

Modéliser pour comprendre, modéliser pour prévoir : apports de la modélisation pour l'évaluation environnementale des filières de gestion de déchets

Olivier Peyronnard, Denise Blanc, Pierre Moszkowicz

Laboratoire de génie civil et d'ingénierie environnementale
Institut national des sciences appliquées (INSA) de Lyon

Mel : olivier.peyronnard@uqat.ca

Résumé

La modélisation est un outil indispensable pour l'évaluation environnementale des filières de gestion de déchets, notamment lorsqu'il s'agit de les recycler ou de les réutiliser en tant que matières premières. L'objectif de prédiction des flux de polluants et des impacts environnementaux butte sur la difficulté, voire l'impossibilité, de valider les modèles élaborés. Pour dépasser cette question de la fiabilité de la simulation prédictive, une nouvelle approche de l'évaluation environnementale est proposée. Il s'agit de déterminer, à partir d'une connaissance fine du comportement des matériaux, les conditions pour lesquelles les polluants sont mobilisés. La modélisation peut alors être utilisée à deux niveaux : « modéliser pour comprendre » et « modéliser pour prévoir ». « Modéliser pour comprendre » consiste à utiliser la modélisation et la simulation numérique pour valider les hypothèses formulées à partir des observations expérimentales et ainsi identifier et comprendre les mécanismes contrôlant la rétention/mobilisation des polluants. « Modéliser pour prévoir » consiste alors à explorer par simulation numérique le comportement du déchet confronté à une multitude de conditions d'exposition afin de déterminer celles n'induisant qu'un risque limité de mobilisation des polluants. Les scénarios de gestion éco-compatibles peuvent alors être proposés.

Introduction

Dans de nombreux domaines, la prise de décisions nécessite une estimation des risques encourus. La « modélisation prédictive » est ainsi devenue un outil incontournable pour évaluer les probabilités d'occurrence d'évènements futurs. Dans chaque domaine, les enjeux, les méthodes et le statut de la modélisation sont spécifiques mais une exigence est commune : garantir, au mieux, la fiabilité des prévisions obtenues afin de maîtriser les conséquences des décisions engagées.

Suites aux nombreuses crises environnementales et sanitaires imputables à l'homme et aux « progrès » de la science (Bhopal, Seveso, Tchernobyl, Three Miles Island, vache folle...), le citoyen exige, au nom du principe de précaution, d'être

prémuni de tout risque pour l'environnement ou pour la santé.

En réponse à cette demande sociétale, diverses méthodologies d'évaluation des risques ont été proposées. Ces différentes méthodologies, toutes plus ou moins basées sur la méthodologie élaborée par l'US-EPA (Guidelines for ecological risk assessment, 1998), définissent le risque comme le produit du danger par l'exposition (risque = danger * exposition) :

— Danger : effet potentiel des stressseurs (polluants, nuisances...) émis par l'activité considérée sur les cibles (organismes vivants, écosystèmes...). Le danger est souvent évalué par des essais de toxicité ou d'écotoxicité (courbe dose-effet, dose létale...).

— Exposition : flux de stressseurs reçus par les cibles. L'exposition des cibles aux stressseurs nécessite une estimation de l'émission des stressseurs et de leur dispersion dans l'environnement.

Plus que toute activité anthropique, la gestion des déchets présente des risques pour l'environnement et la santé humaine. Le choix d'une filière de traitement ou de valorisation d'un déchet devrait donc être motivé par une estimation de ses risques pour l'environnement. En France et en Europe, l'évaluation des risques liés au stockage ou à la valorisation des résidus minéraux est encadrée par la norme NF-EN 12-920 (AFNOR, 2006) et la méthodologie de l'écocompatibilité de l'ADEME (2002). Ces méthodes préconisent un recours à la modélisation pour caractériser l'exposition des milieux récepteurs aux flux de polluants issus des déchets. Cette modélisation doit permettre d'extrapoler les résultats d'essais de laboratoire afin de prédire les flux de polluants émis, depuis l'ouvrage contenant les déchets vers l'environnement, dans les conditions réelles d'exposition.

Cette approche, bien qu'intéressante puisque censée permettre une gestion des déchets appropriée et respectueuse de l'environnement, montre néanmoins des limites. En effet, les résultats obtenus à l'échelle pilote ou terrain divergent généralement des prédictions extrapolées à partir des essais de laboratoire (Twardowska *et al*, 2002 ;

Kylefors *et al*, 2003, Lidelöw et Lagerkvist, 2007 ou van der Sloot *et al*, 2007). Pour être fiable, une prédiction nécessiterait une connaissance fine de l'ensemble des mécanismes en jeu (réactivité du déchet et mécanismes de transfert de matière), de leurs paramètres d'influence et des conditions particulières du scénario envisagé. Compte tenu de la complexité des phénomènes, une telle maîtrise est difficilement accessible. Il peut, alors, paraître quelque peu utopique de vouloir prédire ce comportement.

Ce papier présente quelques pistes de réflexions sur le recours à la modélisation prédictive dans les études d'évaluations des risques pour l'environnement. Pour commencer, nous nous pencherons sur la difficulté de valider un modèle prédictif et, ainsi, sur l'impossibilité de « Modéliser pour prédire » au sens de la prédiction d'évènements futurs. Nous aborderons ensuite la modélisation dans une optique d'apport de connaissance : « Modéliser pour comprendre ». Enfin, nous traiterons de l'utilisation de la modélisation et de la simulation numérique pour définir des scénarios écocompatibles : « Modéliser pour prévoir », au sens d'estimer les conséquences potentielles (Peyronnard, 2008).

Modélisation prédictive : quelle validation ?

L'évaluation environnementale des filières de gestion des déchets implique généralement une modélisation destinée à prédire les flux de polluants libérés par les déchets (ADEME, 2002 ; AFNOR, 2006). Les décisions basées sur ces prédictions ne seront pertinentes que si celles-ci sont fiables, donc obtenues avec des modèles valides. La validation consiste à vérifier l'aptitude du modèle à simuler convenablement le comportement du déchet pour les conditions du scénario envisagé. Cette validation se fait souvent en comparant les résultats expérimentaux et de simulation d'un essai intégral (ADEME, 2002 ; AFNOR, 2006). Cet essai, généralement réalisé à l'échelle pilote (case lysimétrique, par ex.), permet une modélisation physique du scénario envisagé.

La nécessité de cette validation des modèles comportementaux ne peut être contestée dans une optique prédictive. Néanmoins, on peut se demander si cette validation, par comparaison entre résultats expérimentaux et simulés, est pertinente, ou plutôt, quelles sont les conditions à réunir pour qu'une telle validation puisse être pertinente.

La validation d'un modèle vise à vérifier l'aptitude de ce dernier à représenter le comportement du déchet étudié dans le scénario envisagé, à court, moyen et long termes. Les conditions d'exposition de l'essai intégral doivent donc être le plus réalistes possible (agent lixiviant, mode de contact lixiviant/déchet...), mais également permettre une altération des matrices suffisamment rapide pour simuler les évolutions à long terme. La notion de temps est, ici, particulièrement importante. En effet, un modèle adapté pour représenter le comportement à court terme ne l'est pas forcément pour représenter les évolutions à long terme. Lors de la validation, le modélisateur doit donc être en mesure de juger si les convergences, ou les divergences,

entre résultats simulés et expérimentaux, sont représentatives du comportement à court, moyen et long termes (plusieurs dizaines d'années).

Par exemple, pour un déchet stabilisé/solidifié par un liant hydraulique, la dissolution des hydrates cimentaires et/ou la carbonatation de la matrice entraîne(nt) un abaissement du pH de l'eau des pores. Le modèle chimique élaboré pour représenter la réactivité du matériau est donc généralement construit de manière à représenter les mécanismes contrôlant l'évolution du pH dans la matrice minérale (réactions de dissolution/précipitation essentiellement) et ceux contrôlant la rétention/solubilisation des polluants (dissolution/précipitation, sorption...). Les essais destinés à la validation du modèle comportemental doivent donc induire une altération suffisante pour vérifier l'aptitude du modèle chimique à reproduire la diminution du pH et le relargage des polluants au cours de l'attaque acide. La difficulté pour ce type de matériaux réside dans le fait que leur forte capacité de neutralisation acide impose de conduire les essais réalisés à une échelle importante (pilote) sur de longues périodes pour induire une baisse conséquente du pH. Ce problème peut être contourné en travaillant avec un lixiviant acide, mais on perd alors en réalisme.

La validation d'un modèle n'est pertinente que si elle permet de juger de l'aptitude du modèle à représenter le comportement dans des conditions d'exposition réalistes. Compte tenu de la complexité des phénomènes mis en jeu et de la variabilité des caractéristiques et des conditions d'expositions d'une situation réelle de valorisation ou de stockage de déchets, de tels essais sont difficiles à mettre en œuvre. Par ailleurs, certains auteurs (Konikow et Bredehoeft, 1992 et Oreskes *et al*, 1994) estiment que les modèles chimiques ne peuvent pas être validés par les données de terrain. Zhu et Anderson (2002) affirment, quant à eux, que les résultats de simulation ne peuvent être utilisés comme une prédiction du comportement réel. En effet, aussi complexes et complets soient-ils, les modèles peuvent difficilement intégrer la totalité des mécanismes et des variations en jeu sur le terrain. Cette difficulté, voire cette impossibilité de valider expérimentalement les modèles chimiques ne doit néanmoins pas remettre en cause l'utilisation de la modélisation dans une optique d'évaluation environnementale. En effet, si de nombreux phénomènes chimiques et hydrologiques interviennent et interagissent dans la mobilisation des polluants, la modélisation permet d'intégrer les données de différentes disciplines (chimie, minéralogie, hydrologie...) et de coupler les phénomènes pour prendre en compte leurs interactions (Zhu et Anderson, 2002). La modélisation apparaît, alors, comme un outil particulièrement pertinent pour comprendre les mécanismes contrôlant la solubilisation et la mobilisation des polluants.

Modéliser pour comprendre

La modélisation peut être utilisée pour comprendre les mécanismes responsables de la mobilisation des polluants. Des résultats expérimentaux (essais de lixiviation, études

minéralogiques...) permettent généralement de formuler de nombreuses hypothèses pour expliquer le comportement observé à l'échelle du laboratoire. Le croisement entre les résultats de différentes disciplines (minéralogie et lixiviation, par ex.) affine ces hypothèses et s'avère particulièrement efficace pour étudier un phénomène. Par exemple, dans un matériau cimentaire, l'hypothèse d'un contrôle de la solubilité des sulfates par l'ettringite est étayée par l'observation d'ettringite par DRX. Néanmoins, ces hypothèses sont parfois difficiles à confirmer ou à infirmer. Le recours à la modélisation permet de tester ces hypothèses pour simuler le comportement du déchet : une bonne simulation des résultats expérimentaux confirmera les hypothèses faites alors qu'une mauvaise représentation les infirmera. La modélisation permet ainsi, de retenir les hypothèses pertinentes et donc d'identifier les mécanismes contrôlant le comportement du déchet et la mobilisation des polluants.

Dans cette optique, les protocoles expérimentaux peuvent être conçus en vue de leur interprétation à l'aide de la modélisation. C'est-à-dire que les conditions opératoires sont choisies pour être facilement reproduites (conditions aux limites notamment) par l'outil de modélisation/simulation utilisé. Par exemple, pour un essai statique de lixiviation (test de dépendance au pH, par exemple), il est important de s'assurer de l'atteinte de l'équilibre thermodynamique pour une modélisation ne considérant aucune cinétique réactionnelle. Par ailleurs, il peut être intéressant de mettre au point des essais spécifiques à un mécanisme particulier (sorption, cinétique réactionnelle...). De tels essais doivent permettre de vérifier le rôle joué par ce mécanisme dans le cas particulier étudié, ainsi qu'une estimation de ses paramètres de modélisation. Par exemple, pour un polluant dont le comportement est généralement expliqué par un phénomène de sorption, un essai dédié doit permettre de vérifier le rôle de la sorption dans le cas étudié et, le cas échéant, d'estimer le nombre de sites (paramètre classique des modèles de sorption). En outre, lorsque de nombreuses hypothèses peuvent être formulées pour expliquer le comportement d'un matériau, la simulation numérique offre, contrairement à une approche purement expérimentale, la possibilité de toutes les tester afin de ne retenir que les hypothèses les plus pertinentes.

Enfin, des méthodes basées sur le recours à la modélisation et à la simulation peuvent être développées pour aider à l'interprétation des résultats expérimentaux. Une telle méthode, dédiée à l'identification des réactions de dissolution/précipitation contrôlant la réponse à l'attaque acide d'un déchet stabilisé/solidifié par un liant hydraulique, a été proposée par Peyronnard (2008 ; Peyronnard et al. 2009-b). Cette méthodologie s'appuie sur un essai de type ANC (Acid Neutralization Capacity) dont l'analyse différentielle met en évidence chacune des réactions de dissolution ayant lieu au cours de l'acidification (Glass et Buenfeld, 1999, Peyronnard et al., 2009-a). L'étude, par simulation numérique, de la stabilité des phases susceptibles d'être présentes en fonction du contexte géochimique permet de prévoir leur dissolution et, ainsi, d'identifier celles qui contrôlent la réponse à l'attaque acide du matériau étudié

(Peyronnard et al., 2009-b). La méthode développée permet également une quantification des espèces réactives. Cette méthode permet, simultanément, l'identification des mécanismes et la construction d'un modèle les représentant. Elle peut également être appliquée pour l'identification des mécanismes de rétention/mobilisation des polluants. Cependant, ces mécanismes pouvant être de diverses natures (précipitation, co-précipitation, sorption), leur identification est plus délicate et nécessite éventuellement un croisement avec d'autres essais (essais de sorption, par ex.). La modélisation et la simulation numérique s'avèrent donc être des outils particulièrement pertinents pour étudier un phénomène et comprendre les mécanismes le contrôlant. Néanmoins, une étude de la sensibilité des modèles est indispensable pour s'assurer d'une bonne compréhension des mécanismes en jeu. En effet, le choix des données thermodynamiques peut, par exemple, avoir une influence sur la simulation des réactions d'un assemblage de minéraux, et donc sur les résultats de l'identification des mécanismes en jeu (Peyronnard et al., 2009-b).

Modéliser pour prévoir

Si la modélisation peut être vue comme un outil pour la compréhension et l'identification des mécanismes contrôlant le comportement à la lixiviation d'un matériau contenant des polluants, cette compréhension des phénomènes, aussi fine soit-elle, n'est pas suffisante pour juger de la pertinence environnementale d'un scénario de gestion d'un déchet. Il est en effet nécessaire d'évaluer les impacts futurs de la mise en œuvre réelle du scénario prévu. Néanmoins, comme nous l'avons vu précédemment, l'extrapolation à l'échelle du terrain des résultats obtenus au laboratoire reste périlleuse.

Dans ce paragraphe, nous proposons d'aborder l'évaluation environnementale de la gestion des déchets et le recours à la modélisation différemment de l'approche habituellement proposée (ADEME, 2002 et Afnor, 2006). En effet, une prédiction précise des flux de polluants émis par l'ouvrage contenant le déchet ne nous semble pas indispensable pour juger de la pertinence d'une filière de gestion. Il est néanmoins essentiel d'estimer le risque de mobilisation des polluants. L'évaluation environnementale pourrait, alors, consister en une détermination des conditions d'exposition types qui entraîneront une mobilisation des polluants ou, au contraire, les conditions types pour lesquelles les polluants vont être retenus dans l'ouvrage contenant le déchet. A partir de cette identification des conditions de mobilisation des polluants, il est possible de construire différents scénarios de gestion du déchet pour lesquels les risques de mobilisation sont fortement réduits. Les scénarios de valorisation ou de stockage sont alors élaborés, *a posteriori*, à partir d'une connaissance fine des matériaux et des mécanismes de rétention/solubilisation des polluants. Ce type d'approche est, par exemple, à l'origine des modes de gestion des résidus miniers. En effet, le drainage minier acide est généré par l'oxydation en phase aqueuse des sulfures (pyrite, pyrothite...).

Le problème du drainage acide peut alors être traité en éliminant un des réactifs en jeu dans cette oxydation : l'eau, l'oxygène ou les sulfures. Plusieurs possibilités s'offrent alors : empêcher l'air de pénétrer dans le massif de résidus, par exemple en l'ennoyant (le coefficient de diffusion de l'oxygène dans l'eau est très faible) ; stocker les résidus en milieu sec (climat aride, barrières étanches) ; désulfurer les résidus. Dans cette optique, la modélisation et la simulation numérique pourraient s'avérer des outils pertinents. En effet, les modèles élaborés pour décrire le comportement des matériaux peuvent être utilisés pour « prévoir », par simulation numérique, ce comportement pour des conditions d'exposition variées. Contrairement à une approche expérimentale, la simulation numérique permet de confronter un matériau à une multitude de conditions d'exposition. Il est ainsi possible de déterminer celles n'induisant qu'un risque limité pour l'environnement, et donc les conditions d'exposition que devront respecter les scénarios de gestion du déchet. Par exemple, pour un matériau dont les propriétés géotechniques permettent d'envisager une valorisation en techniques routières, il est possible de simuler le comportement pour différents régimes de précipitation, différents types de sol (le drainage dans le sol jouant sur l'hydrodynamique à travers le déchet)... Suivant les résultats, il apparaîtra alors que le matériau peut être utilisé dans de multiples conditions ou alors uniquement pour des conditions très particulières. Ce type d'utilisation de la modélisation comportementale permet à Moszkowicz *et al.* (2002) de déduire des résultats de simulation que favoriser la carbonatation réduit la mobilité du chrome dans le cas d'un bassin de rétention d'eau construit avec un matériau contenant des résidus d'épuration des fumées d'incinération.

En outre, lorsqu'un scénario de gestion pour un déchet est élaboré, la simulation numérique peut être utilisée pour estimer le comportement pour des situations accidentelles ou exceptionnelles. Par exemple, si la valorisation d'un déchet en climat habituellement sec (méditerranéen, par exemple) est envisagée, on pourra s'intéresser aux effets potentiels d'une inondation. On pourra également s'intéresser plus précisément aux risques d'impacts lors de la mise en œuvre du déchet. De tels événements ayant une durée réduite dans le temps, les résultats devront être analysés en considérant une toxicité aiguë des lixiviats. Les résultats du comportement dans les conditions normales devront, quant à eux, être interprétés à la fois pour une toxicité aiguë (mobilisation massive et ponctuelle) et une toxicité chronique (mobilisation diffuse des polluants).

Des essais expérimentaux complémentaires peuvent être mis en œuvre de manière à focaliser l'étude sur les points décelés comme potentiellement problématiques. Si la modélisation et la simulation révèlent un risque de mobilisation des polluants pour des conditions particulières, des essais adéquats doivent permettre d'atteindre ces conditions (susceptibles d'être réunies dans le scénario envisagé). Par exemple, si pour un déchet initialement basique, les risques de mobilisation des polluants apparaissent lorsque le pH s'abaisse en dessous d'un certain seuil, un essai devra être

conduit de manière à atteindre ces niveaux de pH problématiques, et cela, pour une durée raisonnable de l'essai.

Conclusion

La modélisation nous apparaît comme un outil indispensable dans une démarche d'évaluation environnementale des filières de gestion des déchets. Néanmoins, l'utilisation « classique » pour prédire les flux de polluants émis par les déchets dans des scénarios préconçus ne paraît pas particulièrement pertinente. En effet, une telle approche implique une prise de décision sur des résultats de simulation difficiles, voire impossibles à valider. Pour pallier les risques d'écart entre prédictions simulées et comportement réel, une démarche basée sur une « modélisation pour comprendre » et une « modélisation pour prévoir » est proposée.

« Modéliser pour comprendre » repose sur l'idée que la modélisation d'un phénomène complexe requérant une bonne compréhension des mécanismes peut être utilisée pour valider les hypothèses formulées pour expliquer un comportement. En outre, des méthodologies couplant une approche expérimentale et le recours à la simulation numérique peuvent être élaborées afin de faciliter l'interprétation des résultats expérimentaux et la mise en œuvre de modèles comportementaux.

« Modéliser pour prévoir » devient alors possible. En effet, nous proposons d'utiliser la modélisation et la simulation numérique pour définir des scénarios de gestion à faible risque de mobilisation des polluants, et sans avoir la prétention de prédire le comportement réel d'un matériau dans un scénario préconçu. Les résultats de simulation doivent être complétés par une vérification expérimentale des points critiques des scénarios retenus afin de garantir la pertinence des décisions prises. Les essais mis alors en œuvre doivent donc représenter aussi fidèlement que possible le scénario envisagé, mais également contraindre suffisamment le matériau pour permettre une étude du comportement dans les conditions identifiées comme critiques à moyen et long termes.

Références bibliographiques

ADEME. Evaluation de l'écocompatibilité de scénarios de stockage et de valorisation des déchets. ADEME Editions, collection : Connaître pour Agir, 2002, 148 p.

Afnor. NF EN 12920 : Caractérisation des déchets - Méthodologie pour la détermination du comportement à la lixiviation d'un déchet dans des conditions spécifiées. 2006.

Glass G.K., Buenfeld N.R., Differential acid neutralisation analysis, *Cement and Concrete Research* 29 (1999), 1681-1684.

Konikow, L.F., and Bredehoeft, J.D. Ground-water models

cannot be validated. *Advances in Water Resources* 15 (1992), 75-83.

Kylefors K., Andreas L., Lagerkvist A. A comparison of small-scale, pilot-scale and large-scale test for predicting leaching behaviour of landfilled wastes. *Waste Management* 23 (2003), 45-59.

Lidelöw L., Lagerkvist A. Evaluation of leachate emissions from crushed rock and municipal solid waste incineration bottom ash used in road construction. *Waste Management* 27 (2007), 1356-1365.

Moszkowicz P., Tiruta-Barna L., Barna R. Modéliser pour prévoir les flux de polluants émis par un ouvrage contenant des déchets. *Revue des Sciences de l'Eau*, 15 (2002), 41-55.

Oreskes, N., Shrader-Frechette, K. and Belitz, K. Verification, validation, and confirmation of numerical models in the earth sciences. *Science* 263 (1994), 641-646.

Peyronnard O., Apports méthodologiques pour la modélisation du comportement à la lixiviation de résidus minéraux. Applications aux solidifiats de boues d'hydroxydes métalliques. Thèse de doctorat, INSA de Lyon, Villeurbanne 2008, 199 p.

Peyronnard O., Benzaazoua M., Blanc D., Moszkowicz P. (2009-a) Study of mineralogy and leaching behavior of stabilized/solidified sludge using differential acid neutralization analysis. Part I: experimental study. *Cement and Concrete Research*, 39 (2009), pp. 600-609.

Peyronnard O., Blanc D., Benzaazoua M., Moszkowicz P. (2009-b) Study of mineralogy and leaching behavior of stabilized/solidified sludge using differential acid neutralization analysis. Part II: Use of numerical simulation as an aid tool for cementitious hydrates identification. *Cement and Concrete Research*, 39 (2009), pp. 501-509.

Twardowska I., Szczepanska J. Solid waste : terminological and long-term environmental risk assessment problems exemplified in a power plant fly ash study. *The Science of the Total Environment*, 2002, n° 285, pp 29-51.

US-EPA. Guidelines for ecological risk assessment. EPA/630/R-95/002F April 1998, 188 p.

van der Sloot H.A., von Zomeren A., Meussen J.C.L., Seignette P., Bleijerveld R. Test method selection, validation against field data, and predictive modelling for impact evaluation of stabilised waste disposal. *Journal of Hazardous Materials* 141 (2007) 354-369.

Zhu C., Anderson G. Environmental applications of geochemical modeling. Cambridge University Press, 2002, 284 p.