

# Développement d'un module microbiologique dédié à la modélisation hydrobiogéochimique et applications à la mobilité de l'arsenic

le 24 octobre 2006 à 14h00,

à l'École des Mines de Paris, 60 bld saint Michel, RER Luxembourg

Résumé :

La géochimie des systèmes naturels, tels que les anciens sites miniers, est influencée par les activités biologiques. Seuls des moyens informatiques prenant en compte de façon couplée la géochimie, l'hydrodynamique et la microbiologie permettront d'analyser, puis de prédire l'évolution de ces systèmes complexes. Depuis une dizaine d'années, des logiciels, tels que CHESS et HYTEC, sont capables de modéliser la plupart des processus géochimiques et hydrodynamiques se déroulant dans les sols et les sous-sols. L'objectif de ce travail est d'étendre ces logiciels à la prise en compte des activités microbiologiques.

CHESS calcule la spéciation géochimique à l'équilibre par un schéma modifié de Newton-Raphson. La même méthode de résolution a été étendue à la modélisation de systèmes réactionnels composés de cinétiques biologiques. La plupart des lois cinétiques biologiques peuvent désormais être utilisées : lois de Monod, lois d'inhibition, lois thermodynamiques. De plus, les autres options de cet outil ont été maintenues, en particulier le couplage avec le module de transport (HYTEC).

L'implémentation du code de calcul est d'abord vérifiée par la modélisation de plusieurs cas tirés de la littérature. L'outil a ensuite été utilisé pour la modélisation d'expériences réalisées par le BRGM, dans lesquelles un consortium bactérien est responsable de la dissolution réductive d'un hydroxyde de fer riche en arsenic. La mobilisation non congruente du fer et de l'arsenic est expliquée par la sorption sur l'hydroxyde de fer et par l'activité de deux métabolismes bactériens qui dégradent la matière organique en réduisant le Fe(III) et l'As(V).

L'étude de l'ancien site minier de Carnoulès (Gard, France) a finalement été abordée. Des expériences, réalisées par l'université de Montpellier, ont permis d'étudier l'évolution biogéochimique naturelle de l'eau acide de drainage minier. La modélisation des expériences prend en compte les oxydations biologiques du fer et de l'arsenic par l'oxygène dissous, et la précipitation d'une phase amorphe de Fe(III) et d'As(V). Les paramètres thermodynamiques et cinétiques ont été utilisés dans une modélisation hydrodynamique à l'échelle du terrain afin d'appréhender l'évolution géochimique de l'eau sortant du drainage minier.

Les différentes applications ont montré l'intérêt de la modélisation dans l'étude de l'interface eau-minéral, qui est souvent colonisée par des bactéries jouant un rôle dans les processus de précipitation-dissolution. Mais au delà de ce domaine d'étude, l'extension des outils CHESS et HYTEC à la prise en compte des activités biologiques a permis d'étendre considérablement le champs de leurs applications.