

Des pollutions suivies à la trace par Jocelyne Erhel et Jean-Raynald de Dreuzy. Des déchets à vie longue, entretien avec Jérôme Jaffré, propos recueillis par Dominique Chouchan.

Jocelyne Erhel, Jean-Raynald de Dreuzy, Jérôme Jaffré

► **To cite this version:**

Jocelyne Erhel, Jean-Raynald de Dreuzy, Jérôme Jaffré. Des pollutions suivies à la trace par Jocelyne Erhel et Jean-Raynald de Dreuzy. Des déchets à vie longue, entretien avec Jérôme Jaffré, propos recueillis par Dominique Chouchan.. Les Cahiers de l'INRIA - La Recherche, INRIA, 2009, Ces bactéries qui font l'homme. inria-00527556

HAL Id: inria-00527556

<https://hal.inria.fr/inria-00527556>

Submitted on 19 Oct 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

MODÉLISATION HYDROGÉOLOGIQUE

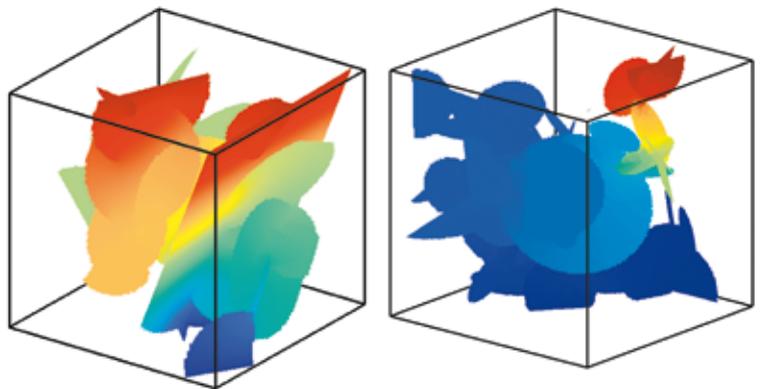
Des pollutions suivies à la trace

L'accès à l'eau potable est un privilège si l'on songe qu'un milliard d'humains en est encore dépourvu. Les recherches visent à produire les connaissances susceptibles d'aider à réduire la dégradation des nappes phréatiques.

Les eaux souterraines représentent environ 23 % des réserves en eau douce de la planète, contre 76 % pour les glaciers et seulement 0,3 % pour les eaux de surface. En France, elles couvrent près des deux tiers des besoins en eau potable et une partie des besoins de l'agriculture et de l'industrie. Mais leur surexploitation hypothèque gravement la pérennité de ces réserves, sans compter le risque corollaire d'une intrusion d'eau de mer dans les nappes littorales⁽¹⁾. Quant à la qualité des eaux, elle souffre d'une multiplicité de pollutions. Comment prédire le transport de ces polluants dans des aquifères dont la structure est généralement très hétérogène ?

La compréhension des mécanismes physico-chimiques de dispersion des polluants suppose au préalable de connaître la structure de ces aquifères et par voie de conséquence la structure des couches géologiques au sein desquelles l'eau circule. Un grand nombre de mesures de terrain sont certes disponibles. Celles-ci restent toutefois parcellaires et sont donc insuffisantes pour fournir une image détaillée de ces géométries complexes, qu'il s'agisse de strates sédimentaires ou de réseaux de fractures dans des roches. Il faut donc dévelop-

per des modèles numériques lesquels seront ensuite « calés » sur les données recueillies *in situ*. Au sein de notre équipe, nous concevons des modèles de nature stochastique (probabiliste): la stratégie consiste en effet à pallier le manque de mesures en utilisant des données de type probabiliste dont les caractéristiques (moyenne, variance, loi de distribution) sont choisies de façon réaliste au regard des mesures disponibles.

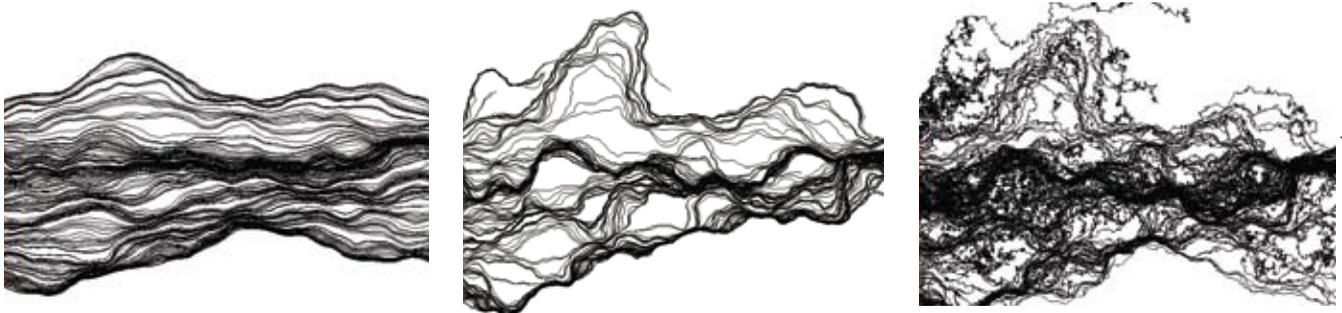


MICAS, INRIA, UNIVERSITÉ DU HAVRE, CNRS

L'étape suivante consiste à modéliser la circulation de l'eau (fig. 1), autrement dit sa vitesse dans les aquifères étudiés et sa charge hydraulique, ce dernier paramètre étant relié à la fois à la hauteur d'eau et à sa pression: l'écoulement se fait dans le sens des fortes charges vers les faibles charges. On rencontre alors une seconde difficulté, liée aux fortes hétérogénéités du milieu. C'est en particulier le cas des zones sédimentaires, les plus perméables étant constituées d'une juxtaposition d'argiles étanches et de sables perméables, eux-mêmes plus ou moins fins et/ou compactés. C'est aussi le cas des zones de roches fractu-

Fig. 1 : Sur ces représentations tridimensionnelles, on voit le résultat d'une simulation de la circulation d'eau dans deux réseaux de fractures d'une roche cristalline dont la structure est obtenue par tirage aléatoire. En rouge les fortes charges hydrauliques, en bleu les faibles charges.

Fig. 2 : Sur cette représentation bidimensionnelle sont simulées les trajectoires d'une espèce chimique (soluté) dans un aquifère pour différents cas. À gauche, une géologie peu hétérogène et un soluté peu diffusif, au centre une géologie très hétérogène et un soluté peu diffusif, à droite, une géologie très hétérogène et un soluté très diffusif.



MICAS, INRIA, UNIVERSITÉ DU HAVRE, CNRS

rées, les fractures étant d'ailleurs susceptibles de former un réseau connecté, avec des écoulements assez importants pour offrir une ressource exploitable. Il faut donc recourir à des modèles capables de prendre en compte ces hétérogénéités. Or celles-ci couvrent une large gamme d'échelles, ce qui impose de découper la zone étudiée, généralement étendue (la taille d'un aquifère), en un très grand nombre de mailles de petite taille (de plusieurs millions à l'ordre du milliard).

La circulation de l'eau est régie par deux équations de base⁽²⁾: la loi dite de Darcy* et la loi de conservation de la masse. La première

Une fois la circulation de l'eau modélisée, il s'agit de déterminer les concentrations d'espèces chimiques présentes. Ces espèces sont, soit en solution, soit sous forme de précipité, soit encore fixées aux grains de la roche. Le problème est de déterminer la répartition spatiale et temporelle de chacune d'elles, autrement dit l'évolution des concentrations des polluants dans telle ou telle maille, l'une des questions étant de savoir si un équilibre finit par s'instaurer. Nous sommes alors confrontés au couplage de deux modèles stochastiques, celui de la circulation de l'eau et celui représentant la dispersion des polluants.

exprime que la vitesse est proportionnelle au gradient de charge hydraulique, le coefficient de proportionnalité – la perméabilité – étant caractéristique du milieu géologique. La charge varie elle-même dans le temps en fonction de la porosité du milieu, de la densité de l'eau (plus ou moins salée par exemple) et de la saturation en eau (mélangée ou pas à de l'air ou à un autre fluide). Quant à la seconde équation, elle exprime que la masse d'eau en circulation reste constante tant qu'il n'y a ni recharge ni pompage.

En l'absence de données géologiques suffisantes – perméabilité, porosité – en tout point de la zone étudiée et d'une connaissance précise des lois de comportement – densité, saturation –, ces différents paramètres sont eux aussi représentés par des variables aléatoires. Nous sommes ainsi conduits à résoudre un système d'équations stochastiques, et ce au sein de chaque maille. Pour ce faire, notre stratégie consiste à estimer une valeur moyenne de la circulation de l'eau en nous fondant sur des simulations associées à un tirage au hasard des valeurs des paramètres (d'une simulation à plusieurs centaines). Autant dire qu'il s'agit d'opérations très gourmandes en puissance de calcul. Le nombre de mailles peut en effet atteindre plusieurs millions, voire plusieurs milliards. D'où l'utilisation des superordinateurs ou des grappes de processeurs connectés entre eux par des réseaux ultrarapides.

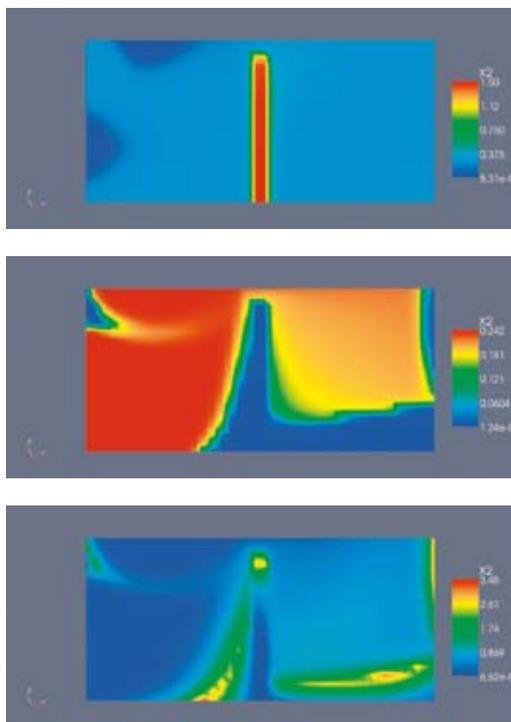
À un instant donné, seules les espèces en solution dans l'eau sont mobiles sous l'effet de la dispersion. Elles réagissent aussi entre elles et avec les espèces fixes, ce qui modifie la composition chimique de l'eau. La dispersion des polluants est régie par trois mécanismes: un mécanisme d'advection (transport par le flux d'eau), un mécanisme de dispersion cinématique (passage d'une ligne de courant à une autre, du fait des hétérogénéités essentiellement), un mécanisme de diffusion moléculaire (de type mouvement brownien). À cela viennent s'ajouter les réactions chimiques éventuelles des espèces entre elles et avec la roche^(3, 4). C'est notamment sur la modélisation de ces mécanismes que portent nos contributions au projet MICAS de l'Agence nationale de la recherche (ANR) et au Groupement de recherche MOMAS (voir l'encadré).

Nous avons par exemple testé notre modèle sur un cas simple dans le cadre de MICAS (fig. 2): une espèce chimique unique et inerte chimiquement (sans aucune réaction avec le milieu environnant). La figure 2 visualise les résultats de simulations de la dispersion dans un aquifère plus ou moins hétérogène. Si la perméabilité du milieu était homogène et s'il n'y avait pas de diffusion moléculaire, les trajectoires seraient identiques et horizontales. Dans les exemples de la figure 2 en revanche, le mouvement des particules reflète la

* La loi établie par l'hydraulicien Henry Darcy (1803-1858), notamment auteur d'un traité sur les fontaines publiques de Dijon, permet d'évaluer le débit d'eau qui peut s'écouler à travers un échantillon de milieu poreux par gravité et par différence de pression.

structure complexe du champ de vitesse et l'effet du mécanisme de diffusion⁽⁵⁾. Au bout d'un temps assez long, on observerait une stabilisation du panache de pollution. Un autre exemple intéressant est celui, purement théorique, que nous avons traité dans le contexte du groupement de recherche MOMAS (fig. 3). Nous avons simulé la dispersion au cours du temps, dans un aquifère, de treize espèces chimiques réagissant entre elles⁽⁶⁾. Mais les caractéristiques géologiques ont été fixées a priori et nous avons attribué deux valeurs possibles à la perméabilité, dans deux zones distinctes. Le modèle de circulation de l'eau et de dispersion des polluants est donc dans ce cas déterministe. La principale difficulté numérique vient alors du couplage non linéaire entre les phénomènes d'advection-diffusion-diffusion, d'un côté, et les réactions chimiques, de l'autre. Cette étude peut s'appliquer à la pollution d'un site par des déchets non radioactifs.

Reste que l'un des défis à relever à court terme, dans toutes ces recherches, est de parvenir à intégrer un nombre croissant de processus hydrogéologiques et physicochimiques, afin de nous rapprocher de situations réelles. Cela suppose de mettre l'accent sur une optimisation des algorithmes, compte tenu de la puissance de calcul et du temps pour résoudre de tels systèmes fortement non linéaires. De nouvelles pistes commencent également à être explorées, en particulier la détermination des caractéristiques hydrauliques à partir des mesures (résolution du problème inverse). Enfin, les méthodes que nous mettons au point pourront s'appliquer à l'étude du comportement d'autres fluides souter-



MOMAS, INRIA, ANDRA

rains (pétrole...). Elles constituent en outre un outil précieux pour les études de sécurité des futurs stockages géologiques de dioxyde de carbone. **J. E. et J.-R. de D.**

Jocelyne Erhel est directrice de recherche à l'Inria. Spécialiste de simulations numériques et de calcul intensif, elle est responsable au centre Inria de Rennes-Bretagne-Atlantique d'une équipe de calcul scientifique appliqué aux géosciences (SAGE).

Jean-Raynald de Dreuzy, chargé de recherche au CNRS au sein de l'Unité mixte de recherche Géosciences Rennes, travaille sur la modélisation des transports de fluides et de contaminants dans les milieux souterrains poreux et fracturés.

Fig. 3 : Cette série de résultats de simulation est réalisée sur la base d'un modèle géologique déterministe et d'un système chimique comportant 13 espèces. Elle montre la dispersion dans l'aquifère d'une des espèces au cours du temps : en rouge les régions où sa concentration est la plus élevée.

MICAS ET MOMAS EN BREF

Le projet *Modelling and Intensive Computation for Aquifer Simulations* (MICAS), financé par l'Agence nationale de la recherche (ANR), associe des équipes de l'Inria, des universités de Rennes 1, de Lyon 1 et du Havre, et le Réseau national des sites hydrogéologiques (H⁺). Son objectif principal : modéliser le transport de polluants dans des aquifères hétérogènes.

Le Groupement de recherche Modélisation mathématique et simulations numériques liées aux problèmes de gestion des déchets nucléaires (MOMAS) se compose de six partenaires : l'Agence nationale pour la gestion des déchets nucléaires (Andra), le Bureau des recherches géologiques et minières (BRGM), le Commissariat à l'énergie atomique (CEA), le CNRS, EDF et l'Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire (IRSN). Près d'une trentaine d'équipes d'universités, d'organismes de recherche et de grandes écoles sont associées aux travaux (via des projets de recherche et des rencontres scientifiques).

⁽¹⁾ G. de Marsily (sous la dir.), Les eaux continentales, Rapport de l'Académie des sciences, EDP Sciences, 2006.

⁽²⁾ G. F. Pinder et M. A. Celia, *Subsurface Hydrology*, Wiley, 2006.

⁽³⁾ C. Zheng et G. Bennet, *Applied contaminant transport modelling*, Wiley Intersciences, 2002.

⁽⁴⁾ W. Hundsdorfer et J. Verwer, *Numerical solution of time-dependent advection-diffusion-reaction equations*, Springer, 2003.

⁽⁵⁾ J.-R. de Dreuzy et al., *Asymptotic dispersion in 2D heterogeneous porous media determined by parallel numerical simulations*, *Water Resource Research* 43, 2007.

⁽⁶⁾ C. de Dieuleveult et J. Erhel, *Global method for coupling reactive transport* (in B. A. Schrefler & U. Perego, ed.), *Proceedings of IACM-ECCOMAS 2008 Congress*.



INRIA / PHOTO C. TOURNIAIRE

résolution se heurte assez vite aux limites de puissance des ordinateurs, en raison de la complexité des processus chimiques notamment. L'un de nos objectifs est de concevoir des algorithmes qui nous permettent d'optimiser les performances des modèles, de les rendre plus rapides. Il est aussi parfois nécessaire d'améliorer la théorie: des réactions chimiques peuvent par exemple nous échapper du seul fait des imperfections d'un modèle. Un autre sujet important sur lequel nous travaillons concerne l'intégration des incertitudes: il s'agit notamment d'étudier la sensibilité de nos simulations à différents jeux de données, sachant qu'une trop grande dispersion des résultats traduit une instabilité du système.

Les méthodes et algorithmes que vous mettez au point trouvent-ils des applications dans d'autres secteurs ?

La loi de programme relatif à une gestion durable des déchets radioactifs a été votée en juin 2006. Pour étudier la faisabilité de stockages en couche géologique profonde de déchets radioactifs à vie longue, les modèles numériques sont un passage obligé.

Entretien avec Jérôme Jaffré

Des déchets à vie longue

Jérôme Jaffré*, directeur de recherche INRIA, est responsable de l'équipe-projet ESTIME (centre de recherche Paris-Rocquencourt).

À quel niveau se situe votre contribution dans le contexte du groupement de recherche MOMAS* ?

Jérôme Jaffré: Quels que soient le mode de confinement des déchets nucléaires qui sera adopté et le type de stockage géologique choisi, on ne peut écarter l'hypothèse de fuites d'éléments radioactifs, même s'ils n'ont lieu que dans quelques milliers ou quelques dizaines de milliers d'années: on est même sûr qu'il y en aura. Comment ces espèces chimiques vont-elles se déplacer? Comment vont-elles réagir avec d'autres espèces chimiques ou avec la roche?... Autant de questions qui nécessitent de mettre au point des modèles capables de représenter les différents phénomènes physico-chimiques susceptibles de se produire, que ce soit à l'intérieur de l'enceinte de confinement (galeries d'entreposage des conteneurs) ou dans son environnement (la couche géologique profonde). J'ajoute qu'en tant que scientifiques, même si nous ne sommes pas indifférents à l'utilité sociale de ce travail, ces questions nous intéressent surtout parce qu'ils sont de vrais défis scientifiques à relever.

De quelle nature sont ces défis ?

J. J.: Ils tiennent notamment au caractère non linéaire des problèmes posés et au fait que leur

J. J.: Bien entendu, à commencer par un grand nombre de problèmes d'hydrogéologie où se posent des questions de transport en milieu poreux. D'autres applications concernent également des phénomènes atmosphériques (dispersion de polluants...). Mais les organes du corps humain sont aussi des milieux poreux: les reins, les poumons...

Au vu de la complexité, avez-vous déjà pensé qu'aucun modèle, même le meilleur, ne pourrait offrir un jour les capacités d'anticipation suffisantes ?

J. J.: Je crois que non. Pour étudier un problème complexe, nous commençons toujours par modéliser les processus essentiels puis, au fur et à mesure, le modèle est enrichi par la prise en compte de phénomènes auparavant négligés. J'ai participé un certain nombre d'années au conseil scientifique de l'Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs (Andra). Au début, nous nous sommes beaucoup posé ces questions. Mais on a cessé de se les poser. Ce qui m'a personnellement convaincu, c'est le stockage géologique profond, c'est-à-dire dans des couches géologiques dont la stabilité est avérée sur des échelles de temps qui n'ont plus rien à voir avec celles des constructions humaines.

Propos recueillis par Dominique Chouchan

* MOMAS est le sigle du Groupement de recherche Modélisation mathématique et simulations numériques liées aux problèmes de gestion des déchets nucléaires.

* Voir aussi l'entretien avec Jérôme Jaffré à l'adresse suivante: http://interstices.info/jcms/c_42195/jaffre.