est également ralentie au point **A**. Ceci se caractérise sur la Figure 4.14 par une rupture de pente très nette sur les courbes présentant l'évolution des fractions massiques de méthane et de dioxyde de carbone au point **A**. Finalement, nous pouvons remarquer qu'aux temps longs, la fraction massique de méthane au point **B** finit par augmenter fortement. Ceci est

dû au fait que la zone du domaine sous jacente au point **B** est une zone où la saturation est forte et où le gaz est chassé par l'arrivée du "panache" de saturation. Le gaz ainsi chassé migre vers les zones supérieures et donc vers le point **B**.

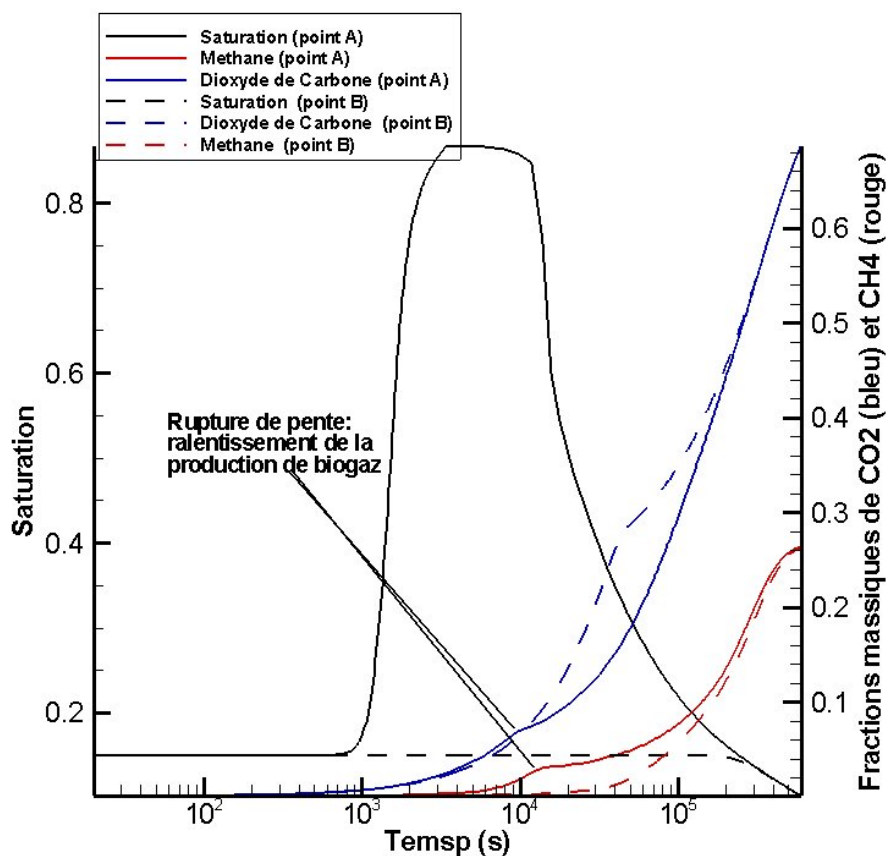


FIG. 4.14 – Evolution de la saturation et des fractions massiques aux points **A** et **B**

Le test d'injection présenté ici permet de mettre en évidence le caractère complexe du comportement des ISD bioréacteurs d'une part et l'impact important de la teneur en eau locale sur la biodégradation d'autre part.

4.2.4 Aspect double milieu

De nombreuses études expérimentales d'injection de lixiviats sur site ou en laboratoire ont mis en évidence l'existence de chemins préférentiels au sein des massifs de stockage de déchets ménager. Ces expériences mettent également en évidence des temps de séjours des lixiviats réinjectés très variables. Le fait qu'une partie des lixiviats réinjectés traversent rapidement le massif de déchet, alors qu'une autre partie le traverse beaucoup plus lentement peut s'expliquer par le fait que le déchet se comporte comme un *double milieu*. C'est ce que constatent par exemple Hartmann et al. (2004) dans le cas particulier d'un déchet de type cendres d'incinérateur. Ils concluent donc que les macro-pores sont responsables

des transferts rapides et que les micro-pores sont responsable des écoulements plus lents. Hartmann et al. (2004) valident également un modèle numérique de double milieu à l'aide des résultats expérimentaux.

Dans l'objectif de mettre en évidence le comportement de type *double milieu* des OM, Rosqvist and Destouni (2000); Rosqvist et al. (2005) mettent en place un dispositif expérimental utilisant le suivi de traceurs au sein d'un échantillon de déchet. Rosqvist and Destouni (2000) utilisent deux types de pilotes expérimentaux. Le premier est une colonne cylindrique de 2 m de hauteur et de 1,93 m de diamètre contenant un déchet excavé d'un ISD après 22 ans de stockage. Ce déchet est supposé entièrement dégradé. Le second est un pilote simulant un ISD de section $12 \times 13 \text{ m}^2$ et de 4,2 m de profondeur contenant un déchet ménager frais. Chacun de ces deux dispositifs est soumis à diverses conditions d'injection d'eau (continue ou transitoire) par la face supérieure. Dans chacune des conditions de réinjection, des tests de traçage au bromure de lithium sont décrits dans Rosqvist and Destouni (2000). L'analyse des résultats des tests de traçage est réalisée à l'aide d'une approche de modélisation probabiliste Lagrangienne. A l'aide de cette méthode, plusieurs modèles d'écoulements sont testés afin de simuler les résultats obtenus. Le premier modèle testé est un modèle d'advection-diffusion classique. Ensuite, deux modèles de type *double milieu* sont testés. Le premier considère deux régions : dans la première région, l'eau est mobile alors que dans la deuxième région, l'eau est immobile. L'échange entre les deux régions se fait par des mécanismes de diffusion. Le deuxième modèle de *double milieu* testé prend également en compte deux régions, mais l'eau est mobile dans les deux régions. On trouvera dans Ahmadi et al. (1998) et Cherblanc et al. (2003) une discussion approfondie sur le développement de ces deux types de modèle par des méthodes de changement d'échelle). Seules les perméabilités et pressions capillaires différencient les deux régions. Les résultats présentés par Rosqvist and Destouni (2000) suggèrent que les modèles de type *double milieu* sont plus adaptés pour décrire le transfert du traceur dans le milieu poreux formé par les OM. Ceci est vérifié pour les deux dispositifs expérimentaux et pour l'ensemble des conditions expérimentales testées. Même si les résultats obtenus sur les deux dispositifs expérimentaux ne permettent pas de calibrer précisément les modèles de *double milieu* utilisés, les résultats obtenus mettent en évidence l'importance de ce type de comportement en *double milieu* pour prédire efficacement le comportement des ISD soumis à la recirculation de lixiviats par exemple.

Ceci nous incite à modifier notre modèle afin de prendre en compte le fait que le déchet est un milieu à *double porosité*. Toutefois, on ne prendra en compte l'aspect double-milieu que pour le transport de l'eau, de façon à disposer d'un outil qui donne des niveaux de saturation totale compatibles avec les observations, notamment une forte rétention d'eau dans le milieu peu perméable.

4.2.4.1 Modélisation

Pour modéliser ces milieux présentant deux échelles de porosité distincte, plusieurs approches sont possibles. On s'appuiera notamment sur toute la littérature pour les milieux fracturés qui sont un exemple typique de double-milieux. Wanfang et al. (1997) recensent les modèles d'écoulement diphasique en milieux fracturés, et plus particulièrement dans le cas des roches. Ils mentionnent que deux types de méthodes peuvent être utilisés pour modéliser ces phénomènes. Dans le cas où l'échelle à laquelle on cherche à modéliser les écoulements est plus grande que la dimension caractéristique des fractures, des modèles de milieux effectifs appelés modèles à *double porosité* ou modèle à *double porosité/perméabilité* sont utilisés, alors que dans le cas où l'échelle à laquelle on cherche à modéliser les écoulements est plus petite que l'échelle caractéristique des fractures, il est possible d'utiliser des modèles à fracture discrète. Dans le cas de ces derniers modèles, les équations de conservation adéquates sont résolues dans chacun des milieux (matrice ou fracture) et sont reliées via des conditions interfaciales. Néanmoins, cette approche ne nous concerne pas puisque nous supposons (du fait de la structure hétérogène des déchets solides) que l'échelle à laquelle nous tentons de modéliser les écoulements est bien supérieure à la taille caractéristique des "macro-pores".

Les modèles à *double milieu* assument que le milieu poreux considéré est constitué de deux régions distinctes dont les propriétés de porosité et de perméabilité sont différentes. Ces modèles sont obtenus soit en utilisant la méthode de prise de moyenne volumique, soit en utilisant la méthode d'homogénéisation (Douglas and Arbogast, 1990; Arbogast et al., 1991; Arbogast, 1994). Les modèles à *double porosité* supposent que l'écoulement d'eau et le transport de chaque espèce dissoute sont décrits par deux équations distinctes (l'une pour le milieu macro-poreux et l'autre pour le milieu micro-poreux) couplés avec un terme décrivant l'échange entre les deux milieux (Gerke and van Genuchten, 1993a). Lors de l'utilisation de tels modèles, l'enjeu est donc de déterminer de façon la plus réaliste possible le terme d'échange entre les deux milieux, tout en utilisant les simplifications les plus adaptées possibles pour décrire les écoulements dans les deux milieux distincts. Gerke and van Genuchten (1993a) résumant de façon assez complète les différentes possibilités permettant de modéliser les écoulements d'eau dans le sol avec une approche double milieu. Si l'on considère uniquement l'échange de la phase liquide entre les deux milieux, mais en restant dans une configuration diphasique (liquide/gaz), les équations régissant la répartition de la phase liquide dans chacun des deux milieux sont les suivantes (Chen et al., 2006) :

$$\frac{\partial (\epsilon \rho_\lambda S)_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\lambda \underline{V}_\lambda)_f = -q_{\lambda, mf} + q_\lambda \quad (4.12)$$

$$\text{et } \frac{\partial (\epsilon \rho_\lambda S)_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\lambda \underline{V}_\lambda)_m = +q_{\lambda, mf} + \epsilon_\beta R_\omega \quad (4.13)$$

Dans ces équations, l'indice f désigne le milieu macro-poreux alors que l'indice m désigne le milieu micro-poreux. Le terme $q_{\lambda, mf}$ désigne le terme d'échange de liquide entre le milieu macro-poreux et le milieu micro-poreux, alors que le terme q_λ est un terme décrivant l'apport éventuel de phase liquide via un puits dans les "fractures" et le terme $\epsilon_\beta R_\omega$ est le terme de production d'eau via l'activité biologique (il apparaît en effet plus judicieux de considérer que l'activité biologique est essentiellement dans le milieu peu perméable).

Les modèles de type *double porosité* pour lesquels on ne considère pas d'advection dans le milieu le moins perméable sont également appelés modèles *mobile/immobile*. Ce type de modèle introduit uniquement un terme d'échange entre le milieu de forte perméabilité et le milieu de faible perméabilité mais ne permet pas le mouvement de la phase liquide dans le milieu de plus faible perméabilité. Dans sa thèse, concernant la modélisation des ISD, Young (1994) développe un modèle de *double milieu* de type *double porosité/perméabilité* que l'on peut également appeler modèle *mobile/mobile* puisqu'il suppose que la phase liquide peut s'écouler à la fois dans le milieu de forte perméabilité et dans le milieu de plus faible perméabilité. Ces modèles ont été introduits bien avant de manière plus générique dans le domaine de l'hydrologie. On pourra se reporter aux travaux de Skopp et al. (1981), Dykhuizen (1990) ou Gerke and van Genuchten (1993a) pour une introduction générale aux modèles de *double milieu*, etc...), et on consultera Ahmadi et al. (1998) et Cherblanc et al. (2003) pour une introduction théorique aux modèles *mobile/mobile*. Le Figure 4.15 présente de façon schématique la différence entre ces deux types de modèles.

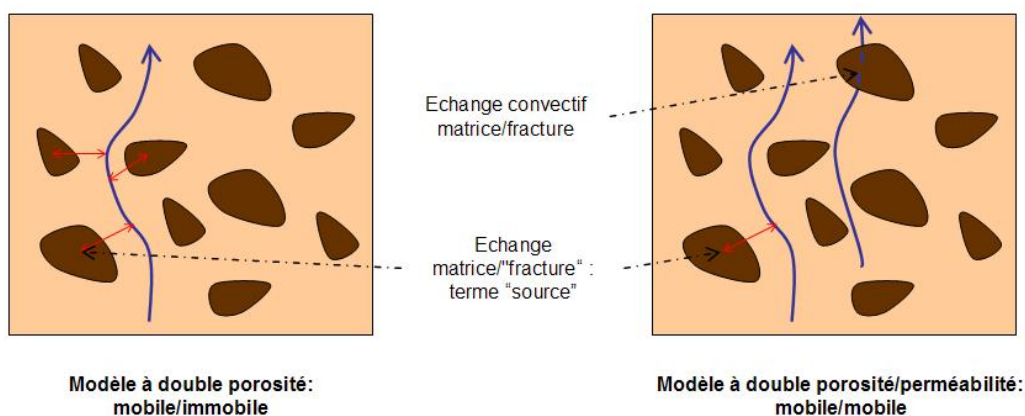


FIG. 4.15 – Différence entre les deux types de modèles à *double milieu*

Dans notre cas, compte tenu de la structure micro poreuse des éléments constituant le déchet ménager, nous considérons que l'eau présente dans le milieu micro-poreux est im-

mobile, c'est-à-dire qu'elle est échangée avec le milieu macro-poreux via le terme d'échange couplé $q_{\lambda,mf}$. Ceci revient à considérer un milieu à *double porosité* plutôt qu'un milieu à *double porosité/perméabilité* (Chen et al., 2006). Les équations 4.12 et 4.13 se transforment donc pour obtenir les équations 4.14 et 4.15.

$$\frac{\partial (\epsilon \rho_{\lambda} S)_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{\lambda} V_{\lambda})_f = -q_{\lambda,mf} + q_{\lambda} \quad (4.14)$$

$$\text{et } \frac{\partial (\epsilon \rho_{\lambda} S)_m}{\partial t} = +q_{\lambda,mf} + \epsilon_{\beta} R_{\omega} \quad (4.15)$$

Si nous transformons cette expression en introduisant la "masse volumique d'eau solide", définie comme ceci : $\hat{\rho}_{\lambda m} = \frac{\text{masse}_{H_2O m}}{V_{\text{milieu poreux}}}$, nous obtenons les équations 4.16 et 4.17 :

$$\frac{\partial (\epsilon \rho_{\lambda} S)_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{\lambda} V_{\lambda})_f = -q_{\lambda,mf} + q_{\lambda} \quad (4.16)$$

$$\text{et } \frac{\partial \hat{\rho}_{\lambda m}}{\partial t} = +q_{\lambda,mf} + \epsilon_{\beta} R_{\omega} \quad (4.17)$$

C'est l'expression du terme de couplage $q_{\lambda,mf}$ que nous allons nous attacher à déterminer par la suite. Chen et al. (2006) reprennent comme référence les travaux de Warren and Root (1963) ou Kazemi et al. (1992). D'une façon générale, que ce soit dans le domaine des écoulements d'eau souterraine ou dans le domaine de l'exploitation de gisements pétroliers, et comme le propose Di Donato et al. (2003) ou Huang et al. (2004), une façon classique d'exprimer ce terme est la suivante (4.18) :

$$q_{\lambda,mf} = F \frac{K_m kr_{\lambda f}}{\mu_{\lambda}} (P_{\lambda f} - P_{\lambda m}) \quad (4.18)$$

F est le facteur de forme ($1/m^2$) lié à la géométrie des fractures, K_m est la perméabilité intrinsèque de la matrice (m^2), $kr_{\lambda f}$ est la perméabilité relative à la phase liquide dans le milieu le plus perméable (sans unité) et μ_{λ} est la viscosité dynamique de l'eau ($kg/m/s^2$).

Si l'on introduit la notion de pression capillaire pour chacun des milieux (f et m), nous avons :

$$P_{C m} = P_{\gamma m} - P_{\lambda m} \quad (4.19)$$

$$P_{C f} = P_{\gamma f} - P_{\lambda f} \quad (4.20)$$

La relation 4.18 peut donc être transformée pour donner la relation 4.21

$$q_{\lambda,mf} = F \frac{K_m kr_{\lambda f}}{\mu_{\lambda}} (P_{C m} - P_{C f} + P_{\gamma f} - P_{\gamma m}) \quad (4.21)$$

Dans le domaine pétrolier, une autre formulation pour ce terme de couplage est utilisée. Cette formulation permet de dériver des termes d'échange uniquement fonction des différences de saturation en huile et en eau dans chacun des deux milieux (Di Donato et al., 2003). Néanmoins, les hypothèses qui permettent de développer ces formulations (incompressibilité des deux fluides par exemple) ne sont pas adaptées à notre cas d'étude.

4.2.4.2 Choix du modèle

Comme le signale Landereau (2000) dans sa thèse, la dérivation exacte du coefficient d'échange entre la matrice micro-poreuse et la fracture nécessite la connaissance structurale détaillée des deux milieux quelle que soit la méthode utilisée (prise de moyenne volumique, méthode de calage, méthode de marche aléatoire, etc...). N'ayant que très peu d'informations qualitatives sur les écoulements diphasiques de type *double milieu* dans les matrices de type "déchets ménagers", il est difficile de développer un modèle très précis. En revanche, comme le montrent Rosqvist and Destouni (2000); Rosqvist et al. (2005), ce type de comportement peut être important dans le fonctionnement hydrologique des alvéoles de stockage, c'est pourquoi nous avons introduit un modèle de *double milieu* dans notre modèle de transport diphasique. Ce modèle est simple et la forme du coefficient d'échange est celle proposée par (Gerke and van Genuchten, 1993b). Cette expression pourra être complexifiée en fonction de l'évolution de la connaissance sur la structure du milieu. Compte tenu de la faible viscosité de la phase gaz, si nous considérons que $P_{\gamma f} \approx P_{\gamma m}$, les deux équations gérant les écoulements de liquide dans les milieux matriciels m de faible porosité et perméabilité et fractures f de porosité et perméabilités plus importantes sont les suivantes :

$$\frac{\partial (\epsilon \rho_{\lambda} S)_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{\lambda} \underline{V}_{\lambda})_f = -F \frac{K_m k_{r\lambda f}}{\mu_{\lambda}} (P_{Cm} - P_{Cf}) + q_{\lambda} \quad (4.22)$$

$$\text{et } \frac{\partial \hat{\rho}_{\lambda m}}{\partial t} = +F \frac{K_m k_{r\lambda f}}{\mu_{\lambda}} (P_{Cm} - P_{Cf}) + \epsilon_{\beta} R_w \quad (4.23)$$

Pour obtenir ces équations, nous supposons que $K_m \ll K_f$, c'est à dire que l'eau imbibé dans la matrice micro-poreuse est immobile. Nous considérons également que le flux de gaz chassé par l'imbibition de la phase liquide dans le domaine m est négligeable.

Nous supposons que le "shape factor" F est de la forme suivante (Warren and Root, 1963; Kazemi et al., 1992) :

$$F = \frac{\beta \gamma_m}{l^2} \quad (4.24)$$

Dans cette expression, β représente un facteur sans dimension caractéristique de la géométrie du milieu, γ_m représente un facteur d'échelle sans dimension dont la valeur par

défaut sera 0.4 et l est la dimension caractéristique de la matrice micro-poreuse. Pour un domaine 3-D, si l_x, l_y et l_z sont les dimensions caractéristiques de la matrice micro-poreuse dans les directions x, y et z , nous avons :

$$\frac{1}{l^2} = \frac{1}{l_x^2} + \frac{1}{l_y^2} + \frac{1}{l_z^2} \quad (4.25)$$

D'après les travaux de Quintard and Whitaker (1993) , pour une système 3-D parallélépipédique (comme cela est notre cas), le facteur de forme β est évalué à 41.35. Nous prendrons cette valeur comme référence. dans un premier temps, nous évaluons les dimensions caractéristiques du milieu de faible perméabilité à 1cm, soit : $l_x = l_y = l_z = 0,01$.

4.2.4.3 Comportement du modèle de *double milieu*

Le modèle mathématique de *double milieu* que nous avons présenté dans le paragraphe précédent a été implémenté dans le code MATAABIO sous forme d'un terme source explicite permettant de prendre en compte le transfert de la phase liquide du milieu le plus perméable vers le milieu le moins perméable, ou inversement, suivant les conditions de pression capillaire dans chacun des deux milieux.

Les mesures de pression capillaire présentées sur la figure 3.3 ne nous donnent pas accès à la pression capillaire du milieu de faible perméabilité ou à celle du milieu de plus forte perméabilité, mais à la pression capillaire d'un mélange des deux milieux. Nous prendrons néanmoins cette mesure comme référence et nous diviserons la pression capillaire mesurée par un facteur 10 pour avoir la pression capillaire du milieu le plus perméable et nous multiplierons cette même pression capillaire par un facteur 10 pour obtenir la pression capillaire du milieu le moins perméable. Les conditions initiales en terme de saturation en phase liquide dans chacun des deux milieux permettent de déterminer les conditions initiales en terme de pression capillaire. Suivant le signe de la différence de pression capillaire de chacun des milieux, le transfert de la phase liquide se fera soit du milieu le moins perméable vers le milieu le plus perméable, soit du milieu le plus perméable vers le milieu le moins perméable, jusqu'à obtenir l'égalité des pressions capillaires.

Nous cherchons ici à modéliser l'injection 1-D de lixiviats dans un milieu initialement partiellement saturé en lixiviat (cf. Figure 4.16). Pour le milieu de plus faible perméabilité, nous utilisons une valeur de perméabilité intrinsèque $K_m = 10^{-15} \text{ m}^2$. La perméabilité du milieu de plus forte perméabilité est $K_{Ix} = 10^{-11} \text{ m}^2$. Nous supposons que pour des saturations inférieures à 0,3 dans chaque milieu, les lixiviats ne sont plus mobiles, c'est à dire que les perméabilités relatives s'annulent. Les résultats obtenus sont présentés sur la Figure 4.17.

En terme de saturation en phase liquide dans le milieu de forte perméabilité, nous

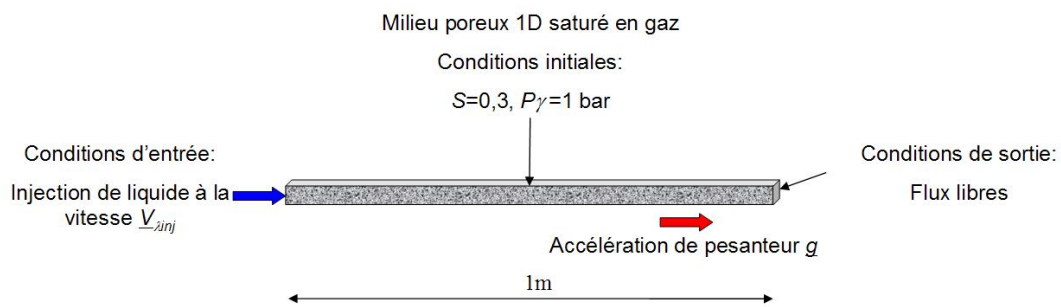


FIG. 4.16 – Représentation schématique du test numérique utilisé pour observer le comportement du modèle de *double milieu*

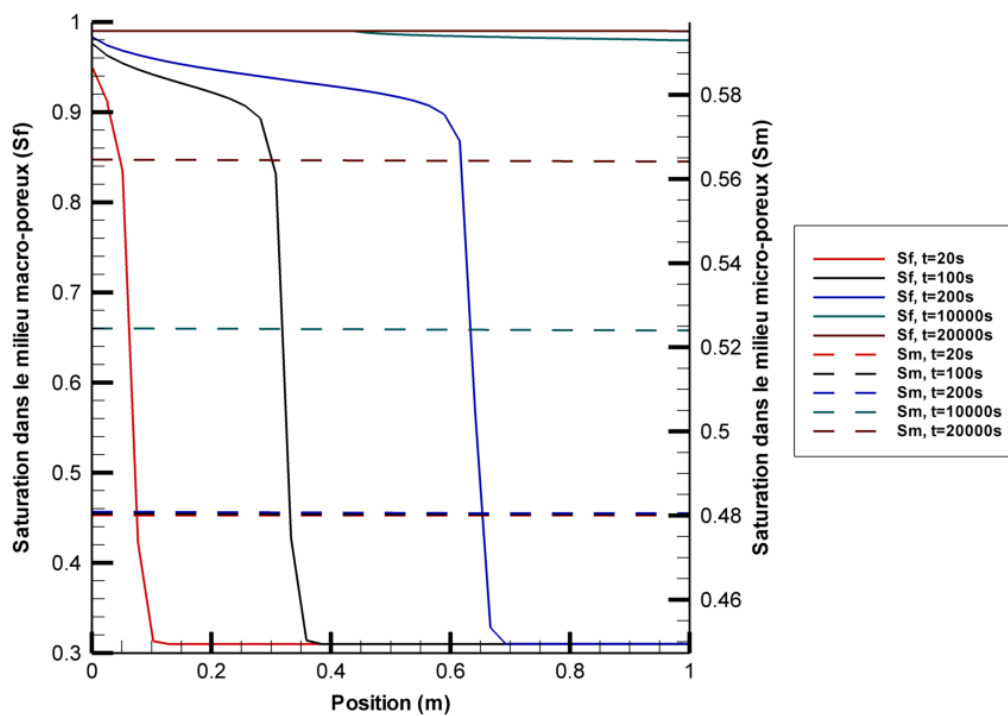


FIG. 4.17 – Evolution des saturations dans le cas du modèle à *double milieu*

pouvons remarquer sur la Figure 4.17 que les profils de saturation sont similaires à ceux présentés dans le paragraphe 4.2.1. Ceci est logique puisque la pression capillaire du milieu de forte perméabilité est relativement faible n'introduit donc pas un terme "diffusif" très important dans l'équation de conservation de la phase liquide. Nous constatons également que, pour des temps d'injection supérieurs à environ 500 secondes, le milieu de plus forte perméabilité est quasiment totalement saturé en phase liquide. Ceci n'est pas du tout le cas pour le milieu de plus faible perméabilité puisque l'on constate, par exemple, que, pour des temps d'injection inférieurs à 500 secondes, la saturation en phase liquide de ce milieu n'a pas varié. Ceci est dû au fait que le terme de transfert entre les deux milieux est très faible. On constate toutefois que la saturation du milieu de plus faible porosité (S_m) varie fortement si le temps de contact entre la phase liquide présente dans le milieu de forte porosité et le milieu de faible porosité est assez long. Le modèle de *double milieu* permet donc à la fois de prendre en compte le transfert entre deux milieux de propriétés physiques différentes, mais également d'introduire un effet de "retard" sur le transfert de la phase liquide entre ces deux milieux. Ce retard dépend fortement de l'expression que nous utilisons pour évaluer le terme de transfert $q_{\lambda,mf}$.

Afin de caractériser l'impact du terme de transfert, nous avons repris le test précédent, mais en multipliant $q_{\lambda,mf}$ par 1000 afin d'augmenter le transfert de lixiviats entre les deux milieux. Ceci revient à considérer que les dimensions caractéristiques l_x , l_y et l_z sont de l'ordre de 5 millimètres plutôt que de l'ordre du centimètre. Les résultats obtenus dans cette configuration sont présentés sur la Figure 4.18.

Nous constatons sur la Figure 4.18 que le "retard" entre les deux champs de saturation dans chaque milieu est beaucoup plus faible que celui que présente la Figure 4.17. Le champ de saturation dans le milieu de faible porosité prend la même forme que celui de la saturation dans le milieu le plus poreux. Ceci s'explique par un transfert beaucoup plus rapide de la phase liquide du milieu de forte porosité vers le milieu de faible porosité que pour les simulations présentées sur la Figure 4.17. On constate néanmoins que le milieu de faible porosité ne se sature pas instantanément en phase liquide, mais présente un "retard" par rapport au milieu de forte porosité. Si l'on augmente encore le terme de transfert entre les deux milieux, nous obtenons un transfert quasi instantané de la phase liquide depuis le milieu de forte porosité vers le milieu de faible porosité pour remplir entièrement les pores du milieu de faible porosité.

L'avantage d'intégrer un modèle de double milieu au code de calcul MATAABIO est de prendre en compte un aspect important dans le transfert de l'humidité au sein des ISD. En effet, le fait d'intégrer un échange de phase liquide entre les deux milieux constituant les OM permet de prendre en compte deux cinétiques distinctes pour le transfert de l'humidité dans les ISD. Ceci est important puisque les cinétiques de biodégradations locales sont

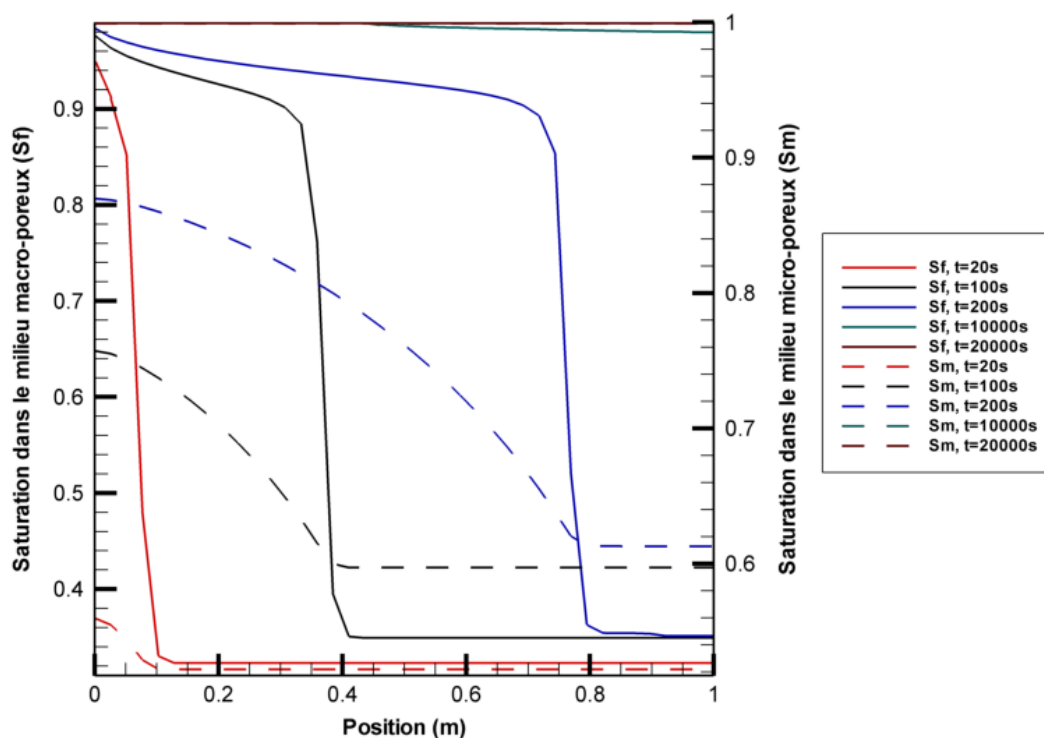


FIG. 4.18 – Evolution des saturations dans le cas du modèle à *double milieu* modifié (échange multiplié par 1000)

directement liées à la teneur en eau locale.

4.3 Conclusion

Dans ce Chapitre, nous avons présenté comment le modèle mathématique décrit au Chapitre 2 est introduit dans un code de calcul que nous appelons MATAABIO. Nous avons détaillé l'ensemble des choix numériques utilisés pour développer le code de calcul. Ces choix pourront bien entendu faire l'objet d'évolutions dans le développement futur du code de calcul. Néanmoins, ils nous permettent de disposer d'un code de calcul robuste qui nous permet de mettre en évidence certains comportements caractéristiques des transferts réactifs au sein des ISD bioréacteurs. Les tests présentés dans ce Chapitre nous ont permis en particulier de mettre en évidence les différents régimes d'écoulements de gaz et de liquide dans les ISD. Cette discussion nous a d'ailleurs conduit à débattre de la validité de l'équation de Richards pour décrire les écoulements diphasiques en milieu poreux. Cette équation malheureusement utilisée très fréquemment dans les travaux de modélisation des ISD ne permet pas de décrire précisément les périodes de réinjection et ne permet pas non plus de décrire les transferts convectifs de gaz. Les tests présentés ont également permis de mettre en évidence l'impact positif de la recirculation de lixiviats sur la production

de biogaz et ont donné des indications intuitives quant à la stratégie de recirculation à adopter. Un modèle de *double porosité* a d'ailleurs été implémenté dans le code de calcul de façon à mieux prendre en compte les différents temps caractéristiques de transfert que l'on peut observer expérimentalement.

Chapitre 5

Résultats et discussion

Après avoir présenté l'ensemble des bases conceptuelles, mathématiques et numériques dans les précédents chapitres, l'objectif du Chapitre 5 est de présenter le comportement du code de calcul MATAABIO dans des configurations qui se rapprochent de celles que l'on peut rencontrer sur site. Les tests que nous présentons dans cette partie se focalisent notamment sur l'impact des procédures de réinjection de lixiviats dans le cas des ISD bioréacteurs. Nous présentons les résultats obtenus pour plusieurs conceptions des dispositifs de réinjection, pour plusieurs débits de réinjection et pour différentes stratégies de réinjection. Enfin, nous présentons l'impact de certaines propriétés du milieu sur les résultats de simulation obtenus avec MATAABIO.

Dans l'ensemble de cette partie, les termes d'échanges de type double milieu que nous avons introduits au Chapitre 4 ont été divisés par un facteur 1000. En effet, les premiers tests d'injection en conditions "réelles" ont permis de mettre en évidence que, pour des saturations inférieures à 50%, l'échange entre les deux milieux est tel que le lixiviat réinjecté n'atteint pas le fond du casier. Ceci n'est pas en accord avec ce que l'on peut observer sur site, c'est pourquoi nous avons pris le parti de réduire l'impact de cet échange. Il sera néanmoins indispensable dans le futur de le quantifier expérimentalement sur un déchet réel afin de mieux le prendre en compte dans le code de calcul.

5.1 Comportement général de MATAABIO

Nous présentons dans cette partie le comportement général du code de calcul MATAABIO en situation quasi réelle. Pour ce faire, nous avons choisi de considérer le cas d'un volume de stockage modèle. Les dimensions de ce volume sont les suivantes : 15 mètres de hauteur, 10 mètres de profondeur et 5 mètres de largeur (cf. Figure 5.1). Ce volume est munie d'un dispositif d'injection composé d'un puits vertical dont la position est définie par $largeur = 0$ m , $profondeur = 0$ m et crépiné sur 2 mètres entre la hauteur

5 m et la hauteur 7 m. Ce puits est inséré dans un matériau drainant de perméabilité intrinsèque 10^{-9} m^2 . Ce matériau drainant occupe la zone définie par les coordonnées suivantes : $0 \leq \text{largeur} \leq 0,5 \text{ m}$, $0 \leq \text{profondeur} \leq 0,5 \text{ m}$, $3 \leq \text{hauteur} \leq 7 \text{ m}$ (cf. Figure 5.1). Initialement la composition du gaz est celle de l'air, soit 21 % d'oxygène et 79 % d'azote. La saturation initiale du milieu est de 15 % et la composition du déchet est celle du MODECOM de référence de 1993. La température initiale du massif est de 293 K. Les flux de masse sont nuls sur l'ensemble des frontières du domaine, hormis au point de la face supérieure dont les coordonnées sont $\text{largeur} = 5 \text{ m}$, $\text{profondeur} = 10 \text{ m}$ et $\text{hauteur} = 0 \text{ m}$ où l'on impose une pression relative de -5 mbar de façon à simuler un puits de dégazage (dans les conditions de terrain). On impose également une température constante de 293 K sur chacune des frontières du domaine. La Figure 5.1 présente une vision simplifiée du volume de stockage modèle considérée.

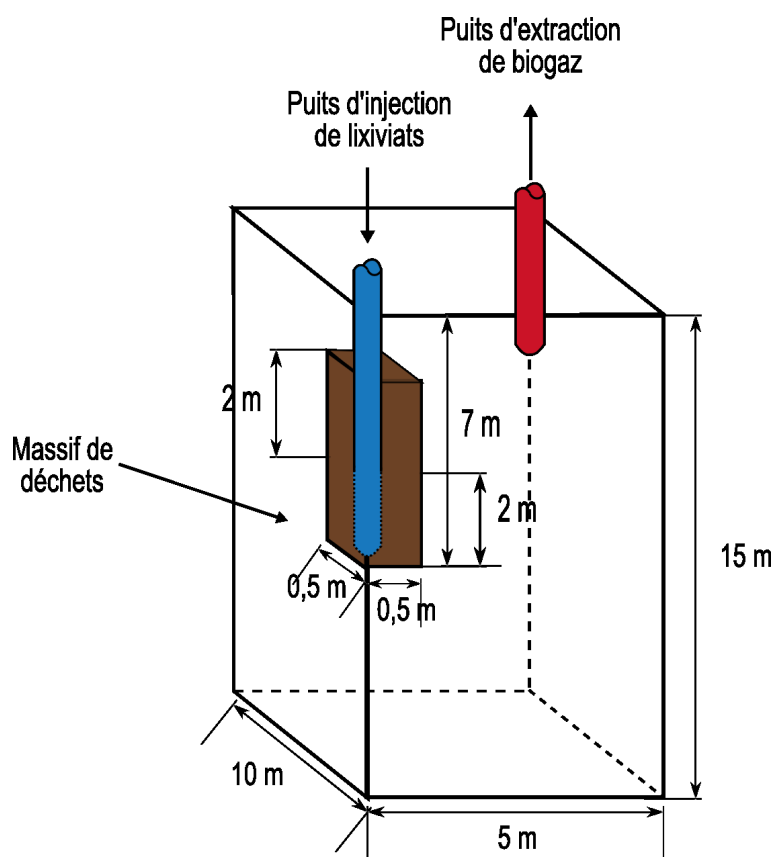


FIG. 5.1 – Volume de stockage modèle. Dispositif de réinjection de type "puits vertical"

Nous présentons par la suite les résultats obtenus dans ce cas pour des simulations de 7 jours. Nous nous focalisons en particulier sur les variables évolutives du système que sont les fractions massiques, la pression, la saturation, ainsi que la température. Nous présenterons également la production de biogaz au cours du temps que l'on obtient grâce au réseau de dégazage. Pour plus de clarté dans la mise en page de ce document, nous

avons pris le parti de présenter l'ensemble des résultats dans un premier temps et de les commenter dans un second temps.

5.1.1 Résultats

L'ensemble des résultats 3D obtenus pour la simulation d'injection présentée précédemment sont réunis dans ce paragraphe.

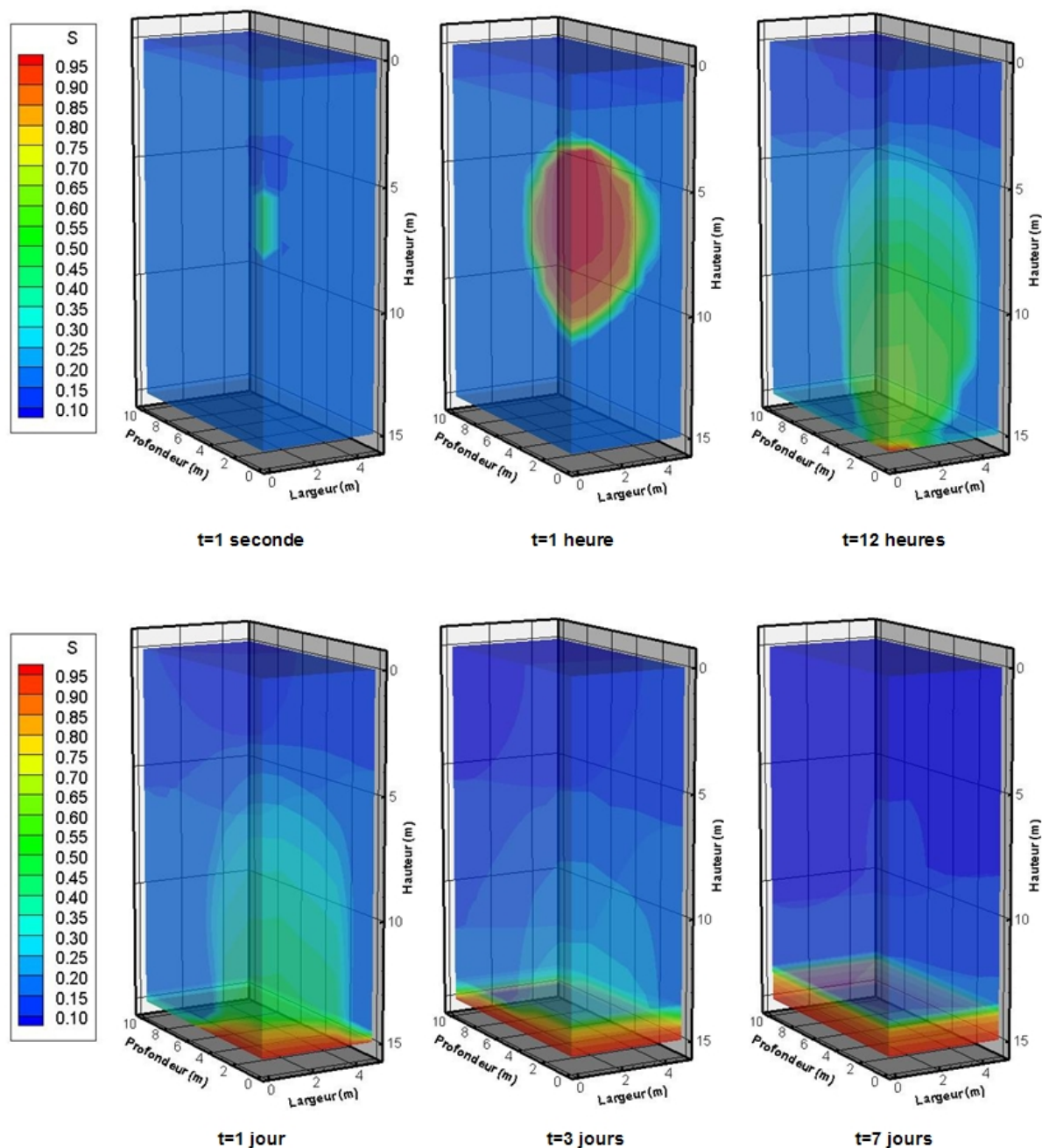


FIG. 5.2 – Evolution de la saturation à la suite de l'injection de lixiviats à $15 \text{ m}^3/\text{h}$ via un puits vertical

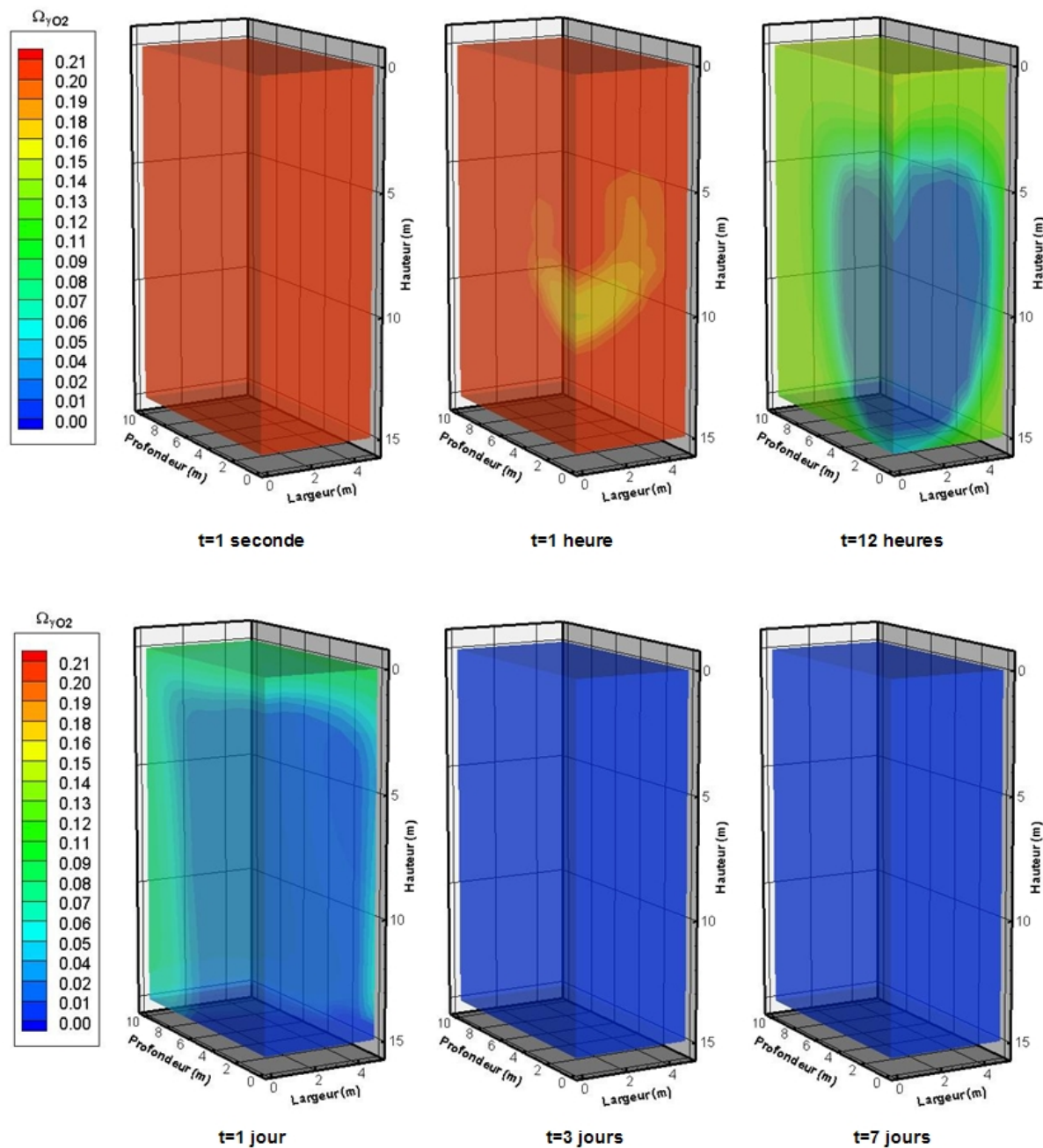


FIG. 5.3 – Evolution de la fraction massique en O_2 à la suite de l'injection de lixiviats à $15 \text{ m}^3/\text{h}$ via un puits vertical

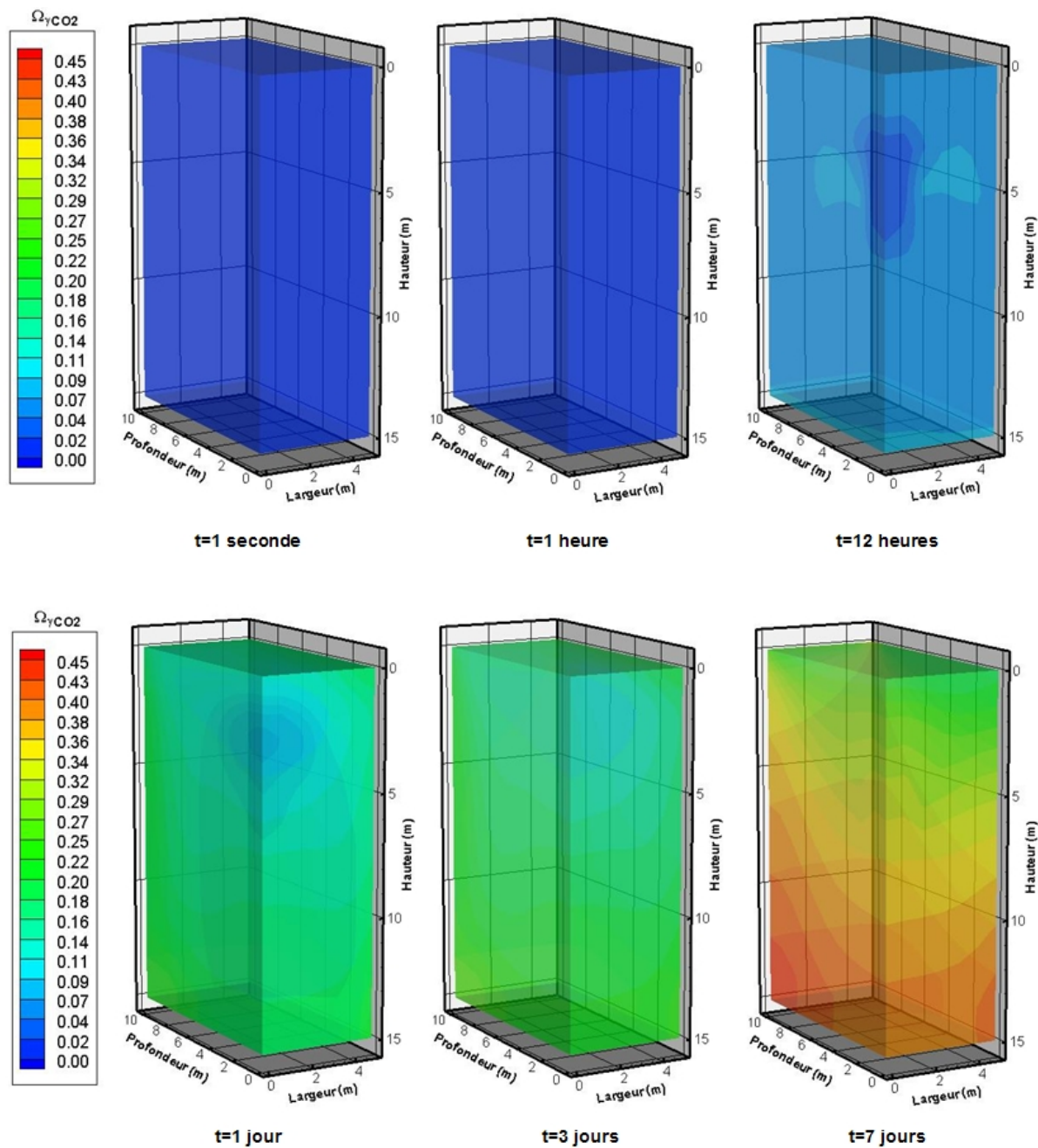


FIG. 5.4 – Evolution de la fraction massique en CO_2 à la suite de l'injection de lixiviats à $15 \text{ m}^3/\text{h}$ via un puits vertical

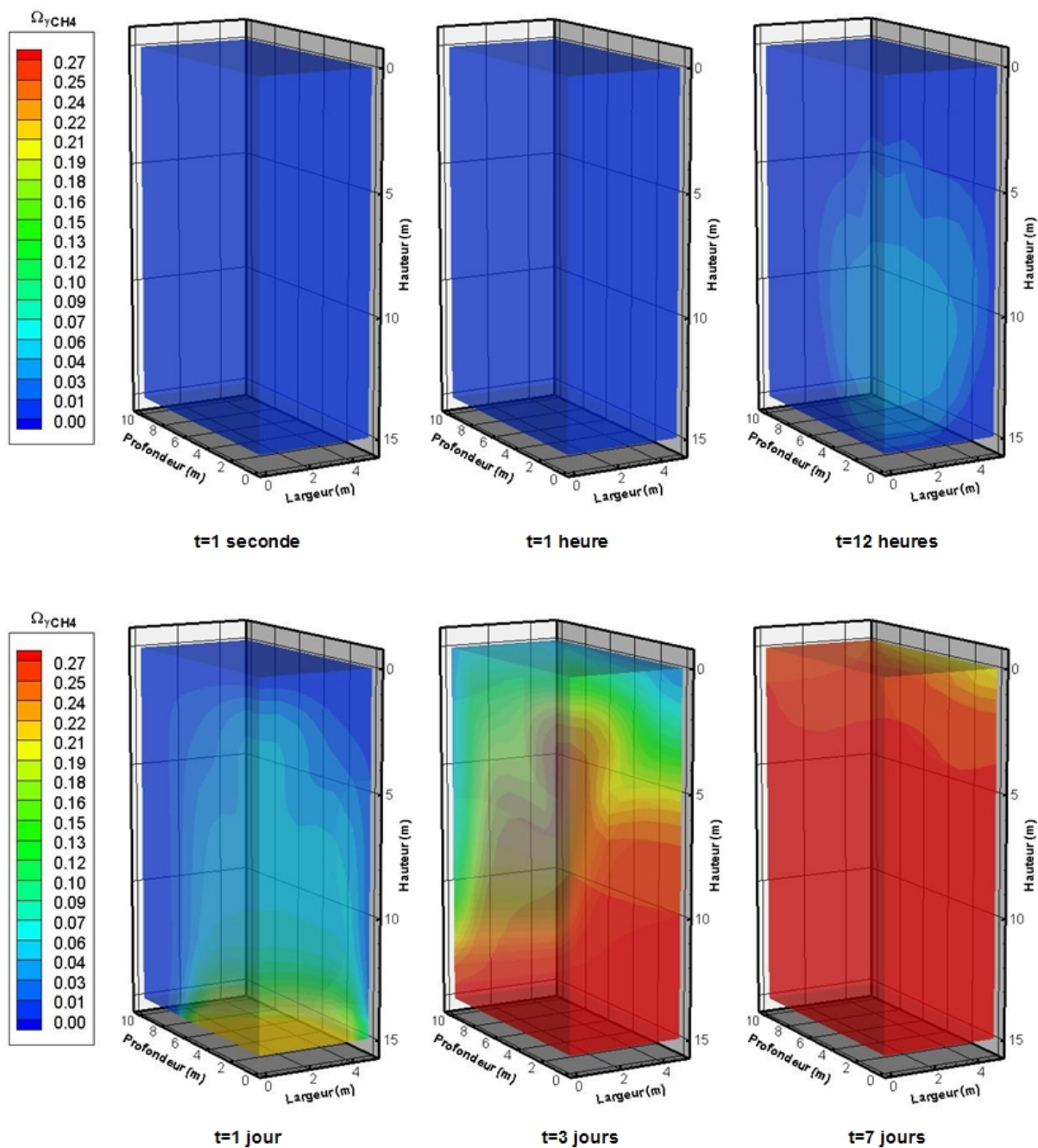


FIG. 5.5 – Evolution de la fraction massique en CH_4 à la suite de l'injection de lixiviats à $15 \text{ m}^3/\text{h}$ via un puits vertical

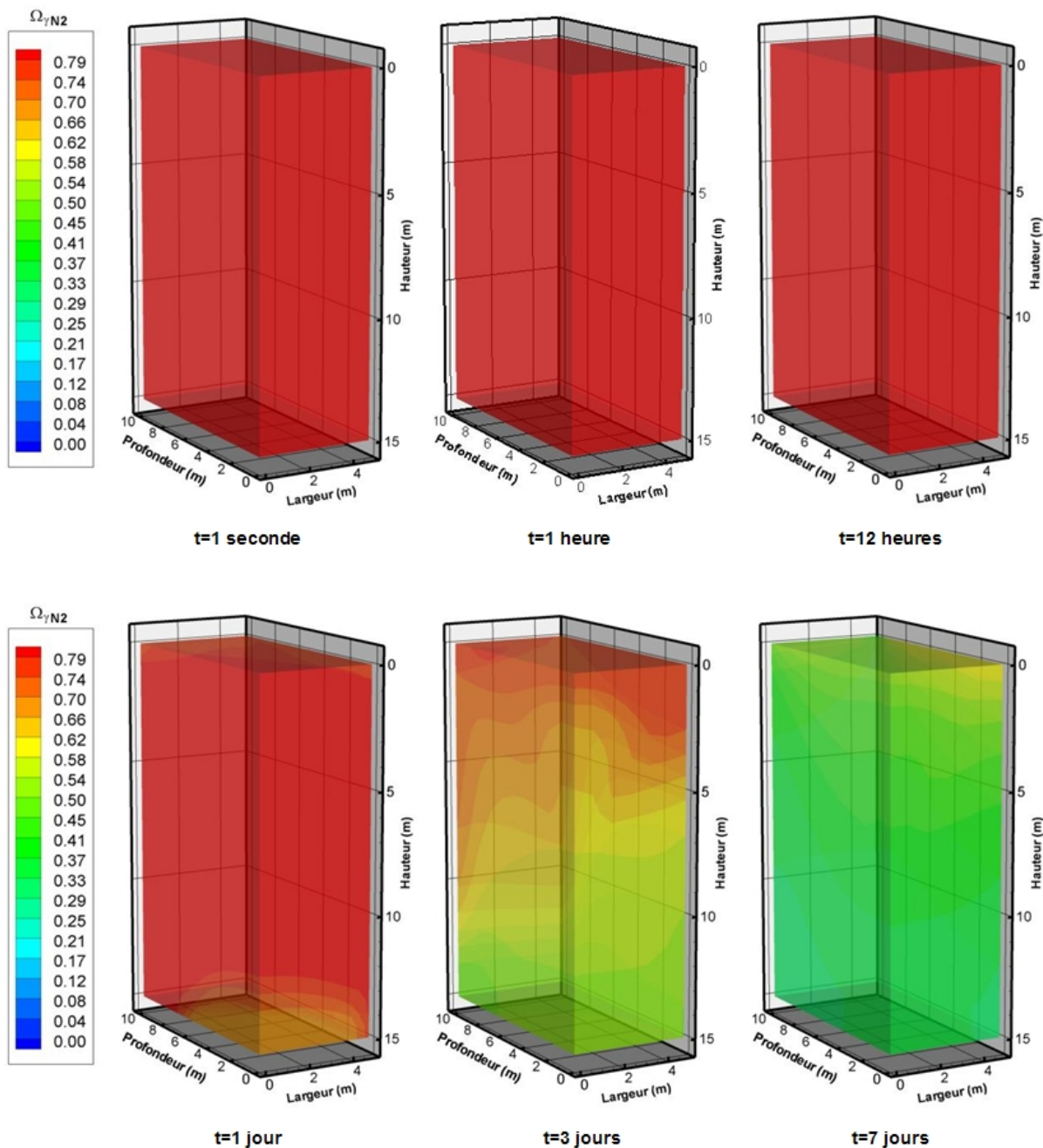


FIG. 5.6 – Evolution de la fraction massique en N_2 à la suite de l'injection de lixiviats à $15 \text{ m}^3/\text{h}$ via un puits vertical

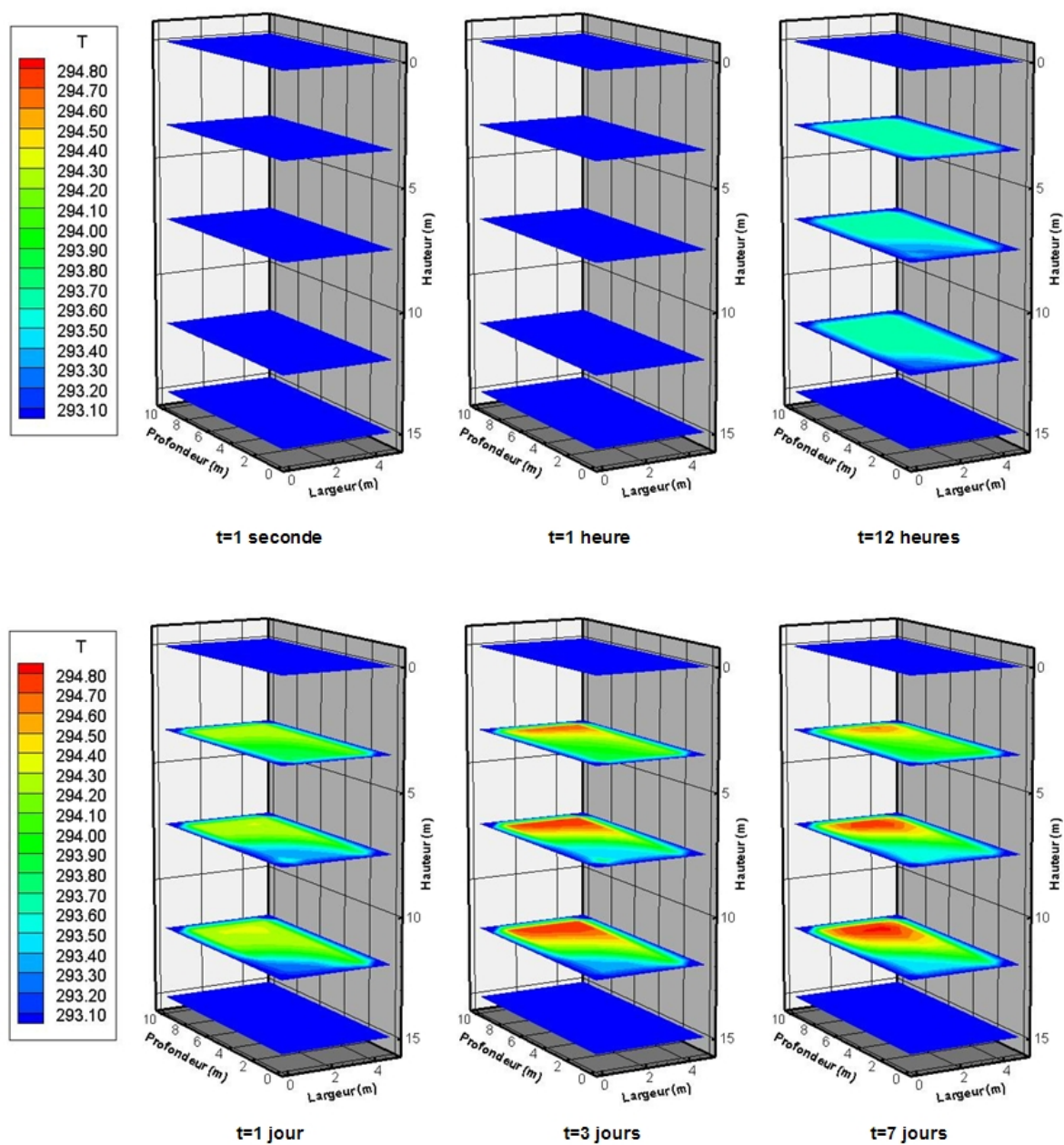


FIG. 5.7 – Evolution de la température du casier à la suite de l'injection de lixiviats à 15 m³/h via un puits vertical

Pour obtenir les résultats présentés sur les Figures 5.2 à 5.7, nous avons utilisé un pas d'espace de 0,5 mètre dans la hauteur, de 0,8 mètre dans la largeur et de 1 mètre dans la profondeur. Le pas de temps que nous utilisons est de 100 secondes sauf pour les périodes d'injection où nous utilisons un pas de temps de 1 seconde de façon à garantir la stabilité du système dans le cas de l'injection sous pression (cf. Chapitre 4). En effet, nous sommes contraints d'adapter le pas de temps au cours du calcul de façon à avoir un pas de temps suffisamment petit pour garantir la stabilité du système pendant les périodes d'injection, mais ensuite suffisamment grand en dehors des périodes d'injection pour que le temps CPU de calcul ne soit pas trop grand.

5.1.2 Ecoulements de gaz et de liquide

L'injection de lixiviats dans le domaine entraîne une augmentation locale de la saturation autour du dispositif d'injection (cf. Figure 5.2). Cette augmentation locale de saturation est accompagnée d'une augmentation de pression jusqu'à environ 2 bars. Nous ne représentons pas l'évolution de la pression de la phase gaz au cours du temps, puisque les niveaux de pression atteints pendant l'injection relaxent rapidement, ce qui ne permet pas de représenter les pressions avec une échelle unique pour l'ensemble des temps de simulation.

Nous constatons sur la Figure 5.2 que le "panache" de saturation en phase liquide s'étend plus rapidement en dessous du dispositif d'injection que dans les autres directions. Ceci est dû au fait que la gravité favorise le déplacement des lixiviats vers le fond du massif. La zone d'impact du dispositif de réinjection possède un rayon d'environ 3,2 mètres. Cette zone peut être définie comme la zone du massif voisine du dispositif d'injection où la saturation en liquide est supérieure ou égale à 50 %. Une fois la période de réinjection terminée, le "panache" de saturation migre verticalement sous l'effet, de la gravité. La pression dans le domaine relaxe alors rapidement et les écoulements de liquide deviennent alors majoritairement gravitaires. Sous l'effet de la gravité, le "panache" de saturation atteint le fond du casier en environ 9 heures. En l'absence de dispositif de drainage des lixiviats, ceux-ci s'accumulent sur la géomembrane étanche disposée au fond du casier.

Les résultats présentés sur la Figure 5.2 mettent également en évidence qu'une "traînée" de saturation se forme derrière le front de saturation. Cette "traînée" est due au fait que, lorsque la saturation diminue, la mobilité de la phase liquide diminue également. C'est pourquoi cette "traînée" met plusieurs jours (une semaine environ) à atteindre le fond du casier. Une fois que la phase liquide est uniformément répartie sur le fond du casier, aucun mouvement de liquide ne se produit plus.

5.1.3 Transport des constituants

Nous commentons ici l'évolution des fractions massiques des constituants présents sous forme gazeuse lors de l'expérience de réinjection présentée précédemment. Nous considérons à la fois l'évolution de la fraction massique en oxygène traduisant l'action des micro-organismes aérobies, la production de dioxyde de carbone par les micro-organismes aérobies et anaérobies et la production de méthane lors de l'activité anaérobie. Nous présentons également l'évolution de la fraction massique du diazote qui est inerte, mais qui est progressivement chassé du massif par la production des autres gaz.

Sur la Figure 5.3, nous pouvons remarquer que la fraction massique d'oxygène diminue rapidement au voisinage du système d'injection. On peut en particulier remarquer que, dès la fin de la période d'injection (1 heure), l'oxygène présent dans le massif de déchets commence à être consommé. Ceci s'explique par la forte augmentation de la teneur en eau au voisinage du dispositif de réinjection. En effet, durant les premières heures qui suivent l'injection de lixiviats, le milieu est majoritairement aérobie, car l'oxygène présent initialement n'est pas encore consommé, et la présence d'une saturation élevée dans la zone de réinjection favorise l'activité des micro-organismes aérobie. Ceci est lié au modèle de biodégradation que nous avons développé (cf. Chapitre 3, paragraphe 3.5) et en particulier à l'influence de la teneur en eau sur l'activité aérobie (cf. Figures 3.11 et 3.12).

Nous pouvons d'ailleurs remarquer sur la Figure 5.4 que la dégradation aérobie de l'oxygène présent dans le milieu s'accompagne d'une production soutenue de dioxyde de carbone. Au temps $t = 12$ heures, la zone de forte diminution de la fraction massique en oxygène est également soumise à une production intense de dioxyde de carbone. Néanmoins, même si elle est plus rapide au voisinage du système de réinjection, dans les zones de forte saturation, la biodégradation aérobie est également active dans le reste du domaine. Après une journée, la Figure 5.3 montre que la majeure partie de l'oxygène initialement présent a été consommée et remplacée par le dioxyde de carbone (cf. Figure 5.4).

Après la première journée, c'est l'action des micro-organismes anaérobies qui prend le relais dans les zones de forte saturation, c'est à dire principalement au fond du casier (cf. Figure 5.5). 3 jours après l'arrêt de l'injection de lixiviats, la biodégradation anaérobie a complètement pris le pas sur l'activité aérobie puisque l'ensemble de l'oxygène initialement présent dans le domaine a été consommé. Le fond du casier devient alors une zone de production intense de méthane et de dioxyde de carbone. Entre le troisième jour et le septième jour, ces deux gaz diffusent progressivement vers le haut du casier depuis le fond du casier où ils sont produits en plus grande quantité.

C'est ainsi que le diazote initialement présent comme solvant gazeux est progressivement chassé du casier par le biogaz produit (cf. Figure 5.6). Néanmoins, après 7 jours de simulation, le diazote conserve toujours son rôle de solvant gazeux, même si sa fraction

massique a largement diminué. Pour observer une disparition complète du diazote du casier, il aurait fallu simuler la vie de ce casier modèle sur une période plus longue.

5.1.4 Production de biogaz

Les éléments de discussion présentés précédemment, sont étayés par la Figure 5.8. Cette figure présente l'évolution de la production cumulée de CO_2 et de CH_4 via le puits de captage situé au sommet du casier.

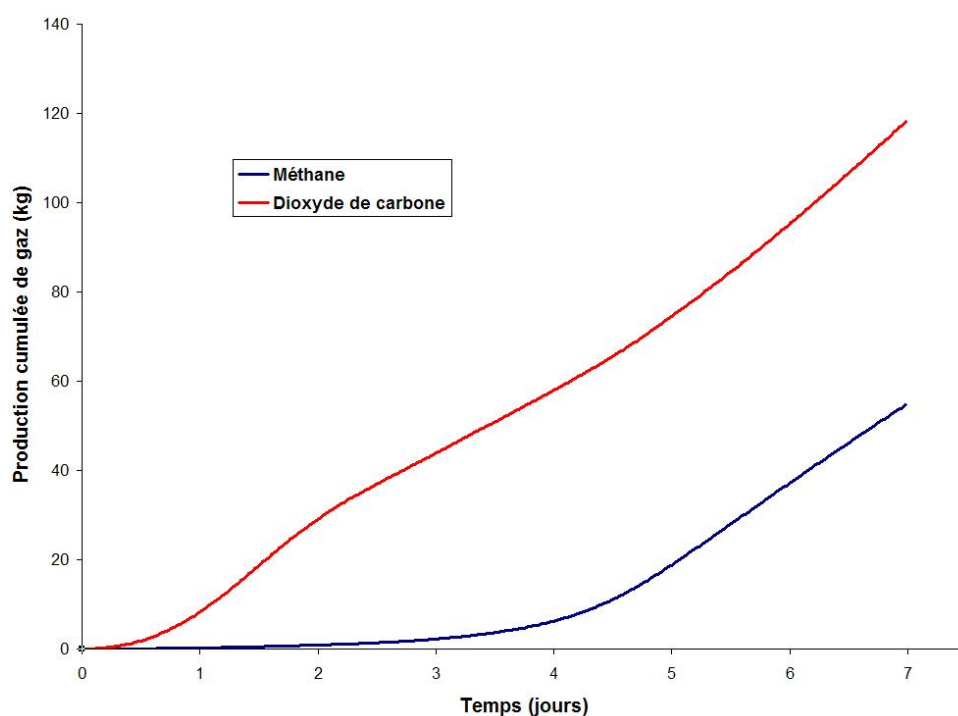


FIG. 5.8 – Production de biogaz à la suite de l'injection de lixiviats à $15 \text{ m}^3/\text{h}$ via un puits vertical

La production de méthane et de dioxyde de carbone présentée sur la Figure 5.8 est clairement divisée en deux phases. En effet, pendant les deux premiers jours de simulation, le gaz produit est majoritairement composé de dioxyde de carbone. Ceci est en accord avec les champs de fractions massiques présentés sur les Figures 5.3, 5.4 et 5.5 qui montrent qu'au voisinage du point d'extraction la composition du gaz varie grandement pour passer d'un gaz riche en O_2 vers un gaz riche en CO_2 , mais toujours assez pauvre en CH_4 . Même si l'activité anaérobie a commencé au fond du casier pour des temps inférieurs à 2 jours, cela n'a pas d'impact sur la composition du gaz extrait par le puits de dégazage puisque le méthane produit en fond de casier n'a pas encore migré vers le sommet du casier.

Ensuite, pour des temps supérieurs à deux jours, la Figure 5.8 met en évidence un ralentissement net de la production de dioxyde de carbone. Ce ralentissement est ac-

compagné de la production des premiers kilogrammes de méthane. Ceci indique donc clairement la transition entre la période de biodégradation aérobie et la période de biodégradation anaérobie. Ensuite, après le 4^{ème} jour, les pentes des courbes de production de méthane et de dioxyde de carbone deviennent plus importantes et sensiblement du même ordre de grandeur, ce qui indique que l'on produit alors environ la même quantité de méthane et de dioxyde de carbone. Ceci est caractéristique de ce qui peut être observé sur les installations de stockage de déchets ménagers.

5.1.5 Température

La Figure 5.7 présente l'évolution de la température du massif à différents temps et pour différentes altitudes au sein du casier. La température évolue peu pendant la période d'injection. Au bout de 12 heures, la température est relativement uniforme pour l'ensemble des altitudes que nous considérons et atteint environ 293,6 K, sauf sur les parois du domaine où les conditions sont isothermes. Ensuite, nous pouvons remarquer que la température augmente jusqu'à environ 295 K pour l'ensemble des altitudes considérées, mais uniquement pour les profondeurs élevées, c'est à dire pour les zones où l'oxygène est encore présent. En effet, la biodégradation aérobie étant plus exothermique que la biodégradation anaérobie, les zones qui montent le plus en température, sont les zones qui sont restées le plus longtemps en conditions aérobies. Enfin, entre les temps $t=3$ jours et $t=7$ jours, la température évolue peu. L'ensemble du casier est alors en conditions anaérobies et la faible production de chaleur anaérobie permet seulement de maintenir la température à des niveaux constants. Nous pouvons néanmoins constater que le déchet est assez peu conducteur de chaleur puisque les niveaux thermiques ne s'homogénéisent pas sur les 3 derniers jours de simulation.

5.1.6 Discussion

Le test de réinjection présenté dans cette section permet de mettre en évidence le caractère couplé de l'ensemble des phénomènes pris en compte dans le code de calcul MATAABIO. En particulier, le couplage des écoulements des phases mobiles, du transport des constituants ainsi que de l'action des micro-organismes rend le code de calcul particulièrement utile à la prédiction du comportement des alvéoles de stockage. Nous allons donc utiliser le code de calcul pour comparer différents scénarios de réinjection afin de dégager des éléments quantitatifs permettant d'orienter les réflexions quant aux stratégies les plus efficaces.

5.2 Influence de la conception du procédé de réinjection

L'objectif de cette partie est de comparer les résultats de simulations numériques obtenues à l'aide de MATAABIO pour plusieurs "designs" des procédés de réinjection de lixiviats. Nous cherchons en réalité à comparer les principaux procédés de réinjection actuellement utilisés ou envisagés en France. Les configurations que nous utilisons sont de plusieurs types. Le premier système que nous étudions est le système d'injection utilisant un puits vertical crépiné sur deux mètres et placé dans un massif drainant. Ce dispositif est identique à celui présenté sur la Figure 5.1. Le second système de réinjection que nous étudions est un système que nous appellerons "chambre d'injection". Il est constitué d'un drain d'injection horizontal crépiné sur 5 mètres et placé dans un massif drainant de 2 mètres de hauteur, de 1,8 mètres de largeur et de 5 mètres de profondeur dont la perméabilité est plus élevée (ici 10^{-9} m^2) que le massif de déchets dans lequel il est placé. L'intérêt d'un tel dispositif est de pouvoir injecter le lixiviat sous pression pour remplir complètement ou partiellement la "chambre" avant de la laisser se vidanger sous l'effet de la gravité. Conceptuellement, ceci présente l'avantage de mieux répartir l'injection du lixiviat, à la fois spatialement et temporellement. Néanmoins, la mise en place de ce type d'installation est récente et le retour d'expérience est faible, d'où l'intérêt d'utiliser MATAABIO comme outil de test de ce type de dispositif. Afin de pouvoir comparer les résultats de simulation pour les deux dispositifs, le débit d'injection utilisé est le même et vaut $15 \text{ m}^3/\text{h}$ et l'injection de lixiviat dure 1 heure.

Les résultats de référence sont ceux que nous avons présenté dans le paragraphe 5.1 pour l'injection de lixiviats grâce à un puits vertical. Nous ne présenterons donc ici que les résultats obtenus pour la "chambre d'injection" puis nous comparerons les comportements des deux systèmes d'injection.

5.2.1 Résultats pour la chambre d'injection

Les conditions initiales ainsi que les dimensions du volume modèle utilisées pour réaliser ces simulations sont identiques à celles présentées dans le paragraphe 5.1. La seule différence est le dispositif de réinjection de lixiviats utilisé. En effet, le puits d'injection vertical est remplacé par un drain d'injection horizontal crépiné sur 5 mètres et placé dans un massif drainant de 2 mètres de hauteur, de 1,8 mètres de largeur et de 5 mètres de profondeur et de perméabilité 10^{-9} m^2 . Les autres paramètres sont identiques à ceux utilisés dans le paragraphe 5.1. La Figure 5.9 présente une vision simplifiée du volume de stockage modèle considéré.

Nous ne présentons ici que les résultats en terme de saturation puisque ce sont ceux pour lesquels les principales différences avec le cas de réinjection présenté dans le para-

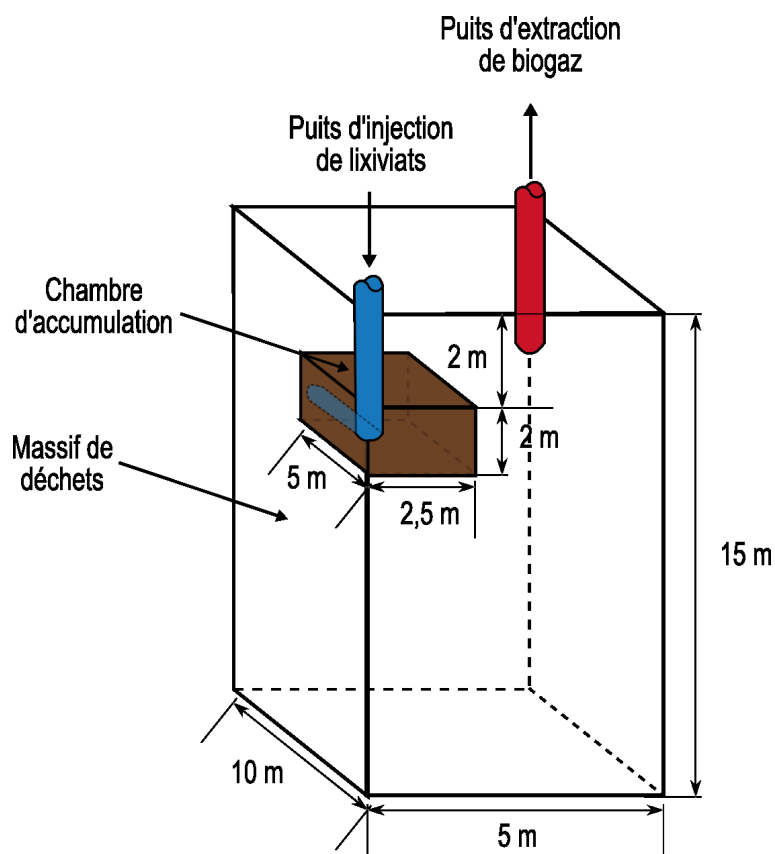


FIG. 5.9 – Volume de stockage modèle. Dispositif de réinjection de type "chambre d'injection"

graphe 5.1 vont apparaître. La Figure 5.10 présente l'évolution des champs de saturation dans le casier au cours du temps. Tout d'abord il convient de constater qu'à la fin de la période de réinjection, soit au bout d'une heure, la "chambre d'injection" est entièrement remplie. Ceci est lié au fait que la perméabilité du massif drainant présent dans la chambre est plus forte que la perméabilité du déchet environnement, ce qui favorise le remplissage de la chambre, plutôt que le drainage gravitaire du lixiviat dans le déchet. De plus, le fait d'utiliser un massif drainant de volume important permet de limiter la montée en pression au voisinage du dispositif d'injection. En effet, on atteint des pressions d'injection de l'ordre de 0,75 bars plutôt que 2 bars dans le cas de l'injection avec un puits vertical. Enfin, nous pouvons remarquer que le "panache" de saturation atteint le fond du casier après environ 11 heures de simulation.

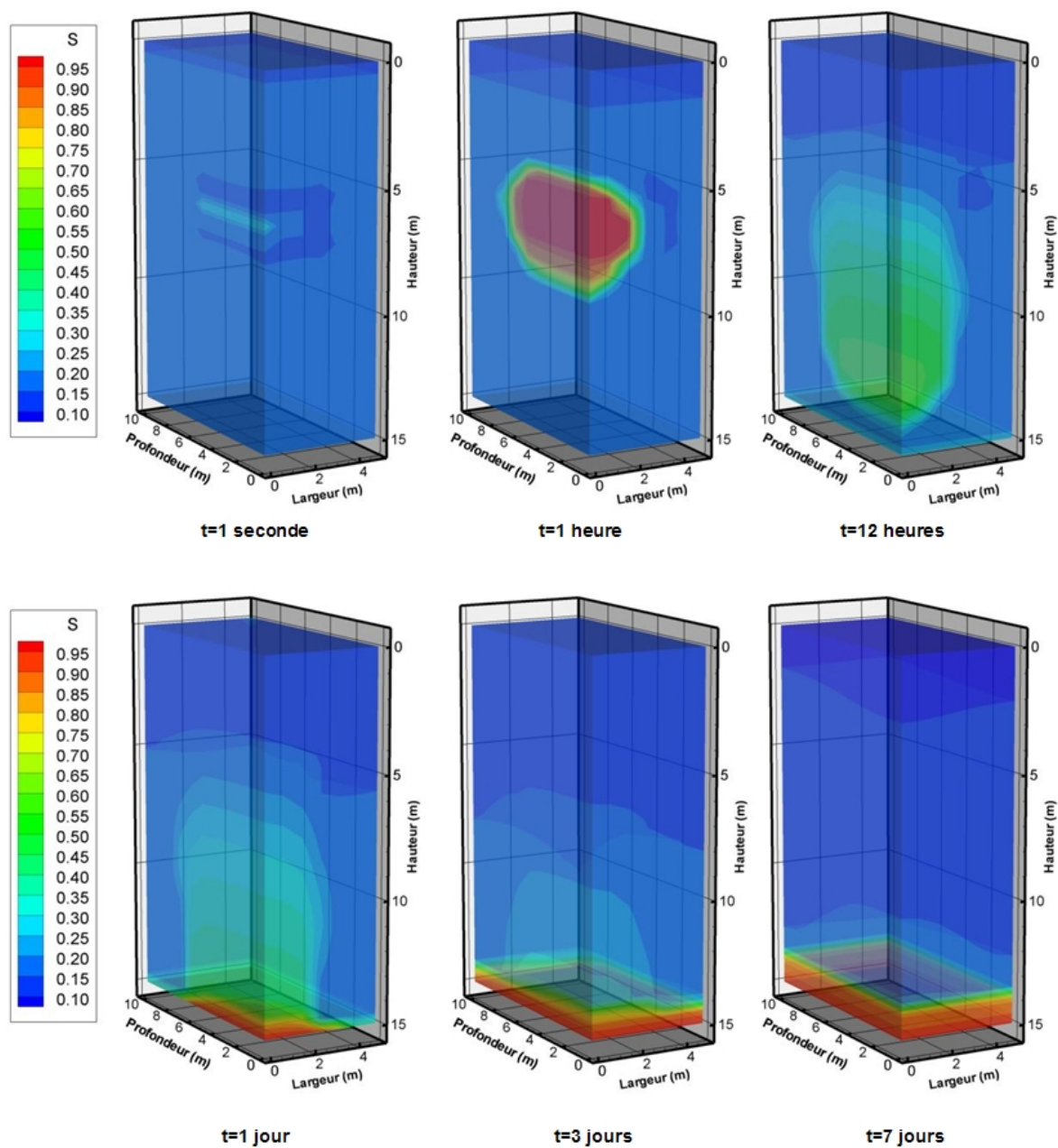


FIG. 5.10 – Evolution de la saturation à la suite de l'injection de lixiviats à $15 \text{ m}^3/\text{h}$ via une "chambre d'injection"

5.2.2 Comparaison des résultats

Nous comparons ici les résultats obtenus pour les deux designs proposés pour les dispositifs d'injection. Tout d'abord, nous nous focalisons sur le rayon d'action du dispositif, c'est à dire la zone dans le plan horizontal impactée par le dispositif de réinjection. Pour pouvoir comparer les deux types de dispositifs, le critère que nous allons utiliser est la surface représentant la zone dont la saturation est supérieure à 50% dans le plan horizontal d'altitude 7 mètres à la fin de la période d'injection (1 heure). Cette surface représente donc la zone d'impact du dispositif de réinjection au niveau de sa base. La Figure 5.11 présente les résultats obtenus pour chacun des deux dispositifs.

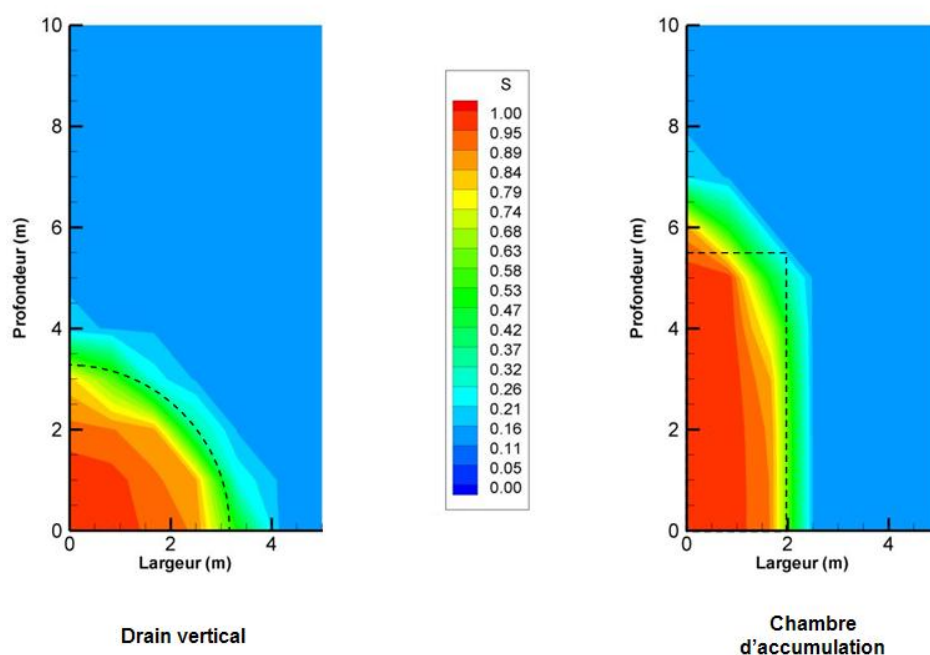


FIG. 5.11 – Surface impactée par les deux dispositifs de réinjection

La Figure 5.11 permet d'avoir une idée des surfaces impactées par la réinjection de lixiviats avec chacun des deux dispositifs. Dans le cas du puits vertical, cette surface est évaluée à 8 m^2 , alors qu'elle vaut environ 11 m^2 dans le cas de la "chambre d'injection". Du point de vue de la répartition spatiale de la teneur en eau autour du dispositif de réinjection, la chambre est donc plus performante.

Comme dans les deux tests, nous utilisons le même volume de lixiviats et la même durée d'injection, nous nous attendons à ce que le "panache de saturation" qui se déplace sous l'effet de la gravité après la période d'injection atteigne le fond du casier plus rapidement dans le cas de l'injection via le puits vertical que dans le cas de l'injection utilisant la "chambre d'injection". Ceci est confirmé par les résultats présentés sur la Figure 5.12.

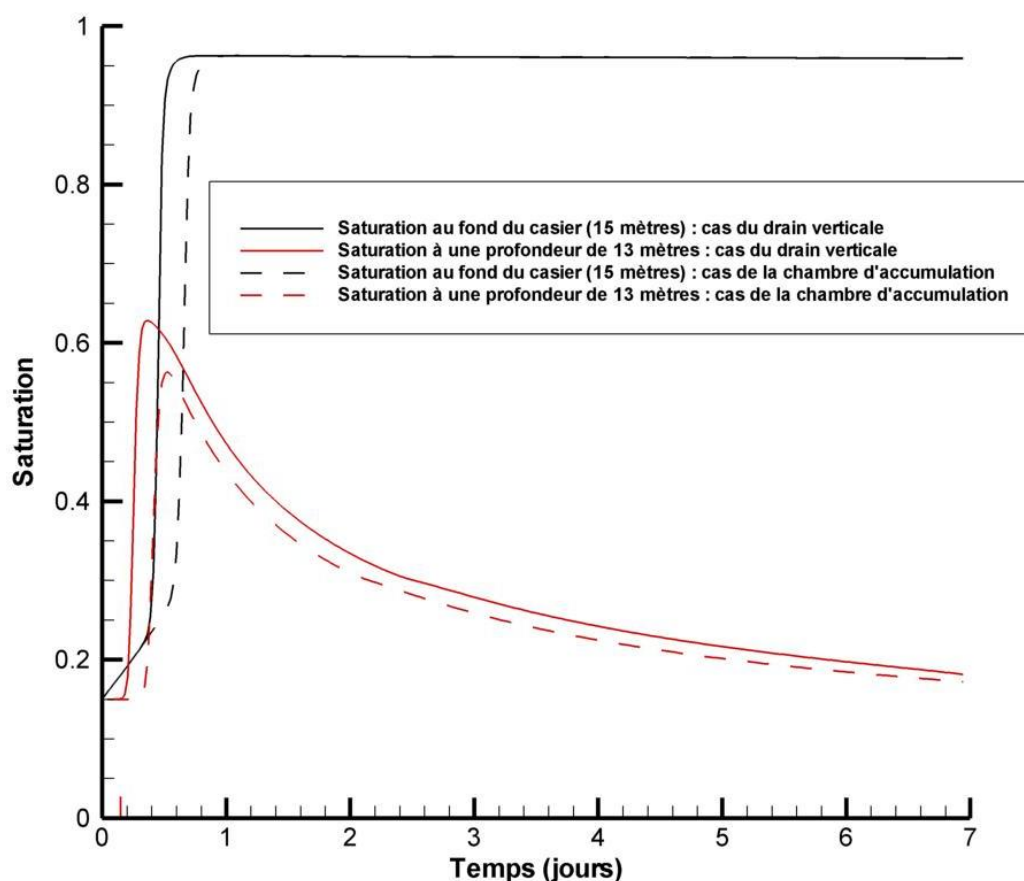


FIG. 5.12 – Evolution de la saturation en dessous du dispositif d'injection de lixiviat

La Figure 5.12 présente l'évolution de la saturation en deux points situés en dessous de la zone de réinjection au fond du casier pour le premier et à une profondeur de 13 mètres pour le second. Ces deux points sont situés à des profondeurs nulles et des largeurs nulles. Ils se situent donc à la verticale directe de la zone de réinjection que ce soit dans le cas du puits vertical ou de la "chambre d'injection". La Figure 5.12 met clairement en évidence que le "panache" de saturation migre plus rapidement vers le fond du casier dans le cas de l'injection via le puits vertical que dans le cas où l'on utilise une "chambre d'injection". En revanche les niveaux de saturation obtenus pour une profondeur de 13 mètres sont plus importants dans le cas de l'injection avec le puits vertical que dans le cas de la "chambre d'injection". De ce fait le temps de contact du déchet avec un niveau de saturation donné est plus important dans le cas où l'on utilise le puits vertical que dans le cas où l'on utilise une "chambre d'injection". Ceci est valable pour l'ensemble du volume de déchet situé en dessous du dispositif d'injection.

Par conséquent le bénéfice obtenu en utilisant une chambre d'injection réside principalement dans le fait que la surface horizontale impactée par le dispositif est plus importante. Néanmoins, les niveaux de teneur en eaux atteints localement en dessous du dispositif ainsi

que les temps de contact avec le déchet sont plus faibles dans le cas de la chambre d'injection. Ceci s'explique simplement par le fait qu'à quantité de lixiviat injectée donnée, si celui-ci est réparti sur une plus grande surface, la saturation sera localement moins importante. Il est donc relativement difficile de conclure quant à l'efficacité du dispositif, sans considérer des critères plus globaux.

Sur la Figure 5.13, nous comparons les courbes de production de biogaz pour chacun des deux dispositifs.

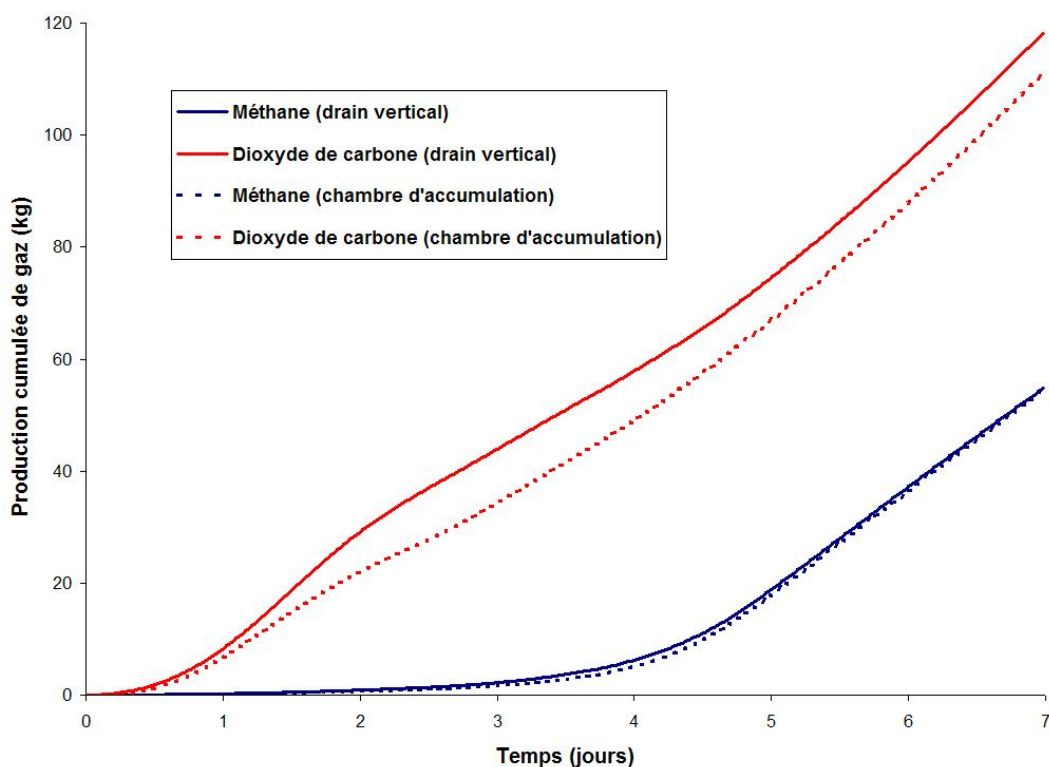


FIG. 5.13 – Production de biogaz pour les deux dispositifs de réinjection

La production de dioxyde de carbone aérobique est clairement plus rapide dans le cas de l'injection via un puits vertical. Ceci s'explique par le fait que le lixiviat injecté dans la chambre d'injection envahit d'abord la zone remplie de matériau drainant. Ce matériau étant inerte, aucune réaction de biodégradation aérobique n'est observée lors des premières minutes. Une fois que le lixiviat accumulé dans la chambre commence à être drainé par gravité, la biodégradation aérobique de la matière organique présente dans les OM commence. Ceci explique donc le léger retard observé sur les deux courbes bleues présentées sur la Figure 5.13. En revanche, la production de méthane est quasiment équivalente pour les deux dispositifs. Seul un léger retard sur le démarrage de la production de méthane est observé dans le cas de la chambre d'injection. Néanmoins, celui-ci est rapidement estompé, et il semble qu'après 7 jours, la production de méthane devient plus importante

dans le cas de la chambre d'injection. Malheureusement, les résultats présentés ici ne nous permettent pas de confirmer cela puisque les simulations ont été stoppées après 7 jours de simulation.

Il est donc relativement difficile de porter une conclusion définitive sur l'intérêt des chambre d'injection en terme de production de biogaz, même si celles-ci ont mis en évidence leur intérêt en terme de surface d'impact du dispositif de réinjection. Des simulations à plus long terme doivent être menées afin de confirmer les tendances dégagées ici.

5.3 Influence de la stratégie de réinjection

Outre le design du dispositif de réinjection, d'autres paramètres peuvent influencer l'efficacité du procédé. En particulier, la stratégie de réinjection peut avoir un impact important sur le comportement des ISD bioréacteurs. En effet, nous avons vu dans cette thèse que l'un des paramètres qui favorise l'activité des micro-organismes est la teneur en eau : plus elle est élevée, plus l'activité des micro-organismes est intense. Néanmoins, pour un volume de lixiviat réinjecté donné, il est possible d'imaginer plusieurs stratégies de réinjection. Nous en testons ici trois différentes. La première est la stratégie que nous avons déjà présentée précédemment. Elle consiste à injecter 15 m^3 de lixiviats dans le massif en 1 heure. La seconde est également une injection continue, mais elle est répartie sur une journée et consiste donc à injecter 15 m^3 de lixiviats dans le massif en 24 heures. Enfin, une dernière stratégie de réinjection est testée et consiste à injecter de façon discontinue le lixiviat dans le massif. Nous utiliserons par exemple une injection répartie sur 3 jours à hauteur de 5 m^3 injectés toutes les 24 heures pendant 1 heure.

5.3.1 Comparaison des résultats

Pour comparer les différentes stratégies de réinjection, nous présentons les résultats de production de biogaz pour chacune de ces stratégies, et nous les comparons. La Figure 5.14 présente les résultats obtenus lorsque l'on utilise un puits vertical comme dispositif de réinjection.

La Figure 5.14 indique qu'au bout de 7 jours, la stratégie qui a permis de produire la plus grande quantité de méthane est l'injection en continu des 15 m^3 de lixiviats sur une journée. En revanche, l'injection en périodes discontinues mais régulières du lixiviat (injection répartie sur 3 jours) permet de produire moins de méthane que les deux autres modalités que nous avons testées. Ce n'est pas le cas pour la production de CO_2 puisque l'injection discontinue du lixiviat permet de produire plus de dioxyde de carbone que les deux autres modalités que nous avons testé. Ceci peut être expliqué par le fait que

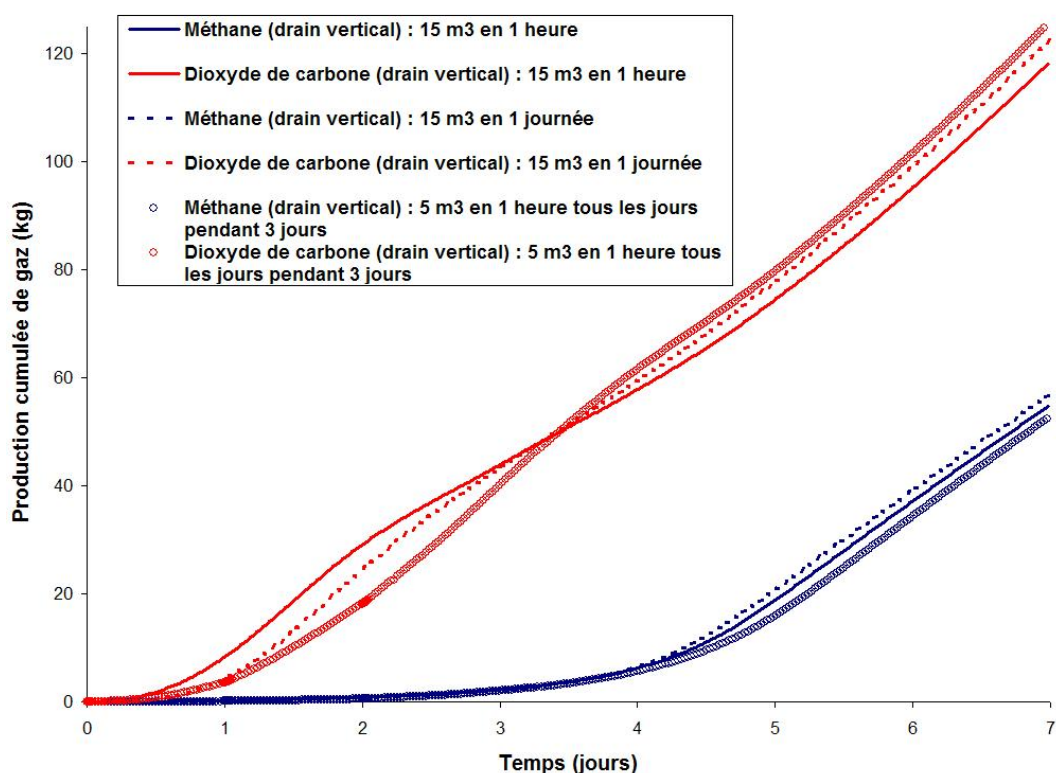


FIG. 5.14 – Production de biogaz pour différentes stratégies de réinjection via un puits vertical

la biodégradation aérobie est plus lente dans le cas où l'on injecte le lixiviat de façon discontinue. En effet, sur les trois premiers jours, la teneur en eau globale du massif est plus faible, ce qui ralentit la production de dioxyde de carbone par rapport au cas où l'on injecte le lixiviat de façon continue. En revanche, après trois jours, la teneur en eau globale du système est plus importante et le volume impacté également, ce qui explique une nette accélération de la production de CO_2 liée à la fois à la fin de l'activité aérobie et au démarrage de l'activité anaérobie.

La Figure 5.15 permet de confirmer cette tendance. En effet, nous pouvons constater que le taux de production de méthane est bien plus soutenu entre 5 et 7 jours dans le cas de l'injection répartie sur trois jours que dans le cas de l'injection en continue (sur 1 heure ou sur 3 jours). Ceci s'explique par le fait qu'après la troisième période d'injection, le retard de production pour cette modalité par rapport aux cas d'injections continues tend à diminuer, mais, également, qu'au bout de 7 jours, c'est avec cette modalité que l'on produit le plus de méthane. Pour confirmer cela, il aurait fallu réaliser des simulations à plus long terme. Malheureusement, l'ensemble des simulations a été réalisé sur 7 jours, c'est pourquoi de nouvelles séries de tests devront être envisagées.

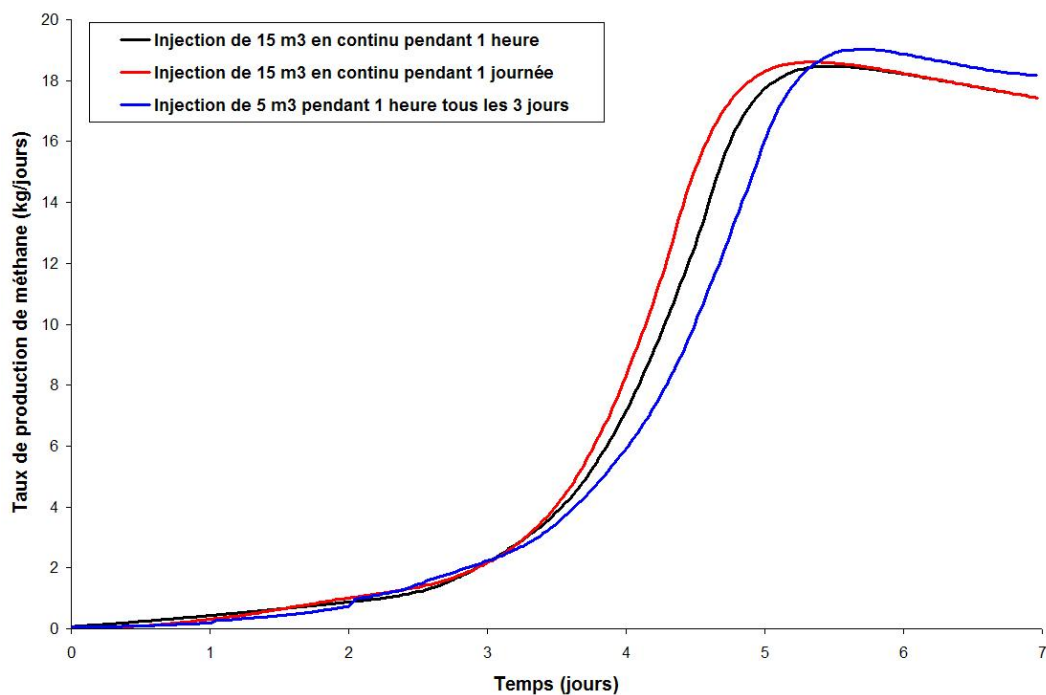


FIG. 5.15 – Taux de production de méthane pour différentes stratégies de réinjection via un puits vertical

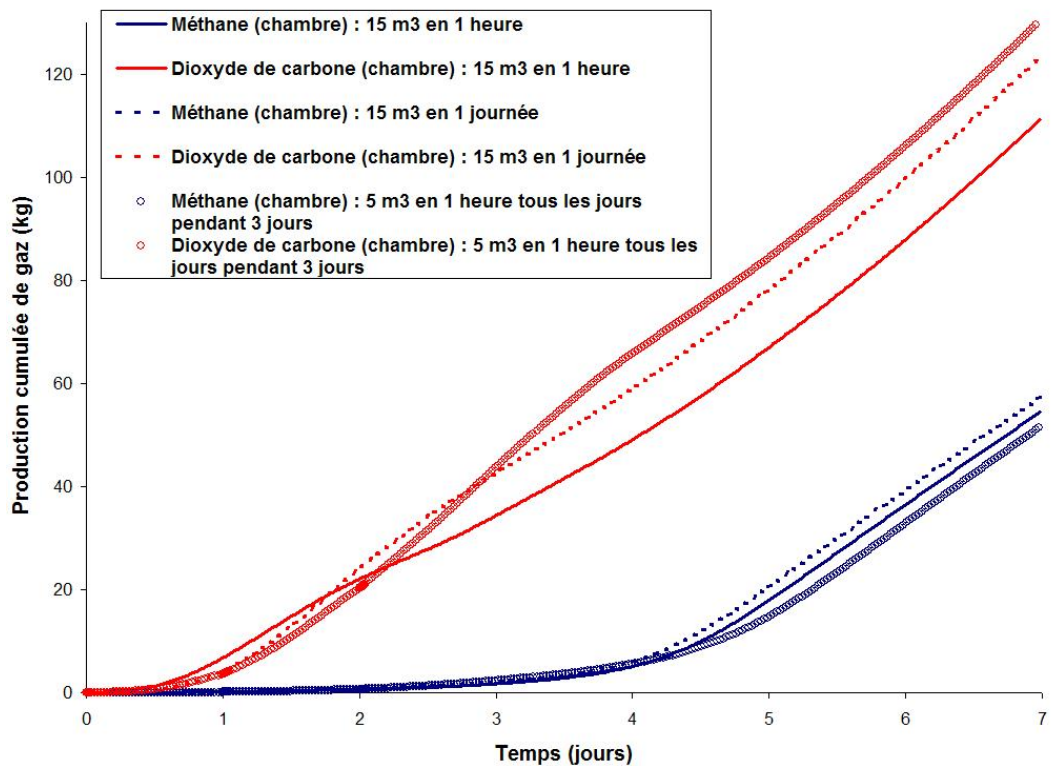


FIG. 5.16 – Production de biogaz pour différentes stratégies de réinjection via une "chambre d'injection"

Nous avons réalisé les mêmes tests dans le cas de la "chambre d'injection". Les résultats de production de biogaz sont présentés sur la Figure 5.16. Ceux-ci confirment les résultats présentés sur la Figure 5.14. Ces résultats permettent en particulier de distinguer un impact clairement différent de la modalité de réinjection utilisée sur la biodégradation aérobie et la biodégradation anaérobie. Ils mettent également en évidence le caractère complexe des couplages entre les transferts dans les ISD bioréacteurs et l'activité des micro-organismes.

Même si les résultats présentés ici semblent indiquer que l'injection en continu sur une journée de la totalité du lixiviat disponible semble être la meilleure solution pour produire la plus grande quantité de méthane au bout de sept jours, cette conclusion doit être considérée avec prudence et d'autres tests à plus long terme doivent être réalisés pour confirmer les tendances dégagées dans cette partie.

5.4 Influence du débit de réinjection

Comme nous pouvons le supposer au regard des résultats présentés dans le paragraphe précédent, le débit de réinjection peut avoir une importance considérable sur le comportement global des ISD bioréacteurs. C'est pourquoi nous présentons ici l'impact du débit de réinjection à la fois sur la surface impactée par le dispositif et sur la production de biogaz dans le cas de l'injection de lixiviat avec un puits vertical. Les simulations sont réalisées dans les mêmes conditions que celles présentées sur la Figure 5.1 et nous comparons les résultats obtenus pour des débits d'injection de $10 \text{ m}^3/\text{h}$, $15 \text{ m}^3/\text{h}$ et $20 \text{ m}^3/\text{h}$. Ces débits sont choisis de façon à être réalistes par rapport à la gamme de débits utilisée sur site (5 à $50 \text{ m}^3/\text{h}$). Pour conserver la quantité de lixiviat injectée, la durée d'injection est adaptée dans chacun des cas de façon à ce que l'on injecte 15 m^3 de lixiviats dans le milieu.

5.4.1 Surface d'impact

La Figure 5.17 présente la surface d'impact du dispositif d'injection pour chacun des trois débits testés. Cette surface est évaluée à la fin de la période d'injection à la base du dispositif, c'est à dire dans le plan horizontal de profondeur 7 mètres. Pour un débit d'injection de $10 \text{ m}^3/\text{h}$, l'injection est stoppée après 1,5 heures, alors qu'elle est stoppée après 1 heure pour un débit de $15 \text{ m}^3/\text{h}$ et après 3/4 heure pour un débit de $20 \text{ m}^3/\text{h}$.

Nous pouvons remarquer sur la Figure 5.17 que la surface horizontale impactée par le système de réinjection est quasiment identique pour les trois débits utilisés. En effet, l'écoulement autour du puits vertical est radial et le rayon d'impact peut être estimé à environ 3,2 mètres. Ceci peut paraître étonnant au premier abord, mais ceci est confirmé

par les résultats présentés sur la Figure 5.18.

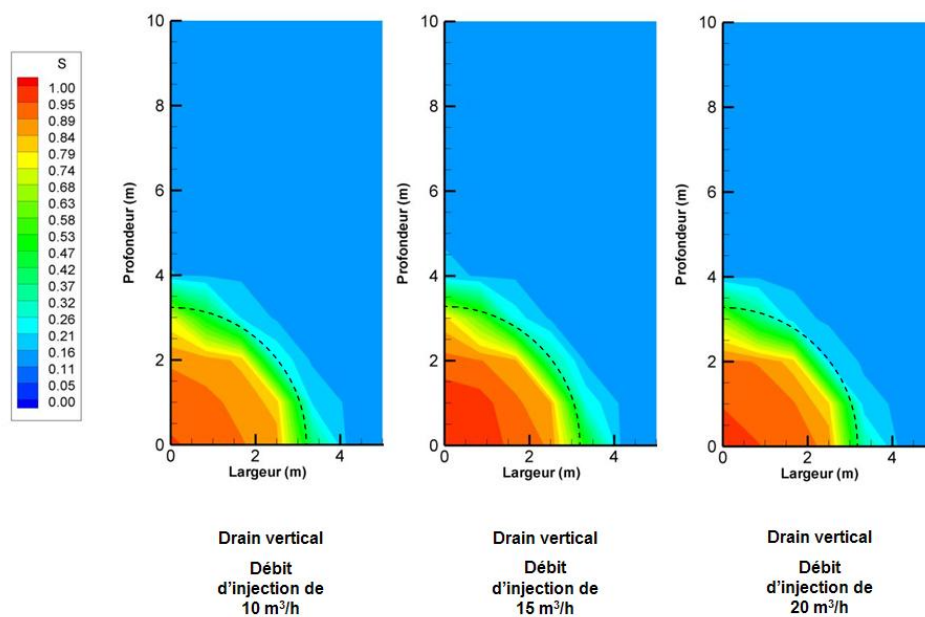


FIG. 5.17 – Comparaison de la surface d'impact du puits vertical pour plusieurs débits

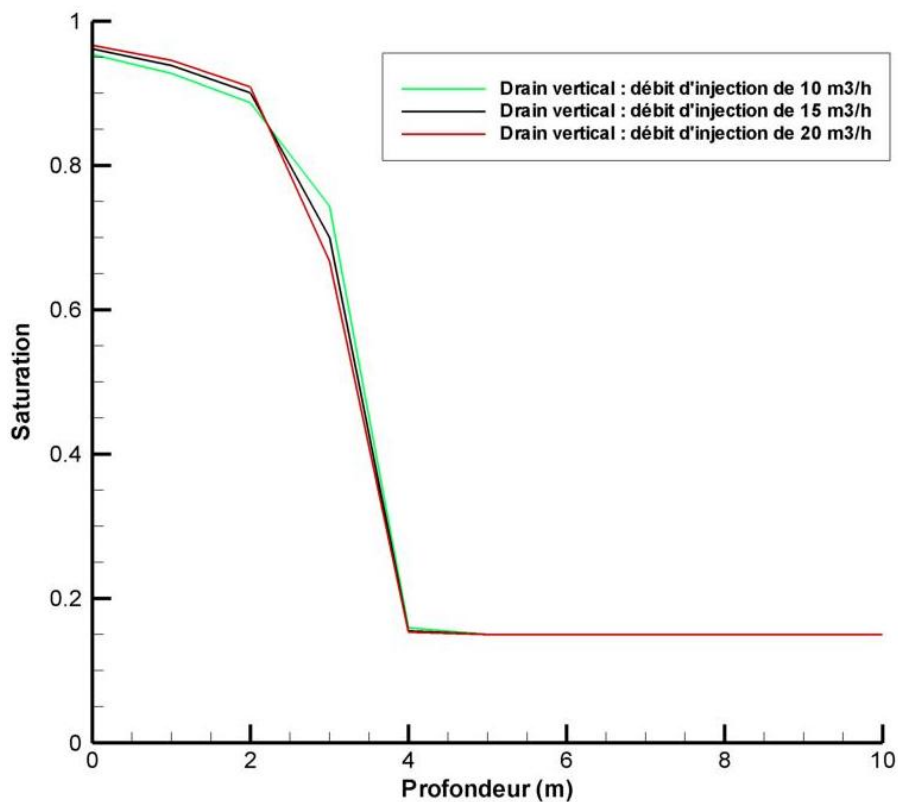


FIG. 5.18 – Comparaison de la distance d'impact du puits vertical pour plusieurs débits

En effet, la Figure 5.18 présente l'évolution de la saturation dans le plan horizontal situé à une profondeur de 7 mètres, le long de l'axe dont la coordonnée en terme de largeur est nulle. Nous pouvons remarquer sur cette Figure que la zone pour laquelle la saturation est supérieure à 50% est identique pour chacun des débits utilisés. La seule différence que l'on peut observer est la saturation maximale atteinte dans la maille d'injection qui augmente très légèrement avec le débit.

De manière générale, ces résultats indiquent que les effets gravitaires restent très déterminants dans la mise en place du panache de saturation en eau, et qu'il faudrait probablement des débits bien plus élevés pour gommer partiellement cet effet.

Les Figures 5.17 et 5.18 nous permettent donc de conclure que le débit d'injection (dans la gamme que nous avons explorée) n'a quasiment pas d'impact sur la surface humidifiée par le système. C'est donc plutôt la quantité de lixiviats réinjecté qui régit la propagation horizontale du front de saturation que le débit d'injection. Néanmoins, ce résultat doit être confirmé par les quantités de biogaz produites.

5.4.2 Production de biogaz

Sur la Figure 5.19, nous comparons les quantités de biogaz produites avec chacun des trois débits.

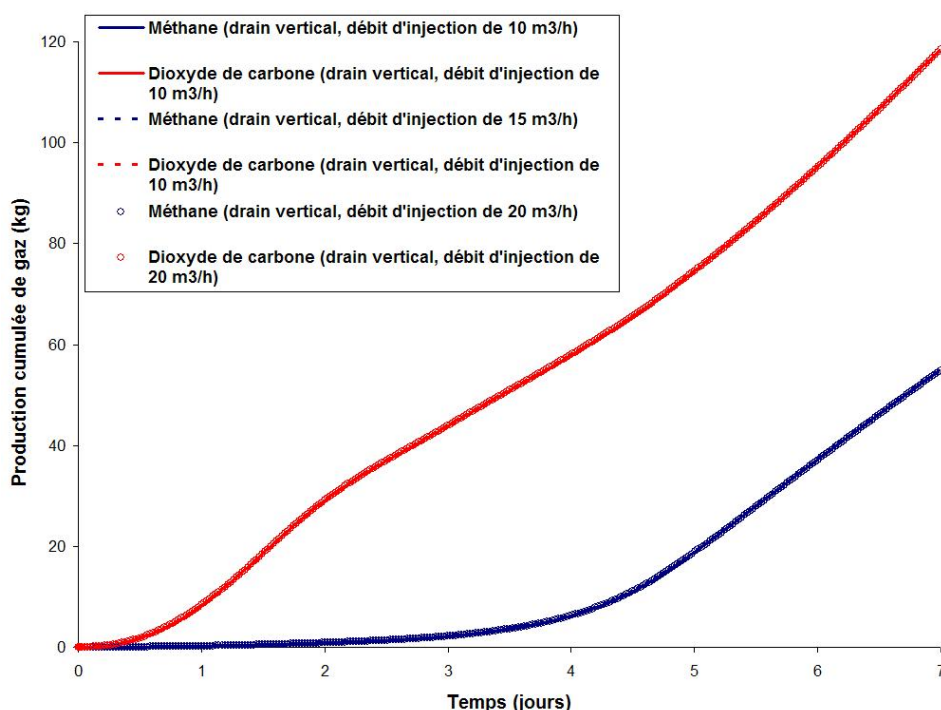


FIG. 5.19 – Influence du débit d'injection sur la production de biogaz

Les résultats de production de méthane et de dioxyde de carbone pour chacun des trois

débites de réinjection utilisés sont identiques. Ceci confirme donc les indications fournies par les résultats présentés sur les Figures 5.17 et 5.18 et le débit d'injection ne semble pas avoir d'influence sur le comportement du casier. Pour la gamme de débits que nous avons testée, il semble donc que ce soit la quantité de lixiviat réinjectée qui influence le comportement du casier.

Néanmoins, ce résultat doit être considéré avec prudence, puisque la gamme de débit que nous avons testé est relativement restreinte. Par exemple, dans le paragraphe précédent, les résultats présentés pour une injection de $15 \text{ m}^3/\text{jour}$, soit $0,625 \text{ m}^3/\text{h}$ sont très différents de ceux présentés sur la Figure 5.19. Comme nous l'avons suggéré plus haut, ceci peut être expliqué par le fait que, pour de faibles débits, les vitesses de migration gravitaire du lixiviat sont du même ordre de grandeur que les vitesses engendrées par le dispositif d'injection. En d'autres termes, lorsque l'on injecte le lixiviat à $0,625 \text{ m}^3/\text{h}$ (cf. Figure 5.14), à la fin de l'injection (après une journée), une grande partie du lixiviat a atteint le fond du casier, alors que dans les cas où l'on injecte le lixiviat à $10 \text{ m}^3/\text{h}$, $15 \text{ m}^3/\text{h}$ ou $20 \text{ m}^3/\text{h}$, à la fin de la période d'injection (après une heure) la majorité du lixiviat réinjecté est concentrée au voisinage du dispositif d'injection. L'injection à très faible débit, mais sur de plus longues périodes permet donc de répartir la migration gravitaire du lixiviat sur des périodes également plus longues.

5.5 Influence de la perméabilité du déchet

Nous tenons à mettre en évidence ici que les propriétés du déchet ont un impact non négligeable sur le comportement des ISD. Nous présentons donc ici les résultats d'un test de réinjection similaire à celui présenté dans le paragraphe 5.1, mais en utilisant un déchet dont la perméabilité verticale est inférieure d'un facteur 3 par rapport à la perméabilité dans le plan horizontal. Cela permet de prendre en compte l'anisotropie du déchet liée à la façon dont il a été placé sur site (cf. Beaven and Powrie (1995)). Nous considérons donc un déchet dont la perméabilité verticale vaut $1/3 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$ et dont les perméabilités dans les autres directions valent 10^{-11} m^2 . Les autres paramètres sont identiques à ceux utilisés dans le paragraphe 5.1.

La Figure 5.20 présente les résultats de production de biogaz pour le test d'injection que nous venons de présenter.

Nous pouvons remarquer que la production de biogaz est nettement moins importante (divisée d'un facteur 10 environ) dans le cas où la perméabilité verticale est divisée par 3. Ceci s'explique par le fait que la perméabilité verticale est plus faible et que le gaz produit en fond de casier migre moins facilement vers la zone d'extraction. Il semble donc que ce soit la diminution de perméabilité qui modifie le comportement du casier plutôt que

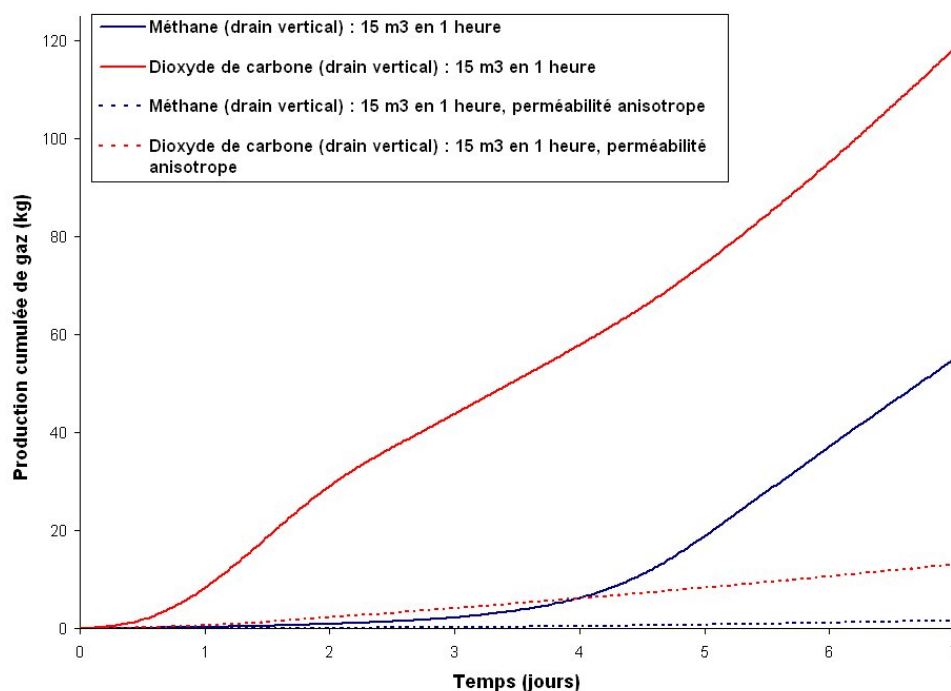


FIG. 5.20 – Influence de la perméabilité du déchet sur la production de biogaz

le caractère anisotrope des propriétés. En réalité, c'est l'ensemble du fonctionnement du casier qui est modifié par la modification des propriétés de perméabilité du déchet. Ceci met donc en évidence l'intérêt de déterminer avec précision les propriétés du matériau afin d'obtenir des simulations numériques précises et d'utiliser les résultats de simulation comme élément prédictif.

5.6 Conclusion et discussion

Les résultats que nous avons présentés dans ce chapitre permettent d'appréhender la complexité des phénomènes qui entrent en jeu dans la simulation des ISD bioréacteurs. Ils ont en particulier mis en évidence le caractère couplé de l'ensemble des phénomènes de transport de masse et de chaleur, de mouvement des phases mobiles et de biodégradation. Le comportement des ISD bioréacteurs est de ce fait relativement difficile à prévoir simplement sans utiliser un outil de simulation. En effet, les variations spatiales et temporelles de l'ensemble des variables du système sont intimement liées et la modification du comportement de l'une d'entre elles peut avoir un impact non négligeable sur l'ensemble du système.

Dans ce chapitre, nous nous sommes en particulier focalisés sur l'impact de la réinjection de lixiviat sur le comportement global d'un casier modèle de type bioréacteur.

Nous nous sommes en particulier intéressés à l'impact de la conception du procédé de réinjection, puis à la stratégie de réinjection et enfin à l'impact du débit de réinjection.

Les résultats présentés mettent en évidence que, dans le cas où l'on utilise un puits de réinjection vertical, le débit n'a que peu d'impact sur la surface humidifiée par le dispositif et sur la production de biogaz au niveau du système de dégazage. Ceci est valable pour des débits d'injection compris entre 10 m³/h et 20 m³/h. Dans ce cas, c'est la quantité de lixiviats réinjectée qui a une influence sur le comportement du casier. En revanche, pour des débits beaucoup plus faibles, il convient de noter que le comportement du casier peut être influencé par le débit, car la durée de la période de réinjection devient plus importante et le drainage gravitaire du lixiviat réinjecté devient le moteur principal du mouvement du lixiviat.

Ce type d'injection très lente, mais continue, du lixiviat a été identifiée comme l'une des stratégies possibles de réinjection. Cette stratégie a été comparée à deux autres modalités de réinjection. La première consiste à injecter la même quantité de lixiviat, en continu, mais sur une période d'une heure, et la seconde consiste à réinjecter de façon discontinue pendant 1 heure tous les jours pendant trois jours. Ces trois stratégies ont été testées à la fois pour un dispositif de réinjection de type puits vertical et pour un dispositif de type "chambre d'injection". Les résultats pour ces deux types de dispositifs sont comparables. Sur les 7 jours de simulation, pour chacun des dispositifs, c'est la réinjection en continu sur une journée de la totalité du lixiviat qui est la plus efficace du point de vue de la production de méthane. Néanmoins, des calculs à plus long terme doivent être entrepris afin de confirmer ces résultats. En effet, les résultats obtenus pour le cas où l'on réinjecte le lixiviat de façon discontinue montrent qu'après sept jours de simulation, c'est la réinjection en discontinu du lixiviat qui donne le meilleur taux de production de méthane. Il est donc nécessaire d'envisager des calculs sur de plus longues périodes et prenant en compte plusieurs cycles de réinjection afin de valider les éléments obtenus grâce aux simulations sur 7 jours. Néanmoins, le résultat obtenu pour les simulation en 3D du volume modèle pour une injection en continu sur une journée sont en accord avec les préconisations intuitives présentées dans le Chapitre 4. En effet, ce type d'injection ne se fait pas sous pression, mais est entièrement géré par la gravité, ce qui semble permettre d'obtenir les écoulements les plus lents possibles et donc d'obtenir les temps de contact les plus élevés entre le lixiviat et le déchet.

Enfin, dans ce chapitre, nous avons comparé le comportement du casier modèle après l'injection de lixiviat via un puits vertical et via un dispositif que nous avons appelé "chambre d'injection". Les résultats de simulations réalisées sur 7 jours mettent en évidence que, durant ces 7 premiers jours, l'injection grâce au puits vertical est plus efficace en terme de production de CO₂. Elle permet en particulier une consommation aérobie plus

rapide de l'oxygène présent initialement. Néanmoins, les résultats en terme de production de méthane, sont relativement proches, même si les simulations d'injection via le puits vertical mettent en évidence une légère avance de production par rapport aux résultats obtenus avec une "chambre d'injection". L'utilisation d'une chambre d'injection permet d'humidifier une surface horizontale plus importante. Cette surface étant plus importante, à quantité de lixiviat injecté donnée, le drainage gravitaire du lixiviat met en jeu un volume de déchet plus important. Par conséquent, il convient de noter que les simulations sur 7 jours ne sont pas suffisantes pour conclure. Tout comme nous avons pu le mentionner précédemment en ce qui concerne la stratégie de réinjection, des simulations à long terme doivent être entreprises afin de confirmer les informations données par les résultats fournis dans ce chapitre.

L'ensemble des éléments que nous avons présenté dans ce chapitre met en évidence l'intérêt de la simulation numérique comme élément prédictif ou comme un outil de validation. Néanmoins, ces résultats indiquent également que l'utilisation de la simulation numérique des ISD bioréacteurs comme outil de prédiction nécessite de comprendre en détails les différents phénomènes mis en cause dans le fonctionnement des ISD et de déterminer avec précision les propriétés du milieu considéré.

Conclusion et perspectives

Le développement du code de calcul MATAABIO a permis de mettre en évidence que le choix des stratégies de recirculation de lixiviats et du design du dispositif de réinjection de lixiviats dans les ISD bioréacteurs est un enjeu primordial dans l'optimisation des procédés innovants mis en place sur les installations de stockage.

Le code de calcul MATAABIO a été développé sur la base d'un modèle conceptuel et mathématique novateur. Le modèle intègre la description du mouvement des phases liquide et gaz, mais également la description de deux phases statiques que sont le biofilm et le substrat solide formé par les OM. Le modèle permet également de décrire le transport réactif multiconstituant des espèces chimiques présentes dans les ISD (CO_2 , CH_4 , H_2O , N_2 , O_2), ainsi que le transport réactif de chaleur. Le modèle macroscopique décrivant les transferts réactifs a été développé via un processus de changement d'échelle. Une attention particulière a été portée à l'évaluation des paramètres macroscopiques utiles au code de calcul. L'évaluation expérimentale des cinétiques de biodégradation et des paramètres de perméabilité et de pression capillaire a été présentée et a permis d'alimenter le code de calcul avec des données réalistes. Enfin, le caractère double milieu du substrat solide que représente le déchet a été intégré de façon à développer un modèle réaliste. La calibration de ce modèle devra néanmoins faire l'objet d'une attention particulière dans les travaux futurs.

Le code de calcul MATAABIO est basé sur une résolution complètement implicite du système d'équations aux dérivées partielles. Seuls les termes d'échange et les termes réactifs sont traités explicitement. A l'aide des résultats 1D obtenus avec le code de calcul, nous avons pu définir une stratégie de recirculation intuitive basée sur des régimes d'écoulements gravitaires. Le régime gravitaire a pour avantage de transporter lentement une quantité de liquide suffisante pour activer les processus de biodégradation anaérobie. Ce type de régime permet d'obtenir un temps de contact maximal entre la phase liquide qui s'écoule dans le milieu et les micro-organismes.

Sur la base de cet élément intuitif, deux procédés de réinjection ont été testés. Une attention particulière a été prêtée au design du procédé. Les résultats des simulations numériques ont pu mettre en évidence l'intérêt des dispositifs de type "chambre d'injec-

tion" en ce qui concerne le rayon d'action du dispositif. Néanmoins, aucune conclusion définitive concernant la production de biogaz n'a pu être développée. Pour ce faire, des simulations à plus long terme doivent être envisagées. Cependant, dans le cas des "chambres d'injection", il est possible de supposer que le régime d'écoulement gravitaire qui suit naturellement la période de réinjection intervient sur un volume plus important et permet ainsi de produire plus de biogaz. Dans le cas des tests d'injection via un drain vertical, le débit d'injection a finalement peu d'influence sur l'efficacité du dispositif, l'essentiel étant d'injecter une quantité donnée de lixiviat.

Enfin, nous avons testé la stratégie de réinjection, c'est-à-dire que, pour un volume donné de lixiviats réinjecté, nous avons comparé la stratégie visant à injecter de façon continue le lixiviat soit pendant une heure, soit pendant une journée ou de façon répartie sur trois jours pendant une heure. Que l'on utilise une "chambre d'injection" ou un dispositif de réinjection vertical, il semble intéressant de réinjecter le lixiviat en continu sur de longues périodes mais avec de faibles débits. Ceci permet en particulier d'obtenir une production accrue de méthane. L'injection discontinue de lixiviat ne semble pas favoriser la production de méthane, mais des simulations à plus long terme doivent être envisagées pour confirmer cette tendance.

Les tests que nous avons menés quant à l'influence de la perméabilité du déchet mettent en évidence l'impact fort des propriétés du milieu sur les résultats de simulation. Or il existe une forte disparité des mesures de ces propriétés du fait, d'une part, de l'hétérogénéité locale du matériau que nous considérons et, d'autre part, de la diversité de composition de ce matériau suivant la région où il est collecté.

C'est pourquoi, l'amélioration de l'outil de simulation passe en priorité par une meilleure connaissance des propriétés physiques du matériau. Il serait intéressant en particulier d'imaginer des procédures de test systématiques permettant de déterminer les perméabilités intrinsèques et relatives ainsi que les courbes de pression capillaire du milieu étudié. L'ensemble des mesures présentées dans le document devront également être éprouvées en comparant les résultats de simulation qu'elles ont pu fournir avec des cas réels. En effet, à la fois les expériences qui ont permis de déterminer le modèle de biodégradation et celles qui ont permis de déterminer les propriétés de perméabilité et de pression capillaire du déchet se sont déroulées en laboratoire. Or, l'une des difficultés liées à l'étude des OM réside dans le fait que les échantillons de déchet étudiés en laboratoire sont souvent de taille caractéristique réduite (tri ou broyage) et n'ont donc pas forcément le même comportement en laboratoire et dans les alvéoles de stockage réelles.

D'autres éléments de réflexion concernant l'optimisation du code de calcul pourront être envisagés. En effet, les méthodes numériques utilisées dans MATAABIO ont l'avantage d'être robustes, mais peuvent certainement être améliorées, notamment pour per-

mettre d'obtenir des temps de calculs plus faibles. Il serait intéressant en particulier d'implémenter une méthode IMPSAT afin de conserver la stabilité du code de calcul tout en diminuant les temps de calcul. D'autres méthodes numériques plus complexes pourront également être testées et comparées à la version initiale du code de calcul.

Enfin, la compréhension détaillée des phénomènes mis en jeu dans les processus de biodégradation de la matière organique présente dans les OM nécessite encore des efforts soutenus. La description détaillée des phénomènes liés au développement de biofilms à la surface des éléments solides composant les OM manque en particulier à la compréhension des phénomènes de biodégradation. Il en est de même en ce qui concerne la répartition de l'eau au sein des différents constituants composant le déchet. Des travaux théoriques et expérimentaux d'envergure sont à initier afin d'aboutir à une compréhension détaillée de l'ensemble des phénomènes complexes et couplés responsables de l'évolution des ISD.

Bibliographie

- Ademe (1997). *MODECOM : Méthode de Caractérisation des Ordures Ménagères*. 2nd édition, Ademe Edition, France.
- Ademe (2006). *Les déchets en chiffres*. Direction Déchets et Sols, Département des Observatoires, des Coûts et de la Planification des Déchets.
- Aguilar-Juarez, O. (2000). *Analyse et modélisation des réactions biologiques aérobies au cours de la phase d'exploitation d'un casier d'un centre d'enfouissement technique*. Thèse de doctorat, Institut des Sciences Appliquées de Toulouse.
- Ahmadi, A., Quintard, M., and Whitaker, S. (1998). Transport in chemically and mechanically heterogeneous porous media V : two-equation model for solute transport with adsorption. *Advances in Water Resources*, 22 :59–86.
- Allen, M. B. (1985). Numerical modelling of multiphase flow in porous media. *Adv. Water Resources*, 8 :162–187.
- Aran, C. (2001). *Modélisation des écoulements de fluides et des transferts de chaleur au sein des déchets ménagers. Application à la réinjection de lixiviat dans un centre de stockage*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- Arbogast, T. (1994). Gravitational forces in dual-porosity systems : I. model derivation by homogenization. *Transport in Porous Media*, 13 :179–203.
- Arbogast, T., Douglas, J., and Hornung, U. (1991). *Frontiers in Pure and Applied Mathematics*, chapter Modeling of naturally fractured reservoirs by formal homogenization techniques, pages 1–19. Elsevier, Amsterdam.
- Arigala, S. G., Tsotsis, T. T., Webster, I. A., Yortsos, Y. C., and Kattapuram, J. J. (1995). Gas generation, transport, and extraction in landfills. *Journal of Environmental Engineering*, 121(1) :33–44.
- Auriault, J.-L. (1987). Nonsaturated deformable porous media : Quasistatics. *Transport in Porous Media*, V2(1) :45–64.

- Aziz, K. and Settari, A. (1979). *Petroleum reservoir simulation*. Applied science publishers LTD.
- Baehr, A. L. and Hult, M. F. (1991). Evaluation of unsaturated zone air permeability through pneumatic tests. *Water Resources Research*, 27 :2605–2617.
- Barlaz, M. A., Ham, R. K., and Shaefer, D. M. (1989). Mass-balance analysis of anaerobically decomposed refuse. *Journal of Environmental Engineering*, 115(6) :1088–1102.
- Barlaz, M. A., Milke, M. W., and Ham, R. (1987). Gas production parameters in sanitary landfill simulators. *Waste management & Research*, 5 :p.27.
- Barry, D., Miller, C., Culligan, E., and Bajracharya, K. (1997). Analysis of split operator methods for nonlinear and multispecies groundwater chemical transport models. *Mathematics and Computers in Simulation*, 43 :331–341.
- Barry, D. A., Bajracharya, K., and Miller, C. T. (1996). Alternative split-operator approach for solving chemical reaction/groundwater transport models. *Advances in Water Resources*, 19 :261–275.
- Bastian, P. (1999). *Numerical Computation of Multiphase Flows in Porous Media*. Technischen Fakultät der Christian-Albrechts-Universität Kiel, Kiel.
- Bear, J. and Bachmat, Y. (1991). *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media*. Kluwer Academic Publishers, The Netherlands.
- Beaven, R. and Powrie, W. (1995). Hydrogeological and geotechnical properties of refuse using a large scale compression cell. In *Proc. Sardinia 95, 5th International Landfill Symposium, Cagliari*, volume 2.
- Benson, C. H., Barlaz, M. A., Lane, D. T., and Rawe, J. M. (2005). State of the practice reviews of bioreactor landfills. US EPA Report, Hackensack, USA.
- Benson, C. H., Barlaz, M. A., Lane, D. T., and Rawe, J. M. (2007). Practice review of five bioreactor/recirculation landfills. *Waste Management*, 27(1) :13–29.
- Bensoussan, A., Lions, J. L., and Papanicolaou, G. (1978). *Asymptotic Analysis for Periodic Structure*, volume volume 5 of Studies in Mathematics and Its Applications. North-Holland, Amsterdam.
- Beuling, E. E., van den Heuvel, J. C., and Ottengraf, S. P. P. (2000). Diffusion coefficients of metabolites in active biofilms. *Biotechnology and Bioengineering*, 67(1) :53–60.

- Beuling, E. E., van Dusschoten, D., Lens, P., van den Heuvel, J. C., As, H. V., and Ottengraf, S. P. P. (1998). Characterization of the diffusive properties of biofilms using pulsed field gradient-nuclear magnetic resonance. *Biotechnology and Bioengineering*, 60(3) :283–291.
- Binder, M. and Bramryd, T. (2001). Environmental impacts of landfill bioreactorcells in comparison to former landfill techniques. *Water, Air, & Soil Pollution*, V129(1) :289–303.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., and Lightfoot, E. N. (2002). *Transport Phenomena*. Wiley.
- Bou-Zeid, E. and El-Fadel, M. (2004). Parametric sensitivity analysis of leachate transport simulations at landfills. *Waste Management*, 24(7) :681–689.
- Bouchez, T., Munoz, M.-L., Vessigaud, S., Bordier, C., Aran, C., and Duquennoi, C. (2003). Clogging of MSW landfill leachate collection systems : prediction methods and in situ diagnosis. In *Proceedings of 9 th Int. Waste Management and Landfill Symposium, Sardinia (I)*.
- Bousquet-Mélou, P. (2000). *Modélisation macroscopique et simulation numérique de la solidification des mélanges binaires*. Thèse de doctorat, Paris VI.
- Bouwer, E. J., Rijnaarts, H. H. M., Cunningham, A. B., and R.Gerlach (2000). *Biofilms in Porous Media*, in *Biofilms II : Process Analysis and Applications*, pages 123–158. Wiley-Liss, Inc.
- Brenier, Y. and Jaffre, J. (1989). Upstream differencing for multiphase flow in reservoir simulation. *Rapports de recherche, INRIA*.
- Brokaw, R. (1968). NASA Tech Note D-4496, NASA.
- Brokaw, R. (1969). Predicting transport properties of dilute gases. *I&EC Process design and development*, 8 :240–253.
- Brooks, R. and Corey, A. (1966). Properties of porous media affecting fluid flow. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, 92 :61–68.
- Brooks, R. J. and Corey, A. T. (1964). Hydraulic properties of porous media. Technical report, Hydrological Paper 3, Colorado State University, Fort Collins.
- Bryers, J. D. (2000). *Biofilms : An Introduction*, in *Biofilms II : Process Analysis and Applications*, pages 3–11. Wiley-Liss, Inc.

- Bryers, J. D. and Drummond, F. (1998). Local macromolecule diffusion coefficients in structurally non-uniform bacterial biofilms using fluorescence recovery after photobleaching (frap). *Biotechnology and Bioengineering*, 60(4) :462–473.
- Burghoffer, P., Danquigny, C., Emonet-Gauthier, A., Getto, D., Haseler, F., Kaskassian, S., Le Roux, F., Quintard, M., Razakarisoa, O., and Schaefer, S. (2005). *Quantification des cinétiques de dissolution sur sites réels (hydrocarbures pétroliers et dérivés halogénés) - Guide méthodologique*, chapter Quantification des cinétiques de dissolution sur sites réels (hydrocarbures pétroliers et dérivés halogénés) - Guide méthodologique, pages 1–74.
- Cao, H. (2002). *Development of techniques for general purpose simulators*. PhD thesis, Stanford University.
- Carbonell, R. and Whitaker, S. (1984). *Fundamentals of Transport Phenomena in Porous Media*, chapter Heat and Mass Transfer in Porous Media, pages 121–198. Martinus Nijhof Publ.
- Carey, M. P., Carty, M. G., Donlon, D. B., Howley, M. D., and Nealon., D. T. (2000). *Landfill Manuals. Landfill Site Design*. Environmental Protection Agency, Ireland.
- Carrayrou, J., Mose, R., and Behra, P. (2004). Operator-splitting procedures for reactive transport and comparison of mass balance errors. *Journal of Contaminant Hydrology*, 68(3-4) :239–268.
- Chapman, S. and Cowling, T. (1939). *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge University Press.
- Chen, T. H. and Chynoweth, D. P. (1995). Hydraulic conductivity of compacted municipal solid waste. *Bioresource Technology*, 51 :205–212.
- Chen, Y.-C., Chen, K.-S., and Wu, C.-H. (2003). Numerical simulation of gas flow around a passive vent in a sanitary landfill. *Journal of Hazardous Materials*, 100(1-3) :39–52.
- Chen, Z. (2003). Numerical analysis for two-phase flow in porous media. *Computational Methods in Applied Mathematics*, 3 :59–75.
- Chen, Z., Huan, G., and Li, B. (2004). An improved impes method for two-phase flow in porous media. *Transport in Porous Media*, 54(3) :361–376.
- Chen, Z., Huan, G., and Ma, Y. (2006). *Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media*. Society for Industrial and Applied Mathematics.

- Chen-Charpentier, B. M. and Kojouharov, H. V. (2003). Numerical simulation of dual-species biofilms in porous media. *Applied Numerical Mathematics*, 47(3-4) :377–389.
- Chenu, D., Skhiri, N., Bletzacker, L., and Quintard, M. (2005). Reactive transport in bioreactors : development of a multiphase flow model. In *Proc. Sardinia 2005, Tenth International Waste Management and Landfill Symposium*.
- Cherblanc, F., Ahmadi, A., and Quintard, M. (2003). Two-medium description of dispersion in heterogeneous porous media : Calculation of macroscopic properties. *Water Resources Res.*, 39 :1154–1173.
- Christensen, B. and Characklis, W. (1990). *Physical and Chemical Properties of Biofilms*, in *Biofilms*, pages 93–130. New York, N.Y : John Wiley & Sons, Inc.
- Christensen, T. and Kjeldsen, P. (1989). *Sanitary Landfilling : Process, Technology and Environmental Impact*, chapter Basic Biochemical Processes in Landfills, pages 29–49. Academic Press.
- Ciegis, R., Papastavrou, A., and Zemitis, A. (2000). Additive splitting methods for elliptic-parabolic problems. *Ann. Univ. Ferrara - Sez. VII - Sc. Mat.*, XLVI :291–306. Annali dell'Università di Ferrara. Sez. VII Scienze Matematiche.
- Cooke, A., Rowe, R., and Rittmann, B. (2005a). Modelling species fate and porous media effects for landfill leachate flow. *Canadian Geotechnical Journal*, 42(4) :1116–1132.
- Cooke, A., Rowe, R., VanGulck, J., and Rittmann, B. (2005b). Application of the bioclog model for landfill leachate clogging of gravel-packed columns. *Canadian Geotechnical Journal*, 42(6) :1600–1614.
- Coptý, N. K., Ergene, D., and Onay, T. T. (2004). Stochastic model for landfill gas transport and energy recovery. *Journal of Environmental Engineering*, 130(9) :1042–1049.
- Coutelieiris, F., Kainourgiakis, M., Stubos, A., Kikkinides, E., and Yortsos, Y. (2006). Multiphase mass transport with partitioning and inter-phase transport in porous media. *Chemical Engineering Science*, 61 :4650–4661.
- Cox, R. and Nishikawa, T. (1991). A new total variation diminishing scheme for the solution of advective-dominant solute transport. *Water Resource Research*, 27 :2645–2654.
- Dagan, G. (1989). *Flow and transport in porous formations*. Springer-Verlag, Berlin.

- Dho, N. Y., Koo, J. K., and Lee, S. R. (2002). Prediction of leachate level in kimpo metropolitan landfill site by total water balance. *Environmental Monitoring and Assessment*, V73(3) :207–219.
- Di Donato, G., Huang, W., and Blunt, M. (2003). Streamline-based dual porosity simulation of fractured reservoirs. In of Petroleum Engineers, S., editor, *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*.
- Douglas, J. and Arbogast, T. (1990). *Dynamics of Fluids in Hierarchical Porous Formations*, chapter Dual porosity models for flow in naturally fractured reservoirs, pages 177–221. Academic Press, London.
- Durmusoglu, E., Corapcioglu, M., and Sanchez, I. (2005). Permeability of municipal solid waste samples. In *Proc. Sardinia 2005, Tenth International Waste Management and Landfill Symposium S. Margherita di Pula, Cagliari*.
- Durmusoglu, E., Sanchez, I. M., and Corapcioglu, M. Y. (2006). Permeability and compression characteristics of municipal solid waste samples. *Environmental Geology*, V50(6) :773–786.
- Duval, F., Fichot, F., and Quintard, M. (2004). A local thermal non-equilibrium model for two-phase flows with phase-change in porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47 :613–639.
- Dykhuizen, R. C. (1990). A new coupling term for dual-porosity models. *Water Resources Research*, 26 :351–356.
- Eberl, H. J., Picioreanu, C., Heijnen, J. J., and van Loosdrecht, M. C. M. (2000). A three-dimensional numerical study on the correlation of spatial structure, hydrodynamic conditions, and mass transfer and conversion in biofilms. *Chemical Engineering Science*, 55 :6209–6222.
- Ehrig, H. J. (1983). Quality and quantity of sanitary landfill leachate. *Waste Management and Research*, 1 :53–68.
- El Fadel, M., Findikakis, A. N., and Leckie, J. O. (1997). Modeling leachate generation and transport in solid waste landfills. *Environmental Technology*, 18 :669–686.
- El-Fadel, M., Findikakis, M., and Leckie, J. O. (1996). Numerical modelling of generation and transport of gas and heat in landfills. i. model formulation. *Waste Management and Research*, 14 :483–504.

- Ely, J. and Hanley, J. (1983). Prediction of transport properties. 2. thermal conductivity of pure fluids and mixtures. *Ind. Eng. Chem. Fundam*, 22 :90–96.
- Ewing, R. (1997). Numerical simulation of the multiphase flow of contaminants in porous media. *Modeling and Computation in Environmental Sciences*, 59 :133–145.
- Eymard, R. and Sonier, F. (1994). Mathematical and numerical properties of control-volume finite-element scheme for reservoir simulation. *SPE Reservoir Engineering*, 9 :283–289.
- Farquhar, G. J. (1989). Leachate : production and characterization. *Canadian journal of civil engineering*, 16 :317–345.
- Farquhar, G. J. and Rovers, F. (1973). Gas production during refuse decomposition. *Water, air and soil pollution*, 2 :483–495.
- Findikakis, A. N. and Leckie, J. O. (1979). Numerical simulation of gas flow in sanitary landfills. *Journal of Environmental Engineering Division, ASCE*, 105 :927–945.
- Francou, C. (2003). *Stabilisation de la matière organique au cours du compostage de déchets urbains : influence de la nature des déchets et du procédé de compostage - Recherche d'indicateurs pertinents*. Thèse de doctorat, INAPG.
- Garcia de Cortazar, A. L. and Monzon, I. T. (2007). Modulo 2 : A new version of an integrated simulation model for municipal solid waste landfills. *Environmental Modelling & Software*, 22(1) :59–72.
- Geiger, S., Roberts, S., Matthai, S. K., Zoppou, C., and Burri, A. (2004). Combining finite element and finite volume methods for efficient multiphase flow simulations in highly heterogeneous and structurally complex geologic media. *Geofluids*, 4(4) :284–299.
- Gerke, H. H. and van Genuchten, M. T. (1993a). A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media. *Water Resources Research*, 29(2) :305–319.
- Gerke, H. H. and van Genuchten, M. T. (1993b). Evaluation of a first-order water transfer term for variably saturated dual-porosity flow models. *Water Resources Research*, 29(4) :1225–1238.
- Gobbé, C. and Quintard, M. (1994). Macroscopic description of unsteady heat transfer in heterogeneous media. *High Temperatures - High Pressures*, 26 :1–14.

- Gourdon, R. (2002). Aide à la définition des déchets dits biodégradables, fermentescibles, méthanisables, compostables. Technical report, Association RECORD, Etude n° 00-0118/1A.
- Gray, K. R., Sherman, K., and Biddlestone, A. J. (1971). A review of composting. part 1 : the practical process. *Process Biochemistry*, 6(6) :32–36.
- Gray, W. G. (1975). A derivation of the equations for multiphase transport. *Chemical Engineering Science*, 30 :229–233.
- Gurijala, K. R. and Sulfito, J. M. (1993). Environmental factors influencing methanogenesis from refuse in landfill samples. *Environmental Science Technology*, 27 :1176–1181.
- Haarstrick, A., Hempel, D., Ostermann, L., Ahrens, H., and Dinkler, D. (2001). Modelling of the biodegradation of organic matter in municipal landfills. *Waste Management Research*, 19(4) :320–331.
- Hager, J. and Whitaker, S. (2002). The thermodynamic significance of the local volume averaged temperature. *Transport in Porous Media*, V46(1) :19–35.
- Harten, A. (1983). High-resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 49 :357–393.
- Harten, A. (1984). On a class of high-resolution total variation stable finite difference schemes. *SIAM Journal Numerical Analysis*, 21 :1–23.
- Hartmann, F., Bader, H.-P., and Scheidegger, R. (2004). Model simulations for describing water transport in a landfill with bottom ash from a municipal solid waste incinerator (MSWI) : model validation and scenarios. *Waste Management Research*, 22(5) :324–333.
- Hartz, K. E., Klink, R. E., and Ham, R. K. (1982). Temperature effects : Methane generation from landfill. *Journal of the Environmental Engineering Division, ASCE*, v.108 :626.
- Hashemi, M., Kavak, H. I., Tsotsis, T. T., and Sahimi, M. (2002). Computer simulation of gas generation and transport in landfills–i : quasi-steady-state condition. *Chemical Engineering Science*, 57(13) :2475–2501.
- Hassanizadeh, S. M. and Gray, W. G. (1997). *Fluid Transport in Porous Media. Advances in Fluid Mechanics*, chapter Recent Advances in Theories of Two-Phase Flow in Porous Media, pages 105–160. Computational Mechanics Publications, Boston.

- Haydar, M. M. and Khire, M. V. (2005). Leachate recirculation using horizontal trenches in bioreactor landfills. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 131(7) :837–847.
- Hilfer, R. (1998). Macroscopic equations of motion for two-phase flow in porous media. *Phys. Rev. E*, 58(2) :2090–2096.
- Hinson, R. K. and Kocher, W. M. (1996). Model for effective diffusivities in aerobic biofilms. *Journal of Environmental Engineering*, 122 :1023–1030.
- Honarpour, M. (1986). *Relative permeability of petroleum reservoirs*. C.R.C. Press, Boca Raton.
- Huang, W., Di Donato, G., and Blunt, M. J. (2004). Comparison of streamline-based and grid-based dual porosity simulation. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 43(1-2) :129–137.
- Hudson, A., Beaven, R., and Powrie, W. (1999). Measurement of the horizontal hydraulic conductivity of household waste in a large scale compression cell. In *Proceedings Sardinia 99, Seventh International Waste Management and Landfill Symposium*.
- Husain, A. (1998). Mathematical models of the kinetics of anaerobic digestion—a selected review. *Biomass and Bioenergy*, 14(5-6) :561–571.
- Islam, J. and Singhal, N. (2002). A one-dimensional reactive multi-component landfill leachate transport model. *Environmental Modelling & Software*, 17(6) :531–543.
- Jaffre, J., Marchand, E., Clement, F., and Roberts, J. (2006). Taking into account air pressure variations in subsoil air-water. In *Proceedings of XVI International Conference on Computational Methods in Water Resources*.
- Jain, P., Powell, J., Townsend, T. G., and Reinhart, D. R. (2005). Air permeability of waste in a municipal solid waste landfill. *Journal of Environmental Engineering*, 131(11) :1565–1573.
- Jang, Y.-S., Kim, Y.-W., and Lee, S.-I. (2002). Hydraulic properties and leachate level analysis of kimpo metropolitan landfill, korea. *Waste Management*, 22(3) :261–267.
- Kaiser, J. (1996). Modelling composting as a microbial ecosystem : a simulation approach. *Ecological Modelling*, 91(1-3) :25–37.
- Kallel, A., Matsuto, T., and Tanaka, N. (2003). Determination of oxygen consumption for landfilled municipal solid wastes. *Waste Management and Research*, 21 :346–355.

- Kallel, A., Tanaka, N., and Matsuto, T. (2004). Gas perméability and tortuosity for packed layers of processed municipal solid wastes and incinerator residue. *Waste Management and Research*, 22 :186–194.
- Kanney, J., Miller, C., and Barry, D. (2003a). Comparison of fully coupled approaches for approximating nonlinear transport and reaction problems. *Advances in Water Resources*, 26(4) :353–372.
- Kanney, J., Miller, C., and Kelley, C. (2003b). Convergence of iterative split-operator approaches for approximating nonlinear reactive transport problems. *Advances in Water Resources*, 26(3) :247–261.
- Karlsen, K. H. and Risebro, N. H. (1997). An operator splitting method for convection-diffusion equations. *Numer. Math.*, 77 :365–382.
- Kazemi, H., Gilman, J. R., and Elsharkaway, A. M. (1992). Analytical and numerical solution of oil recovery from fractured reservoirs with empirical transfer function. *SPE Reservoir Engineering*, 6 :219–227.
- Khire, M. V. and Haydar, M. M. (2005). Leachate recirculation using geocomposite drainage layer in engineered msw landfills. In Alshawabkeh, A., Benson, C. H., Culligan, P. J., Evans, J. C., Gross, B. A., Narejo, D., Reddy, K. R., Shackelford, C. D., and Zornberg, J. G., editors, *Proceedings of the GeoFrontier Conference 2005*, volume 168, pages 10–10. ASCE.
- Kiely, G., Tayfur, G., Dolan, C., and Tanji, K. (1997). Physical and mathematical modelling of anaerobic digestion of organic wastes. *Water Research*, 31(3) :534–540.
- Kim, D.-S. and Fogler, H. S. (2000). Biomass evolution in porous media and its effects on permeability under starvation conditions. *Biotechnology and Bioengineering*, 69(1) :47–56.
- Kim, M. and Barry, R. C. (2002). *Sampling and extraction of total RNA from landfill gas for analysis of microbial community structure*, in Abstracts of the 102nd General Meeting of the American Society for Microbiology. American Society for Microbiology, Washington, D.C.
- Kindlein, J., Dinkler, D., and Ahrens, H. (2006). Numerical modelling of multiphase flow and transport processes in landfills. *Waste Management Research*, 24(4) :376–387.
- Kinmann, R. N., Nutini, D. L., Walsh, J. J., Vogt, W. G., Stamm, J., and Rickabaugh, J. (1987). Gas enhancement techniques in landfill simulators. *Waste Management and Research*, 5 :13.

- Komilis, D. P., Ham, R. K., and Stegmann, R. (1999). The effect of landfill design and operation practices on waste degradation behavior : a review. *Waste Management and Research*, 17(1) :20–26.
- Kreft, J.-U., Picioreanu, C., Wimpenny, J. W. T., and van Loosdrecht, M. C. M. (2001). Individual-based modelling of biofilms. *Microbiology*, 147(11) :2897–2912.
- Krishna, R. and Wesselingh, J. A. (1996). The maxwell-stefan approach to mass transfer. *Chemical engineering science*, 52 :861–911.
- Kurganov, A. and Tadmor, E. (2000). New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection-diffusion equations. *Journal of Computational Physics*, 160 :241–282.
- Landereau, P. (2000). *Modèles Macroscopiques pour les Ecoulements Monophasiques en Milieux Poreux Fracturés : Application aux Tests de Puits*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers.
- Lanini, S. (1998). *Analyse et modélisation des transferts de masse et de chaleur au sein des décharges d'ordures ménagères*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- Lasseux, D., Quintard, M., and Whitaker, S. (1996). Determination of permeability tensors for two-phase flow in homogeneous porous media : Theory. *Transport in Porous Media*, V24(2) :107–137.
- Lee, K.-K., Suk, H., Choi, S.-i., Lee, C. H., and Chung, S.-Y. (2001). Numerical evaluation of landfill stabilization by leachate circulation. *J. Envir. Engrg.*, 127(6) :555–563.
- Lefebvre, X., Lanini, S., and Houi, D. (2000). The role of aerobic activity on refuse temperature rise,i. landfill experimental study. *Waste Management and Research*, 18(5) :444–452.
- Lehmann, F. and Ackerer, P. (1998). Comparison of iterative methods for improved solutions of the fluid flow equation in partially saturated porous media. *Transport in Porous Media*, 31 :275–292.
- Levec, J. and Carbonell, R. G. (1985). Longitudinal and lateral thermal dispersion in packed beds - I : theory. *AIChE Journal*, 31 :581–580.
- Liang, C., Das, K. C., and McClendon, R. W. (2003). The influence of temperature and moisture contents regimes on the aerobic microbial activity of a biosolids composting blend. *Bioresource Technology*, 86(2) :131–137.

- Lide, D. R. (1995). *Handbook of chemistry and physics*. CRC Press.
- Lie, K.-A., Haugse, V., and Karlsen, K. H. (1998). Dimensional splitting with front tracking and adaptive grid refinement. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 14 :627–648.
- Liwarska-Bizukojc, E., Bizukojc, M., and Ledakowicz, S. (2002). Kinetics of the aerobic biological degradation of shredded municipal solid waste in liquid phase. *Water research*, 36 :2124–2132.
- Liwarska-Bizukojc, E. and Ledakowicz, S. (2003). Stoichiometry of the aerobic biodegradation of the organic fraction of municipal solid waste (msw). *Biodegradation*, V14(1) :51–56.
- Lornage, R. (2006). *Comparaison de trois filières de stockage d'ordures ménagères. Etude du comportement des déchets en pilotes semi industriels et caractérisation des émissions liquides et gazeuses associées*. Thèse de doctorat, Université Lyon I - Claude Bernard.
- Manna, L., Zanetti, M. C., and Genon, G. (1999). Modeling biogas production at landfill site. *Resources, Conservation and Recycling*, 26(1) :1–14.
- Marle, C. M. (1967). Ecoulements monophasiques en milieu poreux. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, 22(10) :1471–1509.
- Mason, E. and Saxena, S. (1958). Approximate formula for the thermal conductivity of gas mixtures. *The Physics of Fluids*, 1 :361–369.
- Mason, I. (2006). Mathematical modelling of the composting process : A review. *Waste Management*, 26(1) :3–21.
- Mata-Alvarez, J. and Martinez-Viturtia, A. (1986). Laboratory simulation of municipal solid waste fermentation with leachate recycle. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 36 :547.
- Matheron, G. (1965). *Les Variables Régionalisées et Leur Estimation : Une Application de la Théorie Aléatoire Aux Sciences de la Nature*. Masson, Paris.
- McCarty, P. L. and McKinney, R. E. (1961). Salt toxicity in anaerobic digestion. *Water Pollution Control Federation Journal*, 33 :399–415.
- McCauley-Bell, P., Reinhart, D. R., Sfeir, H., and Ryan, B. O. (1997). Municipal solid waste composition studies. *Practice Periodical of Hazardous, Toxic, and Radioactive Waste Management*, 1(4) :158–163.

- McCreanor, P. T. and Reinhart, D. R. (1999). Hydrodynamic modeling of leachate recirculating landfills. *Waste Management and Research*, 17(6) :465–469.
- Mehta, R., Barlaz, M. A., Yazdani, R., Augenstein, D., Bryars, M., and Sinderson, L. (2002). Refuse decomposition in the presence and absence of leachate recirculation. *J. Envir. Engrg.*, 128(3) :228–236.
- Miller, P. A. and Clesceri, N. L. (2003). *Waste Sites as Biological Reactors : Characterization and Modeling*. CRC Press Company, Boca Raton, Florida, 1st edition.
- Missenard, A. (1965). *Conductivité thermique des solides, liquides, gaz et de leurs mélanges*. Ed. Eyrolles, Paris.
- Münnich, K., Bauer, J., and Fricke, K. (2005). Investigation on relationship between vertical and horizontal permeabilities of mbt wastes. In *Proc. Sardinia 2005, Tenth International Waste Management and Landfill Symposium S. Margherita di Pula, Cagliari*.
- Mora-Naranjo, N., Meima, J. A., Haarstrick, A., and Hempel, D. C. (2004). Modelling and experimental investigation of environmental influences on the acetate and methane formation in solid waste. *Waste Management*, 24(8) :763–773.
- Moyne, C. (1997). Two-equation model for a diffusive process in porous media using the volume averaging method with an unsteady state closure. *Advances in Water Resources*, 20 :63–76.
- Murphy, E. M. and Ginn, T. R. (2000). Modeling microbial processes in porous media. *Hydrogeology Journal*, 8 :142–158.
- Mustin, M. (1987). *Le compost, Gestion de la matière organique*. François Dubusc.
- Mysliwiec, M. J., VanderGheynst, J. S., Rashid, M. M., and Schroeder, E. D. (2001). Dynamic volume-averaged model of heat and mass transport within a compost biofilter : I. model development. *Biotechnology and Bioengineering*, 73(4) :282–294.
- Nastev, M., Therrien, R., Lefebvre, R., and Gelinas, P. (2001). Gas production and migration in landfills and geological materials. *Journal of Contaminant Hydrology*, 52(1-4) :187–211.
- Nessyahu, H. and Tadmor, E. (1990). Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 87 :408–463.

- Noguera, D. R., Okabe, S., and Picioreanu, C. (1999). Biofilm modeling : present status and future directions. *Water Science and Technology*, 39(7) :273–278.
- Oldenburg, C. M., Borglin, S. E., and Hazen, T. C. (2002). Multiphase modeling of flow, transport, and biodegradation in a mesoscale landfill bioreactor. Technical report, Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA 94720.
- Olivier, F. (2003). *Tassement des déchets en CSD de classe II : du site au modèle*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble.
- Pacey, J. P., Ramin, Y., Reinhart, D., Morck, R., and Augenstein, D. (1999). *The bio-reactor landfill : an innovation in solid waste management*. SWANA, Silversprings, Mariland.
- Patankar, S. V. (1980). *Numerical Heat Transfer*. Mc GrawHill, New-York.
- Peaceman, D. (1983). Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation with nonsquare grid blocks and anisotropic permeability. *Society of Pet. Eng. Journal*, pages 531–543.
- Picioreanu, C. (1996). Modelling biofilms with cellular automata. Final report to, European Environmental Research Organisation, Wageningen, The Netherlands.
- Picioreanu, C. and Van Loosdrecht, M. C. M. (2003). *Use of mathematical modelling to study biofilm development and morphology*, in *Biofilms in medicine, industry and environmental biotechnology : characteristics, analysis and control*, chapter 3 3, pages 413–437. IWA.
- Pohland, F. (1975). Sanitary landfill stabilisation with leachate recycle and residual treatment. USEPA Report N°EPA-600/2-75-043.
- Pohland, F. C. and Al-Yousfi, B. (1994). Design and operation of landfills for optimum stabilization and biogas production. *Water Science and Technology*, 30(12) :117–124.
- Pohland, F. G. (1980). Leachate recycle as landfill management option. *Journal of the Environmental Engineering Division, ASCE*, v.106(EE6) :1057.
- Pohland, F. G. and R. Harper, S. (1986). Critical review and summary of leachate and gas production from landfills. USEPA Report N°EPA- EPA/600/2-86/073.
- Pommier, S., Chenu, D., Quintard, M., and Lefebvre, X. (2006). A logistic model for the prediction of the influence of water on the solid waste methanisation in landfills. *Biotechnology and Bioengineering*, In Press.

- Pommier, S., Chenu, D., Quintard, M., and Lefebvre, X. (2007). Modelling of moisture-dependent aerobic degradation of solid waste. *Waste Management (Accepted, DOI : 10.1016/j.wasman.2007.05.002)*.
- Pommier, S. and Lefebvre, X. (2006a). Analyse de la phase aérobie de la biodégradation de déchets solides. modélisation du processus de biodégradation de déchets solides en vue de l'intégration dans un outil de simulation numérique d'un centre de stockage de déchets ménagers. Rapport d'avancement du contrat de collaboration INP toulouse/CRPE/INSA Toulouse.
- Pommier, S. and Lefebvre, X. (2006b). Modélisation du processus de biodégradation de déchets solides en vue de l'intégration dans un outil de simulation numérique d'un centre de stockage de déchets ménagers. Rapport final du contrat de collaboration INP toulouse/CRPE/INSA Toulouse.
- Powrie, W., Hudson, A., and Beaven, R. (2000). Development of sustainable landfill practices and engineering landfill technology. Technical report, Department of Civil & Environmental Engineering, University of Southampton, Highfield, Southampton.
- Pruess, K. (2004). The TOUGH Codes—A Family of Simulation Tools for Multiphase Flow and Transport Processes in Permeable Media. *Journal of Vadose Zone*, 3(3) :738–746.
- Pruess, K., Oldenburg, C., and G., M. (1999). Tough2 user's guide, version 2.0. Technical report, Lawrence Berkeley National Laboratory, Report LBNL-43134, Berkeley, CA, USA.
- Quintard, M., Bletzacker, L., Chenu, D., and Whitaker, S. (2006). Nonlinear, multicomponent, mass transport in porous media. *Chemical Engineering Science*, 61(8) :2643–2669.
- Quintard, M., Kaviany, M., and Whitaker, S. (1997). Two-medium treatment of heat transfer in porous media : Numerical results for effective properties. *Advances in Water Resources*, 20 :77–94.
- Quintard, M. and Whitaker, S. (1988). Two phase flow in heterogeneous porous media : the method of large-scale averaging. *Transport in Porous Media*, 3 :357–413.
- Quintard, M. and Whitaker, S. (1990). Two-phase flow in heterogeneous porous media i : the influence of large spatial and temporal gradients. *Transport in Porous Media*, 5 :341–379.

- Quintard, M. and Whitaker, S. (1993). One- and two-equation models for transient diffusion processes in two-phase systems. *Advances in Heat Transfer*, 23 :369–464.
- Quintard, M. and Whitaker, S. (1994). Convection, dispersion, and interfacial transport of contaminants : Homogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, 17(4) :221–239.
- Quintard, M. and Whitaker, S. (1999). *Vadose Zone Hydrology : Cutting Across Disciplines*, chapter Fundamentals of Transport Equation Formulation for Two-Phase Flow in Homogeneous and Heterogeneous Porous Media, pages 3–57. Oxford University Press, New York.
- Quintard, M. and Whitaker, S. (2000). *Handbook of heat transfer in porous media*, chapter Theoretical analysis of transport in porous media, pages 1–52. Marcel Decker Inc., N.Y.
- Rees, J. F. (1980). Optimisation of methane production and refuse decomposition in landfills by temperature control. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 30 :458.
- Reid, R. C., Pausnitz, J. M., and Poling, B. E. (1987). *Properties of Gases and Liquids*. McGraw-Hill Book Company, 4th edition.
- Reinhart, D. R. (1996). Full scale experiences with leachate recirculation landfills : case studies. *Waste management and research*, 14 :347–365.
- Reinhart, D. R. and Al-Yousfi, A. B. (1996). The impact of leachate recirculation on municipal solid waste landfill operating characteristics. *Waste management and research*, 14 :337–346.
- Reinhart, D. R., McCreanor, P. T., and Townsend, T. (2002). The bioreactor landfill : Its status and future. *Waste Management Research*, 20(2) :172–186.
- Rittmann, B. (1993). The significance of biofilms in porous media. *Water Resources Research*, 29(7) :2195–2202.
- Roe, P. (1983). Some contributions to the modelling of discontinuous flows. In *In proceedings of the SIAM/AMS Seminar, San Diego*.
- Roos, M., Batawi, E., Harnisch, U., and Hocker, T. (2003). Efficient simulation of fuel cell stacks with the volume averaging method. *Journal of Power Sources*, 118(1-2) :86–95.
- Rosqvist, H. and Destouni, G. (2000). Solute transport through preferential pathways in municipal solid waste. *Journal of Contaminant Hydrology*, 46(1-2) :39–60.

- Rosqvist, N. H., Dollar, L. H., and Fourie, A. B. (2005). Preferential flow in municipal solid waste and implications for long-term leachate quality : valuation of laboratory-scale experiments. *Waste Management Research*, 23(4) :367–380.
- Rosso, L., Lobry, J. R., Bajard, S., and Flandrois, J.-P. (1995). Convenient model to describe the combined effects of temperature and ph on microbial growth. *Applied and Environmental Microbiology*, 61 :610–616.
- Rowe, R. K., Armstrong, M. D., and Cullimore, D. R. (2000). Mass loading and the rate of clogging due to municipal solid waste leachate. *Canadian Geotechnical Journal*, 37(2) :355–370.
- Russell, T. F. and Young, L. C. (1993). Implementation of an adaptive implicit method. In *Proceedings of the Twelfth SPE Symposium on Reservoir Simulation, Society of Petroleum Engineers, Dallas*, pages 113–126.
- Saad, Y. (1994). Sparskit : a basic tool kit for sparse matrix computations. Technical report, Version 2.
- Saad, Y. (2000). *Iterative methods for sparse linear systems*. Yousef Saad.
- San, I. and Onay, T. T. (2001). Impact of various leachate recirculation regimes on municipal solid waste degradation. *Journal of Hazardous Materials*, B87 :259–271.
- Sanchez, R., Hashemi, M., Tsotsis, T. T., and Sahimi, M. (2006). Computer simulation of gas generation and transport in landfills ii : Dynamic conditions. *Chemical Engineering Science*, 61(14) :4750–4761.
- Sanchez-Palencia, E. (1980). *Lecture Notes in Physics, vol 127 : Nonhomogeneous media and vibration theory*, volume 127. Springer-Verlag, New-York.
- Saucedo-Castaneda, G., Guterrez-Rojas, M., Baquet, G., Raimbault, M., and Viniegra-Gonzales, G. (1990). Heat transfer simulation in solid substrate fermentation. *Biotechnology and Bioengineering*, 35 :802–808.
- Schroeder, P. R., J. M. Morgan, J. M., Walski, T. M., and Gibson, A. C. (1984). The hydrologic evaluation of landfill performance (help) model. USEPA Report N°EPA-530-SW2-84-009.
- Simunek, J., van Genuchten, M. T., and Sejna, M. (2006). The hydrus software package for simulating the two- and three-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media : Technical manual. Technical report, PC Progress, Prague, Czech Republic.

- Skopp, J., Gardner, W. R., and Tyler, E. J. (1981). Miscible displacement in structured soils : Two-region model with small interaction. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 45 :837–842.
- Sponza, D. T. and Agdag, O. N. (2004). Impact of leachate recirculation and recirculation volume on stabilization of municipal solid wastes in simulated anaerobic bioreactors. *Process Biochemistry*, 39(12) :2157–2165.
- Stewart, P. S. (1998). A review of experimental measurements of effective diffusive permeabilities and effective diffusion coefficients in biofilms. *Biotechnology and Bioengineering*, 59(3) :261–272.
- Stoltz, G. (2007). Mesures hydro-mécaniques dans les déchets ménagers. Rapport d'avancement de la convention UJF Grenoble/INP Toulouse.
- Suchomel, B. J., Chen, B. M., and Allen, M. B. (1998). Macroscale properties of porous media from a network model of biofilm processes. *Transport in Porous Media*, 31(1) :39–66.
- Svehla, R. (1962). Estimated viscosities and thermal conductivities of gases at high temperatures. NASA Tech Note R-132, NASA.
- Sweby, P. (1984). High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 21 :995–1011.
- Taylor, R. and Krishna, R. (1993). *Multicomponent Mass Transfer*. John Wiley & Sons.
- Taylor, S. W. and Jaffe, P. R. (1990). Biofilm growth and the related changes in the physical properties of a porous medium, experimental investigation. *Water Resources Research*, 26 :2153–2159.
- Tiwari, S. K. and Bowers, K. L. (2001). Modeling biofilm growth for porous media applications. *Mathematical and Computer Modelling*, 33 :299–319.
- Townsend, T. G., Miller, W. L., Lee, H.-J., and Earle, J. F. K. (1996). Acceleration of landfill stabilization using leachate recycle. *J. Envir. Engrg.*, 122(4) :263–268.
- US EPA (2002). State of the practice for bioreactor landfills : Workshop on bioreactor landfills. US EPA Report N°EPA-EPA/625/R-01/012.
- Van Genuchten, M. T. (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44 :892–898.
- Van Leer, B. (1973). Towards the ultimate conservation difference scheme I. The quest of monotonicity. *Lecture Notes in Physics*, 18 :163–168.

- Vavilin, V., Lokshina, L., Jokela, J., and Rintala, J. (2004). Modeling solid waste decomposition. *Bioresource Technology*, 94(1) :69–81.
- Vavilin, V. A., Rytov, S. V., and Lokshina, L. Y. (1996). A description of hydrolysis kinetics in anaerobic degradation of particulate organic matter. *Bioresource Technology*, 56(2-3) :229–237.
- Vavilin, V. A., Rytov, S. V., Lokshina, L. Y., Pavlostathis, S. G., and Barlaz, M. A. (2002). Distributed model of solid waste anaerobic digestion. effects of leachate recirculation and ph adjustment. *Biotechnology and Bioengineering*, 81(1) :66–73.
- Vayenas, D. V., Michalopoulou, E., Constantinides, G. N., Pavlou, S., and Payatakes, A. C. (2002). Visualization experiments of biodegradation in porous media and calculation of the biodegradation rate. *Advances in Water Resources*, 25(2) :203–219.
- Verhulst, P. F. (1845). Recherches mathématiques sur la loi d'accroissement de la population. *Mémoires de l'académie royale des sciences, des lettres et des beaux-arts de Belgique*, 18 :1–38.
- Vigneault, H., Lefebvre, R., and Nastev, M. (2004). Numerical simulation of the radius of influence for landfill gas wells. *Vadose Zone J*, 3(3) :909–916.
- Voss, C. I. (1984). Sutra, saturated-unsaturated transport, a finite-element simulation model for saturated-unsaturated, fluid-density-dependent ground-water flow with energy transport or chemically reactive single-species solute transport. Technical report, U.S. Geological Survey, National Center, Reston.
- Wanfang, Z., Wheeler, H. S., and Johnston, P. M. (1997). State of the art of modelling two-phase flow in fractured rock. *Environmental Geology*, 31(3 - 4) :157–166.
- Wang, L. (2000). Flows through porous media : A theoretical development at macroscale. *Transport in Porous Media*, V39(1) :1–24.
- Wang, Y.-S., Odle, W. S., Eleazer, W. E., and Bariaz, M. A. (1997). Methane Potential of Food Waste and Anaerobic Toxicity of Leachate Produced During Food Waste Decomposition. *Waste Management Research*, 15(2) :149–167.
- Warith, M., Li, X., and Jin, H. (2005). Bioreactor landfills : State-of-the-art review. *Emirates Journal for Engineering Research*, 10(1) :1–14.
- Warith, M. A., Smolkin, P. A., and Caldwell, J. G. (2001). Effect of leachate recirculation on enhancement of biological degradation of solid waste : Case study. *Pract. Periodical of Haz., Toxic, and Radioactive Waste Mgmt.*, 5(1) :40–46.

- Warren, J. E. and Root, P. J. (1963). The behavior of naturally fractured reservoirs. *SPE Journal*, pages 245–255.
- Wassiljewa, A. (1904). Wärmeleitung in gasgemischen. *Physik. Z.*, 5 :737–742.
- Whitaker, S. (1967). Diffusion and dispersion in porous media. *AIChE Journal*, 13 :420–427.
- Whitaker, S. (1986a). Flow in porous media I : a theoretical derivation of darcy’s law. *Transport in Porous Media*, 1(1) :3–25.
- Whitaker, S. (1986b). Flow in porous media II : the governing equations for immiscible, two-phase flow. *Transport in Porous Media*, 1(1) :105–125.
- Whitaker, S. (1999). *The Method of Volume Averaging*. Kluwer, Dordrecht.
- Wiener, O. (1912). Die theorie des mischkörpers für das feld des stationären störung. erste abhandlung die mittelswertsätze für kraft, polarization und energie. *Abhandlungen der Mathematisch Physischen Klasse der Königlischen-Sachsichen Gesellschaft der Wissenschaften*, 32 :509–604.
- Wood, B., Golfier, F., Majors, P., Quintard, M., and Whitaker, S. (2004). Biofilms in porous media : Upscaling conservation equations and measurement of microbial distributions via nmr. In *International Conference Biofilms 2004 : Structure and Activity of Biofilms, Las Vegas, NV, USA*.
- Wood, B., Quintard, M., and Whitaker, S. (2000). A numerical analysis of diffusion in biofilms. In *2nd Int. Conf. On Computer Methods for Engineering in Porous Media*.
- Wood, B., Quintard, M., and Whitaker, S. (2002a). Calculation of effective diffusivities for biofilms and tissues. *Biotechnology and Bioengineering*, 77 :495–516.
- Wood, B. and Whitaker, S. (1998). Diffusion and reaction in biofilms. *Chemical Engineering Science*, 53 :397–425.
- Wood, B. D., Quintard, M., Golfier, F., and Whitaker, S. (2002b). Biofilms in porous media : Development of macroscopic transport equations via volume averaging with closure. In S.M. Hassanizadeh, R.J. Schotting, W. G. and Pinder, G., editors, *Computational Methods in Water Resources*, volume 2. Elsevier, Amsterdam.
- Wu, Y.-S. and Forsyth, P. A. (2001). On the selection of primary variables in numerical formulation for modeling multiphase flow in porous media. *Journal of Contaminant Hydrology*, 48 :277–304.

- Wu, Y.-S. and Forsyth, P. A. (2006). Efficient schemes for reducing numerical dispersion in modeling multiphase transport through porous and fractured media. In *Proceedings of TOUGH Symposium 2006, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California*.
- Yoshida, H., Tanaka, N., and Hozuni, H. (1997). Theoretical study on heat transport phenomena in a sanitary landfill. In *Proceedings Sardinia 97, Sixth International Waste Management and Landfill Symposium*.
- Young, A. (1989). Mathematical modeling of landfill gas extraction. *Journal of Environmental Engineering*, 115 :1073–1087.
- Young, A. (1994). Application of computer modelling to landfill processes. Report number : Cwm 039a/92, AEA Technology, Oxford University.
- Yuen, S. (1999). *Bioreactor landfills promoted by leachate recirculation. A full scale study*. Thèse de doctorat, Université de Melbourne.
- Zacharof, A. and Butler, A. (2004a). Stochastic modelling of landfill leachate and biogas production incorporating waste heterogeneity. part 1. model formulation and uncertainty analysis. *Waste Management*, 24(5) :453–462.
- Zacharof, A. and Butler, A. (2004b). Stochastic modelling of landfill processes incorporating waste heterogeneity and data uncertainty. *Waste Management*, 24(3) :241–250.
- Zacharof, A. I. and Butler, A. (1999). Modelling biodegradation processes in heterogeneous landfill waste. In *Proc. Sardinia 1999, Seventh International Waste Management and Landfill Symposium*.
- Zanetti, M. C. and Genon, G. (1999). Physical properties of industrial wastes : laboratory tests. *Resources, Conservation and Recycling*, 25(3-4) :195–213.
- Zarcone, C. (1994). *Etude du couplage visqueux en milieu poreux : mesure des perméabilités relatives croisées*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- Zarcone, C. and Lenormand, R. (1994). Détermination expérimentale du couplage visqueux dans les écoulements diphasiques en milieu poreux. *Comptes Rendus de L'Académie Des Sciences, Paris, Série II*, 318 :1429–1435.
- Zhang, T. and Herbert, H. P. F. (2001). Quantification of extracellular polymeric substances in biofilms by confocal laser scanning microscopy. *Biotechnology Letters*, 23 :405–409.

Annexe A

Tri MODECOM

L'objectif du tri MODECOM (Ademe, 1997) réalisé en mars 2005 sur un site opéré par Onyx en Normandie est d'obtenir environ 20 kg de déchets fermentescibles broyés sous une maille de 10 cm et 20 kg de déchet de type papier/carton broyés sous une maille de 10 cm. Ces deux échantillons sont ensuite utilisés à l'INSA de Toulouse pour réaliser les expériences décrite dans le Chapitre 3.

Échantillonnage L'objectif de cette étape est d'obtenir un échantillon de déchet frais représentatif du déchet moyen entrant sur le site considéré. Dans notre cas nous souhaitons caractériser le déchet brut. La méthodologie MODECOM pour obtenir un échantillon représentatif consiste à choisir une benne entrante au hasard, puis à répartir le contenu de la benne dans des poubelles de 50 kg chacune. L'échantillon d'étude sera constitué de 10 de ces poubelles tirées au hasard parmi l'ensemble de celles remplies lors de l'opération précédente. On obtient donc un échantillon de 500 kg de déchet représentatif du déchet entrant.

En réalité une analyse rapide du déchet entrant nous a permis de conclure que 15 poubelles ne suffiraient pas à recueillir un échantillon de 500 kg de déchets. C'est pourquoi pour obtenir un échantillon de 500 kg de déchets prélevé de façon aléatoire, nous avons utilisé la griffe mécanique présente au dessus de la fosse de stockage du site. A l'aide de cette griffe, nous avons mélangé le déchet reçu le matin même dans la fosse (cf. FIG. A.1). Une fois plusieurs "lâchés" de griffe effectués pour mélanger le déchet, le godet de la chargeuse est placé sous la griffe, et la griffe vient "saupoudrer" le godet. La chargeuse a préalablement été pesée à vide. Elle est de nouveau pesée une fois le godet rempli.

Nous arrêtons le chargement après le deuxième "saupoudrage" une fois que la chargeuse a été remplie de 511 kg de déchet brut.



FIG. A.1 – Sélection de l'échantillon de déchets à trier

Tri L'objectif de cette étape est de trier le déchet de façon à en connaître précisément la composition. Deux critères de tri sont retenus. Tout d'abord un critère granulométrique (taille caractéristique des déchets), et ensuite un critère compositionnel pour chacune des granulométries retenues. En ce qui concerne la granulométrie, les différentes catégories sont les suivantes :

TAB. A.1 – Différentes catégories granulométriques d'un tri MODECOM

Nom	Gros	Moyen Gros	Moyen Petits	Fines
Diamètre	$\varnothing > 100 \text{ mm}$	$100 \text{ mm} > \varnothing > 50 \text{ mm}$	$50 \text{ mm} > \varnothing > 20 \text{ mm}$	$20 \text{ mm} > \varnothing$

En ce qui concerne la composition, 15 catégories sont considérées :

TAB. A.2 – Différentes catégories compositionnelles d'un tri MODECOM

Catégorie	Constituants
Fermentescible	Déchets alimentaires Déchets de jardin
Papiers	Emballages (sacs et papiers d'emballage) Journaux/Brochures (journaux, pubs, etc...) Magazines et publicités sur papier glacé Autres papiers
Cartons	Emballages et autres cartons
Composites	Emballages composés de divers matériaux Autres composites
Textiles	Emballages type filets de fruits et légumes Autres textiles
Textiles sanitaires	Emballages Autres textiles : couches, serviettes hygiéniques, cotons, mouchoirs, etc...
Plastiques	Tous types de plastiques

Catégorie	Constituants
Combustible non classés	Emballages en bois Cuir, caoutchouc, etc...
Verres	Tous types de verres
Métaux	Emballages en aluminium et autres métaux Tous types de métaux
Incombustibles non classés	Gravats et autres matériaux minéraux
Déchets spéciaux	Piles, aérosols, emballages souillés de solvants, peinture, médicaments, huiles automobiles
Pertes	Principalement pertes en eau lors du tri
Fines petites < 8 mm	Composants de diamètres inférieurs à 8 mm
8 mm < Fines grosses < 20 mm	Composants de diamètre compris entre 8 et 20 mm

Résultats du tri Les résultats du tri sont présentés ci-dessous. Ici, nous ne présentons que le résultat final. Sur les 511 kg de déchets échantillonnés, après la journée de tri nous en avons criblé 318 kg et trié 274 kg. Le résultat de cette campagne est présenté ci-dessous. Nous obtenons une répartition granulométrique globale, une répartition compositionnelle globale, et enfin une répartition compositionnelle pour chaque granulométrie.

a) Répartition granulométrique

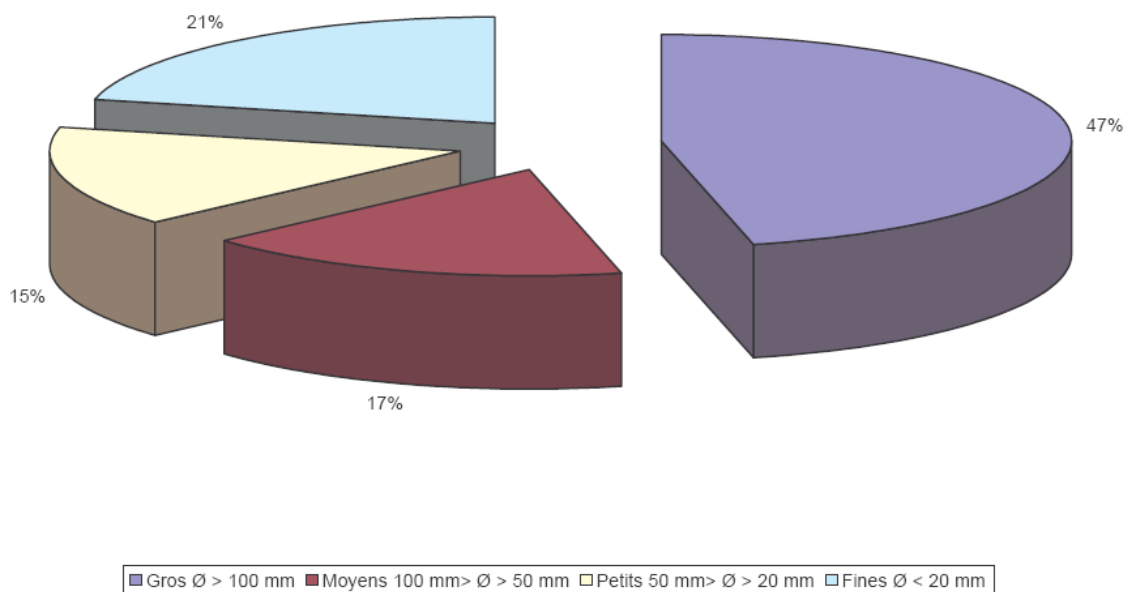


FIG. A.2 – Répartition granulométrique issue du tri (en %)

b) Répartition compositionnelle

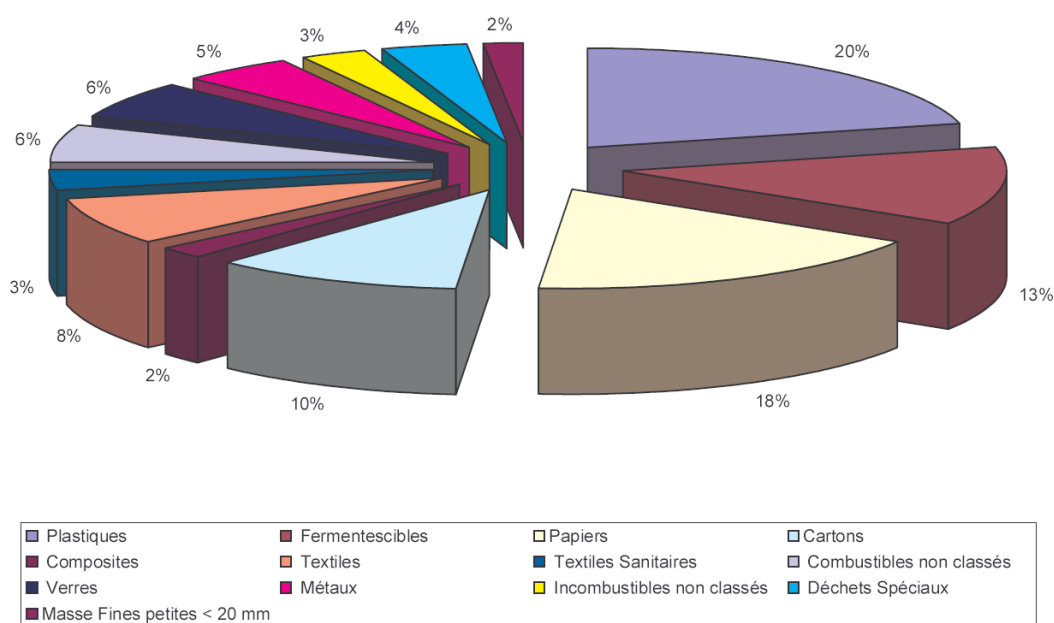


FIG. A.3 – Répartition des catégories compositionnelles (en %)

c) Fiche récapitulative du MODECOM

Fiche d'analyse MODECOM

Date : 15/03/2005 Lieu: Auquemenil

Masse totale de déchet criblé (kg) : 317,76 Masse totale de déchet trié (en cas de cartage) (kg): 274,36

Compo	Granulo			
	Gros Ø > 100 mm (kg)	Moyens 100 mm > Ø > 50 mm (kg)	Petits mm > Ø > 20 mm (kg)	Fines Ø < 20 mm (kg)
Masse totale de la catégorie granulométrique avant tri	147,06	54,4	48	68,3
Masse de la catégorie granulométrique après cartage		43,96	15,04	
	Poids des catégories	Poids des catégories	Poids des catégories	Poids des catégories
Fermentescibles	12,54	9,94	5,2	
Papiers	27,26	8,48	2,42	
Cartons	19,44	2,26	0,56	
Composites	3,42	1,18	0,12	
Textiles	14,86	1,72	0,14	
Textiles Sanitaires	4,36	2,58	0,26	
Plastiques	36,25	8,08	1,18	
Combustibles non classés	11,25	1,1	0,68	
Verres	3,38	6,42	3,3	
Métaux	5,52	3,98	0,68	
Incombustibles non classés	1,94	2,48	1,56	
Déchets Spéciaux	7,6	0,42	0,2	
Masse Fines petites < 20 mm	0	0	0	
	2,28	0,58	0,52	68,3
Masse totale de la catégorie granulométrique après tri	150,1	49,22	16,82	68,3

FIG. A.4 – Fiche détaillée donnant le résultat complet du MODECOM

Lors de ce MODECOM, nous avons pu constater que la fraction fermentescible est moins importante que celle que l'on obtient habituellement sur le même type d'opération. Ceci peut s'expliquer par le fait que ce MODECOM a été réalisé en période hivernale, ce qui ne favorise pas la présence de matière fermentescible dans les ordures ménagères.

Annexe B

Paramètres utilisés dans le modèle de biodégradation

Nous présentons dans le Tableau B.1 l'ensemble des valeurs des paramètres que nous utilisons dans le modèle de biodégradation. Nous ne détaillons pas ici la provenance de chaque valeur. Pour cela, le lecteur pourra se référer à Pommier and Lefebvre (2006b).

TAB. B.1 – Valeurs des paramètres utilisées dans le modèle de biodégradation

Paramètre	Signification	Unité	Valeur utilisée
b	Vitesse spécifique de décès de la population aérobie	j^{-1}	0,2
$Y_{CO_2/SR}$	Stœchiométrie de conversion de S_R en CO_2 (aérobie)	$g/gCOD$	1,375
$Y_{CO_2/XSB}$	Stœchiométrie de conversion de X_{SB} en CO_2 (dégradation lente aérobie)	$g/gCOD$	1,375
$Y_{CO_2/XVSB}$	Stœchiométrie de conversion de X_{VSB} en CO_2 (dégradation lente aérobie)	$g/gCOD$	1,375
Y_{CO_2/CH_4}^{RB}	g CO_2 produit par g de méthane (en DCO) pour la fraction RB	$g/gCOD$	0,6875
Y_{CO_2/CH_4}^{SB}	g CO_2 produit par g de méthane (en DCO) pour la fraction SB	$g/gCOD$	0,6875
Y_{CO_2/CH_4}^{VSB}	g CO_2 produit par g de méthane (en DCO) pour la fraction VSB	$g/gCOD$	0,6875
Y_{CO_2/CH_4}^{SR}	g CO_2 produit par g de méthane (en DCO) pour le substrat liquide S_R	$g/gCOD$	0,6875

Paramètre	Signification	Unité	Valeur utilisée
Y_{CO_2/CH_4}^a	gCO ₂ produit par g de méthane (en DCO) pour les micro-organismes <i>a</i>	<i>g/gCOD</i>	0,6875
Y_{CO_2/CH_4}^m	gCO ₂ produit par g de méthane (en DCO) pour les micro-organismes <i>m</i>	<i>g/gCOD</i>	0,6875
$Y_{\omega/SR}$	Stœchiométrie de production d'eau à partir de S_R (aérobie)	<i>g/gCOD</i>	0,47
$Y_{\omega/XSB}$	Stœchiométrie de production d'eau à partir de X_{SB} (dégradation lente aérobie)	<i>g/gCOD</i>	0,47
$Y_{\omega/XVSB}$	Stœchiométrie de production d'eau à partir de X_{VSB} (dégradation lente aérobie)	<i>g/gCOD</i>	0,47
$f_{I,aero}$	Proportion de biomasse aérobie non biodégradable	-	0,2
$f_{I,anaero}$	Proportion de biomasse anaérobie non biodégradable	-	0,2
$k_{H,R}$	Vitesse spécifique d'hydrolyse aérobie de la fraction rapidement biodégradable	j^{-1}	0,12
$k_{H,S}$	Vitesse spécifique d'hydrolyse aérobie de la fraction lentement biodégradable	j^{-1}	0,035
$k_{H,VS}$	Vitesse spécifique d'hydrolyse aérobie de la fraction très lentement biodégradable	j^{-1}	0,0001
$k_{Han,VSB}$	Vitesse spécifique d'hydrolyse anaérobie de la fraction très lentement biodégradable	j^{-1}	0,0001
$k_{Han,Xm}$	Vitesse spécifique d'hydrolyse aérobie de la population anaérobie	j^{-1}	0,0001
K_{SR}	Constante d'affinité de la population aérobie pour le substrat soluble S_R	<i>gCOD/gIDM</i>	0,015
$K_{m,SR}$	Constante d'affinité de la population anaérobie pour le substrat soluble S_R	<i>gCOD/gIDM</i>	0,0002
K_{O_2}	Constante d'affinité de la population aérobie pour l'oxygène	<i>mbar</i>	20
K_{I,O_2}	Constante d'inhibition par l'oxygène de la population anaérobie	<i>mbar</i>	0,001
$K_{I,XRB}$	Constante d'inhibition par excès de substances organiques rapidement biodégradable (anaérobie)	<i>g/g</i>	0,003

Paramètre	Signification	Unité	Valeur utilisée
$p_{O_2,max}$	Pression maximale en oxygène pour une activité anaérobie optimale	<i>mbar</i>	50
q_0	Etat physiologique initial de la population anaérobie	-	0,001
T_{opt}^a	Température d'activité aérobie optimale	$^{\circ}C$	55
T_{opt}^m	Température d'activité anaérobie optimale	$^{\circ}C$	55
X_{a0}	Population aérobie initiale	<i>gCOD/gIDM</i>	0,02
X_{m0}	Population anaérobie initiale	<i>gCOD/gIDM</i>	0,0005
Y_a	Rendement en biomasse de la croissance aérobie	<i>gCOD/gCOD biodégradable</i>	0,66
Y_m	Rendement en biomasse de la croissance anaérobie	<i>gCOD/gCOD biodégradable</i>	0,05
ν	Taux spécifique d'adaptation de la population anaérobie	j^{-1}	1
μ_{max}^a	Taux spécifique de croissance de la population aérobie	j^{-1}	0,95
μ_{max}^m	Taux spécifique de croissance de la population anaérobie (quel que soit le substrat)	j^{-1}	0,09
$\theta_{min}^{a,R}$	Teneur en eau minimale pour une activité aérobie sur substrat rapidement biodégradable	<i>gH₂O/gMS</i>	4%
$\theta_{min}^{a,SB}$	Teneur en eau minimale pour une activité aérobie sur substrat lentement biodégradable	<i>gH₂O/gMS</i>	11%
$\theta_{min}^{a,VSB}$	Teneur en eau minimale pour une activité aérobie sur substrat très lentement biodégradable	<i>gH₂O/gMS</i>	11%
$\theta_{min}^{a,a}$	Teneur en eau minimale pour une activité aérobie sur la biomasse aérobie (lyse)	<i>gH₂O/gMS</i>	4%
$\theta_{min}^{m,R}$	Teneur en eau minimale pour une activité anaérobie sur substrat rapidement biodégradable	<i>gH₂O/gMS</i>	53%
$\theta_{min}^{m,SB}$	Teneur en eau minimale pour une activité anaérobie sur substrat lentement biodégradable	<i>gH₂O/gMS</i>	53 %
$\theta_{min}^{m,VSB}$	Teneur en eau minimale pour une activité anaérobie sur substrat très lentement biodégradable	<i>gH₂O/gMS</i>	53 %

Paramètre	Signification	Unité	Valeur utilisée
$\theta_{\min}^{m,a}$	Teneur en eau minimale pour une activité anaérobie sur la biomasse aérobie	gH_2O/gMS	53 %
$\theta_{\min}^{m,m}$	Teneur en eau minimale pour une activité anaérobie sur la biomasse anaérobie	gH_2O/gMS	53 %
θ_R^R	Capacité de rétention de la fraction rapidement biodégradable	gH_2O/gMS	257%
θ_R^{SB}	Capacité de rétention de la fraction lentement biodégradable	gH_2O/gMS	194%
θ_R^{VSB}	Capacité de rétention de la fraction très lentement biodégradable	gH_2O/gMS	194%
θ_R^a	Capacité de rétention de la biomasse anaérobie	gH_2O/gMS	194%
$\xi_{RB,lim}$	Concentration limite en substance organique rapidement biodégradable (inhibition des processus anaérobies au-delà)	g/g	0,15

Annexe C

Théorie de Buckley-Leverett

On présente ci-dessous la théorie de Buckley-Leverett. Cette théorie permet, sous certaines hypothèses, de résoudre analytiquement un système d'équations hyperbolique non-linéaire en une dimension. On prendra soin de bien mettre en évidence l'existence d'une vitesse admissible d'injection en-deçà de laquelle le développement classique dit de Buckley-Leverett ne s'applique pas.

Introduction On rappelle les équations de base pour le cas eau (λ) et air (γ), sans pression capillaire, et dans le cas monodimensionnel :

$$\epsilon \frac{\partial S_\gamma}{\partial t} + \frac{\partial V_\gamma}{\partial z} = 0 \quad (\text{C.1})$$

$$\epsilon \frac{\partial S_\lambda}{\partial t} + \frac{\partial V_\lambda}{\partial z} = 0 \quad (\text{C.2})$$

Les vitesses de Darcy pour les deux phases mobiles s'expriment de la façon suivante :

$$V_\gamma = -K \frac{k_{r\gamma}}{\mu_\gamma} \left(\frac{\partial P_\gamma}{\partial z} - \rho_\gamma g_z \right) \quad (\text{C.3})$$

$$V_\lambda = -K \frac{k_{r\lambda}}{\mu_\lambda} \left(\frac{\partial P_\lambda}{\partial z} - \rho_\lambda g_z \right) \quad (\text{C.4})$$

avec la contrainte

$$S_\gamma + S_\lambda = 1 \quad (\text{C.5})$$

On définit les flux fractionnaires par

$$V = V_\gamma + V_\lambda \quad (\text{C.6})$$

$$f_\gamma = \frac{V_\gamma}{V} \quad ; \quad f_\lambda = \frac{V_\lambda}{V} \quad (\text{C.7})$$

En sommant les deux lois de Darcy, et en supposant que la pression capillaire est nulle (ie $P_\lambda = P_\gamma$), on peut écrire :

$$V = -K \frac{k_{r\gamma}}{\mu_\gamma} \left(\frac{\partial P_\gamma}{\partial z} - \rho_\gamma g_z \right) - K \frac{k_{r\lambda}}{\mu_\lambda} \left(\frac{\partial P_\gamma}{\partial z} - \rho_\lambda g_z \right) \quad (\text{C.8})$$

d'où on extrait :

$$\left(\frac{\partial P_\gamma}{\partial z} - \rho_\gamma g_z \right) = - \frac{V + Kl_\lambda g_z (\rho_\gamma - \rho_\lambda)}{K(l_\gamma + l_\lambda)} \quad (\text{C.9})$$

ce qui permet d'écrire

$$f_\gamma = \frac{l_\gamma}{l_\gamma + l_\lambda} \left(1 + \frac{Kl_\lambda g_z (\rho_\gamma - \rho_\lambda)}{V} \right) \quad (\text{C.10})$$

où les mobilités l_γ et l_λ sont définies par

$$l_\gamma = \frac{k_{r\gamma}}{\mu_\gamma} \quad ; \quad l_\lambda = \frac{k_{r\lambda}}{\mu_\lambda} \quad (\text{C.11})$$

L'équation pour la saturation S_γ s'écrit :

$$\phi \frac{\partial S_\gamma}{\partial t} + V \frac{\partial f_\gamma}{\partial z} = 0 \quad (\text{C.12})$$

qui peut se mettre sous la forme canonique :

$$\frac{\partial S_\gamma}{\partial t} + \frac{V}{\phi} \frac{df_\gamma}{dS_\gamma} \frac{\partial S_\gamma}{\partial z} = 0 \quad (\text{C.13})$$

De même, pour la phase liquide l'équation de transport peut se mettre sous la forme canonique suivante :

$$\frac{\partial S_\lambda}{\partial t} + \frac{V}{\phi} \frac{df_\lambda}{dS_\lambda} \frac{\partial S_\lambda}{\partial z} = 0 \quad (\text{C.14})$$

Limites du problèmes de Buckley-Leverett : vitesse admissible Le cas le plus simple du test de Buckley-Leverett consiste à injecter un fluide dans un milieu poreux complètement saturé par un autre fluide. Si cette injection est monodimensionnelle et positionnée en $z=0$, les conditions initiales du problème s'expriment de la façon suivante :

$$\forall z, f_\gamma = 0 \quad (\text{C.15})$$

$$f_\lambda = 1, \text{ pour } z = 0 \quad (\text{C.16})$$

Or f_γ s'exprime sous forme d'un produit de deux quantités :

$$f_\gamma = \frac{l_\gamma}{l_\gamma + l_\lambda} \left(1 + \frac{Kl_\lambda g_z (\rho_\gamma - \rho_\lambda)}{V} \right) \quad (\text{C.17})$$

Pour respecter, les conditions initiales sur la phase gazeuse, on peut donc avoir deux cas de figure :

- on annule la mobilité du gaz :

$$l_\gamma = 0 \quad (\text{C.18})$$

- on annule le second terme du produit :

$$1 + \frac{Kl_\lambda g_z (\rho_\gamma - \rho_\lambda)}{V} = 0 \quad (\text{C.19})$$

Dans le premier cas, la solution est obtenue en annulant la perméabilité relative au gaz (ce qui équivaut prendre une saturation de 1 en liquide dans le cas où l'on considère une perméabilité relative au gaz de la forme $k_{r\gamma} = (1 - S_\lambda)^{n_\gamma}$). En revanche, dans le deuxième cas, on obtient une relation entre la perméabilité relative au liquide et la vitesse d'injection du liquide :

$$k_{r\lambda} = \frac{V\mu_\lambda}{Kg_z(\rho_\lambda - \rho_\gamma)} \quad (\text{C.20})$$

La résolution de cette dernière équation nous donne accès à la valeur de la vitesse limite qui définit la transition entre les deux régimes de Buckley-Leverett.

La démarche pour résoudre complètement ce type de test sera donc la suivante :

- détermination de la saturation au front $S_{\lambda F}$ par la théorie de Buckley-Leverett.
- détermination de la saturation solution de l'équation C.20
- si cette dernière saturation est inférieure à $S_{\lambda F}$, alors, la vitesse du front est :

$$V_F = \frac{V}{\phi} \frac{f_\lambda(S_{\lambda F})}{S_{\lambda F}} \quad (\text{C.21})$$

La saturation au front, $S_{\lambda F}$, est donnée par la solution de l'équation :

$$\left. \frac{df_\lambda}{dS_\lambda} \right|_{S_{\lambda F}} = \frac{f_\lambda(S_{\lambda F})}{S_{\lambda F}} \quad (\text{C.22})$$

- si cette dernière saturation est supérieure à $S_{\lambda F}$, alors la saturation au front est donnée par la solution de l'équation :

$$k_{r\lambda}(S_\lambda) = \frac{V\mu_\lambda}{Kg_z(\rho_\lambda - \rho_\gamma)} \quad (\text{C.23})$$

La vitesse du front est donnée par la relation :

$$V_F = \frac{V}{\phi S_{\lambda F}} \quad (\text{C.24})$$

Modélisation des transferts réactifs de masse et de chaleur dans les installations de stockage de déchets ménagers : application aux installations de type bioréacteur

Aujourd'hui, les Installations de Stockage de Déchets (I.S.D.) restent l'une des filières de traitement des déchets ménagers les plus répandues. Dans les I.S.D., les déchets sont stabilisés grâce à l'activité de biodégradation des micro-organismes présents dans ces déchets. L'analyse et la modélisation des phénomènes intervenant dans le fonctionnement des I.S.D. sont indispensables pour améliorer leur fonctionnement et leurs performances.

Les travaux présentés dans cette thèse consistent, dans une première partie, au développement d'un modèle conceptuel, puis d'un modèle mathématique à l'échelle de Darcy obtenu par changement d'échelle. L'évaluation des propriétés physico-chimiques effectives du milieu est présentée dans une deuxième partie. Une attention particulière est portée à la détermination des termes réactifs et des paramètres régissant les écoulements.

Sur la base du modèle mathématique obtenu, un code de calcul 3D (MATAABIO) est développé. Celui-ci permet de décrire les transferts couplés diphasiques de masse et de chaleur et intègre un modèle de "double porosité". Il est utilisé afin de simuler le comportement d'un casier modèle de type bioréacteur.

Mots clés :

Biodégradation - Bioréacteur - Biogaz - I.S.D. - Transfert de masse et de chaleur - Diphasique - Milieu poreux - Changement d'échelle - Double milieu - Recirculation de lixiviats - Simulation numérique

Modelling reactive heat and mass transport within landfills : application to bioreactor landfill

Today, landfilling remains one of the most common technique to treat domestic waste. In landfills, wastes are stabilized thanks to the activity of the micro-organisms present in the waste. The analysis and the modelling of the phenomena involved in landfill operation are essential to their performances.

In the first part of this thesis, the development of a conceptual model and then of a Darcy scale mathematical model obtained by up-scaling, are presented. The evaluation of the effective physicochemical properties of the medium is presented in a second time. A detailed attention is devoted to the determination of the reactive terms and the parameters governing the flow.

On the basis of this mathematical model, a 3D numerical model (MATAABIO) is developed. It enables to describe the two-phase coupled transfer of mass and heat and it integrates a "dual porosity" model. It is then used to simulate the behaviour of a model rack of bioreactor type.

Key words :

Biodegradation - Bioreactor - Biogas - Landfill - Heat and mass transport - two-phase - Porous Medium - Up-scaling - Dual porosity - Leachate Recirculation - Numerical simulation