

JOURNEES PNRH DE BORDEAUX
Transport et interactions géochimiques
20 et 21 janvier 2004

Laboratoire inter-établissements TREFLE

Site ENSAM, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers
Amphi C
Esplanade des Arts et Métiers,
33405 Talence cedex

PROGRAMME - RESUMES DES COMMUNICATIONS

Organisation:

Yannick ANGUY (TREFLE)

yannick@lept-ensam.u-bordeaux.fr
Tél.: 05 56 84 54 18

JOURNEES PNRH DE BORDEAUX Transport et interactions géochimiques

PROGRAMME
Mardi 20 Janvier 2004

10 ^h 15 – 10 ^h 45	ACCUEIL / POSTERS / CAFE
10 ^h 45 – 11 ^h 00	«Quelques mots d'introduction à ces Journées»

SESSION I : Hydrodynamique et interaction fluides / roche

11 ^h 00 – 11 ^h 30	La genèse et l'évolution du karst: une question d'écoulements souterrains plus qu'un ensemble de processus géochimiques. Par Michel BAKALOWICZ <i>HYDROSCIENCES Montpellier</i>
11 ^h 30 – 12 ^h 00	Modélisation multi - échelle du processus de diffusion/réaction en milieu poreux – Illustration générique et perspectives d'application à la diagenèse d'un système carbonaté. Par Cécile RABIER, Yannick ANGUY, Guy CABIOCH et Pierre GENTHON <i>TREFLE Bordeaux / IRD Nouméa</i>
12 ^h 00 – 12 ^h 30	Déposition en écoulement à plusieurs phases en milieu poreux. Par P. M. ADLER et J.-F. THOVERT <i>IPG Paris / LCD Poitiers</i>

12 ^h 30 - 14 ^h 15	REPAS
---	--------------

14 ^h 15 – 14 ^h 45	Instabilités de dissolution en milieu poreux. Par M. QUINTARD, F. GOLFIER, B. BAZIN, R. LENORMAND et D. LASSEUX <i>IMFT Toulouse / ENSTIMAC / IFP / TREFLE Bordeaux</i>
14 ^h 45 – 15 ^h 15	Simulation BGK sur réseaux de la dissolution d'un poreux au cours de son invasion. Par TALON L., MARTIN J. RAKOTOMALALA N. et SALIN D. <i>FAST Orsay</i>

15 ^h 15 – 15 ^h 45	Prise en compte de l'organisation multi-échelle des réseaux de fractures dans les modèles de transfert. Par Philippe DAVY, Jean-Raynald de DREUZY, Olivier BOUR et Caroline DARCEL <i>GEOSIENCES Rennes / ITASCA Ecully</i>
15 ^h 45 – 16 ^h 15	Evolution de la géométrie de l'espace des vides entre épontes de fracture en cours de cisaillement: implications en termes d'écoulement fluides. Par Joëlle RISS et Antoine MARACHE <i>CDGA Bordeaux</i>

16 ^h 15 – 16 ^h 45	POSTERS / CAFE.
---	-----------------

SESSION II : Transport de polluants / bio atténuation

16 ^h 45 – 17 ^h 15	Thermodynamique hors équilibre et tomographie géo-électrique, ou comment visualiser les phénomènes de transport et les interactions géochimiques à distance. Par REVIL André. <i>CNRS-CEREGE, Aix en Provence</i>
17 ^h 15 – 17 ^h 45	Géochimie et aquifères: modélisation couplée de systèmes fortement réactifs. Par Jan VAN DER LEE. <i>ENSMP - CIG Fontainebleau</i>
17 ^h 45 – 18 ^h 15	Evolution de la qualité de l'eau dans les mines abandonnées du bassin ferrifère Lorrain -De l'expérimentation en laboratoire à la modélisation in situ. Par COLLON Pauline, FABRIOL Robert et BUES Michel <i>LAEGO Nancy / BRGM</i>
18 ^h 15 – 18 ^h 30	DISCUSSION.

18 ^h 30 – 19 ^h 15	POSTERS / APERO
---	-----------------

21 ^h 00	DINER en ville.
--------------------	------------------------

JOURNEES PNRH DE BORDEAUX
Transport et interactions géochimiques

PROGRAMME
Mercredi 21 Janvier 2004

8 ^h 15 – 8 ^h 45	CAFE
---------------------------------------	------

8 ^h 45 – 9 ^h 00	«Encore quelques mots ...»
---------------------------------------	----------------------------

SESSION II (suite) : Transport de polluants / bio atténuation

9 ^h 00 – 9 ^h 30	Le transport réactif, cinétique et non linéaire, dans les milieux poreux hétérogènes: méthodes de modélisations et effets. Par Katia BESNARD, Jean-Raynald de DREUZY et Luc AQUILINA <i>GEOSIENCES Rennes</i>
---------------------------------------	---

9 ^h 30 – 10 ^h 00	Application de l'analyse d'images non linéaire à la caractérisation macroscopique de la dissolution de micelles de polluants en zone saturée. Par Emmanuel LE TRONG, Yannick ANGUY et Azita AHMADI <i>TREFLE Bordeaux</i>
--	---

10 ^h 00 – 10 ^h 30	Structures et textures des argiles: interactions avec les fluides. Par Alain MEUNIER, Dimitri PRET et Stéphane SAMMARTINO <i>HYDRASA Poitiers / ERM Sarl</i>
---	--

10 ^h 30 – 10 ^h 45	POSTERS / CAFE.
---	-----------------

10 ^h 45 – 11 ^h 15	Méthode d'intégration de séries complexes de réactions chimiques dans les modèles de transport réactif : le cas des sites pollués. Par ATTEIA Olivier <i>Institut EGID Pessac</i>
---	---

11 ^h 15 – 11 ^h 45	A novel approach for modelling the biodegradation of chlorinated solvents Par Fabien NEX, Gerhard SCHÄFER (1), Jean-Marie COME, Timothy M VOGEL <i>IMFS-IFARE Strasbourg / BURGEAP Lyon / Center for Microbial Ecology Villeurbanne</i>
---	---

11 ^h 45 – 12 ^h 15	Bio films dans les milieux poreux – Développement des équations macroscopiques par changement d'échelle. Par F. GOLPIER, B. WOOD, S. WHITAKER et M. QUINTARD. <i>ENSTIMAC / Univ. California Davis/ IMFT Toulouse</i>
---	---

12 ^h 15 – 12 ^h 30	DISCUSSION.
---	-------------

12 ^h 30 - 14 ^h 00	REPAS
---	-------

Réunion du Groupe PNRH

14 ^h 00 – 15 ^h 30	ORDRE DU JOUR : 1. Rappels sur la gestion centralisée du projet par l'INSU 2. Mise en place d'un suivi continu du projet par le Comité Scientifique PNRH 3. Appel d'offre 2004: amendement pour l'insertion d'un thème «problèmes inverses»? Instigation d'un projet «inverse» individualisé et indépendant mais en partenariat avec notre projet «transferts complexes et ressources en eau»? 4. Prochaine réunion du groupe: discussion de la thématique, des dates et du site d'accueil.
---	--

15 ^h 30 – 16 ^h 15	Pour les intéressés: visite du TREFLE
---	--

SESSION I: HYDRODYNAMIQUE ET INTERACTION FLUIDES / ROCHE.

20/01/04. 11^h00-11^h30

La genèse et l'évolution du karst: une question d'écoulements souterrains plus qu'un ensemble de processus géochimiques.

Par Michel BAKALOWICZ,
HydroSciences, Montpellier
baka@msem.univ-montp2.fr

Dans le vocabulaire des géologues comme des géomorphologues, le terme de karst est classiquement associé à de la dissolution de roches carbonatées. À partir d'observations de terrain, nous montrerons que le karst ne peut absolument pas être réduit à des formes locales de dissolution, mais à un ensemble de mécanismes, incluant la dissolution des carbonates, commandés par les conditions d'écoulement souterrain. Nous en viendrons donc à définir les concepts à la base de la karstogenèse, comme le potentiel de karstification et le niveau de base. Nous verrons comment ils déterminent les différents types de karst connus; les critères qui permettent de les distinguer seront passés rapidement en revue. Enfin, les conséquences hydrogéologiques seront présentées de manière à faire apparaître les principaux problèmes conceptuels et méthodologiques posés par l'étude des karsts et par la mise en valeur des ressources qu'ils contiennent.

20/01/04. 11^h30-12^h00

Modélisation multi-échelle du processus de diffusion/réaction en milieu poreux - Illustration générique et perspectives d'application à la diagenèse d'un système carbonaté.

Par Cécile RABIER¹, Yannick ANGY¹, Guy CABIOCH² et Pierre GENTHON².

1: TREFLE, Talence.
rabier@lept-ensam.u-bordeaux.fr
2: IRD, Nouméa.

Ce travail s'inscrit dans le contexte de l'étude par la modélisation des phénomènes hydro-chimiques en milieu poreux. Le couplage entre transport et diagenèse est ici traité par une approche multi-échelle permettant de formaliser les interactions entre niveau de description microscopique et niveau(x) de description macroscopique(s). Dans le cadre de l'hypothèse quasi-statique, l'approche permet alors:

- 1: de calculer les propriétés de transport émergeant à un 1^{er} niveau de description macroscopique en intégrant l'effet de la répartition spatiale des interfaces microscopiques entre phases en présence,
- 2: de traiter la nature évolutive de ces interfaces microscopiques (dissolution/précipitation liées au système réactif) en intégrant à la fois la contribution des variables et des phénomènes microscopiques pertinents et celle des phénomènes se déroulant aux échelles supérieures.

La démarche est illustrée dans un 1^{er} temps par un exemple générique (et très simplifié) de diffusion/réaction dans un poreux modèle.

La 2nd partie, plus prospective, concerne l'idée de mettre à profit la mise à jour locale avec le temps t de la géométrie (point 2. ci-dessus) pour valider l'approche en confrontant évolutions microstructurales obtenues numériquement et analogues réels dont les états initiaux, intermédiaires et finaux sont bien contraints. Dans ce travail encore préliminaire, nous présenterons du point de vue naturaliste l'exemple retenu, la transformation de l'aragonite en calcite dans un milieu carbonaté, un corail de type *Porites*, en insistant:

- sur la complexité des systèmes naturels visés par la modélisation,
 - sur les caractéristiques qui devront être préservées dans une optique de validation du modèle.
-

20/01/04. 12^h00-12^h30

Déposition en écoulement à plusieurs phases en milieu poreux.

Par P.M. ADLER¹ et J.-F. THOVERT²

1: IPG Paris, adler@ipgp.jussieu.fr

2: LCD Poitiers

Des solutés sont en général transportés par des mélanges d'eau et d'huile en écoulement dans un milieu poreux; ces solutés peuvent se déposer sur les parois des pores. L'analyse d'un tel phénomène nécessite plusieurs ingrédients. Un modèle réaliste des milieux doit être employé. On doit pouvoir calculer l'écoulement à deux phases. La convection/diffusion du soluté doit être modélisée, ainsi que la déposition aux parois. Cette déposition peut avoir deux conséquences que nous avons étudiées séparément. Dans un premier cas, on peut avoir colmatage progressif du milieu. Dans le second, on peut avoir changement de mouillabilité du milieu.

20/01/04. 14^h15-14^h45

Instabilité de dissolution en milieux poreux.

Par M. QUINTARD¹, F. GOLFIER², B. BAZIN³, R. LENORMAND³ et D. LASSEUX⁴

1: IMFT Toulouse, Michel.Quintard@imft.fr; 2: Ecole des Mines d'Albi; 3: IFP, Rueil-Malmaison, 4: TREFLE Bordeaux

Dissolution mechanisms in porous media are of paramount importance in many practical situations. This is the case, for instance, when considering acid injection in reservoirs, or NAPL (Non-Aqueous Phase Liquid) pollutant dissolution in aquifers, salt formation dissolution. When trying to model those phenomena, several important theoretical questions must be answered. The major question concerns the possibility of representing by macro-scale equations mass and momentum transfer in such systems. Because dissolution patterns are greatly affected by heterogeneity effects at all scales (pore-scale and small-scale heterogeneities leading to wormholing, large-scale heterogeneities), and because the dissolution process itself leads to transient evolution of the geometrical characteristics of the system, there is a great potential for non-local behavior in space and time.

These questions are reviewed on the basis of recent theoretical, experimental, and numerical evidence. The status of Darcy-Scale and Core-Scale models is discussed based on:

- Theoretical arguments using averaging techniques,
- Direct numerical simulation of pore-scale and Darcy-scale problems,
- Experimental evidence (acid injection, salt dissolution, NAPL dissolution).

It is shown that Darcy-Scale models have a sufficient potential for reproducing even unstable dissolution patterns in porous media, as well as some quantitative characteristics such as the optimum flow rate leading to the longest wormhole for a minimum acid consumption. Based on numerical results, the possible features of large-scale models are investigated. Finally, a weak solution to the problem of the impact of large-scale heterogeneities on dissolution models is presented in the case of NAPL dissolution.

20/01/04. 14^h45-15^h15

Simulation BGK sur réseaux de la dissolution d'un poreux au cours de son invasion.

Par TALON L., MARTIN J. RAKOTOMALALA N. et SALIN D.

FAST, Orsay; dos@fast.u-psud.fr

Notre technique de simulation BGK nous a permis de simuler:

1. Le transport passif de traceur dans un milieu poreux de champ de perméabilité connu (statistique et corrélation) en bon accord avec les approches stochastiques.
2. Les réactions chimiques en présence d'écoulements dans les géométries simples (tubes, cellule de Hele-Shaw).

Nous donnons quelques résultats très préliminaires de réactions de dissolution au cours de l'écoulement à travers nos milieux poreux.

20/01/04. 15^h15-15^h45

Prise en compte de l'organisation multi-échelle des réseaux de fractures dans les modèles de transfert.

Par **Philippe DAVY¹**, **Jean-Raynald de DREUZY¹**, **Olivier BOUR¹** et **Caroline DARCEL²**.

1 : GEOSIENCES Rennes, UMR 6118 CNRS, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes cedex.

Philippe.Davy@univ-rennes1.fr

2 : ITASCA, 64 chem. Mouilles 69130 ECULLY

L'objectif de cette communication est de discuter la manière de prendre en compte l'hétérogénéité constitutive des réseaux de fractures dans les modèles d'écoulement. Les réseaux de fractures sont des systèmes multi échelles dont les propriétés statistiques ne montrent pas d'échelle caractéristique évidente: les distributions de longueurs de fractures sont modélisables par des lois de puissance sur plusieurs ordres de grandeur, et les corrélations spatiales par des modèles fractals. Or la plupart des méthodes d'homogénéisation sont basées sur une hétérogénéité d'extension limitée, et la notion de milieu équivalent - indispensable pour traiter un problème «sous contraint» - est assez intuitivement associée à une échelle de représentativité. Dans les milieux multi échelle, définir cette échelle n'est qu'une des difficultés théoriques à surmonter; la structure «porteuse» des flux -notamment sa dimensionnalité et les structures pertinentes, etc. -, les effets d'échelle, la variabilité, les modèles afférents de dispersivité, de réactivité, ..., sont autant d'éléments qu'il est nécessaire de définir pour construire un modèle de transport pertinent.

L'analyse réalisée est basée sur une définition des réseaux de fracture «orientée objet» où chaque fracture est définie par sa position, son orientation, sa taille et son ouverture, et le réseau par les distributions statistiques de ces paramètres. La définition du modèle d'écoulement va essentiellement dépendre de 3 distributions potentiellement interdépendantes: celle des longueurs (tailles) de fractures, celle des ouvertures, et les corrélations spatiales. Le modèle statistique sur lequel nous avons basé notre analyse a été validé sur plusieurs réseaux de failles et de joints, cartographiés à différentes échelles. Il est défini par plusieurs lois d'échelle (sur les densités, les longueurs ou les ouvertures), chacune caractérisée par un exposant et un terme de densité. L'analyse des structures d'écoulement est réalisée à partir de simulations numériques actuellement en 2D sur un grand nombre de réseaux.

En fonction de ces paramètres constitutifs, nous avons défini les grandes classes de modèles admissibles et les structures qui contrôlent la perméabilité des milieux, la diffusion en régime transitoire, la dispersivité et leur réactivité potentielle. Il apparaît notamment que la plupart des paramètres hydrauliques (y inclus la connectivité) ont des dépendances d'échelle importantes, principalement dues à des effets statistiques «extrêmes» (probabilité non négligeable de rencontrer une structure de longueur comparable à la taille du système). La typologie des modèles admissibles va essentiellement dépendre des exposants constitutifs de la structure du milieu (dimension fractale, exposant des longueurs, ...) et d'un paramètre de densité analogue au paramètre de percolation de la théorie éponyme.

20/01/04. 15^h45-16^h15

Evolution de la géométrie de l'espace des vides entre épontes de fracture en cours de cisaillement: implications en termes d'écoulement fluides.

Par **Joëlle RISS** et **Antoine MARACHE**.

CDGA, Talence.

J.Riss@cdga.univ-bordeaux1.fr

La construction d'un modèle de massifs fracturés utilisant la description statistique de la fracturation reconnue, en intégrant pendages, directions et densité de la fracturation rencontrée en forages ou sur les affleurements permet de calculer ensuite des écoulements. Les calculs reposent cependant sur l'approximation des fractures par des objets plans, ce qui est loin de représenter la réalité. En effet la circulation dans les fractures dépend tout à la fois de la morphologie des épontes de la fracture de l'espace des vides situés entre les épontes et de l'état de contrainte qui s'y applique: la chenalisation est essentiellement chenalisée.

On se propose, à partir d'exemples variés de montrer comment la morphologie des fractures conditionne le comportement mécanique d'un joint rocheux et par suite son comportement hydromécanique. Après une présentation de résultats expérimentaux obtenus sur une fracture soumise à un état de contrainte normale puis en cisaillement, on montre que, moyennant une bonne reconstruction - par des méthodes géostatistiques - de la morphologie des épontes, il est possible de prédire l'évolution de l'espace des vides - lieu de l'écoulement- au cours du cisaillement du joint.

En conclusion, l'utilisation conjointe de résultats expérimentaux (essais de laboratoire, saisie de profils), des méthodes de l'analyse d'images et de la géostatistique (simulation et visualisation de la morphologie) et de la modélisation analytique et statistique par plans d'expériences du comportement mécanique du joint est extrêmement riche et efficace pour aider à la compréhension de la complexité de la circulation de fluides entre deux surfaces rugueuses partiellement en contact.

SESSION II: TRANSPORT DE POLLUANTS / BIO ATTENUATION.

20/01/04. 16h45-17h15

Thermodynamique hors-équilibre et tomographie géo-électrique, ou comment visualiser les phénomènes de transport et les interactions géochimiques à distance.

Par **REVIL André**,
CNRS-CEREGE, Aix en Provence, revil@cerege.fr

La thermodynamique hors équilibre permet aujourd'hui de mieux comprendre les phénomènes de transport dans les milieux poreux. Lorsque cette approche est combinée à l'approche de prise de moyenne volumique des équations locales, il est alors possible de décrire les propriétés du matériau poreux rentrant dans les équations constitutives en fonction d'un minimum de paramètres clefs contrôlant l'influence qu'exerce la topologie de l'espace poreux et l'interface eau/minéraux sur les phénomènes de transport. Parmi les implications de ce type d'analyse, il en est une qui intéresse tout particulièrement les géophysiciens. Tout gradient de potentiel chimique (du solvant, c'est-à-dire de l'eau, des solutés, ou des électrons si leur transport est autorisé par la présence de conducteurs métalliques ou de biofilms bactériens) est responsable d'une source nette de courant. Cette densité de courant est une source de petites perturbations électromagnétiques dans les équations de Maxwell. L'enregistrement à distance de ces perturbations (en particulier du champ électrique dans la limite quasi-statique) apporte une information sur les phénomènes de transport (composante électrocinétique) et les interactions géochimiques (e.g. composant électro-rédox). Seront discutés (1) le rapport signal-sur-bruit de ces signaux électriques et leur sensibilité aux fluctuations thermodynamiques locales, (2) des cas d'applications en hydrogéologie à l'aide du formalisme de Green, et (3) un cas d'application à l'étude d'un panache de contamination issu d'un CET. Un autre exemple d'application de ces méthodes (qui ne sera pas traité dans cet exposé) est l'étude des précurseurs électromagnétiques des éruptions volcaniques où les fluctuations électromagnétiques sont directement imputables aux couplages thermo-hydro-mécaniques dans le système considéré via le phénomène électrocinétique.

20/01/04. 17^h15-17^h45

Géochimie et aquifères: modélisation couplée de systèmes fortement réactifs.

Par **Jan VAN DER LEE**
ENSMP, CIG, Fontainebleau, Jan.vanderlee@ensmp.fr

La mobilité des produits chimiques comme les métaux toxiques dans un milieu poreux complètement ou partiellement saturé d'eau dépend fortement des espèces majeures en solution, des phases minérales, des organiques et des gaz dissous ainsi que les réaction de sorption sur les phases immobiles. Afin de comprendre et de contrôler le comportement et la dissémination de la pollution, nous utilisons les modèles géochimiques et hydrodynamiques de façon couplée. En effet, les interactions chimiques et le processus hydrodynamique, e.g. la migration et dispersion dans un milieu poreux, s'imposent simultanément et de façon interdépendante. Le couplage entre un modèle de transport d'un traceur en milieu poreux et un modèle géochimique s'est avéré une tâche délicate, car il s'agit de coupler deux phénomènes dont les concepts physiques, mathématiques et numériques sont fortement différents.

En France, le développement du modèle de transport réactif a été abordé dans le contexte du programme *Pôle Géochimie-Transport*, regroupant plusieurs organismes dont le CEA, IRSN, EDF, Lafarge et l'École des Mines de Paris. L'approche qui repose sur le couplage d'un modèle hydrodynamique-transport avec un modèle géochimique est actuellement utilisée dans un nombre croissant de domaines, dont celui du stockage de déchets radioactifs, la séquestration géologique de gaz, des études d'impact de dépôts polluants comme les résidus miniers par exemple et bien d'autres domaines. D'autres applications, moins courantes mais d'autant plus intéressantes, sont actuellement en voie de se concrétiser, comme l'étude de la corrosion de certains matériaux dans les circuits EPR, ou comme le la simulation du comportement de métaux toxiques dans le corps humain.

Les possibilités du modèle couplé HYTEC peuvent être démontrées à l'aide d'exemples intéressants qui mettent en avant l'importance des phénomènes physico-chimiques du terrain: la fuite d'acide dans la sub-surface (donc en milieu non saturé), l'exploitation d'une mine d'uranium par lixiviation in situ, le colmatage possible à l'interface béton-argile (barrière ouvragée d'un stockage de déchets) ou encore la migration d'une pollution à partir d'un dépôt de curage dans l'aquifère.

20/01/04. 17^h45-18^h15

Evolution de la qualité de l'eau dans les mines abandonnées du bassin ferrifère Lorrain -De l'expérimentation en laboratoire à la modélisation in situ.

Par **COLLON Pauline** ⁽¹⁾, **FABRIOL Robert** ⁽²⁾ et **BUES Michel** ⁽¹⁾

(1) LAEGO, Nancy; (2) BRGM

Pauline.Collon@ensg.inpl-nancy.fr

Depuis une vingtaine d'années, l'abandon des mines de fer lorraines a entraîné un ennoyage progressif des anciens travaux miniers avec pour conséquences sur l'eau souterraine: une modification des écoulements et une dégradation de la qualité de l'eau. Dans ce contexte, notre travail avait pour objectifs de caractériser l'évolution de la qualité de l'eau souterraine pendant et après l'ennoyage, d'en déterminer les causes et de fournir les bases d'un outil d'aide à la gestion de l'eau. A cet effet, une synthèse des connaissances concernant le drainage minier, et plus particulièrement les mécanismes chimiques qui en sont la cause, a été réalisée. Notre attention s'est ensuite portée sur le cas particulier du bassin ferrifère lorrain (BFL).

Une étude expérimentale a été réalisée en laboratoire sur des échantillons prélevés en mine dans la partie nord du BFL. Elle comprend une étude minéralogique, des essais en réacteurs fermés, dont certains ont intégré un suivi de la composition des gaz, et des expériences de lessivage en colonne. Cette étude a permis de caractériser l'évolution de la qualité de l'eau lorsqu'elle est mise en contact avec les roches du BFL: nature de la pollution, durée et origine minéralogique probable.

A partir de ces résultats, un modèle chimique cinétique a été construit, puis a été intégré dans un modèle de mélangeur parfait. Ces simulateurs reproduisent les concentrations observées dans l'eau à l'issue des essais en réacteurs fermés et au cours des expériences de lessivage en colonne. Un scénario expliquant l'évolution de la chimie de l'eau lors de sa mise en contact avec les roches du BFL a ainsi pu être proposé. Enfin, sur cette base, un simulateur a été construit et permet de reproduire l'évolution de la qualité de l'eau au point de débordement du secteur Sud du bassin ferrifère lorrain, dont l'ennoyage a débuté en 1995.

Mots clés: Qualité de l'eau, drainage minier neutre, mines de fer, modélisation, géochimie, modèle couplé chimie/transport.

21/01/04. 9^h00-9^h30

Le transport réactif, cinétique et non linéaire, dans les milieux poreux hétérogènes: méthodes de modélisations et effets.

Par **Katia BESNARD**, **Jean-Raynald de DREUZY** et **Luc AQUILINA**.

GEOSIENCES, Rennes.

Katia.Besnard@univ-rennes1.fr

La modélisation du transport réactif reste encore un enjeu pour la prédiction des transferts de contaminants dans le sous-sol.

Au-delà des aspects purement techniques, la modélisation doit permettre de mieux comprendre la manière dont le couplage entre les parties physique et chimie s'effectue, et la façon de prendre en compte l'hétérogénéité quasi intrinsèque des milieux géologiques. Un des objectifs est de déterminer les lois macroscopiques du transport réactif en milieu hétérogène, notamment dans les cas les plus difficiles où les réactions sont non linéaires et hors d'équilibre.

Nous avons développé un outil numérique modélisant ce couplage physico-chimique. Le modèle repose sur le principe d'une discrétisation de la phase liquide en volumes élémentaires, caractérisés par une ou plusieurs concentrations en solutés. La méthode consiste à suivre simultanément ces volumes dans la grille par une méthode de transport dans le domaine des temps. L'intérêt de ce modèle est le découplage des processus physique et chimique à l'échelle du volume élémentaire. L'évolution de la concentration dans le volume est donnée par le flux chimique et est résolue à chaque traversée de maille par le volume élémentaire. Cette méthode peut s'adapter facilement à toute(s) réaction(s) chimique(s).

Nous avons étudié le comportement d'un panache soumis à une adsorption cinétique, non linéaire de type Freundlich. Le développement du panache a principalement été caractérisé par sa vitesse moyenne et son coefficient de dispersion effectif. L'effet du couplage transport cinétique / non-linéarité a d'abord été étudié en milieu physiquement homogène. Nous avons étudié l'effet des conditions initiales ainsi que l'effet d'une hétérogénéité chimique du milieu. Nous avons montré que la cinétique influence le comportement du panache à court terme, provoquant même dans certains cas l'apparition de doubles pics transitoires dans la distribution du panache en solution. Nous avons quantifié ces phénomènes qui sont potentiellement des indicateurs des paramètres de réaction. Le comportement asymptotique du panache est lui contrôlé par la non linéarité de la réaction. Nous avons étudié ensuite le comportement d'un panache injecté sous forme de pulses dans un milieu physiquement hétérogène dans lequel la variation spatiale de la conductivité hydraulique est supposée aléatoire. Nous avons pu ainsi quantifier les rôles respectifs de la non-linéarité et de l'hétérogénéité du milieu dans l'étalement du panache.

21/01/04. 9^h30-10^h00

Application de l'analyse d'images non linéaire à la caractérisation macroscopique de la dissolution de micelles de polluants en zone saturée.

Par Emmanuel LE TRONG, Yannick ANGUIY et Azita AHMADI.

TREFLE, Talence.

letrong@lept-ensam.u-bordeaux.fr

A l'échelle macroscopique, la lente dissolution de micelles d'un polluant peu miscible dans l'eau (NAPL), piégés dans la zone saturée, est appelée dispersion active. Du point de vue de la modélisation, le passage par prise de moyenne volumique de la description même très simplifiée des processus physiques mis en jeu à l'échelle du pore aux grandeurs macroscopique caractérisant la dispersion active (tenseur de dispersion D^* , «cinétique» de dissolution du polluant α) se heurte classiquement à la complexité microstructurale des milieux poreux réels.

Nous proposons ici une démarche d'analyse d'images non linéaire (Morphologie Mathématique) qui permet de réduire la complexité microstructurale d'un milieu réel (connu sous la forme d'une image digitale 3D binaire) aux seules règles décrivant l'association des tailles de rayons d'accès aux pores adjacents. Ces règles, réputées déterminantes pour les phénomènes de transport et/ou transfert sont ici explicitées sous la forme de modèles de réseaux de pores.

Cette simplification quantitative de la microstructure poreuse fournit un support pour l'étude compréhensive, et à terme prédictive, de l'influence de la microstructure sur les propriétés macroscopiques de transport/transfert de classes variées de milieux poreux.

21/01/04. 10^h00-10^h30

STRUCTURES ET TEXTURES DES ARGILES: interactions avec les fluides

Par Alain MEUNIER¹, Dimitri PRET¹ et Stéphane SAMMARTINO²

1: HYDRASA UMR 6532 CNRS - Université de POITIERS

alain.meunier@hydrasa.univ-poitiers.fr

2: ERM Sarl (convention CNRS - Univ. Poitiers)

Les écoulements des fluides ne peuvent pas être considérés de façon identique dans les matériaux argileux et les simples matrices poreuses. En effet, les argiles présentent trois propriétés particulières qui influencent notablement ces écoulements:

- 1) leur capacité à retenir l'eau soit dans leur structure, soit à la surface de leurs cristaux modifie considérablement la notion de porosité à l'échelle du nanomètre;
- 2) leur capacité de gonflement induit des modifications de la distribution des pores jusqu'à la dimension micrométrique. La conséquence inverse, lorsqu'elles se rétractent, est l'ouverture de fractures en réponse aux tensions internes créées par la diminution de volume du couple solides - eau liée.
- 3) Leur haute réactivité même à l'eau pure liée en grande partie à l'extraordinaire développement des surfaces internes et externes. Cette réactivité se manifeste d'abord par leur capacité d'échange cationique qui est une propriété fondamentale dans les sols ou les barrières ouvragées. Elle se manifeste ensuite par la transformation minéralogique des solides.

Mesurer les interactions entre fluides et argiles nécessite d'abord de caractériser les voies de passage ces fluides (porosité connectée). La technique de l'autoradiographie assistée du traitement des images a permis d'accéder à des paramètres dans un espace 2D hors d'atteinte jusqu'à maintenant telles la surface réelle de contact ou la géométrie du réseau poreux. Pour les matériaux hétérogènes, cette méthode est complétée par la cartographie quantitative qui montre comment les différents composants du solide sont en contact avec les fluides. La distribution minéraux-pores devient accessible dans l'espace 3D grâce à la tomographie à haute résolution. Les performances de la pétrographie quantitative appliquée aux matrices argileuses laissent espérer une meilleure adéquation entre modèles et comportement réel de ces matériaux en conditions naturelles ou artificielles.

21/01/04. 10^h45-11^h15

Méthode d'intégration de séries complexes de réactions chimiques dans les modèles de transport réactif : le cas des sites pollués

Par **ATTEIA Olivier**

Institut EGID, 1 Allée Daguin, 33607 Pessac Cedex
atteia@egid.u-bordeaux.fr

Les modèles de transport réactifs dédiés aux nappes aquifères se développent rapidement, notamment en relation avec l'augmentation de capacité de calcul des ordinateurs. Ceux-ci deviennent indispensables dans le cadre du suivi des sites pollués car les questions à résoudre sont de plus en plus complexes. En effet les phénomènes de biodégradation doivent être appréhendés, que ce soit face à la question de l'atténuation naturelle, ou dans le cadre de techniques modernes de réhabilitation de sites.

L'intégration des réactions chimiques ou biologiques dans les modèles peut globalement se faire selon deux approches. D'une part, une vision basée sur la thermodynamique, qui à l'aide des constantes des réactions et des concentrations des réactifs, permet de déterminer les réactions qui devraient advenir. D'autre part, une approche basée sur la cinétique qui conduit à mettre en place un éventail défini de réactions, tenant plus ou moins compte des conditions réelles du milieu. Nous montrerons, dans le cas de réactions de biodégradation sur site, quelles sont les limites de chaque approche.

Une compilation de résultats de terrain montre qu'il n'est pas possible d'établir de façon univoque l'ordre de la réaction présente in situ. En effet les hétérogénéités de terrain masquent d'éventuelles différences entre des cinétiques de type instantanées, de premier ordre ou de type Monod. Par contre, l'analyse détaillée des résultats de microcosmes permet de définir les schémas réactionnels les plus courants lors de la dégradation de BTEX ou de solvants chlorés. Il apparaît ainsi que la présence de réactions redox, ayant des énergies libres très élevées autorise une description du système comme une suite de réactions advenant selon un ordre connu. Les équilibres connexes, notamment acide-base, sont ensuite calculés par l'intermédiaire du bilan de protons. Nous proposons ainsi une formulation générique du schéma réactionnel permettant une description très précise de celui-ci et une mise en place aisée dans les modèles numériques.

L'utilisation d'une formulation entièrement basée sur la conservation de la matière induit un bilan intrinsèquement équilibré et permet de résoudre directement les concentrations des différentes espèces à partir de celles d'un traceur.

Des exemples de sites pollués, résolus à l'aide de la méthode semi-analytique présentée précédemment, permettront de montrer l'effet induit par les hypothèses formulées sur les réactions. Plus que la cinétique d'une réaction il devient évident que ce sont les conditions géochimiques favorables à cette réaction qui déterminent les concentrations résultantes au sein du panache.

En guide de conclusion, cette méthode est utilisée pour faire apparaître comment il est possible, à partir de données de terrain, de caractériser le schéma réactionnel le plus probable in situ.

21/01/04. 11^h15-11^h45

A NOVEL APPROACH FOR MODELING THE BIODEGRADATION OF CHLORINATED SOLVENTS

Par: **NEX Fabien** ⁽¹⁾, **Gerhard SCHÄFER** ⁽¹⁾, **CÔME Jean-Marie** ⁽²⁾, **VOGEL Timothy M.** ⁽³⁾

(1) IMFS-IFARE, UMR 7507 ULP-CNRS, 23 rue du Loess, BP 20, 67037 Strasbourg cedex.

(2) BURGEAP, 19 rue de la Villette, 69425 Lyon Cedex 03

(3) Center for Microbial Ecology, CNRS UMR 5557, Univ. Lyon 1, 69622 Villeurbanne.

f.nex@burgeap.fr; Schafer@imfs.u-strasbg.fr

Introduction

Chlorinated solvents (COHV), especially chloroethenes (tetrachloroethylene PCE, trichloroethylene TCE, dichloroethylene DCE and vinyl chloride VC), are among the most frequently detected contaminants in the subsurface. Depending on the bio- and geochemical environmental conditions, they can undergo different degradation mechanisms. The aim of this work is to add an innovative chlorinated solvent biodegradation module based on a biological, thermodynamical and mechanistic approach into an existing numerical finite difference code. This work was divided in three steps: 1: the elaboration of the conceptual model, 2: the coding in the 1-D numerical code, and 3: its validation by comparison with other existing numerical codes.

The conceptual model

Biodegradation is often an oxidation-reduction reaction, mediated by micro organisms, involving electron donors and acceptors. Typical electron donors in polluted groundwaters are petroleum hydrocarbons, BTEX, acetate... and the less oxidized COHV (DCE, VC). Typical electron acceptors are inorganic compounds (O₂, NO₃⁻, SO₄²⁻, Mn²⁺, Fe³⁺, CO₂) and the more oxidized COHV (PCE, TCE). However, depending on the environmental

conditions, not all the possible reactions (oxydation, reductive dechlorination under denitrifying conditions, reductive dechlorination under methanogenic conditions...) can apply to all the chlorinated solvents.

Therefore our approach is based on a «switch» system: the first switch corresponds to the selection of one reaction mechanism, the one involving the more energetic electron acceptor, in each part of the aquifer (e.g. if in the groundwater oxygen and sulfate are present, and if the oxygen concentration is higher than a threshold, then the only degradation that is modelled involves oxygen reduction). The second switch corresponds to the selection of the possible degradation pathways for each COHV (for instance, PCE is not considered to be aerobically degraded), based on real site or microcosm observations.

As far as kinetics of biodegradation are concerned, modified Monod / Michaelis-Menten kinetics were used to take into account the possible inhibition of all the compounds present in the aquifer (including the other COHV) on the biodegradation of one chlorinated solvent. This approach does not require a choice between direct and cometabolic degradation, as both can be considered using our mathematical formalism.

Coding and validating the model

These ongoing steps consist of the coding of the conceptual model in the 1-D finite difference flow and transport numerical code and its validation by comparison with existing codes on defined example tests. Once validated, the model will be integrated into a more complex multiphase multicomponent numerical code.

21/01/04. 11^h45-12^h15

Bio films dans les milieux poreux. Développement des équations macroscopiques par changement d'échelle.

Par F. GOLFIER⁽¹⁾, B. WOOD⁽²⁾, S. WHITAKER⁽²⁾ et M. QUINTARD⁽³⁾

1: Ecole des Mines d'Albi, golfier@enstimac.fr; 2: Univ. of Davis; 3: IMFT Toulouse. atteia@egid.u-bordeaux.fr

La modélisation du transport d'espèces chimiques en présence de bactéries, se développant sous la forme d'amas appelés biofilms, est un problème très actuel compte tenu de l'intérêt croissant pour ses applications tant environnementales (bio-rémédiation, bio-atténuation de contaminants dans les aquifères) qu'industrielles (bio-réacteur, corrosion des conduites).

Nous nous concentrerons ici sur la modélisation des équations macroscopiques qui régissent le transport à l'échelle de Darcy et le calcul des propriétés effectives (tenseur de dispersion) qui en découlent. Nous décrirons, en particulier, les résultats obtenus à l'aide de la méthode de prise de moyenne volumique dans les conditions d'équilibre local entre la phase fluide et la phase bio-film. Le calcul du tenseur de dispersion sera effectué en résolvant le problème de fermeture sur une cellule unitaire 3D obtenue par reconstruction tomographique d'un milieu poreux réel comportant une fraction volumique de bio-film. Nous montrerons comment le tenseur de dispersion effective dépend des paramètres de transport intrinsèques de la phase fluide et de la phase bio-film, du champ de vitesse, et de la géométrie des deux phases.

SESSION POSTER

Les 20/01 et 21/01/04

Géométrie et fonctionnement d'un réservoir karstique béarnais: cas de la fontaine d'Orbe (Arette, Pyrénées Orientales).

Par Fabrice REY^{1, 2}, Frédéric PRETOU², Frédéric HUNEAU¹, Joëlle RISS¹, Francis FRAPPA¹, Richard FABRE¹ et Roland LASTENNET¹

1: CDGA, Talence, J.Riss@cdga.u-bordeaux1.fr; 2: CETRA, Larroin.

Modeling tracer breakthrough tailing in a conduit-dominated karstic aquifer: dual flow and longitudinal dispersivity interpretation.

Par N. MASSEI, H.Q. WANG, M.S. FIELD, J.P. DUPONT, M. BAKALOWICZ et B. LAIGNEL

Nicolas.Massei@ univ-rouen.fr

Assessment of direct transfer and resuspension of particles during turbid floods at karstic spring.

Par N. MASSEI, H.Q. WANG, J.P. DUPONT, J. RODET et B. LAIGNEL

Nicolas.Massei@ univ-rouen.fr

Influence du caractère historique de la micro structure sur l'évolution du tenseur de diffusivité effective d'un milieu poreux granulaire.

Par Cécile RABIER¹, Yannick ANGY¹, Cédric MERCET¹, Pierre GENTHON² et Guy CABIOCH²

1: TREFLE, Talence, rabier@lept-ensam.u-bordeaux.fr; 2: IRD, Nouméa.

Transport réactif au sein d'un pilote expérimental à l'échelle métrique.

Par Charlotte GUILLOT DE SUDIRANR et Olivier ATTEIA

Institut EGID, Pessac, guillot@egid.u-bordeaux.fr