

sisippa 89

INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON INTEGRATED APPROACHES
TO WATER POLLUTION PROBLEMS
SYMPOSIUM INTERNATIONAL SUR DES SOLUTIONS INTÉGRÉES
POUR DES PROBLÈMES DE POLLUTION DE L'EAU
SIMPÓSIO INTERNACIONAL SOBRE SOLUÇÕES INTEGRADAS
PARA PROBLEMAS DE POLUIÇÃO DA ÁGUA

UTILISATION DE MODELES DE SIMULATION POUR LA GESTION
DE LA QUALITE DES EAUX SOUTERRAINES

THE USE OF SIMULATION MODELS IN THE QUALITY MANAGEMENT OF GROUNDWATER

Ph. JEAN ; Cl. LEFROU ; J.C. ROUX (1)

RESUME

Les problèmes de pollution des eaux souterraines apparaissent de plus en plus fréquemment. Leur origine peut être ponctuelle (stockage de déchets, usine, ouvrage de captage défectueux) ou diffuse (pollution urbaine ou agricole) ou encore provenir de la contamination par les eaux de surface.

Des modèles globaux peuvent permettre d'évaluer et de prévoir l'évolution de la pollution diffuse.

Des modèles plus complexes peuvent permettre de simuler l'évolution d'un polluant dans le sous-sol. Ils doivent alors combiner les lois physiques et l'hydrodynamique et de la diffusion avec celles concernant les équilibres chimiques des différentes substances dissoutes dans l'eau et de leur interaction avec la matière solide.

Le BRGM a mis au point différents modèles opérationnels qui sont utilisés pour l'étude et la résolution de problèmes de pollution des eaux souterraines à des échelles variées.

Mots-clés : pollution des eaux souterraines, prévision, modélisation, simulation, interaction, hydrogéochimie

ABSTRACT

Pollution problems afflicting groundwater are increasingly common. Their origin can be a single source, such as a rubbish tip, a factory, or a defective well, or it can be diffuse (urban or agricultural pollution). In fact, pollution of groundwater can even be caused by the infiltration of polluted surface water.

(1) BUREAU DE RECHERCHES GEOLOGIQUES ET MINIERES
Service Géologique National
BP 6009
45060 ORLEANS CEDEX - FRANCE

General computer-run models can help in the evaluation and prediction of diffuse pollution. More complex models can simulate the evolution of a pollutant within the soil or sub-soil. Such models must take account of the physical laws of hydrodynamics and diffusion, which must be combined with the laws governing chemical equilibria of substances dissolved in water and their interaction with solid matter.

The BRGM disposes over several computer-operated models that were designed and made operational in house, and which can help in the study and resolution of groundwater-pollution problems on all scales.

Key words : groundwater pollution, prevision, modelisation, simulation, interaction, hydrogeochemistry

INTRODUCTION

Depuis des siècles les eaux souterraines sont utilisées notamment pour la satisfaction des besoins domestiques. Toutefois, la méconnaissance des lois régissant leur écoulement a conduit à des politiques de gestion inadaptées. Ainsi, en France, les hygiénistes considéraient-ils qu'a priori les eaux souterraines étaient *naturellement pures* et devaient être systématiquement préférées aux eaux de surface pour la production d'eau potable. La gestion de la qualité de ces eaux se limitait alors à la protection des ouvrages de captage contre les risques de pollutions issues du voisinage.

L'apparition de pollutions des eaux souterraines, d'abord ponctuelles et liées à l'urbanisation et à l'industrialisation, puis plus étendues et liées notamment au développement de l'agriculture intensive ont conduit à réviser ces dogmes. Parallèlement, les connaissances scientifiques ont progressé. Sur le plan quantitatif des méthodes de prospection géophysique, la mesure des paramètres hydrodynamiques ont permis de déterminer la géométrie des aquifères et de modéliser les écoulements en tenant compte des relations avec les eaux de surface (infiltration, évaporation, relations nappes/rivières).

Les progrès récents ont porté sur la prise en compte des aspects qualitatifs. Les phénomènes qui régissent la variation de la qualité des eaux souterraines sont complexes : outre ceux liés à l'hydrodynamique qui régissent l'écoulement de l'eau ils relèvent des lois physico-chimiques relatives à la diffusion, aux équilibres chimiques des solutions dans l'eau et aux interactions physiques et chimiques de l'eau avec les formations géologiques traversées. Il s'y ajoute lors de l'infiltration dans le sol ou dans les transferts rivière/nappe des phénomènes biologiques.

Les risques de pollution des eaux souterraines sont donc très variables selon qu'il s'agit de nappes libres en relation directe avec le sol, de nappes alluviales en relation avec des rivières ou des nappes captives protégées par des formations géologiques plus ou moins imperméables. Ces risques sont d'ailleurs variables en fonction de l'exploitation de la ressource en eau qui modifie les écoulements souterrains et les relations avec les eaux de surface.

La prise de conscience de ces données conduit progressivement à faire évoluer la politique de gestion des eaux dans les différents Etats. Ainsi

la notion d'aquifère, analogue à la notion de bassin versant pour les eaux de surface, s'impose-t-elle comme unité de gestion. Ainsi est-on conduit à considérer qu'il existe un lien étroit entre la politique de gestion du sol et du sous-sol et la gestion de la qualité des eaux souterraines.

La localisation des activités susceptibles de polluer les eaux souterraines (industries, habitat, agriculture intensive, dépôt de déchets...) et les règles imposées à ces activités doivent tenir compte de la vulnérabilité des eaux souterraines. Lorsqu'une pollution est intervenue (ponctuelle ou diffuse), il faut prévoir son évolution pour prendre des mesures appropriées : abandon de l'usage de la ressource contaminée au profit d'une autre ressource, traitement de l'eau polluée avant usage ou réhabilitation du site pollué.

Cette politique nouvelle se traduit par une évolution des législations et réglementations variable suivant les pays : prise en compte des servitudes de protection des captages d'eau souterraine (périmètres de protection) dans les politiques d'urbanisme (plans d'occupation des sols), police des eaux souterraines réglementant les prélèvements et les rejets dans les aquifères, approche intégrée de la réglementation de la qualité des sols et de la qualité des eaux souterraines. Elle se traduit également par la mise en place de moyens financiers adaptés (superfond de l'Environmental Protection Agency aux USA pour la réhabilitation des sites pollués, redevances de pollution des organismes de bassin dans plusieurs pays européens, etc.).

La mise en oeuvre de ces politiques de gestion de la qualité des eaux n'est possible que si des outils techniques fiables sont mis à la disposition des responsables de cette gestion pour prévoir les conséquences des différentes actions entreprises sur la qualité des eaux. Cette prévision est d'autant plus nécessaire que, compte-tenu des vitesses d'écoulement des eaux qui sont beaucoup plus faibles que celles des eaux de surface, les conséquences de ces actions n'apparaissent qu'à moyen et long terme et que les erreurs sont difficilement réparables. Compte-tenu de la complexité des phénomènes physiques, chimiques et biologiques qui régissent l'évolution de la qualité des eaux souterraines, la modélisation de ces phénomènes sera souvent la seule solution permettant d'effectuer cette prévision.

Nous présentons dans les pages qui suivent quelques modèles de simulation d'évolution de pollution dans les eaux souterraines, avec des exemples de leurs applications.

1-MODELE BICHE : UN MODELE GLOBAL POUR LA MODELISATION DES NITRATES

1.1 - Description du modèle

Le modèle BICHE (Bilan CHimique des Eaux) a été mis au point en 1984. C'est un logiciel convivial pour la modélisation globale des transferts de nitrates dans un bassin versant. Il permet d'établir le bilan entre les quantités de nitrates apportées par épandage, consommées par les plantes et infiltrées par les pluies efficaces. Il est ainsi possible de réaliser facilement des prévisions de concentrations à long terme des nitrates à l'exutoire du bassin ou sur un piézomètre selon différents scénarios d'épandage d'engrais. Les données nécessaires au modèle sont : les historiques des pluies, de l'évapotranspiration potentielle, des épandages d'engrais, des concentrations en nitrates dans la nappe, et de consommation des plantes.

1.2 - Exemples d'application : sources de Provins

Une application intéressante a été faite sur le site des sources de la Voulzie, près de Provins (bassin de 250 km²), qui sont utilisées pour l'alimentation en eau de la ville de Paris. Le modèle a été ajusté sur les pluies, les débits et les concentrations en nitrates mesurées (ou interprétées) mois par mois pendant 37 ans, de 1947 à 1983 (Fig. 1). Il a alors été utilisé pour prévoir l'évolution des concentrations au cours des années à venir (fig. 2) en supposant un scénario avec les mêmes cultures, les mêmes fertilisants et les mêmes pluies que ces 77 dernières années. Le modèle montre une stabilisation très lente : la concentration passerait de 55 mg/l en 1984 à 95 mg/l après 40 ans avant de se stabiliser vers 115 mg/l après 100 ans. Un second scénario montre que même en réduisant les épandages d'engrais pour les ramener à leurs valeurs de 1964 on observerait une stabilisation (à la valeur actuelle de 55 mg/l) pendant une quinzaine d'années avant que la concentration ne décroisse et atteigne 40 mg/l après 40 ans environ.

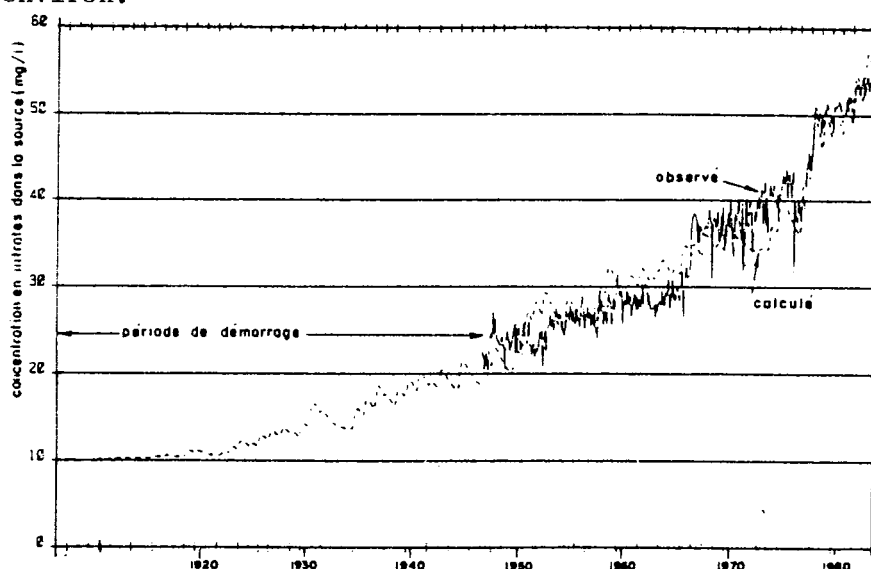


Fig.1 - Ajustement du modèle BICHE sur les concentrations en nitrates de 1947 à 1983

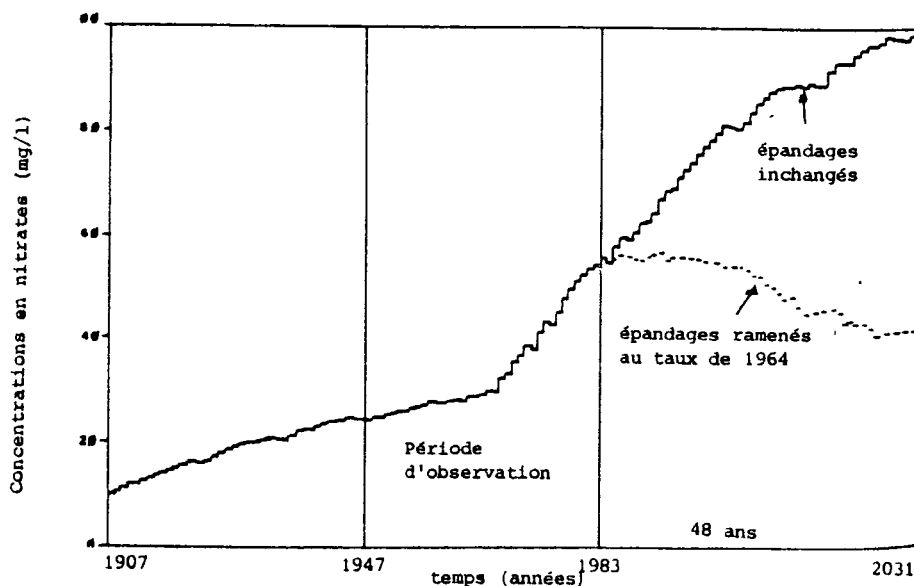


Fig. 2 - Simulation pendant 48 ans de 2 scénarios après 1983

2-CATTI : INTERPRETATION DE TRACAGES

2.1 - Description

Dans le cadre d'une recherche commune avec l'Institut d'Ingénierie Hydraulique de l'Université de Stuttgart (RFA - W. KINZELBACH), un logiciel a été développé pour l'interprétation assistée par micro-ordinateur des traçages réalisés dans les aquifères.

Ce logiciel, dénommé CATTI (computer Assisted Tracer Tests Interpretation) utilise un micro-ordinateur compatible IBM/PC. Il est complètement interactif avec sorties graphiques à l'écran ou à l'imprimante. Il est conçu pour traiter simultanément une ou plusieurs courbes de restitution observées dans différents puits, ainsi que l'étude d'un panache de pollution. Il peut également être utilisé comme outil de prévision.

Le logiciel CATTI permet soit l'ajustement manuel par essais et erreurs successifs (fig. 3), soit l'ajustement automatique (fig. 4).

C'est un logiciel ouvert : les modes d'écoulement (1D, 2D, axisymétrique) et les lois d'interaction physico-chimique simulées ne sont pas limitées ; de nouveaux modèles peuvent être introduits sans difficulté.

Les modèles actuellement programmés sont :

- * injection instantanée dans un écoulement uniforme à une dimension (colonne, infiltration verticale diffuse...),
- * injection instantanée ou continue dans un écoulement uniforme à 2 dimensions (écoulement naturel de nappe),
- * même problème avec dispersivités dépendant du chemin parcouru (prise en compte de l'échelle d'hétérogénéité des aquifères),
- * même problème avec incertitude sur la direction de l'écoulement de la nappe (problème concret rencontré dans tous les traçages en nappe avec écoulement naturel non perturbé),
- * injection instantanée dans un écoulement radial convergent vers un puits en pompage ; formule analytique approchée,
- * même problème avec solution numérique précise : couplage des techniques d'optimisation avec un modèle par différences finies,
- * les effets chimiques peuvent être pris en compte de façon simplifiée à l'aide d'un coefficient de retard et d'une décroissance exponentielle, ou bien de façon plus sophistiquée par une loi d'échange avec cinétique linéaire,
- * le calage peut être effectué sur plusieurs piézomètres simultanément, plus éventuellement sur une ou plusieurs cartes de pollution (relevés synchrones) à des dates différentes ; lorsqu'on dispose de plusieurs piézomètres, il permet de déterminer la direction d'écoulement de la nappe supposé uniforme).

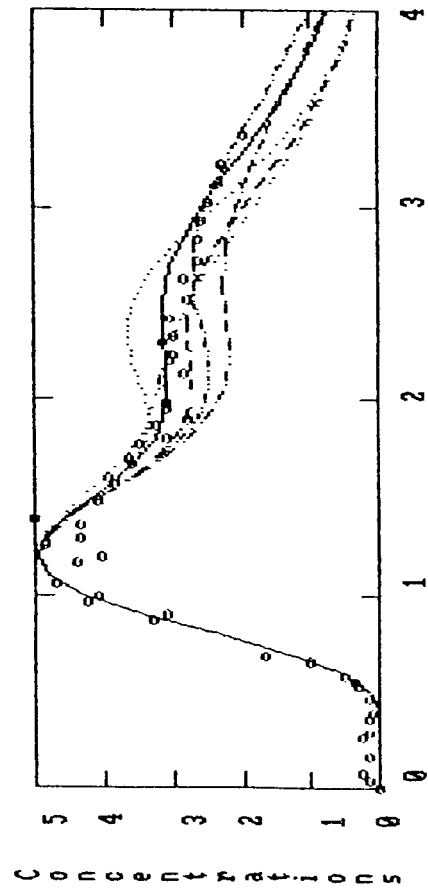


Fig. 3 - Identification par essais et erreurs

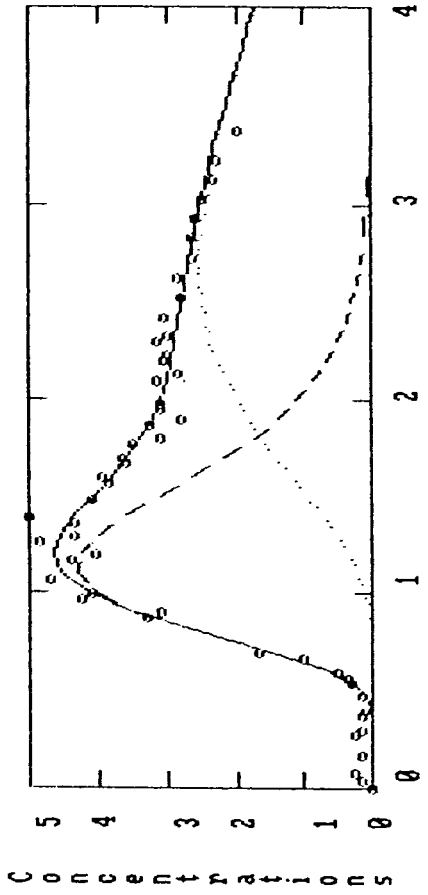


Fig. 4 - Résultat d'une optimisation directe

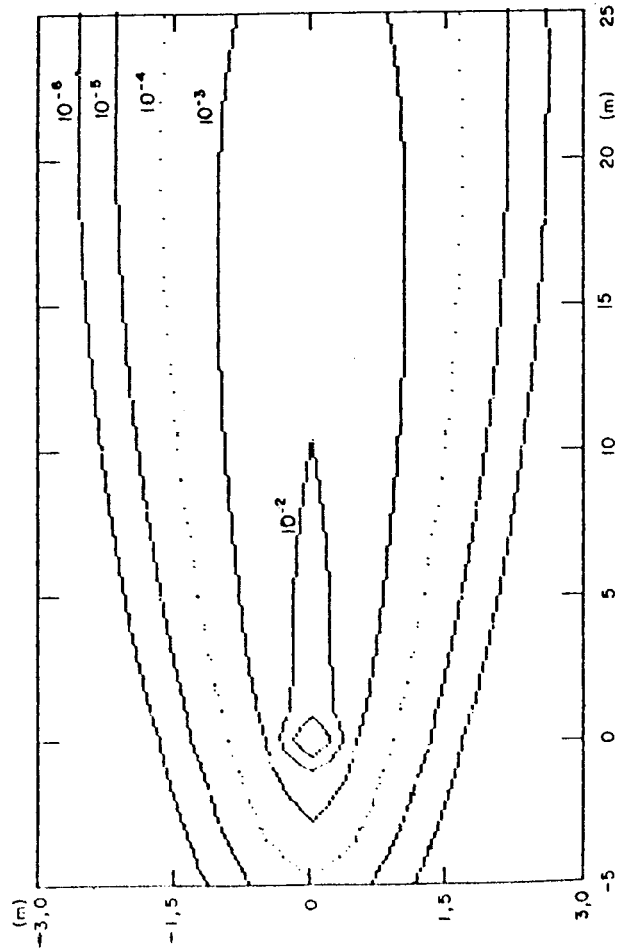


Fig. 5 - Forme du panache avec un αL constant

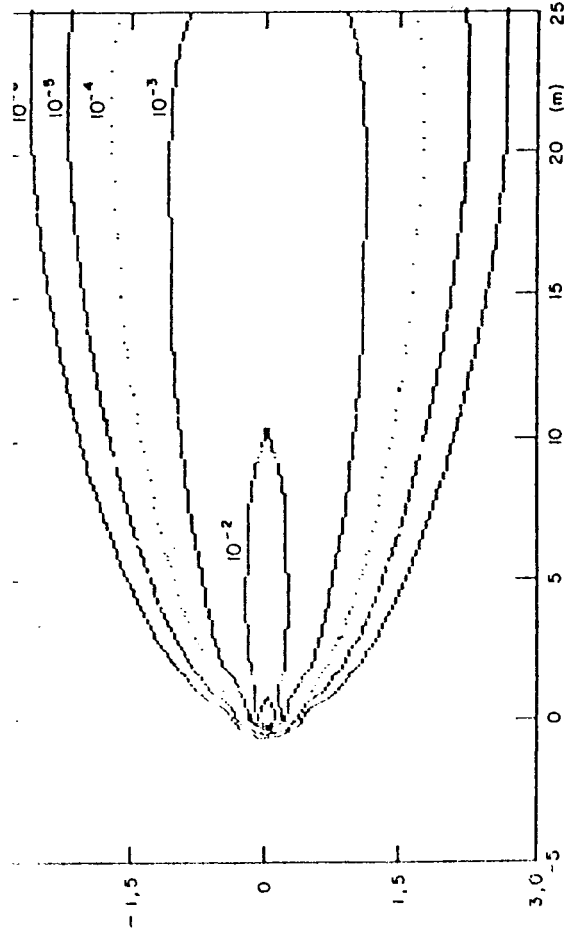


Fig. 6 - Panache avec un αL variant exponentiellement

Ce logiciel est distribué par International Ground Water Modelling Center (IGWME, Indianapolis, Delft).

2.2 - Exemples d'application

2.2.1 - Exemple d'interprétation de traçages

Dans un aquifère alluvial, une nappe captive de 4 m d'épaisseur est soumise à un écoulement uniforme. Le traceur (I^{131}) est injecté dans un forage, et les concentrations observées dans 3 forages distants de 6.5 m et alignés sur une perpendiculaire à l'écoulement naturel, sont situés 32.5 m en aval du puits d'injection.

CATTI a permis une interprétation simultanée des courbes de réponse dans les trois ouvrages, avec identification automatique de la porosité, des coefficients de dispersion et de la direction de l'écoulement.

2.2.2 - Panache de pollution

CATTI permet de prévoir la carte des isoconcentrations en aval d'une source de pollution (ponctuelle dans le temps ou permanente). Le schéma classique avec une dispersivité invariante, crée un artefact, avec une remontée des concentrations en amont de la source de pollution (fig. 5), alors que CATTI, grâce à la prise en compte d'une dispersivité variant en fonction de la distance parcourue (fig. 6), propose un schéma conforme aux observations.

3-MODELE VIKING : TRACÉ DE LIGNES DE COURANT

3.1 - Description

Le logiciel VIKING (Vitesse Continues Interpolées dans une Grille) permet de traiter tous les problèmes de trajectoires (en deux ou trois dimensions) de propagations par convection pure, en régime permanent ou transitoire.

Il est possible de calculer :

- * les trajectoires générées à partir de lieux et de dates quelconques choisies par l'utilisateur,
- * les trajectoires aboutissant à un pompage automatiquement réparties en tubes de courant de flux égaux,
- * de matérialiser par des flèches des vitesses d'écoulement de la nappe,
- * les isochrones des temps d'arrivée (pompage) ou de propagation des fronts (injection),
- * les flux traversant un secteur d'un aquifère.

Le modèle VIKING permet diverses utilisations :

- * le dimensionnement des périmètres de protection d'un captage en fonction des temps d'arrivée,

- * la détermination des zones d'alimentation de champs captants ou de secteurs de nappe,
- * la recherche d'exutoire de secteurs de nappes,
- * le calcul d'isochrones d'avancement des front de pollution,
- * l'interception de pollutions.

3.2 - Exemple d'application : risque de pollution par un site de stockage de déchets

La figure 7 présente un exemple de simulation de pompages sur des forages dans des sables argileux situés à proximité d'un site de stockage de déchets. Le modèle VIKING permet de visualiser l'aire d'alimentation (rabattements), du captage ainsi que les lignes de courant.

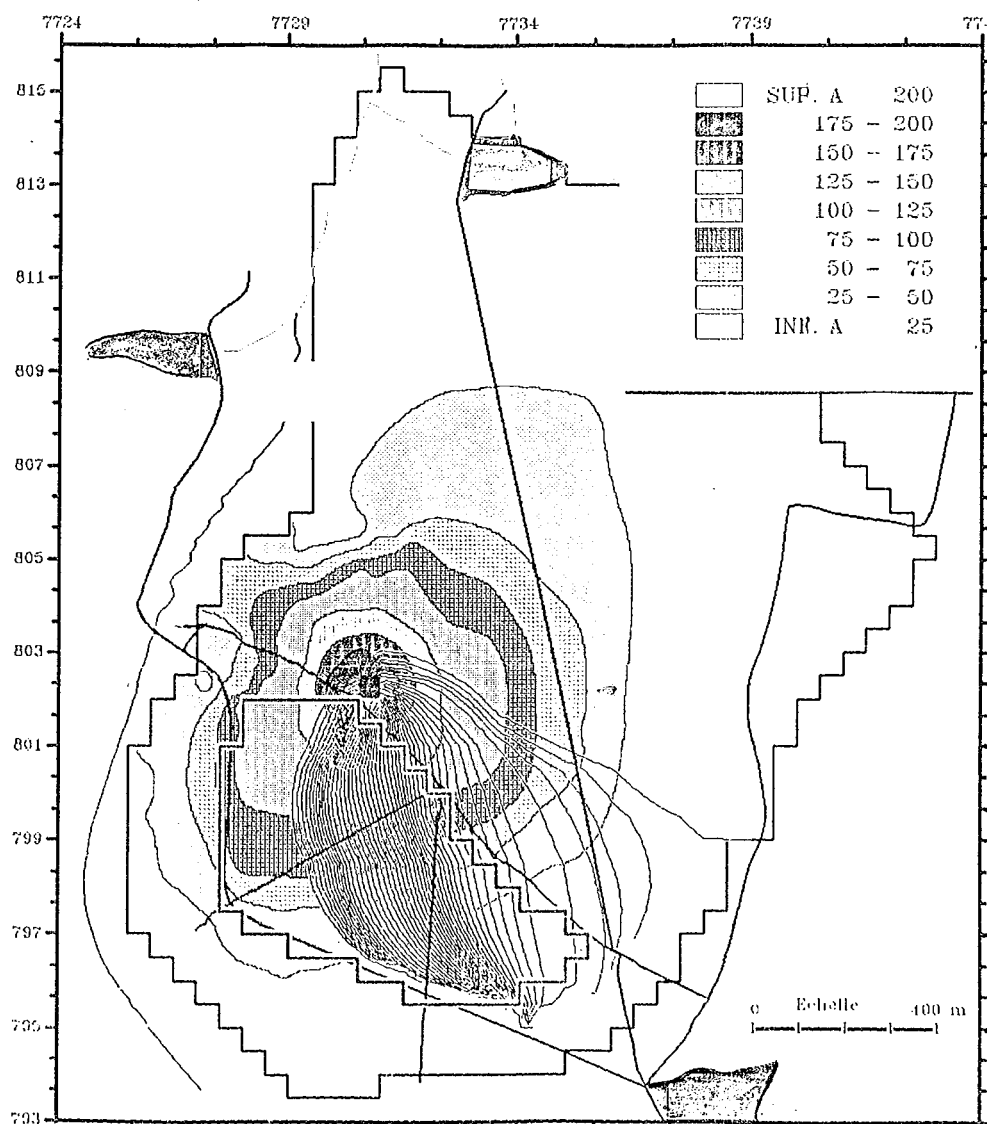


Fig. 7 - Simulation de pompage à 4.3 m³/h à proximité d'un centre de stockage - Aire d'alimentation et carte des rabattements (en cm)

4-MODELE SÉSAME : MIGRATION DE POLLUTION DIFFUSE OU ACCIDENTELLE DANS LES AQUIFERES

4.1 - Description

Le modèle SÉSAME (Simulation des Écoulements de Solutés dans les Aquifères par un Modèle Équimultiple) est utilisé pour l'étude de la migration de polluants dans les aquifères (domaine bidimensionnel). Il calcule les vitesses le long des lignes de courant à partir d'une carte piézométrique mesurée ou calculée sur tout autre modèle hydrodynamique. La substance dissoute est représentée par des particules mobiles de masse connue qui migre d'abord sous l'effet de la convection. Les dispersions longitudinale et transversale sont déterminées par une fonction aléatoire pour représenter l'effet dispersif.

La source du traceur peut être ponctuelle ou par zone, l'injection est continue ou instantanée. L'adsorption du polluant peut être représentée par un facteur de retard. La dégradation est prise en compte par une période de demi-vie du polluant.

Le modèle SÉSAME permet l'édition des résultats suivants :

- * carte des concentrations au cours du temps,
- * évolution des concentrations en un point quelconque de l'aquifère,
- * évolution des concentrations aux limites du modèle (écoulement dans un plan d'eau, une rivière, pompages...).

les cartes peuvent être visualisées sous forme de tableaux numériques, ou sous la forme de cartes isovaleurs sur une imprimante graphique ou un traceur.

Les principales applications concernent les problèmes d'environnement :

- * prévision de l'extension de pollutions accidentelles ou chroniques dans une nappe libre ou captive,
- * étude de sites de stockage de produits toxiques,
- * détermination des périmètres de protection d'un captage d'eau potable ou industrielle.

4.2 - Exemples d'application

4.2.1 - Evolution des teneurs en nitrates dans la nappe des calcaires de Beauce

Le modèle s'articule avec un modèle hydrodynamique utilisé pour le calcul des charges hydrauliques. Il comprend 478 mailles de 10 km² chacune. Le pas de temps choisi est l'année. Un état initial des concentrations en nitrates a été constitué à l'aide des teneurs mesurées sur 250 points d'eau environ (sur chaque point d'eau, une valeur moyenne annuelle a été calculée).

En outre, on a eu recours à l'imagerie spatiale pour la caractérisation de l'occupation du sol et l'affectation automatique des paramètres cultureux aux mailles du modèle.

Un deuxième champ de valeur (1984) a été utilisé pour "caler" le modèle, c'est-à-dire obtenir les flux massiques azotés qui parviennent effectivement à la nappe à partir de la surface du sol. Constatant, sur la période de 3 ans considérée, une augmentation des teneurs sur la quasi totalité des points d'eau, il a été possible de caler le modèle en travaillant non pas sur les champs de valeurs eux-mêmes, mais sur leur différence : partant d'un état initial de teneurs nulles, on a donc tenté de restituer, par ajustement successifs des flux massiques injectés, les différences calculées (fig. 8).

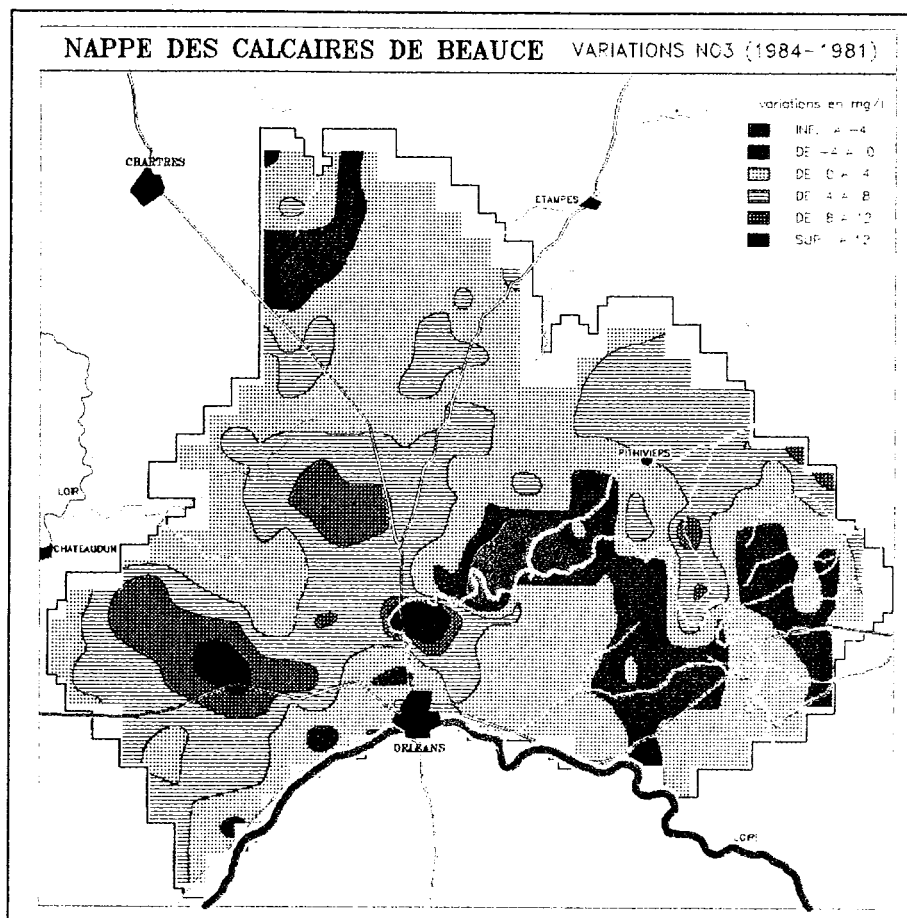


Fig. 8 - Carte de l'évolution de teneurs en nitrates obtenue par différence des cartes krigées de 1984 à 1981

Un essai de prévision sur 10 ans en pas de temps annuels, en partant de l'état 1981 a montré une très nette progression de la pollution de l'ordre de 4 à 12 mg/l selon les zones avec une forte extension entre Orléans et Chateaudun (croissance supérieure à 12 mg/l) ce qui correspond aux plages de minéralisation totale de 40-50 mg/l. La pollution affecte donc de plus en plus de captages publics, ce qui pose d'énormes problèmes de prévention.

4.2.2 - Prévision de l'impact d'une infiltration contrôlée d'effluents urbains

Près d'Agadir (Maroc) il est projeté de mettre en place un dispositif d'épuration naturelle des eaux usées de l'agglomération, par infiltration naturelle dans les sables dunaires de la vallée de l'oued Souss. A 6 km à l'amont, se trouve un champ captant d'eau potable. L'objectif était donc de prévoir l'impact de l'infiltration des eaux usées sur la qualité de l'eau au niveau des captages, compte tenu des performances de l'épuration et des caractéristiques hydrodynamiques et de transfert dans la nappe.

Des expériences de traçages, à l'iodure de sodium, et à la Rhodamine WT, en écoulement convergent vers un puits soumis à pompage ont été effectuées afin de déterminer la porosité cinématique et la dispersivité locale. L'interprétation des mesures a été faite à l'aide du logiciel CATTI.

En ce qui concerne l'impact du dispositif d'infiltration plusieurs scénarios ont été retenus pour mettre en évidence :

- * l'impact de l'injection sur la qualité des eaux du champ captant,
- * la possibilité de repomper à des fins d'irrigation une partie des eaux injectées tout en protégeant le champ captant,
- * le débit minimal d'injection sans reprise, ne contaminant pas le champ captant.

Les résultats ont montré que l'infiltration de 500 l/s :

- * sans pompage de récupération, aboutit à terme à la contamination de 5 forages du champ captant représentant 52 % du débit total capté (316 l/s), (fig. 9),

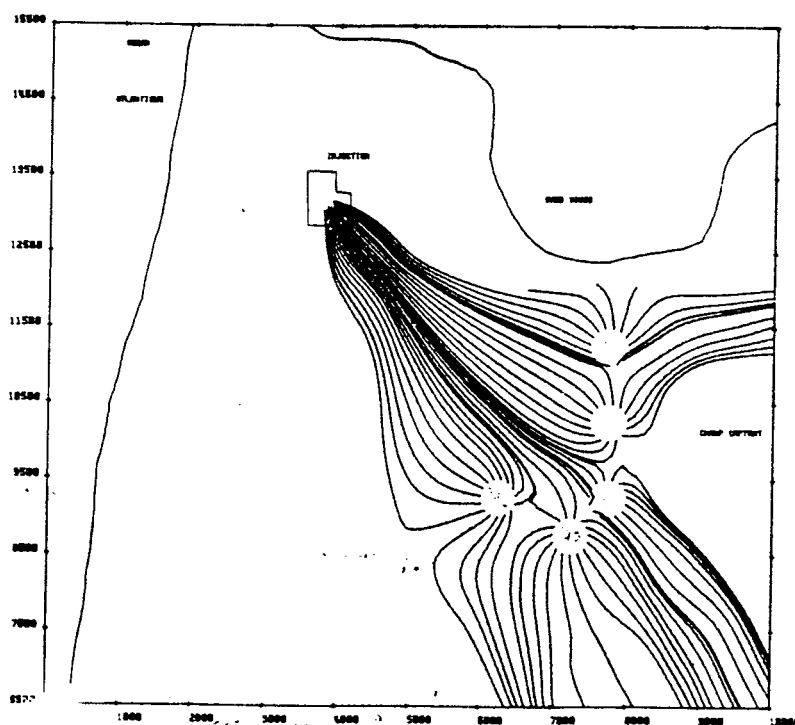


Fig. 9 - Scénario 1 - Infiltration de 500 l/s sans reprise : contamination de 5 forages

* combinée à un pompage de récupération de 220 l/s situé entre dispositif d'infiltration et captages, à 1.400 m de la zone d'infiltration, permet de protéger le champs captant (fig. 10).

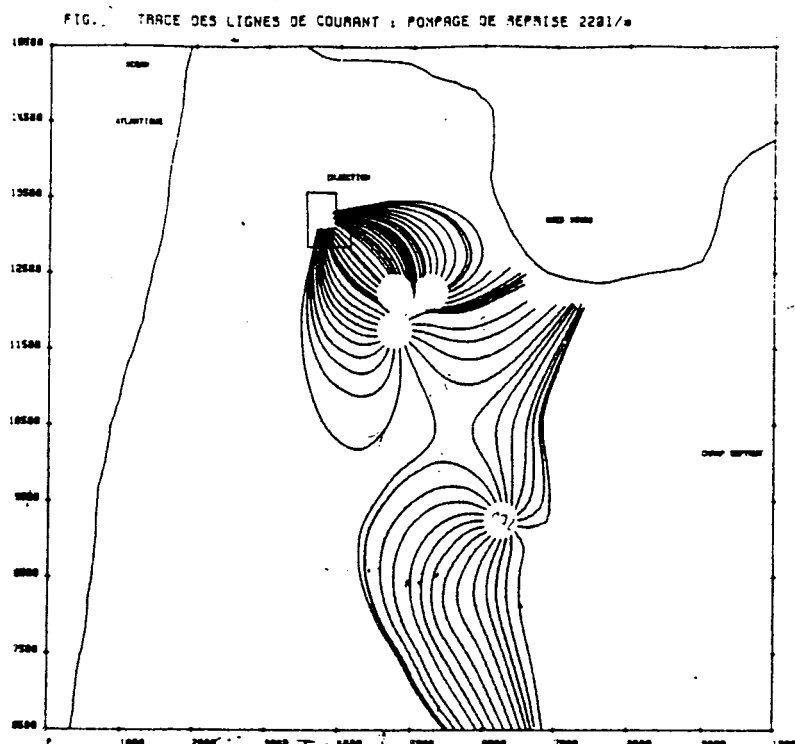


Fig. 10 - Scénario 2 - Infiltration de 500 l/s et repompage de 220 l/s : préservation du champ captant

4.2.3 - Transfert de micro-polluants organiques dans un champ captant

Dans la région de Mulhouse, entre 1986 et 1988, plusieurs forages d'eau potable prélevant la nappe alluviale de la plaine d'Alsace, ont été contaminés par des teneurs importantes en chloronitrobenzène, ce qui a nécessité leur fermeture. Les pollutions ont pour origine deux industries chimiques situées en amont hydraulique des champs captants. La contamination a débuté vraisemblablement au début du siècle, les quantités exactes des polluants ne sont pas connues. En 1976 un incident de fabrication sur l'un des sites est à l'origine d'un déversement accidentel de 300 t de chloronitrobenzène. L'ensemble de la zone contaminée s'étend sur un secteur de 39 km².

L'objectif de la modélisation était de prévoir l'évolution de la pollution vis-à-vis de certains captages menacés. Tout d'abord un modèle hydrodynamique en régime permanent prenant en compte les échanges nappes-rivières a été mis en oeuvre. Les simulations ont mis en évidence l'importance de ces échanges qui jouent un rôle prépondérant dans le fonctionnement hydraulique de la nappe phréatique. Ensuite, l'utilisation du modèle SESAME, a permis la reconstitution de l'historique de la pollution. Selon différents scénarios :

* injection de courte durée de chloronitrobenzène missible dans l'eau, en négligeant les phénomènes de dégradation,

- * source continue de pollution qui serait mise progressivement en solution dans l'eau, en négligeant les phénomènes de dégradation,
- * source de pollution continue, avec prise en compte des phénomènes de dégradation.

Dans tous les cas, les phénomènes d'adsorption ont été pris en compte. Il a donc été possible de restituer de façon satisfaisante la répartition des concentrations mesurées avec plusieurs séries de paramètres différents.

Les différentes simulations ont permis de confirmer les points suivants :

- * le calcul des lignes de courant met en évidence que l'extension et la dilution du panache de pollution sont nettement influencées par les relations nappe-rivière,
- * l'adsorption du produit dans les alluvions ralentit la propagation du polluant (la vitesse du front de pollution est environ trois fois plus faible que la vitesse de l'eau),
- * les mécanismes de dégradation sont sans doute importants pour ce type de produit. Des observations réalisées sur une courte période (1 à 2 ans) sont insuffisantes pour calculer de façon fiable une prévision sur 10 ans. Il apparaît que la dégradation est beaucoup plus faible dans le milieu naturel qu'en laboratoire.

Dans un deuxième temps, on a cherché à prévoir l'évolution de la pollution pour les 10 prochaines années selon deux hypothèses réalistes :

- * une pollution continue pendant 20 ans, en négligeant la dégradation. Dans ce cas, on constate une aggravation de la pollution sur l'ensemble du champ captant et une contamination de la nappe en aval, (fig. 11),
- * une pollution continue pendant 10 ans, avec prise en compte d'une dégradation (période de demi-vie de 10 ans). Dans ce second cas, on constate une quasi disparition de la pollution en aval immédiat du site industriel et une aggravation de la contamination en amont et en aval du champ captant le plus en aval.

En conclusion, le modèle a reconstitué de façon satisfaisante la répartition actuelle des concentrations, mais l'absence de données précises sur l'adsorption et surtout la dégradation des produits organiques dans le milieu naturel n'a pas permis de conclure de façon précise sur le devenir de cette pollution.

5-MODÈLE POLLUX : PROPAGATION DES POLLUTIONS DANS LES RIVIÈRES ET LES AQUIFÈRES

5.1 - Description

Le logiciel POLLUX (propagation de POLLutions dans les eaux souterraines) est un modèle hydrodispersif monocouche ou multicouche permettant de simuler en trois dimensions la propagation de pollutions dans les rivières et les aquifères. Le déplacement du polluant étudié est représenté au moyen de particules affectées chacune d'une certaine masse. Les

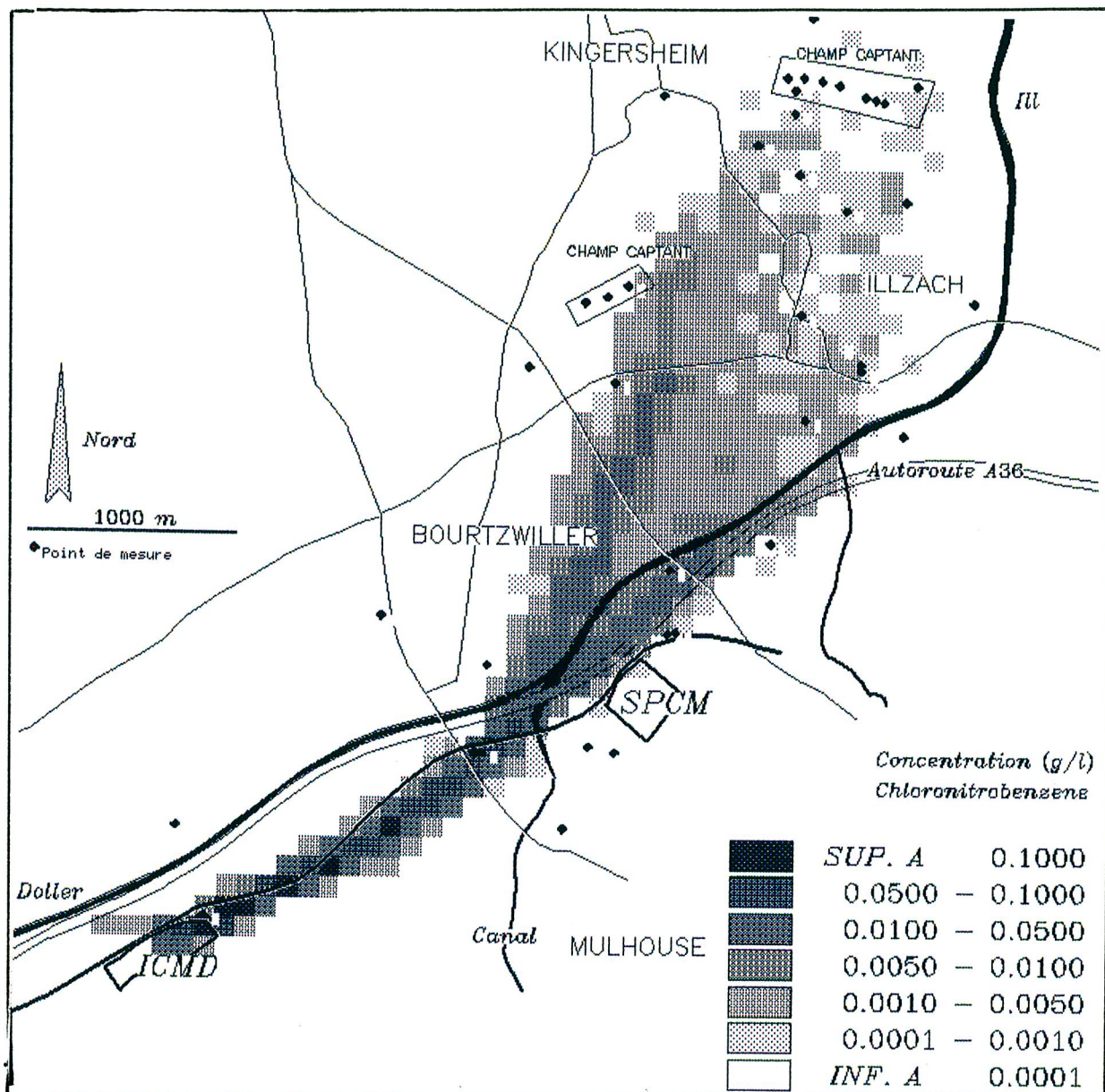


Fig. 11 - Modélisation de la contamination d'un aquifère et d'un champ captant - Carte des concentrations calculées en chloronitrobenzène - 10 ans

phénomènes de dispersion (longitudinale et transversale) sont pris en compte à l'aide d'une méthode de type cheminement aléatoire.

La mise en oeuvre du logiciel POLLUX est particulièrement aisée. Il travaille à partir d'un champ de vitesses fourni par un modèle hydrodynamique souterraine.

5.2 - Exemple d'application : Evaluation future de la salinité du bassin potassique d'Alsace

Un modèle hydrochimique (de type hydrodispersif) couplé au modèle VAL, a été mis au point pour simuler la propagation des chlorures dans la nappe de la plaine du Rhin en aval des terrils du Bassin potassique, afin de prévoir l'évolution future des teneurs en chlorures en fonction de différentes hypothèses de prélèvements des eaux souterraines.

Un des scénarios étudiés (fig. 12) suppose la création de cinq puits de dépollution d'ici 1991. Il s'inscrit donc dans le cadre des travaux menés jusqu'à ce jour visant à limiter l'extension de la pollution et à protéger les zones non contaminées. Il tient compte d'un éventuel désengagement des Mines de Potasses d'Alsace à partir de 2000-2005 conduisant à l'arrêt de certains forages. Cependant, ne seront arrêtés que les puits qui soutirent une charge faible de l'aquifère.

Il est à opposer à un autre scénario qui suppose de limiter les efforts de dépollution aux seuls puits de dépollution existants.

Ces simulations ont permis de mettre en évidence un certain nombre d'enseignements :

- * la lenteur des phénomènes nécessitant de poursuivre sur une très longue période les efforts de dépollution (très au-delà de 2005),
- * la sensibilité des langues salées étroites situées en aval des terrils Alex, Rodolphe, Marie-Louise et Joseph-Else, qui permet d'envisager, notamment pour Alex et Rodolphe, une dépollution plus intensive.

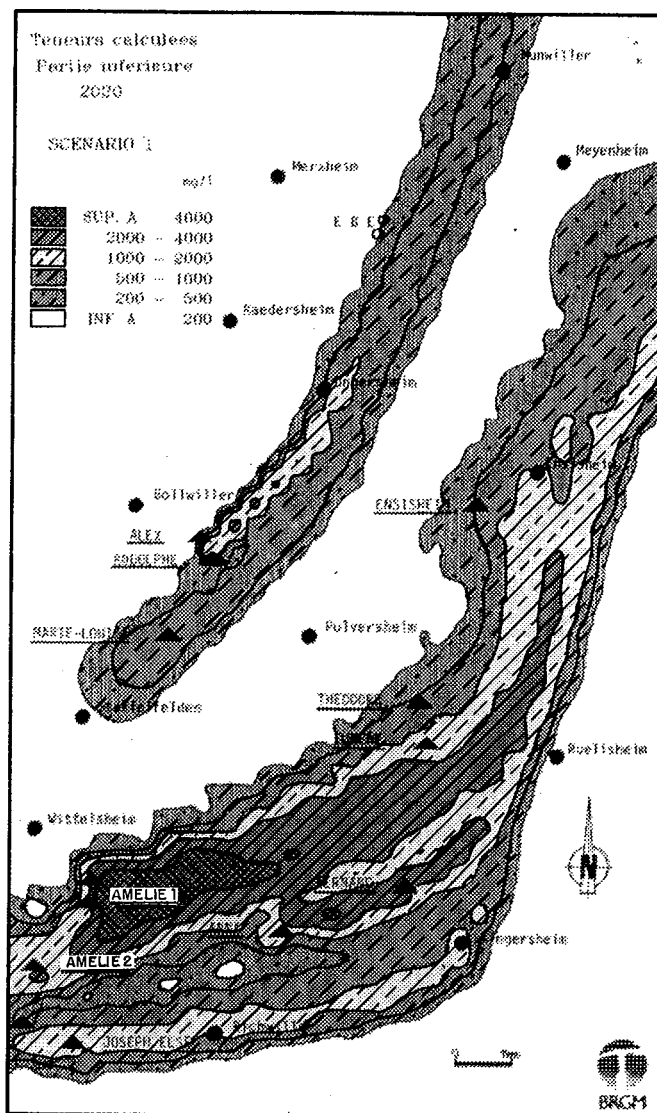


Fig. 12 - Scénario 1 : carte des teneurs calculées en chlorures, en 2020

Il conviendrait en particulier de vérifier l'impact des ouvrages qui pourraient être créés en amont sur les teneurs des captages destinés à l'alimentation en eau potable de Colmar.

6-LES MODELES COUPLÉS : CALCUL DES ÉQUILIBRES CHIMIQUES

Dans de nombreux cas, les transports en solution sont associés à des phénomènes de dissolution ou de précipitation qui contrôlent la propagation. La pression et la température de même que la présence de gaz dissous doivent être pris en compte simultanément au transport : le logiciel CAT a été élaboré pour ce type de calcul.

Pour des molécules organiques ioniques ou ionisables, ou encore dans le cas de polluants métalliques, l'environnement chimique peut avoir une forte influence sur les propriétés de sorption (ou d'adsorption dans le cas des métaux). Des variations du pH ou du Eh, la présence de complexants organiques, une compétition de différents ions vis-à-vis des sites d'adsorption, etc... peuvent rendre nécessaire un calcul de la répartition des différentes espèces chimiques au cours du temps : le logiciel MISS a été conçu pour ce type de transfert les principales applications étant la pollution par les micropolluants métalliques.

Dans ces deux cas, il est nécessaire de procéder à chaque pas de temps et dans chaque maille à un calcul des équilibres chimiques. Chaque particule contient alors la somme des éléments chimiques qui interviennent dans la réaction et il est fait appel à un calcul de spéciation. Il s'agit alors d'un modèle couplé hydrodispersif hydrochimique dont le principe est illustré par la figure 13. Rappelons qu'il est fait l'hypothèse que les réactions chimiques sont réversibles et instantanées. Le transport est effectué grâce au logiciel SESAME.

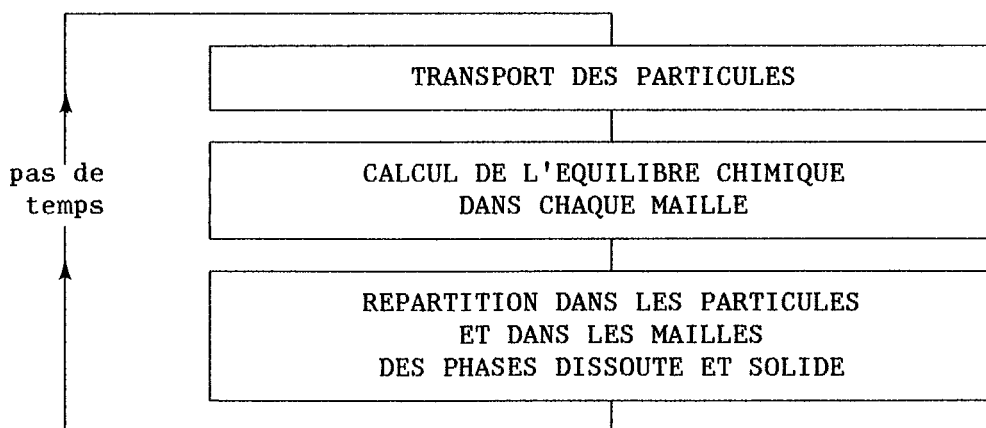


Fig. 13 : Principe du couplage

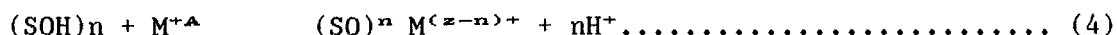
6.1 - Le modèle MISS

La migration de polluants non biodégradables et non volatils dans les eaux souterraines est le résultat de la compétition entre le transport dissous et solide et la rétention par insolubilisation (adsorption, précipitation). Pour le couplage de l'hydrodynamique et des interactions solides-liquides, ces dernières sont souvent prises en compte par des

expressions empiriques (le coefficient de partition K_d). Cette approche néglige le rôle prépondérant des interactions entre solutés, elles-même fortement dépendantes de la chimie de l'eau.

MISS (pour Migration et Interactions de Solutés dans les Sols) est un code de calcul couplant le transport hydrodispersif avec les interactions chimiques (entre solutés et avec les surfaces des solides). Le modèle géochimique prend en compte l'hydrolyse et la complexation en solution ainsi que l'adsorption.

L'adsorption est assimilée à une complexation classique mais avec des ligands de surface. Ces réactions s'écrivent sous la forme générale :



avec $n = 1$ ou 2 ; et S étant un site de surface ionisable.

Même s'il existe très probablement plusieurs sortes de sites de surface, il semblerait que pour un solide donné, une constante moyenne puisse néanmoins être déterminée pour chaque métal trace. Les constantes de surface doivent être mesurées en laboratoire pour le type de matière solide rencontrée dans le système considéré.

Dans le modèle, les éléments chimiques suivants pris en compte : Mg, Ca, Na, K, Cl; SO_4 , NO_3 , HCO_3 , Si, PO_4 , F, Sr, Fe (II, III), Al, NH_4 , HS, Cd, Cu, Ni, Pb, Zn, Mn, Hg et le carbone organique. Le pH est considéré pour l'instant comme une constante, la température et la capacité d'échange (qui contrôle l'adsorption) sont imposées.

Application

Le code de calcul MISS est dans sa version actuelle un outil de recherche. Avant qu'il ne puisse être utilisé pour des applications pratiques (situations réelles et en deux dimensions), il doit être validé. Cette étape capitale est réalisée au moyen d'expériences en colonne. Quelques utilisations théoriques de MISS peuvent néanmoins être présentées.

L'élution de quatre métaux toxiques le cadmium, le cuivre, le mercure et le nickel à travers une colonne d'aquifère théorique est simulée à la figure 14.

Quelle que soit la concentration en NaCl, l'ordre d'apparition des métaux en sortie de colonne est cadmium, mercure, puis nickel ; à la fin des simulations effectuées la colonne filtre encore complètement le passage du cuivre (fig. 14). Cet ordre de mobilité des métaux dans la colonne correspond aux interactions simultanées des différents cations avec l'ion Cl^- et la surface solide.

6.2 - Le modèle CAT

Le modèle CAT (Chemistry and Aqueous Transport) a pour base un calcul des équilibres chimiques entre de nombreuses phases minérales, une phase aqueuse et éventuellement plusieurs phase gazeuses.

Les données du modèles sont la température et la pression, la composition totale de chaque élément chimique du système (minéraux, phase aqueuse...) ainsi que les énergies standards de formation de ces éléments.

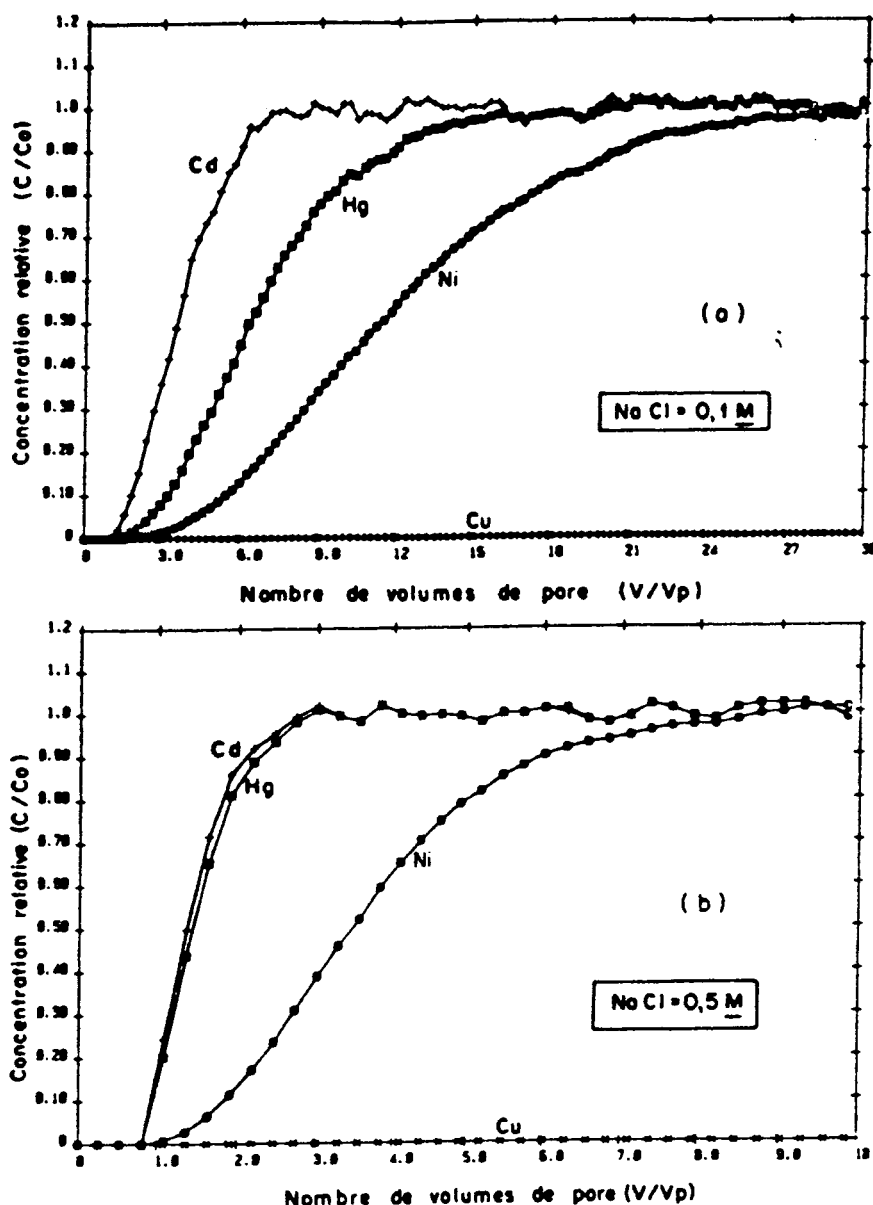


Fig. 14 - Courbes (calculées par MISS) de l'évolution du cadmium, du cuivre, du mercure et du nickel à travers une colonne d'aquifère théorique : (a) en milieu 0.1 M NaCl et (b) en milieu 0.5 M NaCl

Le principe de calcul est une minimisation de l'énergie libre de Gibbs sous contrainte de la balance de masse.

La phase de donnée thermodynamique actuelle comprend 390 minéraux, 200 espèces aqueuses et 8 gaz. Il est donc possible de simuler la dissolution précipitation pour la plupart des phénomènes hydrogéochimiques observés dans le milieu naturel.

Certaines pollutions où la précipitation à un rôle important sont étudiées avec ce type d'outil mais les principales applications sont le stockage en milieu géologique profond, la géothermie et la gestion de réservoirs pétroliers.

Application

Environnement :

- * choix des sites de stockage de produits toxiques,
- * prévision de l'extension de pollutions accidentelles
- * réhabilitation et dépollution d'aquifère

Energie :

- * évolution d'un réservoir d'hydrocarbures (diagenèse, récupération assistée),
- * stockage intersaisonnier de chaleur,
- * exploitation de champ géothermique

Exploration minière

- * prospection hydrogéochimique
- * évaluation des anomalies chimiques autour des minéralisations

CONCLUSION

Au travers des exemples présentés , on peut mesurer les progrès réalisés depuis quelques années en matière de simulation des mécanismes de transfert de pollution dans les nappes et notamment le comportement chimique des polluants en interaction avec l'aquifère. La mise en évidence de variations de concentration dans l'espace et dans le temps permet de comprendre le mécanisme de migration et de restituer par modélisation, sinon la pollution complète, au moins un événement significatif.

En effet, la modélisation a franchi pour la plupart des étapes de validation un seuil de qualité :

- * les mécanismes de propagation (lois physico-chimiques) sont assez bien appréhendées,
- * la fiabilité et la cohérence des modèles mathématiques sont maîtrisées,
- * la capacité de prévoir l'extension d'une pollution actuelle dans le temps et dans l'espace est opérationnelle.

La modélisation de pollutions minérales ou organiques a donc un futur très prometteur en tant qu'outil de gestion des eaux souterraines. Cependant, dans de nombreux cas, l'absence de quantification précise des phénomènes dans le milieu naturel, et d'une validation expérimentale en laboratoire et in situ constituent des limitations à l'utilisation des modèles.

Il existe encore en France peu de cas de pollutions de nappes étudiées sur modèle. Les causes en sont multiples :

- * la prise de conscience que l'eau est une ressource économique primordiale est récente, le traitement des rejets étant considéré comme une entrave économique,

- * de nombreuses pollutions constatées à l'heure actuelle correspondent à des activités industrielles anciennes les responsabilités sont souvent difficiles à établir, la réhabilitation est souvent coûteuse d'où le faible nombre d'études imposées par l'administration,
- * les modèles mathématiques et les techniques de décontamination sont des outils très récents.

Pour terminer nous rappellerons que si l'on peut espérer d'ici quelques années, mieux maîtriser la prévision d'évolution des pollutions dans le sous-sol, l'effort doit toujours porter sur la prévention : connaissance de la vulnérabilité des eaux souterraines à l'aplomb des sites industriels ou d'épandages, respect des règles de stockage, de transport des produits polluants, car le plus grand nombre de pollutions accidentelles et même chroniques sont dues à des négligences ou à un non respect des réglementations existantes.

BIBLIOGRAPHIE

- BOURG A., JEAN Ph., GADALIA A., MAUROUX B. et MOUVET C. - Prévision par modélisation des transferts de micropolluants organiques dans un champ captant - Rapport BRGM inédit - 89 SGN 160 EEE - 1989
- LANDREAU A., ROUX J.C. - Evolution et répartition des teneurs en nitrates dans les eaux souterraines en France - In : *La pollution par les nitrates. Quels responsables ?* Association Internationale des Entrepreneurs Ecologiques, colloque national Dijon, octobre 1984, cahiers de l'AIDEC n° 21 et 22 - 1984 - pp 3-45
- JEAN Ph. - Le modèle SESAME - Modélisation de la migration de substances dissoutes dans les eaux souterraines - Rapport BRGM SGN/3E 88/12
- MAKHOUKH M., NGHIRA A., JEAN Ph. et SAUTY J.P. - Application de la micro informatique à la prévision de l'impact d'une infiltration contrôlée d'effluents urbains - Fac - 4ème symposium international sur l'application des systèmes à la gestion des ressources en eau - Rabat - 11/13 octobre 1988
- ROUX J.C. - Pollution de la nappe de la craie sous les zones industrielles de la région rouennaise. In : *proc. symposium Amsterdam* - Publ. AIHS n° 123, 1987, pp 408-420
- ROUX J.C. - Qualité et pollution des eaux souterraines de la France - *Annales de la Voirie et de l'Environnement* - n° 12 - décembre 1987
- ROUX J.C. - Contrôle et protection de la qualité des eaux souterraines captées pour l'alimentation en eau potable - *Hydrogéologie N° 1* - Ed. du BRGM - 1988
- THIERRY D., SEGUIN J.J. - Un modèle hydrologique global de transfert de nitrates dans un bassin versant - Application aux sources de Provins et à la nappe de la Beauce à Pithiviers - *Hydrogéologie n° 1* - 1986 - p 3-12

- SAUTY J.P., BOURG A., JEAN Ph., RICHARD F. - MISS, a coupled model of water-chemistry and hydrodispersive transport in aquifers. - *Proc. Internat. Conf. on Goundwater contamination : Use of Models in Decision Making*, Octobre 1987 - Amsterdam
- SAUTY J.P. - Identification des paramètres du transport hydrodispersif dans les aquifères par interprétation de traçages en écoulement cylindrique convergent ou divergent - *Jour. hydrol.* - vol 39 - n° 1-2 - 1978 - pp. 69-103
- SAUTY J.P., KINZELBACH W. - Identification of the parameters of groundwater mass transport - Invited paper to NATO advanced Research Workshop, Lisboa - June 1-5 1987
- SAUTY J.P., KINZELBACH W. - CATTI international ground water modeling center - IGWMC - Bas 24 - 1988
- VANCON J.P. - Modèle hydrochimique du bassin potassique - Evolution future de la salinité - Rapport BRGM 87 SGN 621 ALS
- VANCON J.P., ACKERER Ph. - Modèle hydrodispersif multicouche pour la simulation de la propagation des pollutions dans les eaux superficielles et les eaux souterraines - Rapport BRGM inédit 89 SGN 190 ALS