



Programme R&D MACAOH (2001-2006)

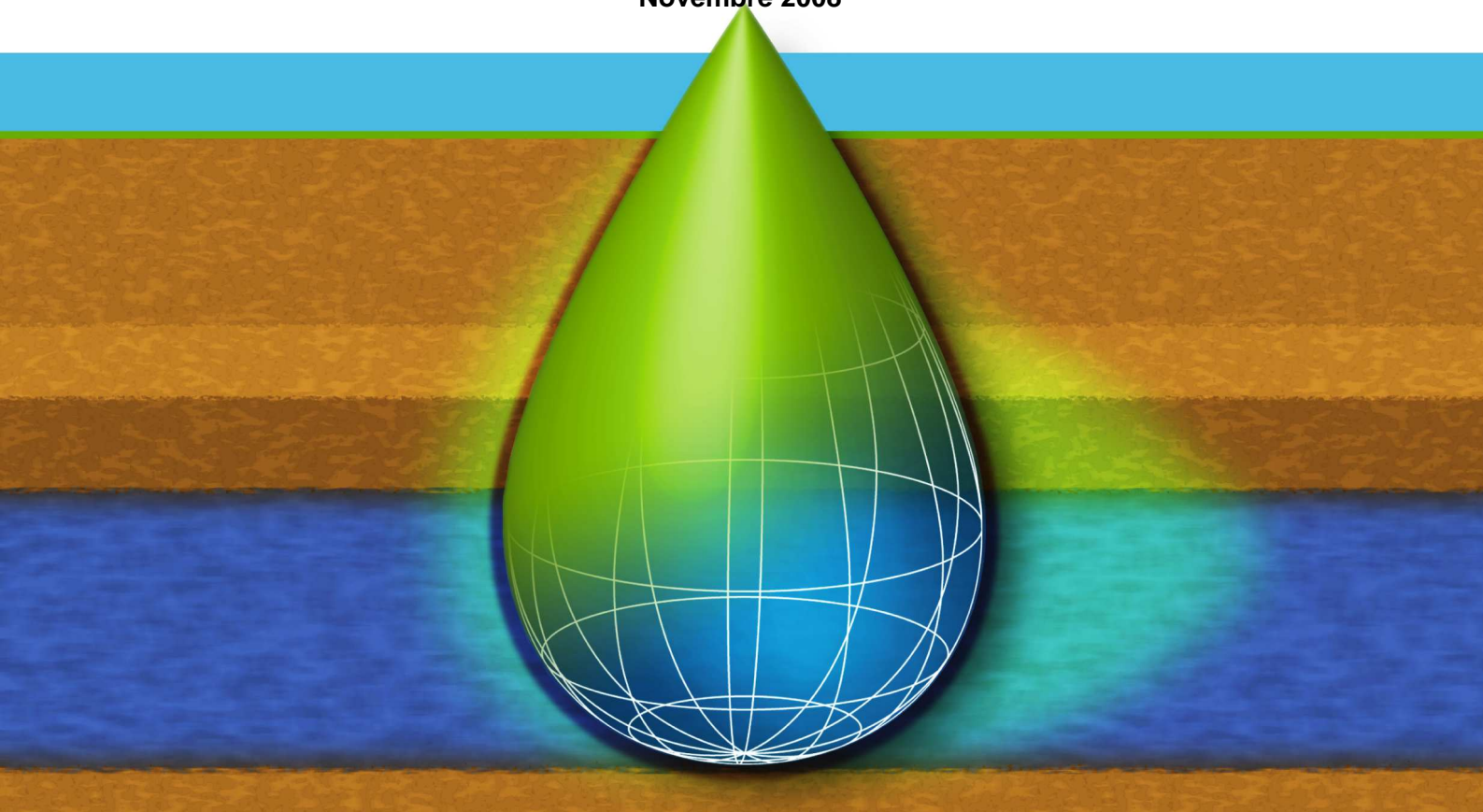
(Modélisation, Atténuation, Caractérisation dans les Aquifères des composés Organo-Halogénés)

MODÉLISATION DU DEVENIR DES COMPOSÉS ORGANO-CHLORÉS ALIPHATIQUES DANS LES AQUIFÈRES

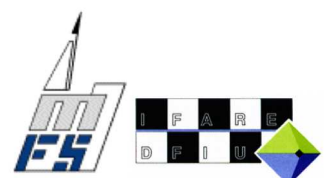
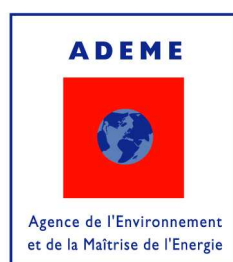
GUIDE MÉTHODOLOGIQUE

Résumé

Novembre 2008



CONNAÎTRE POUR AGIR



Remerciements :

Le présent document a été élaboré par :

Jean-Marie CÔME - BURGEAP, Directeur Recherche & Développement, Coordonnateur du programme MACAOH

Michel QUINTARD - Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, Directeur de Recherche CNRS, Expert scientifique du programme MACAOH

Gerhard SCHÄFER - Institut de Mécanique des Fluides et des Solides / Institut Franco-Allemand de Recherche sur l'Environnement, Professeur de l'Université Louis Pasteur à Strasbourg, Directeur de l'IFARE

Robert MOSÉ - Ecole Nationale du Génie de l'Eau et de l'Environnement de Strasbourg, Professeur

Philippe DELAPLACE - Institut Français du Pétrole, Ingénieur de Recherche

Frank HAESELER - Institut Français du Pétrole, Chef du département géochimie, Chef de Projet Sites Pollués

Claude MOUTON - Responsable du projet MACAOH pour l'ADEME, Ingénieur au Département Sites et Sols Pollués

L'ADEME en bref

L'Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie (ADEME) est un établissement public sous la tutelle conjointe du ministère de l'Ecologie, de l'Energie, du Développement durable et de la Mer

et du ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche. Elle participe à la mise en oeuvre des politiques publiques dans les domaines de l'environnement, de l'énergie et du développement durable.

Afin de leur permettre de progresser dans leur démarche environnementale, l'agence met à disposition des entreprises, des collectivités locales, des pouvoirs publics et du grand public, ses capacités d'expertise et de conseil. Elle aide en outre au financement de projets, de la recherche à la mise en œuvre et ce, dans les domaines suivants : la gestion des déchets, la préservation des sols, l'efficacité énergétique et les énergies renouvelables, la qualité de l'air et la lutte contre le bruit.

<http://www.ademe.fr>

Toute représentation ou reproduction intégrale ou partielle faite sans le consentement de l'auteur ou de ses ayants droits ou ayants cause est illicite selon le Code de la propriété intellectuelle (Art. L 122-4) et constitue une contrefaçon réprimée par la Code pénal. Seules sont autorisées (Art. L 122-5) les copies ou reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective, ainsi que les analyses et courtes citations justifiées par le caractère critique, pédagogique ou d'information de l'œuvre à laquelle elles sont incorporées, sous réserve toutefois, du respect des dispositions des articles L 122-10 à L 122-12 du même Code, relatives à la reproduction par reprographie.

SOMMAIRE

1. ENJEUX ET OBJECTIFS DU PROJET R&D MACAOH	3
2. RECOMMANDATIONS SUR LES CONDITIONS DE REALISATION DES PRESTATIONS DE MODELISATION	5
2.1 Objectifs.....	5
2.2 Logigramme «conditions de réalisation d'une prestation de modélisation »	6
3. QUELLE TYPOLOGIE DE SITUATIONS A MODELISER ET COMMENT CHOISIR UN OUTIL DE CALCUL	9
3.1 Etape 1 : Fonctionnalités « écoulement des phases »	10
3.2 Etape 2 : Choix du modèle physique.....	10
3.3 Etape 3 : Exemples d'outils de calcul disponibles.....	10
3.4 Données nécessaires	11
4. LES DIFFERENTES ETAPES DU TRAVAIL DE MODELISATION	12
4.1 Schématisation du problème	13
4.2 Construction du modèle numérique	13
4.3 Mise en œuvre du modèle	14
5. BIBLIOGRAPHIE.....	15

Les 3 guides méthodologiques MACAOH en version française ainsi que les résumés en langue française et anglaise sont téléchargeables sur le site de l'ADEME.

Caractérisation dans les aquifères d'une zone source constituée d'organo-chlorés aliphatiques, Guide méthodologique ADEME, Programme R&D MACAOH, 137 p.

<http://www2.ademe.fr/servlet/getDoc?cid=96&m=3&id=51385&p1=00&p2=11&ref=17597>

Atténuation naturelle des composés organo-chlorés aliphatiques dans les aquifères, Guide méthodologique ADEME, Programme R&D MACAOH, 214 p.

<http://www2.ademe.fr/servlet/getDoc?cid=96&m=3&id=51390&p1=00&p2=11&ref=17597>

Modélisation du devenir des composés organo-chlorés aliphatiques dans les aquifères, Guide méthodologique ADEME, Programme R&D MACAOH, 182 p.

<http://www2.ademe.fr/servlet/getDoc?cid=96&m=3&id=51391&p1=00&p2=11&ref=17597>

Dans le contexte des sites pollués par des composés organo-chlorés aliphatiques, la modélisation numérique est un outil permettant de comprendre le comportement des polluants dans le milieu souterrain et de prédire leur devenir dans l'espace et dans le temps. Le choix de l'outil de calcul (solution analytique ou plus généralement code numérique) et la mise en œuvre du modèle sont les deux étapes clés des travaux de modélisation, quel que soit l'objet de l'étude (quantification d'une zone source, estimation des mécanismes d'Atténuation Naturelle, étude d'impact, évaluation des risques pour la ressource en eau, dimensionnement d'un procédé de dépollution, ...).

Ainsi, les objectifs du guide méthodologique MACAOH/« Modélisation » sont doubles :

- proposer une aide à la décision pour le choix de l'outil de calcul. A partir des objectifs définis par le donneur d'ordre, des recommandations sont proposées pour aider le prestataire à sélectionner les mécanismes, les fonctionnalités, les formalismes mathématiques, les schémas numériques et in fine l'outil (ou les outils) de calcul en vue de l'établissement de son offre technique. En corollaire, ce processus d'aide à la décision permettra au donneur d'ordre de juger de la pertinence des choix effectués par le prestataire dans son offre ou son rapport d'étude ;
- préciser la démarche à suivre pour qu'une prestation de modélisation réponde aux objectifs fixés (cahier des charges) par un donneur d'ordre. Cette démarche est motivée par l'absence de référentiel pour la modélisation dans un contexte où les incertitudes et les enjeux sont forts et la traçabilité de la démarche généralement faible. Au vu des incertitudes nombreuses qui interviennent dans la mise en œuvre de la modélisation, il n'apparaît pas possible de définir une « norme » de modélisation garantissant un degré de qualité connu à l'avance. Les recommandations proposées permettront néanmoins d'assurer une « bonne pratique » de modélisation, et donc d'offrir des garanties de qualité sur les résultats obtenus.

Ce document est un résumé du guide méthodologique MACAOH/« Modélisation du devenir des composés organo-chlorés aliphatiques dans les aquifères ». Après une présentation des enjeux et objectifs du projet R&D MACAOH, il aborde 3 points clés :

- les recommandations sur les conditions de réalisation des prestations de modélisation ;
- la typologie de situations à modéliser conduisant au choix d'un outil de calcul ;
- les différentes étapes du travail de modélisation.

1. Enjeux et objectifs du projet R&D MACAOH

Depuis les années 1950, les cas de pollution de sites par des composés organo-halogénés se sont multipliés dans les pays industrialisés. Parmi ces composés, la famille la plus souvent rencontrée est celle des **composés organo-chlorés aliphatiques** (chlorométhanes, chloroéthanes, chloroéthènes). Ces composés correspondent à des liquides non miscibles dans l'eau et plus denses que l'eau (à l'exception du chlorure de vinyle, du chlorométhane et du chloroéthane). Ainsi, lors d'un déversement d'organo-chlorés aliphatiques sur le sol, les mécanismes de propagation peuvent être décrits en deux processus distincts et successifs (Figure 1) :

- une infiltration gravitaire de la **phase organique** (liquide constitué par un ou plusieurs composés organo-chlorés aliphatiques) dans le sol, laissant derrière elle une zone à **saturation résiduelle**. Cela conduit au sein du milieu poreux à une **zone source** de dimension limitée par rapport aux dimensions caractéristiques de l'aquifère ;
- le développement d'un **panache de composés dissous** dans l'eau de nappe par dissolution des composés présents dans la zone source et le développement d'un **panache de composés gazeux** dans l'air de la zone non saturée par volatilisation des polluants présents dans la zone source et/ou présents dans l'eau de nappe. Du fait de la lenteur des transferts par dissolution et volatilisation, la disparition de la zone source est un mécanisme très long (plusieurs années voire plusieurs dizaines d'années) en regard de la mise en place de la zone source (quelques jours à quelques semaines dans un milieu sableux).

La prévision du comportement des organo-chlorés dans les aquifères se heurte à une triple difficulté : la caractérisation de la zone source (localisation de la zone source, estimation du volume de phase organique et détermination de la composition de cette phase organique), l'évaluation qualitative et quantitative du potentiel d'atténuation naturelle (à la fois dans la zone source et les panaches dissous/gazeux) et la modélisation (quels modèles physiques, quels outils, quelles méthodologies, ...).

A partir de ces constats, l'ADEME a engagé un projet de Recherche & Développement sur le comportement et le devenir des composés organo-chlorés aliphatiques dans les aquifères. Dénommé MACAOH (Modélisation, Atténuation, Caractérisation dans les Aquifères des Organo-Halogénés), ce programme a été réalisé par un groupement composé d'un bureau d'études, BURGEAP, et de trois organismes de recherche, l'IFP (Institut Français du Pétrole), l'IMFS/IFARE (Institut de Mécanique des Fluides et des Solides de Strasbourg / Institut Franco-Allemand de Recherche sur l'Environnement) et l'IMFT (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse).

Réalisé sur 5 ans (2001-2006), il est structuré autour des trois thèmes précités et comprend des expérimentations en laboratoire (batch, colonne), sur pilote (bassin SCERES)¹ et sur deux sites industriels, ainsi que des travaux de modélisation (en particulier des tests de performance des outils de calcul dans le cadre d'un programme d'inter-comparaison associant les partenaires de MACAOH et 8 équipes de modélisateurs).

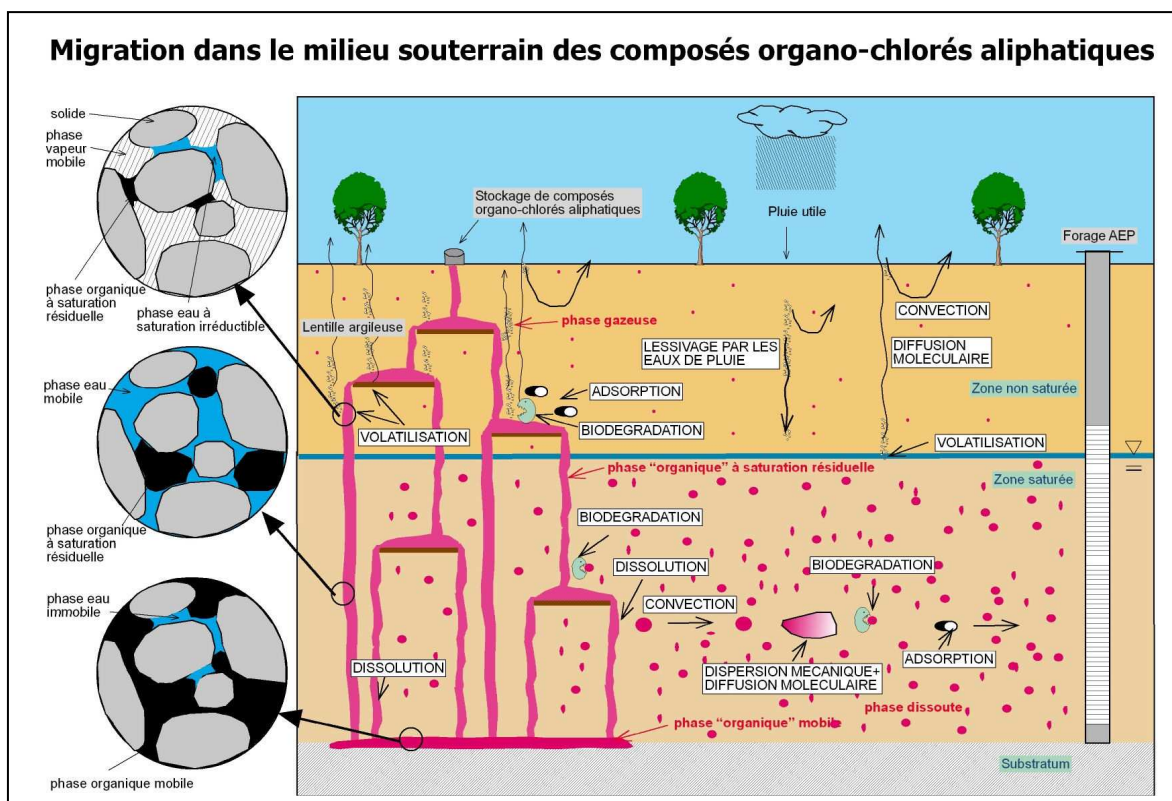


Figure 1 – Mécanismes en jeu dans le devenir des composés organo-chlorés aliphatiques dans le milieu souterrain

¹ Site Contrôlé Expérimental de Recherche pour la réhabilitation des Eaux et des Sols, situé à l'IFARE à Strasbourg (bassin enterré et instrumenté de dimensions 25 m x 12 m x 3 m reconstituant un aquifère alluvial).

Les objectifs visés étaient, d'une part, de contribuer à combler des lacunes en matière de compréhension et de connaissances appliquées et, d'autre part, d'élaborer **trois guides méthodologiques** relatifs aux thèmes « **Caractérisation d'une zone source** », « **Atténuation naturelle** » et « **Modélisation** ». Ces guides, téléchargeables sur le site de l'ADEME, sont également référencés parmi les outils techniques de gestion des sites pollués du Ministère de l'Ecologie, de l'Energie, du Développement Durable et de l'Aménagement du Territoire².

Les guides méthodologiques MACAOH contiennent à la fois une description des concepts clés, des méthodologies et des protocoles, et des exemples d'application. Ils sont destinés aux prestataires (bureaux d'études, organismes de recherche, etc.) et aux donneurs d'ordre (industriels, aménageurs, collectivités, institutionnels, etc.).

2. Recommandations sur les conditions de réalisation des prestations de modélisation

2.1. Objectifs

Le processus décisionnel aboutissant à la réalisation d'une prestation de modélisation ainsi que les recommandations qui lui sont associées fixent les conditions minimales requises pour que la modélisation réponde aux objectifs fixés (cahier des charges) par un donneur d'ordre. Les recommandations pourront servir :

- au donneur d'ordre, pour vérifier l'adéquation des moyens mis en œuvre par un prestataire avec les objectifs du cahier des charges ;
- au prestataire, pour expliciter et justifier clairement sa démarche et ses choix, dans le cadre d'une offre technique en réponse à une consultation, puis pour la réalisation de la prestation et la rédaction du rapport.

Insistons sur le fait que des incertitudes nombreuses interviennent dans la mise en œuvre de la modélisation. Ces incertitudes sont liées :

- à la qualité et l'exhaustivité des données pour la schématisation (erreurs de mesure, coût élevé de l'acquisition des données, nombre limité de points de mesure, ...),
- à l'absence de modèles descriptifs acceptables à une échelle de description raisonnable sur le plan pratique (les modèles mathématiques retenus pour modéliser le transport dans un système hétérogène aussi complexe qu'un milieu naturel ne sont que des approximations pouvant conduire à des représentations très grossières s'ils sont utilisés de manière inappropriée, c'est-à-dire hors de leur domaine de validité),
- à la qualité des approximations numériques utilisées (choix des schémas numériques, choix du maillage, ...).

Dans ce contexte, il n'apparaît pas possible de définir une « norme » de modélisation garantissant un degré de qualité connu à l'avance. Par exemple, il n'est pas possible de fixer a priori un nombre minimal de mailles assurant une « bonne qualité » d'une simulation numérique. A l'inverse, il est possible d'affirmer qu'une simulation proposée avec un seul maillage ne permet pas de conclure sur la bonne ou mauvaise convergence de la solution obtenue vers la solution exacte du problème (seule une analyse des résultats de plusieurs simulations réalisées avec des maillages différents permet de préciser l'influence du maillage sur le résultat). En conséquence, le guide méthodologique recommande une étude de sensibilité sur les paramètres numériques décrivant le maillage, conduisant in fine à un choix raisonnable du maillage utilisé pour l'exploitation du modèle.

Dans ce chapitre, un certain nombre de recommandations sont proposées permettant d'assurer une « **bonne pratique** » de modélisation, et, donc, offrant des garanties de qualité des résultats obtenus. Ces recommandations se sont appuyées en particulier sur le retour d'expérience des travaux menés dans le cadre de MACAOH [2].

² <http://www.sites-pollues.ecologie.gouv.fr/OutilsMethodologiquesMO.html>

2.2. Logigramme « conditions de réalisation d'une prestation de modélisation »

Le logigramme décisionnel présentant les conditions de réalisation d'une prestation de modélisation est schématisé Figure 2. Les principales étapes sont commentées ci-après.

Etape 1 : cahier des charges

Le cahier des charges élaboré par le donneur d'ordre comporte les objectifs de l'étude (étude d'impact, évaluation des risques, définition de scénarios de réhabilitation, dimensionnement de dispositifs de dépollution, ...). Il ne requiert pas de la part du donneur d'ordre d'actions de pré-étude ou d'analyse des données existantes. Celles-ci seront effectuées par les candidats et serviront à la rédaction de l'offre technique.

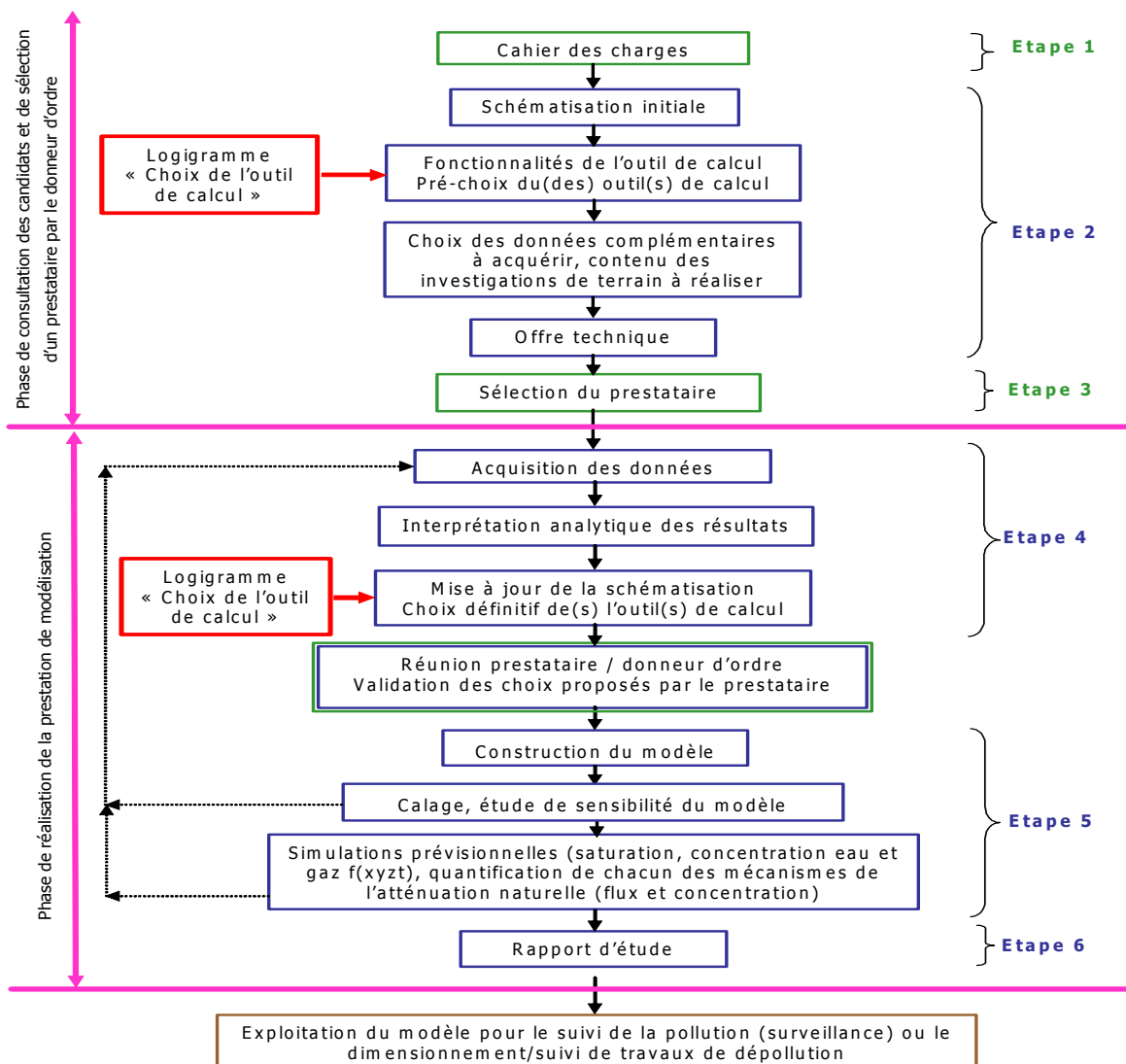


Figure 2 - Logigramme « conditions de réalisation d'une prestation de modélisation »
 (en vert : prestations réalisées par le donneur d'ordre ; en bleu : prestations réalisées par le prestataire ; en marron : prestation optionnelle réalisée par un prestataire)

Etape 2 : schématisation initiale et élaboration de l'offre technique

Les candidats (prestataires consultés) effectuent une première schématisation du problème posé à partir des rapports d'études fournis par le donneur d'ordre dans le cadre de la consultation (et éventuellement à partir d'archives détenues par les prestataires). Les éléments minima indispensables à cette schématisation sont une esquisse géologique et hydrogéologique ainsi que des données de concentrations en polluants dans les sols, l'eau et/ou l'air.

A partir de cette schématisation, chaque candidat élabore une offre technique argumentée comportant :

- une première schématisation du problème (schématisation initiale),
- la définition des fonctionnalités de(s) l'outil(s) de calcul et un choix a priori de l'outil de calcul (ou des outils) qui sera(seront) mis en œuvre,
- le contenu détaillé des données complémentaires à acquérir et leur mode d'acquisition (investigations de terrain, essais et analyses en laboratoire, recherche bibliographique, ...),
- une description des éléments de mise en œuvre de la modélisation, notamment en tenant compte des recommandations proposées dans ce guide.

Etape 3 : choix d'un prestataire par le donneur d'ordre

Les candidats et le donneur d'ordre (dans le cadre de l'évaluation qu'il est amené à faire des offres), peuvent s'appuyer sur le logigramme de la Figure 3 qui permet de choisir, en fonction d'un certain nombre de critères, le ou les type(s) d'outil(s) de calcul les plus pertinents en fonction des objectifs de l'étude et des éléments connus caractérisant le site.

Etape 4 : Acquisition et interprétation des données, mise à jour de la schématisation et choix définitif de(s) l'outil(s) de calcul

En fonction de la schématisation initiale retenue, les données à acquérir se traduisent en un certain nombre de paramètres physiques à introduire dans le modèle ainsi qu'en un certain nombre de variables qui serviront au calage du modèle. 4 classes de méthodes sont retenues :

- mesures de terrain (ce vocabulaire inclut les mesures sur site, mais aussi l'analyse en laboratoire d'échantillons prélevés sur site),
- mesures par des expérimentations de laboratoire (essais en colonne, ...),
- estimation à partir de données disponibles dans la littérature,
- calage par comparaison entre les résultats du modèle et des données de terrain (essentiellement hauteurs piézométriques, concentrations, saturations).

A partir d'une analyse des diverses méthodes disponibles, des possibilités de mise en œuvre et des coûts associés, les méthodes préconisées sont présentées dans le guide « Modélisation ». Dans la mesure où les mesures de terrain, ou dans un degré moindre celles de laboratoire, sont pratiquement disponibles, elles sont à privilégier par rapport aux données de la littérature.

Une interprétation approfondie des données acquises est recommandée avant le démarrage des travaux de modélisation, afin de « dégrossir » le problème et fournir des ordres de grandeur de flux, de cinétiques ou de bilans de masse. Les outils à mettre en œuvre pourront être les équations de base utilisées classiquement pour les sites pollués (lois de Darcy, Fick, Raoult, ...), éventuellement des solutions analytiques (par exemple du transport 1D avec une cinétique de dégradation d'ordre 1, ...), voire des codes numériques avec une schématisation très grossière.

L'interprétation à l'aide d'outils analytiques des mécanismes d'Atténuation Naturelle de la zone source et des panaches pourra également s'appuyer sur les recommandations formulées dans les guides MACAOH « Caractérisation d'une zone source » et « Atténuation Naturelle ».

A partir de cette interprétation des données, la schématisation sera mise à jour et le choix définitif de(s) l'outil(s) de calcul effectué. Plusieurs outils pourront être éventuellement nécessaires pour coupler des mécanismes ou simuler deux problématiques bien distinctes. Cette étape pourra faire appel à nouveau au logigramme de choix de l'outil de calcul.

Il est recommandé à ce stade de prévoir une réunion donneur d'ordre / prestataire de façon à valider les choix définitifs.

Etape 5 : construction et mise en œuvre du modèle

A partir de la schématisation définitive, le modèle peut alors être mis en œuvre. Les travaux comprennent trois étapes principales : la construction du modèle, le calage et l'étude de sensibilité, les simulations prévisionnelles. En fonction des résultats du modèle, le prestataire sera éventuellement conduit à acquérir des données complémentaires.

Une fois le modèle calé, il est possible de réaliser des simulations prévisionnelles, qui ont pour objet de prévoir l'évolution des variables du modèle (pressions, saturations, concentrations) à différents pas de temps à partir de la situation de calage. Ces simulations sont réalisées avec ou sans modification des conditions aux limites/imposées au modèle (par exemple, niveau d'eau variable dans un cours d'eau, modification d'un débit de pompage, ...).

La mise en œuvre et la restitution des simulations prévisionnelles constituent la valeur ajoutée essentielle de la modélisation. Il est donc important de suivre un certain nombre de recommandations visant à garantir la qualité de la prestation :

- si, à l'issue des phases précédentes, il subsiste plusieurs scénarios plausibles, alors les simulations doivent être effectuées sur l'ensemble de ces scénarios ;
- pour chaque scénario, plusieurs jeux de paramètres seront utilisés, en fonction des résultats de l'étude de sensibilité effectuée et des données mesurées ;
- l'exploitation des résultats des simulations prévisionnelles comprendra en particulier les informations suivantes :
 - champs de concentration et saturation à différents temps,
 - concentrations en fonction du temps, pour les composés dans l'eau et dans le gaz sur les différentes cibles,
 - évaluation du pourcentage de chaque mécanisme impliqué dans l'atténuation des saturations dans la zone source et des concentrations dans la nappe et dans les gaz, a minima pour un pas de temps,
 - bilans de masse : évolution de la masse et de la composition à différents temps pour la phase organique, flux par compartiment, flux cumulés en entrée/sortie du domaine, flux dégradés ou produits à différents temps pour les polluants transportés dans l'eau et dans le gaz.

Etape 6 : rapport d'étude

Le rapport fourni par le prestataire comprendra une description détaillée des prestations:

- **présentation détaillée et argumentée de la schématisation** retenue, avec géométrie du domaine modélisé, descriptif complet du (des) maillage(s) utilisé(s), lithologie, conditions aux limites, fonctionnalités prises en compte pour l'écoulement et le transport ;
- **données acquises dans le cadre de la caractérisation du site** avec leur mode d'obtention, interprétation des données et présentation la plus complète possible des valeurs retenues pour le modèle ;
- **présentation de l'(des) outil(s) de calcul**, incluant les mécanismes pris en compte, leur formalisme mathématique, les schémas numériques, les équations de bilan, ainsi que la liste exhaustive des paramètres utilisés dans le modèle et des variables simulées ;
- **procédure de calage** : procédure mise en œuvre, critères retenus pour comparer les résultats du modèle et les données du site, bilans de masse, estimation de l'incertitude associée au choix des paramètres « calés », conditions du calage ;
- **étude de sensibilité sur les paramètres numériques** : influence du maillage et paramètres d'intégration en temps (au minimum deux simulations), informations sur tous les paramètres numériques ;
- **étude de sensibilité sur les paramètres non numériques** : en priorité sur les paramètres clés identifiés lors du diagnostic de pollution, et si ces mécanismes sont inclus, sur les paramètres du modèle de biodégradation ainsi que les paramètres intervenant dans les modèles de dissolution et de volatilisation ;
- **simulations prévisionnelles**, avec fourniture des informations suivantes : champs de concentration et saturation à différents temps, concentrations en fonction du temps, évaluation du pourcentage de chaque mécanisme dans l'atténuation des saturations dans la zone source et des concentrations dans la nappe et dans les gaz (a minima pour un pas de temps), bilans de masse sur la phase organique et sur les flux.

3. Quelle typologie de situations à modéliser et comment choisir un outil de calcul

La démarche à suivre pour sélectionner l'outil de calcul approprié en fonction du problème à modéliser comprend trois étapes successives (Figure 3) :

- **étape 1 : analyse des fonctionnalités nécessaires au modèle physique**, en sélectionnant dans un premier temps celles liées à l'écoulement des phases et dans un second temps celles relatives au transport des composés (dissolution, volatilisation, biodégradation) ;
- **étape 2 : choix du modèle physique** en combinant les deux types de fonctionnalités. Pour chacun des modèles, la liste des paramètres nécessaires est décrite ;
- **étape 3 : choix de l'outil de calcul** en fonction du modèle physique sélectionné (à partir d'une liste minimale proposée de codes numériques et de solutions analytiques).

Le choix d'un modèle physique peut varier en fonction de l'échelle de modélisation. Par conséquent, le prestataire pourra être amené à envisager la mise en œuvre d'un ou plusieurs outils de calcul, éventuellement combinés.

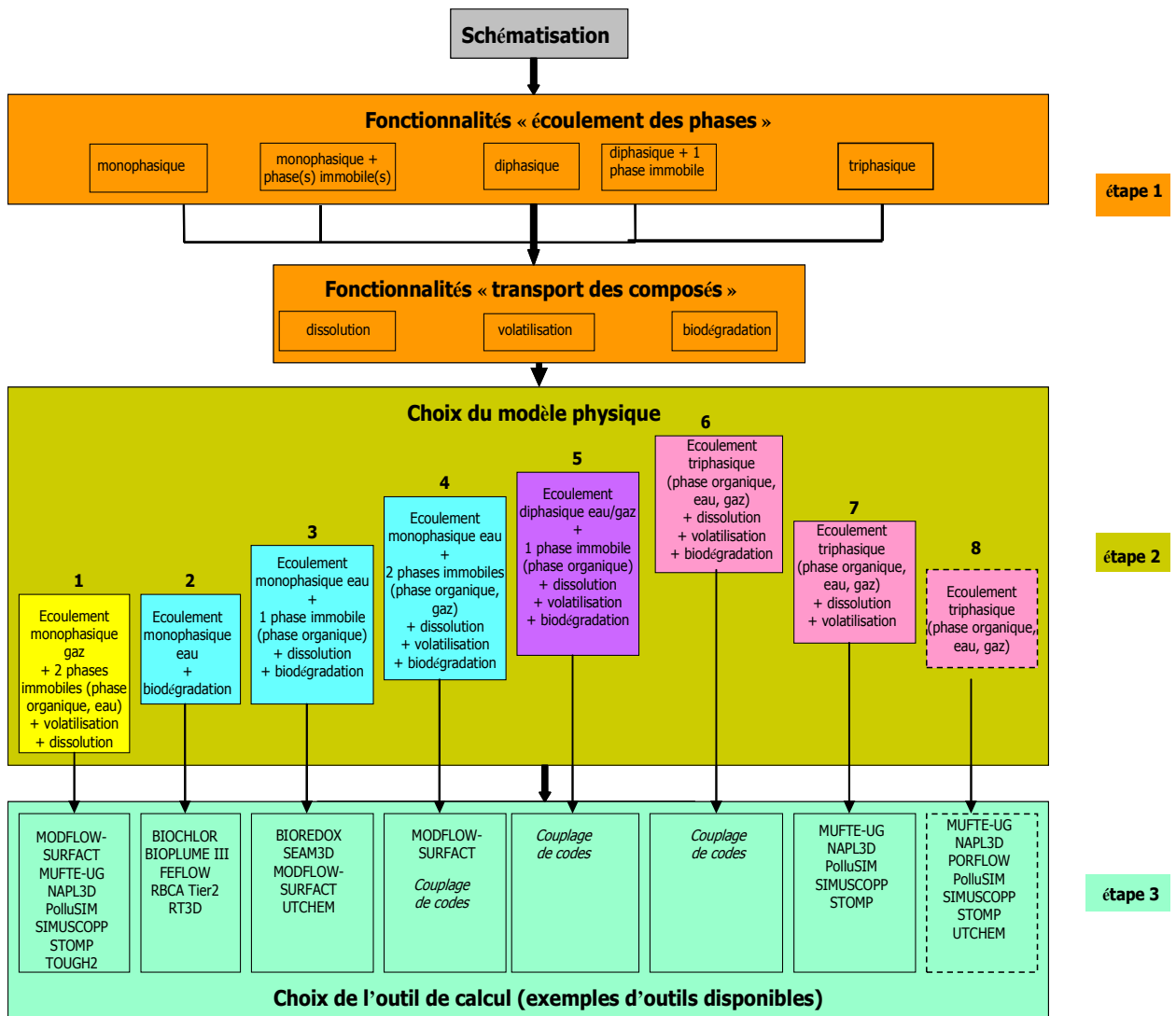


Figure 3 – Logigramme « choix de l'outil de calcul »

3.1. Etape 1 : Fonctionnalités « écoulement des phases »

5 classes de fonctionnalités associées à l'écoulement des phases (eau, gaz, phase organique) sont proposées :

- écoulement monophasique (eau ou gaz),
- écoulement monophasique avec présence d'une ou deux phases immobiles³ (eau, gaz ou phase organique),
- écoulement diphasique (eau/phase organique, phase organique/gaz ou eau/gaz),
- écoulement diphasique avec présence d'une troisième phase immobile,
- écoulement triphasique (eau/phase organique/gaz).

Fonctionnalités « transport des composés organo-chlorés aliphatiques »

La discrimination des fonctionnalités de transport se fait par les 3 mécanismes suivants : dissolution, volatilisation, biodégradation. Il est sous-entendu que les mécanismes de transport physico-chimiques, tels que la convection, la dispersion, la diffusion et la sorption font partie des fonctionnalités minimales requises.

Pour chacun des mécanismes de transfert entre phases (dissolution, volatilisation, sorption), des choix sont à faire entre différents types de modèle, en particulier équilibre local ou non-équilibre local, avec un coefficient de transfert constant ou variable, etc. Ces choix peuvent être guidés par la discrétisation du maillage. Par exemple, pour la dissolution, une méthodologie a été proposée pour guider le choix du modèle à partir de deux critères principaux liés aux données de terrain [1] :

- la taille des hétérogénéités à prendre en compte : il est admis que des hétérogénéités de l'ordre de grandeur ou supérieures au décimètre peuvent être prises en compte par la discrétisation du domaine d'étude ;
- la valeur de la saturation initiale par rapport à la saturation résiduelle de la phase organique.

Concernant la biodégradation, il convient de prendre en compte a minima la déchloration réductrice séquentielle, mais des choix sont à faire concernant le type de modèle (premier ordre ou Monod, ...), la prise en compte ou non de la biomasse, la compétition éventuelle entre accepteurs d'électrons, etc.

3.2. Etape 2 : Choix du modèle physique

Le choix du modèle physique dépend des possibilités de découplage entre les diverses fonctionnalités d'écoulement et de transport. Le choix des fonctionnalités est en principe fondé sur l'expertise des données de terrain et sur les objectifs de l'étude.

A partir de la matrice des fonctionnalités écoulement/transport et d'une analyse des situations typiques de sites à modéliser, il est proposé 8 modèles physiques dont les fonctionnalités sont décrites dans le logigramme de la Figure 3. Pour chacun des modèles, la zone source peut être de type mono-composé ou multi-composés.

3.3. Etape 3 : Exemples d'outils de calcul disponibles

Une liste minimale⁴ d'outils de calcul disponibles pour simuler le devenir des organo-chlorés dans les aquifères est présentée Figure 3. Au vu de la finalité du guide méthodologique, cette liste a été restreinte à des codes/solutions analytiques commerciaux ou universitaires présentant des particularités intéressantes et aisément accessibles aux bureaux d'études. Les aspects numériques (techniques de résolution, type de discrétisation, etc.) sont des critères de choix supplémentaires.

³ Le terme immobile est ici relatif à la convection des phases fluides (fonctionnalité écoulement). Une phase immobile peut néanmoins migrer dans le milieu poreux sous l'influence d'autres mécanismes (diffusion, ...)

⁴ La recherche des outils de calcul disponibles effectuée dans le cadre du programme MACAOH ne peut être qualifiée d'exhaustive. A ce titre, la liste d'outils proposés (élaborée en 2006) est qualifiée de minimale.

3.4. Données nécessaires

Les données nécessaires à la mise en œuvre des 8 modèles physiques sont recensées dans le Tableau 1. Les différents modes d'acquisition des paramètres sont précisés dans le guide.

Tableau 1 - Paramètres et variables nécessaires dans les modèles (X: toujours nécessaire ; (X) nécessaire pour certaines situations).

Paramètres	Modèle1	Modèle2	Modèle3	Modèle4	Modèle5	Modèle6	Modèle7	Modèle8
Pétrophysique, relations pression capillaire/saturation et perméabilité relative/saturation⁵								
Conductivité hydraulique	(X)	X	X	X	X	X	X	X
Porosité totale	X	X	X	X	X	X	X	X
Porosité cinématique		X	X	X	X	X	X	X
Relations pression capillaire / saturation eau-gaz					X	X	X	X
Relations pression capillaire / saturation eau-phase organique						X	X	X
Relations pression capillaire / saturation gaz/phase organique						X	X	X
Relations perméabilité relative / saturation eau-gaz	X			X	X	X	X	X
Relations perméabilité relative / saturation eau-phase organique			X	X	X	X	X	X
Relations perméabilité relative / saturation gaz-phase organique	X				X	X	X	X
Saturation résiduelle en phase organique	X		X	X	X	X	X	X
Saturation irréductible en eau	X		(X)	X	X	X	X	X
Saturation résiduelle en gaz	X			X	X	X	X	X
Densité de la phase organique					X	X	X	X
Viscosité de la phase organique						X	X	X
Densité de la phase gazeuse	X			X	X	X	X	X
Dispersion, diffusion, tortuosité								
Dispersivité zone source (α_T)		(X)	(X)	(X)	(X)	(X)	(X)	
Dispersivité panache (α_L, α_T)		X	X	X	X	X	X	
Diffusion moléculaire dans l'eau pour chaque composé	(X)	(X)	(X)	(X)	(X)	(X)	(X)	
Diffusion moléculaire dans l'air pour chaque composé	X			X	X	X	X	
Tortuosité	X			X	X	X	X	
Thermodynamique multi-composés								
Fraction molaire de chaque composé dans la phase organique	X		X	X	X	X	X	
Masse molaire de chaque composé	X		X	X	X	X	X	
Solubilité de chaque composé	X		X	X	X	X	X	
Pression de vapeur saturante de chaque composé	X			X	X	X	X	
Constante de Henry de chaque composé	X			X	X	X	X	
Coefficient d'échange pour la dissolution	(X)		X	X	X	X	X	
Coefficient d'échange pour la volatilisation	X			X	X	X	X	
Coefficient de partage sol/eau	(X)	X	X	X	X	X	X	
Fraction de carbone organique		(X)	(X)	(X)	(X)	(X)	(X)	

⁵ Le choix pertinent des pressions capillaires indépendantes n'est pas abordé dans le présent document, celui-ci dépendant des propriétés du système étudié. Il en est de même pour la façon de construire les pressions capillaires triphasiques à partir des pressions capillaires diphasiques, en l'absence de mesures effectuées en conditions triphasiques : plusieurs choix sont possibles qui dépendent également du système étudié.

Paramètres	Modèle1	Modèle2	Modèle3	Modèle4	Modèle5	Modèle6	Modèle7	Modèle8
Biodégradation								
Ordre 0								
Vitesse de dégradation de chaque composé		X	X	X	X	X		
Ordre 1								
Vitesse de dégradation de chaque composé		(X)	(X)	(X)	(X)	(X)		
Monod								
Vitesse maximale de dégradation de chaque composé		(X)	(X)	(X)	(X)	(X)		
Constante de demi-saturation de chaque composé		(X)	(X)	(X)	(X)	(X)		
Monod + transport du carbone organique et des accepteurs d'électrons inorganiques								
Vitesse maximale de dégradation de chaque composé		(X)	(X)	(X)	(X)	(X)		
Constante de demi-saturation de chaque composé		(X)	(X)	(X)	(X)	(X)		
Monod + prise en compte de la biomasse								
Vitesse maximale de dégradation de chaque composé		(X)	(X)	(X)	(X)	(X)		
Constante de demi-saturation de chaque composé		(X)	(X)	(X)	(X)	(X)		
Taux de croissance et de dégénérescence de la biomasse dans les sols		(X)	(X)	(X)	(X)	(X)		
Taux de croissance et de dégénérescence de la biomasse dans l'eau		(X)	(X)	(X)	(X)	(X)		
Variables								
Pression dans la phase eau (piézométrie)		X	X	X	X	X	X	X
Pression dans la phase gazeuse	(X)			(X)	(X)	(X)	(X)	X
Saturation en phase organique	X		X	X	X	X	X	X
Concentrations dans la phase eau	(X)	X	X	X	X	X	X	
Concentrations dans la phase gaz	X			X	X	X	X	
Flux gazeux à l'interface sol/atmosphère	(X)			(X)	(X)	(X)	(X)	

4. Les différentes étapes du travail de modélisation

De manière générale, les travaux de modélisation se déroulent en plusieurs étapes :

- **schématisation du problème** : définition de la géométrie du modèle, identification des mécanismes avec leur formulation mathématique (équations de bilans au sein du domaine, valeurs des divers paramètres physiques, ...), conditions aux frontières du domaine (conditions aux limites), conditions initiales,
- **construction du modèle numérique** proprement dit, c'est-à-dire transcription de la formulation mathématique dans le code numérique retenu. Des choix propres à la modélisation numérique sont alors à faire : maillage, choix des schémas numériques approximant le problème mathématique, choix des pas de temps, ...
- **mise en œuvre du modèle** : calage, étude de sensibilité, simulations prévisionnelles.

4.3. Mise en œuvre du modèle

La mise en œuvre d'un modèle implique plusieurs étapes et bien souvent de nombreux allers et retours entre elles :

- **le calage** : la phase dite de « calage » consiste à effectuer un certain nombre d'allers et retours entre les « données d'entrée méconnues » et les « résultats » du modèle, le but étant d'estimer ces données d'entrée sur la base d'un accord a posteriori entre les « résultats » du modèle et les « mesures de terrain » correspondantes (par exemple la piézométrie, Figure 4) ;
- **l'étude de sensibilité** : l'étude de sensibilité aux divers paramètres du modèle commence dès l'étape de calage précédemment décrite, de manière à caler le modèle sur des paramètres méconnus mais « sensibles » (Figure 5). L'autre aspect de l'étude de sensibilité est de mettre en correspondance les « incertitudes sur les données » avec les « incertitudes sur les résultats », de manière à susciter d'éventuelles mesures de terrain complémentaires, ou de manière à fournir des résultats avec des fourchettes de confiance bien chiffrées.

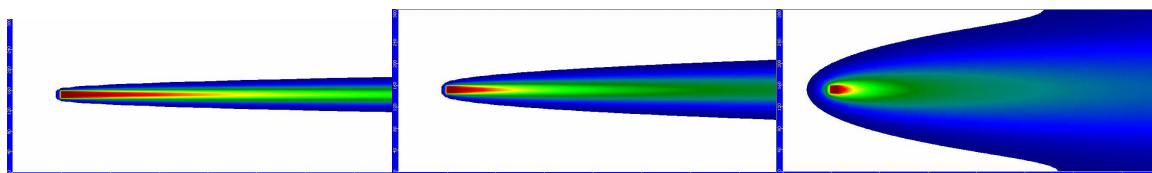


Figure 5 – Etude de sensibilité sur la dispersivité ($\alpha_L = 1$ m et $\alpha_T = 0,1$ m à gauche - $\alpha_L = 1$ m et $\alpha_T = 0,33$ m au centre - $\alpha_L = 10$ m et $\alpha_T = 3,3$ m à droite)

- **les simulations prévisionnelles** : une simulation prévisionnelle est généralement une simulation sur une longue durée avec prise en compte de la totalité des phénomènes et paramètres identifiés comme sensibles aux échelles de temps ou d'espace concernées par l'étude. Toute simulation prévisionnelle doit être accompagnée de simulations complémentaires qui entreront dans le cadre de l'étude de sensibilité précédemment décrite, quantifiant l'incidence des incertitudes en « entrée » sur les « observables » (concentration en polluant à tel endroit de l'aquifère par exemple).

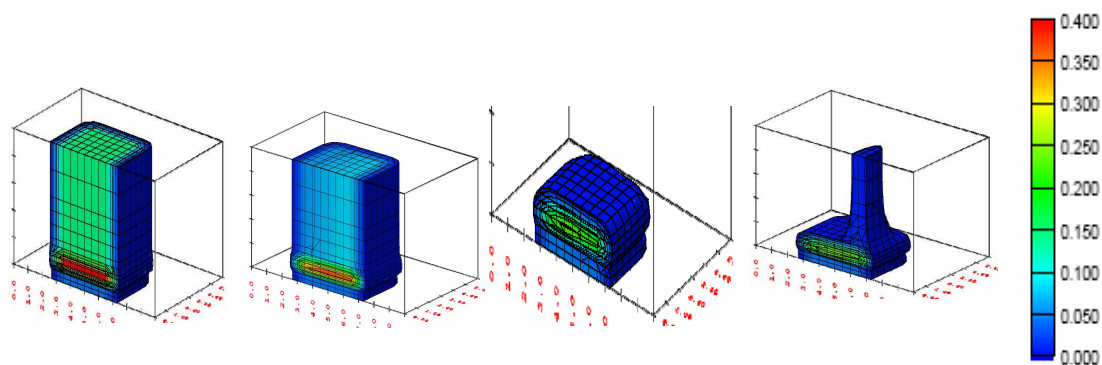


Figure 6 – Calage ($t = 7600$ j) et simulations prévisionnelles de saturation en phase organique (de gauche à droite $t = 50$ j, $t = 2000$ j, $t = 7600$ j, $t = 10000$ j - site A MACAOH)

5. Bibliographie

[1] Côme J.M., Burghoffer P., Danquigny C., Emonet-Gauthier A., Getto D., Haeseler F., Kaskassian S., Le Roux F., Quintard M., Razakarisoa O., Schaefer G., 2005. CIDISIR, Quantification des cinétiques de dissolution sur sites réels - hydrocarbures pétroliers et dérivés halogénés -, Guide méthodologique, Programme R&D RITEAU/Ministère de la Recherche, 72p. <http://www.sites-pollues.ecologie.gouv.fr/DocumentsModelisation.asp#CIDISIR>

[2] Quintard M., Schäfer G., Côme J.M., Mosé R., Kaskassian S., Delaplace P., Nex. F., Haeseler F., 2006. Modélisation du devenir des composés organo-chlorés aliphatiques dans les aquifères : situations à modéliser, analyse critique des outils de calcul disponibles, programme d'inter-comparaison. Rapport final ADEME, Volume II, Programme R&D MACAOH (Modélisation, Atténuation, Caractérisation dans les Aquifères des Organo-Halogénés), 144 p.