



Intersol'2017

16 Mars 2017

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

par

Ioannis IGNATIADIS
(BRGM/D3E/SVP)



Plan de l'exposé :

1. Préambule, illustration avec projets multi-échelles

2. Présentation rapide de projet:

- Motivation et justification, objectifs & modules du projet

3. Réalisations 2016 :

- Examen de quelques anciens projets du BRGM sur la base d'un canevas d'inter-comparaison
- Construction progressive d'une méthodologie de travail multi- échelles et multi-outils

4. Perspectives 2017- 2019. Conclusions

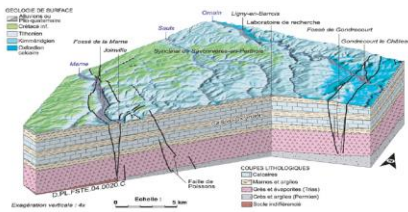
- La plateforme PRIME du projet ARD 2020 PIVOTS
- La technique de changement d'échelle par prise de moyenne volumique

5. Conclusions

1. Préambule

- Pour comprendre, évaluer et prédire finement l'évolution temporelle et spatiale des polluants dans l'environnement d'un sol et sous-sol, qu'il soit
 - en atténuation naturelle ou
 - en traitement de remédiation biologique ou physicochimique,
- ✓ il est nécessaire de recourir, parfois exhaustivement, à :
 - des mesures physicochimiques, géophysiques et biologiques sur site,
 - des expériences de traitabilité en laboratoire, sur pilote et sur site et
 - des modèles numériques.

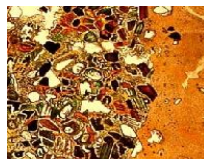
Illustration de la difficulté de la tâche.....



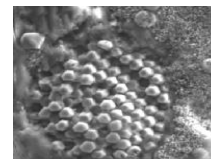
Kilomètre



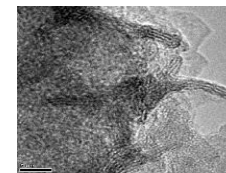
Mètre



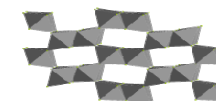
Centimètre



Micromètre



Nanomètre



Angström

m
e
s
u
r
e
s

- ❖ Analyse statistique de données ;
- ❖ Méthodes géophysiques

- ❖ Observation de terrain
- ❖ séparation granulo. (élutriation, sédigraphie)
- ❖ Analyse statistique de données ;

- ❖ Analyses chimiques
- ❖ Observation de lames minces
- ❖ Cartographie microsonde et (μ)-XRF

- ❖ Observation et analyses MEB
- ❖ Analyses microsonde et (μ)-XRF

- ❖ Observations MET
- ❖ Diffraction des rayons X
- ❖ Thermo-gravimétrie

- ❖ Techniques synchrotron (XANES, EXAFS) et autres grands instruments
- ❖ Diffraction (RX, neutrons)

m
o
d
è
l
e
s

- ❖ Modèles couplés géochimie / transport
- ❖ Approches probabilistes/possibilistes
- ❖ Modèles empiriques d'interprétation

- ❖ Modèles couplés (ex : chimie / transport)
- ❖ Modèles empiriques d'interprétation

- ❖ Modèles thermodynamiques

- ❖ Modèles macroscopiques moyennés (ex: complexation de surface)

- ❖ Modélisation moléculaire (dynamique)

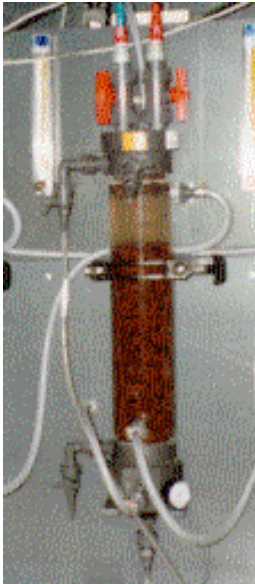
- ❖ Modélisation atomique (DFT)
- ❖ Modélisation cristallographique de DRX



Les échelles d'observation (10^{-10} à 10^3 m)/mesures et différents modèles pour décrire un même système (exemples non exhaustifs)

METALBIOREDUCTION EU 5th FP 2000-2003

- Development of technologies using the activity of sulfate- and metal-reducing bacteria to remove heavy metals (Cr) from ground waters



2 L



20 L



200 L

METALBIOREDUCTION EU 5th FP 2000-03

> Development of technologies using the activity of sulfate- and metal-reducing bacteria to remove metalloids (As) from soils



21 kg



961 kg

brgm
~10000

2000-2017 LOPEREC

> Traitement des eaux d'exhaure de Loperec (Finistère)

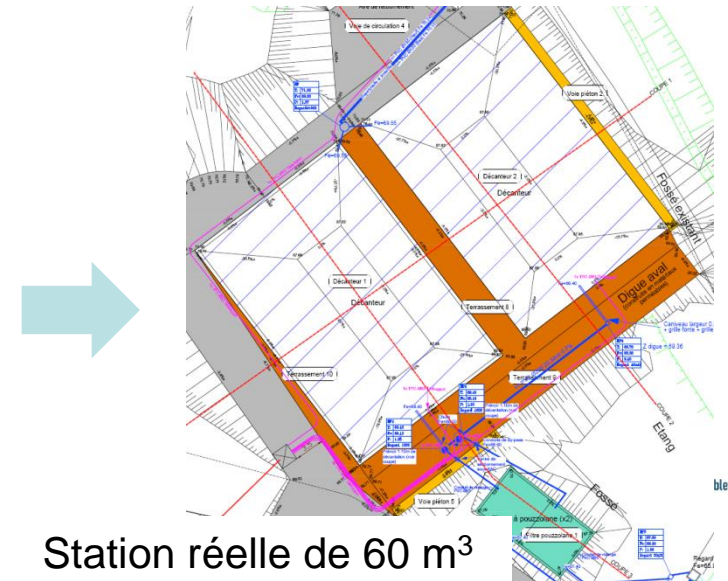


Labo: colonnes de 20 mL

Laboratoire et sur site : colonnes de 2 L



Pilote sur site de 1 m³



Station réelle de 60 m³

~3000000

ANR Eco-industries 2012 - 2016: DECHLORED

> **Dépollution in situ des aquifères impactés en Solvants Chlorés par Dithionite et/ou nFeZV**

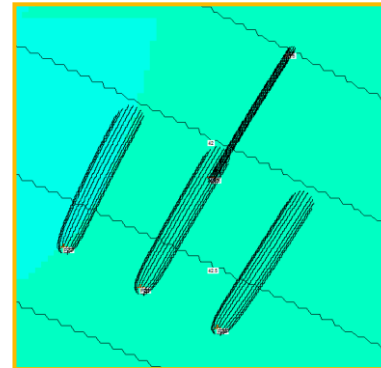
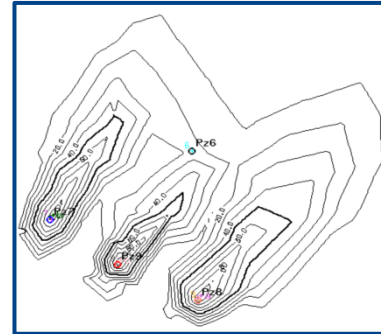
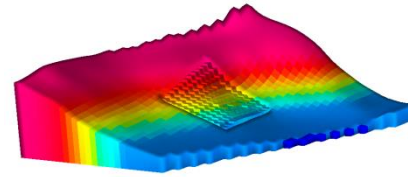


50 mL



8 L

2.000.000

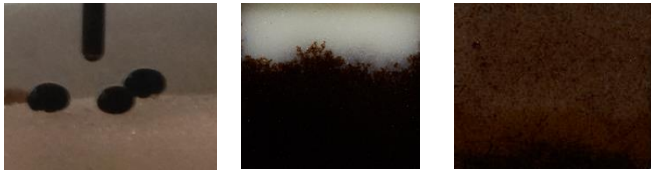


15625 m³



AMI 2013-2017 : SILPHES

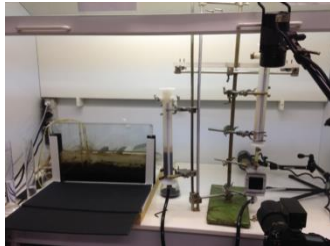
> **Dépollution *in situ* des aquifères impactés en Composés Chlorés par pompage avec soutiens thermique et chimique, injection de mousse, réduction par nFeZV catalysé**



0.05 L



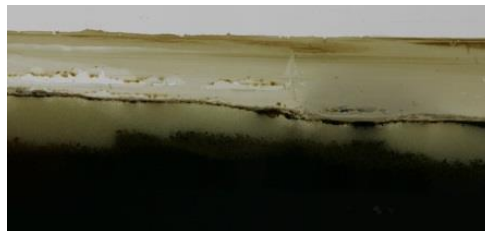
0.5 L



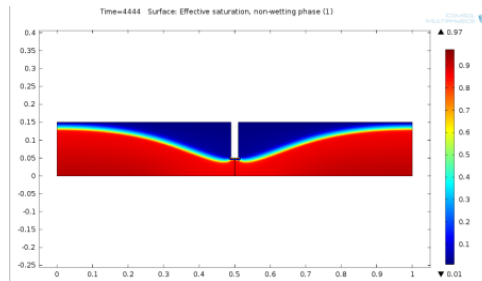
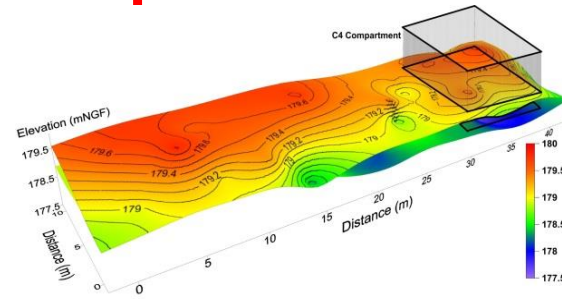
10



10 L



20



1200 m³ (x 4)

120 000

24.000.000

Mots-clés

Activités

- > **Traitabilité des polluants**
- > **Expérimentation empirique Multiéchelle**
- > **Dimensionnement**
- > **Extrapolation**
- > **Démonstration**
- > **Simulation numérique Multi-échelle**

Outils

- > **Analyses diverses**
- > **Monitoring, T°C, pH, Redox, S, O₂**
- > **MS Excel**
- > **PhreeqC**
- > **GDM 7.1 BRGM ou Isatis Géovariances**
- > **Marthe, TRACK, MODFLOW, FEFLOW,**
....

Paramètres

- > **Température**
- > **pH-Redox**
- > **Conductivité, O₂, gaz**
- > **Concentration d'espèce**
- > **Biodisponibilité d'espèce**
- > **Débit**
- > **Porosité**
- > **Perméabilité**
- > **Diffusion**
- > **Dispersivité**
- > **Homogénéité**
- > **Hétérogénéité**
- > **...**

2. Motivation du projet MULTISCALEXPER

- Il 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, 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.
 - De façon beaucoup plus pragmatique, il s'agit de montrer la faisabilité d'une approche intégrée de l'échelle moléculaire à l'échelle de terrain sur un sujet précis qui est la caractérisation du comportement et la traitabilité à grande échelle de polluants dans les milieux poreux.
- **Ce projet permettra de renforcer la thématique :**
 - 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
 - des grandes échelles de façon à pouvoir interagir avec les donneurs d'ordres privés ou publics, 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 nous intéressent plus directement
- **C'est également un secteur "rentable" en termes de visibilité scientifique (publications, projets ANR, UE, ADEME), technique (savoir-faire, brevets,) et économique (contrat d'exploitation avec le privé, vente de la RCI aux sociétés privées, ...).**

2. Objectifs MULTISCALEXPER

- 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 existants (BIOTHERMEX, DECHLORED, BIOPHY, SILPHES, BIOXYVAL, LABBIO, ..) et s'appuieront sur la plateforme PRIME du projet ARD 2020 PIVOTS en cours de construction.
- Il s'agit aussi de définir une méthodologie de dimensionnement des expérimentations multi-échelles, basée sur une approche numérique, qui seront mis en place dans le contexte des plateformes PRIME, LABBIO, PLATIIN.
- L'ambition est également de se positionner sur la thématique «caractérisation du comportement et traitabilité à grande échelle de polluants dans les milieux poreux» grâce à un groupe de travail interne et externe transversal, qui travaille :
 - sur des échelles (de micro à macroscopique) des milieux (sols, eaux souterraines et biosphères correspondantes (écosystèmes)) et des contextes très différents (sites et sols pollués, gestion des ressources en eau,...)
 - mais qui, à travers ce projet s'organise 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).

2. Modules du MULTISCALEXPER



Le projet, prévu sur une durée de 4 ans, s'organise autour de 6 modules interactifs, mis en place afin de répondre aux objectifs fixés et construire l'activité autour de cette thématique.

- **Module 1** : Etat de l'art, inventaires, brevets, rapports, publications, communications (2016 - 2019)
- **Module 2** : Sélection d'une problématique environnementale (site pollué et/ou matrice) pour une étude expérimentale et test de traitabilité en labo (échelle mm-cm) (2016-2017)
- **Module 3** : Tests en colonne (échelle cm-m) (2017)
- **Module 4** : Tests en pilote PRIME PIVOTS (échelle plurimétrique) (2018)
- **Module 5** : Test sur site réel (échelle décamétrique) (2018-2019)
- **Module 6** : Technique de changement d'échelle (2016-2018)

2. Modules du MULTISCALEXPER



Le projet, prévu sur une durée de 4 ans, s'organise autour de 6 modules interactifs, mis en place afin de répondre aux objectifs fixés et construire l'activité autour de cette thématique.

- **Module 1** : Etat de l'art, inventaires, brevets, rapports, publications, communications (2016 - 2019)
- **Module 2** : Sélection d'une problématique environnementale (site pollué et/ou matrice) pour une étude expérimentale et test de traitabilité en labo (échelle mm-cm) (2016-2017)

☐ Module 1 en 2016 : Recensement des compétences « multi-échelles » en *modélisation in silico* et *en expérimentation en labo, Pilote et in situ* à travers les projets menés par le BRGM

☐ Module 2 en 2016: Choix argumenté d'un site d'étude : Le site de l'ancienne cokerie de Moyeuvre Grande (projet BIOXYVAL 2016-2020) avec comme polluants des HAP (dont HAP hétéro-atomiques) sur limons et alluvions de l'Orne ..

☐ 3 thèses CIFRE (avec co-direction et encadrement BRGM) sont associées à ce projet

3. Examen de quelques projets antérieurs et en cours du BRGM sur la problématique des contaminants et de la remédiation des sols et des aquifères sur la base d'un canevas d'inter-comparaison

- **Définition d'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)
- **Etablissement d'une méthodologie de travail multi-échelles et multi-outils** 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 seront explicités pour chaque échelle d'investigation. Les apports de la modélisation seront précisés et détaillés pour chaque étape aux différentes échelles d'investigation.

3. Canevas d'inter-comparaison **général**

> A la base du canevas de comparaison utilisés dans l'examen des projets ont trouve :

- La nature du polluant
- La matrice de propagation du polluant (eau, sol, sédiments...)
- La méthode de traitement utilisée pour la dépollution
- La catégorie expérimentale : précision sur le dispositif expérimental (en dimensions) et la taille de l'échantillon.
- La catégorie de modélisation : échelles de modélisation numérique, écoulement et transport

3. Canevas d'intercomparaison: **expérimentation**

> Principe d'exclusion de projet :

- tout projet portant sur une seule échelle est exclu de l'analyse

> Dans la partie expérimentale, l'analyse se porte sur les essais en :

- **Batch** (0D, systèmes fermés) de 1 mL ou de 10 L
- **Colonne** (1D radial, écoulement 1D) de longueur de 1 cm à 5 m
- **Bac** (2D ou 3D, écoulement latéraux) de 0,1 m à 30 m
- **Pilote** de démonstration *in situ*
- **In situ sur site total** avec ou sans commercialisation du ou des procédés

3. Canevas d'intercomparaison: **modélisation numérique**

> **Principe d'exclusion de projet de l'analyse :**

- tout projet portant sur une seule échelle est exclu de l'analyse même si la modélisation est présente.

> **Principe d'inclusion de modélisation :**

- sont considérés comme modélisations à une échelle, la modélisation hydro-chimique de spéciation, de réaction-batch, de transport monodimensionnel.
- la cartographie de la pollution (2D ou 3D) avec ou sans estimation de la quantité du polluant est admise comme modélisation, mais à une seule échelle.
- Sont admises les modélisations par les outils TRACK, MODFLOW, MARTHE et FEFLOW. Ils permettent grâce à des données hydrodynamiques (vitesse de la nappe, gradient hydraulique,...), de prendre en compte l'hétérogénéité de l'espace poreux et d'évaluer la dispersivité d'un polluant ou d'un réactif de traitement (teneur) dans l'espace poreux.

> **Dans la partie modélisation, l'analyse s'effectue sur :**

- Echelle microscopique (μm), échelle d'un pore (μm au cm)
- Echelle mésoscopique (cm au m)
- Echelle macroscopique (m au km)

3. Résultats d'inter-comparaison: liste projets examinés

- > TRAITABILITE ADEME (4 cas)
- > CHROME INDE IBM-BRGM (1 cas)
- > METALBIOREDUCTION (2 cas)
- > HSBA CHROMSTAB (1 cas)
- > DECHLORED (3 cas)
- > ANR SILPHES (3 cas)
- > GEOTEX (1 cas)
- > LOPEREC (1 cas)
- > LIMULE (1 cas)
- > BIOXYVAL (3 cas)

10 projets, 21 cas

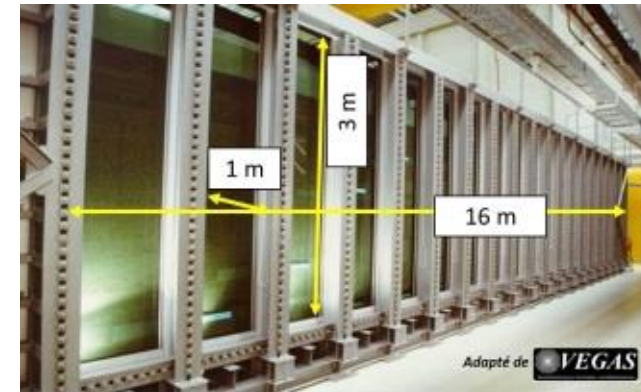
3. Résultats d'inter-comparaison

> En matière d'investigations en dépollution répondant aux diverses problématiques en SSP, on constate que :

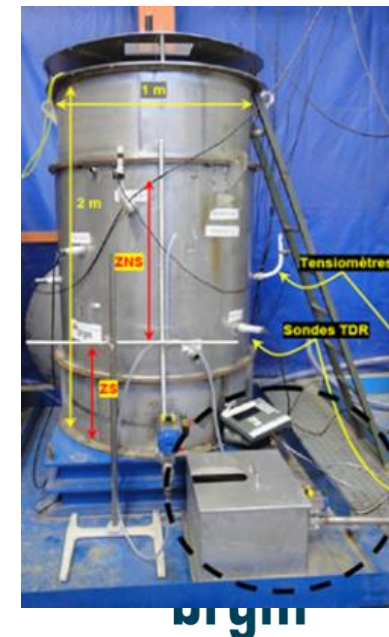
- Les expériences/mesures de laboratoire sont réalisées à différentes échelles dont aucune ne correspond à l'échelle de modélisation du cas réel (site).
- Le plus souvent, deux échelles (labo et colonnes de labo) sont réalisées.
- Une échelle d'investigation est quasi-systématiquement ignorée (métrique).
 - 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.
- La démonstration *in situ* est réalisée quelques fois.
- Un 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.

4.Perspectives 2017: La plateforme PRIME PIVOTS (échelle plurimétrique)

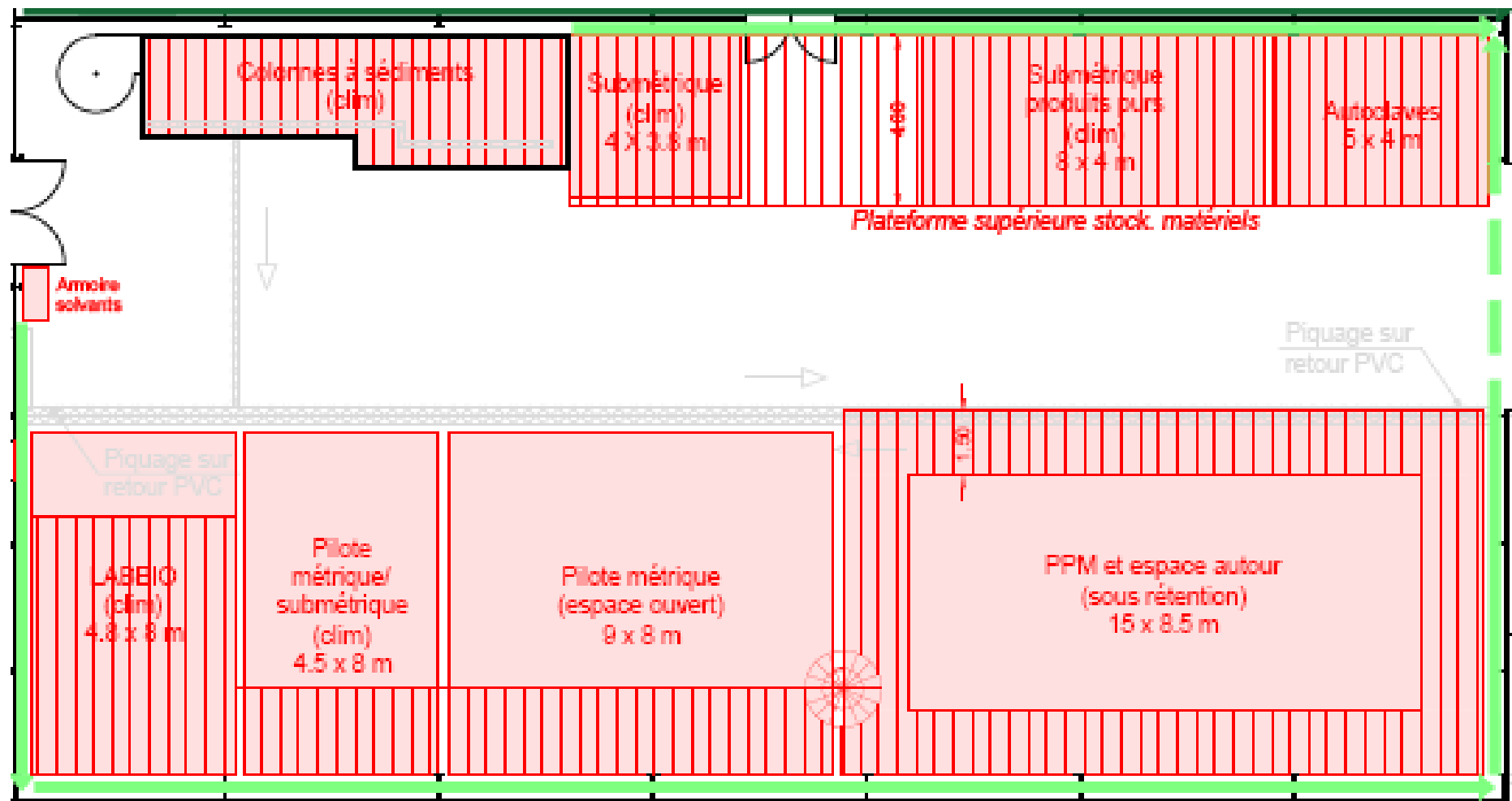
- Contexte et enjeux : monitoring et remédiation eaux, sols et sous-sol, pour une gestion durable
- Pilote expérimental plurimétrique unique en France + pilotes taille métrique + équipements phares. Simulations mécanismes en conditions naturelles ou de chantiers de décontamination



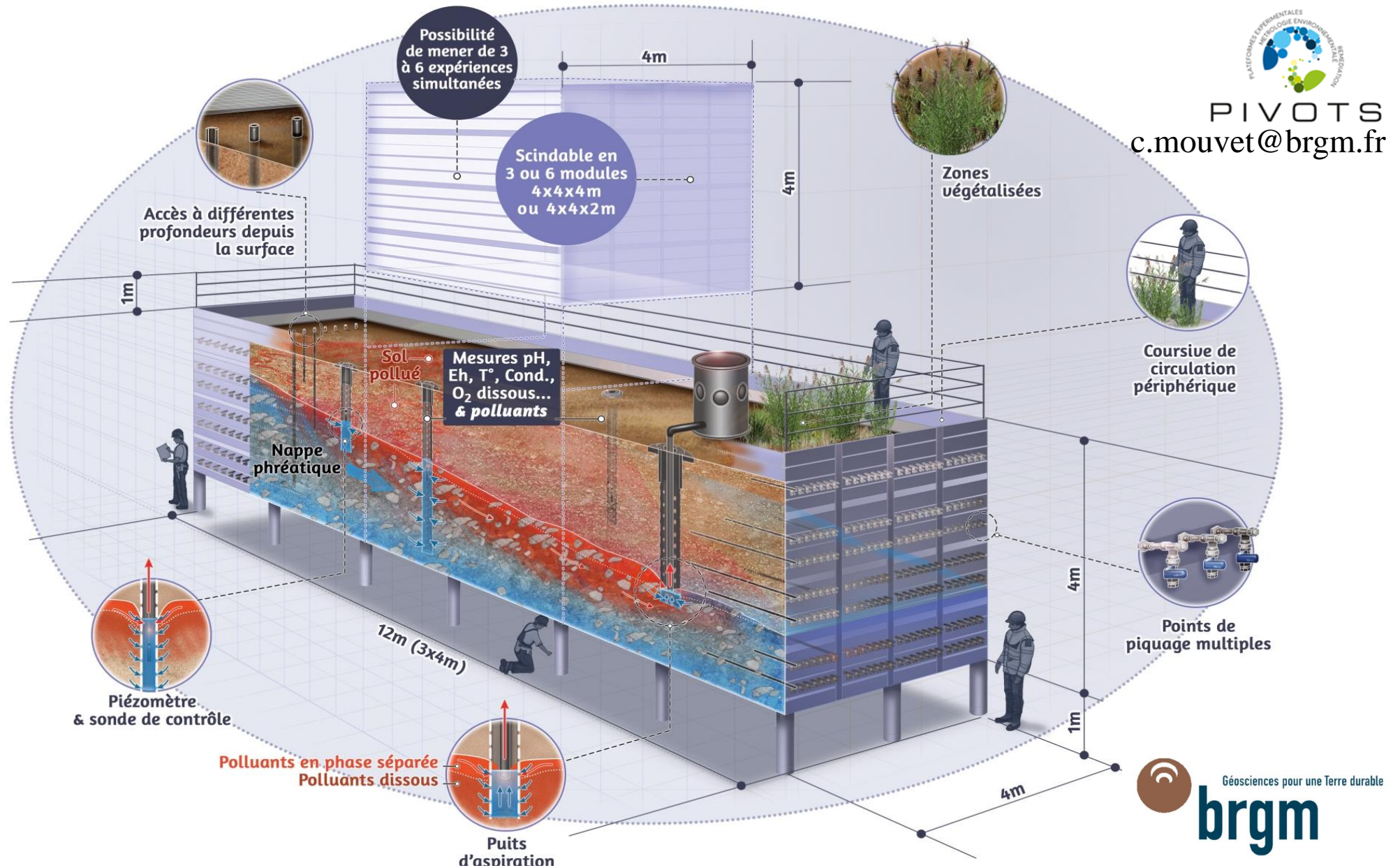
- Validation capteurs et procédés
- Modélisation et intégration à différents niveaux de la chaîne de valeurs (=> éco-services aval)
- Avec l'appui des plateformes et équipements existants au Brgm



4.Perspectives 2017: Plan réaménagement halle G2 PRIME



4.Perspectives 2017: PRIME PIVOTS pilote plurimétrique



PIVOTS
c.mouvet@brgm.fr



Coursive de circulation périphérique



Points de piquage multiples



Géosciences pour une Terre durable

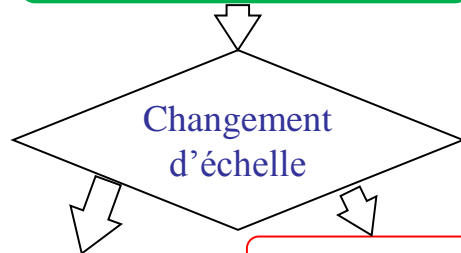
brgm

4.Perspectives 2017:Technique de changement d'échelle

Physique du transport à l'échelle inférieure (connue)

h.davarzani@brgm.fr

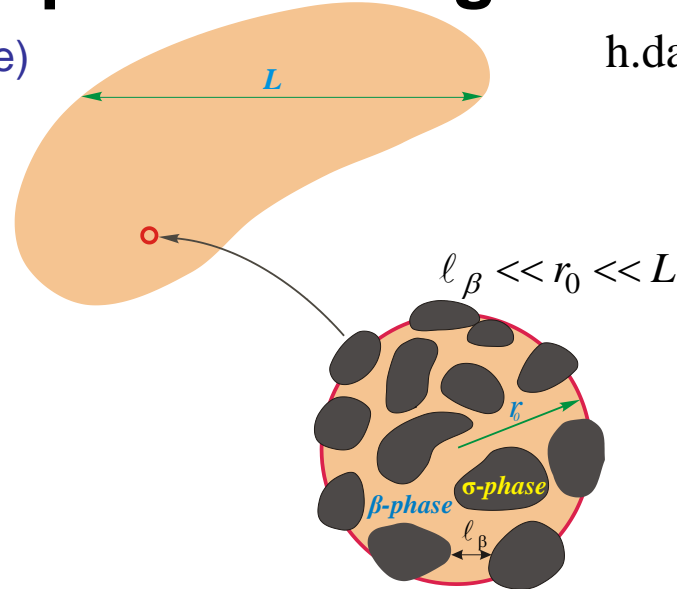
Équations Microscopiques



Équations Macroscopiques

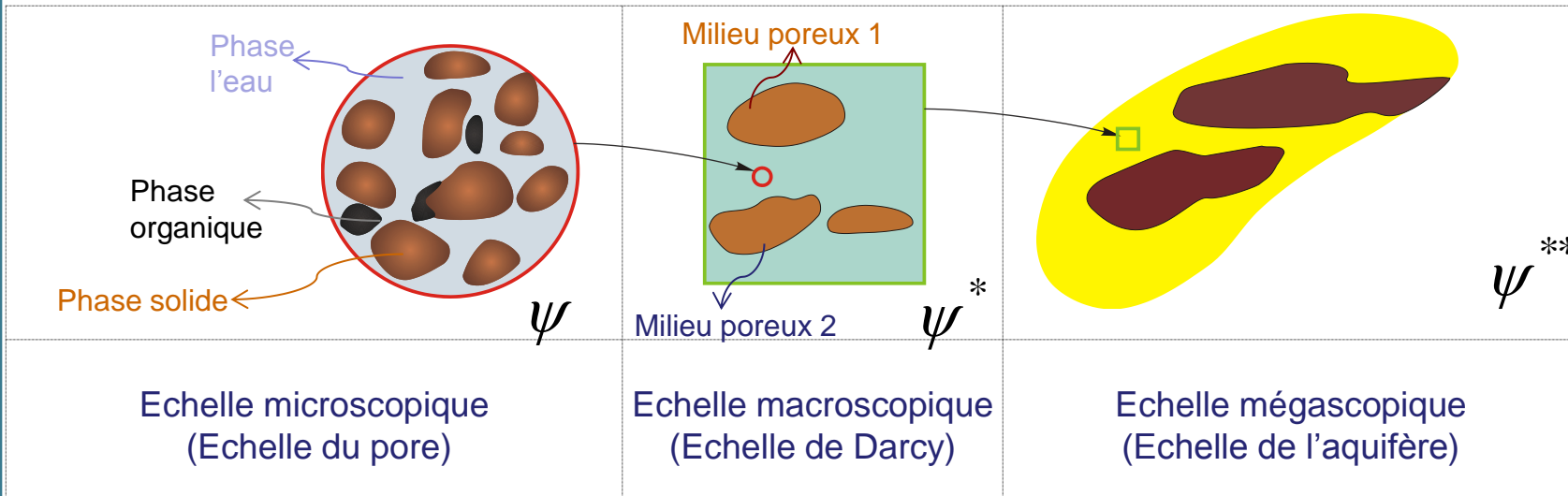
Problème de fermeture

Coefficients effectifs



Physique du transport à l'échelle supérieure

moyenne volumique, $\bar{\psi}$



WHITAKER, S. (1999). The Method of Volume Averaging. Theory and Applications of Transport in Porous Media, Vol. 13. Kluwer Academic Publishers.

QUINTARD, M. and WHITAKER S. (1994). "Transport in ordered and disordered porous media II: Generalized volume averaging." Transport in Porous Media 14, no. 2: 179-206.

5. Conclusions:

- **Définition de canevas d'intercomparaison des contenus des anciens projets** (programme d'expérimentation réalisés, structuration des tâches, retours d'expériences sur les questions de dimensionnement, résultats obtenus à chaque échelle).
- Examen d'une quinzaine des projets antérieurs et en cours sur la problématique des contaminants et de la remédiation des sols et des aquifères.
- **Conclusion en** avantages, inconvénients, redondances et manquements à chaque échelle et type d'approche.
- **Actions pour palier aux manquements (échelle métrique expérimentale et technique de changement multi-échelle).**
- **Etablissement d'une méthodologie de travail multi-échelles et multi-outils.**

Je vous remercie pour votre attention

Thanks you for your attention

E
C
H
E
L
L
E

S
P
A
T
I
A
L
E

kms

km

1 – 100
m

cm
à m

PRAT

atmosphère
UO, CNRS

PESA

échanges sol-atmosphère
INRA, UO, CNRS

PRIME

sol, sous-sol,
eau, sédiment
BRGM

O-ZNS

sol, sous-sol,
eau
UO, CNRS

PERMECA

sous-sol,
géomécanique,
géothermie
Antea group

Plateforme transversale **DECAP** : développement de
capteurs pour l'environnement (CNRS, UO)

Jours à
décennies

années

mois à
année

jour à
mois

E
C
H
E
L
L
E

T
E
M
P
O
R
E
L
E

Géosciences pour une Terre durable

brgm