



# Simulation du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines : recommandations pour le choix du modèle et de la démarche

Fabrice Quiot, Claire Rollin, Guillaume Masselot, Salvador Jordana

## ► To cite this version:

Fabrice Quiot, Claire Rollin, Guillaume Masselot, Salvador Jordana. Simulation du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines : recommandations pour le choix du modèle et de la démarche. 2. Rencontres nationales de la recherche sur les sites et sols pollués, Oct 2009, Paris, France. ADEME Editions. Angers, pp.NC, 2009. <ineris-00973354>

**HAL Id: ineris-00973354**

**<https://hal-ineris.ccsd.cnrs.fr/ineris-00973354>**

Submitted on 4 Apr 2014

**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.

# Simulation du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines : recommandations pour le choix du modèle et de la démarche

**Fabrice Quiot<sup>(1)</sup>, Claire Rollin<sup>(1)</sup>, Guillaume Masselot<sup>(1)</sup> et Salvador Jordana<sup>(2)</sup>**

<sup>(1)</sup> INERIS, Direction des Risques Chronique, Parc Technologique ALATA - BP 2  
60550 Verneuil-en-Halatte - fabrice.quiot@ineris.fr

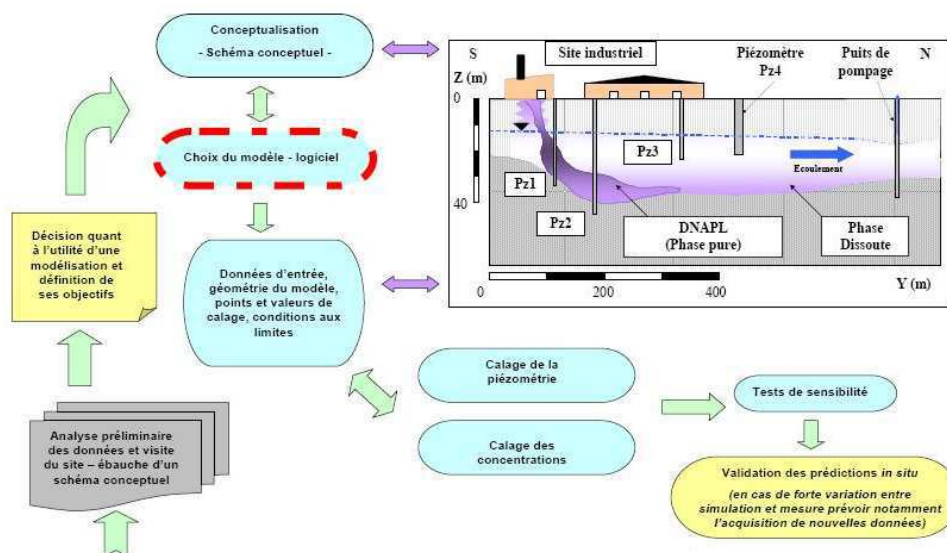
<sup>(2)</sup> Amphos 21, Passeig de Rubí 29-31 - 08197 Valldoreix

## Résumé

Dans le cadre de l'étude d'un site pollué et notamment de l'évaluation des risques pour la ressource en eau, la modélisation prédictive peut, sous certaines conditions, être employée comme outil d'aide à la décision. Ainsi, à la demande du MEEDDAT, l'INERIS conduit un programme d'appui dont l'un des principaux objectifs est d'apporter une aide aux modélisateurs intervenant dans le contexte des sites pollués.

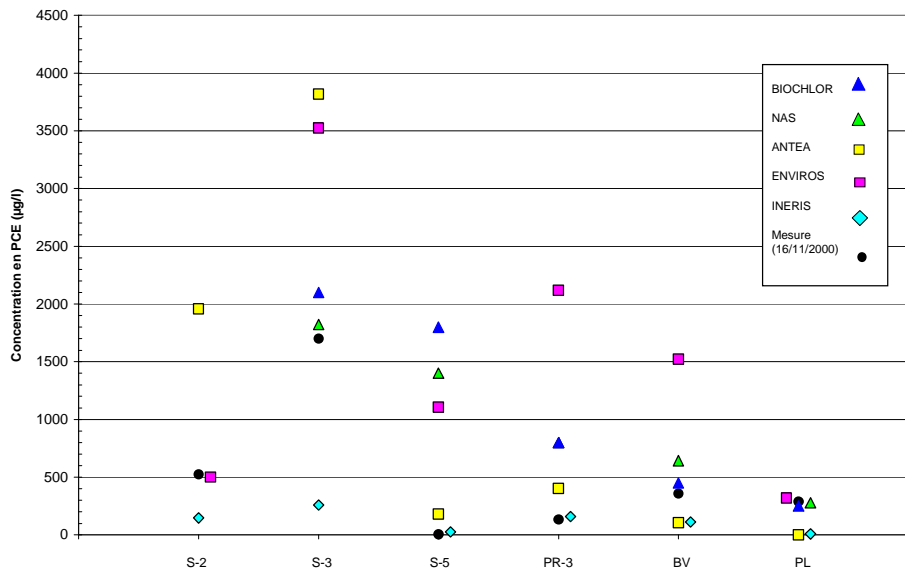
De récents travaux ont porté sur la question du choix de l'outil adapté, notamment entre modèle analytique et modèle numérique. En effet, selon le site étudié, ce choix peut se révéler important pour l'obtention de résultats exploitables pour parvenir à une gestion raisonnée et proportionnée d'une pollution. Or, de nombreux outils de calcul sont disponibles actuellement et un recensement (bien que non exhaustif) met en exergue leur diversité.

Ces travaux ont également conduit à rappeler les principaux objectifs, les phénomènes pouvant être simulés et la démarche générale d'une modélisation prédictive du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines (cf. Figure 1).



**Figure 1 : Démarche générale de modélisation**

Une application mise en œuvre sur deux outils analytiques (BIOCHLOR et NAS) ainsi que la comparaison des résultats obtenus à ceux acquis dans le cadre de la simulation d'un cas traité précédemment par des outils numériques (Cas Réel n°3, intercomparaison des résultats et des démarches), apporte des indications complémentaires quant aux éléments justifiant ou non le choix d'un modèle (cf. Figure 2).



**Figure 2 : Comparaison du calage des concentrations entre outils analytiques et numériques**

L'exercice d'intercomparaison qui a été mené sur plusieurs cas dont le Cas Réel n°3 a fait intervenir des équipes d'origines différentes, traitant des cas identiques en suivant leur démarche propre avec les outils dont elles disposent et qu'elles emploient habituellement. L'objectif de ces exercices est de mettre en avant les données d'entrée à considérer, les problèmes rencontrés et les solutions retenues.

Concernant le choix d'un outil adapté, des recommandations ont pu être formulées et portent principalement sur le choix des phénomènes à considérer, les objectifs attendus et les outils de calcul en eux-mêmes. Cependant, il ressort de cette étude que la clef de l'efficacité et de la précision lors de la modélisation d'un système dépend en premier lieu de l'élaboration du modèle conceptuel et de la qualité des données disponibles et utilisées.

La démarche recommandée consiste à privilégier une approche pragmatique en justifiant les réserves relatives aux résultats présentés. Il convient, si possible, de débiter par un modèle simple (analytique ou numérique avec des hypothèses simplificatrices) avant de compliquer le modèle si nécessaire et en fonction des données disponibles. En cas de trop fortes incertitudes, le modèle doit conduire à proposer de nouvelles investigations.

Outre le suivi de la démarche générale proposée, au cours de toute modélisation, il est également recommandé de contraindre les paramètres de calage par des données de terrain et de les privilégier par rapport aux données bibliographiques (sauf si leur qualité peut être remise en cause). Concernant les données bibliographiques, l'INERIS a mis au point une base de données sous Access qui sera accessible en ligne, relative aux paramètres  $K_d$  et  $T_{1/2}$  pour différents polluants (hydrocarbures et solvants chlorés). En effet, en l'absence de données de terrain, le recours à des informations bibliographiques peut être justifié lorsque le contexte de l'étude est similaire à celui pour lequel la valeur a été estimée (conditions redox, lithologie, teneur en carbone organique...). Ce recueil de données permettra au modélisateur d'obtenir des domaines de variations (min. et max. d'après des valeurs issues de la littérature) adaptés à ses besoins.

La gestion d'un site pollué passe notamment par la réalisation d'un bilan « coûts-avantages » et la définition de différents scénarii de réhabilitation, dans ce cadre comme dans d'autres (cf. section 2), la simulation du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines constitue une aide à la décision non négligeable. Cependant, comme le rappelaient en 2006 l'ADEME, le BRGM et l'INERIS dans une note portant sur les mesures et modèles [1], la complexité des phénomènes mis en jeu, la simplification inhérente à toute modélisation et le manque de données d'entrée constituent des limites qu'il convient également de considérer. En effet, le recours à un outil de modélisation, qu'il soit analytique<sup>1</sup> ou numérique<sup>2</sup>, peut s'avérer au final inadapté s'il n'est pas justifié par le schéma conceptuel ou de fonctionnement ainsi que par la quantité et la qualité de données d'entrée disponibles (exemples : paramètres hydrodynamiques, hydrodispersifs, concentrations, piézométrie, etc).

Dans le cadre du programme TRANSPOL [2], conduit par l'INERIS à la demande du Ministère en charge de l'environnement, et dont l'un des objectifs est d'apporter une aide aux modélisateurs intervenant dans le domaine des sites pollués, de récents travaux ont porté sur la question du choix de l'outil adapté, notamment entre modèle analytique et modèle numérique [3]. Selon le site étudié, ce choix pourra se révéler déterminant pour l'obtention de résultats exploitables et une gestion raisonnée et proportionnée d'une pollution. Or, de nombreux outils de calcul sont actuellement disponibles et un recensement (bien que non exhaustif) met en exergue leur diversité. Outre des recommandations quant au choix de l'outil, ces travaux ont également permis de rappeler les principaux objectifs, les phénomènes pouvant être simulés et la démarche générale d'une modélisation prédictive du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines.

## **1. DEMARCHE GENERALE DE MODELISATION**

La démarche générale et les principales étapes d'une modélisation conduite dans le cadre d'une étude portant sur les sites pollués sont exposé en Figure 1.

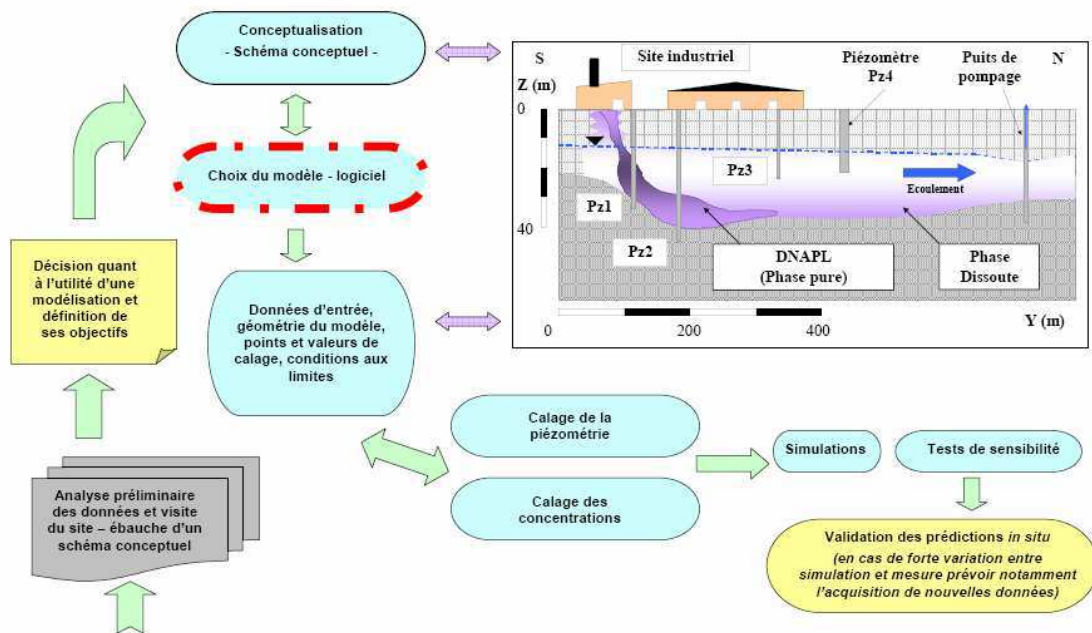
Il apparaît que le choix de l'outil de modélisation fait suite à la définition des objectifs et à la réalisation d'un schéma conceptuel permettant d'appréhender les phénomènes prenant part au transfert de la pollution vers les enjeux préalablement identifiés (ici un puits de pompage en aval hydraulique).

Les principaux objectifs et phénomènes à considérer sont repris ci-après (cf. sections 2 et 3).

---

<sup>1</sup> Outil simplifié qui utilise une solution mathématique des équations d'écoulement et/ou de transport en tous points de l'espace et du temps.

<sup>2</sup> Le domaine étudié est discrétisé dans l'espace et dans le temps et un schéma numérique est utilisé (différences finies, éléments finis, volumes finis, etc) pour résoudre les équations d'écoulement et/ou de transport.



**Figure 1 - Schématisation de la démarche globale de modélisation**

## 2. OBJECTIFS DE LA MODELISATION

Le recours à la modélisation peut avoir différents objectifs, notamment :

- synthétiser les données disponibles pour orienter l'état des lieux ou identifier les nouvelles zones à investiguer ou à surveiller plus particulièrement ;
- prédire l'évolution d'une pollution au droit d'une zone sensible ;
- tester la mise en œuvre d'un procédé de réhabilitation sur les écoulements et/ou le panache ;
- tester l'impact de l'atténuation naturelle sur l'étendue du panache de pollution.

Bien que la modélisation doive dans la mesure du possible faire suite à un état des lieux suffisamment détaillé, permettant de disposer de données fiables et directement mesurées dans l'environnement potentiellement impacté, le premier point ci-dessus montre qu'un modèle simplifié peut également intervenir en amont afin d'orienter les investigations.

## 3. PRINCIPAUX PHENOMENES

Les principaux mécanismes et paramètres associés au transfert des polluants dans les aquifères (constitués par le sol - zone non saturée - et la nappe - zone saturée), en particulier au sein du milieu poreux, sont rappelés ci-dessous.

Mécanismes	Principaux paramètres associés
Advection (ou convection)	coefficient de perméabilité K, porosité efficace $n_e$
Dispersion cinématique	coefficient de dispersivité longitudinale $\alpha_L$ coefficient de dispersivité transversale $\alpha_T$
Diffusion moléculaire	coefficient de diffusion moléculaire D
Adsorption (ou sorption)	coefficient de partage sol-eau $K_d$ (hypothèse $K_d$ )
Biodégradation	constante de dégradation $\lambda$ ou temps de demi-vie $T_{1/2}$
Volatilisation	constante de Henry, pression de vapeur saturante

**Tableau 1 - Principaux mécanismes et paramètres associés au transport (d'après [4], [5])**

#### 4. OUTILS EXISTANTS

Il existe actuellement un très grand nombre de modèles développés pour simuler les écoulements et/ou le transport de polluants dans les sols et les eaux souterraines. Une recherche bibliographique a permis d'en dresser une liste [3] (non exhaustive et valable en fin d'année 2007).

Les principales différences observées entre ces outils portent sur les phénomènes simulés (en particulier la sorption, la biodégradation et la volatilisation), la prise en compte de la zone non saturée et d'une géochimie plus ou moins complexe ou encore sur les polluants considérés et sous quelle forme ils le sont (pure, dissoute, gazeuse).

#### 5. INTERCOMPARAISON

Afin de tester les variations de résultats pouvant être attendues en termes de concentrations calculées entre outils analytiques et numériques, un essai d'intercomparaison a été mené en 2007. Il a porté sur la mise en œuvre d'une nouvelle phase d'intercomparaison dédiée au cas réel n°3 du programme TRANSPOL [2]. Ce cas réel de pollution (CR3) traitait d'une nappe alluviale polluée par des solvants chlorés (notamment perchloroéthylène, PCE, et trichloroéthylène, TCE).

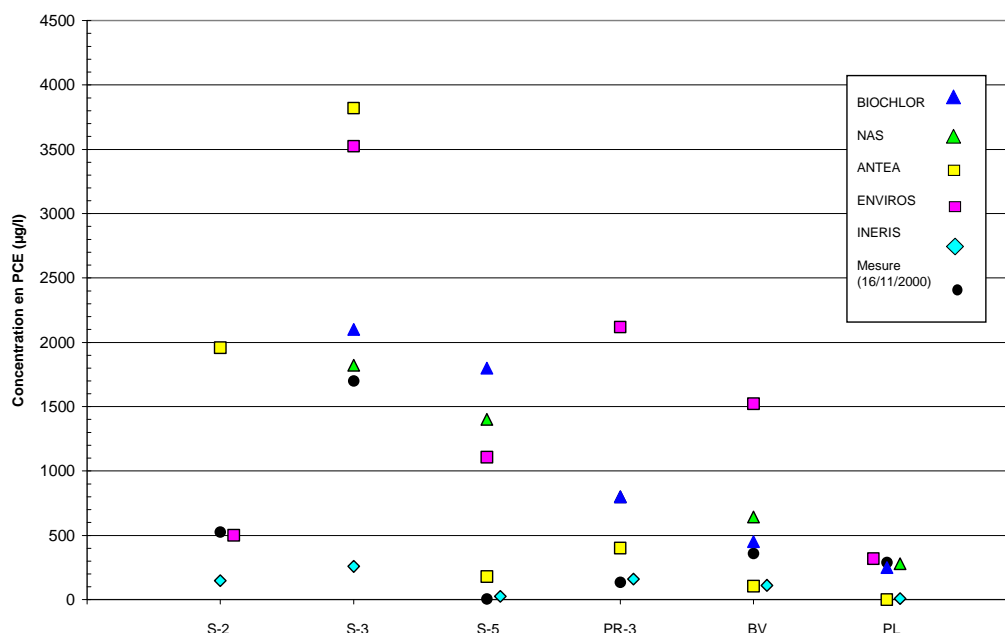
Les logiciels BIOCHLOR [6] et NAS [7] ont été testés dans un premier temps (choix basé sur retour d'expérience et l'intérêt - pour ce qui concerne NAS - de considérer les conditions rédox du milieu).

Comme le montre le tableau suivant, concernant NAS, simple d'utilisation et rapide à mettre en œuvre, il se révèle inadapté dans le cadre du CR3. En effet, il est destiné aux simulations liées à la dépollution et non pas au calcul prédictif concernant le panache (extension et concentration). Ce constat illustre cependant la nécessité de choisir un outil en tenant compte des objectifs.

	BIOCHLOR	NAS
Conceptualisation	Adapté aux solvants chlorés. Dégradation séquentielle du 1 <sup>er</sup> ordre. Un seul coefficient de retard	Principalement destiné à évaluer les objectifs de dépollution d'une source. Pas de dégradation séquentielle du 1 <sup>er</sup> ordre
Source	Option permettant de considérer une source variable dans l'espace mais pas dans le temps	Source constante dans l'espace et dans le temps
Paramètres et calibration	Calage des concentrations (calculs/mesures) à une seule date et pour quelques ouvrages de surveillance	Comparaison calculs/mesures non disponible directement. Définition par le calcul de plusieurs paramètres (sans ajustement possible)
Bilan de masse	Option pratique permettant de visualiser l'effet de la biodégradation	Non disponible
Utilisation	Interface simple à appréhender mais unités anglo-saxonnes (nécessite une étape de conversion). Manuel d'utilisation et exemples	Le manuel est incomplet (notamment pour justifier les calculs des paramètres). Exemples disponibles

**Tableau 2 - Synthèse des principales remarques concernant l'utilisation de BIOCHLOR et NAS dans le cadre du CR3**

Dans un second temps, les résultats des modèles BIOCHLOR et NAS ont été comparés à ceux obtenus par les équipes modélisatrices au cours de la seconde phase d'intercomparaison du CR3 portant sur l'utilisation de modèles numériques. La figure qui suit présente les résultats obtenus à la date de calage des concentrations en PCE.



**Figure 2 - : Comparaison du calage des concentrations en PCE sur 6 piézomètres**

Ces résultats montrent que dans le cas du CR3 et compte-tenu des données d'entrée disponibles, des outils « simplifiés » sont capables de fournir des concentrations attendues à un point d'observation donné similaires à celles obtenues via des outils numériques. Cette similarité des résultats peut cependant être expliquée dans ce cas par le fait que l'exercice

d'intercomparaison mené avec les outils numériques ait été fortement simplifié. En effet, pour ce qui concerne les écoulements et la représentation de la source des hypothèses simplificatrices ont été considérées.

## 6. RECOMMANDATIONS

Comme le soulignent les paragraphes qui précèdent le choix d'un outil adapté doit être basé sur les phénomènes considérés, les objectifs et les outils disponibles voire sur la possibilité d'adaptation de l'outil envisagé au cas traité.




L'outil de calcul doit en effet permettre :

- de répondre aux objectifs (respect d'un seuil de concentration en aval d'un site) ;
- de protéger les enjeux (captage d'alimentation en eau potable) ;
- de respecter coûts et délais (par exemple la mise en œuvre d'un modèle couplé géochimie/transport nécessitera plus de temps qu'un modèle ne tenant pas compte de la géochimie) ;
- de prendre en compte les phénomènes identifiés et retenus (la biodégradation lorsqu'elle est mise en évidence suite à des mesures isotopiques notamment) ;
- d'intégrer les hypothèses simplificatrices retenues (sur la géométrie de la source ou les échanges nappe/rivière) ;
- de considérer le comportement et la toxicité des polluants.

Le choix de l'outil peut également être lié à :

- la quantité et la qualité des données ;
- la facilité d'utilisation (existence ou non d'une interface fonctionnant sous windows) ;
- le retour d'expérience.

Ces éléments sont repris dans le Tableau 3.

<b>Informations à considérer</b>		
<b>Liées aux phénomènes</b>	<b>Liées aux objectifs</b>	<b>Liées aux données/outils</b>
		
<ul style="list-style-type: none"> <li>• prise en compte des phénomènes identifiés et retenus</li> <li>• complexité du site et hypothèses simplificatrices</li> <li>• comportement et toxicité des polluants à considérer</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• les calculs doivent permettre de répondre aux attentes</li> <li>• enjeux en termes de santé publique et d'environnement</li> <li>• coûts et délais</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• quantité et qualité des données</li> <li>• retour d'expérience</li> <li>• facilité d'utilisation</li> </ul>

**Tableau 3 - Informations à considérer pour le choix d'un outil de modélisation adapté**



En définitive, la démarche recommandée consiste à privilégier une approche pragmatique en justifiant les réserves relatives aux résultats présentés. Il convient, si possible, de débiter par un modèle simple (analytique ou numérique avec des hypothèses simplificatrices) avant de compliquer le modèle si nécessaire et en fonction des données disponibles. En cas de trop fortes incertitudes, le modèle doit conduire à recommander de nouvelles investigations.

Outre le suivi de la démarche générale proposée, au cours de toute modélisation, il est également recommandé de contraindre les paramètres de calage par des données de terrain et de les privilégier par rapport aux données bibliographiques (sauf si leur qualité peut être remise en cause). Concernant les données bibliographiques, l'INERIS a mis à disposition en 2008 une base de données accessible en ligne, actualisée annuellement, relative aux paramètres  $K_d$  et  $T_{1/2}$  pour différents polluants (hydrocarbures et solvants chlorés).

En effet, en l'absence de données de terrain, le recours à des informations bibliographiques peut être justifié lorsque le contexte de l'étude est similaire à celui pour lequel la valeur a été estimée (conditions redox, lithologie, teneur en carbone organique...), ce recueil de données peut permettre au modélisateur d'obtenir des domaines de variations (minimum et maximum d'après des valeurs issues de la littérature) adaptés à ses besoins.

Quoiqu'il en soit, en cas de pollution avérée, la réalisation d'une modélisation et l'acquisition de données de terrain ne doivent pas retarder la mise en œuvre de mesures de gestion visant à préserver la santé publique ainsi que l'environnement.

## 7. Références

[1] ADEME, BRGM (EPI/ENV n°167/2006), INERIS (DRC-7 5999-DESP 39/06). (2006). « Mesures et Modèles » : enjeux, avantages et inconvénients en contexte de gestion de sites pollués.

[2] Programme TRANSPOL, présentation et résultats sur <http://www.ineris.fr/transpol/>

[3] Quiot F. 2008 – Recommandations relatives au choix entre modèle analytique et numérique dans le cadre de l'étude du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines. Rapport INERIS-DRC-08-86031-00620A.

[4] Lemièrre, B., Seguin J.J., Guyonnet D, Baranger Ph., Saada A.. 2008 – Guide sur le comportement des polluants dans les sols et les nappes – Document du BRGM 300 – Nouvelle édition 2008.

[5] Wiedemeier T.H., Swanson M.A., Moutoux D.E., Gordon E.K., Wilson J.T., Wilson B.H., Kampbell D.H., Haas P.E., Miller R.N., Hansen J.E., Chapelle F.H. 1998 – Technical protocol for evaluating natural attenuation of chlorinated solvents in groundwater - EPA/600/R-98/128.

[6] Aziz C.E., Newell C.J., Gonzales J.R., Haas P.E., Clement T.P., Sun Y. 2000 – BIOCHLOR Natural Attenuation Decision Support System, User's Manual Version 1.0, U.S. EPA, Office of Research and Development, EPA/600/R-00/008.

[7] Mendez E., Widdowson M.A., Brauner J.S., Chapelle F., Casey C. 2004 – Natural Attenuation Software (NAS): A computer program for estimating remediation times of contaminated groundwater, In: G. Latini, G. Passerini, and C. Brebbia (Eds.), Development and Application of Computer Techniques to Environmental Studies X (ENVIROSOFT 2004), ISBN: 1-85312-718-3, 185-194.