HAL
open science

MULTISCALEXPER : traitabilité empirique des polluants et modélisation numérique multi échelles : avantages, inconvénients, redondances, manquements et solutions à chaque échelle et type d'approche

Ioannis Ignatiadis, Stéfan Colombano, Hossein Davarzani, Marc Crampon, Stéphanie Betelu

To cite this version:

Ioannis Ignatiadis, Stéfan Colombano, Hossein Davarzani, Marc Crampon, Stéphanie Betelu. MULTISCALEXPER : traitabilité empirique des polluants et modélisation numérique multi échelles : avantages, inconvénients, redondances, manquements et solutions à chaque échelle et type d'approche. 4èmes Journées Nationales de la Recherche sur les Sites et Sols pollués, Nov 2019, Montrouge, France. hal-02369657

HAL Id: hal-02369657

https://brgm.hal.science/hal-02369657

Submitted on 19 Nov 2019

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.

Quatrièmes Rencontres nationales
de la **Recherche sur les sites et sols pollués**

26 et 27 novembre 2019, Le Beffroi de Montrouge
(Portes de Paris)

Candidature pour : ☒ Communication orale ☐Communication poster ☐Communication poster avec présentation d'outil ☐ Vidéo de 180s

MULTISCALEXPER : traitabilité empirique des polluants et modélisation numérique multi échelles : avantages, inconvénients, redondances, manquements et solutions à chaque échelle et type d'approche

Ioannis IGNATIADIS*, Stéfan COLOMBANO, Hossein DAVARZANI, Marc CRAMPON et Stéphanie BETELU

Bureau de Recherches Géologiques et Minières (BRGM), France,
i.ignatiadis@brgm.fr, s.colombano@brgm.fr, h.davarzani@brgm.fr, m.crampon@brgm.fr, s.betelu@brgm.fr,

*contact : Ioannis IGNATIADIS, i.ignatiadis@brgm.fr

Abstract

To understand, evaluate and finely predict the spatiotemporal pollutants evolution in environments, under natural attenuation or remediation (by bio- or chemical treatment), it is necessary to resort to: i) geophysical, physical and chemical and biological measurements on site, ii) laboratory treatability experiments, and iii) numerical models. In practice, that results in the use of parameters and/or empirical models for modelling on the scale of an actual site. This use permits to reproduce the controlled tests in laboratory or on site, which are used then as validation tests. However, their use for predictive calculations is problematic for the tests, where it is impossible to sweep the whole of conditions and couplings met in the system of interest. Within the framework of a predictive model, the improvement or invalidation of the empirical parameters/models must thus be done based on comprehension of the subjacent mechanisms and their mutual interactions. With this purpose, it is necessary to have recourse to mechanistic and multi-scale approaches, with uncertainties estimate, which makes it possible to choose, in a reasoned way, the dominating mechanisms and their simplified exemplification.
MULTISCALEXPER project has as a principal objective to develop activities of multi-scale experimentation, utilizing numerical modelling on all the levels (from dimensioning to the interpretation of the results). These activities will be carried out using numerical tools and multi-scale pilots. More particularly, it is a question of defining a dimensioning methodology for multi-scale experiments, based on numerical approaches. This project aims at reinforcing the depollution techniques on: i) the small scales in order to be able to interact with academic laboratories, working at increasingly smaller scale, and especially ii) the great scales in order to be able to interact with depollution firms, directed in the opposite way of increasingly large scale as fast as possible. The first deliverable of the project was the critical analysis of about 15 BRGM collaborative projects, carried out in the depollution domain both of organic and inorganic pollutants. The projects were evaluated on the basis of a grid of techno-economic criteria and compared to the scale imitated, according to two approaches: 1) multi-scale experimentation (from a molecular scale to that of an actual site), in batch, column, plurimetric pilot, *in situ* demonstration, partial or total depollution of a site and 2) multi-scale numerical modelling. The advantages, disadvantages, redundancies and failures concerning each approach and scale were highlighted. It results very rich issues from it, showing that only scientific and technical knowledge were not enough to solve complex problems. In a way much more pragmatic, it is shown that it is necessary to innovate in approaches and scales. In particular, in porous media, the feasibility of an integrated approach on a precise depollution subject depends on the pollutant behaviour characterization and treatability on a large scale. The work, in different media and contexts, will have to be organized to cover all the stages allowing pollutants treatability by controlled, reasoned and pragmatic implementation of the methods and scales.

ADEME
Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie

Quatrièmes Rencontres nationales de la Recherche sur les sites et sols pollués

26 et 27 novembre 2019, Le Beffroi de Montrouge
(Portes de Paris)

Introduction : Contexte, problématique, objectifs

Pour comprendre, évaluer et prédire finement l'évolution temporelle et spatiale des polluants dans l'environnement d'un sol et sous-sol, en atténuation naturelle ou en traitement de remédiation bio- ou chimique, il est nécessaire de recourir, parfois exhaustivement, à des mesures géophysiques, physicochimiques et biologiques sur site, à des expériences de traitabilité en laboratoire et à des modélisations numériques. Il est attendu qu'une caractérisation fine du fonctionnement du système pollué permettra une remédiation optimale. Néanmoins, le coût économique de cette phase de caractérisation augmente avec son degré de précision alors que les gains qu'elle est susceptible de procurer pour la phase de traitement sont très difficiles à apprécier. Dans la plupart des cas, c'est seulement *a posteriori* que la pertinence de la mesure ou de l'expérience peut être jugée. Une autre façon d'améliorer le rapport coût/bénéfice de l'opération de caractérisation est de rationaliser les investigations à mener en proposant un meilleur enchainement des approches de modélisation, de mesure sur le terrain et d'expérimentation. Pour cela, l'apport de chacune de ces approches aux différentes échelles d'investigation doit être précisé.

Les modèles numériques sont adaptés à l'échelle d'investigation grâce à la considération de paramètres d'entrée supposés décrire le système dans son ensemble. Les systèmes étudiés sont souvent de grandes dimensions (déca-, hecto- ou kilométriques) et sont donc fortement hétérogènes spatialement en termes de propriétés physiques et chimiques : une des premières difficultés des modélisateurs est donc de simplifier suffisamment le système pour pouvoir le modéliser (temps de calcul/convergence) tout en conservant les hétérogénéités qui contrôlent l'évolution du système. Idéalement, les modèles développés sont alimentés par les observations et les paramètres : i) issus d'observation et de mesures sur le terrain, ii) acquis en laboratoire, ou iii) relevés dans la littérature.

Les mesures de terrain et expériences de laboratoire sont réalisées à différentes échelles dont souvent aucune ne correspond à l'échelle de modélisation du site. Ces observations/mesures peuvent être déclinées du mètre à l'angström, chacune des échelles apportant un lot d'informations potentiellement utiles pour la modélisation à l'échelle du site.

Les données recueillies à chacune de ces échelles peuvent être elles-mêmes modélisées et fournir des paramètres d'intérêt. Néanmoins, ces informations ne permettent pas de paramétrer les modèles de façon optimale, parce que les processus dominants, notamment dans le transfert des polluants, diffèrent selon l'échelle de caractérisation. Toutefois, le paradoxe de ces modélisations est que plus l'échelle de modélisation s'approche de celle du site, moins le nombre de paramètres contrôlés (c'est-à-dire contraints et compris) est prépondérant, alors que la complexité des systèmes grandit et que les couplages entre phénomènes sont plus nombreux (problématique de l'upscalling et de la hiérarchisation des mécanismes). D'où la nécessité de hiérarchiser les processus en fonction des échelles étudiées.

Dans la pratique, cela se traduit par l'utilisation de paramètres et/ou de modèles empiriques pour les modélisations à l'échelle du site. Cette utilisation permet de reproduire les essais contrôlés en laboratoire ou sur site qui servent alors de test de validation (ex : tests normés). Cependant leur utilisation pour des calculs prédictifs est problématique, car les essais ne permettent pas de balayer l'ensemble des conditions et des couplages rencontrés dans le système d'intérêt. Dans le cadre d'un modèle prédictif, la justification (ou l'amélioration ou l'invalidation) des paramètres/modèles empiriques doit donc se faire sur la base de la compréhension des mécanismes sous-jacents et de leurs interactions mutuelles. Pour ce faire, il est nécessaire d'avoir recours à une approche (par modélisation et par expérimentation) mécanistique et multi-échelle avec une estimation des incertitudes, ce qui permet de choisir de façon raisonnée les mécanismes prépondérants et leur représentation simplifiée. Une des difficultés rencontrées pour cette approche est que chaque échelle d'investigation correspond souvent à une communauté scientifique distincte dont les intérêts et le vocabulaire scientifiques sont parfois très éloignés.

Le projet MULTISCALEXPER n'a pas pour ambition de résoudre l'ensemble des problèmes de changement d'échelle, dans la compréhension du comportement et du devenir des polluants dans le sol et le sous-sol, à

savoir le développement et l'expérimentation des couplages que nécessite l'établissement de lois aux petites échelles avant de pouvoir passer à une modélisation macroscopique. Ce projet a pour objectif principal de développer des actions d'expérimentation multi-échelles, faisant intervenir la modélisation numérique à tous les niveaux (du pré-dimensionnement à l'interprétation des résultats). Elles seront réalisées à l'aide des outils numériques et des pilotes multi-échelles. Il s'agit aussi plus particulièrement de définir une méthodologie de dimensionnement des expérimentations multi-échelles, basée sur une approche numérique. Ce projet vise à renforcer les techniques de dépollution sur la thématique : i) des petites échelles de façon à pouvoir interagir avec les laboratoires académiques dont beaucoup se sont orientés dans cette voie du toujours plus petit, et surtout ii) des grandes échelles de façon à pouvoir interagir avec les donneurs d'ordres privés ou publics (ANR, UE, ADEME), des sociétés de dépollution dont beaucoup se sont orientés dans la voie inverse du toujours plus grand au plus vite. Il ne s'agit pas d'évoluer dans ces deux sens, mais de mieux pouvoir s'intégrer à leurs projets/discussions et de savoir en tirer le maximum d'information aux échelles qui intéressent plus directement la communauté des techniciens de la dépollution. C'est également un secteur "rentable" en termes de visibilité scientifique (publications, projets), technique (savoir-faire, brevets,) et économique (contrat d'exploitation avec le privé, vente de la RCI aux sociétés privés, …).

Matériel et méthodes

Un parmi les premiers livrables du projet MULTISCALEXPER a été l'examen critique d'une quinzaine de projets du BRGM (21 cas de dépollution), projets réalisés dans le cadre de l'ANR ou l'ADEME ou l'UE, dans le domaine de la dépollution en considérant à la fois les polluants organiques et inorganiques. Ces projets ont été évalués sur la base d'une grille de critères technico-économiques et par rapport à l'échelle considérée, suivant deux voies:

1) l'expérimentation (du µm à plusieurs centaines de m) : en batch, colonne, pilote plurimétrique, démonstration *in situ*, dépollution partielle d'un site ou dépollution totale d'un site) et
2) la modélisation numérique multi-échelle (du pore au Km²).

Il a été nécessaire de définir un canevas d'inter-comparaison des contenus des projets (programme d'expérimentation réalisés, structuration des tâches, retours d'expériences sur les questions de dimensionnement, résultats obtenus à chaque échelle). Aussi, une méthodologie de travail multi-échelles et multi-outils a été établie permettant d'optimiser la gestion de matériaux ou matrices contaminés, en tenant compte des aspects réglementaires et économiques s'y afférant. Les dimensionnements volumique et analytique sont explicités pour chaque échelle d'investigation. Les apports de la modélisation sont précisés et détaillés pour chaque étape aux différentes échelles d'investigation.

Résultats et discussion

En matière d'investigations en dépollution répondant aux diverses problématiques en Sites et Sols Pollués (SSP), l'examen des plusieurs projets a permis de constater que :

- Les expériences/mesures de laboratoire sont réalisées à différentes échelles dont aucune ne correspond à l'échelle de modélisation du cas réel (site).
- Le plus souvent, deux échelles sont réalisées (laboratoire et colonnes de laboratoire).
- Une échelle d'investigation est quasi-systématiquement ignorée, l'échelle métrique. Ceci peut s'expliquer par le surcoût que cette expérimentation peut engendrer, car pour pouvoir exécuter cette échelle d'investigation, il faut i) avoir les installations nécessaires pour traiter au moins deux échantillons de cette taille, et ii) excaver et transporter une grande quantité d'échantillon et iii) réaliser les essais monitorés, ce qui est très coûteux. Ce constat a motivé la décision d'engager des actions pour pallier aux manquements de l'échelle métrique expérimentale et plus précisément un apport appuyé par les techniques numériques de changement multi-échelle.
- La démonstration *in situ* est réalisée quelques fois. Un seul projet a abouti à la dépollution d'un site entier (HSBA Chromstab, Bois-Colombes)
- La modélisation numérique hydrogéochimique est utilisée pour les essais batch.
- Sur l'échelle de démonstration ou site entier, seule la modélisation-interpolation des données pour déterminer la distribution et la quantification dans l'espace de la pollution est quelques fois utilisée, avant et après un traitement.
- La modélisation numérique hydrogéologique et chimie-transport ne sont pas systématiquement utilisés ni pour prédire ou optimiser les traitements, ni pour valider, après le traitement, les résultats des expériences.
- La modélisation de type « changement d'échelle », au sens mathématique du terme n'est jamais réalisée. Ce dernier constat a motivé la décision du BRGM de proposer un sujet de thèse intitulé « modélisation multi-échelles » auprès de l'ADEME. Le sujet a été retenu et la thèse a démarré en Octobre 2017.

Les avantages, inconvénients, redondances et manquements concernant chaque échelle et chaque type d'expérimentation (empirique ou numérique) sont ainsi repérés. Il en résulte une expérience très riche, montrant souvent que la connaissance scientifique et le savoir technique ne suffissent pas pour résoudre des problèmes complexes. De façon beaucoup plus pragmatique, il est démontré qu'il faut innover en approches et en échelles. Notamment dans les milieux poreux, la faisabilité d'une approche intégrée de l'échelle moléculaire à l'échelle de terrain sur un sujet précis passe par la caractérisation du comportement et la traitabilité à grande échelle de polluants. Le travail sur des échelles (de micro à macroscopique) des milieux (sols, eaux souterraines et biosphères correspondantes) et des contextes différents (sites et sols polluées, gestion des ressources en eau,..) devra s'organiser pour couvrir l'intégralité des étapes permettant une expérimentation de la biophysicogéochimie des polluants dans les sols et leur traitabilité par implémentation contrôlée, raisonnée et pragmatique des méthodes et des échelles (de l'échelle moléculaire à celle du site d'étude).

Le projet MULTISCALEXPER démontre également la nécessité de structurer un réseau des scientifiques ayant les mêmes préoccupations et visions (réseaux de plateformes, interface avec les institutionnels, relation avec les industriels, complémentarité avec partenariats,…).

Conclusions et perspectives

Il a décidé d'établir d'une méthodologie de travail multi-échelles et multi-outils, en incluant l'expérimentation-modélisation numérique dans le changement d'échelle. Des actions pour pallier aux manquements (échelle métrique expérimentale et technique de changement multi-échelle) sont entreprises. Les travaux se déroulent comme prévu avec une certaine synergie avec des thèses expérimentales et une thèse en modélisation numérique de changement d'échelle.

A ce jour (Janvier 2019), nous n'avons pas encore de jeu de données expérimentales d'échelle métrique : les travaux expérimentaux suivent le chemin déjà constaté, de l'évitement de l'échelle métrique ! Toutefois, il nous reste toute l'année 2019 pour remédier à cela. Vers la fin 2019 ou encore l'été 2020, nous disposerions de très bonnes données expérimentales d'échelle métrique, et si possible pluri-métriques, pour que la modélisation du changement d'échelle avec prise de moyenne volumique, puisse être testée et validée.

Par ailleurs, un autre constat est illustré : dans tous les projets, tels qu'ils sont rédigés et exécutés jusqu'à ce jour, d'une durée moyenne de 3 à 4 ans, il apparaît difficile et hasardeux de réussir à passer de l'échelle de traitabilité de laboratoire ou sub-métrique à l'échelle de la démonstration *in situ* ou du terrain. La raison en est que partant de peu de connaissances en traitabilité, la durée et les budgets des projets ne permettent pas de s'attarder sur l'échelle métrique, échelle longue et couteuse. L'absence de résultats en échelle métrique dévient le plus souvent pénalisante lors du passage en démonstration *in situ* avec comme conséquence avec des résultats amoindris ou hasardeux. Les résultats seraient sans doute meilleurs si l'échelle métrique était réalisée avec un accompagnement par modélisation numérique pour la validation de changement d'échelle.
Une solution pour éviter de finir les projets sans bien traiter le changement d'échelle métrique avant le saut vers la traitabilité ou la démonstration *in situ*, serait de commencer les travaux de traitabilité en échelle métrique sur des sujets où la traitabilité est bien maitrisée à l'échelle sub-métrique, pour monter en échelle métrique et pluri-métrique, en prenant le soin d'avoir des données complètes (projets récents) et pouvant intégrer l'hétérogénéité du milieu.

Notons que le BRGM dispose maintenant d'outils métriques et plurimétriques, au sein de la plateforme PRIME.

Remerciements

Ce travail est financé par le BRGM dans le cadre du Projet Stratégique Opérationnel PSO (2016-2019) de la Direction Eau, Environnement et Ecotechnologies. Une collaboration étroite a eu lieu avec le projet

BIOXYVAL. Nous remercions l'ADEME qui a financé une partie de BIOXYVAL dans le cadre du programme Investissements d'Avenir. Nous remercions l'ANRT (Association nationale pour la recherche et la technologie) pour le soutien financier de Florian Cazals en thèse CIFRE. Nous remercions également la Direction BRGM/D3E et le projet MULTISCALEXPER, qui ont financé une partie du projet. Enfin, nous remercions chaleureusement le soutien financier apporté au projet PIVOTS par la Région Centre - Val de Loire (programme ARD 2020 et CPER 2015-2020) et le ministère de l'Enseignement supérieur et de la Recherche (CPER 2015-2020 et la subvention de service public au BRGM).