

# Résumé

---

La bio-remédiation *in situ* est une technique de réhabilitation couramment utilisée pour le traitement des sols et des nappes contaminés, notamment par les hydrocarbures pétroliers. Si démontrer la pertinence de ce type de traitement constitue un préalable incontournable pour chacun des sites où il est mis en œuvre, l'efficacité du traitement dépend de ses conditions de mise en œuvre dans le contexte spécifique d'un site. Le suivi et le contrôle des différents processus qui gouvernent les phénomènes de biodégradation est complexe, et leur optimisation constitue un élément clé de la réussite du traitement tant au plan technique qu'économique.

La démarche générale du travail de thèse porte sur le développement d'une méthodologie permettant d'employer la modélisation dans une démarche de gestion (au sens des textes de 2007) d'un site contaminé par des hydrocarbures pétroliers traité par biodégradation *in situ*. L'originalité du travail de thèse porte sur l'utilisation de la modélisation comme outil de compréhension des mécanismes et d'aide à la décision à chaque étape du traitement :

- Dimensionnement de l'installation : définir la meilleure option envisageable.
- Suivi de l'efficacité du traitement : optimiser le procédé.
- Prédiction et justification de l'arrêt du traitement : sécuriser en termes de garantie de résultat.

Les données d'un site d'étude servent de support dans la définition de l'approche méthodologique de modélisation. A chaque étape d'un projet de bio-remédiation *in situ* (depuis sa conception et son dimensionnement jusqu'à la réception des travaux, en passant par son monitoring, et son optimisation), peut être associée une étape de modélisation qui fera appel à des moyens plus ou moins sophistiqués avec des exigences de précision variables.

Le premier outil développé concerne l'estimation des incertitudes prédictives dans les modèles mis en œuvre. Cet aspect est fondamental, dès lors que l'on souhaite utiliser la modélisation dans un processus d'aide à la décision. Il peut être utilisé dans la phase de dimensionnement du procédé et au stade de la prédiction de l'efficacité du traitement. Les processus de bio-remédiation *in situ* impliquent des relations complexes et incertaines entre la biomasse, les contaminants et les mesures de contrôle appropriées. Prévoir la performance du traitement (en termes de réduction du flux et/ou de la masse) constitue un défi en raison des incertitudes liées aux propriétés du milieu, de la source et aux incertitudes liées aux mécanismes de bio-remédiation. L'étude de la contribution des incertitudes paramétriques dans la prédiction de la performance du traitement est réalisée avec la méthode du « Null Space Monte Carlo » (NSMC) implémentée dans l'outil PEST.

Le second outil utilisé concerne l'optimisation du design et/ou du monitoring d'un procédé de bio-traitement *in situ*. Dans ce contexte, deux objectifs peuvent être envisagés à savoir la réduction du flux de contaminants d'une part, et l'élimination de la masse à la zone source d'autre part. L'outil utilisé est un algorithme d'optimisation mathématique dénommé "Particle Swarm Optimisation" (PSO). Le choix de la fonction objectif à optimiser est particulièrement important et s'avère lié au comportement spécifique hydrogéochimique du site considéré.

Cette étude montre que les outils NSMC et PSO s'avèrent appropriés dans l'utilisation de modèles de transport réactif dans la gestion environnementale. Les temps de calcul de ces modèles hautement paramétrés et non linéaires limitent encore l'utilisation de la modélisation comme outil d'aide à la

décision. Malgré ces limites, l'approche proposée pour gérer la bio-remédiation *in situ* des eaux souterraines sur site réel peut être efficace pour fournir un soutien dans la gestion du traitement d'une pollution, étendant ainsi le domaine d'application de la modélisation numérique. Cette approche permet aussi de mettre en évidence des difficultés dues aux spécificités du site ou à la technique même de traitement choisie, permettant d'alerter à temps les gestionnaires.

Mots clés : biodégradation *in situ*, hydrocarbures pétroliers, modélisation, analyse des incertitudes, optimisation des procédés.

# Abstract

---

In-situ bioremediation is a commonly used remediation technology to clean up the subsurface of petroleum-contaminated sites. Although demonstrating the relevance of this type of treatment is an essential prerequisite for each site where it is implemented, the effectiveness of the treatment depends on its implementation conditions in the site-specific context. The monitoring and control of different processes that govern biodegradation phenomena is complex, and optimization is a key element of successful treatment both technically and economically.

The general approach of the thesis is the development of a methodology for using modelling in a management approach (as defined in the French regulatory text) of petroleum-contaminated site treated by *in situ* biodegradation. The work focuses on the use of modelling as a tool for understanding mechanisms and for decision support at every stage of treatment:

- System design: defining the best possible option.
- Monitoring the effectiveness of treatment: process optimization.
- Prediction and justification of stopping treatment: analysis of the uncertainty on the treatment result.

Data from two study sites are used to define the modelling methodology. At each stage of the bioremediation project (design, conception, monitoring and optimization) may be associated a modelling stage that will be more or less sophisticated depending on accuracy requirements.

The first tool developed involved predictive uncertainty analysis, which is crucial when modelling is used as a decision support tool, and can be used at the design process step or for predicting the effectiveness of treatment. The process of in-situ bioremediation involves complex and uncertain relationships among biomass, contaminants and appropriate control actions. Forecasting remedial performance (in terms of flux and mass reduction) is a challenge due to uncertainties associated with (i) the medium and source properties and (ii) the efficiency of concentration reducing mechanisms. Parametric uncertainty contributions involved in forecasting treatment performance is carried out with the "Null-Space Monte Carlo" (NSMC) method implemented in the PEST tool.

The second tool relates design and / or monitoring optimization of the bio-treatment method. In this context, two purposes can be considered: the reduction of contaminants flux or mass in the source zone. The tool used is a mathematical optimization algorithm called "Particle Swarm Optimization" (PSO). The choice of the objective function to be optimized is particularly important and appears to be related to hydrogeochemical site-specific behavior.

This study showed that the NSMC and PSO methods are suitable tools for an efficient use reactive transport models in environmental management. The computation time of these highly parameterized and nonlinear models still limit the use of modelling as a decision support tool. Despite these limitations, the proposed approach for managing the bioremediation in-situ groundwater on actual site can be effective to provide support in managing the treatment of pollution, extending the field of application of numerical modelling. This approach also allows to highlight difficulties due to site-specific behavior or to the treatment technique applied, and to inform decision support managers in consequence.

Key words: in situ biodegradation, petroleum hydrocarbons, modelling, uncertainty analysis, optimization for system design