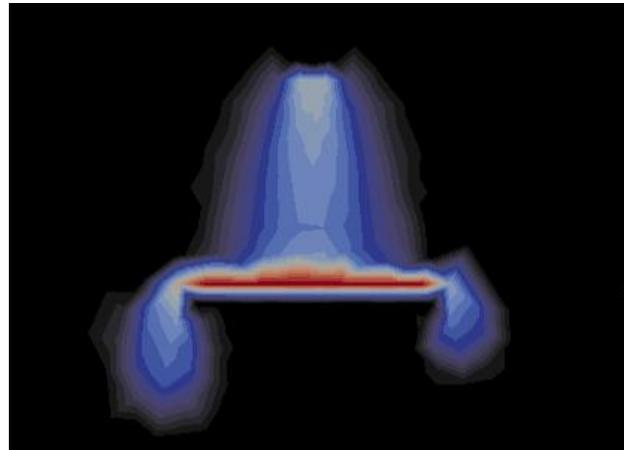


CubicM, un code de calcul pour simuler le devenir de polluants organiques dans le milieu souterrain

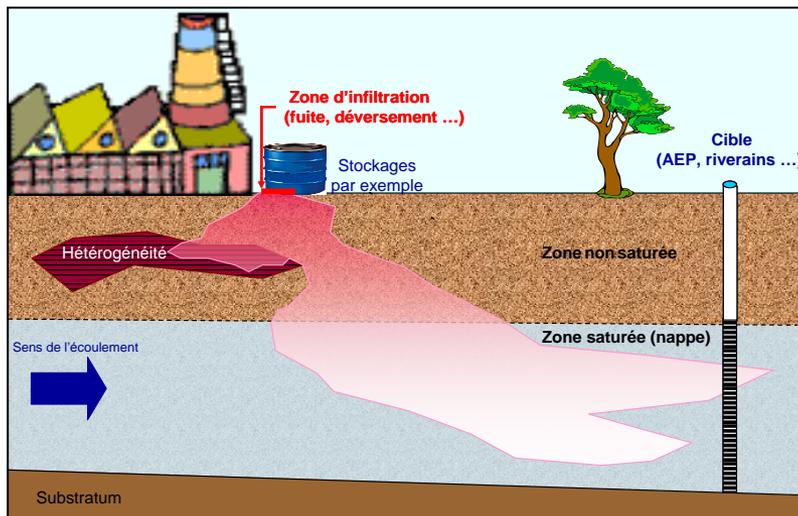


J. Chastanet, J.-M. Côme, Raphael Di Chiara Roupert, Gerhard Schafer, Michel Quintard

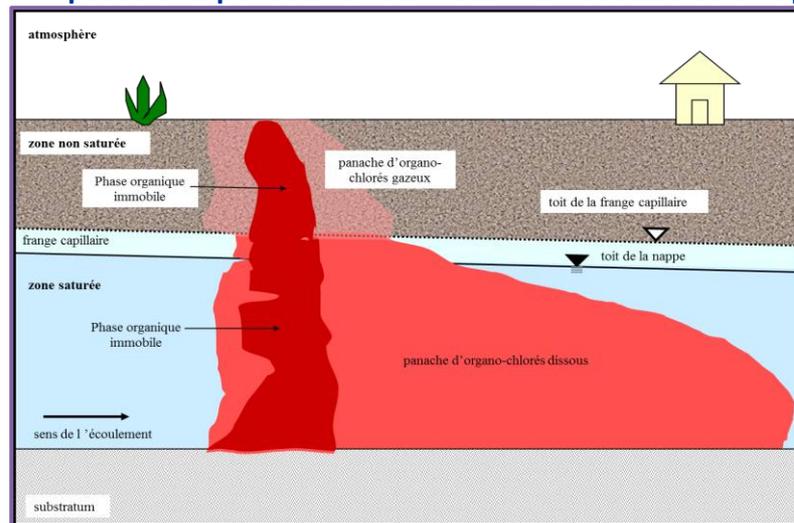
Contexte : la modélisation des pollutions organiques

- Triple objectif lorsque des codes de calcul sont mis en œuvre :
 - quantifier des mécanismes qui régissent la migration de pollution dans le milieu souterrain
 - Prédire le devenir des pollutions
 - Dimensionner une technique de dépollution
- Un constat : manque d'outils pour simuler les pollutions organiques

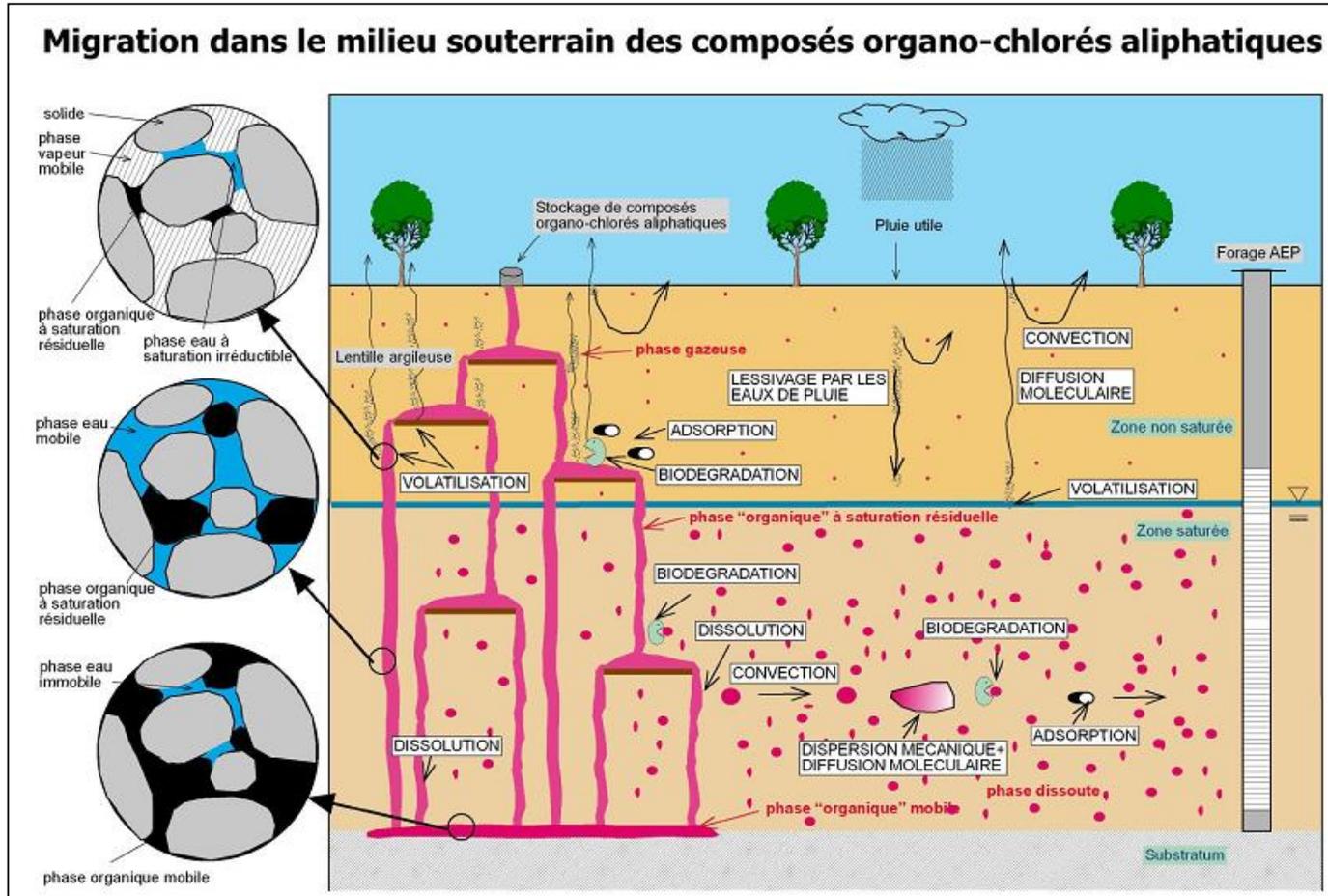
Déversement accidentel d'un polluant à la surface



Impact d'une pollution ancienne sur l'air des sols et la nappe



Mécanismes participant au devenir de polluants (DNAPL) dans les sols



Guide méthodologique "atténuation naturelle dans les aquifères", Projet R&D MACAOH (2001-2006)

www.ademe.fr

Objectif du projet

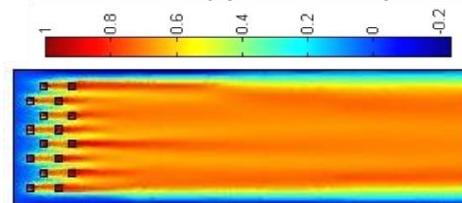
Développer un outil de calcul pour simuler le devenir de polluants organiques dans le milieu souterrain en prenant en compte l'ensemble des mécanismes physiques, chimiques et biologiques en jeu

CubicM : un code multiphase, multicomponent & multiprocess

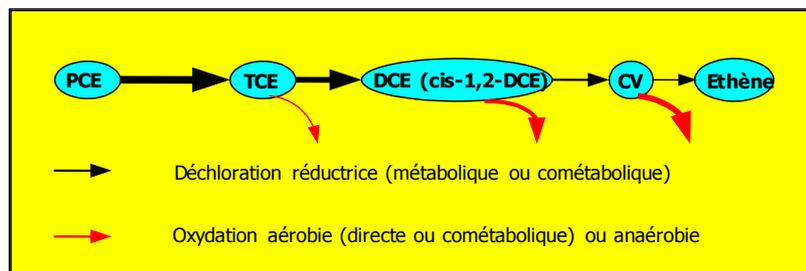
- Écoulements multiphasiques
- Transport de polluant dans l'eau, la phase organique et l'air des sols
- Dissolution, volatilisation, adsorption
- Réactions chimiques & biologiques

Avec des fonctionnalités avancées pour certains mécanismes:

- Diffusion multiconstituants dans l'air des sols : interaction des polluants dans le cas d'une pollution multiple
- Échanges entre phases en non équilibre (effets cinétique dus à l'hétérogénéité des milieux/pollution)

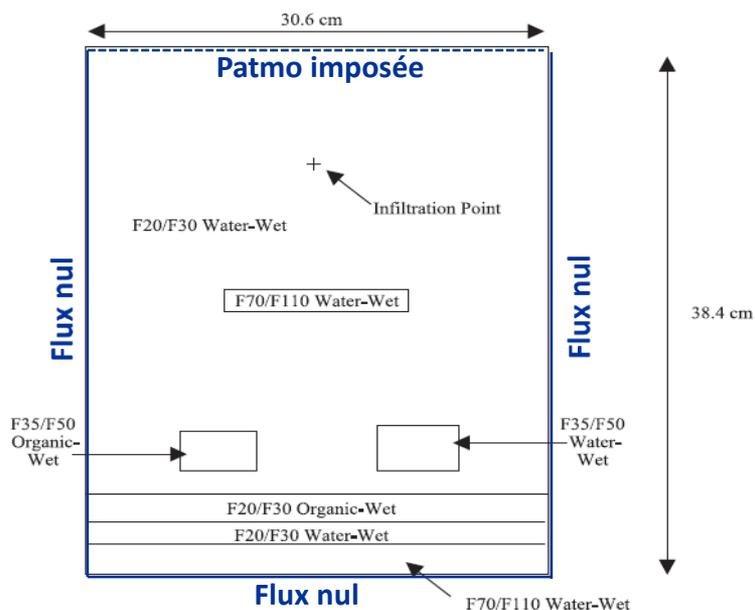


- Des modules de biodégradation dédiés à des familles de polluants



Cas test écoulement diphasique (eau / NAPL)

Situation : modélisation d'un déversement accidentel d'hydrocarbure lourd dans une nappe



Expérience de O'Carroll et al (2004)
Injection de NAPL (PCE pur) dans un bac rempli de sable saturé en eau
[expérience et simulation avec un code propriétaire]

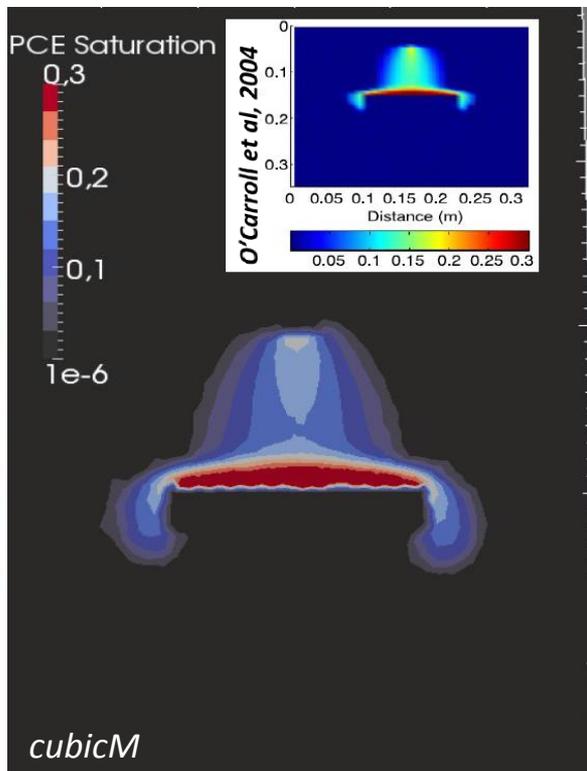
Mise en œuvre avec CubicM:

- Écoulement diphasique (Pression de l'eau, saturation en NAPL)
- Formulation faiblement compressible (entièrement couplée, méthode des lignes)

	Kxx (m ²)	Kyy (m ²)	Kxy (m ²)	Porosité (-)	Pd (Pa)	lambda (-)
F20/F30	4,03e-10	4,03e-10	0	0.3227	532	2.95
F70/F110	4.69E-12	4.69E-12	0	0.3227	3774	5.94
F35/F50 (organic)	6,38e-11	6,38e-11	0	0.3227	200	3.44
F35/F50 (water-wet)	6,38e-11	6,38e-11	0	0.3227	1377	3.44

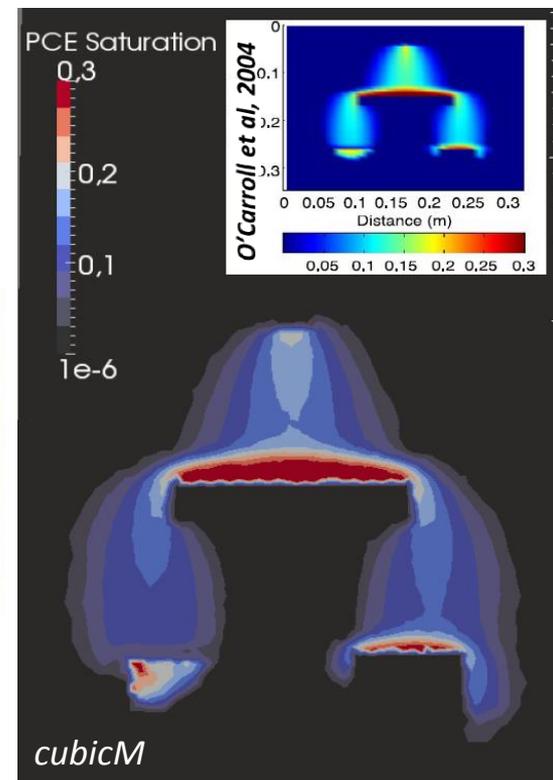
Cas test écoulement diphasique (eau / NAPL)

À 10 min



Expérience
(O'Carroll et al, 2004)

À 20 min



Expérience
(O'Carroll et al, 2004)

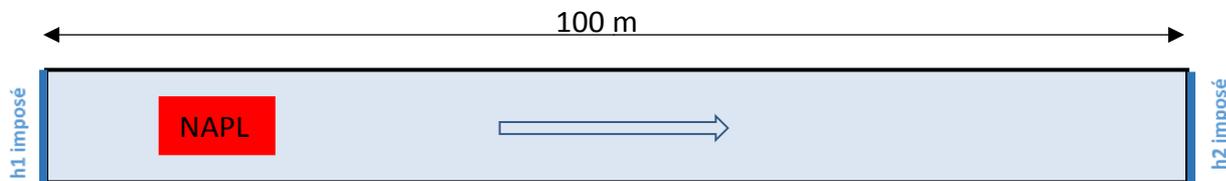
Concordance des 2 simulations, effet du maillage visible

Vitesse de l'infiltration surestimée dans les simulations par rapport aux expériences

Conclusion : bonne cohérence de cubicM avec l'expérience et un autre code

Cas test dissolution

Situation : NAPL à saturation résiduelle dans un aquifère (zone saturée) et impact des composés dissous sur la nappe

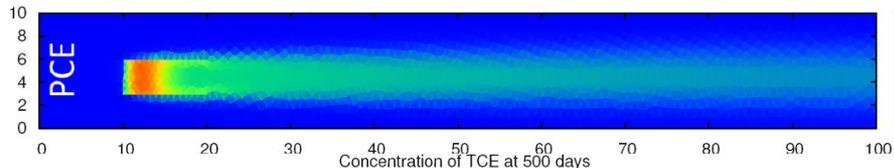


perméabilité $5 \cdot 10^{-3}$ m/s
porosité 30%
Caractéristique du NAPL :

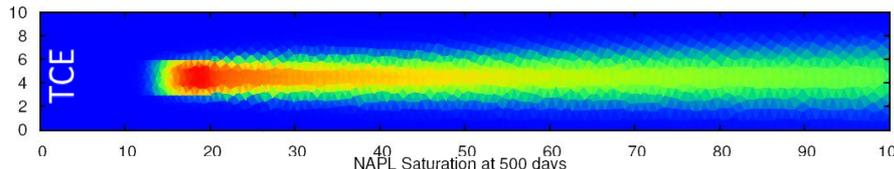
- 35% de PCE, 65% de TCE
- Saturation 10%

CubicM

Concentration of PCE at 500 days



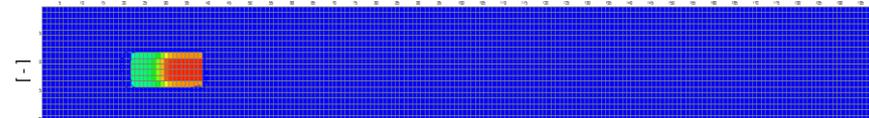
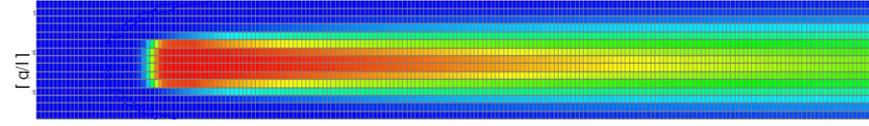
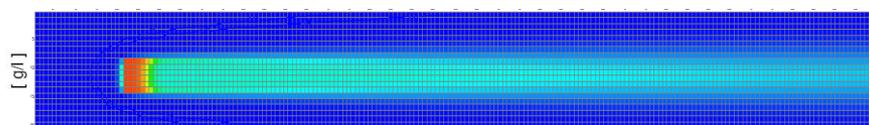
Concentration of TCE at 500 days



NAPL Saturation at 500 days



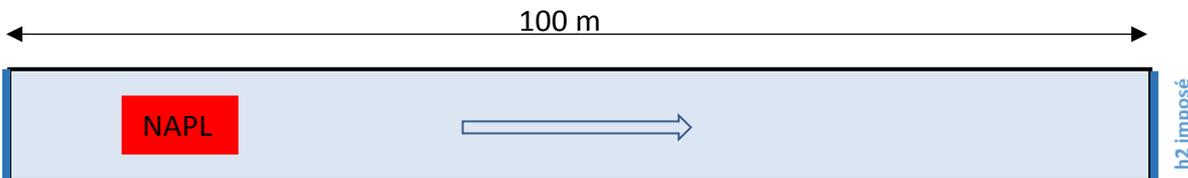
Modflow-Surfact



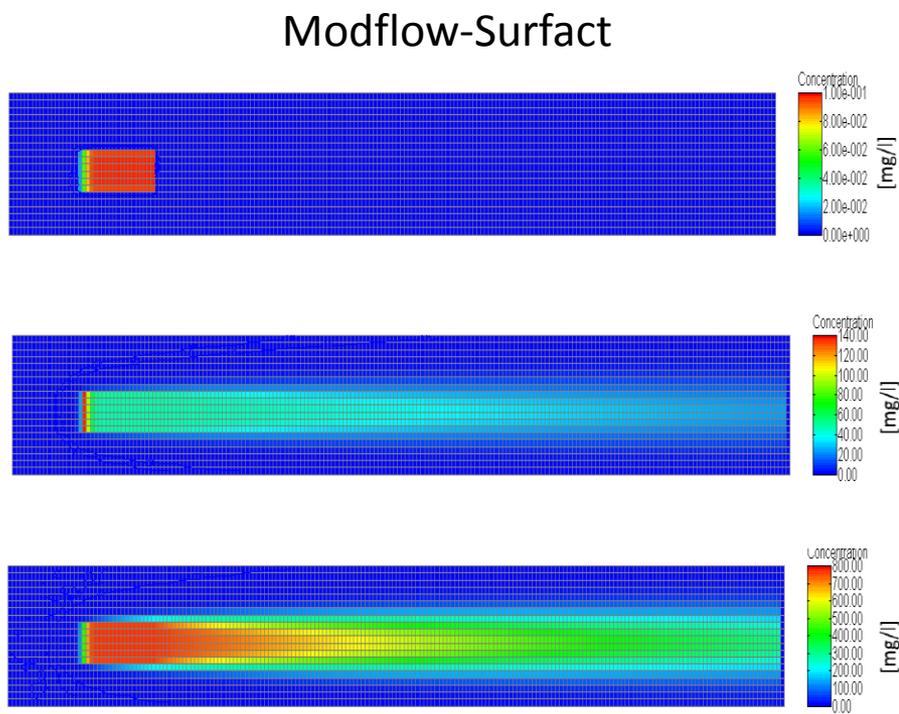
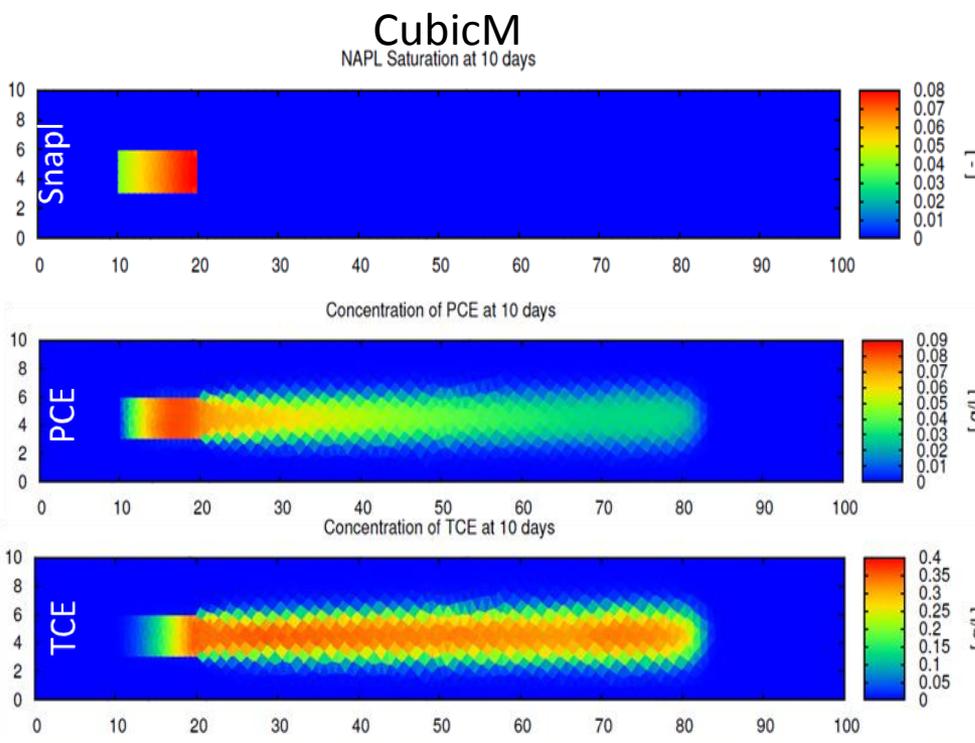
Conclusion : bonne cohérence de cubicM avec Modflow-Surfact pour le mécanisme de dissolution

Cas test dissolution et biodégradation

Situation : NAPL à saturation résiduelle dans un aquifère (zone saturée) et impact des composés dissous sur la nappe en prenant en compte la biodégradation (chloroéthènes)



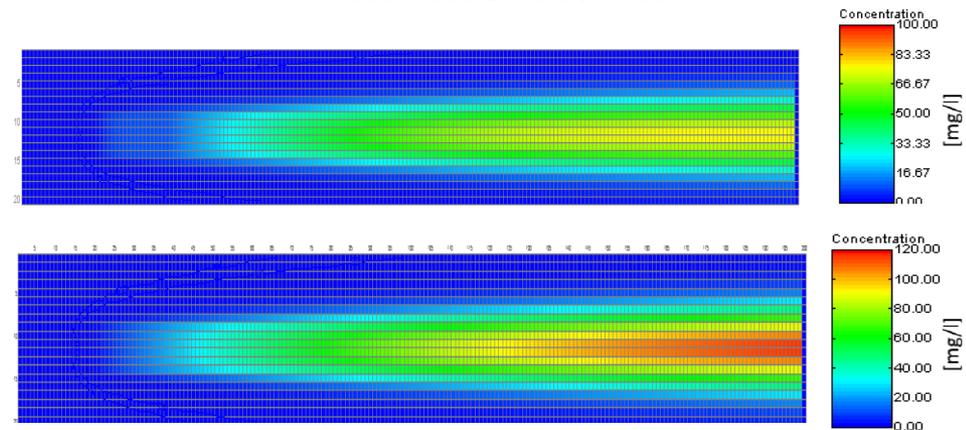
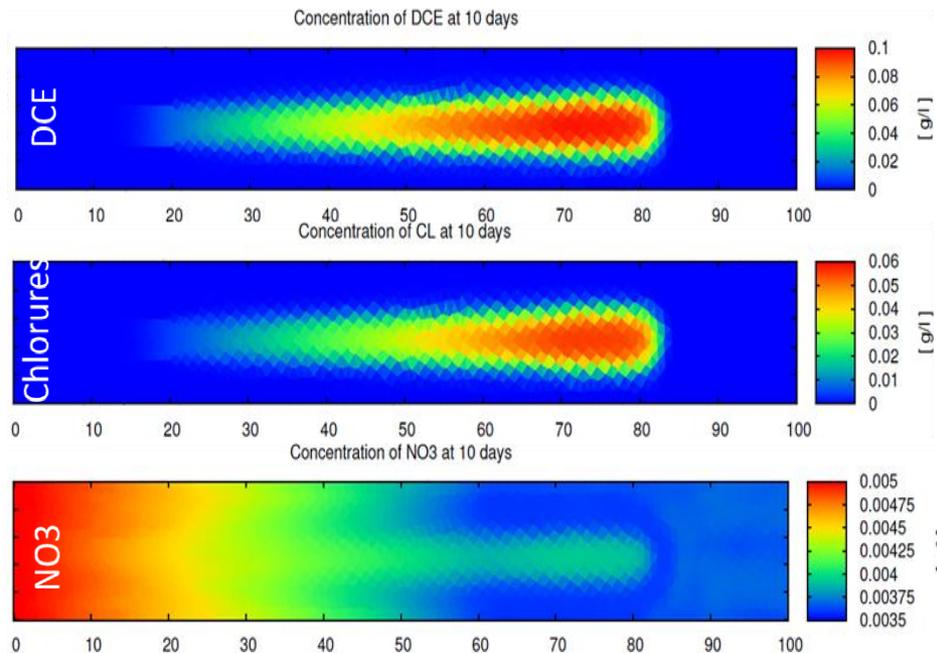
perméabilité 5.10^{-3} m/s
 porosité 30%
 Caractéristique du NAPL :
 • 35% de PCE, 65% de TCE
 • Saturation 10%



Cas test dissolution et biodégradation des chloroéthènes

CubicM

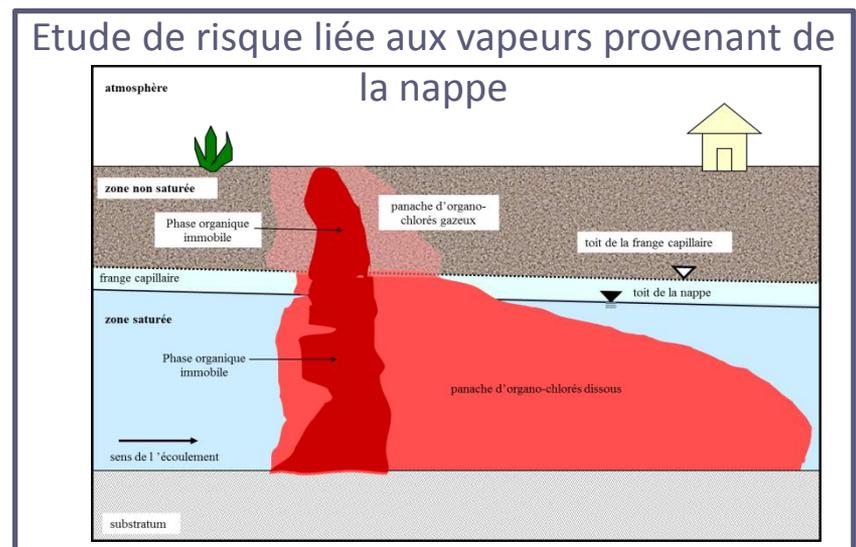
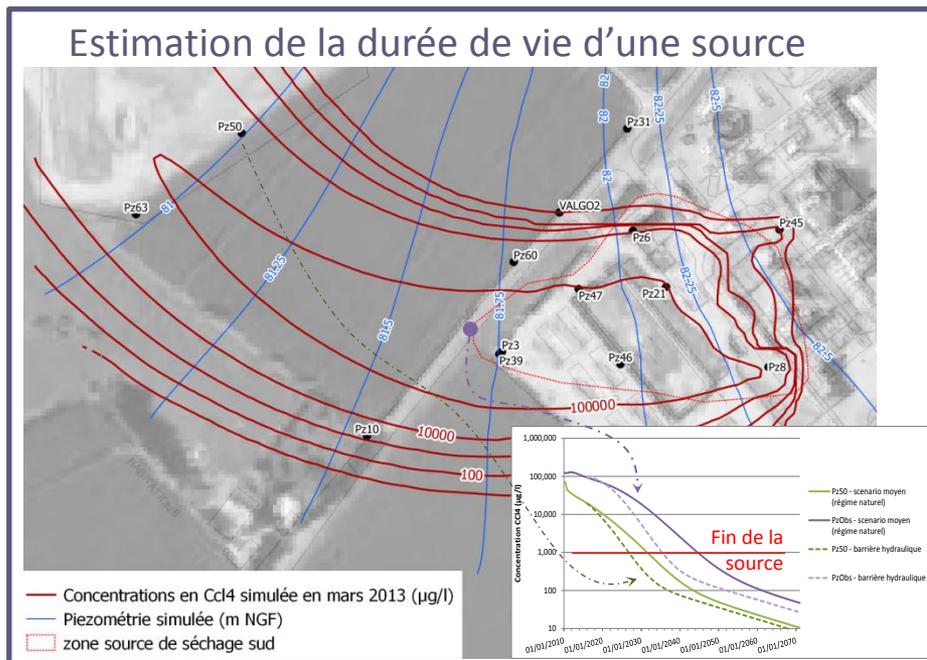
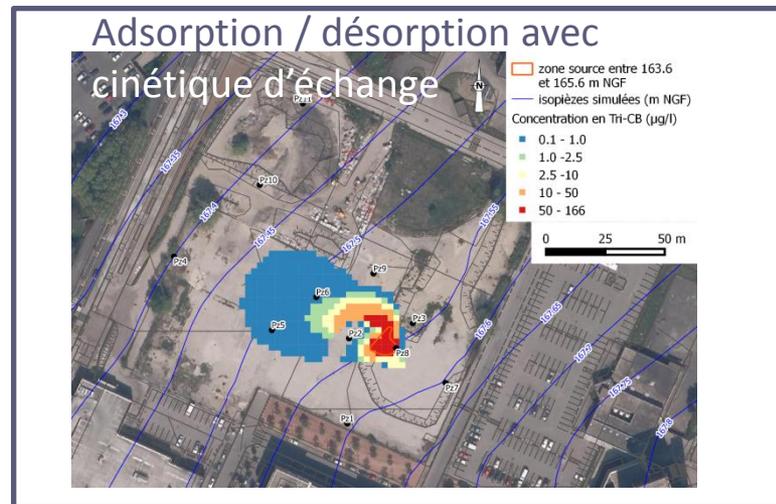
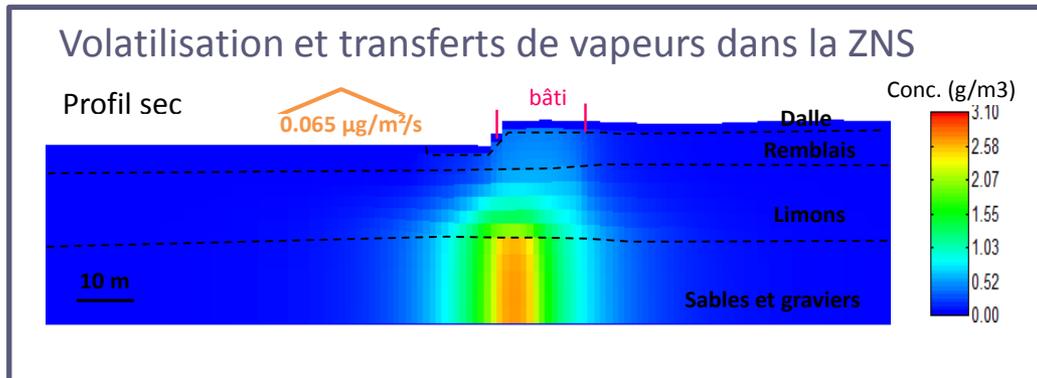
Modflow-Surfact



Condition redox homogène

Conclusion : écart de prédiction lorsque différents formalismes de biodégradation sont considérés

Perspectives : développements à venir et situations à tester



Merci de votre attention

