

Simulation des transferts de polluants dans les sols

Etat de l'art



C4H5O2_5 2/ 9/99 THERMC 4H 50 2 0G 300.000 5000.000 1392.000 1
1.64121890E+01 1.20184883E-02-4.40468566E-06 7.30124728E-10-4.42784365E-14 2



ETUDE N° 95-0504/1A

**ÉTAT DE L'ART DE LA SIMULATION DES TRANSFERTS
DE POLLUANTS DANS LES SOLS**

RAPPORT FINAL

février 1997

J. BOURGOIS - École des Mines de St Etienne
P. MOSZKOWICZ - LAEPSI - INSA de Lyon

Créée en 1989 à l'initiative du Ministère en charge de l'Environnement, l'association RECORD – REseau COopératif de Recherche sur les Déchets et l'Environnement – est le fruit d'une triple coopération entre industriels, pouvoirs publics et chercheurs. L'objectif principal de RECORD est le financement et la réalisation d'études et de recherches dans le domaine des déchets et des pollutions industrielles.

Les membres de ce réseau (groupes industriels et organismes publics) définissent collégalement des programmes d'études et de recherche adaptés à leurs besoins. Ces programmes sont ensuite confiés à des laboratoires publics ou privés.

Avertissement :

Les rapports ont été établis au vu des données scientifiques et techniques et d'un cadre réglementaire et normatif en vigueur à la date de l'édition des documents.

Ces documents comprennent des propositions ou des recommandations qui n'engagent que leurs auteurs. Sauf mention contraire, ils n'ont pas vocation à représenter l'avis des membres de RECORD.

- ✓ Pour toute reprise d'informations contenues dans ce document, l'utilisateur aura l'obligation de citer le rapport sous la référence :

RECORD, Etat de l'art de la simulation des transferts de polluants dans les sols, 1997, 129 p, n°95-0504/1A.

- ✓ Ces travaux ont reçu le soutien de l'ADEME (Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie)
www.ademe.fr

© RECORD, 1997

Etude RECORD n°95-0504/1A

ETAT DE L'ART DE LA SIMULATION DES TRANSFERTS DE POLLUANTS DANS LES SOLS

I. PRESENTATION DE LA MISSION	3
I.1. Introduction	3
I.2. Objet de la mission	3
I.3. Contenu de la mission	4
I.3.1. Analyse de la demande	4
I.3.2. Analyse de l'offre.....	4
I.3.3. Elaboration de propositions	4
II. UN PEU DE GEOLOGIE	5
II.1. Les roches.....	5
II.2. L'eau dans les roches	6
II.2.1. Comportement des roches vis-à-vis de l'infiltration.....	6
II.2.2. Les aquifères.....	6
II.2.3. Écoulement et alimentation des eaux souterraines.....	7
II.3. Etude d'un site hydrogéologique.....	8
II.3.1. La connaissance de l'aquifère sur le terrain	8
II.3.2. Où trouver les données hydrogéologiques ?	9
II.4. Les sols et les sites industriels français.....	9
II.4.1. Les grands types de sols	9
II.4.2. Situation géographique des grandes zones industrielles françaises.....	10
III. GENERALITES SUR LES POLLUANTS DANS LES SOLS.....	11
III.1. Le sol : un milieu poreux composé de trois phases	11
III.2. Les relations entre le sol et l'eau	11
III.3. Les polluants	12
III.4. L'eau potable : gestion et normes.	14
IV. TRANSFERT DE L'EAU ET DES POLLUANTS DANS LES SOLS.....	15
IV.1. Fonctionnement général	15
IV.2. Transport de l'eau en milieu poreux.....	16
IV.2.1. La zone saturée.....	16
IV.2.2. La zone non saturée.....	18
IV.3. Transport des solutés dans les milieux poreux.....	19
IV.3.1. La convection	20
IV.3.2. La diffusion.....	20
IV.3.3. L'équation générale de transport.....	21
IV.4. Les interactions entre le sol et le soluté.....	22
IV.4.1. Les mécanismes physico chimiques.....	22
IV.4.2. Les réactions microbiologiques	24
IV.5. La notion de coefficient de répartition	25
IV.6. Etablir l'équation de transport.....	26
V. MODELISER POUR SIMULER	28
V.1. Qu'est-ce qu'un modèle ?	28
V.2. Les problèmes d'échelle de travail	28
V.3. Les différentes approches de la modélisation.....	29
V.3.1. L'approche déterministe.....	29
V.3.2. L'approche stochastique.....	31

V.3.3. Les fonctions de transfert	32
V.3.4. Les modèles type «boîte noire»	33
V.4. Les modèles en hydrologie	33
V.5. Les modèles géochimiques	34
V.6. Les différentes approches rencontrées au cours de la modélisation	35
V.7. Conclusions.....	37
VI. SYNTHÈSE DE LA DEMANDE	38
VI.1. Motivations de la demande.....	38
VI.2. La demande générale	39
VI.2.1. Les principaux besoins	39
VI.2.2. Comptes-rendus d'entretiens concernant la demande.....	40
VII. ANALYSE DE L'OFFRE	43
VII.1. Les modèles les plus utilisés et leur champ d'application	43
VII.1.1. Quelques modèles	43
VII.2. Autres modèles existants sur le marché	47
VII.3. Les programmes en cours, groupes de travail, organismes de recherche et bureaux d'études ...	49
VII.3.1. Quelques programmes en cours.....	49
VII.3.2. Groupe de réflexion	51
VII.3.3. Laboratoires de recherches et écoles	51
VII.3.4. Organismes de recherche, grands groupes et sociétés.....	57
VIII. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES	62
BIBLIOGRAPHIE	64
LISTE DES ANNEXES	66
LISTE DES FIGURES	67
LEXIQUE	68
ANNEXES	

I. PRESENTATION DE LA MISSION

I.1. Introduction

Les sociétés industrielles utilisent et produisent un très grand nombre de substances qui sont susceptibles d'engendrer une pollution des milieux naturels. Une conséquence particulièrement importante peut survenir par infiltration dans le sol de polluants solubles dans l'eau, pouvant contaminer la nappe phréatique et menacer les ressources en eau potable. La réglementation évolue pour garantir la préservation de cette ressource.

Il est donc nécessaire d'estimer l'impact d'une pollution accidentelle ou chronique, réelle ou potentielle, en terme de risque. La modélisation, en permettant la simulation du devenir des polluants dans les sols peut constituer un outil d'aide à la décision, soit en vue de la prévention de la pollution de la ressource ou de la réparation de nuisances déjà existantes. Dans un souci d'anticiper la demande réglementaire et en se conformant au principe de précaution, l'association RE.CO.R.D. a initié cette étude pour faire un état de l'art des outils permettant de simuler les transferts de polluants dans les sols. Des propositions de programmes de recherches seront faites en vue d'améliorer les possibilités actuelles d'analyse de risques pour les sols pollués.

I.2. Objet de la mission

La mission a pour but de récolter les informations pertinentes sur les méthodes existantes de **simulation** et de **prévision** de la **migration des polluants dans les sols** et plus particulièrement pour les **zones non saturées**.

En effet, avant de lancer de nouvelles études concernant la **modélisation** du transfert des polluants dans les sols il est nécessaire de disposer d'informations précises sur l'état actuel des connaissances, les performances des outils existants et les travaux déjà engagés par ailleurs (entreprises, bureaux d'études, laboratoires de recherche, programmes européens en cours,...). De plus, il est nécessaire de faire apparaître la nature des besoins concrets exprimés par les membres de RE.CO.R.D.

Cette étude a été réalisée sous la responsabilité de:

Pierre Moszkowicz : Maître de conférence à l'INSA de LYON : Laboratoire d'Analyse Environnementale des Procédés et Systèmes Industriels (LAEPSI).

Jacques Bourgois : Maître de recherche à l'Ecole des Mines de Saint-Etienne
Département Ingénierie de l'Environnement.

avec les concours de:

- Hervé Vaillant* : Ingénieur de recherche à l'Ecole des Mines de Saint-Etienne
Département Ingénierie de l'environnement.
- Ibrahim Alimi Ichola* : Maître de Conférence à l'INSA de LYON : Laboratoire de
Géotechnique.
- Suzanne Foret* : Stagiaire Ecole Nationale des Travaux Publics de l'Etat de
Vaulx en Velin

I.3. Contenu de la mission

La mission est articulée en trois volets correspondant à l'analyse de la demande, de l'offre, et à la formulation de propositions de programmes de recherche.

I.3.1. Analyse de la demande

Les experts sont chargés de rencontrer les interlocuteurs proposés par les différents membres de l'association RE.CO.R.D. De ces entretiens, doit se dégager une formulation des besoins exprimés par les membres de RE.CO.R.D.

I.3.2. Analyse de l'offre

L'analyse de l'offre doit permettre d'identifier les outils de calcul existants, en mettant l'accent sur ceux qui visent à caractériser le transfert de l'eau et celui des polluants solubles dans les milieux saturés et non saturés, en prenant en compte le couplage des phénomènes physiques de transport (diffusion / convection) avec les interactions chimiques sols/polluants.

Plusieurs contacts avec des laboratoires spécialisés ont été conduits afin d'avoir la vision la plus large possible sur les programmes de recherche et les préoccupations scientifiques actuelles concernant la thématique de la modélisation des transferts de polluants dans les sols.

I.3.3. Elaboration de propositions

L'ensemble de l'analyse de la demande et de l'offre doit permettre de dégager une liste préliminaire des acteurs de la recherche. Les limitations empêchant aujourd'hui l'utilisation satisfaisante des outils de simulation doivent être mises en évidence .

Ces résultats serviront à proposer des orientations qui seront discutées dans le cadre de la programmation 1997 des programmes de recherche de RE.CO.R.D.

II. UN PEU DE GEOLOGIE

II.1. Les roches

Les roches constituant la croûte terrestre sont faites d'un assemblage varié de minéraux. On peut classiquement diviser les roches en deux grands groupes :

- les roches qui se sont formées à la surface du globe : ce sont les roches sédimentaires,
- les roches qui ont pris naissance en profondeur dans des conditions de pression et de température très différentes de celles qui règnent à la surface de la Terre. A l'intérieur de ces roches, on sépare deux familles : les roches éruptives ou magmatiques et les roches métamorphiques.

Les roches sédimentaires.

Ce sont les produits de sédiments meubles qui sont formés à la surface du globe, sur les continents ou dans les mers. On les subdivise en trois grands groupes en fonction de leur origine *détritique*, *chimique* ou *biologique*.

Les roches détritiques sont constituées de matériaux arrachés par l'érosion aux continents et redéposés plus ou moins loin de leur source d'origine, dans des milieux variés sous des formes diverses (sable, argile, conglomérats...).

Les roches d'origine chimique résultent principalement de la précipitation physico-chimique de divers sels dont l'eau de mer constitue le stock principal. C'est le cas des évaporites (gypse, sel gemme, potasse...) et de certains calcaires et dolomites, de phosphates...

Les roches d'origine biologique, dont la genèse est liée indirectement ou directement à l'intervention de la vie et des processus biologiques. Certaines se sont formées par accumulation de coquilles ou de squelettes d'organismes qui ont puisé dans le milieu (la mer le plus souvent) les éléments nécessaires à leur constitution (calcaire, silice, phosphates). D'autres sont constituées par de la matière vivante (dite organique) élaborée par les organismes. Ce sont les roches carbonées (charbons et hydrocarbures).

Les roches éruptives ou ignées.

Ces roches se forment par cristallisation d'un magma (d'où le terme de roche magmatique) visqueux, constitué d'un mélange de gaz, de liquide et de cristaux, porté à haute température (700 à 1200 °C). Le magma peut monter plus ou moins rapidement à la surface du globe. Lorsque la montée est brusque, le magma se refroidit rapidement, et se trouve comme figée lors de son arrivée en surface ou près de celle-ci. Ainsi se forment les roches volcaniques comme les basaltes.

Lorsque le magma migre plus lentement et demeure à l'intérieur de l'écorce, il cristallise progressivement et forme les roches plutoniques tel que les granites. Ces roches n'apparaîtront à la surface qu'à la suite d'une érosion profonde.

Les roches métamorphiques.

Dans certaines conditions tectoniques et/ou d'enfouissement, les roches sédimentaires ou ignées peuvent se transformer en d'autres roches sous l'effet d'une élévation de la température et de la pression. Elles sont alors dites métamorphiques.

Les variations de température et pression engendrent de nouvelles structures (organisation en feuillet) et conduisent à l'apparition de nouveaux assemblages minéraux dans les roches (schistes, mica-schistes, gneiss...).

II.2. L'eau dans les roches

L'eau ne peut pénétrer dans les roches que dans la mesure où il existe des vides, et elle ne peut circuler que si ces vides sont en communication les uns avec les autres. La **porosité** exprime le volume de vides ; la **perméabilité** mesure l'aptitude d'une roche à se laisser traverser par l'eau.

II.2.1. Comportement des roches vis-à-vis de l'infiltration

La pénétration de l'eau dans le sous-sol est conditionnée par la perméabilité des roches qu'elle y rencontre. En fonction de ce critère, on sépare les roches en trois catégories:

- **Roches poreuses mais imperméables**. Ce sont des roches largement ou totalement argileuses, où l'eau est solidement fixée par adsorption dans des pores de très petites dimensions : la circulation y est pratiquement nulle.

- **Roches poreuses, perméables en petit**. Ces roches laissent circuler l'eau à travers les pores interconnectés de la roche. Ce sont elles qui renferment les réserves d'eau mobilisables les plus fréquentes. Certaines sont meubles (sables, graviers, cailloutis, scories volcaniques...) mais on rencontre également dans cette catégorie des roches qui présentent, en plus de la porosité interstitielle, une porosité de fissure (grès, craie, calcaires récifaux...)

- **Roches non poreuses, perméables en grand**. Pratiquement imperméables à l'échelle de l'échantillon par suite de leur compacité, ces roches offrent à l'eau des voies de pénétration localisées dans les **fissures** : diaclases, joint de cisaillement, de stratification, de schistosité, fentes de retraits, etc. Toutes les roches dont la cohésion est élevée peuvent être rangées dans ce groupe (granite, gneiss, calcaires, laves...). Certaines voient l'ouverture initiale de leurs discontinuités s'agrandir par dissolution (roches carbonatées, gypse). Les roches carbonatées sont très caractéristiques de ce type de dissolution qui conduit à une morphologie karstique (cas des Causses, du Jura, de la Provence...).

II.2.2. Les aquifères

Les aquifères sont des formations géologiques perméables permettant l'écoulement d'une nappe souterraine ou le captage de quantité appréciable d'eau. Les relations de l'eau et des terrains encaissants sont assimilables à celles d'un liquide en mouvement dans un récipient occupé par une roche poreuse.

Comme dans un récipient plus ou moins rempli, l'eau de la nappe contenue dans l'aquifère atteint un certain niveau appelé surface piézométrique ; cette surface ou ce niveau d'eau fluctue dans le sens vertical en fonction de l'alimentation et de la vidange. On distingue quatre grands types d'aquifères :

1- **Les nappes libres** où l'eau occupe, à partir d'un substratum, tout l'espace vertical sus-jacent, sans rencontrer d'obstacle imperméable limitant son développement vers la surface.

2- **Les aquifères fissurés et karstiques.** Dans les roches peu poreuses perméables en grand, une nappe d'eau peut se mettre en place, dans la mesure où les fissures et les fractures sont en communication et où les fentes sont suffisamment nombreuses et larges. En général, seules les zones de grandes fractures contiennent de l'eau en quantité notable. Dans les aquifères karstiques, l'eau se concentre dans des vides agrandis par la dissolution de la matrice calcaire par les eaux chargées de gaz carbonique acide. Ce type d'aquifère est caractérisé par des variations considérables de la surface piézométrique et des débits.

3- **Les nappes captives.** Dans les aquifères plus profonds, les eaux souterraines sont emprisonnées dans les formations hydrogéologiques perméables entre deux formations imperméables fixes : le substratum en base et le toit au sommet. Cette formation est donc sous pression et lorsque que l'on perce le toit de l'aquifère, l'eau s'en trouve expulsée. Son niveau se stabilise à une altitude qui représente le *niveau piézométrique*. La pression peut être telle que le niveau piézométrique peut se retrouver au-dessus de la surface (cas des puits artésiens).

4- **Les aquifères superposés :** La localisation des aquifères en profondeur est déterminée par la succession des formations hydrogéologiques. Les formations imperméables délimitent les aquifères. Ceux-ci peuvent ne comporter qu'une seule couche perméable (aquifères monocouches) ou plusieurs couches (aquifères multicouches). Chaque aquifère est caractérisé par une surface piézométrique particulière. Dans les aquifères multicouches, les écoulements à travers les formations semi-perméables sont possibles grâce au mécanisme de drainance.

II.2.3. Écoulement et alimentation des eaux souterraines

L'écoulement des nappes d'eau souterraines se fait depuis les zones hautes vers les zones basses où se trouvent les exutoires. Les aires d'alimentation sont caractérisées par un bombement de la surface piézométrique. L'alimentation principale se fait par les eaux de pluie qui s'infiltrent, mais une nappe peut être alimentée par une rivière ou par une autre nappe. De façon générale, les nappes sont soumises à des écoulements liés à la différence de charge hydraulique, entre les zones d'alimentation (zone haute) et les zones d'exploitation ou d'émergence (zone basse).

L'alimentation par les précipitations se fait naturellement par les eaux météoriques et par les eaux de fonte du manteau neigeux. Les fluctuations piézométriques des nappes ou du débit des sources sont en liaison avec la lame d'eau d'infiltration réelle issue de la pluie après prélèvement de l'évapotranspiration et du ruissellement.

Des relations hydrauliques existent entre les rivières et les nappes. En dehors des périodes de pluie qui montrent une relation directe entre les précipitations et les débits observés dans les rivières, on constate que dans notre pays, les rivières sont encore alimentées en étiage (période de basses eaux). Ce débit de base provient des nappes souterraines qui ont accumulé des eaux d'infiltration et les restituent progressivement aux rivières. En été l'écoulement se fait donc des nappes vers les rivières; et en hiver le sens de l'écoulement s'inverse lorsque la rivière en crue est plus haute que la nappe, elle alimente alors le réservoir aquifère.

II.3. Etude d'un site hydrogéologique

Beaucoup de pollutions affectent aujourd'hui les eaux souterraines. Ces pollutions sont d'autant plus préoccupantes que dans la plupart des cas, l'homme exploite ces ressources souterraines par l'intermédiaire des captages d'eau potable. Une bonne connaissance de la géologie et de l'hydrogéologie permet une meilleure prévention des risques de pollution et une efficacité accrue en ce qui concerne les traitements nécessaires. Les caractéristiques d'un aquifère (débit d'exploitation, vitesse d'écoulement, qualité des eaux, type d'alimentation, géologie et structure du terrain...) sont les données essentielles pour comprendre et décrire les transferts des polluants transportés par l'eau dans les sols.

II.3.1. La connaissance de l'aquifère sur le terrain

Les études hydrogéologiques réalisées dans la plupart des cas à des fins d'exploitation de captages, constituent une source de renseignements très précieuse pour la connaissance de la géologie, de l'aquifère, et des relations qui les lient.

L'approche hydrogéologique d'un site passe par la connaissance géologique des sols et des roches concernés (identification des formations, type de la formation productive, structure globale de la région, système de failles). L'agencement et la nature géologique du terrain donne en général, les grandes notions de l'hydrogéologie du site (emplacement de la nappe, type d'aquifère, type d'alimentation, sensibilité...).

La connaissance précise de l'aquifère nécessite la mise en oeuvre de techniques plus lourdes et l'installation de sondages et puits d'exploitation par une société de forage, sollicitée en général par le bureau d'étude ou l'hydrogéologue qui réalise le projet.

Ce sont les piézomètres, forages de très faible diamètre (une dizaine de cm en moyenne), qui sont réalisés en premier lieu. Ils permettent l'investigation du sol et de l'aquifère par l'intermédiaire de différentes sondes qui sont descendues à l'intérieur du forage. Ces sondes, suivant leur fonctionnement (émission de rayon gamma, résistance électrique...) donnent accès à des informations qualitatives sur les roches en profondeur (perméabilité, nature de la roche, compacité...) et le niveau de la nappe dont les variations sont suivies directement dans le piézomètre. Toutes ces informations, indispensables pour l'implantation et l'exploitation d'un captage AEP (eau potable), constituent une bonne base de données facilement consultable.

C'est l'exploitation d'un tel ouvrage, qui passe par une série d'essais de pompage et permet d'obtenir les paramètres quantitatifs et qualitatifs spécifiques de l'aquifère et de visualiser et comprendre son comportement global. On connaît alors de façon très précise le débit exploitable, la réponse de la nappe, l'influence de l'alimentation, la qualité des eaux, et on peut donc évaluer le temps de transmission d'une pollution accidentelle déversée en amont.

II.3.2. Où trouver les données hydrogéologiques ?

L'implantation d'un forage AEP nécessite des autorisations départementales et la participation de plusieurs acteurs (privés, communaux, départementaux...). L'étude préalable hydrogéologique est en général faite par un hydrogéologue agréé, ou par un bureau d'études.

Les hydrogéologues agréés dépendent d'une administration départementale (souvent la DDASS) et sont seuls habilités à définir les périmètres de protection autour du captage. Ces personnes sont sur une région, une source de renseignements de qualité. C'est auprès d'eux que l'on peut obtenir des renseignements sur la géologie, sur la structure géologique de la région et sur l'aquifère.

Les captages sont en général gérés soit par la commune, soit par une filiale d'un grand groupe (CGE, Lyonnaise...). La DDASS en association avec le «fermier» (personne du groupe qui s'occupe des captages), mesure la qualité de l'eau de façon mensuelle, veille au bon fonctionnement des forages et au respect des périmètres de protection. On peut donc obtenir auprès du fermier, de la DDASS, des hydrogéologues, tous les renseignements nécessaires sur les caractéristiques de l'aquifère, utiles pour une modélisation de celui-ci.

A ces sources de renseignements on peut ajouter également les bureaux d'études et les sociétés de sondages, qui en général travaillent depuis longtemps sur une même région et qui en connaissent donc bien les principales spécificités ; les résultats sont cependant facilement accessibles. Enfin, il faut ajouter la base de données du sous-sol du BRGM.

II.4. Les sols et les sites industriels français.

II.4.1. Les grands types de sols

La France se divise en cinq grandes zones métamorphiques et plutoniques qui sont le Massif Armoricaïn, le Massif Central, les Alpes, les Pyrénées et les Vosges.

Ces zones sont composées de roches très anciennes (plusieurs centaines de millions d'années) autour desquelles, au fil des millions d'années, les variations du niveau marin, les glaciations, la succession des climats, et la tectonique, ont généré toute une série de roches sédimentaires. Ce sont ces roches qui forment nos grands bassins (Bassin Parisien et Aquitain). Des zones d'effondrement à l'intérieur des vieux massifs ont créé des fossés tels que le fossé rhénan et le sillon rhodanien dans lesquels s'écoule le Rhin et le Rhône. Ces mêmes variations du niveau marin ont comblé ces fossés avec l'aide de la sédimentation fluviale et de l'érosion glaciaire et forment ainsi, des grandes zones sédimentaires telle que la Provence ou les Causses.

Toutes ces régions sédimentaires, métamorphiques et plutoniques se sont trouvées plus ou moins fracturées, bousculées suivant l'endroit, la force et la durée des événements tectoniques. La France géologique se couvre donc ainsi d'un réseau complexe de failles à toute échelle.

Les grands ensembles sédimentaires vont à la fois présenter des roches calcaires, marneuses, sableuses... qui proviennent d'une accumulation plus ou moins importante en domaine océanique et en même temps des dépôts fluviaux et glaciaires (galets, conglomérats, alluvions...pour les fleuves, moraines et autres pour les glaciers).

Les cratons sont composés de la vieille croûte, que l'on retrouve d'ailleurs **sous les zones sédimentaires à plus ou moins grande profondeur**. Ces zones d'émergence de vieux

terrains sont un assemblage de roches métamorphiques, de protusions granitiques mise à nue par l'érosion et de roches volcaniques plus ou moins récentes.

L'organisation structurale de ces **massifs anciens** est en général très complexe car elle découle d'une succession de mouvement tectono-métamorphique générant différentes conditions de pression et température au cours du temps. Ces zones sont pour la plupart très peu perméables. Les ressources en eau souterraine sont faibles : on rencontre de petites nappes locales dans les zones d'altération ou dans les dépôts alluviaux de surface ou encore dans les zones fissurées. Pour avoir de gros débits, il faut faire appel aux eaux de surface et ce, en période hors étiage qui peuvent être sévères.

Dans les **zones sédimentaires**, il en est tout autrement puisque l'on s'adresse alors à des roches perméables à différentes échelles, chaque type de dépôts étant caractérisé par un certain nombre de paramètres variables au cours du temps et dans l'espace, ainsi qu'un cortège de réactions chimiques et biologiques encore mal déterminées. L'agencement des nappes va dépendre du milieu sédimentaire auquel on s'adresse.

→ Dans les régions de plateaux calcaires (karst), c'est le domaine de l'écoulement dans les fissures élargies, le réseau de fissures peut jouer un rôle de réservoir ou nappe en liaison avec les eaux de surface et la rivière souterraine. Ces réservoirs sont en général situés en dessous de la cote d'altitude des exutoires.

→ Les régions de bassins sédimentaires sont en général constituées par une alternance de roches perméables et peu perméables. C'est là que l'on trouve les plus grands aquifères.

→ Les plaines alluviales vont renfermer les nappes alluviales en relation avec les fleuves. Ces nappes sont souvent les plus exploitées et souvent en danger d'être contaminées par des pollutions accidentelles ou venues du fleuve qu'elles côtoient.

II.4.2. Situation géographique des grandes zones industrielles françaises.

Les grandes régions industrielles sont généralement localisées sur les zones sédimentaires où s'écoulent les grands fleuves, voies de communication. Le faible relief de ces régions permet l'installation des voies routières et ferroviaires à moindre coût, à l'opposé des zones de montagnes (vieux cratons en général) qui nécessitent tunnels, terrassements, et mesures de protection géotechniques accrues contre les effondrements ou les avalanches).

Globalement, on retrouve donc les concentrations urbaines et industrielles, soit sur les zones de faibles reliefs, présentant des voies de communication aisées, soit dans les régions de dépôts sédimentaires qui sont la plupart du temps, assez sensibles à cause de leur forte perméabilité et de leur fonction de stockage d'eau. On peut remarquer quelques exceptions telles que les vallées de la Maurienne et de la Tarentaise qui sont en zone de montagne mais néanmoins en fond de vallée et donc sur des dépôts glaciaires et fluviaux de faible épaisseur.

III. GENERALITES SUR LES POLLUANTS DANS LES SOLS

III.1. Le sol : un milieu poreux composé de trois phases

La charte européenne des sols établie par le conseil de l'Europe le 30 mai 1972, définit le sol comme suit :

« Le sol est un milieu vivant et dynamique qui permet l'existence de la vie végétale et animale. Il est essentiel à la vie de l'homme en tant que source de nourriture et de matière première. Il est un élément fondamental de la biosphère et contribue, avec la végétation et le climat, à régler le cycle hydrologique et à influencer la qualité des eaux. »

Suivant le spécialiste, la définition d'un sol varie. Pour l'ingénieur, le sol est avant tout une roche meuble, un support, un milieu poreux. Pour l'agriculteur, c'est la couche de terre travaillée par opposition au sous-sol qui ne l'est pas. Pour le pédologue, au plein sens du terme, qui étudie l'ensemble des matériaux et l'activité biologique, c'est l'aspect biologique et géochimique qui domine. Le géologue travaille à l'échelle du globe (tectonique des plaques), de la croûte terrestre (histoire et condition de formation des chaînes de montagnes) comme à celle des premiers mètres de terrain (dépôts sédimentaires superficiels) ou encore de la molécule (étude de la spéciation moléculaire à haute pression). L'hydrogéologue travaille sur un ensemble restreint à l'échelle d'une région géographique que l'on appelle le bassin versant et va considérer les relations eau - sol dans cette zone (quantification, mais aussi mode de circulation, type de terrain, qualité des eaux et protection, possibilité d'exploitation. Enfin l'hydrologue va considérer les phénomènes physico-chimiques concernant l'eau et ses interactions avec le sol dans la tranche superficielle (quelques dizaines de mètres par rapport à l'approche du géologue).

D'un point de vue physico-chimique, qui est l'approche de la modélisation concernant les transferts de polluants, le sol peut être considéré comme un système poreux à trois phases : la matrice du sol, une phase liquide composée d'eau et de solutés, une phase gazeuse composée d'air et de vapeur d'eau ainsi que de composés organiques volatils. Chacune de ces phases possède des caractéristiques physiques et mécaniques propres, utilisées pour la modélisation afin de les définir en quantité et en qualité.

III.2. Les relations entre le sol et l'eau

Le sol se compose :

- **d'une zone non saturée** composée elle-même de trois zones : la zone d'évaporation et d'évapotranspiration (la plus proche de l'air libre), la zone de transition où il y a un transfert d'eau par infiltration et la partie non saturée de la frange capillaire (partie au-dessus de la nappe où se trouve l'eau capillaire, seulement retenue par les forces capillaires) où la pression de l'eau est inférieure à la pression atmosphérique. L'eau remplit incomplètement les interstices, le reste du volume étant occupé par l'air,

- **d'une zone saturée** où l'eau occupe cette fois complètement la porosité du sol. L'eau de cette zone est libre en ce sens qu'elle peut être mise en mouvement par l'effet de la gravité ou de charges hydrauliques. Cette notion regroupe à la fois ce que l'on appelle la

nappe souterraine et en même temps une partie de la frange capillaire qui peut également être saturée.

L'eau en présence dans les sols non saturés peut avoir différents comportements. On distingue **l'eau de constitution** du sol qui appartient à la structure même des composants et qui est donc ni échangeable, ni mobile, **l'eau liée**, **l'eau capillaire** et **l'eau gravitaire**.

L'eau liée ne peut pas se déplacer par gravité et ne transmet pas la pression hydrostatique. C'est une eau qui ne peut être extraite que par séchage (thermique ou mécanique). Elle est liée à la surface des grains par le jeu des forces d'attraction moléculaires très intenses.

L'eau capillaire s'élève au-dessus de la nappe pour former la zone capillaire, cette eau est insensible à l'action de la gravité et est retenue par les seules forces capillaires du sol. Ces forces sont uniquement présentes dans les milieux poreux non saturés et sont des forces motrices pour le mouvement de l'eau. Afin d'illustrer de façon simple la notion de capillarité, il suffit de considérer la montée de l'eau dans un mur à partir d'un horizon mouillé en base ; la hauteur de montée d'eau est proportionnelle à la pression, ou succion qu'exercent les forces capillaires du milieu.

L'eau gravitaire ou eau libre remplit l'espace resté libre entre les pores, interstices ou fissures. Cette eau de percolation (proprement dite) peut se déplacer sous l'effet de la gravité ou des gradients de pression. Elle est en dehors du champ d'attraction des particules solides C'est la partie vraiment active des eaux souterraines.

III.3. Les polluants

La pollution des eaux souterraines et des eaux continentales en général s'effectue soit par infiltration d'eaux météoriques chargée en polluants, soit par déversement direct de polluants liquides à la surface du sol ou encore par contamination indirecte par les eaux de ruissellement qui sont chargées en produits plus ou moins toxiques et qui peuvent atteindre la nappe en traversant la zone non saturée ou par l'intermédiaire des cours d'eau. Après avoir atteint la nappe le polluant est entraîné par l'écoulement de celle-ci vers l'aval et c'est au cours de ce trajet qu'il voit sa concentration varier en fonction de la circulation des eaux souterraines et des différents facteurs biophysicochimiques pouvant affecter sa mobilité et sa toxicité.

On peut lister les principales familles de polluants : radioactifs, chimiques (hydrocarbures et produits de combustion, matières plastiques, pesticides, détersifs, dérivés du soufre, nitrates, phosphates, métaux lourds, fluorures, composés organiques,...), biologiques (matières organiques mortes, micro-organismes pathogènes).

Tous ces polluants peuvent être directement ou indirectement très toxiques. Ils peuvent agir suivant différents modes de propagation (sol, air, eau), par concentration progressive dans les organismes vivants et ainsi altérer tout ou partie d'une chaîne alimentaire (phénomènes de bioamplification, biomagnification).

Les principales sources de polluants proviennent de la production et de l'utilisation des diverses sources d'énergie, des activités industrielles et de l'agriculture. Le souci de la pollution des sols apparaît dans la législation concernant les déchets dès 1975 puisque la loi du 15 juillet 1975 vise les déchets «de nature à produire des effets nocifs sur le sol, la flore et la faune, à dégrader les sites ou les paysages, à polluer l'air ou les eaux».

L'urbanisation accélérée des pays industrialisés a eu pour effet une multiplication des sources de contamination de l'environnement. L'expansion considérable de la production industrielle a engendré des masses énormes de déchets minéraux ou organiques, biodégradables ou non, parfois très toxiques. La pollution des sols va généralement provenir de xénobiotiques alors que pour la pollution de la ressource en eau, on a une forte composante microbiologique couplée aux xénobiotiques.

La production et l'utilisation d'énergie constitue une source importante de pollution de la biosphère en général et des sols en particulier. Dans cette catégorie, vont rentrer les produits pétroliers, mais aussi le charbon et le gaz. L'énergie nucléaire constitue un cas particulier: la gestion des risques de dissémination des radioéléments porte essentiellement sur les mesures de sécurité du fonctionnement des réacteurs et sur la gestion à long terme des déchets. De très lourdes études sont actuellement engagées sur le stockage profond des déchets à longue période. L'extraction et la combustion des produits pétroliers s'accompagnent d'innombrables pollutions directes ou indirectes tel que les marées noires ou les accidents de transports qui contaminent et polluent les eaux continentales et les sols, ainsi que les vidanges sauvages et autres usages dispersifs des hydrocarbures. Les goudrons résultant de l'exploitation du gaz à partir du charbon, sont à l'origine de pollutions très importantes qui concernent plusieurs centaines de sites.

En définitive, la boulimie d'énergie, caractéristique des pays industrialisés, s'accompagne d'un risque de contamination sans cesse accru des eaux continentales et des sols par les innombrables substances polluantes produites par les combustions et usages annexes.

L'industrie chimique, mais aussi la métallurgie, voire l'électronique, mettent en circulation de nombreux composés minéraux et/ou organiques de toxicité souvent élevée et peu dégradables ou indestructibles (mercure, cadmium, vanadium. La chimie organique produit d'innombrables molécules de synthèse plus ou moins toxiques. On considère que tout au plus, le tiers de ces substances ont fait l'objet d'une étude sérieuse sur leurs impacts potentiels sur l'environnement et sur l'homme.

La civilisation moderne produit également des masses colossales de déchets solides qui peuvent se classer de différentes manières. On pourra distinguer les déchets domestiques, agricoles et industriels. Les deux premières catégories sont constituées en partie par des matières organiques donc biodégradables, mais la gestion des déchets ultimes constitue toujours une préoccupation vis-à-vis de la pollution des sols où sont situés les sites de stockage.

L'agriculture moderne représente une importante source de pollution des sols cultivés et des ressources en eau potable. L'usage massif d'engrais chimiques et le recours systématique aux pesticides ont malheureusement été accompagnés d'une pollution accrue des sols et des eaux continentales ainsi que des productions végétales et animales par divers contaminants minéraux et organiques. L'abus de fertilisants a été tel que dans de nombreux pays la pollution des nappes phréatiques atteint localement des niveaux excédant les concentrations admissibles en nitrates. Les métaux et métalloïdes toxiques (cadmium, vanadium, chrome, cuivre, arsenic, etc.) contenus comme impuretés dans les superphosphates, s'accumulent dans les sols et peuvent passer dans les plantes cultivées.

Les pesticides et les insecticides, qui ont connu une expansion spectaculaire, possèdent également un fort pouvoir biocide et donc une haute toxicité pour une multitude d'organismes

que nous consommons par la suite. Les masses de ces substances dispersées dans l'espace rural sont considérables si l'on regarde la toxicité et/ou la persistance de certaines d'entre elles. L'insertion de ces produits dans les chaînes alimentaires, par l'intermédiaire des sols et des cultures n'est plus à démontrer.

III.4. L'eau potable : gestion et normes.

Pendant longtemps, on a considéré rôle épurateur du sol comme suffisant. La pollution présente en surface ne semblait pas affecter les eaux souterraines captées ou les eaux superficielles. C'est seulement avec l'avènement de l'ère industrielle et de ses inévitables pollutions que la société a commencé à se soucier du lien entre l'activité agricole, industrielle ou domestique et la pollution des eaux de nappe et de surface en terme de potabilité, ou d'autre usage. On s'est alors rendu compte que le sol ne suffisait plus pour épurer nos rejets, qu'il pouvait être lui-même contaminé et contaminer à son tour, après un certain temps de transfert, la ressource en eau. Il devenait donc essentiel d'établir un moyen de contrôle de la qualité de l'eau.

La préservation de cette qualité ainsi qu'une meilleure gestion du patrimoine eau font partie des grandes préoccupations au même titre que l'évolution des réserves en matières premières. L'OMS (Organisation Mondiale pour la Santé) a édicté des valeurs guide internationales pour l'eau de boisson entre autre, qui comprennent un exposé général des valeurs guide bactériologiques, physiques, chimiques, biologiques et radiologiques. La plupart des pays ont établi des normes de qualité en référence à ces valeurs guide. En France, la loi impose de façon stricte que «les eaux ne doivent présenter aucun signe de dégradation de qualité et doivent satisfaire aux exigences de qualité définis dans le décret n°89-3 (3/01/89)» (**annexe 1**).

Ces exigences ont été récemment réactualisées par la Loi sur l'Eau (03/01/92). Les objectifs définis sont de renforcer les mesures de contrôle et de sanctions pour la protection de la ressource en eau et des milieux aquatiques (entamé en 1964) et de mettre en place une véritable gestion intégrée du patrimoine eau (cf Code Permanent Environnement et Nuisances). Il faut souligner que les normes varient en fonction de l'usage : les paramètres observés, et les exigences ne seront pas les mêmes suivant que l'eau est destinée à un usage domestique ou industriel.

Le principe de gestion intégrée fait peu à peu son chemin dans les esprits et on assiste maintenant à une collaboration de plus en plus fréquente entre les différents acteurs d'un même bassin, souvent en conflit d'usage (agriculteurs, entreprises, communes, habitants, état) en vue de la protection de la ressource en eau souterraine et superficielle.

IV. TRANSFERT DE L'EAU ET DES POLLUANTS DANS LES SOLS

Un soluté est une substance soluble dans l'eau et qui se meut avec elle par *transport convectif* et *diffusif* mais qui peut aussi *interagir avec le milieu* dans lequel la solution (eau + soluté) se déplace. La solution aqueuse est à la fois vecteur et milieu réactionnel. Les transferts de solutés impliquent différents mécanismes bio-physico-chimiques fortement couplés et très complexes.

IV.1. Fonctionnement général

Lorsque l'on parle de transfert de polluants dans un sol, on considère dans la plupart des cas, les polluants solubles dans l'eau (cependant les Composés Organiques Volatils peuvent aussi être transportés dans la phase gazeuse). L'eau est donc très importante en tant que vecteur mais aussi en tant que cible potentielle ou réelle. Le schéma suivant rend quelque peu compte de la complexité des phénomènes qui interagissent entre eux dans le cas particulier des produits phytosanitaires :

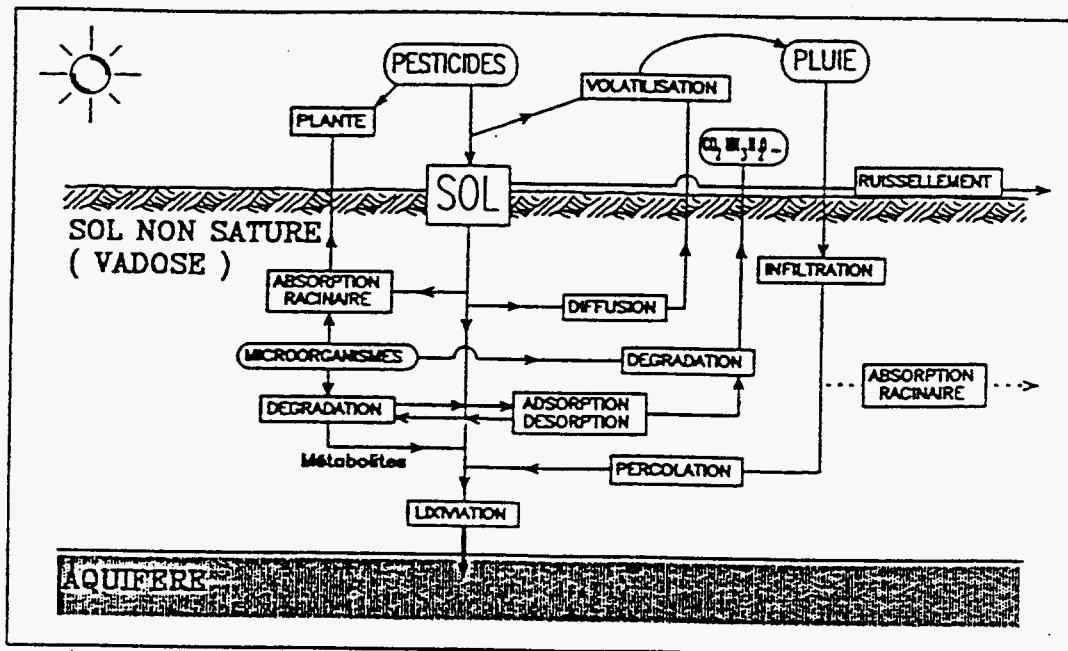


Figure 1 : Cycle des produits phytosanitaires (d'après Vachaud and Vauclin, 1992)

Une fraction du produit répandu, est assimilée par le sol et les plantes. La fraction restante, volatilisée à la surface du sol et du feuillage des plantes, retourne à l'atmosphère. Une partie de ces produits sous forme vapeur, est susceptible de se dissoudre dans l'eau de pluie et d'être réinfiltrée dans le sol, pouvant ainsi former des zones d'accumulation. Lorsque la pluie est trop intense pour être entièrement infiltrée dans le sol ou que la zone non saturée disparaît par suite de la remontée de l'horizon saturé, le ruissellement apparaît. Les polluants accumulés dans les couches supérieures du sol peuvent alors être emportés par les eaux de ruissellement, soit sous forme dissoute, soit sous forme adsorbée quand l'eau de ruissellement transporte des particules fines sur lesquelles ces produits sont fixés [Guinot, 1995]. La partie

des polluants qui parvient à s'infiltrer est soumise à de nombreux phénomènes physiques, chimiques et biologiques qui sont détaillés ci-après.

IV.2. Transport de l'eau en milieu poreux

La pénétration et le transport de l'eau dans un milieu poreux sont globalement régis par deux grands phénomènes : la charge hydraulique induite par les forces de gravité, exprimée mathématiquement par la loi de Darcy et les phénomènes de capillarité (suction). En fait, ce mouvement dépend de l'énergie de l'eau dans le sol. La définition de cette énergie doit être liée à l'énergie libre de Gibbs qui permet d'exprimer les conditions d'équilibre ou les conditions de changement d'état. L'eau dans le sol étant soumis à divers champs de forces, son énergie résulte de la somme des potentiels de ces forces. Ce potentiel résultant comprendra aussi bien le potentiel des forces gravitaires que le potentiel des forces capillaires, que le potentiel des pressions osmotiques. La loi de Darcy sera généralisée en utilisant le gradient de ce potentiel. Il convient de séparer les transports dans la zone saturée de ceux dans la zone non saturée.

IV.2.1. La zone saturée

IV.2.1.1. La loi de Darcy

La base fondamentale du calcul de quantité d'eau souterraine circulante (ou débit de nappe), par l'hydrodynamique souterraine, est la loi empirique de Darcy établie en 1856. Avec un dispositif expérimental, Darcy a montré que le débit d'eau Q en $m^3.s^{-1}$, filtrant de haut en bas dans une colonne de sable de 1 m de hauteur, à travers une section totale perpendiculaire à la direction de l'écoulement, A en m^2 , est fonction d'un *coefficient de proportionnalité*, K en $m.s^{-1}$, caractéristique du milieu perméable et de la perte de charge par unité de longueur du cylindre de sable, h/l (sans dimension).

On définit alors le débit Q fonction de :

$$Q(m^3.s^{-1}) = K(m.s^{-1}).A(m^2).\frac{h}{l}$$

Cette loi, établie sur des dispositifs particuliers, a été vérifiée expérimentalement au laboratoire, dans toutes les conditions possibles. Ces études ont permis d'établir une expression généralisée applicable dans tous les cas, quelle que soit la direction x d'écoulement. Soit :

$$q = -K \frac{dH}{dx}$$

- où
- * q représente le volume d'eau écoulé par unité de surface et par unité de temps soit le **débit unitaire** en $m.s^{-1}$.
 - * K le facteur de proportionnalité généralement appelé **conductivité hydraulique** ($m.s^{-1}$) ou coefficient de perméabilité.
 - * $\frac{dH}{dx}$ est le **gradient de charge hydraulique** (sans dimension).

IV.2.1.2. Définitions

La **conductivité hydraulique** ou **coefficient de perméabilité** K permet de quantifier la perméabilité qui est l'aptitude d'un réservoir à se laisser traverser par l'eau, sous l'effet d'un gradient de charge hydraulique. Le coefficient de perméabilité définit le volume d'eau gravitaire (en m^3) traversant en une unité de temps (s), sous l'effet d'une unité de gradient hydraulique, une unité de section (en m^2) orthogonale à la direction de l'écoulement. Ce paramètre a la dimension d'une vitesse. Des méthodes de mesure de la conductivité existent en laboratoire sur des échantillons mais aussi *in situ*.

D'autre part, on distingue plusieurs grandeurs à ne pas confondre :

→ La **charge hydraulique** H qui représente le poids de la colonne d'eau, exprimée en m de hauteur d'eau au dessus du niveau de référence.

→ Le **gradient de charge hydraulique** est défini comme le quotient de la charge H appliquée par la longueur de la colonne de sable l (expérience de Darcy). Ceci représente la perte de charge par unité de longueur (sans dimension).

IV.2.1.3. Les limites d'application de la loi de Darcy

La loi de Darcy n'est pas toujours vérifiée en écoulement saturé. Cette relation n'est plus linéaire aux grandes vitesses d'écoulements pour lesquelles les turbulences ne sont plus négligeables. La loi de Darcy est donc applicable seulement pour les *écoulements laminaires* (c'est à dire qu'il y a glissement non turbulent de couches fluides superposées et parallèles) et dans les cas où l'interaction sol-eau n'introduit pas de changements dans la fluidité ou de perméabilité en fonction du gradient. L'écoulement laminaire est prépondérant dans les limons et les matériaux plus fins, mais dans les sables grossiers et les graviers de porosité plus importante, on peut avoir des conditions non laminaires et la loi de Darcy n'est alors pas toujours applicable.

Le critère quantitatif permettant l'évaluation du domaine turbulent est le «nombre de Reynolds» :

$$Re = \frac{\bar{u}d}{\mu}$$

où d est le diamètre effectif des pores, \bar{u} la vitesse moyenne d'écoulement, ρ la densité du liquide et μ sa viscosité dynamique.

Dans les milieux poreux, le flux reste linéaire par rapport au gradient hydraulique aussi longtemps que Re est *inférieure à l'unité*. Au fur et à mesure que la vitesse d'écoulement augmente, particulièrement dans les systèmes composés de grands pores, l'apparition de tourbillons turbulents contribue à la dissipation d'énergie effective. On observe alors des phénomènes qui s'écartent de la loi de Darcy. Il faut néanmoins souligner que ces phénomènes sont généralement d'une faible importance dans la pratique, et la loi de Darcy peut être utilisée dans la grande majorité des cas en ce qui concerne l'écoulement de l'eau dans un sol saturé [Hillel, 1988].

IV.2.2. La zone non saturée

IV.2.2.1. L'équation de Darcy appliquée au milieu non saturé

Les équations du milieu non saturé découlent de celles de la zone saturée. La différence réside dans le fait que certains paramètres deviennent variables au cours du temps et dans l'espace. C'est le cas de la conductivité hydraulique K qui, en zone non saturée, dépend à la fois des caractéristiques du sol (sols plus ou moins compacts, graveleux, sableux, dimension des pores, état hydrique du sol...) mais aussi de celles du fluide (densité, viscosité). L'état insaturé du sol entraîne l'apparition du phénomène de capillarité qui se traduit par la succion. On peut imaginer la succion par la hauteur d'eau qui va monter dans un milieu poreux à partir d'un horizon saturé. On l'exprime en m d'eau.

En tenant compte de ce phénomène, on peut considérer K comme variable par rapport à Ψ (potentiel de succion).

$$K = K(\psi)$$

Dans la zone saturée, le flux est induit par un gradient de charge hydraulique $\frac{dH}{dx}$ qui représente un potentiel hydraulique. Dans la zone non saturée, en absence de charge hydraulique, on peut avoir un flux qui cette fois résulte d'un gradient de concentration en eau (ou d'un gradient de potentiel de succion).

Richards en 1931, étend donc la loi de Darcy conçue pour l'écoulement en milieu saturé, à la zone non saturée, en stipulant que la conductivité est une fonction de la charge de succion. La relation de Darcy devient alors l'équation de Richards écrite ici pour un écoulement unidirectionnel:

$$q_x = -K(\psi) \frac{d\psi}{dx}$$

où $\frac{d\psi}{dx}$ est le gradient de succion

On peut écrire l'équation de Richards, lorsque l'on est en présence à la fois de la succion et d'une charge hydraulique, sous la forme suivante :

$$q_x = -K(\psi) \frac{dH}{dx}$$

où H représente la charge hydraulique qui peut inclure les termes de gravité et de succion. On peut bien écrire ces relations vectoriellement pour les trois directions de l'espace.

IV.2.2.2. L'approche diffusionnelle en zone non saturée

On peut décrire le flux d'eau en milieu non saturé par l'intermédiaire de la diffusion au lieu de la succion. En effet les gradients de teneur en eau peuvent être considérés comme les potentiels induisant des transports diffusifs.

On exprime mathématiquement la diffusion par une loi phénoménologique, la **loi de Fick**, qui considère que le flux diffusif q est proportionnel au gradient de concentration du produit :

$$q = -D_e \text{Grad } \theta$$

Où θ est la teneur en eau

D_e , le coefficient de diffusion ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$) ou la diffusivité de l'eau.

Le coefficient de diffusion est alors lié à la conductivité hydraulique par le fait que θ et Ψ sont eux-mêmes liés. Le flux peut donc s'écrire de deux manières suivant que l'on considère la succion ou le mouvement par diffusion :

$$q_x = \begin{cases} -K(\psi) \frac{d\psi}{dx} \\ \text{ou} \\ -D_e(\theta) \frac{d\theta}{dx} \end{cases}$$

θ la **teneur en eau** volumique peut être exprimée en pourcentage; c'est la quantité d'eau (gravitaire, liée) contenue dans un réservoir, saturé ou non, rapporté au volume total, quel que soit le type d'eau considérée. Dans la zone non saturée, on parle d'humidité définie par :

$$\theta = \frac{\text{volume eau}}{\text{volume total}}$$

On peut alors relier les coefficients de diffusion et de perméabilité :

$$D_e(\theta) = K(\theta) \frac{d\psi}{d\theta}$$

Remarque :

La loi de Darcy définie à l'aide du potentiel de succion n'a de sens que si le sens de l'évolution hydrique du sol est connue. En effet, le phénomène d'hystérèse de la relation entre la succion et la teneur en eau, oblige à préciser le sens de variation de la teneur en eau pour fixer cette relation. La fonction $K(\psi)$ doit être définie soit pour le mouillage (infiltration), soit pour le drainage. Ceci complique sa détermination. L'hypothèse faite par Richards (1931), en posant la conductivité hydraulique fonction de la teneur en eau, ne peut être traduite par la relation $K(\psi)$ que si la relation $\psi(\theta)$ est univoque. En précisant l'histoire de l'évolution de l'humidité dans le sol, la relation (IV.4) a alors un sens. Sinon, l'équivalence formelle des deux écritures de la loi de Darcy ne peut être justifiée.

IV.3. Transport des solutés dans les milieux poreux

Le transport des solutés présents dans l'eau est régi par les lois physiques de transport de l'eau que nous venons de voir. Les solutés sont ainsi véhiculés de façon «passive» c'est à

dire sans interactions d'ordre chimique, par des mécanismes de **convection**. En outre les différences de concentration d'un soluté dans l'eau induisent un transport par **diffusion**.

IV.3.1. La convection

Ce phénomène est le plus simple que l'on puisse considérer et l'hypothèse implicite est la non-interaction entre les solutés (le polluant) et le sol. Le soluté suit donc le mouvement général de l'eau sans perturbation d'origine chimique. Au mouvement général du soluté, s'ajoute le mécanisme de **dispersion cinématique**. Ce phénomène dépend de la vitesse d'écoulement d'un fluide dans un milieu poreux. La dispersion est liée à l'hétérogénéité des vitesses microscopiques lorsqu'un fluide s'écoule à travers un milieu poreux; sa distribution de vitesse n'est pas uniforme. Cela est dû :

- * au profil de vitesse qui, dans les capillaires intergrains est parabolique,
- * à la dimension des pores,
- * aux lignes de courant qui fluctuent par rapport à la direction principale de l'écoulement en raison des obstacles constitués par les grains ou matériaux plus grossiers [Dupont, 1994].

IV.3.2. La diffusion

La **diffusion** recouvre l'ensemble des phénomènes qui tendent à homogénéiser les concentrations dans un fluide où existent des gradients de concentration. A la dispersion cinématique décrite précédemment, résultant de l'écoulement du fluide, on ajoute la **diffusion moléculaire**, phénomène physique qui provient de l'agitation moléculaire. On utilise souvent le terme de diffusion pour parler à la fois de la dispersion cinématique et de la diffusion moléculaire. La **diffusion moléculaire** préexiste dans un fluide au repos et provient de la distribution non homogène du soluté dans la phase fluide. Le soluté va migrer des zones plus concentrées vers les zones moins concentrées afin d'établir une distribution de concentration uniforme. Ce mouvement est généré par la pression osmotique, commandé par le gradient de concentration qui varie d'une zone à l'autre du milieu poreux.

On modélise le phénomène de **diffusion** (dispersion cinématique et diffusion moléculaire) par la **loi de Fick** explicitée précédemment où on considère que le coefficient de diffusion D (coefficient de diffusion apparent), est la somme du coefficient de dispersion cinématique D_{cin} et du coefficient de diffusion moléculaire D_{mol} .

$$D = D_{cin} + D_{mol}$$

La dispersion cinématique étant liée à la vitesse d'écoulement, D_{cin} devient nul quand la vitesse de l'écoulement tend vers 0. Le coefficient de dispersion cinématique est lié à la vitesse de l'écoulement par une loi semi-empirique :

$$D_{cin} = \lambda V$$

où V est la vitesse de l'écoulement.

Le coefficient λ est appelé la dispersivité et a la dimension d'une longueur. Sa valeur déterminée au laboratoire est de quelques centimètres; in situ elle de l'ordre du mètre voire

des centaines de mètres suivant l'hétérogénéité de la formation (Lallemand-Barrès et al. cités par de Marsily). La dispersivité peut varier avec la direction de l'écoulement.

L'étude du transport dispersif nécessite la mesure du coefficient de diffusion moléculaire et de la dispersivité. Le coefficient de diffusion du soluté dans le sol est différent du coefficient de diffusion des ions dans l'eau appelé coefficient de diffusion libre. La valeur du coefficient de diffusion moléculaire est réduite par la présence des pores partiellement remplis et par la tortuosité du sol. Pour tenir compte des différents facteurs influençant la diffusion des ions dans la sol, le coefficient de diffusion moléculaire est multiplié par différents coefficients réducteurs. On obtient alors le **coefficient effectif de diffusion**. Le tableau ci-dessous donne une idée des coefficients correcteurs proposés. Les techniques de détermination du coefficient de diffusion du soluté permettent l'obtention du coefficient effectif de diffusion. On peut alors obtenir le coefficient correcteur global appelé facteur d'impédance, si on connaît par ailleurs le coefficient de diffusion libre.

Définition du coefficient effectif de diffusion D^* (Shackelford 1988)

Définition	Référence
$D^* = \tau D_{mol}$	Gillham <i>et al.</i> (1984)
$D^* = \tau \alpha D_{mol}$	Li et Grégory (1974)
$D^* = \tau \theta D_{mol}$	Berner (1974), Drever (1982)
$D^* = \tau \alpha \gamma \theta D_{mol}$	Kemper <i>et al.</i> (1964); Olse et Kemper (1968); Nye (1979)
$D^* = \tau \gamma D_{mol}$	Poter <i>et al.</i>
$D^* = \tau \alpha \theta D_{mol}$	van Shalk et Kemper (1966)

τ facteur de tortuosité

α facteur de mobilité

γ facteur dû au compactage

θ teneur en eau volumique

L'utilisation de la loi de Fick appliquée à la diffusion du soluté dans le sol permet la détermination de D^* .

IV.3.3. L'équation générale de transport

Si on combine la convection et la diffusion, on aboutit à l'équation de convection-diffusion, écrite ici pour un écoulement unidirectionnel dans un milieu poreux saturé :

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{ij} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \right)}_{(a)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{v}_j \bar{C})}_{(b)} + \Phi$$

où \bar{C} la concentration du soluté,

D_{ij} le coefficient de diffusion de l'élément i dans la direction j ,

et \bar{v}_j la vitesse d'écoulement dans la direction j .

Le premier terme (a) représente la diffusion tandis que le second (b) traduit la convection. Φ représente le terme source (apparition ou disparition de masse de soluté durant le transport).

Le champ de vitesse \bar{v}_j s'obtient par la résolution des équations de Darcy ou de Richards.

- La convection et la dispersion peuvent être considérées comme **conservatives** lorsque:
- 1) il n'existe pas de phénomène de sorption-désorption qui modifie la concentration en soluté en un point de l'écoulement par les échanges avec la matrice poreuse.
 - 2) tout l'eau se déplace; il n'y a pas de couche de molécules d'eau adsorbées ou retenues par capillarité, qui constituerait une phase immobile susceptible d'influencer la migration du soluté.
 - 3) il n'existe pas de phénomènes de dissolution/précipitation qui modifieraient la concentration de soluté en un point du milieu poreux.

IV.4. Les interactions entre le sol et le soluté

Le transport d'un soluté dans un milieu poreux est fonction de facteurs spécifiques au fluide, à la matrice solide, au soluté lui-même ou encore aux différentes interactions existant entre les différentes phases. Les phénomènes à prendre en compte sont la convection, la diffusion qui englobe la dispersion cinématique et la diffusion moléculaire pour les mécanismes de transport du liquide, auxquels s'ajoutent les phénomènes d'adsorption et d'échange d'ions, les réactions chimiques et les processus biologiques (liste non exhaustive) pour les mécanismes influençant la mobilité des espèces.

Dans ce type de processus, la loi de conservation de la matière n'est pas respectée dans la phase aqueuse, c'est pourquoi ces phénomènes sont «non conservatifs». Ils se superposent, en terme de «source» et de «puits» aux équations de transport par convection - dispersion. Ainsi, on identifie plusieurs processus pouvant conduire à l'immobilisation des solutés (adsorption, précipitation chimique...) ou à leur mobilisation différée.

IV.4.1. Les mécanismes physico chimiques

La rétention

Dans les sols non saturés, la proportion de l'eau liée plus ou moins fortement au squelette peut être du même ordre de grandeur que celle de l'eau libre. Cette partition de la phase liquide en phase mobile et phase immobile, influence le transport de soluté. La différence de concentration dans la phase mobile et la phase immobile provoque un échange entre les deux phases qu'on appelle «échange latéral». Pour tenir compte de cet aspect du transport, on introduit le coefficient de partage exprimé en pourcentage d'eau mobile. Soit $f = \theta_m / \theta$, où θ_m est la teneur en eau mobile et θ est la teneur en eau volumique total du milieu poreux.

A chaque phase est alors associée la concentration appropriée: C_m pour la phase mobile et C_{im} pour la phase immobile. L'équation (IV.6) de convection-dispersion devient :

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} + \frac{1-f}{f} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{ij} \frac{\partial C_m}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{V}_j C_m) + \Phi$$

Cette équation suppose constant, le pourcentage d'eau mobile dans le poreux.. Cette équation comporte deux inconnues ; il faut donc lui adjoindre une relation supplémentaire pour la résolution.

L'adsorption

L'adsorption de molécules de soluté à la surface du solide provoque leur immobilisation. Ce phénomène résulte des forces d'attraction ou de répulsion existant entre les ions ou les molécules des différentes phases.

On distingue :

- **L'adsorption physique** qui est le résultat de réactions impliquant de liaisons physico-chimiques de faible énergie (échange d'ions et forces de Van der Waals),
- **L'adsorption chimique** qui concerne les liaisons chimiques de forte énergie (liaisons covalentes).

Pour décrire les processus d'adsorption/désorption, des hypothèses d'équilibre local sont souvent utilisées :

- *l'hypothèse d'équilibre local (LEA)* : on considère que les processus d'adsorption sont instantanés par rapport à la convection et la dispersion. La sorption et la désorption sont décrites par des relations entre la concentration massique de soluté adsorbé S et la concentration de soluté C de la solution d'équilibre. Ces relations sont les isothermes de sorption-désorption. Les isothermes $S(C)$ peuvent être de différents types (explicités ci-après). Dans les conditions naturelles, les phénomènes de sorption ne sont réversibles que lorsque le sol et la solution contiennent suffisamment de cations de remplacement pour permettre la désorption. On peut tenir compte de ce phénomène d'hystérèse en utilisant des coefficients différents pour les isothermes suivant qu'on est en sorption ou en désorption. Cette approche conduit à la définition d'un coefficient K_d quand la relation entre les concentrations dans les deux phases est linéaire.

Lorsqu'on considère que les processus d'absorption/désorption ont une cinétique qui ne peut être négligée, il faut prendre en compte la cinétique de sorption/désorption.

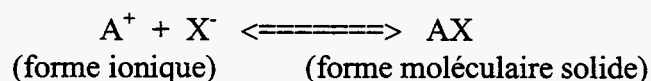
Les réactions d'échange ionique

Ce processus s'ajoute à l'adsorption. L'existence de charges électriques non neutralisées à la surface et / ou à l'intérieur des minéraux en est à l'origine. Des ions de charges opposées viennent se fixer sur ces charges non neutralisées et créent ainsi une double couche électrique. On distingue les échanges de cations des échanges d'anions suivant la charge électrique des éléments en présence. Ainsi par exemple, les charges négatives du réseau cristallin des argiles ne sont pas totalement compensées par les cations appartenant à ce réseau. Des cations «compensateurs», interchangeables, peuvent être attirés et retenus à la surface des minéraux argileux.



Les réactions de solubilisation-précipitation

Ces réactions sont aussi importantes que les phénomènes d'adsorption ou d'échange ionique. Elles se produisent dans l'eau des pores ou en surface des particules du sol. Ce processus a pour action de précipiter les solutés dissous dans l'eau [Dupont 94].



L'évolution de l'équilibre réactionnel est fonction de nombreux paramètres (concentrations respectives dans la phase aqueuse, composition du sol, température, pH,

pression,...). Ces réactions peuvent être modélisées à l'aide des constantes d'équilibre ou des produits de solubilité que l'on peut trouver dans les bases de données thermodynamiques.

IV.4.2. Les réactions microbiologiques

Dans les sols, tous les types de micro-organismes existent (champignons, algues, bactéries, protozoaires...). Depuis longtemps on s'est aperçu qu'ils jouent un rôle fondamental dans maintes transformations chimiques et mêmes physiques. Les approches modélisatrices ont souvent négligé d'aborder ce sujet car les interconnexions existants entre les micro-organismes, le sol, les plantes et les composantes chimiques et physiques sont extrêmement complexes et encore assez méconnues. La connaissance en ce domaine est très incomplète, empirique ou complètement théorique. La prise en compte de l'action des micro-organismes sur un polluant dans la modélisation est donc assez récente et liée à l'utilisation de plus en plus courante de micro-organismes pour la dépollution des sols ou *bioremédiation*.

La biodégradation d'un composé organique en condition aérobie (O₂ présent) ou anaérobie (absence d'oxygène) peut être définie comme une réaction de réduction catalysée biologiquement. Elle conduit fréquemment à la conversion d'un composé organique en un produit inorganique. Une telle conversion est appelée *minéralisation*. Toutes les réactions microbiennes conduisent au stade ultime, à un produit inorganique par l'intermédiaire d'une minéralisation. Dans ce type de réaction, le carbone, l'azote, le phosphore, le soufre et les autres éléments en présence, sont convertis en CO₂ et autres formes inorganiques. Une partie cependant reste sous forme organique et est incorporée dans les cellules de la population active pour assurer le fonctionnement. Une autre partie peut apparaître comme un produit typique du métabolisme de l'organisme.

L'action des micro-organismes est souvent perçue comme positive dans le sens où elle transforme une substance active en un produit inactif. Mais cette transformation peut induire la production de molécules toxiques. [Alexander, 1994].

L'évaluation de l'action, de l'efficacité des micro-organismes ainsi que la qualité et la quantité de leur production paraît donc extrêmement importante. Cette évaluation passe inmanquablement par l'aspect modélisation. Plusieurs types de modèles sont utilisés afin d'évaluer l'impact de l'activité microbienne et rendre compte des différents processus chimiques qui interagissent entre eux. Ces modèles sont le plus souvent utilisés dans le cadre de dépollution de sols *in situ*.

Les modèles de réaction biologique vont représenter la manière dont les organismes transforment les polluants et ce, plus ou moins rapidement. Le taux de biodégradation dépend de la somme de biomasse présente, de la concentration en polluant, du type d'accepteurs d'électrons, des sources de nourriture disponibles, et de paramètres décrivant le taux de transport des polluants suivant les organismes en présence et enfin, du rendement des réactions enzymatiques en jeu.

Les limitations de ces modèles sont en général liées au caractère très spécifique de ceux-ci. La validation s'effectue sur un site et les résultats disponibles sont difficilement extrapolables d'un site à un autre. [In situ bioremediation, 1993].

Il est évident que le développement des micro-organismes et l'activité qui en découle est particulièrement présent dans les zones non saturées. En particulier, les phénomènes de battement de nappe sont particulièrement propices à ces phénomènes.

IV.5. La notion de coefficient de répartition

Le transport de polluants dans un sol est le résultat de compétition entre les phénomènes conservatifs qui tendent à véhiculer le polluant, et les phénomènes non conservatifs qui tendent à l'immobiliser (adsorption, précipitation). Afin de rendre compte des différents processus de sorption-désorption, le concept de K_d a été introduit. Le K_d ou coefficient de répartition intervient dans toutes les réactions citées précédemment et regroupe en quelque sorte les différentes interactions entre les polluants et le sol. Il exprime la répartition de l'élément polluant considéré entre la phase liquide où il est transporté et la phase solide où il est adsorbé. Ce coefficient a pour avantage d'introduire dans les fonctions de transfert, un facteur de retard.

$$K_d = \frac{\text{concentration totale dans la phase solide (par unité de masse)}}{\text{concentration totale en solution (par unité de volume liquide)}} = \frac{S}{C}$$

La répartition d'un élément ou d'un composé entre une fraction immobilisée et une fraction dissoute peut être exprimée suivant différentes relations mathématiques. Ces relations mathématiques représentent les isothermes qui décrivent les équilibres thermodynamiques de répartition de concentration entre la phase solide et la phase liquide. On distingue classiquement trois grandes classes d'équilibre dont les isothermes ont les formes suivantes :

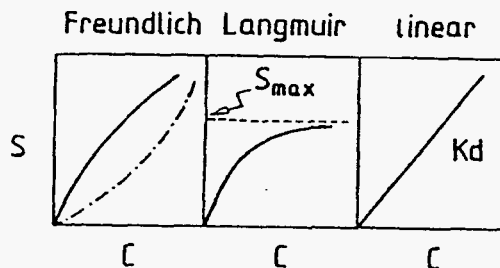


Figure 2 : Isothermes d'adsorption les plus fréquents

Ainsi pour les métaux, l'isotherme d'adsorption est souvent de type Freundlich (parabole) ou Langmuir (hyperbole). Pour les polluants organiques hydrophobes, l'isotherme d'adsorption est souvent linéaire, et par conséquent le K_d correspondant est indépendant de la concentration totale du composé. Il est généralement admis que pour les métaux, à des faibles concentrations, le coefficient de répartition peut être considéré comme constant.

Il est possible d'estimer le K_d par l'expérimentation en comparant la vitesse de transfert d'un élément par rapport à celle de l'eau. L'expression à laquelle on aboutit, est considérée comme un **facteur de retard** qui peut être utilisé pour estimer la vitesse de migration du polluant. Cette expression n'est valable que pour une adsorption linéaire, réversible et instantanée.

Le facteur de retard est souvent exprimé dans les modèles déterministes par une équation faisant intervenir la densité et la porosité du sol et le K_d de la substance. Le K_d pour une fonction linéaire est calculé lui même par le K_{oc} et la fraction organique du sol. Le facteur de retard est déterminé par l'équation :

$$1 + \left(\frac{\rho}{\varepsilon} * K_d \right) \quad (\text{cas de DEDALE 3D})$$

Il ne faut pas omettre d'autre part que l'adsorption peut rentrer en compétition avec les réactions d'hydrolyse et de complexation - dissolution. Par exemple la migration du mercure à travers une colonne de sable est fortement dépendante de la composition de l'eau.

Le coefficient de répartition permet de simplifier la modélisation des transferts de polluants, et dans certains cas, cette notion permet d'obtenir des prédictions tout à fait raisonnables. Cependant l'utilisation du K_d implique plusieurs contraintes à respecter si l'on veut obtenir des résultats valides. D'une part la réaction d'adsorption, doit être suffisamment rapide par rapport à l'écoulement de l'eau et réversible. Le K_d est soumis au comportement de l'élément ou du composé que l'on considère (spéciations préférentielles, comportement chimique,...). De plus, il dépend également de la stabilité de la chimie de l'eau environnante. On peut noter aussi, l'influence de la présence de grosses molécules organiques dissoutes (ou sous forme colloïdale) comme les substances humiques qui sont susceptibles de diminuer l'adsorption des molécules organiques hydrophobes.

IV.6. Etablir l'équation de transport

La vitesse de l'écoulement du fluide est donnée par la loi de Darcy. Lorsque le sol est non saturé, cette vitesse dépend en plus de la teneur en eau volumique θ .

Les équations de transfert de soluté doivent tenir compte de l'état hydrique du sol et de toutes les possibilités de modification de la concentration. En tenant aussi compte de la disparition ou de l'apparition de l'élément chimique, par application du principe de la conservation de la masse, l'équation générale de transport isotherme d'une espèce chimique est la suivante (transfert unidirectionnel) :

$$\frac{\partial(\rho S_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\theta C_i)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \theta D_i(\theta, q) \frac{\partial C_i}{\partial z} \right\} - \frac{\partial}{\partial z} (q C_i) + \sum_{j=1}^n \phi_{i,j}(C_i, S_i)_{c,i}(z, t)$$

(a) (b) (c) (d) (e)

C_i est la concentration de l'espèce chimique dans la phase liquide.

S_i est la concentration de l'espèce chimique dans la phase solide.

D_i est le coefficient apparent de diffusion de l'espèce chimique, dépendant de la teneur en eau volumique et du flux de Darcy donné par l'équation (3).

Le premier terme (a) de l'équation (IV.8) décrit le taux de passage de l'espèce (i) de la phase liquide à la phase solide et vice versa; il inclue le processus de sorption/désorption et d'échange ionique.

Le deuxième terme (b) est le taux d'accumulation de l'espèce (i) dans la phase liquide.

Le terme (c) décrit le transfert diffusif associant la diffusion moléculaire ou ionique à la dispersion cinématique.

Le terme (d) représente le transfert convectif, l'espèce chimique (i) étant transporté par le flux de liquide.

Le terme (e) prend en compte les sources et consommations de l'espèce (i).

L'utilisation du coefficient de partition K_d permet l'association des deux concentrations S_i et C_i (phase solide et phase liquide). L'utilisation de la relation entre S_i et C_i permet l'introduction dans l'équation de transfert de la fonction retard $R(C)$. On peut alors réécrire l'équation de transport sous la forme (transport unidirectionnel dans un sol saturé):

$$R(\bar{C}) \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_{ij} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{v}_j \bar{C}) + \Phi$$

avec $R(C) = 1 + \frac{\gamma_d}{n} K_d$ si la relation entre S et C est linéaire soit : $S = K_d C$

γ_d est la densité sèche du sol, n la porosité.

Lorsque le transport a lieu dans un sol non saturé, les paramètres θ (teneur en eau volumique) et q (flux de Darcy, lié à la vitesse de pore) évoluent. On doit alors associer à l'équation de transport de soluté l'équation de Richards en régime transitoire, soit :

$$c(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ K(\psi) \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right) \right\}$$

ou

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ D_e(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right\} - \frac{\partial K}{\partial z}$$

avec

$c(\psi) = \frac{\partial \theta}{\partial \psi}$ est la capacité de rétention du sol; cette fonction rend compte de l'aptitude d'un milieu poreux à libérer ou à emmagasiner de l'eau sous l'effet d'une variation de pression. Elle correspond au coefficient d'emmagasinement d'une aquifère lorsqu'on atteint la saturation.

$D_e(\theta)$ est la diffusivité de l'eau et ψ la succion. L'écriture de ces correspond aux deux écritures de la loi de Darcy, soit à partir du gradient de succion (forme la plus fréquemment utilisée), soit à partir du gradient de teneur en eau en introduisant la diffusivité de l'eau dans un sol.

Les équations de transport peuvent être établies pour un écoulement bidimensionnel et tridimensionnel. Si le milieu est anisotrope, les paramètres de ces équations doivent être évalués pour chacune des trois directions. La résolution d'un tel système est très lourde et très compliquée. Une appréciation des différents phénomènes est nécessaire avant toute recherche de solution d'un cas réel.

V. MODELISER POUR SIMULER

V.1. Qu'est-ce qu'un modèle ?

Comme il a été souligné précédemment, la compréhension des phénomènes de transfert est complexe et la modélisation doit prendre en compte le fait que les processus étudiés sont en général couplés les uns aux autres, qu'ils sont non linéaires et dans un milieu polyphasé (eau-air-sol). Ce milieu est susceptible de se déformer et les concentrations en fluide varient dans le temps et l'espace sous l'action conjuguée de variation d'énergie mécanique et thermique avec la possibilité de changements de phase et d'échanges physico-chimiques entre les phases. Un modèle doit donc être considéré comme une image simplifiée d'une réalité complexe qui permet de simuler et d'extrapoler cette réalité.

On peut représenter grossièrement un modèle sous une forme générale telle que :

$$Y = F(X, A) + \varepsilon$$

X est le vecteur des variables d'entrée et Y, le vecteur des variables de sorties. A représente le vecteur des paramètres à prendre en compte et ε , l'erreur commise en assimilant l'objet de l'étude à son image modélisée mathématiquement. Tout l'art de la modélisation réside donc dans l'appréciation de la validité des résultats en fonction des erreurs. Un modèle doit être **précis, robuste, adaptable et simple** d'usage dans la mesure du possible.

Globalement on distingue trois grandes classes de modèles :

- lorsque F résulte de l'expérimentation, il s'agit de *modèles empiriques*. Cette appellation est plutôt employée pour désigner le mode d'obtention de certaines lois (comme la Loi de Darcy, tirée directement de l'expérimentation) utilisées dans les codes de calcul des modèles de transfert,
- les *modèles déterministes* correspondent à une fonction F fondée sur une certaine connaissance mathématique et physique des processus impliqués,
- si les variables d'entrée ou les paramètres sont considérés comme des fonctions aléatoires, les modèles sont dit *stochastiques*,
- les modèles type «boîte noire» : ce type de modèles est basé sur la détermination de relations entre les données d'entrée et la sortie après analyse du système et ceci, sans que la structure interne de la boîte ne soit connue.

V.2. Les problèmes d'échelle de travail

La modélisation implique de travailler à des échelles différentes, et le passage d'une échelle à une autre est en général très délicat. Si l'on veut faire une analyse fine des phénomènes de migration de l'eau et des solutés, on doit distinguer trois niveaux d'approche : l'échelle microscopique, l'échelle du volume représentatif et l'échelle du terrain.

L'échelle **microscopique** prend en compte les phénomènes au niveau de la phase aqueuse contenue dans les pores et à celui des interfaces du liquide avec les parois des pores. On définit alors des paramètres locaux qui décrivent une quantité physique en un point, c'est-à-dire un élément de volume infiniment petit. Les géométries de la porosité définissent les domaines de continuité. Cette approche présenterait l'avantage de décrire les phénomènes

avec l'approche la plus rigoureuse mais elle n'est pas réaliste pour des milieux poreux aussi complexes et hétérogènes que le sont des sols.

L'échelle spécifique des milieux poreux est très généralement une échelle plus macroscopique. C'est à son niveau que le mélange polyphasique (eau air sol) peut-être considéré comme un milieu continu. On définit alors un **Element de Volume Représentatif** (EVR) [Gaudet, 1974], autour d'un point, choisi à l'intérieur d'un pore. Les grandeurs (porosité, concentrations, pression, vitesses d'écoulement,...) peuvent alors être considérées comme des variables continues. Le domaine d'étude est alors le milieu poreux dans les limites où ces grandeurs peuvent être définies et continues. Il faut noter le domaine de recherche qui vise à « réconcilier » les deux approches précédentes: l'homogénéisation vise à trouver les paramètres macroscopiques à partir de la description microscopique des phénomènes.

Le passage de l'échelle du laboratoire à celle du **terrain** pose évidemment de très gros problèmes dans le cas des transferts de polluants dans les sols car les caractéristiques du terrain ne peuvent être approchées que de manière très schématique ou incomplète à l'échelle du laboratoire ou même du pilote. C'est certainement là l'une des limitations pour une utilisation pertinente des modèles de simulation.

V.3. Les différentes approches de la modélisation

V.3.1. L'approche déterministe

V.3.1.1. Objectifs et limites de l'approche déterministe

L'approche déterministe conduit à expliciter par des équations mathématiques l'ensemble de tous les phénomènes qui régissent le transport des polluants, comme on l'a vu au chapitre précédant. A chaque cas étudié correspond une hiérarchisation des phénomènes à prendre en compte:

- nature et caractéristiques du milieu poreux,
- interactions des solutés avec le sol,
- conditions du scénario considéré...

Les lois de Darcy et/ou de Richards permettent théoriquement de calculer les écoulements de la phase aqueuse et les diverses réactions bio-physico-chimiques peuvent être traduites par des équations correspondantes.

Cette approche atteint cependant un certain nombre de limites et difficultés:

- pour modéliser le transfert de polluants dans un sol, les différentes connaissances à mettre en jeu proviennent de différents champs disciplinaires et les formalismes des équations mathématiques qui en résultent ne sont pas toujours faciles à intégrer dans une approche unifiée,
- le problème d'échelle de travail est crucial pour l'approche déterministe car il est très difficile, voire impossible, de garantir l'identité des phénomènes au laboratoire et sur le terrain,
- la connaissance précise des nombreux paramètres à prendre en compte est souvent très lourde ou même impossible,
- la résolution numérique d'un modèle déterministe détaillé peut conduire elle-même à de grosses difficultés, hors de proportion avec la qualité espérée des résultats de simulation,
- en général, une description déterministe détaillée menée sur un cas d'étude perd la possibilité d'être généralisable.

Il ne faut cependant pas condamner sans appel l'approche déterministe. Au laboratoire, elle permet, en tout cas, de mettre en évidence et de quantifier les phénomènes qui déterminent le fonctionnement du système étudié, permettant ainsi d'étayer une approche plus pragmatique. Elle constitue donc un excellent outil de recherche pour étudier en détail les interactions entre l'eau, le sol et le soluté. Néanmoins, la détermination des paramètres, la validation des modèles ainsi que l'utilisation de ceux-ci en condition naturelle, sont autant de limites à considérer.

V.3.1.2. Les modèles déterministes

Ces modèles sont fondés sur la connaissance plus ou moins établie des processus mis en jeu lors de la migration des polluants dans les sols. On peut distinguer les modèles essentiellement fondés sur la notion de vitesse et de flux de matière et qui utilisent les lois de Darcy, de Fick. Ces modèles qui sont utilisés la plupart du temps, sont dit **déterministes mécanistes**.

Ces outils déterministes mécanistes tiennent compte, dans l'absolu, des phénomènes physiques suivants:

- les phénomènes de transport représentés sont la convection et la diffusion,
- les phénomènes physico-chimiques pris en compte sont l'adsorption du soluté sur la matrice poreuse, la volatilisation dans la fraction gazeuse et la dégradation des composés par les micro-organismes contenus dans le sol [Guinot, 1992].

En parallèle les modèles **fonctionnels** sont de type capacitifs : le sol est assimilé à un réservoir. Ces modèles ne s'attachent pas au calcul du transport dans un seul milieu physique particulier. Ils sont utilisés dans le cas de simulation à l'échelle du bassin versant. Ces approches effectuent également une modélisation de l'hydrologie et du transport fondée sur des hypothèses ou des descriptions simplificatrices des processus physiques.

Certains modèles négligent le transport par diffusion et dispersion, seuls sont pris en compte les transports par convection. Ce type de modèle a été utilisé avec un certain succès pour simuler le devenir de concentrations appliquées à la surface d'un sol, mais ils présentent de sérieuses limitations lorsque le sol est hétérogène ou contient déjà des polluants.

D'autres modèles adoptent une approche chromatographique pour simuler le lessivage des sols en considérant une « discrétisation » du sol en compartiments disposés en cascade. Cette approche apparaît pertinente dans le cas de transport de plusieurs espèces chimiques ou de substances fortement interactives avec la phase solide. Ces modèles ont l'avantage de présenter une structure mathématique simple et ils n'utilisent qu'un nombre réduit de paramètres et de données d'entrée ce qui est un gros avantage. L'utilisation de ce type d'approche est là aussi limitée lorsque le sol présente de fortes hétérogénéités ou un géomorphisme complexe.

Les approches déterministes sont utilisées dans la plupart des logiciels de calcul que l'on trouve sur le marché.

Les logiciels MARTHE et TAFFETAS développés au BRGM utilisent la méthode aux volumes finis pour la résolution du modèle. Ils résolvent simultanément les équations de conservation de la masse d'eau et de la masse de soluté. Une loi de variation de la densité est prise en compte lors de la discrétisation de l'équation de conservation de la masse de soluté.

Les logiciels SIMUSCOP de IIFP, RESCOPP de l'ENI (Italie), BURGEAP et l'IFP résolvent les équations de transport en 1D, 2D et 3D en utilisant la méthode des éléments finis ou des volumes finis. La géochimie est prise en compte par introduction du facteur retard. Ces

logiciels se sont principalement intéressés aux hydrocarbures et paramètres hydrodynamiques nécessaires sont donnés par des tables (bases de données).

Le logiciel DEDALE 3-D utilise des équations déterministes plus détaillées. La variation de la densité est prise en compte aussi bien dans l'écriture des équations de conservation de la masse d'eau et de la masse de soluté.

Ces logiciels permettent d'établir la répartition spatio-temporelle de la charge hydraulique ou de la succion et celle de la concentration des éléments chimiques. Le nombre de paramètres à déterminer pour leur utilisation sont d'autant plus nombreux que le modèle mise en oeuvre est complexe.

V.3.2. L'approche stochastique

Les propriétés physico-chimiques d'un sol présente de grandes fluctuations dans l'espace et au cours du temps. Les paramètres utilisés pour la description du transport de polluant n'échappent pas à ces fluctuations. Ces paramètres étant obtenus après échantillonnage ou après mesures in situ en nombre limité, le problème de la représentativité se pose toujours. Pour limiter ces inconvénients, on envisage une démarche statistique.

A partir de l'ensemble des mesures disponibles, on effectue une analyse statistique des propriétés de l'échantillon, sa moyenne, sa variance et sa loi de distribution. Cette approche a été abondamment décrite dans la littérature (voir Warrick et Nielsen, Mac Bratney et Webster 1983 et Vauclin 1983). Elle conduit à considérer les phénomènes de transfert comme des processus erratiques susceptibles d'être quantifiés par des modèles stochastiques.

Les propriétés hydrodynamiques sont représentées par des fonctions aléatoires. qu'on introduit dans les modèles mécanistes. La solution d'un problème de transport est présentés sous forme de probabilité ou en terme de risques. Par exemple, si on admet la loi de Darcy, la conductivité hydraulique $K(\psi)$ du milieu naturel sera considérée comme un processus stochastique. De cette loi et de l'équation de Darcy résultent le fait que la vitesse de pore, du coefficient de dispersion cinématique sont des processus stochastiques.

La résolution des équations de base après introduction des différents processus stochastiques, doit donner en théorie, la distribution spatio-temporelle de la concentration en soluté pour toute les réalisations possibles de K .

L'équation stochastique de transport a été très peu étudiée. On peut citer le modèle de Bresler et Dagan (1979, 1980 et 1983) qui reste à l'heure actuelle le plus représentatif. Les résultats actuellement disponibles aussi bien pour l'hydrodynamique que pour le transport, démontre la non existence de " propriétés effectives " capable de caractériser un milieu homogène équivalent à un milieu réel pour lequel la solution du problème hydro-dispersif dans un sol non saturé serait identique à la moyenne des solutions du problème dans le milieu réel hétérogène (Vauclin 1993).

Cette approche des paramètres hydrodynamiques par les fonctions aléatoires suppose la formation géologique étudiée bien définie (grès, argile, roche cristalline). La description de la formation elle-même peut être fortement erratique. Une description stochastique du sol s'impose. On définit alors les propriétés moyennes du milieu poreux. Cette description est liée à l'échelle utilisée (microscopique ou macroscopique). Le passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique nécessite un outil mathématique (de Marsily 1992). Une fois les lois statistiques des propriétés du milieu poreux établie, elles sont alors étendues à la loi de Darcy et aux équations de conservation de la masse pour une description macroscopique de l'écoulement. Les champs de vitesses et de pression sont représentés par leur moyenne d'après la loi de probabilité utilisée.

Une dernière approche stochastique de l'écoulement est la représentation du milieu naturel par des milieux aléatoires. Des techniques de représentation de milieux poreux ont été développées pour tirer meilleur parti des résultats des campagnes de reconnaissance géologique ou pédologique et rendre compte de la variabilité des faciès. Il s'agit de trouver un modèle de site d'après les informations données par les sondages. Des exemples d'application telles que la dépollution, l'estimation de la ressource en eau d'un aquifère demandent que soient connus des "modèles" de la géométrie du milieu. La technique des milieux aléatoires propose de décrire le milieu par un nombre de "blocs élémentaires" pouvant atteindre plusieurs millions. Ces nouvelles méthodes sont très liées à l'utilisation de méthodes numériques. Les méthodes développées dépendent du domaine d'application.

La méthode booléenne a été développée dans le domaine pétrolier. Elle consiste à générer dans l'espace, de façon aléatoire, des "objets" dont la position et les dimensions sont tirées au hasard, tandis que la forme est a priori connue. Il suffit alors de définir les paramètres hydrodynamique dans l'objet et dans la matrice pour calculer un écoulement. Le choix du type d'objets élémentaires est infini. Plusieurs types d'objets peuvent être superposés, représentant plusieurs faciès (sables grossiers, sables fins, limons, argiles, par exemple).

La dernière méthode de description de la géométrie d'un milieu poreux est la simulation de processus sédimentaires qui génèrent des situations géomorphiques d'un site. La génération des faciès est faite non pas en simulant les processus statistiques ayant une ressemblance avec les distributions observées, mais comme le résultat d'un processus physique de sédimentation. On va donc engendrer des successions de crues dans les rivières ou delta, en simulant le débit du fleuve, sa charge en sédiments et la sédimentation de cette charge, et éventuellement la reprise partielle ou totale de cette charge par l'érosion. On suit ainsi le mécanisme de formation des dépôts au cours du temps, en fonction du climat, de la pente du sol, de l'érosion et du transport solide. Cette méthode n'est pas conditionnée par les observations; il n'existe aucun moyen de forcer la simulation à respecter les faciès observés au forage. Contrairement aux deux méthodes précédentes, une seule simulation est faite pour la description du milieu poreux. Vue l'aspect aléatoire que comporte la succession des crues, il serait possible d'engendrer plusieurs simulations mais la lourdeur des calculs l'interdit pour l'instant.

V.3.3. Les fonctions de transfert

Il s'agit, de manière schématique, d'établir une relation stochastique entre un signal et sa transformée par le milieu traversé. Par exemple, si l'on désigne par Q_e le débit d'entrée et Q_s le débit de sortie, cette relation peut se mettre sous la forme :

$$Q_s = \int_0^t g(t-t')Q_e(t')dt'$$

La fonction $g(t|t')$ est la densité probabilité des temps de séjour. Elle décrit la probabilité qu'aura une molécule entrant dans le volume de contrôle (par exemple la surface du sol) au temps t' de sortie (par exemple à une profondeur définie) entre les instants t et t' . Elle représente l'effet de l'ensemble des processus et de la nature des conditions initiales et aux limites sur le temps de séjour d'une substance dans le sol.

Ce type d'approche a été utilisé avec succès pour simuler des expériences in situ réalisées avec différentes substances (Br, Cl, Nitrates, pesticides, Jury et al. 1986; White *et al.* 1986). Cette approche peut constituer un modèle de gestion de site intéressant dans la mesure

où il ne requiert qu'un nombre réduit de données. Ces types de modèles très souvent utilisés en hydrologie, nécessitent un étalonnage spécifique aux conditions d'utilisation.

Toute modification du milieu, des conditions aux limites exige la recherche d'une nouvelle fonction. Ce type d'approche a conduit à des modèles de types « boîte noire ».

V.3.4. Les modèles type «boîte noire»

Dans l'approche « boîte noire », le modélisateur détermine les relations existant entre les entrées et les sorties d'un système dynamique

Il faut signaler une technique d'identification assez récente des systèmes basée sur l'utilisation des réseaux de neurones. En utilisant des séries d'entrées et de sorties observées, le réseau de neurones peut déterminer une « pondération » entre les données d'entrées qui puisse fournir la ou les sorties. Cette phase de calage est la phase d'apprentissage. La relation qui existe entre les entrées et la sortie se trouve automatiquement calée par le modèle sans que le modélisateur n'ait à faire aucun choix. La modélisation est réduite à sa plus simple expression : il n'y a pas d'équations phénoménologiques à écrire, pas de géométrie, pas de paramètres ni de conditions aux limites et pas de vérification d'un algorithme. Après le calage (apprentissage du réseau), on peut utiliser le modèle en prévision et fournir la sortie pour un nouveau jeu de données d'entrée. Il n'y a pas à notre connaissance d'application de cette technique à la modélisation des transferts de polluants dans les sols. Une limitation évidente est le grand nombre de données expérimentales nécessaires pour le calage du modèle.

V.4. Les modèles en hydrologie

Les modèles en hydrologie sont utilisés afin de prédire l'évolution des débits à l'exutoire d'un bassin versant, suivant différents paramètres (pluie, évapo-transpiration, état hydrique du bassin versant et caractéristiques de celui-ci...). L'hydrologie s'attachant à des phénomènes aléatoires, les approches s'appuient toutes sur une interprétation ou une modélisation statistique des données hydrologiques disponibles, c'est-à-dire sur des mesures de pluie et de débits. Les catégories de modèles sont identiques à celle inventoriées précédemment pour les modèles de transfert. Soit on progresse avec une approche déterministe basée sur les connaissances physiques des phénomènes, soit avec une approche statistique ou stochastique, soit sous la forme des modèles «réservoirs» où les bassins versants sont abordés comme une suite de réservoirs.

On trouve classiquement des modèles déterministes couplés avec des modèles stochastiques qui utilisent les équations avec des fonctions aléatoires à la place de paramètres fixes mesurés sur le terrain ou par l'expérimentation. Cette approche courante en hydrologie l'est moins en ce qui concerne les transferts en milieux poreux.

Dans les modèles déterministes hydrologiques, on retrouve le SHE (Système Hydrologique Européen) qui est utilisé à l'intérieur de certains codes de calcul pour la détermination de la convection-dispersion de polluants dissous, ou pour la modélisation de processus géochimiques (exemple de MIKE SHE).

Dans les modèles statistiques purs, on va avoir des modèles très spécifiques tels que les modèles AR (auto régressif), ARX (AR exogène), ou ARMB(AR à moyenne mobile)... Les modèles réservoirs sont parmi les plus utilisés en hydrologie, et suivant le type de

résolution, on va distinguer les modèles réservoirs linéaires, modèles de Muskingam, modèle réservoir non linéaire, ou cascade de Nash. Ces modèles sont basés sur l'équation de continuité suivante :

$$\frac{dS(t)}{dt} = I(t) - Q(t)$$

ainsi que sur les lois de comportement du bassin versant reliant le stock d'eau S à l'infiltration I et au débit Q :

$$S(t) = f[I(t), Q(t)]$$

Si on s'attache plus en détail au terme d'infiltration, on peut faire appel aux différents modèles d'infiltration, comme le modèle de Gree-Ampt (que l'on retrouve souvent dans les codes de calculs pour les transferts de polluants dans les sols), de Philips ou de Horton. Ces modèles sont basés soit sur Darcy, soit sur Richards suivant la zone qu'ils considèrent.

De la même manière que pour l'infiltration, les hydrologues ont également établi des modèles pour l'évapo-transpiration qui prennent en compte les paramètres atmosphériques (vitesse du vent, humidité de l'air, température, rayonnement solaire..) alliés aux paramètres caractéristiques des sols.

L'approche hydrologique va être utilisée lorsque l'on va vouloir modéliser l'impact d'une forte pluie sur le relargage de polluants dans les sols.

V.5. Les modèles géochimiques

La géochimie des sols pose encore beaucoup de problèmes quant à la modélisation. Les logiciels détaillés n'en sont encore qu'à leur début et sont peu nombreux. On considère souvent la chimie sous l'angle simplificateur du Kd qui joue un rôle de boîte noire. Les modèles de géochimie sont des logiciels de calculs thermodynamiques des équilibres en solution en contact avec les roches.

Comme exemple, on peut citer le modèle **Geochimist's Workbench**, développé par Bethke depuis 1992, qui aborde le problème des équilibres chimiques de manière très complète. Ce type de modèle utilise plusieurs codes de calculs qui déterminent les équilibres thermodynamiques et les chemins réactionnels possibles pour les systèmes fluide + minéraux + gaz rencontrés en géochimie.

La minéralogie des formations du site ainsi que les compositions et caractères physico-chimiques des eaux sont utilisés pour l'évaluation des réactions possibles, des spéciations des solutions et des chemins réactionnels. La modélisation permet, à partir des interactions fluide/roche simulées, de retrouver des solutions ayant des caractéristiques proches de celles des eaux analysées.

La confrontation entre la composition des solutions simulées et des solutions analysées aide à la compréhension de l'évolution de la solution polluante dans l'encaissant. La modélisation doit permettre d'évaluer la réaction de l'encaissant vis à vis des éléments impliqués, les types de réactions, le rôle des différentes formations, les éléments mobiles et immobiles...

On peut citer quelques cas d'étude: la contamination de sols et des eaux sous-terraines par des polluants minéraux, l'évaluation du devenir de produits industriels fluorés, le drainage

acide de rejets miniers sulfurés, l'injection de gaz dans un aquifère profond et l'impact hydrochimique de la remise en eau d'une mine métallique.

V.6. Les différentes approches rencontrées au cours de la modélisation

Lors de la modélisation il est indispensable de réfléchir au préalable sur (par exemple) :

- l'approche dimensionnelle : 1-D, 2-D ou 3-D,
- le type de résolution spatiale de la zone à étudier : différences finies, éléments finis, volumes finis,
- le schéma de résolution en régime transitoire : implicite, explicite, implicite-explicite.

Dans les différents outils de simulation de transfert de polluants dans les sols, présentés par la suite, ces différentes approches sont abordées de manières différentes. Se pose alors le problème du choix ou du bien fondé de ces différentes approches pour obtenir des simulations les plus proches de la réalité. Nous ne donnerons ci dessous que les éléments de réflexion pour l'approche dimensionnelle.

Les écoulements souterrains sont de façon générale de nature tridimensionnelle. Dans certains cas, une hypothèse de «bidimensionnalité» peut cependant être faite : c'est l'hypothèse de Dupuit. Dans cette hypothèse, pour de faibles pentes de la surface libre, les lignes de courant sont considérées comme horizontales et sont associées à des vitesses proportionnelles à la pente de surface libre et indépendantes de la profondeur (ce qui implique que les lignes équipotentielles sont verticales). Les modèles 2-D s'appuient sur cette hypothèse et considèrent en un point de l'espace (x,y) une vitesse unique de l'écoulement souterrain, quelque soit la profondeur.

On peut rencontrer trois types d'approches :

1- approche 2-D ZS

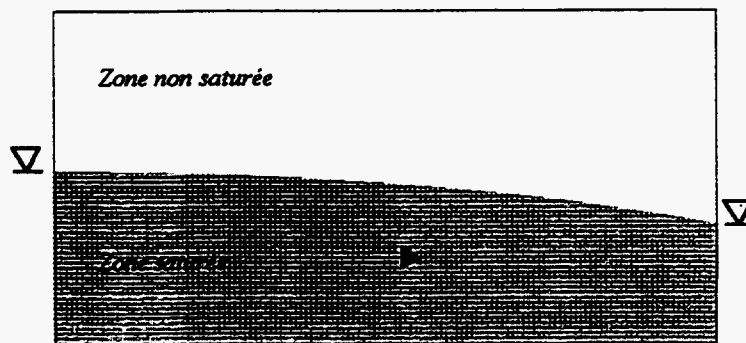


Figure 3 : approche 2-D ZS

2- approche 3-D ZNS / ZS

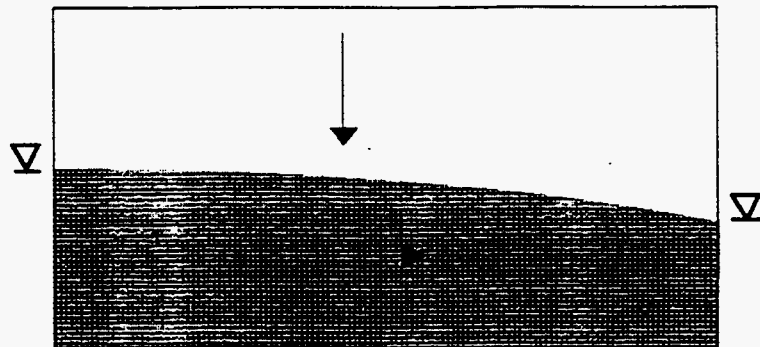


Figure 4 : approche 3-D ZNS / ZS

3- approche 3-D complète (DEDALE 3-D)

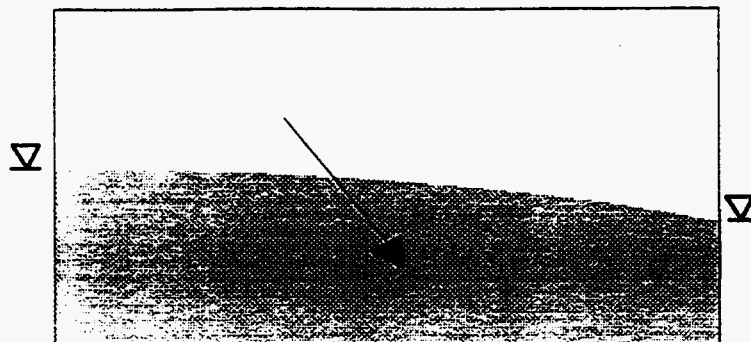


Figure 5 : approche 3-D complète (DEDALE 3-D)

Il est important de noter que le devenir d'un polluant est complètement différent suivant les approches considérées, comme le montrent les deux figures suivantes.

1- Une approche bidimensionnelle implique d'appliquer le polluant non pas à la surface du sol, mais directement dans l'aquifère et sur toute l'épaisseur de celui-ci, de façon homogène. Par conséquent, même si l'hypothèse de Dupuit est valable, l'utilisation de ce type de modèle pour des problèmes de transfert de polluants s'avère délicate.

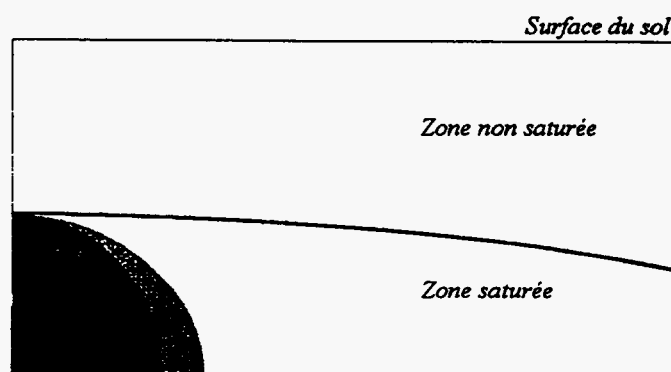


Figure 6 : approche bidimensionnelle

2- Dans une approche tridimensionnelle, le polluant peut effectivement être appliquée à la surface du sol. Sa propagation se fait dans la zone non saturée puis ensuite dans la partie supérieure de la zone saturée. Sa concentration selon une verticale est hétérogène. Dans le cas d'une approche complète, à la différence d'une approche couplées ZNS / ZS, le polluant peut migrer *latéralement* au sein de la zone non saturée.

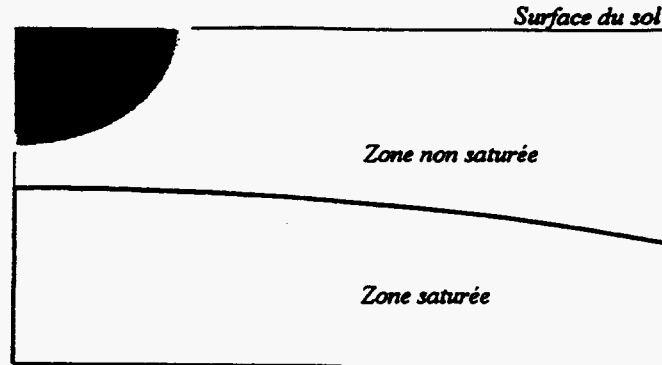


Figure 7 : approche tridimensionnelle

V.7. Conclusions

Différentes approches modélisatrices sont utilisées pour décrire les transferts de polluants dans les sols. L'enjeu principal est la prise en compte réaliste de la complexité des phénomènes réels.

Une première difficulté réside dans le fait que la description macroscopique du transfert de polluants dans un sol doit être menée sur de grandes échelles d'espace et de temps alors que la connaissance précise des mécanismes mis en jeu n'est possible qu'à l'échelle du laboratoire. De plus, les connaissances proviennent de champs disciplinaires très différents. Un modèle global est a priori difficile à construire, ne serait-ce qu'à cause des formalismes provenant des différentes approches.

L'approche déterministe, qui a pour ambition de coller au plus près des mécanismes physico-chimiques réels, atteint ses limites lorsque la complexité des phénomènes réels empêche de garantir la pertinence des choix nécessairement simplificateurs du modèle ou la fiabilité des données nécessaires.

L'approche stochastique, séduisante a priori pour une approche des situations complexes et les possibilités de changement d'échelles, ne s'impose qu'au prix d'une approche très rigoureuse des données statistiques manipulées et de validations expérimentales poussées.

VI. SYNTHÈSE DE LA DEMANDE

VI.1. Motivations de la demande

Une analyse de risques dus à la pollution d'un site passe par l'évaluation de la pollution actuelle et de son devenir. Cette évaluation peut être menée à l'aide d'outils de modélisation et de prévision de la migration de polluants, et plus particulièrement la migration de ceux-ci dans la zone non saturée en direction de la nappe.

Aujourd'hui, les membres de RE.CO.R.D. s'intéressent à la problématique de l'évaluation du risque "sols pollués" essentiellement pour trois raisons :

→ La nouvelle réglementation :

Suite à la circulaire de Barnier (circulaire du 3 décembre 1993, **Annexe 2**) des consignes sur l'étude des risques pour les sols pollués arrivent aux DRIRE. Cette circulaire annonce aux préfets la mise en place d'une véritable politique de traitement des sites et sols pollués.

Les études de risques impliquent :

- * la caractérisation de la source de pollution,
- * la caractérisation de la cible (attention toute particulière à l'eau potable),
- * la caractérisation du transfert des polluants jusqu'à la nappe. C'est ici qu'intervient l'utilité des modèles de migration de polluants dans les sols et notamment en zone non saturée.

Une grille d'évaluation ainsi que les niveaux d'exigence de décontamination sont joints à la circulaire.

→ La cessation et l'achat d'activités :

Les arrêtés d'autorisation prévoient les conditions de remise en état des lieux à l'expiration d'une exploitation. L'article 34, alinéa 2 du décret du 21 septembre 1977 (**Annexe 3**) impose à l'exploitant d'informer le préfet dans le mois de la cessation d'activité sous peine d'une amende contraventionnelle. Il doit *remettre le site dans un état tel qu'il n'y ait plus d'inconvénients ou de danger pour la santé ou l'environnement*. A défaut du respect de cette obligation générale le préfet pourra mettre en oeuvre les sanctions administratives prévues à l'article 23 de la loi du 19 juillet 1976 (**Annexe 4**). Dans le cas d'un rachat, l'industriel sera responsable du terrain acheté, et par conséquent de la dépollution nécessaire si elle n'a pas été faite. Le coût de rachat peut alors devenir exorbitant. Des litiges et des poursuites judiciaires apparaissent déjà entre des acheteurs de terrains qui nécessitaient une dépollution et qui n'en ont pas bénéficié pour cause (d'omissions volontaires ou non).

Dans le cas d'une cessation d'activité ou d'un rachat, la problématique de l'industriel est simple : *à partir de quand doit-il dépolluer et jusqu'où ?* Si le site est pollué, l'industriel doit savoir si cette pollution va évoluer ou non (migration des polluants), et par conséquent, quelle est l'urgence d'une mise en place d'une dépollution.

→ Répondre à des problèmes internes de pollution :

Les industriels, suivant leurs activités présentes ou passées, peuvent avoir la responsabilité de sites pollués. Ces sites sont connus, répertoriés et attendent d'être traités. Mais lorsque l'on est en présence de plusieurs sites, il devient alors nécessaire d'avoir un *outil d'évaluation* afin de **hiérarchiser** les sites à dépolluer. La modélisation de l'évolution de la pollution dans le temps et dans l'espace peut permettre de prévoir quels sont les sites qui vont demander un traitement rapide et ceux qui peuvent rester en attente (combien de temps ?) sans conséquences néfastes pour l'environnement.

VI.2. La demande générale

VI.2.1. Les principaux besoins

La demande générale des membres de RE.CO.R.D. dans ce domaine est relativement unanime. Les besoins s'orientent essentiellement vers des *outils simples à utiliser*, et donnant *la meilleure prévision possible avec une économie de données*. Un reproche souvent rencontré à propos des outils existants concerne leur lourdeur d'utilisation et la nécessité de posséder de nombreuses données théoriques et surtout expérimentales (sur les polluants : répartition du champ de concentrations, solubilités, coefficients de partage, constantes de Henry, pressions de vapeur..., et sur les sols : perméabilité, porosité, teneur en carbone organique, température,...) Or l'acquisition de ces données est très coûteuse, de plus elles sont difficilement représentatives de la réalité complexe de sols en général très hétérogènes.

Les principaux besoins et les principales questions relatives à ces outils sont résumés ci-dessous :

- * étude des interactions polluants/sols, élaboration d'une base de données,
- * problème de la connaissance des données physico-chimiques des polluants (solubilité, coefficient de partage...), d'où le besoin d'un carnet d'adresse de laboratoires pouvant effectuer ces analyses,
- * demande d'outils simples et utilisables dans des cas concrets, et/ou domaine d'application plus large,
- * connaissance du domaine d'application des différents modèles : 2D, 3D, zone saturée, zone non saturée, analytique, numérique...
- * quels sont les moyens nécessaires pour utiliser ces outils de simulation : un béotien équipé d'un micro ou alors une station de calcul avec une équipe de spécialistes ?
- * problème de la "gourmandise" des logiciels actuels en données (implication sur les coûts),
- * connaissance des paramètres nécessaires pour faire tourner le modèle avec une bonne précision, et implication des données d'entrée sur les résultats de la simulation,
- * compréhension des phénomènes,
- * nécessité d'outils solidement validés sur des cas réels,
- * nécessité de méthodologies d'acquisition de données sur le terrain qui soient pertinentes.

De manière générale, les demandes convergent vers la nécessité d'un outil **fiable** d'aide à la décision, permettant, avec une **économie de moyens** mis en oeuvre, de caractériser l'évolution future des polluants présents dans le sol.

VI.2.2. Comptes-rendus d'entretiens concernant la demande.

Avertissement :

Ne figurent dans ce paragraphe que les éléments jugés significatifs des entretiens qui ont été menés avec les représentants des membres de RE.CO.R.D. Ces comptes-rendus pourront être complétés si nécessaire à la demande des tuteurs qui suivent l'étude.

ELF

Contact : M. PEREZ

Une préoccupation très actuelle est l'étude de risques concernant les sites pollués. Les outils méthodologiques sont insuffisants, surtout en ce qui concerne la mobilité des polluants. Pour évaluer les conséquences de la pollution d'un sol, un maillon manquant reste la modélisation du terme de transfert des polluants de la source d'émission à la cible. Il faudrait dépasser une approche qui reste relativement arbitraire pour caractériser la **dangerosité** des polluants relativement à leur mobilité. En effet, la responsabilité des entreprises est engagée et il faut un outil d'évaluation agréé par les différents acteurs.

Une approche critique des modèles existants est nécessaire pour déterminer leur domaines d'application et la validité de leur pouvoir prédictif.

ELF s'est déjà engagé sur plusieurs programmes de recherche qui concernent les sols pollués, notamment avec l'IFP (projet EUREKA/RESCOPP).

GDF

Contact : M. VERCAMER

GDF est propriétaire de nombreux sites historiquement contaminés. Le problème réside dans l'hétérogénéité extrêmement importante des sites. L'un des problèmes essentiels va être de hiérarchiser la dépollution des sites. Au vu du nombre de sites, la dépollution va être répartie au cours du temps. Mais dans quel ordre?

Les polluants sont souvent des hydrocarbures lourds résultant des anciens procédés de production de gaz, mais les produits ont évolué au cours du temps et les sols ont connu des remaniements. La modélisation des mécanismes de transferts est très complexe et il serait bon d'avoir une approche d'**expert** pour avoir les éléments d'une bonne appréhension des principaux phénomènes.

La demande est ciblée sur deux points essentiels :

→ * nécessité de mettre au point un inventaire des principaux couples polluants/sols afin de pouvoir établir une méthodologie de travail pour un gain de temps et un meilleur traitement.

→ * besoin de faire des évaluations de sols plus pertinentes afin de mieux gérer les sols pollués, impliquant peut être une révision de la législation quand à la destination des sols dépollués (décharge, incinération). La modélisation sert dans ce cas à prédire la mobilisation ou non des polluants et d'en prédire l'évolution future.

EDF

Contact : Melle DUMONT

Il n'y a pas de recherche sur la migration de polluants dans les sols chez EDF (sauf pour le domaine particulier du stockage à long terme des déchets nucléaires pour lequel des études sont engagées par l'ANDRA et le CEA).

EDF souhaiterait connaître l'offre commerciale existante, tant du point de vue des logiciels que des laboratoires et bureaux d'études experts dans le domaine et capables d'offrir des prestations. Un domaine intéressant EDF est le cas des PCB.

GEMMES/TREDI

Contact : Mrs. HILERMANN, STRAUSS (Société GEMMES) et DURECU (Société TREDI)
Destruction des déchets industriels (TREDI)
Réhabilitation de sites (GEMMES)

Les techniques de réhabilitation de sites utilisées par la société GEMMES sont diverses :

- désorption par traitement thermique,
- traitement par lavage,
- traitement biologique (en cours de développement),
- traitement par CO₂ supercritique (en R&D).

La société GEMMES réalise des études prospectives sur les sites pollués. et possède des outils de modélisation de migration de polluants dans les sols tel que le logiciel SUTRA (1984, révisé en 1989) qu'elle utilise notamment pour la simulation de la migration des sels dans les mines de potasse. Le principal reproche envers ce logiciel concerne sa lourdeur d'utilisation. GEMMES recherche un logiciel plus simple d'utilisation, plus performant et avec un domaine d'application plus large.

RHONE-POULENC

Contact : M. LEMAREC

La problématique "sols pollués" est essentielle pour 2 raisons :

- - la réglementation nouvelle : directives européennes, Ministère de l'Environnement...
- - cessation et achat d'activités.

RP a déjà effectué récemment un état de l'art sur les logiciels disponibles.

La préoccupation actuelle de RP est de comprendre ce qu'il y a dans la "boîte noire" de la modélisation. Pour cela RP mène des actions de recherche avec d'autres laboratoires et les thèmes de travail sont les suivants:

- - comportement des polluants dans les sols,
- - modélisation de la migration des polluants : modèle d'écoulement et de transport de polluants,
- - analyse des risques avec une composante écotoxicologique.

L'intérêt est plutôt orienté vers les modèles numériques plutôt qu'analytiques. Les modèles stochastiques ne semblent encore pas assez efficaces et fiables.

A l'heure actuelle, RP utilise plusieurs logiciels existant sur le marché :

- DEDALE 3D (LHF - SOGREAH)
- MARTHE 3D (ANTEA - BRGM)
- MODFLOW (écoulement) et MT3D (transfert de masse)

SOCOTEC

Contact : M. MOREL

SOCOTEC Environnement est un cabinet d'études effectuant notamment le diagnostic de sites pollués (historique, caractérisation géologique et hydrogéologique, sondages).

Le diagnostic donne un état du site (à un moment donné) qui permet une "analyse des risques" puis d'arriver à une décision (dépollution ou non) mais le problème rencontré avec les logiciels de calculs est la gourmandise en données qui exigent de nombreuses investigations sur les sites, et impliquent donc une augmentation sensible du coût pour le bureau d'études qui utilise le logiciel ainsi que pour le client, sans garantir une prestation meilleure que celle d'un expert.

SOLVAY

Contact : M. MICHIELS

Les modèles déjà utilisés sont MARTHE et MODFLOW (hydrodynamique), AQUA 3D (hydrodynamique et également transport des polluants en zone saturée).

Les polluants rencontrés chez SOLVAY :

- organochlorés : dichlorométhane, di et trichloroéthylène ...,
- pesticides : hexachlorocyclohexane, lindane et dérivés, pentachlorophénol ...,
- hydrocarbures et solvants (cétones ...),
- métaux lourds (métalliques) : mercure, chrome...

La demande de SOLVAY peut se résumer en quelques points:

- tester AQUA 3D en zone saturée (à court terme),
- une étude bibliographique en ZNS des différentes configurations selon le type de polluants et le type de sols (déterminer la capacité de stockage de la ZNS),
- étude de quelques polluants en ZNS (les plus sensibles comme par exemple le mercure),
- améliorer les techniques d'échantillonnage.

VII. ANALYSE DE L'OFFRE

VII.1. Les modèles les plus utilisés et leur champ d'application

Beaucoup des logiciels de calcul que l'on trouve maintenant sur le marché proviennent du marché américain dont le fonctionnement permet de consulter gratuitement tous les modèles réalisés dans les instituts d'état comme les Universités ou l'EPA. Le monde des modélisateurs français s'est donc, dans beaucoup de cas, contenté d'améliorer les interfaces qui sont par contre, rudimentaires et rendent les logiciels extrêmement compliqués à l'utilisation à l'origine. Ces modèles sont tous basés sur l'approche déterministe et se différencient par leur domaine d'application et la complexité des phénomènes pris en compte.

VII.1.1. Quelques modèles

MARTHE

Modélisation d'Aquifère par un maillage Rectangulaire en régime Transitoire pour le calcul Hydrodynamique des Ecoulements

Conçu et réalisée au BRGM (D. Thiéry) pour la modélisation hydrodynamique et hydrodispersive des écoulements souterrains en milieu poreux, le logiciel MARTHE comprend :

- un module de calcul hydrodynamique et hydrodispersif (MARTHE proprement dit),
- quatre modules de préparation, gestion et représentation graphique des données et résultats de modélisation

MARTHE permet de résoudre les problèmes d'écoulements rencontrés dans différents domaines :

- gestion des aquifères,
- génie civil,
- environnement et plus particulièrement modélisation de la migration d'un polluant dans une nappe,
- stockage souterrain de déchets industriels,
- exploitation minière.

MARTHE a été étendu pour lui permettre, en plus des écoulements classiques en aquifères, de modéliser les écoulements complexes en zone non saturée et à densité variable.

Pour modéliser les écoulements en zone non saturée, on fait les hypothèses suivantes :

- écoulement isotherme,
- sol non gonflant (la porosité est constante au cours du temps),
- fluide incompressible,
- perméabilité à l'air infinie, d'où une pression de l'air égale à la pression atmosphérique.

Ce modèle a le gros avantage d'avoir été testé dans divers contextes naturels qui ne sont pas forcément ceux pour lesquels il a été conçu. On peut citer l'exemple de l'installation de MARTHE chez un industriel du Val de Saône qui a investi dans l'achat et le calage de ce logiciel sur des conditions hydrogéologiques précises, pour la prévision de pollution sur son site.

Il faut ajouter à MARTHE, qui simule les écoulements en milieu surtout sédimentaire, les autres modèles présentés par le BRGM et ANTEA :

- ROCKFLOW (simule des écoulements et transports en milieu à double porosité),
- CHANNET (simule les écoulements et transports dans les milieux fracturés et imperméables).

DEDALE 3D

Le Laboratoire d'Hydraulique de France (LHF), le Centre de Recherche pour l'Hydraulique et les Structures (CRIS) de l'Ente Nazionale per l'Energia (ENEL) et SOGREAH développent conjointement un système de modélisation tridimensionnel opérationnel pour les eaux souterraines : DEDALE 3D

DEDALE 3D est un outil de simulation des écoulements, du transport et de la dispersion dans les eaux souterraines. Parce qu'il modélise à la fois la zone saturée et la zone non saturée, qu'il tient compte de l'influence sur l'écoulement des variations de la densité de fluide, qu'il permet d'intégrer les hétérogénéités et anisotropies du sol et les singularités hydrauliques (puits tranchées, drains, surfaces de suintement...), le système DEDALE est adapté à toute une gamme de problèmes posés par la gestion ou la protection de la ressource en eau souterraine ou des problèmes de génie civil.

DEDALE est applicable aux études de pollution des eaux souterraines comme :

- la contamination provenant de décharge,
- fuite de stockage souterrain profond ou de surface,
- pollution agricole par pesticides et fertilisants,
- pollution ponctuelle et diffuse,
- périmètre de protection,
- pénétration de solution salée...etc

ainsi qu'à des problèmes de génie civil :

- excavation drainage,
- tunnels,
- construction de barrage...

Ce système de calcul, dont le développement a été initié en 1992, a déjà fait l'objet de nombreuses validation de terrain et continue à évoluer. DEDALE peut tourner sur des micro-ordinateurs ou sur station.

MIKE SHE

Assez souvent cité, ce logiciel est commercialisé par le LHF en collaboration avec le Danish Hydraulic Institute qui l'a créé. MIKE SHE est un système de modélisation des processus majeurs de la phase terrestre du cycle hydrologique. Il simule le mouvement de l'eau et le transfert de polluants dans les bassins hydrographiques en partant de la pluie (ou fonte des neiges) via l'interception-évapotranspiration, le ruissellement, l'écoulement dans les cours d'eau, l'infiltration à travers la zone non saturée, l'écoulement dans les nappes et les échanges nappes/rivières. MIKE SHE est construit autour d'un module principal MIKE SHE WM qui simule le mouvement de l'eau auquel peuvent s'ajouter des modules spécifiques complémentaires :

MIKE SHE AD (convection-dispersion de polluants dissous),

MIKE SHE GC (processus géochimiques),
MIKE SHE SE (érosion du sol),
MIKE SHE IR (irrigation).

Le module principal WM est lui même modulable suivant que l'on considère la fonte des neiges, les écoulements de surface, les écoulements en nappe ou les écoulements en zone non saturée.

MIKE SHE a été testé et validé sur un grand nombre de bassins hydrographiques dans des conditions hydrologiques et climatiques très diverses; il peut être installé sur des stations de travail UNIX.

MODFLOW

MODFLOW est un logiciel de simulation pour Windows (PMWIN) pour décrire et estimer les écoulements et le transport pour les eaux souterraines en 3D qui utilise les résolutions d'équations par différences finies. A ce module MODFLOW, on peut ajouter différents modules qui gèrent le transport de particules (PMPATH ou MODPATH), le transport de soluté (MT3D) et l'estimation de paramètres (PEST). MODFLOW peut simuler l'influence de puits, de rivières, de drains, l'impact de conditions limites, les phénomènes de recharge et d'évapotranspiration.

Le module MT3D qui permet de simuler le transport de solutés utilise des résolutions hybrides Eulerienne et Lagrangienne pour résoudre l'équation de convection-dispersion en 3D. MT3D peut être utilisé pour modéliser le changement de concentration d'une espèce miscible de polluant dans les eaux souterraines en considérant les phénomènes de convection, dispersion et des réactions chimiques. Les réactions chimiques incluses dans ce code sont limitées aux équilibres de sorption, aux réactions irréversibles de dégradation du premier ordre ou la biodégradation.

SIMUSCOPP

Le logiciel SIMUSCOPP est développé dans le cadre du projet EUREKA RESCOPP par l'Institut Français du Pétrole (développement du simulateur réalisé par Beicip-Franlab, validation), BURGEAP (spéciations, validation) et des sociétés italiennes du Groupe ENI (développement des interfaces).

Ce modèle numérique a pour but la simulation :

→ de la migration d'un polluant hydrocarbure ou solvant chloré de la surface d'un sol au travers de la zone insaturée et saturée, sa dissolution puis son transport dans la nappe (aide à l'analyse des risques),

→ d'un certain nombre de procédés de rémediation : pompage d'huile mobile, venting (froid ou chaud), biodégradation, injection de solutions tensioactives, injection de vapeur.

Ce logiciel peut travailler en 1D, 2D ou 3D en géométrie cartésienne ou radiale, sous maillages locaux, en milieu poreux homogène ou hétérogène (porosités et conductivités hydrauliques). Les phénomènes physiques pris en compte sont les suivants :

- 1, 2 ou trois phases présentes dans le système eau-phase organique (huile-air),
- écoulements mono, di ou tri phasiques (loi de Darcy généralisée),
- transfert de constituants entre les phases : dissolution dans l'eau, évaporation en phase gazeuse,
- transport par convection et diffusion/dispersion hydrodynamique,
- facteur retard : rétention de polluants,
- calcul des propriétés thermodynamique et d'équilibre des phases à l'aide d'équations d'état ou de valeurs tabulées (base de données),

- biodégradation des produits dissous et en phase résiduelle (en cours de développement).

Les validations qui ont été effectuées se sont faites en laboratoires sur colonne, à l'échelle d'un site pilote (SCERES) ainsi qu'*in situ* sur des problèmes de pompage d'huile mobile, d'opérations de venting ou de transferts d'hydrocarbures dans le cadre d'accident.

Le code écrit en FORTRAN 77 fonctionne sur un grand nombre d'ordinateurs : PC, Stations de travail UNIX, ordinateurs centraux vectoriels ou non (CRAY, VAX, CONVEX...).

LEACHMP

- **LEACHM** de New York State College of Agriculture and Life Sciences Cornell University.

Le LEACHM [Wagenet R.J. and Huston J.L., 1989] est un modèle d'écoulement unidimensionnel. Il permet d'estimer l'impact due à la mobilisation et la migration d'un polluant organique adsorbé, localisé dans la zone non saturée au dessus de la nappe. LEACHM calcule les équilibres de distribution du polluant entre la phase liquide, gazeuse et adsorbée sur la matrice solide.

Il utilise l'équation de Richards pour la description des écoulements. La résolution des équations de l'hydrodynamique et du transport est effectuée suivant la méthode des différences finies. Il prend en compte l'extraction racinaire de l'eau et des produits phytosanitaires par les plantes, ainsi que la volatilisation. Il est possible de simuler l'évolution simultanée de plusieurs produits et de leur métabolites. Le pas de temps de calcul est variable, déterminé en fonction des données météorologiques disponibles. Mais ce modèle ne prend pas en compte les écoulements dérivant des différences de densité.

Il est composé des modules :

- LEACHP pour simuler le mouvement des pesticides et leur dégradation,
- LEACHC pour décrire le mouvement des ions inorganiques (Ca, Mg, Na, K, SO₄, Cl, CO₃, HCO₃),
- LEACHB pour décrire le développement microbien,
- LEACHW pour décrire le mouvement de l'eau seule.

Ces différents modèles s'appliquent aussi bien aux essais de laboratoire qu'aux essais *in situ*. L'absorption de l'eau et du soluté par les racines des plantes est décrite par les différents modèles. Il est possible d'obtenir le profil de températures à l'aide de LEACHP. On peut alors modifier point par point les coefficients qui dépendent de la température.

Ce modèle a été développé pour la migration des pesticides avec des isothermes d'adsorption à un ou deux sites.

SUTRA

SUTRA (Saturated-Unsaturated Transport) est un logiciel qui simule le mouvement de fluide et le transport d'énergie ou de substance dissoute dans le sol. C'est un modèle bi-dimensionnel utilisant à la fois la méthode des éléments finis et des différences finies pour résoudre les équations qui gouvernent les processus simulés, soit :

- la densité de flux dépendante de l'écoulement d'eau dans la zone saturée et non saturée,

- le transport de solutés en eau souterraine où le soluté est soumis au phénomène d'adsorption sur la matrice poreuse et des réactions de production et de dégradation,
- transport de chaleur dans l'eau souterraine et dans la matrice solide de la nappe.

Les écoulements souterrains sont simulés à travers une résolution numérique des équations de bilans de masse. Le système hydraulique souterrain peut être saturé, partiellement insaturé ou complètement insaturé et la densité de fluide peut être constante ou varier avec le temps comme une fonction de la concentration du soluté ou de la température du fluide.

SUTRA peut être employé en analyse d'écoulement hydraulique uni ou bidimensionnel d'aquifère ou pour la simulation du transport naturel, ou induit par l'homme, de solutés, impliquant les processus de sorption, de production et de dégradation. L'option modélisant les écoulements avec les différences de densités peut être utilisée dans le cas d'intrusion d'eau salée dans un aquifère.

Ce code a été validé sur le terrain de nombreuses fois par la Société Hydroexpert entre autre et son efficacité est réelle. Son point faible reste la convivialité : SUTRA est lourd d'utilisation et assez complexe. Il fonctionne sur PC (Pentium nécessaire) et sur station UNIX.

Une description détaillée de ces principaux modèles se trouve dans l'annexe 5.

VII.2. Autres modèles existants sur le marché

Les modèles cités précédemment sont ceux qui ont été cités le plus souvent dans le discours des industriels, bureaux d'études et laboratoires contactés. Vauclin en 1993 avait déjà précédemment établi une liste non exhaustive des modèles disponibles, on peut toutefois amener quelques compléments (fig. 8, 9)

Nom du modèle	référence de l'auteur	utilisation
SLIM	Addiscott, 1982	mouvement de nitrates
SWAM	Alonso et De coursey, 1985	hydrologie générale des sédiments et des pesticides
WATCROS	Aslyng et Hansen, 1982	production de récoltes
ANIMO	Berghuijs et al., 1985	modèle azote
PULSE	Bergstrom et al., 1987	transfert de nitrates
PRZM	Carsel et al., 1984	transfert de solutés
TRANS CSM	Chardon, 1984	mobilité du cadmium
TRANS	Agneessens, 1985	mouvement de solutés
PESTAN	De willigen et al., 1982	transport de pesticides
MORELN	Ferrari et Cuperus, 1973	transport de nitrates
NITCROS	Geng et al., 1987	équilibre de l'azote
RZWQM	Hansen et Aslyng, 1984	transport de solutés
WHNSIM		plantes
SOILN	Hurwe et Van der ploeg, 1987	dynamique de l'azote
BAM	Johnsson et al., 1987	transport de pesticides
CREAMS	Jury et al., 1983	qualité de l'eau
RENLEM	Knisel, 1980	transport de solutés
GLEAMS	Kragt et De vries, 1987	qualité de l'eau
CALF	Leonard et al., 1986	mouvement et dégradation des pesticides
CMLS	Nicholls et al., 1982	mouvements chimiques
SIMUL	Richter et al., 1988	progression des nitrates
COFARM	Rieu, 1984	précipitation et transport de solutés
NTRM	Schaffer et al., 1984	niveau d'azote
OPUS	Schaffer et Larson, 1987	idem
MOUSE	Ferreira et Smith, 1990	transport de phosphate
ONZAT	Van drecht, 1985	transport non linéaire de solutés
LEACHMP	Winten et al., 1988	réponse pour l'eau salée
POLUT2D	Kuppusamy et al., 1993	transport de solutés en zone non saturée

Figure 8 : Liste non exhaustive de modèles disponibles (Vauclin, 1993)

Logiciels	ZS	ZNS	D	Physico-chimie	Bio-logie	Multi-phasique	Thermique	Polluants	Couplage	Contient	divers
AQUA	+		2 et 3 D				+				
SUTRA	+	+	2 D (3)				+				
BIOF&T-3-D	+	+	2 et 3 D		+						
MOFAT	+	+	2D			+					
MARS	+		2 et 3D	+	+	+					Remediation
PORFLOW											
PMWIN	+		3D	+	+			+		MODFLOW PMPATH MODPATH MT3D PEST	
VS2DT	+		2D	+				solutés			
VLEACH		+	1D			+					
VAM2D	+		2D								
RISKPRO'S SESOIL		+	1D	+	+						
RISKPRO's AT123D	+		3D				+				
PRZM2		+	1D					pesticides		PRZM VADOFT	
MT3D	+		3D	+							
MOC	+		2D					solutés			
KYSPILL	+	+									type SEAS
HSSM	+		2D					Hydrocarbures			
BIOPLUME II	+		2D		+			Hydrocarbures			
BIO1D			1D	+	+						
GMS			3D						MOD- FLOW MT3D		Ecoul. nappe Géo-stat.
FLOWTRANS	+		2D								
FEMSEEP	+		2D								
CHEMFLOW		+	1D								
PEST									MOD- FLOW MT3D		Paramètres
MINTEQA2				+							
FLUIDYN- POLLUSOL	+	+	2D	+		+		+			
CTRAN/W	+	+	2D	+					SEEP		

Figure 9 : Liste complémentaire de modèles

VII.3. Les programmes en cours, groupes de travail, organismes de recherche et bureaux d'études

VII.3.1. Quelques programmes en cours

Projet Eureka ISMAP (Integrated System for the Management of Agricultural Pollutions).

Ce projet a pour souci de concilier *l'emploi des produits phytosanitaires de protection des cultures et la qualité de la ressource en eau*. Cet objectif peut être atteint grâce à la réalisation d'un système d'information et d'aide à la décision pour la gestion des pollutions diffuses d'origine agricole. Dans ce système, la composante modélisation est appelée à jouer un rôle important.

Dans le cadre de ce programme, une thèse, en collaboration avec le Laboratoire Hydraulique de France (LHF-Grenoble), et le Laboratoire d'étude des Transferts en Hydrologie et Environnement (LTHE-Grenoble), a déjà été réalisée par Vincent Guinot, sur «La modélisation mécaniste du devenir des produits phytosanitaires dans l'environnement souterrain. Application à la protection des captages en aquifère». Cette thèse a fait l'objet d'une validation du code MIKE SHE sur un site-test du projet ISMAP (Bassin de Grand Morin, région parisienne) au cours de laquelle une réflexion a été menée sur la capacité de l'outil numérique à modéliser les processus qui se produisent dans le sol. Le but de la thèse a été de mettre en place une méthodologie qui permettra de déterminer les quantités maximales de produits phytosanitaires que l'on peut tolérer à l'épandage, sans risquer d'entraîner, au niveau des captages d'eau potable, un dépassement des normes de potabilité.

Projet Eureka RESCOPP

Le projet Rescopp est un projet européen sur la restauration des sols pollués, qui a débuté en 1993 et qui s'achève fin 1996. Les objectifs de ce programme sont de répondre à la demande en analyse de risques et en prédiction.

Dans le cadre de ce projet, l'IFP, BURGEAP et des sociétés italiennes du groupe ENI ont développé le logiciel SIMUSCOPP. Le logiciel s'attache à la simulation :

→ de la migration d'un polluant hydrocarbure ou solvant chloré de la surface d'un sol au travers de la zone insaturée et saturée, sa dissolution puis son transport dans la nappe (aide à l'analyse des risques),

→ d'un certain nombre de procédés de rémédiation : pompage d'huile mobile, venting (froid ou chaud), biodégradation, injection de solutions tensioactives, injection de vapeur.

Le programme PNETOX

L'écotoxicologie est un élément incontournable et indispensable dans l'évaluation des risques liés à la présence de contaminants dans l'environnement. Les besoins en écotoxicologie, de la part des industriels, des pouvoirs publics et des directions opérationnelles du ministère ont donc conduit à la mise en place en 1995 d'un plan d'action et d'un programme sur l'écotoxicologie, mené par le club CRIN-environnement avec l'assistance de l'ADEME.

Le programme PNETOX s'appuiera sur les programmes en cours dans les autres organismes (SRAE, ADEME, INERIS, IFREMER, INRA, CNRS, CEA, CEMAGREF). Il jouera un rôle de coordination et d'animation par rapport à ces programmes et de structuration de

l'écotoxicologie. Il développera et soutiendra les recherches complémentaires à celles déjà entreprises en même temps que de nouvelles recherches pluridisciplinaires prenant en compte l'évaluation du risque et celles pouvant aboutir à une valorisation.

Les recherches portent sur :

→ la précision de la capacité d'acceptation des milieux à recevoir des charges toxiques (contamination par l'eau, l'air ou le sol), tout en maintenant une qualité satisfaisante de l'environnement,

→ l'évaluation correcte du risque lié à la mise sur le marché de substances ou à des pollutions installées ou susceptibles de se produire. Les tests existants sont à améliorer et de nouveaux sont à mettre en place. Des modèles d'exposition sont à développer.

Les thèmes de recherche retenus concernent l'effet biologique des polluants ainsi que la notion de biodisponibilité d'un contaminant.

Contrat de Plan Etat-Région

Dans le cadre du XI^{ème} Contrat de Plan Etat-Région, le Programme Fédérateur Environnement a financé des crédits au Conseil Régional Rhône-Alpes ainsi que des organismes d'Etat. Un tableau récapitulatif des moyens attribués à l'ensemble des projets retenus est présenté en annexe 6.

Caracas

Depuis 1994, il a été lancé au sein de l'Europe plusieurs programmes concernant l'environnement, comme le EC R&D Programme Environnement and Climate qui s'achèvera en 1998. Ce programme a pour sujet de concertation le recyclage, le traitement des déchets et le traitement de site contaminé. A cette occasion, différents projets ont démarré comme le projet CARACAS (Concerted Action on Risk Assessment for Contaminated land qui a débuté le 1^{er} février 1996 et d'une durée de trente mois.

Les objectifs principaux sont :

→ d'identifier, de compiler, d'évaluer et de réajuster les différents projets et approche scientifique pour l'évaluation des risques, actuellement développés dans les états membres de l'Union européenne,

→ de proposer des priorités scientifiques pour les futurs projets et programmes de la commission européenne et des états membres de l'Europe,

→ d'élaborer des directives et des recommandations pour l'évaluation du risque sur les sites contaminés.

Cette action concertée est menée par 14 participants des états membres de l'union européenne: Belgique, Autriche, Danemark, Finlande, France, Allemagne, Grèce, Irlande, Italie, Pays-Bas, Portugal, Espagne, Suède et Grande-Bretagne. Des pays tel que la Norvège, la Suisse, les USA et l'Australie apportent leur contribution par leur expérience et leur connaissance sur ce projet.

Les thèmes de travail sont les suivants :

→ toxicologie humaine,

→ évaluation du risque écologique,

→ devenir et transport des contaminants,

→ analyse et étude de site,

→ modélisation,

→ méthode pour l'évaluation des risques,

→ bilan sur les normes : inventaire et directives.

Le projet CARACAS progresse en collaboration avec d'autres initiatives internationales dans le domaine des sols contaminés, comme le projet NICOLE (Network industrially Contaminated Land in Europe), ISO/CEN-Working Group, EEA-Topic Center Soil, Ad Hoc-working Group sur les sols contaminés.

Plus particulièrement, sur le thème du devenir et du transport des contaminants, le groupe doit passer en revue la connaissance actuelle sur les processus biologiques, chimiques, physiques qui interviennent dans le devenir et le transport des contaminants organiques et inorganiques pour les sols et les eaux. L'accent est mis sur le fait que ce sujet devrait être, à l'avenir, intégré à la pratique d'évaluation de risques. Ce thème est abordé par l'analyse et la discussion autour des différents processus tel que la sorption/désorption, la biodégradation, la dispersion, la diffusion...

VII.3.2. Groupe de réflexion

Le club CRIN, déjà cité à l'occasion du programme PNETOX, regroupe des laboratoires et centres de recherche, l'administration et des entreprises. La collaboration de tous ces membres a débouché sur un travail en réseaux, où la fonction du club a pris un caractère volontairement complémentaire des structures fédératives qui existent dans chacun de ces milieux. Le club CRIN désire accentuer ce fonctionnement en réseaux organisés en développant une coopération avec certaines associations (Entreprises pour l'Environnement, Chimie et Ecologie, RE.CO.R.D....) et constituer des relais régionaux vers les collectivités territoriales, acteurs d'importance croissante. Un de leur thème de travail s'articule autour de la problématique des sols en considérant différentes approches :

- la bioaccessibilité,
- le devenir des xénobiotiques,
- les métaux.

Sur l'approche «métaux», le club CRIN s'est donné un programme de travail comportant quatre volets, à savoir, les teneurs du sol en éléments traces, les friches et sites pollués, la pollution diffuse des sol et les transferts de polluants entre le sol et les autres milieux.

VII.3.3. Laboratoires de recherches et écoles

Le Laboratoire d'études des Transferts en Hydrologie et Environnement

Contact : Mrs GAUDET et VAUCLIN

Suite à l'évolution de l'Institut de Mécanique de Grenoble vers 4 laboratoires différents, l'ex-groupe Hydrologie est devenu en Janvier 1992 le LTHE, unité biappartenante à l'Institut National Polytechnique de Grenoble et l'Université Joseph Fourier (Grenoble).

L'orientation générale des activités de recherche est focalisée sur des études de transferts polyphasiques couplés de masse et de chaleur dans les matériaux poreux et des étude de la phase continentale du cycle des eaux en terme de quantité et de qualité.

Les recherches sont réparties entre 4 équipes travaillant en étroite collaboration :

- l'équipe Transferts en Matériaux Poreux (TMP) (Resp. J.P. Gaudet),
- l'équipe Hydrologie de la Zone Non Saturés (HLNS) (Resp. G. Vachaud),
- l'équipe Hydrométéorologie (HMET) (Resp. J.D. Creutin),
- l'équipe hydrologie de surface (HSURF) (Resp. Ch. Obléd).

Les perspectives de recherches vont s'orienter, entre autre, vers la modélisation des transferts couplés d'eau, d'énergie et de solutés avec la prise en compte des équilibres géochimiques dans le milieu poreux (sols, roches, matériaux de construction). Cette optique inclue plus précisément :

- le traitement des non linéarités dans les processus de transfert/transport,
- le développement et l'introduction de procédures d'estimation des paramètres par méthode inverse,
- les techniques de changement d'échelles et de macro (méga) scopisation des processus en milieu hétérogène.

Pour les équipes TMP et HLNS, les buts à atteindre en ce qui concerne la modélisation des transferts de polluants dans les sols seraient d'identifier les couples Polluants/Sols les plus couramment rencontrés afin d'établir une méthodologie de travail efficace.

La caractérisation de la nature de la variation spatiale des paramètres du sol, des fluides et des solutés constitue un thème de travail important à développer.

Rq : un groupe de travail s'est constitué en collaboration avec P. Verbelin (ENSEPI) dans le cadre d'un programme Environnement TTEC sur l'écotoxicologie.

Laboratoire d'Analyse Environnementale des Procédés et Systèmes Industriels
INSA-lyon

Contact : Mrs NAVARRO et MOSZKOWICZ

Le LAEPSI a pour thèmes de recherche 6 axes principaux :

- analyse des cycles de vie (ACV),
- organisation du système déchets et analyse des procédés,
- inertage des déchets ultimes,
- décontamination des sites pollués,
- traitements des effluents,
- génie des procédés appliqués à l'environnement.

Quelques thèse en cours :

* Etude des transferts de solutés dans les matériaux poreux soumis à lixiviation (Florence Sanchez).

* Etude de la réversibilité de l'adsorption des polluants organiques aromatiques dans les sols pollués (Rémy Bayard).

* Etude du transfert de polluants volatils en phase gazeuse pour le diagnostic rapide de sols pollués par des essence ou gasoil (Pascale Le Goff).

Laboratoire des Sciences de l'Environnement

Contact : M. T. Winiarski, Melles Y. Bouvet et C. Delolme

L'équipe interdisciplinaire de recherche du Laboratoire des Sciences de l'Environnement (LSE) travaille sur l'analyse et la modélisation de l'impact des activités humaines sur l'environnement naturel.

L'impact des centres d'enfouissement techniques sur la qualité des eaux souterraines et l'évaluation des risques pour l'environnement (pollution des eaux et des sols, santé humaine) liés à la qualité des lixivats produits par les décharges constituent le premier thème. *Les effets des aménagements* (barrages) sur la capacité de prise en charge des effluents industriels et urbains par les fleuves représentent le second champ de recherche. Le troisième thème

développe une *méthodologie de diagnostic des sols contaminés (friches industrielles) et de la qualité des eaux*.

Les outils développés pour traiter ces thèmes sont: un laboratoire de chimie analytique, des modèles physiques et biologiques, des stations d'acquisition de données.

La problématique des sites contaminés s'oriente plus précisément vers :

- l'étude de la microflore du sol (C Delolme),
- l'étude de la matrice solide du sol (T. Winiarski),
- l'amélioration, la validation et l'utilisation de modèles (C Delolme et T. Winiarski)

Cette double approche permet de tester les modèles numériques sur modèle physique.

Exemples de modèles physiques utilisés :

- . fond de décharge-zone non saturée-aquifère à l'échelle 1:100,
- . bassin d'infiltration d'eaux pluviales-zone non saturée à l'échelle 1.

Exemples de modèles numériques utilisés :

- POLLUT2D dans le cas d'un fond de décharge,
- LEACH dans le cas d'un fond de décharge et d'un bassin d'infiltration.

Quelques thèse en cours :

- * Contribution des microorganismes dans le transfert des métaux lourds dans le sol (J. Crosnier).
- * Modélisation du devenir des métaux lourds dans la zone non -saturée du sol. Prise en compte du compartiment microbien (C. Hébrard).
- * Relation entre les fluctuations de l'activité microbienne et l'état de perturbation d'un sol (B. Brohon).

Laboratoire des sciences du génie chimique

Contact : M. SARDIN

M. SARDIN utilise le code IMPACT (modèle de réacteurs en cascade).

M. SARDIN a beaucoup travaillé sur les pollutions minérales (métaux lourds) et s'intéresse depuis 2-3 ans aux HAP et COV. Son laboratoire a surtout travaillé jusqu'à maintenant en zone saturée. Pour la zone insaturée, M. SARDIN soulève le problème de l'aspect triphasique et le problème de la modélisation hydrodynamique dans cette zone.

Laboratoire de Géologie Appliquée-Université Paris VI

Contact : M. De MARSILY

Le Laboratoire de Géologie Appliquée organise ses recherches autour des thèmes suivants :

- fonctionnement des systèmes fluviaux anthropisés,
- écoulements souterrains et interactions fluides-solides,
- métallogénie,
- géophysique non linéaire et analyse des précipitations.

L'Institut de Mécanique des Fluides

Contact : M. ACKERER

L'IMF constitue l'URA CNRS 854, à l'Université Louis Pasteur de Strasbourg. Les pôles de travail s'articulent autour de 4 axes en modélisation à l'IMF :

- transport et écoulement en milieux poreux saturés,
- méthode inverse,

- modèle de transport des substances réactives (phénomènes de spéciation avec les métaux lourds),
- aspect multiphasique

Ils s'intéressent par exemple à la dissolution des différents constituants d'un gasoil dans l'eau. Les méthodes classiques des éléments finis n'étant pas suffisantes (surtout en milieu hétérogène), l'IMF développe une méthode d'éléments finis mixtes hybrides et discontinus.

Intérêt : temps de calcul plus court.

Contrainte : méthode explicite (problème des pas de temps).

Développé en 2D et 3D, en régime permanent ou transitoire.

Rq : L'IMF possède Swanflow (partie écoulement d'hydrocarbure).

Afin de lutter contre toute forme de propagation souterraine d'un contaminant, il est important de connaître les mécanismes relatifs au cheminement d'un polluant. C'est dans ce but que le Laboratoire d'Hydrodynamique des Milieux Poreux (LHMP) a mis en place le modèle MARCEAUS (Modèle d'Analyse et de Recherche sur la Contamination des Eaux Souterraines). Ce dispositif permet de reconstituer, dans une cuve de laboratoire, une portion de nappe phréatique artificielle. Pour représenter au mieux la réalité physique, la cuve expérimentale est constituée d'un milieu hétérogène. La cuve expérimentale est remplie d'un milieu poreux qui occupe un volume de 500x100x95 cm³.

L'Institut Franco-Allemand de Recherche sur l'Environnement

Contact : M. RAZAKARISOA

L'objectif de l'IFARE est la protection des aquifères contre la pollution par hydrocarbures et dérivés.

Cette protection passe par :

- la compréhension des mécanismes,
- les méthodes de décontamination,
- les modèles mathématiques.

L'IFARE travaille sur un grand dispositif expérimental baptisé SCERES (Site Contrôlé Expérimental de Recherche pour la Réhabilitation des Eaux et des Sols) dans le but d'améliorer la maîtrise des phénomènes de contamination d'aquifère alluvial par infiltration d'hydrocarbures. L'outil SCERES, constitué par un bassin étanche de 25x12x3m, implanté sur le campus de Strasbourg-Cronembourg, permet de faire progresser les connaissances sur la compréhension des mécanismes de migration du polluant et la détermination quantitative du domaine contaminé. Le projet SCERES associe des équipes universitaires (CNRS, universités françaises et allemandes), et des partenaires du secteur industriel et de la technologie avec Anjou Recherche de la Générale des Eaux, le Burgéap et l'IFP.

Laboratoire de Géomécanique - ENS de Géologie de Nancy

Contact : M. BUES

Le Laboratoire de Géomécanique travaille sur la migration de polluants en zone saturée et s'attache plus précisément à décrire:

- le transfert de micropolluants réactionnels, aspect bio-physico-chimique (code calcul bio-physico-chimique),
- la biodégradation des pesticides dans les sols (phényl acétate de mercure : accident de Sandoz en 1986) : transport et interaction avec le sol,
- le transport de produits de différentes densités (viscosité élevée) (solutions salines par exemples),

- la modélisation en 1D pour interpréter les essais sur colonnes (convection, dispersion, cinétique de dégradation),
- la modélisation en 3D : viscosité et densité différentes.

L'Ecole des mines de Paris

Contact : M. LEDOUX

Le Centre d'Informatique Géologique consacre son activité à l'étude du cycle de l'eau et plus particulièrement des transferts de fluides et de matières dans le sous-sol et à l'interface sol et sous-sol. L'activité de recherche du centre est orientée autour de trois thèmes principaux couvrant une large gamme de problèmes environnementaux liés à la partie continentale du cycle de l'eau :

- modélisation des systèmes hydrogéologiques et hydrologiques,
- modélisation des transferts de matière et de chaleur et des interactions fluide-roche dans le milieu souterrain,
- étude des précipitations et des écosystèmes lacustres et fluviaux.

Modélisation des systèmes hydrologiques et hydrogéologiques

Ce thème de recherche traditionnel du laboratoire a donné lieu à des développements théoriques portant essentiellement sur :

- la modélisation hydro-thermo- mécanique des bassins sédimentaires,
- la modélisation tridimensionnelle de la structure hydrogéologique du Bassin de Paris, entreprise pour le compte du CEA,
- le changement d'échelle sur les perméabilités et les paramètres de transport dans les réservoirs très hétérogènes (application directe pour les réservoirs pétroliers et sites de stockage profond de déchets radioactifs),
- la modélisation du transport en milieu fissuré (équipement hydroélectrique souterrain pour EDF, stockage de déchets nucléaires).

Modélisation du transfert de matière et de chaleur et des interactions fluides-roches.

Cette activité s'articule autour des problèmes de géochimie continentale et plus particulièrement des transferts de matières minérales sous l'effet de circulation de fluides. ces travaux trouvent leur application dans le domaine d'altération et accumulations superficielles, dans la gestion de l'environnement des sites miniers et industriels, dans la cimentation des réservoirs pétroliers et dans les expertises géochimiques sur des sites de friches industrielles. Ce thème vise à l'identification, à la mise en oeuvre et à la validation de nouveaux concepts dans les modèles. Elle s'appuie sur une expérimentation en laboratoire ou *in-situ* menée en collaboration avec des organismes de recherches extérieurs.

Les perspectives

Les problèmes environnementaux se rapportant au sous-sol, tels que les pollutions industrielles ou l'élimination des déchets, constituent actuellement un thème de recherche porteur. De plus, la problématique scientifique du Centre d'Informatique Géologique, alliant les moyens de caractérisation des milieux au potentiel de quantification grâce à la modélisation, vont lui permettre de développer et promouvoir des méthodes et de réaliser des expertises.

L'école des mines de Saint Etienne

Contact : Mrs BOURGOIS et VAILLANT

Le département "Ingénierie de l'Environnement" a été créé à l'Ecole des Mines de Saint-Etienne en 1991. Les principaux domaines de recherche abordés, liés à l'environnement industriel, sont:

- la maîtrise spatiale des risques (pollutions, inondations),
- la modélisation des phénomènes de propagation de pollution (ressources en eau)
- le diagnostic et l'aide à la décision pour la réhabilitation des sols pollués,
- l'analyse des risques techniques et organisationnels en conception et maintenance des réseaux,
- la prévention du BLEVE en cas d'incendie,
- la conception d'outils d'aide à la décision pour le traitement de déchets industriels,
- l'analyse des dysfonctionnements d'installations automatisées et l'aide à la conduite à partir de systèmes
- experts temps réel.

Les thèses en cours dans le laboratoire Pollution-Eau-Sol sont :

- Evaluation du risque potentiel sur l'environnement lors de la réhabilitation d'un site contaminé (V.L. Duong).
- Modélisation des propagations de pollutions biphasiques en milieu hétérogène (zone saturée ou non) -application au cas de l'accident ferroviaire de Chavanay (Loire) (W. Anker).

L'école des mines de St Etienne contribue au Centre National d'Etudes et de Recherche sur les Sites et Sols Pollués de Douai *via* un groupement entre EMSE, EMP et ARMINES.

L'Ecole des mines de Douai

Contact : M. GUILLERMO et Melle SOUTO

L'école des mines de Douai a mis en place un **Centre National d'Etudes et de Recherches sur les Sites et Sols Pollués**.

Actuellement le département Chimie et Environnement ne travaille pas sur la modélisation de migration de polluants dans les sols. Toutefois, il y a une thèse en cours (depuis environ 1 an et demi) sur "Etude d'un site pollué par les métaux - Evaluation du degré de contamination des sols et prévision de son évolution" (c'est surtout l'aspect interaction sol-polluants qui est traité).

Centre National d'Etudes et de Recherches sur les Sites et Sols Pollués

La première pierre du Centre a été posée début avril par Madame le Ministre de l'Environnement.

Les statuts de ce centre prévoient deux types de partenaires :

noyau dur : partenaires mettant à disposition du centre 2 cadres à temps plein + 1 bourse de thèse + 125 KF/an. Le noyau dur décide des thèmes de recherche à effectuer dans le centre.

membres associés : partenaire mettant à disposition du centre 250 KF/an. Les membres associés ne sembleraient avoir qu'une voix consultative sur les thèmes de recherche à effectuer dans le centre.

Partenaires actuels : ARMINES-EMP-EMSE, BRGM, CDF, CEA, CGE, EM Douai, GDF, INERIS, Institut Pasteur, ISA, Rhône-Poulenc Chimie, Usinor, Université du Nord.

Les axes généraux des recherches qui seront réalisés dans ce centre sont actuellement définis comme ci-dessous :

- caractérisation des sites pollués :
 - . spéciation,
 - . devenir des polluants,
 - . mobilité/transport,
 - . bilan pollution/industrie,
 - . échantillonnage,
- analyse de risques,
- faisabilité de procédés.

VII.3.4. Organismes de recherche, grands groupes et sociétés

Ce sont en général des grosses structures qui ont une connaissance poussée en la matière. Du fait de leur diversification, on y trouve souvent un pôle de recherche, en relation avec leur production, qui peut mener des études fort intéressantes et qui peut être particulièrement avancé dans un domaine, suivant leur ancienneté. C'est le cas de l'IFP et de Rhône-Poulenc.

L'IFP

Contact : M. Le THIEZ

Ce grand groupe possède une activité de recherche très développée et collabore avec de nombreux laboratoires (cf. collaboration avec l'IMF, et l'IFARE de Strasbourg). L'IFP développe actuellement un logiciel de migration de polluants organiques dans les sols et sous-sols (ZS et ZNS, di ou triphasique, migration et transfert du milieu poreux vers la nappe) dans le cadre du programme européen RESCOPP : SIMUSCOPP.

Un des pôles d'activité de l'IFP est orienté vers la modélisation de procédés de remédiation : pompage, venting, biodégradation (ZNS et ZS), injection de solution de tensioactif.

Pour l'avenir, l'IFP compte axer ces efforts sur :

- l'introduction de stratégie d'échantillonnage,
- la géostatistique pour la prise en compte de l'hétérogénéité des milieux poreux,
- les procédures de calage automatique,
- l'amélioration de la connaissance de la biodégradation et des transferts physique.

ANTEA-BRGM

Contact : M. ROYER (ANTEA) et M. THIERY (BRGM)

De l'étroite coopération de ces deux structures, il en découle une volonté d'être à l'écoute des industriels en particulier en tant que maître d'oeuvre par l'intermédiaire d'ANTEA tout en progressant en recherche appliquée et fondamentale *via* le BRGM et ses collaborations avec de multiples laboratoires de géologie, géophysique, géochimie...en France et à l'étranger.

ANTEA travaille avec les industriels sur le stockage de déchets et également sur le diagnostic des sols pollués. Ils sont maître d'oeuvre pour les traitements de type land farming, traitement de lixiviat (incinération ou mise en décharge). Le BRGM et ANTEA développe et commercialise deux logiciels :

→ MARTHE : Modélisation d'Aquifère par un maillage Rectangulaire en régime Transitoire pour le calcul Hydrodynamique des Ecoulements : simulation hydrodynamique en nappe en milieu sédimentaire, milieu poreux continu, différences finies.

→ ROCKFLOW : simulation écoulement en zone de socle ou milieu fracturé, utilisé pour site de stockage sous granite, éléments finis, nécessite beaucoup de données, milieu à double porosité, approche stochastique de la fracturation.

Un autre logiciel est également développé : le logiciel CHANNET pour les milieux fracturés (matrice imperméable).

Il faut souligner la parution d'un **Guide Méthodologique**, demandé au BRGM par le Ministère de l'Environnement : «Gestion des sites (potentiellement pollués)»

Contenu du guide :

Cet outil a été mis en place dans le souci d'une approche nationale cohérente et homogène du problème des sites et sols pollués. L'élaboration de cet ouvrage est menée par le Ministère de l'Environnement avec des organismes experts, le BRGM et l'INERIS et dans le cadre de groupes de travail nationaux. Il se compose de plusieurs petits guides méthodologiques ainsi qu'un grand nombre d'annexes dans lesquelles sont répertoriées toutes les informations législatives et techniques relatives au problème.

Un premier guide pose les directives à suivre pour un prédiagnostic sur les sites en activités et les sites abandonnés. Il est suivi par un guide sur l'Etude des sols, un autre sur l'Evaluation simplifiée des risques et un dernier sur l'Evaluation simplifiée des risques et classement des sites. Dans les annexes, sont regroupés les lois, les normes pour l'eau, les sols, des recommandations pour la collecte des échantillons préalable au diagnostic, des techniques, les sources d'informations, les notes de danger, un glossaire des sites et sols pollués....

Présenté de façon claire et concise, cet ouvrage constitue un outil d'aide à la décision très utile. Toutefois, il convient de considérer ces guides comme des outils «provisaires» qui seront régulièrement modifiés et actualisés pour prendre en compte d'une part l'évolution des connaissances et d'autre part le retour d'expérience de leur utilisation.

GEOSTOCK

Contact : Mrs. COLIN et GENESTE

Géostock est maître d'œuvre en dépollution. Il essaye de promouvoir les techniques *in situ* (lessivage, pompage, écrémage, technique bio en excavé).

Géostock utilise depuis longtemps des modèles appliqués au stockage souterrain (modèle hydraulique sans transport, modèle 2D hydraulique (SILMULOG) (éléments finis)). Ce sont des outils d'origine pétrolière.

Ils possèdent également un modèle récent pour les stockages en réservoir : Workbench 3D (avec module transport et module multiphasique).

En migration de polluants dans les sols, ils possèdent :

. Porflow : fait à l'origine pour les radioéléments, ZNS, volumes finis, écoulement et transport, complet en physique, multiphasique, tourne sur une station X (apprentissage délicat). Logiciel distribué par ACRI (Sofia Antipolis),

. AQUA 2D : éléments finis, écoulement et transport, uniquement nappe, tous types de polluants, données : coefficient de rétention et constante de dégradation, paramètres dimensionnels, paramètres hydrauliques, conditions limites spatiales et temporelles, porosité, transmissivité...tourne sur PC, outil convivial,

. un petit logiciel américain : SPILLUOL.

HYDROEXPERT

Contact : Mrs BONNET et OLTEAN

HYDROEXPERT, possède plusieurs antennes dans la région parisienne, ainsi que dans le sud de la France. Cette société d'ingénieurs conseil, indépendante de toute entreprise ou groupe financier, possède entre autre SUTRA (plus MODFLOW, TALISMAN..) dont ils ont beaucoup développés l'interface (pré-processeurs et post-processeurs). Leurs services sont axés sur l'évaluation de projets d'hydraulique rurale, les problèmes de sédimentologie marine et fluviale, d'hydrologie quantitative, d'impact et de sûreté.

Un pôle recherche met en oeuvre pour ses besoins propres ou à la demande de ses clients, des procédés, des équipements ou des méthodes de mesures innovants comme la fracturation hydraulique, des tensioperméamètres ou des carottiers légers.

SOGREAH Ingénierie

Contact : Mrs Le BIDEAU et JARDIN

Située à Grenoble, filiale du groupe Sogelerg-Sogreah, Sogreah Ingenierie est une société d'Ingénieurs Conseil axée sur les techniques de l'hydraulique et de l'environnement principalement en vue de l'aménagement du territoire.

Leurs activités sont concentrées sur l'environnement urbain et industriel, l'Ingénierie fluviale et hydroagricole, les barrages et aménagements et les ports et les côtes.

Cette société collabore étroitement avec la filiale de recherche, le LHF et participe de ce fait à de nombreux projet. Les modèles, mis au point ou améliorés par le LHF sont commercialisés par ces deux partenaires et peuvent être installés et calés sur une situation, chez un industriel, dans le but d'une prévision des risques de pollution.

Le Laboratoire d'Hydraulique de France

Contact : Mrs CUNGE et BOISSON

Le LHF a été créé en 1988, il constitue une des premières sociétés privées françaises que l'industrie gère en collaboration avec la recherche. Leurs compétences sont axées sur le domaine de l'eau, de l'environnement et de l'informatique. La collaboration de leur division numérique et physique avec la participation de l'INPG et de l'UJF de Grenoble a permis le développement de plusieurs codes de calculs dont les plus importants, en ce qui concerne le sujet de l'étude, sont DEDALE 3D et MIKE SHE.

Le développement d'autres codes de calculs ne constitue plus un pôle d'intérêt, ou une difficulté pour eux. Leurs efforts se veulent concentrés sur l'amélioration et la promotion de leurs produits actuels par le biais de validation de perfectionnement sur site pilote (à trouver) et de modification de programme incluant l'approche géochimique, d'une part, et de l'influence de la microbiologie d'autre part.

TRANSOFT

Contact : Mme RENARD et M. TRIPATHI

TRANSOFT offre une gamme de logiciels provenant du marché de la recherche américaine, destinés à étudier les phénomènes de mécanique des fluides et de structure en utilisant les technologies actuelles. Leurs logiciels sont en général disponibles sur la plupart des ordinateurs. TRANSOFT développe beaucoup les interfaces des logiciels récupérés afin de les rendre utilisable par le grand public. Il sont demandeurs de sites-test afin de valider leur modèle.

Faculté Polytechnique de Mons - Laboratoire de Géologie

Contact : M. SQUERENS

Le Laboratoire de Géologie utilise des modèles de migration de polluants en zone saturée. Ils utilisent le logiciel AQUA3D (modèle islandais) commercialisé par la société Natural Systems Software. Ce laboratoire est intéressé par des modèles prenant en compte la zone non saturée. Il illustre cette demande par un exemple de pollution : cas d'une citerne qui s'est renversée sur le remblais d'une autoroute, la pollution n'est toujours pas apparue au niveau de la nappe ! (alors que seulement 3 000 tonnes de carburant, sur environ 17 000 perdues, ont été pompées). La pollution est certainement retenue par les craies.

Mr. Squerens estime qu'un modèle chimique est pratiquement impossible à réaliser du fait du grand nombre de réactions pouvant intervenir.

University of Illinois (USA)

Un certain nombre d'industriels (Amoco, Chevron, Hewlett-Packard, Mobil, Texaco...) ont constitué en 1986 un consortium pour coopérer sur le programme "Hydrogeology" (Annexe 7). L'objectif est le développement d'outils de calculs pour la simulation des processus hydrogéologiques et géochimiques. Les recherches sont effectuées par un groupe de chercheurs de l'Université de l'Illinois. Des logiciels sont élaborés et commercialisés. Le logiciel *Géochemist's Workbench* permet de modéliser les interactions géochimiques de nombreux composés avec les roches et les sols (voir chapitre V.5).

QUESTOR

Contact : M. STEWART

Queen's University Sciences and Technology Research Centre (Dublin, Irlande).

QUESTOR est une structure de mutualisation de crédits de recherche pour un groupe d'industriels dans le domaine de l'environnement. A la différence de RE.CO.R.D., QUESTOR possède ses propres laboratoires, situés dans une université.

La thématique de la modélisation des transferts de polluants dans le sol a été abordée par les chercheurs de QUESTOR et se développe. Deux projets sont actuellement en cours dans ce domaine (annexe 8) :

. modélisation numérique de la dispersion des polluants dans la zone non saturée : il s'agit de résoudre les problèmes numériques de résolution des modèles rencontrés surtout dans les cas de la prise en compte des réactions chimiques. Une validation des résultats sur sites est également prévue,

. modélisation biogéochimique du devenir de métaux dans les milieux saturés et non saturés : les interactions de ces métaux avec les composés organiques dans les sols doivent être spécifiquement étudiées et modélisées pour être prises en compte.

Il est évident que les membres industriels de QUESTOR considèrent comme prioritaire les recherches en matière de caractérisation de la mobilité des polluants dans les sols. Les études sont menées par des équipes très pluridisciplinaires associant chimistes, biochimistes et numériciens.

QUESTOR est très ouvert à une collaboration avec RE.CO.R.D.

Il est important de souligner que faire un inventaire exhaustif de tous les laboratoires, écoles, entreprises et organismes qui travaillent de près ou de loin sur la pollution des sols est impossible. La revue ci-dessus se veut uniquement indicative et non pas directive quant aux prises de contacts qui pourront s'établir par le futur. Il est bien entendu, qu'il existe en fait, un grand nombre de travaux en cours sur le sujet. Entre autres, ne sont pas cités tous les acteurs de la recherche en microbiologie, en géochimie, thèmes qui doivent être pris en compte dans la modélisation d'aujourd'hui.

Un certain nombre de renseignements, concernant les thèmes de travail et les perspectives des labo, organismes et entreprises sont disponibles sur les serveurs d'Internet.

VIII. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

A l'issue de cette étude, il est possible de dégager les principales questions et les problèmes qui restent posés concernant la modélisation du transport des polluants dans les sols.

La problématique nécessite une approche très **pluridisciplinaire**, comme toutes les sciences de l'Environnement en général. Si de nombreux spécialistes de l'hydrogéologie, de la géochimie et de la bio-physico-chimie maîtrisent bien des aspects particuliers du domaine d'étude, par contre leur association dans une approche commune et globale ne se fait que très difficilement. La collaboration avec des numériciens ou des informaticiens est certainement encore plus problématique.

Comme pour toute modélisation, **les données d'entrée restent LE problème**. En effet, le sol et en particulier sa zone non saturée sont très hétérogènes et se pose alors le problème des mesures et de leur acquisition. Les données sont-elles représentatives du milieu à étudier ? Sinon, quelle est la signification des résultats obtenus ?

Comme pour toute simulation, il apparaît aussi la nécessité de la **fiabilité** et de la **validité** des prévisions obtenues par le calcul.

Si, *a priori*, il ne semble pas qu'il y ait des avancées importantes à attendre de l'amélioration des schémas numériques, il existe sûrement de nombreux cas où certains phénomènes physiques, physico-chimiques ou biologiques restent mal modélisés.

En se rappelant que modéliser c'est d'abord hiérarchiser les phénomènes régissant une réalité complexe (examen des connaissances existantes, écritures des phénomènes sous forme d'équations mathématiques, résolution numérique et validation), nous pouvons faire les **propositions d'études** suivantes :

* l'évaluation de la pollution des sols étant une approche relativement nouvelle, il nous paraît important de rester pragmatique dans un premier temps et de recenser les connaissances déjà acquises. Ce recensement pourrait faire l'objet de la création d'une **base de données** concernant :

- les **interactions polluants/sols** afin de répondre aux questions : quel est le devenir d'un polluant dans un sol donné ? Au bout de combien de temps le polluant examiné sera-t-il dégradé naturellement ? Le sol peut-il être réutilisable et quand ?

- les **polluants types** générés par les différentes catégories d'industrie, dans le but de cerner au mieux les recherches de polluants lors d'une évaluation de site.

Cette base de données ne saurait voir le jour sans une participation active des différents acteurs du domaine,

* **mise en oeuvre de calculs couplant les différentes approches** (géologiques, chimiques, physiques, biologiques, ...), ce qui entraîne la participation d'équipes pluridisciplinaires ou un rapprochement de différentes équipes de recherche. Cette intégration favoriserait une vision globale des phénomènes afin de se rapprocher le plus possible de la réalité,

* avant d'utiliser tout modèle, il est nécessaire d'**améliorer la méthodologie d'acquisition des données** afin de représenter au mieux le site à étudier, cette amélioration passant par un recensement des connaissances sur les sols et les sous sols après discussion avec des géologues, hydrogéologues, utilisateurs des sites, ... Ce recensement pourrait aboutir à la création de cartes en 3D. La gestion des données par un **Système d'Information Géographique** servirait à paramétrer les modèles et à analyser dans l'espace les résultats de simulation,

* les paramètres d'entrée avec quelle précision ? La réponse à cette question pourrait être faite en étudiant la **sensibilité des modèles** aux différents paramètres d'entrée et la **hiérarchisation** des paramètres clés.

En effet, d'une part, il n'est pas toujours nécessaire de connaître avec une grande précision certains paramètres dont la sensibilité est faible vis-à-vis des simulations obtenues par le modèle. Et d'autre part, la précision nécessaire pour certains paramètres ne peut être obtenue par la mesure sur le terrain, et, par conséquent, la simulation ne pourra donner que des résultats approchés voire erronés,

* en ce qui concerne la **validation des modèles**, deux voies peuvent être pressenties :

- sur un site particulier très instrumenté,

- sur des sites anciens ou existants déjà recensés et ayant déjà fait l'objet d'une étude.

La première voie implique le choix d'un site, son instrumentation et son suivi, la seconde pourrait faire l'objet de l'écriture d'une base de données (paramètres nécessaires à la validation) en collaboration avec un organisme tel que l'Ademe,

* les modèles de transport existants sur le marché sont tous du type déterministe, une approche alternative se développe actuellement : "**les modèles stochastiques**" où les résultats ne sont plus donnés comme des valeurs proprement dites mais en terme de probabilité (les paramètres d'entrée pouvant être également probabilistes ou non numériques du type *un peu, moyen, beaucoup*). Quelle sont la complexité et la validité de cette approche ?

* on peut aussi définir un sujet dont l'enjeu paraît moindre mais qui mérite cependant l'attention : les logiciels existant actuellement sur le marché semblent manquer de convivialité. Il existe une demande dans ce domaine notamment pour la mise au point d'**interfaces** et aussi pour une **adaptation "locale"** simplifiée de logiciels commerciaux, paramétrés et adaptés à des cas restreints ou localisés (par exemple surveillance d'un site sensible),

* une étude comparative des qualités et limites de quelques logiciels commerciaux peut être utile à condition de pouvoir obtenir les éléments objectifs de la validation des simulations,

* des études particulières, en laboratoire, des mécanismes fondamentaux régissant les interactions des polluants avec les sols, sont déjà effectuées par des équipes spécialisées. Il serait souhaitable de recenser les thèmes déjà étudiés afin de cerner les domaines encore peu connus, et éventuellement, de lancer de nouvelles recherches.

BIBLIOGRAPHIE

- M.B. ABBOTT, J.C. BATHURST, J.A. CUNGE, P.E. O'CONNELL, J. RASMUSSEN** (1986) An introduction to The European Hydrological System - Système Hydrologique Européen « SHE », 1 : History and Philosophy of a physically-based distributed modelling system. 2 : Structure of a physically-based distributed modelling system. *J. of Hydrology*, 87, p. 45-59 and 61-77
- ALEXANDER M.** (1994). Biodegradation and bioremediation. *Academic Press*, 302p.
- BOURG A.C.M. & SAUTY J.P.** (1987) . Can the distribution coefficient K_d concept account successfully for the adsorption of pollutants in hydrodynamic mass transfer model? B.R.G.M. Orléans. *Vulnérabilité of soil and groundwater to pollutants : proceeding of the International Conference on March 30, at Noordwijk aa ZEE.*
- CASTAGNY G.** (1982). Principes et méthodes de l'hydrogéologie. Dunod Université 236p.
- DUPONT A.** (1994). Validation d'un modèle mathématique de transferts de polluants dans les sols à partir de données d'un modèle réduit. TFE de l'ENTPE, V/A Environnement et Hydraulique, 70p.
- ENCYCLOPAEDIA UNIVERSALIS.** Solutions en équilibre (292-302) et Sols (272-285). Enseigner la géologie. Collège - Lycée. Nathan, 286p, 196-223
- DE MARSILY G.** (1983) Hydrologie quantitative. Coll Sciences de la Terre. Ed Masson, 215 p.
- GAUDET J.P** (1974). Ecoulement transitoire d'eau et de sel dans la zone non saturée. *Thèse 3ème cycle mécanique des fluides.* Université scientifique et médicales de Grenoble. 136p.
- GOUNOT A.M.** (1991). Ecologie microbienne des eaux et sédiments souterrains. *hydrologie*, n°3, 239-248.
- GUINOT V.** (1995) . Modélisation mécaniste du devenir des produits phytosanitaires dans l'environnement souterrain, application à la protection des captages en aquifère. *Thèse*, 216p.
- HILLEL.D.** (1988). L'eau et le sol. 2ème Ed. Sciences et Techniques. 288 p.
- HISTOIRE DE LA TERRE NOTRE PLANETE** Société Géologique de France.
- IN SITU BIOREMEDIATION.** When does it work (1993). *National Research Council*, 207p, 80-91.
- KATYAL, A.K., KALUARACHCHI, J.J. and PARKER, J.C.** : MOFAT, a two dimensional finite element program for multiphase flow and multicomponent transport, program documentation and user's guide, 1991.
- LEDOUX E.** (1993) . Modélisation du transport des polluants par les eaux souterraines : *Séminaire de programmation «Modélisation du comportement des polluants dans les hydrosystèmes».*
- G. de MARSILY**, Soil and Rock Flow Properties, Stochastic Description, *Encyclopedia of Physical Science and Technology*, vol. 15
- G. de MARSILY**, Milieux Aléatoires et Phénomènes Hydrologiques, *C.R. Acad. Agric. Fr*, 1994, 80, no 6, pp. 3-20
- G. de MARSILY** Quelques réflexions sur l'utilisation des modèles en hydrologie. *Revue des sciences de l'eau*, 7 (1994) pp. 219-234
- MARTELAT A.** . (1993). Estimation des flux hydriques et nitriques dans les sols agricoles. Approches spatiale à plusieurs échelles dans la plaine du Rhin Supérieur. *Thèse de 3ème cycle.* 180p.
- MOLINARI J., ROCHON.J.** (1976) . Mesure des paramètres de transport de l'eau et des substances en solution en zone saturée. *La houille Blanche*, n° 314, 233-242.

- NE-ZHENG S.** (1996). Mathematical modelling of groundwater pollution, *Geological Publishing House* réédité chez Springer, 377, 187-199.
- PHILIP J.R.** (1957) The theory of infiltration : Sorptivity and algebraic infiltration equations. *Soil Science* 84. 257-264p.
- RAIMBAULT G.** (1986). Diffusivité et conductivité hydrauliques de matériaux ou sols non saturés en eau. *Bull. Liason Labo. P. et Ch.* 145 Sept-Oct. Réf 3113.
- VAUCLIN M.** (1993) Modélisation du transport de solutés dans la zone non saturée du sol : revue et état de l'art. *Séminaire de programmation «Modélisation du comportement des polluants dans les hydrosystèmes».*
- M. VAUCLIN,** Modélisation du Transport de Soluté dans les Zones non Saturées du Sol : Revue et Etat de l'Art Laboratoire d'Etude des Transferts en Hydrologie et Environnement.
- VESTED, H.J. et al.** : Advection-dispersion modeling in three dimensions. *Appl. Math. Modeling*, 16 : 506-519, 1992.
- WAGENET R.J. AND HUSTON J.L.** (1989) : *LEACHM. A process-based model of water and solute movement, transformations, plant uptake and chemical reactions in the unsaturated zone.* Departement of agronomy, Cornelle University-Ithaca, NY 14853
- WHITE R. E., S. S. DYSON, R. A., HAIGH, W. A. JURY and G. SPOSITO** 1986. A Transfert Fonction Model of Solute Transport through Soil. 2 - Illustrative applications. *Water Resour. Res.* 22 : 248-254
- YONG R.N., MOHAMED A.M.O., WARKENTIN B.P** (Ed 1992). Principles of contaminant transport in soils. *Developments in Geotechnical Engineering* 73, 327, 143-157.

LISTE DES ANNEXES

Annexe 1 : Décret n°89-3 du 3 janvier 1989.

Annexe 2 : Circulaire de 3 décembre 1993

Annexe 3 : Article 34, décret du 21 septembre 1977

Annexe 4 : Article 23 de la loi du 19 juillet 1976

Annexe 5 : Fiches détaillées de divers modèles

Annexe 6 : Tableau récapitulatif des projet retenus pour le XI^{ème} Contrat Plan Etat-Région

Annexe 7 : Programme “Hydrology” de l’Université de l’Illinois

Annexe 8 : Programmes de recherche de QUESTOR

LISTE DES FIGURES

figure 1 : Cycle des produits phytosanitaires (Vachaud and Vauclin, 1992).

figure 2 : Isothermes d'adsorption les plus fréquents.

figure 3 : approche 2-D ZS

figure 4 : approche 3-D ZNS / ZS

figure 5 : approche 3-D complète (DEDALE 3-D)

figure 6 : approche bidimensionnelle

figure 7 : approche tridimensionnelle

figure 8 : Liste non exhaustive de modèles disponibles.

figure 9 : Liste complémentaire des modèles

LEXIQUE

Argile

Terme désignant soit un minéral (=minéral argileux), soit une roche composée pour l'essentiel de ces minéraux.

- Minéraux argileux - Phyllosilicates hydratés, se présentant en très petit cristaux (quelques μm , en plaquettes hexagonales ou parfois en fibres). Ces minéraux sont très nombreux, avec principalement : la kaolinite, l'illite, les smectites, les interstratifiés, les minéraux fibreux (auxquels on ajoute les chlorites et les micas lorsqu'ils se présentent en très petit cristaux).

- Roches argileuses - Roches sédimentaires ou résiduelles à grain très fin (classe des lutites), contenant au moins 50% de minéraux argileux, auxquels peuvent s'ajouter d'autres minéraux très divers, détritiques ou non, d'où des compositions très variées (argiles calcareuses, argiles sableuses, argiles micacées...).

Calcaire

Roche sédimentaire carbonatée contenant au 50% de calcite CaCO_3 , pouvant être accompagnée d'un peu de dolomite, d'aragonite, de sidérite.

Coefficient d'emmagasinement S sans dimension

Ce coefficient permet de mesurer en place et sur un volume important, par le biais d'études et expérimentations, la capacité du réservoir à emmagasiner de l'eau. C'est le rapport du volume d'eau libérée ou emmagasinée, par unité de surface de l'aquifère (1 m^2) sous l'effet d'une variation de charge hydraulique correspondante, Δh .

Conductivité hydraulique K en $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ou coefficient de perméabilité pour les hydrogéologues

La conductivité définit le volume d'eau gravitaire en m^3 traversant en une unité de temps (s), sous l'effet d'une unité de gradient hydraulique, une unité de section en m^2 orthogonale à la direction de l'écoulement. Ce paramètre a la dimension d'une vitesse.

Diffusion moléculaire

C'est un phénomène physique lié à l'agitation moléculaire : dans un fluide au repos, le mouvement brownien envoie des particules dans toutes les directions de l'espace. La résultante de cette agitation moléculaire sera donc un transfert de particules des zones à concentration élevée vers les zones à concentration plus faibles.

Diffusivité en $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$

Le rapport T/S est appelé la diffusivité de l'aquifère. Elle régit la propagation d'influences dans l'aquifère.

Dispersion

C'est un phénomène de mélange essentiellement lié à l'hétérogénéité des vitesses microscopiques au sein du milieu poreux (cf paragraphe sur la dispersion cinématique, II-3.2).

Gravier

Elément de quelques millimètres dans les roches sédimentaires détritiques (classe des rudites). Selon les classifications, les limites vont de 1 ou 2 mm à 15 ou 30 mm, parfois plus.

Indice de vides noté e

C'est encore un indice du volume relatif des pores mais il se rapporte au volume solide et non au volume total de sol. Cet indice est généralement préféré par les ingénieurs et les mécaniciens des sols, tandis que la porosité est plus utilisée en physique du sol appliquée à l'agriculture. En général, e varie de 0,3 à 2,0 :

$$e = (\text{vol d'air} + \text{vol d'eau}) / \text{vol solide}$$

Limon

Dépôt détritique meuble, argileux et silteux, à grain très fin (classe des lutites), continental et d'origine fluviatile, lagunaire ou encore éolienne (limon des plateaux, loess).

Perméabilité

C'est l'aptitude d'un réservoir à conduire l'écoulement de l'eau dans des conditions hydrodynamiques imposées, soit sous l'effet d'un gradient de charge hydraulique. On la mesure par deux coefficients : le coefficient de perméabilité ou conductivité hydraulique et la perméabilité intrinsèque.

Perméabilité intrinsèque k en m^2 ou en *Darcy*

C'est le volume de liquide en m^3 d'unité de viscosité cinématique traversant en une unité de temps (en s), sous l'effet d'une unité de gradient hydraulique, une unité de section (en m^2) orthogonale à la direction de l'écoulement. Elle s'exprime en m^2 ou en *Darcy*. Le *Darcy* est la perméabilité d'un milieu débitant $1 \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ à travers une surface de 1 cm^2 sous un gradient hydraulique, normal à cette surface, de 1 atmosphère par centimètre.

Perméabilité relative

La perméabilité intrinsèque k_i est fonction de la saturation du milieu en fluide i : plus la portion du milieu poreux, occupée par le fluide i , sera grande, plus la perméabilité liée à ce fluide sera grande. On définit alors la perméabilité relative k_{ri} telle que :

$$k_{ri} = k_i / k$$

k étant la perméabilité intrinsèque (saturée) du milieu poreux.

Porosité cinématique

C'est le rapport de la vitesse de déplacement à la vitesse de filtration. il équivaut au rapport du volume des vides réellement parcouru par l'eau gravitaire au volume du milieu (saturé ou non). C'est la teneur en eau mobile. Ce concept est assez proche de la porosité efficace.

Porosité efficace, notée n_e en %

C'est le rapport du volume d'eau gravitaire, V_e que le réservoir peut contenir à l'état saturé, puis libérer sous l'effet d'un égouttage complet, à son volume total V_t .

Porosité efficace, $n_e = \text{Vol d'eau gravitaire } (V_e) / \text{vol totale } (V_t)$.

Porosité totale ω ou n en %

La plupart des roches et des sols contiennent naturellement un certain pourcentage de vides qui peuvent être occupés par de l'eau ou des fluides. C'est ce que l'on appelle la porosité ou porosité efficace suivant la littérature.

Porosité totale = volume de vides/volume total de roche.

Sable

Au sens courant, matériau meuble formé de grains de quartz (grains de sable) tel celui des plages ou des dunes. Plus précisément, sédiment détritique meuble dont les grains sont en majorité compris entre 1/16 mm (62,5 µm) et 2 mm (classe des arénites).

Teneur en eau θ en %

θ la **teneur en eau** volumique exprimée en pourcentage, est la quantité d'eau contenue dans un réservoir, saturé ou non, rapporté au volume total, quel que soit le type d'eau considérée. Dans la zone non saturée, on parle d'humidité définit par:

$$\theta = \frac{\text{volume d'eau}}{\text{volume total}}$$

définit le volume d'eau gravitaire en m³ traversant en une unité de temps (s), sous l'effet d'une unité de gradient hydraulique, une unité de section en m² orthogonale à la direction de l'écoulement. Ce paramètre a la dimension d'une vitesse.

Transmissivité T en (m².s⁻¹)

La productivité d'un captage dans un aquifère est fonction de son coefficient de perméabilité, K et de son épaisseur, b.

On définit la transmissivité comme le débit d'eau qui s'écoule, par unité de largeur, L, d'un aquifère, sous l'effet d'une unité de gradient hydraulique.

$$T(\text{m}^2.\text{s}^{-1}) = K(\text{m}.\text{s}^{-1}).b(\text{m})$$

On la mesure sur le terrain grâce aux pompages d'essais.

Vitesses d'écoulement en m.s⁻¹ ou m.an⁻¹

L'écoulement des eaux souterraines peut-être considéré comme le déplacement de particules d'eau dans l'espace et dans le temps, le long de trajectoires, appelées lignes de flux ou lignes de courant.

Deux méthodes de détermination des vitesses d'écoulement, correspondant à deux conceptions de leur mouvement, sont utilisées :

- application de la loi de Darcy, avec une correction introduisant la porosité efficace, calculant la vitesse effective, notée V_e . C'est le concept d'hydrodynamique souterraine,
- opérations de traçages, sur le terrain, mesurant la vitesse de déplacement, notée V_d . c'est le concept de l'hydrocinématique souterraine.

La **vitesse de filtration** V , calculée par la loi de Darcy, se rapporte à la section totale (section avec trajectoires théoriques qui ne tiennent pas compte des grains et des pores A). Elle n'a pas de réalité physique. Par exemple pour un débit de nappe $Q=1\text{m}^3.\text{s}^{-1}$, traversant une section totale de $200\,000\text{m}^2$:

$$V = Q / A = 5.10^{-6} \text{ m.s}^{-1} = 150\text{m/an}$$

La **vitesse effective**, V_e : la loi de Darcy est corrigée par rapport à la section efficace (section où l'on considère que les lignes de courant suivent un trajet complexe à travers les pores et les grains) :

$$V_e = V / n_e \quad (\text{de l'ordre de } 10^{-5} \text{ m.s}^{-1})$$

La **section efficace** est plus petite que la section totale, donc pour un débit de nappe constant, la vitesse effective est plus grande que la vitesse de filtration.

La vitesse de déplacement introduit le concept de dispersion et étudie les trajectoires réelles dans les vides du milieu à l'échelle microscopique. L'opération de mesure pour se faire en laboratoire sur colonne ou sur le terrain. On obtient la direction réelle de l'écoulement et les paramètres de dispersion. On injecte un traceur à un temps t et on mesure sa concentration au

cours du temps. L'intervalle de temps écoulé entre l'entrée et la sortie est appelé temps de séjour. La courbe obtenue (rapport des concentrations en fonction des temps de séjours) permet d'obtenir la vitesse de déplacement.

ANNEXE 1

ANNEXE I-3

Exigences de qualité des eaux douces superficielles utilisées ou destinées à être utilisées pour la production d'eau destinée à la consommation humaine

(Décr. n° 91-257 du 7 mars 1991, art. 2-III)

G : valeur guide. I : valeur limite impérative.

GROUPES DE PARAMÈTRES	PARAMÈTRES	A 1		A 2		A 3	
		G	I	G	I	G	I
Paramètres organoleptiques.	Coloration (après filtration simple) mg/l (échelle Pt)	10	20	50	100	50	200
	Odeur (facteur de dilution à 25 °C)	3		10		20	
Paramètres physico-chimiques liés à la structure naturelle des eaux.	Conductivité $\mu\text{S}/\text{cm}$ à 20 °C	1 000		1 000		1 000	
	Température (°C)	22	25	22	25	22	25
	pH (unités pH)	6,5-8,5		5,5-9		5,5-9	
	Chlorures (mg/l Cl)	200		200		200	
	Sulfates (mg/l SO_4)	150	250	150	250	150	250
	Matières en suspension (mg/l)	25					
	Demande biochimique en oxygène (DBO_5) à 20 °C sans nitrification (mg/l O_2)	< 3		< 5		< 7	
	Demande chimique en oxygène (DCO) (mg/l O_2)					30	
Taux de saturation en oxygène dissous (% O_2)	> 70		> 50		> 30		
Paramètres concernant les substances indésirables.	Nitrates (mg/l NO_3)	25	50		50		50
	Ammoniaque (mg/l NH_4)	0,05		1	1,5	2	4
	Azote Kjeldhal (NO_3) excepté (mg/l N)	1		2		3	
	Hydrocarbures dissous ou émulsionnés après extraction par éther de pétrole (mg/l)		0,05		0,2	0,5	1
	Phénols (indice phénol) para-nitraniline 4 aminoantipyrine (mg/l $\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$)		0,001	0,001	0,005	0,01	0,1
	Agents de surface réagissant au bleu de méthylène (mg/l lauryl-sulfate)	0,2		0,2		0,5	
	Substances extractibles au chloroforme (mg/l)	0,1		0,2		0,5	
	Fer dissous (mg/l Fe)	0,1	0,3	1	2	1	
	Manganèse (mg/l Mn)	0,05		0,1		1	
	Cuivre (mg/l Cu)	0,02	0,05	0,05		1	
	Zinc (mg/l Zn)	0,5	3	1	5	1	5
	Phosphore (mg/l P_2O_5)	0,4		0,7		0,7	
	Fluor (mg/l F)	0,7-1	1,5	0,7-1,7		0,7-1,7	
	Bore (mg/l B)	1		1		1	
	Baryum (mg/l Ba)		0,1		1		1

GROUPES DE PARAMÈTRES	PARAMÈTRES	A 1		A 2		A 3	
		G	I	G	I	G	I
Paramètres concernant les substances toxiques.	Arsenic (µg/l As)	10	50		50	50	100
	Cadmium (µg/l Cd)	1	5	1	5	1	5
	Cyanures (µg/l CN)		50		50		50
	Chrome total (µg/l Cr)		50		50		50
	Plomb (µg/l Pb)		50		50		50
	Mercure (µg/l Hg)	0,5	1	0,5	1	0,5	1
	Sélénium (µg/l Se)		10		10		10
	Hydrocarbures polycycliques aromatiques total 6 substances visées par décret du 3 janvier 1989 (µg/l)		0,2		0,2		1
Pesticides.	Total : parathion, HCH, dieldrine (µg/l) .		1		2,5		5
Paramètres microbiologiques.	Coliformes totaux 37 °C (100 ml)	50		5 000		50 000	
	Coliformes thermotolérants (100 ml)	20		2 000		20 000	
	Streptocoques fécaux (100 ml)	20		1 000		10 000	
	Salmonelles	Absence dans 5 000 ml		Absence dans 1 000 ml			

ANNEXE II

(Décr. n° 90-330 du 10 avr. 1990, art. 12-I)

Programmes d'analyse des échantillons d'eau

La présente annexe fixe les programmes d'analyse d'échantillons, pour les eaux distribuées par un réseau collectif public ou privé (I), les eaux conditionnées et la glace alimentaire (II) et les eaux utilisées dans les industries alimentaires (III) ainsi que les modalités d'adaptation du programme d'analyse (IV).

I. - EAUX DISTRIBUÉES PAR UN RÉSEAU COLLECTIF PUBLIC OU PRIVÉ

A. - Contenu des analyses

TABLEAU 1
Analyses bactériologiques

ANALYSES BACTÉRIOLOGIQUES		
Réduite (B 1)	Sommaire (B 2)	Complète (B 3)
Coliformes thermotolérants. Streptocoques fécaux.	Coliformes thermotolérants. Streptocoques fécaux. Dénombrement des bactéries aérobies revivifiables à 22 °C et 37 °C.	Coliformes thermotolérants. Streptocoques fécaux. Coliformes. Dénombrement des bactéries aérobies revivifiables à 22 °C et 37 °C. Spores de bactéries anaérobies sulfitoréductrices.

B. - Fréquence des prélèvements d'eau à analyser

(Décr. n° 91-257 du 7 mars 1991, art. 4-1)

1° Le tableau n° 3 précise le type d'analyses à effectuer selon que les échantillons d'eau ont été prélevés dans la ressource (R), dans l'eau, traitée ou non, avant son refoulement dans le réseau de distribution (P) ou dans le réseau (D).

« Le tableau 4 indique la fréquence des prélèvements d'échantillons d'eau à effectuer

chaque année dans la ressource (RP, RS) et dans l'eau avant son refoulement dans le réseau de distribution (P 1, P 2 P, P 2 S, P 3) selon le débit journalier de l'eau.

Le tableau 5 indique la fréquence de ces prélèvements dans l'eau distribuée aux consommateurs selon la population desservie par le réseau et selon que l'eau est désinfectée ou non. Lorsqu'un réseau de distribution dessert plusieurs communes, le nombre des

analyses à effectuer doit être au moins égal à celui correspondant à la population des communes desservies par le réseau sans être inférieur au nombre des communes desservies ;

2° Lorsque la valeur de certains paramètres figurant dans les analyses-types R et P est susceptible d'être modifiée en cours de distribution, les prélèvements d'échantillons d'eau peuvent être réalisés dans le réseau de distribution. »

TABLEAU 2

Analyses physico-chimiques

(Décr. n° 91-257 du 7 mars 1991, art. 3)

ANALYSES PHYSICO-CHIMIQUES							
	Analyse physico-chimique réduite (C1)	Analyse physico-chimique sommaire (C2)	Analyse physico-chimique complète (C3)	Analyses physico-chimiques particulières (C4)			
				C4 a	C4 b	C4 c	« C4 d »
Paramètres organoleptiques	- Aspect (qualitatif) : odeur, saveur, couleur. - Turbidité.	- Aspect (qualitatif) : odeur, saveur, couleur. - Turbidité.	- Aspect (quantitatif) : odeur, saveur, couleur. - Turbidité.				
Paramètres physico-chimiques. Structure naturelle des eaux.	- pH. - Conductivité.	- Température. - pH. - Conductivité.	- Température. - pH. - Conductivité. - Chlorures. - Sulfates. - Silice. - Calcium. - Magnésium. - Sodium. - Potassium. - Aluminium. - Résidus secs. - Oxygène dissous. - Anhydride carbonique libre (essai au marbre) ou calcul de l'équilibre calco-carbonique. - Carbonates. - Hydrogéné-carbonates.				Matières totales en suspension (M.E.S.). Demande chimique en oxygène (D.C.O.). Demande biochimique en oxygène dissous (D.B.O ₅).

ANALYSES PHYSICO-CHIMIQUES							
	Analyse physico-chimique réduite (C1)	Analyse physico-chimique sommaire (C2)	Analyse physico-chimique complète (C3)	Analyses physico-chimiques particulières (C4)			
				C4 a	C4 b	C4 c	« C4 d »
Paramètres concernant les substances indésirables.		(Décr. n° 91-257 du 7 mars 1991, art. 3-2°) - Nitrates. - Nitrites. - Ammonium. - Deux paramètres parmi les paramètres suivants : chlorures, sulfates, oxydabilité au $KMnO_4$ ou carbone organique total, titre alcalimétrique complet ou dureté totale.	- Nitrates. - Nitrites. - Ammonium. - Oxydabilité au $KMnO_4$, à chaud, en milieu acide. - Hydrogène sulfuré. - Fer. - Cuivre. - Zinc. - Manganèse. - Phosphore. - Fluor. - Chlore résiduel ou tout autre paramètre représentatif du traitement de désinfection.	- Azote. Kjeldhal. - Hydrocarbures dissous. - Agents de surface. - Indice. Phénol.			Bore. Baryum. Substances extractibles au chloroforme.
Paramètres concernant les substances toxiques.					- Cadmium. - Plomb. - H.P.A.	- Arsenic. - Cyanures. - Chrome. - Mercure. - Sélénium.	
Autres paramètres.						- Pesticides. - Composés organohalogénés volatils.	

TABLEAU 3
Analyses types
(Décr. n° 91-257 du 7 mars 1991, art. 4-II)

EMPLACEMENT	RESSOURCE		PRODUCTION				DISTRIBUTION
	Au point de puisage, avant traitement (R)		Après traitement et avant refolement ou au point de puisage en l'absence de traitement (P)				
Origine de l'eau	(R.P.)	(R.S.)	(P 1)	(P 2)		(P 3)	Eaux souterraines et superficielles (D)
	Eaux souterraines	Eaux superficielles	Eaux souterraines et eaux superficielles	Eaux souterraines (P 2 P)	Eaux superficielles (P 2 S)	Eaux souterraines et eaux superficielles	
ANALYSES TYPES	B 1	B 1	-	-	-	-	-
	-	-	-	-	-	-	B 2
	-	-	B 3	-	-	-	-
	-	-	-	-	-	-	C 1
	-	-	C 2	-	-	-	-
	C 3	C 3	-	C 3	C 3	-	-
	-	C 4 a	-	-	C 4 a	C 4 a	-
	C 4 b	C 4 b	-	-	-	-	-
	-	C 4 c	-	-	-	C 4 c	-
	-	« C 4 d »	-	-	-	-	-

TABLEAU 4

Fréquences annuelles d'analyse (échantillons prélevés à la ressource et en usine)
(Décr. n° 91-257 du 7 mars 1991, art. 4-III)

DÉBIT JOURNALIER (m ³ /jour)	FRÉQUENCES ANNUELLES D'ÉCHANTILLONNAGE					
	R.P.	R.S.	P 1	P 2 P	P 2 S	P 3
Inférieur à 100	—	—	1	—	—	—
De 100 à 399	1/2	2	2,5	1/2	1	1/5
De 400 à 999	1/2	2	2,5	1/2	1	1/5
De 1 000 à 1 999	1/2	2	3,5	1/2	1	1/5
De 2 000 à 5 999	1	3	7	1	1	1/2
De 6 000 à 9 999	2	6	8	1	1	1/2
De 10 000 à 19 999	2	6	14	2	2	1
De 20 000 à 29 999	4	12	22	3	3	1
De 30 000 à 59 999	4	12	42	6	6	1
De 60 000 à 99 999	4	12	70	10	10	1
Supérieur ou égal à 100 000	4	12	140	20	20	1

Nota. - 1° En ce qui concerne les eaux superficielles de la ressource (R.S.), outre les analyses bactériologiques (B 1), il est procédé :

a) A une recherche annuelle de salmonelles (dans cinq litres d'eau) ;

b) A une recherche de coliformes dans les conditions suivantes :

ba Une fois par an pour un débit inférieur à 6 000 m³/jour ;

bb Deux fois par an pour un débit compris entre 6 000 m³/jour et 20 000 m³/jour ;

bc Quatre fois par an pour un débit supérieur à 20 000 m³/jour ;

2° En ce qui concerne les analyses microbiologiques, les chiffres de la colonne P 1 sont doublés lorsque les eaux sont désinfectées.

TABLEAU 5

Fréquences annuelles d'analyses
(Échantillons prélevés en distribution)
(Décr. n° 91-257 du 7 mars 1991, art. 4-IV)

POPULATION DESSERVIE	D	
	Eau non désinfectée (nd)	Eau désinfectée (d)
500 habitants	2	4
2 000 habitants	6	
5 000 habitants	12	
10 000 habitants	24	24
30 000 habitants	60	
50 000 habitants	90	
100 000 habitants	150	240
150 000 habitants	210	
300 000 habitants	390	720

Pour les populations inférieures à 500 habitants, le nombre d'analyses D est égal à 2 dans le cas d'eaux non désinfectées et à 4 dans le cas d'eaux désinfectées. Pour les populations supérieures à 500 habitants, le nombre d'analyses à effectuer est obtenu par interpolation linéaire entre les chiffres fixés dans les colonnes D, le chiffre étant arrondi à la valeur entière la plus proche.

Pour les populations supérieures à 300 000 habitants, le nombre d'analyses à effectuer est obtenu par extrapolation linéaire, le chiffre étant arrondi à la valeur entière la plus proche.

II. - EAUX CONDITIONNÉES ET GLACE ALIMENTAIRE

Les analyses et fréquences annuelles d'échantillonnage doivent respecter les prescriptions définies au tableau n° 6 ci-après :

TABLEAU 6

Analyses types et fréquence annuelle d'échantillonnage des eaux conditionnées et de la glace alimentaire

EMPLACEMENT des points de prélèvements		ANALYSES TYPES	FRÉQUENCES annuelles d'échantillonnage
Ressource (1).		Analyse bactériologique complète (B 3). Analyse physico-chimique complète (C 3).	3
E A U	Avant soutirage ou avant congélation.	Analyse bactériologique complète (B 3) Analyse physico-chimique complète (C 3).	3
		Analyses physico-chimiques spéciales (C 4 a, C 4 b et C 4 c).	1
	Après conditionnement ou après emballage.	Analyse bactériologique complète (B 3). Analyse physico-chimique sommaire (C 2).	6
Dans le cas où l'eau est traitée avant conditionnement, le programme réglementaire d'analyses est adapté à la nature et aux caractéristiques du traitement effectué.			
M A T É R I E L	Flacons vides après lavage, désinfection et rinçage. Surface des bouchons, capsules ou joints en contact avec l'eau.	Analyse bactériologique sommaire (B 2).	6
Eau de rinçage (2).			

(1) Les analyses sont à effectuer lorsque l'eau ne provient pas d'une distribution publique.

(2) Lorsque le rinçage n'est pas pratiqué avec l'eau à conditionner ou avec une eau de distribution publique.

III. - EAUX UTILISÉES DANS LES ENTREPRISES ALIMENTAIRES

Lorsque l'eau utilisée dans les entreprises alimentaires ne provient pas d'une distribution publique, des prélèvements d'échantillons d'eau sont effectués sur la ressource exploitée.

Les analyses et fréquences d'échantillonnage doivent respecter les prescriptions suivantes :

TABLEAU 7

Analyses types et fréquences d'échantillonnage annuelles

Analyses types.	Analyse bactériologique complète (B 3). Analyse physico-chimique sommaire (C 2)	Analyse physico-chimique complète (C 3). Analyses physico-chimiques particulières (C 4 a, C 4 b, C 4 c).
Fréquences annuelles d'échantillonnage.	Les fréquences annuelles d'échantillonnage sont identiques à celles prévues pour les analyses effectuées sur les ressources alimentant les réseaux d'adduction (tableau 4) ; elles ne peuvent être inférieures à celles indiquées ci-dessous :	
Fréquences minimales.	3	1

IV. - ADAPTATION
DU PROGRAMME

Pour l'application de l'article 9 du présent décret, le programme d'analyse peut être modifié dans les conditions suivantes :

1. A coût égal de réalisation du programme d'analyses, la nature et la fréquence des paramètres analysés peuvent être modifiées.

2. a) Pour les eaux d'origine superficielle, les fréquences d'échantillonnage peuvent être réduites d'un facteur 2 à l'exception de celles concernant les analyses bactériologiques ;

b) Pour les eaux souterraines ou profondes, les fréquences d'échantillonnage peuvent être réduites d'un facteur 4.

3. Le programme peut comprendre des analyses supplémentaires dont le coût ne conduit pas à un dépassement supérieur à 20 p. 100 du programme d'analyse établi selon les modalités prévues aux tableaux 1 et 2 de la présente annexe.

ANNEXE III

(Décr. n° 90-330 du 10 avr. 1990,
art. 13.I et II et Décr. n° 91-257
du 7 mars 1991, art. 5)

Limites de qualité des eaux brutes
utilisées pour la production d'eau
destinée à la consommation humaine

1. Paramètre organoleptique

Coloration après filtration dépassant 200 mg/l de platine en référence à l'échelle platine-cobalt.

2. Paramètres en relation
avec la structure naturelle des eaux

1. Température de l'eau supérieure à 25 °C.
2. Pour les substances suivantes, valeurs des concentrations supérieures aux valeurs ci-après :

a) Chlorures « 200 » mg/l (Cl)
b) Sulfates 250 mg/l (SO₄)

3. Pour les eaux superficielles, pourcentage d'oxygène dissous inférieur à 30 p. 100 de la valeur de saturation.

3. Paramètres concernant
des substances indésirables

Pour les substances suivantes, valeurs des concentrations supérieures aux valeurs ci-après :

1. Nitrates « 50 mg/l (NO₃)
pour les eaux superficielles ou
100 mg/l (NO₃)
pour les autres
eaux ».

2. Ammonium 4 mg/l (NH₄)

3. Oxydabilité
(KMnO₄) en milieu
acide 10 mg/l (O₂)

4. Phénols (indice
phénols) para nitraniline et 4 aminoantipyrine 0,1 mg/l
(C₆ H₅ OH)

5. Agents de surface
(réagissant au bleu de
méthylène 0,5 mg/l
(lauryl-sulfate).

6. Hydrocarbures dis-
sous émulsionnés
après extraction au
tétrachlorure de car-
bone 1 mg/l

7. Zinc 5 mg/l (Zn)

« 8. Baryum 1 mg/l (Ba) pour
les eaux superficielles ».

4. Paramètres concernant
des substances toxiques

Pour les substances suivantes, valeurs des concentrations supérieures aux valeurs ci-après :

1. Arsenic 100 µg/l (As)

2. Cadmium 5 µg/l (Cd)

3. Cyanures 50 µg/l (CN)

4. Chrome total 50 µg/l (Cr)

5. Mercure 1 µg/l (Hg)

6. Plomb 50 µg/l (Pb)

7. Sélénium 10 µg/l (Se)

8. Pesticides pour le
total des trois subs-
tances suivantes
(parathion, HCH,
dieldrine) 5 µg/l

9. Hydrocarbures po-
lycyclo aromati-
ques :
Pour le total des six
substances suivan-
tes 1 µg/l

Fluoranthène ;
Benzo (3,4) fluoranthène ;
Benzo (1,12) fluoranthène ;
Benzo (3,4) pyrène ;
Benzo (1,12) pérylène ;
Indéno (1,2,3-cd) pyrène.

5. - Paramètres microbiologiques

Eau contenant plus de 20 000 coliformes
thermotolérants et plus de 10 000 streptoco-
ques fécaux par 100 millilitres d'eau prélevée.

CIRCULAIRE DU 16 MAI 1989

relative à la présence
de composés organohalogénés volatils
dans les eaux destinées
à la consommation humaine
(J.O. du 28 juin 1989)

Destinataires : Messieurs les préfets de région
(direction régionale des affaires sanitaires et
sociales) et à Madame et Messieurs les préfets
de département (direction départementale des
affaires sanitaires et sociales).

Il y a une quinzaine d'années, a été mise en
évidence la présence de certains composés
organohalogénés dans les eaux traitées desti-
nées à la consommation humaine. Peu après,
du trichloréthylène était identifié dans des
eaux de nappes.

Depuis lors, de nombreux travaux ont été
menés dans différents pays, notamment en
France, pour mieux connaître ces produits,
les conditions de leur présence dans les eaux
et de leur évolution, et pour apprécier les
risques sanitaires qu'ils représentent.

La directive C.E.E. n° 80-778 du 15 juillet

ANNEXE 2

Paris, le 03 DEC. 1993

Signalé

Le Ministre de l'Environnement

à

**Messieurs les Préfets de Région
Mesdames et Messieurs les Préfets de Département**

Objet : Politique de réhabilitation et de traitement des sites et sols pollués.

La prévention des risques industriels et de la pollution des eaux ainsi que la réduction des rejets atmosphériques font l'objet depuis de nombreuses années d'actions cohérentes et concertées. Celles-ci ont déjà conduit dans le domaine industriel à des résultats notables. L'impact des activités humaines sur l'environnement se réduit ainsi. Mais les traces des pollutions passées en sont malheureusement d'autant plus perceptibles. L'histoire nous a en effet légué des pollutions historiques, constituées d'anciens dépôts de déchets, de sols et d'eaux souterraines pollués dont la mémoire collective a parfois déjà oublié l'existence et la localisation précise.

Les cas de pollution les plus flagrants ont fait l'objet par le passé d'actions de résorption efficaces mais ponctuelles. Vos services établissent périodiquement l'inventaire des cas connus et la circulaire du 9 janvier 1989 détaille, pour le cas où aucun responsable solvable n'est identifié, les modalités d'exécution d'office de travaux par l'agence de l'environnement et de la maîtrise de l'énergie.

Des mesures de prévention dans l'aménagement et l'exploitation des installations potentiellement à l'origine de telles pollutions ont parallèlement été mises en oeuvre depuis de nombreuses années. Les stockages de substances dangereuses sont par exemple systématiquement réalisés sur des aires de rétention et les cuves souterraines comportent couramment des enveloppes dédoublées. Les conditions d'élimination des déchets se sont aussi considérablement améliorées depuis vingt ans.

La loi n° 92-646 du 13 juillet 1992 relative à l'élimination des déchets et aux installations classées pour la protection de l'environnement et l'arrêté ministériel du 1er mars relatif aux prélèvements et à la consommation d'eau ainsi qu'aux rejets de toute nature des installations classées soumises à autorisation ont récemment encore renforcé ces mesures préventives.

Il faut cependant définir aujourd'hui une véritable politique de traitement des sites et sols pollués. L'existence de ces sites doit être admise et nous devons apprendre à les traiter dans la transparence et avec sérénité. A l'époque où seuls les cas les plus graves attiraient notre attention, l'appellation de "points noirs" était peut-être fondée. Aujourd'hui, devant les quelques milliers de sites potentiellement pollués et présentant des risques très variables que compte sans doute notre pays, il convient d'en parler ouvertement mais sans catastrophisme.

I) Les principes d'une politique réaliste de traitement des sites et sols pollués.

Une politique efficace mais raisonnée de traitement des sites et sols pollués doit s'appuyer tout à la fois sur une recherche systématique et organisée des sites potentiellement concernés et permettre la définition concertée de priorités. Le traitement de chaque site doit dépendre de son impact effectif sur l'environnement et de l'usage auquel il est destiné. Il faut donc commencer par évaluer précisément les conséquences actuelles et potentielles des pollutions constatées. C'est l'appréciation de l'impact sur l'environnement et la santé humaine qui doit ensuite conduire au choix de techniques de traitement et d'objectifs de dépollution adaptés au devenir du site.

Cette démarche générale doit concerner de très nombreux sites : des secteurs industriels entiers ont pu être à l'origine de pollutions plus ou moins étendues des sols. Les dépôts anciens d'hydrocarbures ou de produits chimiques ont en général conduit à des pollutions des sols. Même les stations service, voire les cuves de fioul domestique si communes, peuvent avoir conduit à une légère et très locale contamination des sols par les hydrocarbures. Les décharges municipales de nos villes n'ont sans doute pas non plus toujours été aménagées et exploitées sans incidences pour l'environnement.

Vous comprenez donc qu'il s'agit d'une action de longue haleine, à l'échelle d'un siècle et demi d'histoire industrielle dans notre pays. La mise en oeuvre de cette politique ne pourra être que progressive et fonction des moyens publics et privés qu'il sera possible de mobiliser. Il convient cependant de s'y consacrer dès maintenant avec un souci naturel d'identifier des priorités.

II) Les moyens et les outils nécessaires à la mise en oeuvre de cette politique.

J'entends alors progressivement mettre en place les éléments administratifs et techniques qui vous seront à cet effet nécessaires :

1) La recherche des sites et sols pollués.

L'identification des sites pollués repose, d'une part, sur les constats de l'inspection des installations classées ou sur des campagnes de détection (étude des sols) sur les sites actuellement en activité et, d'autre part, sur la collecte de nombreuses informations relatives aux activités industrielles passées d'une région (archives, témoignages etc.).

Mes services préparent une grille d'orientation des recherches précisant les activités ayant potentiellement pu conduire à une pollution des sols ainsi qu'un guide simplifié de réalisation d'études de sols. A l'image des études-déchets, ces études porteront pour les secteurs les plus concernés sur une appréciation des caractéristiques des sols et sous-sols des principaux sites.

Parallèlement, des inventaires dits "historiques", fondés sur l'examen d'archives tant privées que publiques et le recueil de témoignages pourront contribuer à localiser les sites potentiellement pollués par des activités aujourd'hui arrêtées.

2) L'évaluation des risques et de la vulnérabilité de chaque site.

a) Evaluation initiale simplifiée et hiérarchisation.

En complément à la définition d'un guide méthodologique d'étude des sols, je compte pouvoir bientôt vous diffuser une grille simplifiée d'évaluation et de hiérarchisation des sites permettant d'apprécier rapidement l'urgence d'investigations complémentaires. Cette grille d'évaluation simplifiée comprendra des informations de référence permettant d'apprécier pour certaines substances des teneurs jugées anormalement élevées dans les sols. Ces seuils porteront notamment sur les principaux polluants rencontrés et sur les niveaux de contamination qui rendent des investigations complémentaires souhaitables.

Les démarches de recherche de site et d'évaluation devront être étroitement liées. L'identification d'un site potentiellement pollué devra s'accompagner le plus rapidement possible de l'évaluation simplifiée des risques qu'il engendre. Cette première évaluation devra permettre d'apprécier l'opportunité et l'urgence d'investigations complémentaires préalables à un traitement. Les risques présentés par le site seront à cet effet comparés à une échelle de gravité qui facilitera au niveau national l'établissement de priorités d'intervention. Cette démarche opérationnelle aboutira à une hiérarchisation de la pollution des sites.

.../...

Un site sera considéré comme pollué lorsque cette première évaluation simplifiée des risques conduira à prescrire une étude plus approfondie.

b) Etudes d'impact et objectif de réhabilitation.

Des études d'impact approfondies devront être réalisées sur les sites identifiés comme pollués afin de définir les travaux à mener ainsi que les objectifs de contamination résiduelle à retenir en fonction de l'usage ultérieur du site. Dans certains cas, les interventions ainsi définies pourront rendre le site de nouveau propre à tout usage. Dans d'autres cas, les travaux permettront simplement de limiter à son plus faible niveau techniquement réalisable et économiquement acceptable l'impact créé par le site sur son environnement. Il conviendra alors de veiller durablement à son affectation.

Un guide méthodologique à venir définira les grandes lignes de ces études approfondies et illustrera leur utilité pour fixer des seuils de décontamination à travers quelques scénarii types. Parallèlement, des travaux complémentaires seront engagés afin d'étudier l'opportunité d'un inventaire géochimique national sur la teneur habituelle des sols et des roches naturelles en substances minérales. En liaison avec l'évolution de la réglementation de l'urbanisme, je proposerai enfin à mes collègues chargés de la santé, de l'équipement et de l'agriculture, d'envisager la détermination de seuils d'usage banalisé qui fixeraient au cas par cas et pour des scénarii de référence des objectifs de dépollution en fonction de l'usage ultérieur souhaité.

Tous ces outils administratifs et techniques devront être disponibles dans leur version initiale avant la fin 1994 afin de lancer dès que possible la réalisation d'études historiques régionales et d'études des sols dans les secteurs d'activités a priori potentiellement à l'origine de telles pollutions des sols. Je compte pour ce faire organiser une large concertation nationale avec l'ensemble des acteurs concernés et créer un groupe de travail national sur ce sujet. Cette structure légère et ouverte participera à la définition technique de tous les éléments de cette nouvelle politique.

3) La création de structures adaptées d'information et de concertation.

La définition à l'échelle nationale de méthodologies et d'outils d'appréciation de référence est indispensable. La notion même de site pollué est cependant aujourd'hui encore tellement subjective et peu admise qu'il convient de l'explicitier localement et de faciliter tous les échanges d'information sur ce sujet sensible. C'est pourquoi, il est nécessaire d'instituer sur ce sujet un échange de vues et une concertation à l'échelle régionale.

.../...

Cette réflexion pourrait être menée au niveau régional en liaison avec l'élaboration du plan régional d'élimination des déchets industriels spéciaux. La complexité du travail à mener dans ce dernier cadre, notamment pour ouvrir un nouveau centre de stockage de déchets industriels ultimes devrait cependant conduire à privilégier la création d'une commission distincte pour les sites et sols industriels pollués. Certains secrétariats permanents pour la prévention des pollutions industrielles (S.P.P.I.) pourraient alors s'avérer des structures d'accueil appropriées.

Aussi je demande aux préfets de région de bien vouloir consulter dès aujourd'hui leurs collègues de département et l'ensemble des partenaires concernés sur la structure qui leur semble la plus appropriée pour traiter de ces questions. L'interlocuteur naturel de l'Etat dans ce domaine doit être la région et je demande ainsi aux préfets de région de consulter de manière privilégiée les présidents des conseils régionaux sur les modalités de création d'une structure de concertation et d'information régionale sur les sites et sols pollués. Il appartient aux préfets de région de coordonner les actions de l'Etat dans ce domaine.

Ces structures permettront d'engager dès à présent les consultations préalables au lancement d'études historiques régionales. Celles-ci doivent en effet reposer sur des actions concertées des industriels et de leurs fédérations professionnelles, des élus, de l'administration et des associations. La réalisation d'une telle étude pourra donc utilement regrouper l'ensemble des partenaires locaux concernés autour de la direction régionale de l'industrie, de la recherche et de l'environnement et de la délégation régionale de l'agence de l'environnement et de la maîtrise de l'énergie. Cette même structure sera enfin particulièrement appropriée pour consigner les informations issues de l'ensemble des sources de renseignement disponibles (inspection des installations classées, industriels, témoignages, etc.).

Je demande aux préfets de région de m'informer avant le 1er mars 1994 des dispositions qu'ils auront retenues pour instituer cette nécessaire concertation à l'échelle régionale sur le traitement des sites et des sols pollués. Il conviendra notamment d'étudier le plus rapidement possible, et dans le cadre d'action collective, la réalisation d'études historiques régionales sur les sites potentiellement pollués par les activités aujourd'hui disparues.

4) Le fichier national des sites et sols industriels pollués.

Le recensement des sites potentiellement pollués devra rester du ressort de l'inspection des installations classées à l'échelon local. Il me semble cependant indispensable de disposer d'un véritable inventaire national des sites effectivement pollués, où des actions de dépollution doivent être entreprises, éventuellement avec le concours de la puissance publique si aucun responsable solvable ne peut être identifié. L'existence de certains sites devra par ailleurs être conservée en mémoire, notamment si leur état conduit à une restriction de l'usage ultérieur du sol et du sous-sol.

.../...

La direction de la prévention des pollutions et des risques constituera donc un fichier national des sites et sols pollués dont un inventaire actualisé sera périodiquement publié. Après un recensement initial des sites connus, toute nouvelle découverte d'un site effectivement pollué, c'est-à-dire dont l'évaluation simplifiée des risques conduira à prescrire une étude plus approfondie, donnera lieu à une inscription sur ce fichier. Lorsque les actions de dépollutions pratiquées permettront un usage banalisé du site, il sera rayé de l'inventaire national.

III) Qualification initiale de l'inventaire des sites connus.

Dans la phase initiale de préparation des éléments techniques et administratifs de cette nouvelle politique, il ne sera pas immédiatement possible de réaliser une évaluation simplifiée et une hiérarchisation des sites connus ou qui seront découverts prochainement. La mise au point d'une méthodologie nationale harmonisée d'évaluation simplifiée des risques et de hiérarchisation des sites ne pourra en effet pas aboutir avant mi 1994. Il convient en effet de tester la pertinence d'une telle méthode avant de la généraliser.

Il est cependant dès à présent souhaitable de rassembler les informations objectives disponibles sur chaque site déjà connu. Je vous adresserai donc très prochainement un formulaire de recensement des sites pollués connus et de qualification des informations disponibles sur chacun d'entre eux. Il sera accompagné d'un mode d'emploi destiné à harmoniser le recueil des informations aujourd'hui disponibles sur ces sites. Il conviendra d'étudier avec soin les sites recensés par le passé et qui ont déjà pu faire l'objet de traitement plus ou moins poussés. J'attacherai en effet une importance toute particulière à ce que l'existence de ces sites et les restrictions d'usage qui en découlent éventuellement ne soient pas progressivement oubliées.

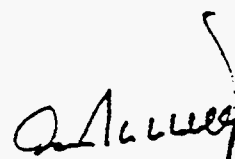
Le fichier national à venir sera donc initialement renseigné par ce recueil de données sur les sites déjà connus et complété ultérieurement. Le regroupement en une même base de données des informations objectives précises sur les sites connus et des résultats des campagnes expérimentales de hiérarchisation permettra en effet d'affiner la méthode utilisée et d'établir une échelle de gravité de la pollution des sites. Les sites découverts ensuite, à l'issue de recherches historiques ou de la réalisation d'études des sols, seront enregistrés au fichier national avec une classification immédiate sur l'échelle de gravité des sites pollués.

Vous le comprenez : l'objectif est ambitieux et la tâche importante. La pollution des sols et des eaux souterraines peut conduire à des risques réels pour la santé humaine. C'est aujourd'hui bien souvent la pollution d'une nappe exploitée voire d'un captage qui conduit à la découverte d'un site pollué. Les risques et les coûts de telles découvertes tardives sont considérables : nouvelle source d'alimentation en eau potable, dérivation de cours d'eau, gel de milliers d'hectares, etc. L'identification et le traitement des cas les plus menaçants constitueront ainsi de véritables actions de prévention.

.../...

Je ne doute pas des efforts que vos services et votre inspection des installations classées entreprendront dans le cadre de la mise en place progressive de cette nouvelle politique de réhabilitation des sites et sols pollués que je souhaite initier.

Je vous demande dans un premier temps de bien vouloir informer le conseil départemental d'hygiène de votre département de ces orientations générales et d'entreprendre sans tarder les consultations nécessaires à la constitution de la structure d'information et de concertation sur les sites et sols pollués adaptée au contexte local de votre région. Comme je vous l'ai précisé plus haut je vous demanderai ensuite de consigner les informations disponibles sur les sites actuellement connus. Chaque étape de la mise en place de cette nouvelle politique fera enfin l'objet d'instructions spécifiques détaillées. Vous voudrez bien me tenir précisément informé des conditions de leur mise en oeuvre et des difficultés éventuelles que vous pourriez rencontrer dans leur application.



Michel BARNIER

ANNEXE 3

DECRET N° 77-1133 DU 21 SEPTEMBRE 1977

**pris pour l'application de la loi n° 76-663 du 19 juillet 1976
relative aux installations classées pour la protection de
l'environnement**

Le Premier ministre,

Sur le rapport du garde des sceaux, ministre de la justice, du ministre de l'intérieur, du ministre de la défense, du ministre de la culture et de l'environnement, du ministre délégué à l'économie et aux finances, du ministre de l'équipement et de l'aménagement du territoire, du ministre de l'agriculture, du ministre de l'industrie, du commerce et de l'artisanat, du ministre du travail et du ministre de la santé et de la sécurité sociale,

Vu la directive 85/337/CEE du conseil des communautés européennes en date du 27 juin 1985 concernant l'évaluation des incidences de certains projets publics et privés sur l'environnement ;

Vu le code pénal, et notamment son article R. 25 ;

Vu la loi n° 76-663 du 19 juillet 1976 relative aux installations classées pour la protection de l'environnement ;

Vu la loi n° 61-842 du 2 août 1961 relative à la lutte contre les pollutions atmosphériques et les odeurs ;

Vu la loi n° 75-633 du 15 juillet 1975 relative à l'élimination des déchets et à la récupération des matériaux ;

Vu la loi n° 76-629 du 10 juillet 1976 relative à la protection de la nature, et notamment son article 2 ;

Vu la loi n° 83-630 du 12 juillet 1983 modifiée relative à la démocratisation des enquêtes publiques et à la protection de l'environnement ;

Vu la loi n° 92-3 du 3 janvier 1992 sur l'eau, notamment ses articles 10 et 11 ;

Vu la loi n° 92-1443 du 31 décembre 1992 portant réforme du régime pétrolier ;

Vu la loi n° 93-24 du 8 janvier 1993 sur la protection et la mise en valeur des paysages et modifiant certaines dispositions législatives en matière d'enquêtes publiques, notamment son article 21 ;

Vu le décret du 1er février 1925 instituant la commission interministérielle des dépôts d'hydrocarbures ;

Vu le décret n° 53-578 du 20 mai 1953 modifié portant règlement d'administration publique pour l'application des articles 5 et 7 de la loi du 19 décembre 1917 modifiée relative aux établissements dangereux, insalubres ou incommodes ;

Vu le décret n° 72-1240 du 29 décembre 1972 fixant les modalités de recouvrement de la redevance annuelle applicable à certains établissements classés comme dangereux, insalubres ou incommodes et le décret n° 75-1370 du 31 décembre 1975 fixant la liste des activités soumises à la perception de la redevance annuelle applicable à certains établissements classés comme dangereux, insalubres ou incommodes ;

Vu le décret n° 73-361 du 23 mars 1973 fixant les modalités de recouvrement de la taxe unique applicable aux établissements classés comme dangereux, insalubres ou incommodes ;

Le Conseil d'Etat (section des travaux publics) entendu,

Décète :

Article 29

Les prescriptions générales applicables aux installations soumises à déclaration font l'objet d'arrêtés préfectoraux pris sous l'autorité du ministre chargé des installations classées, après avis du conseil départemental d'hygiène. Les modifications et adaptations prévues à l'article 10 (2^e alinéa) de la loi du 19 juillet 1976 font l'objet d'arrêtés préfectoraux pris sur le rapport de l'inspection des installations classées et après avis du conseil départemental d'hygiène.

Une ampliation des arrêtés prévus à l'alinéa précédent est adressée à chacun des maires du département et un extrait en est publié dans deux journaux locaux ou régionaux diffusés dans tout le département.

Article 30

Si le déclarant veut obtenir la modification de certaines des prescriptions applicables à l'installation, il adresse une demande au préfet, qui statue par arrêté.

Les arrêtés pris en application de l'alinéa précédent ainsi que ceux qui sont prévus aux articles 10 (3^e alinéa) et 11 de la loi du 19 juillet 1976 sont pris sur le rapport de l'inspection des installations classées et après avis du conseil départemental d'hygiène. Ils font l'objet des mesures de publicité prévues à l'article 27.

Le déclarant a la faculté de se faire entendre par le conseil ou de désigner à cet effet un mandataire. Il doit être informé au moins huit jours à l'avance de la date et du lieu de la réunion du conseil et reçoit simultanément un exemplaire des propositions de l'inspection des installations classées.

Le projet d'arrêté est porté par le préfet à la connaissance du déclarant, auquel un délai de quinze jours est accordé pour présenter éventuellement ses observations par écrit au préfet, directement ou par mandataire.

Article 31

Toute modification apportée par le déclarant à l'installation, à son mode d'exploitation ou à son voisinage, entraînant un changement notable des éléments du dossier de déclaration initiale doit être portée avant sa réalisation à la connaissance du préfet, qui peut exiger une nouvelle déclaration.

Tout transfert d'une installation soumise à déclaration sur un autre emplacement nécessite une nouvelle déclaration.

Les déclarations prévues aux alinéas précédents sont soumises aux mêmes formalités que les déclarations primitives.

Article 32

La déclaration cesse de produire effet lorsque l'installation n'a pas été mise en service dans le délai de trois ans ou lorsque l'exploitation a été interrompue pendant plus de deux années consécutives, sauf le cas de force majeure.

TITRE III

- DISPOSITIONS COMMUNES A TOUTES LES INSTALLATIONS CLASSEES

Article 33

(Décret n° 94-484 du 9 juin 1994, art. 29 - entrera en vigueur six mois après la publication du décret)

"Le directeur régional de l'industrie, de la recherche et de l'environnement est chargé, sous l'autorité du préfet du département, de l'organisation de l'inspection des installations classées.

Les inspecteurs des installations classées sont des cadres techniques désignés par le préfet sur proposition du directeur régional de l'industrie, de la recherche et de l'environnement et relevant :

- a) De la direction régionale de l'industrie, de la recherche et de l'environnement ;
- b) Des services vétérinaires de la direction départementale de l'agriculture et de la forêt ;
- c) De la direction départementale des affaires sanitaires et sociales.

Le préfet peut en outre désigner comme inspecteurs des installations classées, sur proposition du directeur régional de l'industrie, de la recherche et de l'environnement, des cadres techniques appartenant à d'autres services de l'Etat, à la condition qu'au sein de ces services ces agents ne soient pas affectés dans des structures où peuvent être effectuées des missions rémunérées directement ou indirectement par les propriétaires ou les exploitants d'installations classées.

A Paris et dans les départements des Hauts-de-Seine, de la Seine-Saint-Denis et du Val-de-Marne, les inspecteurs des installations classées peuvent être désignés parmi les cadres techniques du service des installations classées de la préfecture de police.

Les inspecteurs des installations classées qui sont également inspecteurs des installations nucléaires de base, sont désignés conjointement par le ministre chargé des installations classées et par le ministre chargé de la sûreté nucléaire, sur proposition du directeur de la sûreté des installations nucléaires. Ils sont choisis parmi les cadres techniques définis ci-dessus ou parmi les cadres techniques placés sous l'autorité du ministre chargé de la sûreté nucléaire. Outre leurs fonctions d'inspecteur des installations nucléaires de base, ils sont chargés de la surveillance, sur le territoire national, des installations classées situées à l'intérieur du périmètre des installations nucléaires de base."

Article 34

(Décret n° 94-484 du 9 juin 1994, art. 30)

"Sauf dans le cas prévu à l'article 23-2, lorsqu'une installation classée change d'exploitant, le nouvel exploitant en fait la déclaration au préfet dans le mois qui suit la prise en charge de l'exploitation. Cette déclaration mentionne, s'il s'agit d'une personne physique, les nom, prénoms et domicile du nouvel exploitant et, s'il s'agit d'une personne morale, sa dénomination ou sa raison sociale, sa forme juridique, l'adresse de son siège social ainsi que la qualité du signataire de la déclaration. Il est délivré un récépissé sans frais de cette déclaration."

Article 34-1

(Décret n° 94-484 du 9 juin 1994, art. 31)

"I - Lorsqu'une installation classée est mise à l'arrêt définitif, son exploitant remet son site dans un état tel qu'il ne s'y manifeste aucun des dangers ou inconvénients mentionnés à l'article 1er de la loi du 19 juillet 1976 susvisée.

Le préfet peut à tout moment imposer à l'exploitant les prescriptions relatives à la remise en état du site, par arrêté pris dans les formes prévues à l'article 18 ci-dessus.

II - L'exploitant qui met à l'arrêt définitif son installation notifie au préfet la date de cet arrêt au moins un mois avant celle-ci.

Toutefois, dans le cas des installations autorisées pour une durée limitée définies à l'article 17-1, cette notification est adressée au préfet six mois au moins avant la date d'expiration de l'autorisation.

III - Dans le cas des installations soumises à autorisation, il est joint à la notification un dossier comprenant le plan à jour des terrains d'emprise de l'installation, ainsi qu'un mémoire sur l'état du site. Le mémoire précise les mesures prises ou prévues pour assurer la protection des intérêts visés à l'article 1er de la loi du 19 juillet 1976 susvisée, et pouvant comporter notamment :

- 1° L'évacuation ou l'élimination des produits dangereux, ainsi que des déchets présents sur le site ;
- 2° La dépollution des sols et des eaux souterraines éventuellement pollués ;
- 3° L'insertion du site de l'installation dans son environnement ;
- 4° En cas de besoin, la surveillance à exercer de l'impact de l'installation sur son environnement.

Le préfet consulte le maire de la commune concernée. En l'absence d'observations dans le délai d'un mois, son avis est réputé favorable.

Lorsque les travaux prévus pour la cessation d'activité par l'arrêté d'autorisation ou par un arrêté complémentaire sont réalisés, l'exploitant en informe le préfet.

L'inspecteur des installations classées constate la conformité des travaux par un procès-verbal de récolement qu'il transmet au préfet."

IV - Dans le cas des installations soumises à déclaration, la notification doit indiquer les mesures de remise en état du site prises ou envisagées. Il est donné récépissé sans frais de cette notification.

Article 35

(Décret n° 94-484 du 9 juin 1994, art. 32) "Pour les installations existantes faisant l'objet des dispositions de l'article 16 de la loi du 19 juillet 1976, l'exploitant doit fournir au préfet les indications suivantes :"

- 1° S'il s'agit d'une personne physique, ses nom, prénoms et domicile ; s'il s'agit d'une personne morale, sa dénomination ou sa raison sociale, sa forme juridique et l'adresse de son siège social, ainsi que la qualité du signataire de la déclaration ;
- 2° L'emplacement de l'installation ;
- 3° La nature et le volume des activités exercées ainsi que la ou les rubriques de la nomenclature dans lesquelles l'installation doit être rangée.

Article 36 (abrogé par l'article 33 du décret n° 94-484 du 9 juin 1994)

Article 37

(Décret n° 94-484 du 9 juin 1994, art. 34) "Dans le cas prévu à l'article 35, le préfet peut exiger la production des pièces mentionnées aux articles 3 ou 25 du présent décret."

Le préfet peut prescrire, dans les conditions prévues aux articles 18 et 30 ci-dessus, les mesures propres à sauvegarder les intérêts mentionnés à l'article 1er de la loi du 19 juillet 1976.

Ces mesures ne peuvent entraîner de modifications importantes touchant le gros oeuvre de l'installation ou des changements considérables dans son mode d'exploitation.

Les dispositions de l'alinéa précédent cessent d'être applicables si l'exploitation a été interrompue pendant deux années consécutives, sauf le cas de force majeure, ou si l'installation se trouve dans les cas prévus aux articles 20, 31 ou 39 du présent décret.

Article 38

L'exploitant d'une installation soumise à autorisation ou à déclaration est tenu à déclarer (Décret n° 86-1289 du 19 décembre 1986, art. 5) "dans les meilleurs délais" à l'inspection des installations classées les accidents ou incidents survenus du fait du fonctionnement de cette installation qui sont de nature à porter atteinte aux intérêts mentionnés à l'article 1er de la loi du 19 juillet 1976.

Article 39

Le préfet peut décider que la remise en service d'une installation momentanément hors d'usage par suite d'un incendie, d'une explosion ou de tout autre accident résultant de l'exploitation sera subordonnée, selon le cas, à une nouvelle autorisation ou à une nouvelle déclaration.

Article 40

Par arrêté pris après avis du Conseil supérieur des installations classées, le ministre chargé des installations classées peut procéder à l'agrément de laboratoires ou d'organismes en vue de la réalisation des analyses et contrôles qui peuvent être prescrits en application du présent décret et mis à la charge des exploitants.

(Décret n° 94-484 du 9 juin 1994, art. 35)

"Des arrêtés pris dans les mêmes formes fixent les conditions dans lesquelles doivent être présentées les demandes d'agrément."

Article 41

Lorsqu'une installation a fait l'objet d'une mesure de suppression, de fermeture ou de suspension, l'exploitant est tenu de prendre toutes dispositions nécessaires pour la surveillance de l'installation, la conservation des stocks, l'enlèvement des matières dangereuses, périssables ou gênantes ainsi que des animaux se trouvant dans l'installation.

A défaut pour l'exploitant de prendre les dispositions nécessaires, il pourra être fait application des procédures prévues à l'article 23 de la loi du 19 juillet 1976.

(Décret n° 80-813 du 15 octobre 1980, art. 8.) "En cas d'application de l'article 15 de la loi du 19 juillet 1976 à une installation publique ou privée travaillant pour les armées, le projet de décret prévu audit article est soumis pour avis au ministre de la défense, avant son examen par le Conseil supérieur des installations classées."

Article 42

Lorsqu'une installation doit être implantée sur le territoire de plusieurs départements, la demande ou la déclaration prévue au présent décret est adressée aux préfets de ces départements, qui procèdent à l'instruction dans les conditions prévues au présent décret ; les décisions sont prises par arrêté conjoint de ces préfets, sauf dans le cas prévu à l'article 16.

Article 43

(Décret n° 86-1289 du 19 décembre 1986, art. 6.) "Sera puni de la peine d'amende prévue pour les contraventions de la 5ème classe :

1° Quiconque aura exploité une installation soumise à déclaration sans avoir fait la déclaration prévue à l'article 3 de la loi du 19 juillet 1976 ;

2° Quiconque n'aura pas pris les mesures imposées en vertu de l'article 26 de la loi du 19 juillet 1976 sans qu'ait été pris, en raison de l'urgence, l'avis du maire ou de la commission départementale consultative compétente ;

3° Quiconque aura exploité une installation soumise à autorisation sans satisfaire aux prescriptions prévues à l'article 7 de la loi du 19 juillet 1976 et aux articles 17 et 18 du présent décret ;"

4° Quiconque aura exploité une installation soumise à déclaration sans satisfaire aux prescriptions générales ou particulières prévues aux articles 28, 29 et 30 du présent décret

5° Quiconque aura omis de procéder aux notifications prévues aux articles 20 (1er alinéa) et 31 (1er alinéa) du présent décret

(Décret n° 94-484 du 9 juin 1994, art. 36)

"6° Quiconque aura omis de faire la déclaration ou la notification prévue aux articles 34 et 34-1 du présent décret ;"

(Décret n° 94-484 du 9 juin 1994, art. 37)

"7° Quiconque, après cessation de l'exploitation d'une installation classée, n'aura pas respecté les prescriptions de l'arrêté préfectoral pris en application de l'article 34-1 du présent décret."

8° Quiconque aura omis de fournir les informations prévues aux articles 35 et 36 du présent décret ;

9° Quiconque aura omis d'adresser la déclaration prévue à l'article 38 du présent décret ;

(Décret n° 94-484 du 9 juin 1994, art. 38)

"10° Quiconque aura mis en oeuvre des substances, des produits, des organismes ou des procédés de fabrication soumis à agrément en vertu du quatrième alinéa de l'article 4 de la loi du 19 juillet 1976 susvisée sans avoir obtenu l'agrément ou sans avoir respecté les conditions prévues par cet agrément."

TITRE III bis

(Décret n° 94-484 du 9 juin 1994, art. 39)

"Dispositions relatives aux opérations soumises à l'agrément institué par le quatrième alinéa de l'article 4 de la loi du 19 juillet 1976 modifiée susvisée."

Article 43-1

I - La mise en oeuvre d'organismes génétiquement modifiés dans une installation figurant à la nomenclature des installations classées est soumise à agrément.

II - Un arrêté du ministre chargé des établissements classés fixe la composition du dossier à fournir à l'appui de la demande.

L'agrément est délivré par l'autorité compétente pour délivrer l'autorisation ou donner récépissé.

Il ne peut être accordé que de manière expresse. Le délai maximum de délivrance de l'agrément, qui court à partir de la date de notification de l'accusé de réception que l'autorité compétente adresse à l'exploitant lorsque le dossier est complet, est de trois mois. Ce délai peut être prolongé par une décision motivée lorsque des consultations sont nécessaires.

Les délais prévus ci-dessus courent à partir de l'accusé de réception que le préfet adresse à l'exploitant lorsque le dossier est complet.

III - La demande d'agrément pour la mise en oeuvre d'organismes génétiquement modifiés dans une installation classée est transmise à la commission de génie génétique, notamment pour déterminer le classement des organismes mis en oeuvre. Cet avis peut ne pas être demandé dans le cas des opérations relevant du ministre de la défense. L'autorité compétente dispose d'un délai de huit jours à compter de la date de l'accusé de réception du dossier complet pour transmettre la demande d'avis à la commission de génie génétique.

La commission dispose d'un délai de quarante-cinq jours pour formuler son avis. Si elle ne s'est pas prononcée dans ce délai, son avis est réputé favorable.

IV - La commission de génie génétique est consultée par le ministre chargé des installations classées sur les règles générales applicables aux installations classées figurant à la rubrique 2680 de la nomenclature, fixées en application des articles 7 et 10-1 de la loi du 19 juillet 1976. Elle dispose d'un délai de deux mois pour formuler son avis. Si elle ne s'est pas prononcée dans ce délai, son avis est réputé favorable."

TITRE IV

DISPOSITIONS TRANSITOIRES

Article 44

A titre transitoire, la nomenclature des établissements dangereux, insalubres ou incommodes résultant du décret du 20 mai 1953 modifié constitue la nomenclature des installations classées pour la protection de l'environnement prévue à l'article 2 de la loi du 19 juillet 1976.

ANNEXE 4

conseil supérieur des installations classées. Ce décret soumet les installations à autorisation ou à déclaration suivant la gravité des dangers ou des inconvénients que peut présenter leur exploitation.

Art. 3. - Sont soumises à autorisation préfectorale les installations qui présentent de graves dangers ou inconvénients pour les intérêts visés à l'article 1^{er}.

L'autorisation ne peut être accordée que si ces dangers ou inconvénients peuvent être prévenus par des mesures que spécifie l'arrêté préfectoral.

(L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 2-II) La délivrance de l'autorisation, pour ces installations, peut être subordonnée notamment à leur éloignement des habitations, immeubles habituellement occupés par des tiers, établissements recevant du public, cours d'eau, voies de communication, captages d'eau, ou des zones destinées à l'habitation par des documents d'urbanisme opposables aux tiers. « Elle prend en compte les capacités techniques et financières dont dispose le demandeur, à même de lui permettre de conduire son projet dans le respect des intérêts visés à l'article 1^{er}. »

Sont soumises à déclaration les installations qui, ne présentant pas de tels dangers ou inconvénients, doivent néanmoins respecter les prescriptions générales édictées par le préfet en vue d'assurer dans le département la protection des intérêts visés à l'article 1^{er}.

Art. 3-1 (L. n° 91-1381 du 30 déc. 1991, art. 2). - Le stockage souterrain en couches géologiques profondes de produits dangereux, de quelque nature qu'ils soient, est soumis à autorisation administrative. Cette autorisation ne peut être accordée ou prolongée que pour une durée limitée et peut en conséquence prévoir les conditions de réversibilité du stockage. Les produits doivent être retirés à l'expiration de l'autorisation.

(L. n° 92-646 du 13 juill. 1992, art. 6-1) « A l'issue d'une période de fonctionnement autorisé de vingt-cinq ans au moins, l'autorisation peut être prolongée pour une durée illimitée, sur la base d'un bilan écologique comprenant une étude d'impact et l'exposé des solutions alternatives au maintien du stockage et de leurs conséquences. Le renouvellement s'accompagne d'une nouvelle évaluation des garanties financières prévues à l'article 7-1 de la loi n° 75-633 du 15 juillet 1975 relative à l'élimination des déchets et à la récupération des matériaux ou à l'article 53 de la loi n° 87-565 du 22 juillet 1987 relative à l'organisation de la sécurité civile, à la protection de la forêt contre l'incendie et à la prévention des risques majeurs. »

Pour les stockages souterrains de déchets ultimes, l'Agence de l'environnement et de la maîtrise de l'énergie peut conclure avec l'exploitant, avant l'octroi de l'autorisation visée au premier alinéa, une convention qui détermine les conditions techniques et financières de l'engagement et de la poursuite de l'exploitation, compte tenu de l'éventualité du refus de sa prolongation. Cette convention est soumise pour avis au représentant de l'État.

Les dispositions des deux alinéas précédents ne s'appliquent pas au stockage souterrain de déchets radioactifs. »

Art. 4. - L'exploitant est tenu d'adresser sa demande d'autorisation ou sa déclaration en même temps que sa demande de permis de construire.

Il doit renouveler sa demande d'autorisation ou sa déclaration soit en cas de transfert, soit en cas d'extension ou de transformation de ses installations, ou de changement dans ses procédés de fabrication, entraînant des dangers ou inconvénients mentionnés à l'article 1^{er}.

(L. n° 92-654 du 13 juill. 1992, art. 7-1) La mise en œuvre, dans certaines catégories d'installations classées, de substances, de produits, d'organismes ou de procédés de fabrication peut, pour l'application de directives communautaires relatives à la protection de l'environnement, être subordonnée à un agrément. Un décret en Conseil d'État fixe les conditions d'application du présent alinéa et notamment les conditions de délivrance de l'agrément ainsi que les délais dans lesquels il est accordé, ou à l'expiration desquels il est réputé accordé.

(L. n° 92-646 du 13 juill. 1992, art. 6-II) Un décret en Conseil d'État définit les cas et conditions dans lesquels le changement d'exploitant est soumis à une autorisation préfectorale délivrée en considération des capacités techniques et financières nécessaires pour mettre en œuvre l'activité ou remettre en état le site dans le respect de la protection des intérêts visés à l'article 1^{er}.

Art. 4-1 (L. n° 92-646 du 13 juill. 1992, art. 4-III). - Les dispositions prises en application de la présente loi doivent, lorsqu'elles intéressent les déchets, prendre en compte les objectifs de la loi n° 75-633 du 15 juillet 1975 précitée.

Les décisions relatives aux installations d'élimination des déchets prises au titre de la présente loi doivent comporter les mesures prévues aux articles 7 et 7-1 de la loi n° 75-633 du 15 juillet 1975 précitée.

Art. 4-2 (L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 2-1). - La mise en activité, tant après l'autorisation initiale qu'après une autorisation de changement d'exploitant, des installations définies par décret en Conseil d'État présentant des risques importants de pollution ou d'accident, des carrières et des installations de stockage de déchets est subordonnée à la constitution de garanties financières.

Ces garanties sont destinées à assurer, suivant la nature des dangers ou inconvénients de chaque catégorie d'installations, la surveillance du site et le maintien en sécurité de l'installation, les interventions éventuelles en cas d'accident avant ou après la fermeture, et la remise en état après fermeture. Elles ne couvrent pas les indemnités dues par l'exploitant aux tiers qui pourraient subir un préjudice par fait de pollution ou d'accident causé par l'installation.

Un décret en Conseil d'État détermine la nature des garanties et les règles de fixation de leur montant.

Sans préjudice de la procédure d'amende administrative prévue à l'article 7-1 de la loi n° 75-633 du 15 juillet 1975 relative à l'élimination des déchets et à la récupération des matériaux pour les installations de stockage de déchets, les manquements aux obligations de garanties financières donnent lieu à l'application de la procédure de consignation prévue à l'article 23 de la présente loi, indépendamment des poursuites pénales qui peuvent être exercées.

**LOI N° 76-663
DU 19 JUILLET 1976**
relative aux installations classées
pour la protection de l'environnement
(JO du 20 juillet 1976)

**TITRE PREMIER
DISPOSITIONS GÉNÉRALES**

Article premier (L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 1^{er}-I). - Sont soumis aux dispositions de la présente loi les usines, ateliers, dépôts, chantiers et d'une manière générale les installations exploitées ou détenues par toute personne physique ou morale, publique ou privée, qui peuvent présenter des dangers ou des inconvénients soit pour la commodité du voisinage, soit pour la santé, la sécurité, la salubrité publiques, soit pour l'agriculture, soit pour la protection de la nature et de l'environnement, soit pour la conservation des sites et des monuments.

(L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 1^{er}-II) Les dispositions de la présente loi sont également applicables aux exploitations de carrières au sens des articles 1^{er} et 4 du Code minier.

Art. 2. - Les installations visées à l'article 1^{er} sont définies dans la nomenclature des installations classées établie par décret en Conseil d'État, pris sur le rapport du ministre chargé des Installations classées, après avis du

tuer une partie du prix : il peut aussi demander la remise en état du site aux frais du vendeur, lorsque le coût de cette remise en état ne paraît pas disproportionné par rapport au prix de vente.

Art. 9 (L. n° 90-557 du 2 juill. 1990, art. 6). - Dans les communes comportant une aire de production de vins d'appellation d'origine, l'avis du ministre de l'Agriculture doit être demandé en vue de l'autorisation prévue au premier alinéa de l'article 4 ci-dessus. Cet avis est donné après consultation, le cas échéant, de l'institut national des appellations d'origine.

Le ministre de l'Agriculture est en outre consulté, sur sa demande, lorsqu'un établissement soumis à l'autorisation visée ci-dessus doit être ouvert dans une commune limitrophe d'une commune comportant une aire de production de vins d'appellation d'origine.

« Le ministre de l'Agriculture et de la Forêt est également consulté, sur sa demande, lorsqu'un établissement soumis à l'autorisation visée ci-dessus doit être ouvert dans une commune ou dans une commune limitrophe d'une commune comportant une aire de production d'un produit d'appellation d'origine contrôlée autre que le vin. »

Le ministre de l'Agriculture dispose d'un délai de trois mois pour donner son avis. Ce délai court à partir de la date à laquelle il a été saisi par le préfet du dossier auquel est joint son avis.

TITRE III

DISPOSITIONS APPLICABLES AUX INSTALLATIONS SOUMISES A DÉCLARATION

Art. 10 (L. n° 90-85 du 23 janv. 1990, art. 11-II et L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 3-II). - Les prescriptions générales prévues à l'article 3, dernier alinéa, sont édictées par arrêtés préfectoraux, pris après avis « de la commission départementale consultative compétente » et, pour les ateliers hors sol, de la commission départementale des structures agricoles. Elles s'appliquent automatiquement à toute installation nouvelle ou soumise à nouvelle déclaration.

Les modifications ultérieures de ces prescriptions générales peuvent être rendues applicables aux installations existantes selon les modalités et selon les délais prévus dans l'arrêté préfectoral qui fixe également les conditions dans lesquelles les prescriptions générales peuvent être adaptées aux circonstances locales.

Les établissements soumis à déclaration sous le régime de la loi du 19 décembre 1917 et ayant obtenu, en vertu de l'article 19, alinéa 1^{er} ou 4 de ladite loi, la suppression ou l'atténuation d'une ou plusieurs prescriptions résultant d'arrêtés préfectoraux, conservent le bénéfice de ces dérogations. Il peut toutefois y être mis fin par arrêté préfectoral pris après avis « de la commission départementale consultative compétente », selon les modalités et dans le délai fixés par ledit arrêté.

Art. 10-1 (L. n° 92-654 du 13 juill. 1992, art. 7-II). - Pour la protection des intérêts mentionnés à l'article 1^{er} ci-dessus, le ministre chargé des installations classées peut fixer par arrêté, après consultation des ministres intéressés et du Conseil supérieur des installations classées, les prescriptions générales applicables à certaines catégories d'installations soumises à déclaration. Ces arrêtés

s'imposent de plein droit aux installations nouvelles. Ils précisent, après avis des organisations professionnelles intéressées, les délais et les conditions dans lesquels ils s'appliquent aux installations existantes.

Ils précisent également les conditions dans lesquelles ces prescriptions peuvent être adaptées par arrêté préfectoral aux circonstances locales.

Art. 11 (L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 3-II). - Si les intérêts mentionnés à l'article 1^{er} de la présente loi ne sont pas garantis par l'exécution des prescriptions générales contre les inconvénients inhérents à l'exploitation d'une installation soumise à déclaration, le préfet, éventuellement à la demande des tiers intéressés et après avis « de la commission départementale consultative compétente », peut imposer, par arrêté, toutes prescriptions spéciales nécessaires.

(L. n° 86-2 du 3 janv. 1986, art. 40) « En vue de protéger les intérêts visés à l'article premier, le représentant de l'État peut prescrire la réalisation des évaluations et la mise en œuvre de remèdes que rendent nécessaires soit les conséquences d'un accident ou incident survenu dans l'installation, soit les conséquences entraînées par l'inobservation des conditions imposées en application de la présente loi. Ces mesures sont prescrites par des arrêtés pris, sauf cas d'urgence, après avis « de la commission départementale consultative compétente ».

Art. 12. - Les installations qui, soumises à déclaration en vertu de la présente loi, bénéficiaient d'une autorisation régulière avant la date d'entrée en vigueur de la loi du 19 décembre 1917, sont dispensées de toute déclaration ; elles sont soumises aux dispositions des articles 10 et 11.

TITRE IV

DISPOSITIONS APPLICABLES A TOUTES LES INSTALLATIONS CLASSÉES

Art. 13. - Les personnes chargées de l'inspection des installations classées ou d'expertises sont assermentées et astreintes au secret professionnel dans les conditions et sous les sanctions prévues à l'article 378 du Code pénal et, éventuellement, aux articles 70 et suivants du même code.

Elles peuvent visiter à tout moment les installations soumises à leur surveillance.

Art. 14 (L. n° 92-654 du 13 juill. 1992, art. 7-IV et L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 9). - Les décisions prises en application des articles 3, « 4, 4-2 », 6, 11, 12, 16, 23, 24 et 26 de la présente loi sont soumises à un contentieux de pleine juridiction. Elles peuvent être déférées à la juridiction administrative.

1° Par les demandeurs ou exploitants, dans un délai de deux mois qui commence à courir du jour où lesdits actes leur ont été notifiés ;

2° Par les tiers, personnes physiques ou morales, les communes intéressées ou leurs groupements, en raison des inconvénients ou des dangers que le fonctionnement de l'installation présente pour les intérêts visés à l'article 1^{er}, dans un délai de quatre ans à compter de la publication ou de l'affichage desdits actes, ce délai étant, le cas échéant, prolongé jusqu'à la fin d'une période de deux années suivant la mise en activité de l'installation.

(L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 6) « Les dispositions de l'alinéa précédent ne sont pas applicables aux décisions concernant les

autorisations d'exploitation de carrières pour lesquelles le délai de recours est fixé à six mois à compter de l'achèvement des formalités de publicité de la déclaration de début d'exploitation transmise par l'exploitant au représentant de l'État dans le département. »

Les tiers qui n'ont acquis ou pris à bail des immeubles ou n'ont élevé des constructions dans le voisinage d'une installation classée que postérieurement à l'affichage ou à la publication de l'arrêté autorisant l'ouverture de cette installation ou atténuant les prescriptions primitives ne sont pas recevables à déférer ledit arrêté à la juridiction administrative.

(L. n° 76-1285 du 31 déc. 1976, art. 69) « Le permis de construire et l'acte de vente, à des tiers, de biens fonciers et immobiliers doivent, le cas échéant, mentionner explicitement les servitudes afférentes instituées en application de l'article L. 421-8 du Code de l'urbanisme. »

Art. 15 (L. n° 92-654 du 13 juill. 1992, art. 7-III). - S'il apparaît qu'une installation classée présente, pour les intérêts mentionnés à l'article 1^{er} ci-dessus, des dangers ou des inconvénients qui n'étaient pas connus lors de son autorisation ou de sa déclaration, le ministre chargé des installations classées peut ordonner la suspension de son exploitation pendant le délai nécessaire à la mise en œuvre des mesures propres à faire disparaître ces dangers ou inconvénients. Sauf cas d'urgence, la suspension intervient après avis des organes consultatifs compétents et après que l'exploitant a été mis à même de présenter ses observations.

(L. n° 92-646 du 13 juill. 1992, art. 4-VII) Un décret en Conseil d'État, pris après avis du conseil supérieur des installations classées, peut ordonner « la suppression ou la fermeture » de toute installation, figurant ou non à la nomenclature, qui présente, pour les intérêts mentionnés à l'article 1^{er}, des dangers ou inconvénients tels que les mesures prévues par la présente loi ne puissent les faire disparaître.

Art. 16 (L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 7). - Les installations qui, après avoir été régulièrement mises en service, sont soumises, en vertu d'un décret relatif à la Nomenclature des installations classées, à autorisation ou à déclaration peuvent continuer à fonctionner sans cette autorisation ou déclaration à la seule condition que l'exploitant se soit déjà fait connaître du représentant de l'État dans le département ou se fasse connaître de lui dans l'année suivant la publication du décret.

Les renseignements que l'exploitant doit transmettre au représentant de l'État dans le département ainsi que les mesures que celui-ci peut imposer afin de sauvegarder les intérêts mentionnés à l'article 1^{er} sont précisés par décret en Conseil d'État.

TITRE IV BIS

DISPOSITIONS APPLICABLES AUX EXPLOITATIONS DE CARRIÈRES (L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 8)

Art. 16-1 (L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 8). - Les exploitations de carrières sont soumises à l'autorisation administrative prévue à l'article 3.

L'autorisation administrative visée à l'alinéa précédent ne peut excéder trente ans.

Cette autorisation ne peut excéder quinze ans pour les terrains dont le défrichement est

puni d'une peine d'emprisonnement de ... (1) à ... (1) et d'une amende de ... (1) à ... (1) F, ou de l'une de ces deux peines.

II. Quiconque poursuit l'exploitation d'une installation classée sans se conformer à l'arrêté de mise en demeure d'avoir à respecter, au terme d'un délai fixé, les prescriptions techniques déterminées en application des articles 3; 6, 7, 10 ou 11 sera puni d'une peine d'emprisonnement de ... (1) à ... (1) et d'une amende de ... (1) à ... (1) F, ou de l'une de ces deux peines.

(L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 3-II) Sera puni des mêmes peines quiconque poursuit l'exploitation d'une installation sans se conformer à un arrêté de mise en demeure pris en application de l'article 26 par le représentant de l'État dans le département sur avis du maire et « de la commission départementale consultative compétente ».

(L. n° 92-646 du 13 juill. 1992, art. 12-II) III. Quiconque ne se conforme pas à l'arrêté de mise en demeure de prendre, dans un délai déterminé, les mesures de surveillance ou de remise en état d'une installation ou de son site prescrites en application des articles 6, 7, 10, 11, 15, 24 ou 26 lorsque l'activité a cessé sera puni d'une peine d'emprisonnement de ... (1) à ... (1) et d'une amende de ... (1) à ... (1) F, ou de l'une de ces deux peines.

Art. 21 (L. n° 85-661 du 3 juill. 1985, art. 4). Quiconque met obstacle à l'exercice des fonctions des personnes chargées de l'inspection ou de l'expertise des installations classées sera puni d'une peine d'emprisonnement de ... (1) à ... (1) et d'une amende de ... (1) à ... (1) F, ou de l'une de ces deux peines.

Art. 22. - Les infractions sont constatées par les procès-verbaux des officiers de police judiciaire et des inspecteurs des installations classées. Ces procès-verbaux sont dressés en double exemplaire dont l'un est adressé au préfet et l'autre au procureur de la République. Ils font foi jusqu'à preuve contraire.

Art. 22-1 (L. n° 92-1336 du 16 déc. 1992, art. 307). - Le tribunal peut ordonner l'affichage ou la diffusion intégrale ou partielle de la décision prononcée dans les conditions prévues par l'article 131-35 du Code pénal.

Art. 22-2 (L. n° 85-661 du 3 juill. 1985, art. 6). - Toute association régulièrement déclarée depuis au moins cinq ans à la date des faits, se proposant par ses statuts la sauvegarde de tout ou partie des intérêts visés à l'article premier de la présente loi, peut exercer les droits reconnus à la partie civile en ce qui concerne les faits constituant une infraction aux dispositions de la présente loi ou des règlements et arrêtés pris pour son application et portant un préjudice direct ou indirect aux intérêts collectifs qu'elle a pour objet de défendre.

Art. 22-3 (L. n° 85-661 du 3 juill. 1985, art. 7). - Pendant la durée de l'interdiction d'utiliser l'installation prononcée en application de l'article 19 ci-dessus, l'exploitant est tenu d'assurer à son personnel le paiement des salaires, indemnités et rémunérations de toute nature auxquels celui-ci avait droit jusqu'alors.

Art. 22-4 (L. n° 92-1336 du 16 déc. 1992, art. 308). - Les personnes morales peuvent être déclarées responsables dans les conditions prévues par l'article 121-2 du Code pénal des infractions définies aux articles 18 et 20 de la présente loi.

(1) NDLR: Pour le taux de ces peines, v. au commentaire: Tableau des sanctions pénales, n° 185.

Les peines encourues par les personnes morales sont :

1° L'amende, suivant les modalités prévues par l'article 131-38 du Code pénal ;

2° Les peines mentionnées aux 2°, 3°, 4°, 5°, 6°, 8° et 9° de l'article 131-39 du même code.

L'interdiction mentionnée au 2° de l'article 131-39 du même code porte sur l'activité dans l'exercice ou à l'occasion de l'exercice de laquelle l'infraction a été commise (2).

TITRE VII

SANCTIONS ADMINISTRATIVES

Art. 23 (L. n° 92-654 du 13 juill. 1992, art. 7-V). - Indépendamment des poursuites pénales qui peuvent être exercées et lorsqu'un inspecteur des installations classées ou un expert désigné par le ministre chargé des Installations classées a constaté l'inobservation des conditions imposées à l'exploitant d'une installation classée, le préfet met en demeure ce dernier de satisfaire à ces conditions dans un délai déterminé.

Si, à l'expiration du délai fixé pour l'exécution, l'exploitant n'a pas obtempéré à cette injonction, le préfet peut :

(L. n° 92-654 du 13 juill. 1992, art. 7-V) « a) Obliger l'exploitant à consigner entre les mains d'un comptable public une somme répondant du montant des travaux à réaliser, laquelle sera restituée à l'exploitant au fur et à mesure de l'exécution des mesures prescrites ; il est procédé au recouvrement de cette somme comme en matière de créances étrangères à l'impôt et au domaine. Pour le recouvrement de cette somme, l'État bénéficie d'un privilège de même rang que celui prévu à l'article 1920 du Code général des impôts ;

b) Faire procéder d'office, aux frais de l'exploitant, à l'exécution des mesures prescrites ;

c) (L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 3-II) Suspendre par arrêté, après avis « de la commission départementale consultative compétente », le fonctionnement de l'installation, jusqu'à exécution des conditions imposées et prendre les dispositions provisoires nécessaires.

Les sommes consignées en application des dispositions du a) peuvent être utilisées pour régler les dépenses entraînées par l'exécution d'office des mesures prévues aux b) et c. »

(L. n° 92-654 du 13 juill. 1992, art. 7-VI) Lorsque l'état exécutoire pris en application d'une mesure de consignation ordonnée par l'autorité administrative fait l'objet d'une opposition devant le juge administratif, le président du tribunal administratif ou le magistrat qu'il délègue, statuant en référé, peut, nonobstant cette opposition, à la demande du représentant de l'État ou de toute personne intéressée, décider que le recours ne sera pas suspensif, dès lors que les moyens avancés par l'exploitant ne lui paraissent pas sérieux. Le président du tribunal statue dans les quinze jours de sa saisine.

Art. 24. - Lorsqu'une installation classée est exploitée sans avoir fait l'objet de la déclaration ou de l'autorisation requise par la présente loi, le préfet met l'exploitant en demeure de régulariser sa situation dans un délai déterminé en déposant suivant le cas une déclaration ou une demande d'autorisation. Il peut, par arrêté motivé, suspendre

(2) Entrée en vigueur du nouveau Code pénal le 1^{er} mars 1994 (L. n° 93-913 du 19 juill. 1993).

l'exploitation de l'installation jusqu'au dépôt de la déclaration ou jusqu'à la décision relative à la demande d'autorisation.

Si l'exploitant ne défère pas à la mise en demeure de régulariser sa situation ou si sa demande d'autorisation est rejetée, le préfet peut, en cas de nécessité, ordonner la fermeture ou la suppression de l'installation. Si l'exploitant n'a pas obtempéré dans le délai fixé, le préfet peut faire application des procédures prévues à l'article 23 (3^e et 4^e alinéas).

Le préfet peut faire procéder, par un agent de la force publique, à l'apposition des scellés sur une installation qui est maintenue en fonctionnement soit en infraction à une mesure de suppression, de fermeture ou de suspension prise en application de l'article 15, de l'article 23 ou des deux premiers alinéas du présent article, soit en dépit d'un arrêté de refus d'autorisation.

Art. 25. - Pendant la durée de la suspension de fonctionnement prononcée en application de l'article 23 ou de l'article 24 ci-dessus, l'exploitant est tenu d'assurer à son personnel le paiement des salaires, indemnités et rémunérations de toute nature auxquels il avait droit jusqu'alors.

TITRE VIII

DISPOSITIONS DIVERSES

Art. 26 (L. n° 93-3 du 4 janv. 1993, art. 3-II). - Lorsque l'exploitation d'une installation non comprise dans la nomenclature des installations classées présente des dangers ou des inconvénients graves pour les intérêts mentionnés à l'article 1^{er} de la présente loi, le préfet, après avis - sauf cas d'urgence - du maire et « de la commission départementale consultative compétente », met l'exploitant en demeure de prendre les mesures nécessaires pour faire disparaître les dangers ou les inconvénients dûment constatés. Faute par l'exploitant de se conformer à cette injonction dans le délai imparti, il peut être fait application des mesures prévues à l'article 23 ci-dessus.

Art. 26-1 (L. n° 92-646 du 13 juill. 1992, art. 4-VIII). - Lorsque les personnes morales de droit public interviennent, matériellement ou financièrement, pour atténuer les dommages résultant d'un incident ou d'un accident causé par une installation mentionnée à l'article 2 ou pour éviter l'aggravation de ces dommages, elles ont droit au remboursement, par les personnes responsables de l'incident ou de l'accident, des frais qu'elles ont engagés, sans préjudice de l'indemnisation des autres dommages subis. A ce titre, elles peuvent se constituer partie civile devant les juridictions pénales saisies de poursuites consécutives à l'incident ou à l'accident.

Cette action s'exerce sans préjudice des droits ouverts par l'article 22-2 de la présente loi aux associations répondant aux conditions de cet article.

Art. 27 (L. n° 87-565 du 22 juill. 1987, art. 25). - En ce qui concerne les installations appartenant aux services et organismes dépendant de l'État qui seront inscrites sur une liste établie par décret, les pouvoirs attribués au préfet par la présente loi seront exercés soit par le ministre chargé des Établissements classés, soit par le ministre chargé de la Défense pour les installations qui relèvent de son département.

« Les dispositions des articles 7-1 à 7-4 de la présente loi ne sont pas applicables à celles de ces installations qui relèvent du ministre de la Défense. »

Les pénalités prévues au titre VI sont applicables aux justiciables des juridictions militaires des forces armées conformément au Code de justice militaire et notamment en ses articles 2, 56 et 100.

Art. 28. - Les modalités d'application de la présente loi seront fixées par décrets en Conseil d'État.

Ces décrets détermineront en outre :

1° Pour les installations visées à l'article 27 ci-dessus, les procédures d'enquête et d'autorisation, ainsi que les conditions de surveillance et de contrôle ;

2° Pour les autres services de l'État, ainsi que pour les collectivités locales et les établissements publics à caractère administratif :

a) Les conditions d'application des mesures prévues aux articles 19, 23, 24, 25 et 26 ;

b) Les personnes qui seront regardées comme pénalement responsables des infractions commises.

Art. 29. - Les dispositions de la présente loi entrent en vigueur le 1^{er} janvier 1977. A cette date, sont abrogés la loi modifiée du 19 décembre 1917 relative aux établissements dangereux, insalubres ou incommodes, le décret-loi validé du 1^{er} avril 1939 instaurant une procédure d'urgence pour l'instruction des demandes de construction de dépôts d'hydrocarbures, et les dispositions applicables aux installations soumises à la présente loi et qui lui sont contraires.

La référence à la présente loi est substituée à la référence à la loi du 19 décembre 1917 dans tous les textes contenant une telle disposition.

La présente loi sera exécutée comme loi de l'État.

ANNEXE 5

Nom : MARTHE
Société : B.R.G.M

Type de modèle

Modélisation hydrodynamique et hydrodispersive des écoulements souterrains en milieu poreux.

Modélisation des écoulements en 2D ou en 3D anisotropes horizontal-vertical

Aquifères monocouches ou multicouches

Écoulement en régime permanent ou en régime transitoire

Écoulement en zone saturée ou non saturée

Migration dispersive d'un effluent dans la nappe

"Transport inverse" pour la localisation des sources de pollution

Couplage du transport avec des interactions physico-chimiques entre eau, effluent et matrice poreuse

Écoulements diphasiques, eau-gaz, eau-huile

Objet et champ d'application

Résolution des problèmes d'écoulement dans plusieurs domaines

Gestion des aquifères

Génie civil : assèchement des fouilles - simulation de l'effet hydraulique des parois étanches

Environnement : migration des polluants dans une nappe

Stockage souterrain de déchets : étude du confinement d'un stockage souterrain

Exploitation minière : calcul de débits d'exhaures miniers et des rabattements associés

Méthodes et techniques utilisées

Résolution des équations d'écoulement par une méthode des différences finies

Calcul du transport par différentes méthodes selon l'importance du phénomène de convection ou de diffusion (différences finies - méthode des déplacements aléatoires - méthodes des caractéristiques (méthodes MOC)).

Type de transport

Transport de soluté

Transport polyphasique (eau-gaz, eau-huile)

Données requises

Paramètres hydrauliques du sol

Perméabilité : $K = f(h)$ (paramètres décrivant la fonction)

Coefficient d'emménagement spécifique (courbe caractéristique de l'humidité du sol)

Teneur en eau de saturation (porosité)

Paramètres de représentation du milieu

Données spatiales (cotes du substratum, topographie ...)

Paramètres de discrétisation et de maillage

Paramètres de transport

Coefficient de diffusion

Fonction retard (paramètres du phénomène d'adsorption-désorption)

Terme source

Conditions initiales et aux limites (de l'écoulement et de transport)

Expériences acquises et validation

Modélisation des aquifères

Écoulement à travers la berge d'un cours d'eau

Réalimentation artificielle de nappe

Écoulement dans un aquifère en contact avec la mer

Écoulement en régime transitoire produit par convection naturelle

Limitations

Modèles des paramètres hydrodynamiques (expression unique pour la fonction perméabilité, courbe de rétention)

Validité de la cinétique d'adsorption-désorption

Difficilement utilisable dans les sols fins à faible perméabilité à cause du phénomène de partition de l'eau interstitielle.

Nom : TAFFETAS

Société : BRGM

Type de modèle

Simulation des écoulements et transport de masse (multi-composant) et de chaleur dans un milieu poreux et/ou fracturé (régime permanent ou transitoire)

Représentation du milieu fracturé par le mélange des éléments finis à une dimension (écoulement dans les canaux ou dans les cavités), les éléments à deux dimensions

Etude des écoulement en régime permanent et transitoire dans un domaine bidimensionnel ou tridimensionnel

Etude du couplage hydrodynamique, du transport de masse et du transport de chaleur grâce à la variation de la densité et de viscosité du liquide

Calage automatique des paramètres lors de la simulation par la méthode de Khan-Newton

Objet et champs d'application

Calcul de l'écoulement d'un fluide incompressible monophasé dans la matrice poreuse (problème de filtration) et dans les fractures planes par utilisation de la loi de Darcy linéaire dans le milieu poreux et de la loi linéaire ou non linéaire dans les fractures planes

Simulation du transport des polluants radioactifs et non radioactifs avec prise en compte des réactions d'adsorption grâce à l'utilisation du facteur de retard

Application au calcul des transports dans les couches rocheuses fracturées tridimensionnelles

Gestion des aquifères

évaluation des termes du bilan hydraulique (entrées-sorties, stockage-déstockage)

interaction entre forage

Environnement

modélisation de la migration d'un ou plusieurs polluants dans une nappe

Stockage souterrain des déchets industriels

étude du confinement d'un stockage souterrain

Géothermie

étude des doublets géothermiques

Méthodes et techniques utilisées

Modèle utilisant le code de ROCKFLOW développé par l'Université de Hanovre et mis en forme par le BRGM de 1989 à 1994.

Écoulement

Utilisation des éléments à 1, 2 et 3 dimensions pour la description de l'écoulement de l'eau ou de la solution dans les fractures, la matrice poreuse et la matrice poreuse connectées à des fractures

Écoulement décrit par la loi de Darcy généralisée; utilisation des lois d'écoulement non linéaires dans les fractures

Prise en compte des hétérogénéités et anisotropies dans toutes les directions

Transport de soluté

Description de transport de mono et poly-composants chimiques et/ou de chaleur selon trois méthodes en fonction du problème posé :

Méthode de Taylor-Galerkine avec correction des oscillations liées au phénomène de convection

des particules Méthode des déplacements aléatoires (Random Walk), appelée méthode

précédentes Méthode des caractéristiques (MOC), combinaison des deux méthodes

 Couplage de l'hydrodynamique, du transport de masse et du transfert de chaleur
 Calage automatique des paramètres du modèle selon une variante de la
méthode de Khan-Newton

Données requises

 Matrice des conductivités hydrauliques et des coefficients d'emmagasinement
 Facteur de répartition des fractures, porosité
 Coefficient de diffusion, coefficient de dispersion longitudinale et transversale
 Fonction densité de la solution et fonction viscosité dynamique (nécessité d'un
modèle de fonction)

 Conditions initiales - conditions aux limites sur :
 Flux de liquide, flux de masse (de soluté), flux de chaleur dépendant du
temps

 Concentration
 Données géométriques du milieu et du maillage

Expériences acquises et validation

 Modélisation d'un écoulement en régime transitoire et en régime permanent dans un
milieu poreux à double porosité (Aspö, Suède)

 Etude de la migration des déchets radioactifs dans les roches granitiques (Grimsel,
Suisse ; Finnsjön, Suède ; Neuvy Boin, France)

 Diffusion des matériaux de déchets contaminés en dépôt à Münchehagen, Allemagne ;
à Mol (Belgique)

Limitations et future évolution

 Absence d'interactions physico-chimiques
 Ecoulement multiphasique (fluides non miscibles)
 Transport et échange de soluté entre fluides non miscibles
 Peu adapté à l'étude des transferts dans les sols non saturés

Nom : DEDALE 3D

Société : LHF

Le Laboratoire d'Hydraulique de France (LHF), le Centre de Recherche pour l'Hydraulique et les Structures (CRIS) de l'Ente Nazionale per l'Energia (ENEL) et SOGREAH développent conjointement un système de modélisation tridimensionnel opérationnel pour les eaux souterraines : DEDALE 3D

DEDALE 3D est un outil de simulation des écoulements, du transport et de la dispersion dans les eaux souterraines. Parce qu'il modélise à la fois la zone saturée et la zone non saturée, qu'il tient compte de l'influence sur l'écoulement des variations de la densité de fluide, qu'il permet d'intégrer les hétérogénéités et anisotropies du sol et les singularités hydrauliques (puis tranchées, drains, surfaces de suintement...), le système DEDALE est adapté à toute une gamme de problèmes posés par la gestion ou la protection de la ressource en eau souterraine ou des problèmes de génie civil.

DEDALE est applicable aux études de pollution des eaux souterraines comme :

- la contamination provenant de décharges,
- fuite de stockage souterrain profond ou de surface,
- pollution agricole par pesticides et fertilisants,
- pollution ponctuelle et diffuse,
- périmètre de protection,
- pénétration de solution salée...

ainsi qu'à des problèmes de génie civil :

- excavation drainage,
- tunnels,
- construction de barrage...

Ce système de calcul, débuté en 1992, a déjà fait l'objet de nombreuses validations de terrain et continue à évoluer. DEDALE peut tourner sur des micro-ordinateurs ou sur station.

Formulation des équations de bases

On suppose que la formulation de Darcy est applicable. Par conséquent les équations générales sont donc les suivantes :

- Loi de Darcy avec densité variable du fluide:

$$q = -K(\nabla H + \rho' \gamma) \quad (1)$$

- Conservation de la masse de soluté avec une cinétique de dégradation du premier ordre :

$$R\left(\frac{\partial(\rho\theta C)}{\partial t} - \rho\theta\lambda C\right) + \text{div}\left[\rho C \bar{q} - \rho\theta D \overline{\text{grad}C}\right] = 0 \quad (2)$$

- Loi de variation de la densité du fluide en fonction de la teneur en soluté :

$$\rho = f1(C) \quad (3)$$

- Loi de variation de la conductivité hydraulique en fonction de la teneur en eau:

$$K = f_2(\theta) \quad (4)$$

- Loi de variation de la succion capillaire en fonction de la teneur en eau :

$$h+z=f_3(\theta) \quad (5)$$

avec :

q vecteur vitesse d'écoulement

H charge hydraulique

C concentration du soluté

ρ masse volumique de l'eau avec soluté

θ teneur en eau

K conductivité hydraulique

z côte par rapport à un niveau de référence (croissant vers le bas)

D tenseur de diffusion

R facteur de retard

λ coefficient de dégradation

γ vecteur unilatéral

ρ' densité relative : $\rho' = \frac{\rho}{\rho_0} - 1$

avec ρ_0 densité de l'eau à 10°C.

L'aspect biogéochimique est transcrit par un facteur de retard R et un coefficient de dégradation λ . Cette approche très classique se retrouve dans la plupart des modèles actuels.

Le schéma numérique

La méthode de résolution est fondée sur la méthode des différences finies. Cette méthode qui présente deux niveaux d'itérations a été préférée à la résolution plus classique de l'équation (2) exprimée sous la forme de l'équation de Richards car elle permet une meilleure conservation de la masse d'eau notamment dans la zone saturée. L'équation de transport et de dispersion de soluté est à son tour, discrétisée selon un schéma implicite aux différences finies. Ce schéma a l'avantage de fiabiliser la résolution sans pour autant introduire une forte diffusion numérique.

Les caractéristiques de sol et les conditions limites

Le calcul requiert la connaissance de la succion capillaire et de la conductivité hydraulique en fonction de la teneur en eau. DEDALE permet de définir ces courbes caractéristiques en chaque point du domaine ou dans des zones pour représenter les hétérogénéités du sol. Des courbes différentes peuvent être obtenues dans les directions verticales et horizontales pour tenir compte d'une éventuelle anisotropie.

En ce qui concerne les conditions limites, DEDALE gère toute une gamme de conditions aux limites externes (flux ou charge imposée, concentration imposée ou sortie libre) ou internes (surfaces de suintement, puits de pompage et d'injection, tranchées, drains, parois minces peu imperméables ou imperméables).

Nom : SIMUSCOPP

Société : IFP

Le logiciel SIMUSCOPP est développé dans le cadre du projet EUREKA RESCOPP par l'Institut Français du Pétrole (développement du simulateur réalisé par Beicip-Franlab, validation), BURGEAP (spéciations, validations) et des sociétés italiennes du Groupe ENI (développement des interfaces).

Ce modèle numérique a pour but la simulation :

→ de la migration d'un polluant hydrocarbure ou solvant chlorés de la surface d'un sol au travers de la zone insaturée et saturée, sa dissolution puis son transport dans la nappe (aide à l'analyse des risques),

→ d'un certain nombre de procédés de remédiation : pompage d'huile mobile, venting (froid ou chaud), biodégradation, injection de solutions tensioactives, injection de vapeur.

Ce logiciel peut travailler en 1D, 2D ou 3D en géométrie cartésienne ou radiale, sous maillages locaux, en milieu poreux homogène ou hétérogène (porosités et conductivités hydrauliques).

Les phénomènes physiques pris en compte sont les suivants :

- 1, 2 ou 3 phases présentes dans le système eau-phase organique (huile-air),
- écoulements mono, di ou tri phasiques (loi de Darcy généralisée),
- transfert de constituants entre les phases : dissolution dans l'eau, évaporation en phase gazeuse,
- transport par convection et diffusion/dispersion hydrodynamique,
- facteur retard : rétention de polluants,
- calcul des propriétés thermodynamiques et d'équilibre des phases à l'aide d'équations d'état ou de valeurs tabulées (base de données),
- biodégradation des produits dissous et en phase résiduelle (en cours de développement).

Les conditions initiales et aux limites prises en compte sont les suivantes :

- équilibres gravitaires et capillaires en zone insturée (eau-air ou eau-air-huile), avec ou sans pendage de nappe,
- conditions aux limites :
 - . nappe : surfaces d'injection et productrices d'eau, recharges, pluies, puits d'injection/pompage,
 - . polluant : injection en surface, pompage en zone insaturée ou saturée,
 - . échanges avec la surface du sol : entrées/sorties d'air en fonction des gradients de pression (naturels ou imposés) dans le milieu poreux.

Chaque condition aux limites peut fonctionner en pression ou en débit et supporte la présence d'une ou plusieurs phases (par ex. le pompage d'huile et d'eau dans un puits de rabattement).

Aspects numériques :

- discrétisation spatiale et temporelle par volumes finis,
- schémas explicites ou implicites en temps, linéarisation par méthode de Newton,
- résolution des systèmes linéaires par méthodes de GAUSS ou par méthodes itératives (gradient conjugué préconditionné ou non).

Les validations qui ont été effectuées se sont faites sur colonnes en laboratoires, à l'échelle d'un site pilote (SCERES) ainsi qu'*in situ* sur des problèmes de pompage d'huile mobile, d'opération de venting ou de transferts d'hydrocarbures dans le cadre d'accident.

Le code écrit en FORTRAN 77 fonctionne sur un grand nombre d'ordinateurs : PC, Stations de travail UNIX, ordinateurs centraux vectoriels ou non (CRAY, VAX, CONVEX...).

Formulation des équations de base :

La description mathématique du "flux multiphasique composite" en milieu poreux est basée sur l'équation de conservation de masse pour chaque composé, et de conservation des moments pour chaque phase. L'équation générale de conservation de masse pour un composé i existant dans les trois phases fluides (p) et adsorbé sur la matrice r est :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(\sum_{p=1}^{N_p} \rho_p \cdot S_p \cdot x_i^p \right) + (1-\phi) \cdot \rho_r \cdot q_i^r \right] + Q_i + R_i + \operatorname{div} \left(\sum_{p=1}^{N_p} \rho_p \cdot x_i^p \cdot \alpha_i^p \cdot \bar{u}_p + \bar{J}_i^p \right) = 0$$

avec :

g phase gazeuse
 i composé
 o phase huile
 p phase fluide (g, o, w)
 y phase solide
 w phase aqueuse

\bar{J}_i^p flux de diffusion-dispersion de i dans la phase p , mol.s⁻¹
 P pression de phase, Pa
 q_i^r fraction molaire de i adsorbé sur la phase solide
 Q_i terme source d'injection/production du composé i , mol.s⁻¹
 R_i terme source de biodégradation du composé i , mol.s⁻¹
 S_p saturation de la phase p
 t temps
 \bar{u}_p vélocité de Darcy de la phase p , m.s⁻¹
 x_i^p fraction molaire de i dans la phase p
 α_i^p flux modificateur de i dans la phase i
 ϕ porosité
 ρ_p densité molaire de la phase p , mol.m⁻³

Nom : SUTRA

SUTRA (Saturated, Unsaturated, TRANsport) est un logiciel qui permet de simuler les mouvements d'eau et le transport soit d'énergie thermique soit d'éléments dissous, entraînés par cette eau, dans un milieu poreux continu.

Le modèle est basé sur une méthode numérique hybride combinant les éléments finis et les différences finies pour discrétiser les équations qui gouvernent les phénomènes interdépendants qui sont simulés :

- 1) Le mouvement d'un fluide aqueux, de densité pouvant être variable, en zone saturée ou non saturée.
- 2a) Le transport d'éléments dissous dans l'eau qui peuvent être en outre soumis au cours du mouvement à des phénomènes d'adsorption sur la matière poreuse, et à des phénomènes de croissance ou de production à la suite de réactions géochimiques locales.
- 2b) Le transfert d'énergie thermique par l'intermédiaire du fluide en circulation et de la matrice poreuse (par conduction thermique).

SUTRA donne comme résultats fondamentaux des simulations : la pression du fluide en mouvement et soit, selon l'option choisie, la concentration des éléments dissous, ou la température, en fonction du temps et en tout point du domaine représenté.

SUTRA peut évidemment être utilisé pour simuler tout phénomène plus simple inclus dans l'ensemble défini ci-dessus.

SUTRA est essentiellement bidimensionnel, ce qui veut dire qu'il peut être utilisé pour représenter des coupes verticales dans le cas des phénomènes où intervient la gravité (écoulement en zone non saturée, écoulement saturé à densité variable), ou pour représenter des domaines en projection sur un plan horizontal dès lors que la gravité n'intervient pas. Dans ce dernier cas, la 3^{ème} dimension est prise en compte par intégration, dans la valeur de certains paramètres physiques qui sont fonction de l'épaisseur du milieu aquifère (par exemple la transmissivité) ou de distances verticales entre ce milieu et certaines conditions composées (ex : la drainance).

SUTRA utilise, pour la discrétisation spatiale, la méthode des éléments finis. Ce qui veut dire que la conception du maillage est très souple, à base d'éléments quadrilatéraux. En outre, SUTRA autorise la création de "nœuds de pincement" (pinch nodes) sur n'importe quel côté des quadrilatères du maillage. Ce qui permet de resserrer très facilement le maillage dans tous les endroits où la dynamique des phénomènes est importante (et réciproquement de le relâcher dans les endroits plus calmes).

Pour la discrétisation du temps, SUTRA utilise une approximation par différences finies implicite avec prévision ou plus rarement un schéma explicite dans les débuts des périodes transitoires.

Les conditions aux limites prises en compte peuvent être permanentes ou variables dans le temps. Il peut s'agir de conditions de charge de concentration ou de température composées de débits en eau et/ou d'éléments dissous ou de calories.

Les équations fondamentales qui sont traitées par le modèle sont :

- 1) les équations de conservation de la masse et de l'énergie,
- 2) l'équation de DARCY généralisée pour traduire l'équilibre hydrodynamique de la phase fluide,
- 3) l'équation de dispersion des éléments dissous ou de la température au cours de leur entraînement par l'eau dans le milieu poreux,

4) éventuellement une loi d'adsorption ou une loi de production (ou disparition) - par réaction géochimique avec la matrice - de l'élément dissous dont la concentration est considérée.

Ces équations sont couplées dans la mesure où certains des paramètres physiques qui interviennent dans chacune d'elles sont des fonctions de variables évolutives en fonction des autres. Par exemple, la perméabilité à l'eau est une fonction de la température (par l'intermédiaire de la viscosité) et de la densité ; la densité peut dépendre de la concentration en éléments dissous, etc.

Les résultats des simulations sont donnés sous forme de tableaux de valeurs pour chaque nœud du maillage ou sous forme de courbes isovaleurs tracées par un module de contourage intégré dans SUTRA.

SUTRA est sans doute un modèle très complet du point de vue théorique. Compte tenu de sa complexité, il doit être réservé à l'analyse de cas bien circonscrits, si possible par l'utilisation préalable de modèles plus simplifiés.

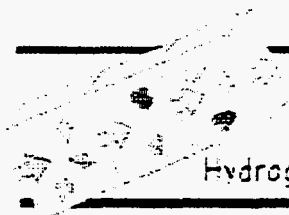
ANNEXE 6

LISTE DES PROJETS FINANCES 1995-1996
(en KF)

PROJETS	Coordonnateurs	Coût total du projet hors personnel sur 2 ans (KF)	Montant demandé	Financement accordé	Bourses	Subvention 1995		Subvention 1996 (Somme globale attendue)	Organisme attributaire
						Région	Autres partenaires		
1/ Gestion écologique intégrée des hydro-systèmes	Eric HEROUIN CEMAGREF - Hydrologie-hydraulique	1 340,00	700,00	600,00	1	270,00	90,00	240	CEMAGREF Lyon
2/ Etude des impacts anthropiques sur les écosystèmes lacustres subalpains	Daniel GERDEAUX INRA - Labo. d'hydrobiologie lacustre	2 095,00	1 060,00	920,00		414,00	115,00	391	INRA
3/ Agriculture durable, protection du sol et des ressources en eaux souterraines	Michel VAUCLIN - CNRS Amédée MOLLARD - INRA	2 256,00	1 176,00	1 010,00	1	454,50	126,25	429	INRA
4/ Gestion et protection des espaces naturels alpins et biodiversité. Apports de la biologie moléculaire à l'écologie évolutive des populations en milieu de montagne	Irène TILL Université Joseph Fourier Labo. de biologie des populations d'altitude	2 109,00	802,00	690,00	1	310,50	86,25	293	UJF Grenoble
5/ Changements environnementaux et bioévaluation des écosystèmes et des paysages de montagne. Rôle et intérêt d'indicateurs biologiques et écologiques pour connaître et gérer la biodiversité	Jean-Jacques BRUN CEMAGREF - Envt naturel & paysage	1 894,00	910,00	780,00		351,00	97,50	332	CEMAGREF Grenoble
6/ Evaluation des risques et mise au point de techniques de réhabilitation de sols contaminés Applications à 2 sites de la région Rhône-Alpes	Yves JOUANNEAU CEA-CENG	2 341,00	1 302,00	1 120,00		504,00	140,00	478	CENG
7/ Risques liés à l'introduction volontaire ou accidentelle de substances exogènes dans l'environnement sol	Lucille JOCTEUR MONROZIER Université Claude Bernard Lyon 1	1 450,00		200		90,00	25,00	85	CNRS Lyon
8/ Impact de la pollution atmosph. sur la santé humaine (projet IMPAS)	Pierre MASCIET Université de Savoie	2 920,00	900,00	770,00		346,50	96,25	327	Univ. de Savoie Chambéry
9/ Dynamique de la pollution urbaine et impact sur la santé et l'habitat	Jean-Pierre WOLF Université C. Bernard Lyon 1	2 255,00	1 087,00	935,00		420,75	116,98	397	Univ. Cl. Bernard Lyon
TOTAL		18 660,00	7 945,00	7 025,00	3	3 161,25	893,13	2970	

* pour le projet 7, le financement accordé vient en complément du soutien CNRS dans le cadre GDR EXOSOL (1200 KF TTC sur 2 ans)

ANNEXE 7



Research Consortium

Hydrogeology Program at the University of Illinois

The Hydrogeology Program at the University of Illinois is an active group that develops and applies computational methods to investigate hydrogeologic and geochemical processes in the subsurface. The Program has more than ten years of history in cooperative research with domestic and international research groups from the petroleum, minerals, and environmental protection industries, as well as government research laboratories and other universities.

An industrial consortium was created in 1986 to facilitate such cooperation. The current consortium members are:

- [Amoco](#) Production Research Company
- [ARCO](#) Oil and Gas Company
- [Chevron](#) Oil Field Research
- [Conoco](#), Inc.
- Exxon Production Research Company
- [Hewlett-Packard](#)
- Japan National Oil Corporation
- [Lawrence Livermore National Laboratory](#)
- [Marathon](#) Oil Company
- [Mobil](#) Research and Development
- [Sandia National Laboratory](#)
- [SiliconGraphics](#) Computer Systems
- [Texaco](#), USA
- [U.S. Geological Survey](#) (Reston)
- [U.S. Geological Survey](#) (Denver)

As our research sponsors, consortium members enjoy a number of benefits, including licenses to software developed with the Hydrogeology Program.

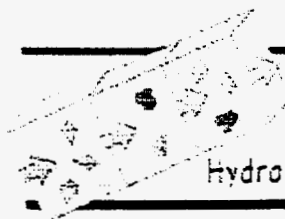


[hydro homepage](#) - [consortium](#) - [software](#) - [short course](#) - [publications](#)

Last updated 9/13/96:mrt

HTML written using HTML Pro and tested on Netscape Navigator 3.0 for Mac and Microsoft Internet Explorer 2.0 for Mac. All graphic images were manipulated using Adobe Photoshop. This page is maintained on a server at the University of Illinois at Urbana-Champaign.

URL: "http://www.hercules.geology.uiuc.edu/~bethke/consort.html"



People in the Program

Hydrogeology Program at the University of Illinois

➤ **Craig Bethke, Professor,** c-bethke@uiuc.edu

➤ **Annette Fugl, Research Scientist,**
afugl@aquifer.geology.uiuc.edu

➤ **Tren Haselton, Research Programmer,**
haselton@aquifer.geology.uiuc.edu

➤ **Pilar Manzano, Research Programmer,**
pmanzano@aquifer.geology.uiuc.edu

➤ **Xiang Zhao, Research Associate,**
x-zhao@aquifer.geology.uiuc.edu

➤ **Amy Berger, Graduate student,**
aberger@aquifer.geology.uiuc.edu

➤ **Melinda Tidrick, Graduate student,**
tidrick@aquifer.geology.uiuc.edu

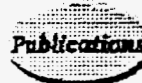
➤ **Jungho Park, Graduate student,**
jpark@aquifer.geology.uiuc.edu

➤ **George Roadcap, Graduate student,**
roadcap@uiuc.edu

➤ **Zhiying Cao, Graduate student,**
caol@uiuc.edu

➤ **Tamar Shinar, Student programmer,**
shinar@uiuc.edu

➤ **Jean Daly, Business Manager,**
jdaly@aquifer.geology.uiuc.edu

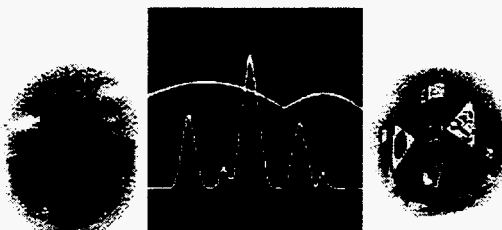


[hydro homepage](#) - [consortium](#) - [software](#) - [short course](#) - [publications](#)

Last updated 9/9/96:mrt

ANNEXE 8

The Queen's University of Belfast



Questor Centre WWW Server

THE QUEEN'S UNIVERSITY ENVIRONMENTAL SCIENCE AND TECHNOLOGY RESEARCH CENTRE

[\[Introduction\]](#) [\[Industry Members\]](#) [\[Center Organisation\]](#) [\[Benefits to Industry\]](#) [\[Current Research Projects\]](#) [\[Posts Advertised\]](#) [\[OUCAT\]](#)



+44 (0)1232 335577/8



+44 (0)1232 661462

Email address: QUESTOR@qub.ac.uk

● INTRODUCTION

The Questor Centre was the first industry-university cooperative environmental research centre outside the USA. It was set up in May 1989 in The Queen's University of Belfast with nine founder industry members and five participating university departments. The Centre is physically located near the School of Chemistry which initiated the development.

The Centre allows both partners to do that which they are best at - the university to carry out basic research, the industry partners to apply this research to minimise their environmental impact while generating wealth. This real partnership between industry and the university is very advantageous. It allows input from industry into the choice of research topics and helps to focus the relevance of the research. The research students and post doctoral staff working in the Centre are in regular contact with senior industrialists who can advise on the relevance of the work. The industry links help ensure that the students can integrate more smoothly into the work environment.

● INDUSTRY MEMBERS

The members are drawn from Ireland, North and South, and from GB. They are currently:

- Beckman Instruments*
- BNFL*
- BP Chemicals*
- Chemvite*
- Coca Cola Bottlers (Ulster) Ltd.*
- DoE Environment Service*
- DoE Water Service*
- Du Pont (UK) Ltd.*
- ESB*
- Exxon Research & Engineering*

- Fisons Instruments*
- Fruit of the Loom*
- International Biochemicals*
- ICI Chemicals & Polymers*
- Northern Ireland Electricity*
- Perkin-Elmer/Foss Electric*
- Schering Plough*
- Severn Trent Water*
- Unilever Research*
- Welsh Water*
- Yamanouchi Ireland*
- Yorkshire Water*

● CENTER ORGANISATION

Currently the Departments of Agriculture, Chemical Engineering, Chemistry, Civil Engineering, Computer Science, the School of Biology and Biochemistry, Division of Molecular Biology, and Psychology are participating in the Centre research programme.

The strength of the Centre lies in a carefully structured interaction between industry and the university. One representative from each member organisation sits on the Centre Industry Advisory Board which meets every six months. All proposed research projects are presented to the Board for selection based on industry relevance, quality of the research and ability to achieve the goals set out.

A mixture of research students, research associates and research fellows are carrying out the research and they are selected from a large field of young people who are attracted to apply to the Centre by a combination of environmental relevance and industrial participation in the research. These young people leave the Centre after two or three years and, in today's situation of increasing demand and decreasing supply of science graduates, they are a valuable human resource. Members of the Centre have the opportunity to assess their performance and thus attract suitable candidates to work with them.

The interdisciplinary nature of the Centre, bringing various disciplines to bear on environmental problems, has proved to be very important. This has, for example, led to a joint project between Chemical Engineering and Microbiology which has been funded by EPSRC. This project has also been linked with a complementary one in the Hazardous Substance Management Research Centre in New Jersey, USA. A further chemistry/chemical engineering project on flocculation has been funded by IRTU and this has been linked with a research project on the computational fluid dynamics of mixing in HSMRC.

Currently, the Centre is expanding to carry out research into clean technology and build a demonstration facility in addition to the current remit of clean-up and end-of-pipe technology. This expansion will include work on inorganic and organic clean technology, some of which will be catalysis based, and also biocatalytic work. The staff of the Centre will number 36.

● SUMMARY OF BENEFITS TO INDUSTRY

- Prior access to a waste management, clean technology and demonstration research programme funded at over £6m over the first six years.
- The opportunity to help select the research to be carried out and review it every six months.
- The opportunity to assess and eventually offer employment to the graduates and postgraduates working in the Centre.
- Royalty-free access to all patents arising from the research.

- Close contact with the Centre and thereby with The Queen's University of Belfast.
 - Involvement in an international environmental research programme between USA, France, Germany, Russia and Questor.
 - The opportunity for networking within the Membership and Internationally.
-

For further information please contact:

Prof. Jim Swindall
Director
The Questor Centre
The Queen's University of Belfast
Belfast BT9 5AG



[Questor Centre Homepage](#)

Last updated 10 October 1996 E-Mail questor@qub.ac.uk

Pre-proposal for a Questor Centre Research Project September 1994

1. Title

Numerical modelling of pollutant dispersion in the unsaturated (surface) zone.

2. Principal investigator

John Stewart, Questor/Computer Science.

Ph. (0232)245133 Ext 3375

Fax (0232) 331232

3. Overview

Many of Questor's members may have problems or potential problems with contaminated land. Modelling studies are usually necessary to determine the short and long term dispersion of contaminants and any ensuing risks and to decide on the need (and potential strategies) for remediation.

There are many commercial and research codes available to undertake such studies and modelling of hydrology and contaminant transport in the (generally) deeper saturated zone has been widely undertaken. However, modelling of the unsaturated (near surface) zone, and particularly the use of coupled models, which cope adequately with migration from unsaturated to saturated layers, is not so well advanced because of some widely recognised difficulties.

These difficulties arise when attempting to solve the non-linear systems of equations needed to describe the complex processes in the unsaturated zone. In particular, the presence of 'sharp fronts' associated with migrating contaminants causes problems for modellers. These problems are manifested in two main ways, either the mathematical solver fails to converge to a stable solution or oscillations about a solution occur. When coupled with chemical reaction models, oscillations to negative contaminant concentrations will obviously lead to program failure.

These difficulties were noted in a major comparative study of ground water modelling strategies carried out by the OECD (The International HYDROCOIN Project) where none of the six project teams were able to obtain a converged solution using the parameters supplied with a test case, and have been confirmed by researchers at British Nuclear Fuels plc (A. Pinner, pers. comm.) who are currently developing a model for the unsaturated zone.

This project seeks to combine the skills and experience in High Performance Computing and mathematical methods available at Queen's with the modelling skills of researchers from those Questor members who are working in this field to overcome these difficulties. Some potential solutions have been identified and these are detailed below.

4. Industrial relevance

Modelling dispersion (and retention) processes in the unsaturated zone is important for several reasons,

i) spills and accidental releases tend to occur at the ground surface (i.e. in the unsaturated zone) and so retention in and/or transport through the unsaturated zone is of prime importance,

ii) predictions of where a contaminant will be retained are also important when planning a remediation strategy. If the contaminant is transported to the saturated zone (i.e. into the aquifer) it may be possible to remove it by pumping from wells. If contaminants remain in the unsaturated zone they may be difficult to remove without changing the hydrogeological characteristics of the system. (Excavation is currently the most common strategy, but others including the use of leaching solutions and pumping wells may be possible.)

iii) assessments of the long-term risk associated with contaminants retained in the unsaturated zone will help to decide whether or not to undertake remedial action.

The widespread use of computer models for environmental modelling indicates their cost effectiveness. It would be unrealistic to form a complete characterisation of ground contamination by physical examination. This particular project is aimed at an important area - near-surface contamination - where many sites cannot be adequately modelled.

5. Route to exploitation

The project would be carried out in co-operation with researchers from those Questor members who wish to take part. The work should provide new modelling codes, with acknowledged effectiveness, for use both in-house and commercially. In order to establish the value of the model detailed studies of contaminated sites would be made and it is intended that Questor members would find direct benefit by co-operating in studies of their own sites.

6. Methodology

The project would proceed through a number of stages.

i) A review of available techniques and models (particularly those which have been demonstrated, tested, calibrated and fully documented)

ii) Improving the performance of existing models. Some of the difficulties outlined above may be ameliorated by refining the three dimensional finite element mesh, for example using finer meshes, moving or adapting meshes, for regions where flow and concentration gradients change rapidly. Mesh refinement techniques imply the need for much increased computing power and the use of High Performance Computing such as parallel or mainframe machines will be investigated.

iii) An alternative approach involves the investigation of different mathematical solvers for the finite element scheme which might circumvent some of the problems of non-convergence or oscillations. It is possible that researchers in related fields (e.g. aeronautics) have developed techniques which could be adapted to overcome some of the difficulties.

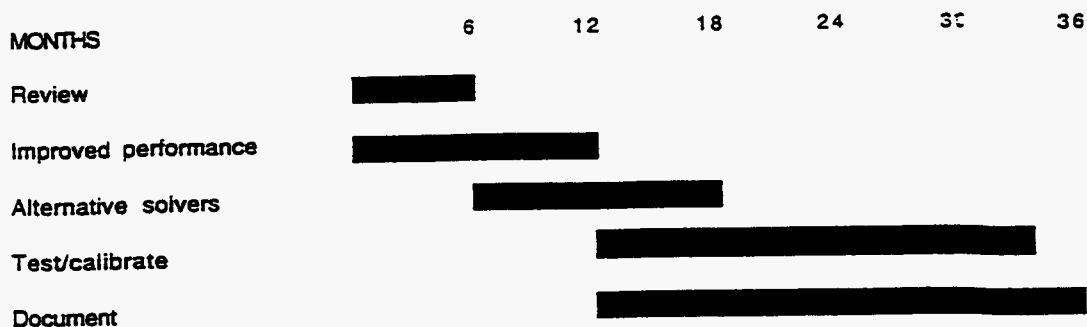
iv) Having identified and/or produced candidate model(s) for unsaturated zone problems these will be tested and calibrated at sites representing a range of conditions. Questor members would be requested to take part in this study by testing codes against their own contaminated sites.

v) In line with the aim of producing modelling codes which are acceptable to regulatory authorities and others, details of the study will be documented for scrutiny and approval by interested parties.

7. Objective

The objective of the project is to arrive at a consensus on which codes are useful for modelling in the unsaturated zone and could be taken forward for regulatory examination and approval and subsequently be used both in-house and commercially.

8. Timing



9. Budget

This would be the main task of the principal investigator but, in addition, a research assistant, preferably with a background in mathematical computation would also work on the project.

Travel to liaise with co-operating members would be necessary.

In addition, there would be costs associated with calibration studies of candidate codes - these costs would not be part of the project budget.

Cost summary	Staff	2/3 Senior Research Fellow 2/3 Post-doc. Research Assistant
	Travel	£3000

Pre-proposal for a Questor Project

A CAST award studentship to study biogeochemical modelling of the fate of metal contaminants in saturated and unsaturated media

Project Title

Computer simulation of coupled transport and chemical interaction between organic compounds and metals in the environment.

Principal Investigators

This would be a jointly supervised CAST award studentship (a CAST award is the NI equivalent of a CASE award in Britain). The Queen's University supervisors would be Dr. R.M. Kalin and Mr. J.R. Stewart. The Industrial partner would be British Nuclear Fuels.

Overview

The capability to model the movement of metal pollutants in saturated and unsaturated media is limited by our ability to include all the relevant physical and chemical controls into biogeochemical computer codes. In particular, the movement of metals is not only controlled by reduction-oxidation reactions and the solubility of inorganic salts, but also interactions with naturally occurring or anthropogenically derived organic compounds through chelation or other bonding mechanisms. When bound to organic compounds their subsequent transport may be retarded, if the organic material is essentially immobile, or modified depending on the transport of the organic.

This project will add to the ongoing groundwater modelling efforts at The Queen's University. There is currently one Questor project on groundwater modelling. John Stewart is working on the development of improved numerical methods to solve problems encountered when modelling the transport of contaminants in the unsaturated zone, especially where 'sharp concentration fronts' occur. Dr. Robert Kalin has several post-graduate students working on various aspects of groundwater modelling and contamination. His new facility, the Environmental Engineering Research Centre (EERC), was initiated to offer novel techniques to validate isotope-geochemical and biogeochemical modelling of contaminated land and will work closely with the Questor centre. This project will form a useful link between an existing Questor research programme and this new research group at Queen's.

Industrial Relevance

The fate of metal contaminants in water is of considerable interest to both the subsequent users of potentially contaminated water and from those deemed responsible for the contamination. Adequate computer simulation can provide a quantifiable projection of the fate of metals in the environment. These models can also be used as a predictive tool for the potential success of remedial strategies.

Objectives

The objectives of this study are as follows:

- 1) Conduct a review of the literature on interactions between organic compounds (of specific interest) and metals in the saturated and unsaturated environment.
- 2) Study and develop the chemical thermodynamic and kinetic relationships between organics and metals of interest needed for incorporation into existing computer modelling code.
- 3) Design and write appropriate computer code for incorporation into biogeochemical modelling programs

Methodology

The course of the project will be driven by the availability of appropriate thermodynamic and kinetic data for interaction between metals and organic materials. We anticipate much of this data currently exists due to research efforts during the past decade in the USA which considered metal-organic interaction as a method of extracting metals from mine tailings and waste sites. Some research at Queen's has been published on the formation of complexes between copper ions and naturally occurring humic and fulvic acids. This work of Dr. Allen from the Department of Chemical Engineering may provide additional data. We anticipate that the experimental work will be undertaken jointly between EERC labs and the Questor centre.

The project proceed via the following stages

- 1) A literature survey will be made for details of reaction kinetics and equilibrium data on relevant metal-organic compound interactions. The extent of the data available will determine the need for experimental work.
- 2) Experimental work will be undertake to study the interactions between specific metals and organics of interest. Emphasis will be given to those combinations of interest to Questor members.
- 3) Computer modelling code will be written to incorporate the effects of these chemical interactions into contaminant transport models.
- 4) The new code will be incorporated into a current complete biogeochemical model, tested and calibrated using both test and field data.

Timing

The project will run for the normal three year period associated with doctoral research. It is anticipated that the student would work for approximately half of the first two years at British Nuclear Fuels research laboratory.

The proposed timing is as follows:

<i>Months</i>	<i>Location/work</i>
1 to 3	BNFL - familiarization with biogeochemical modelling techniques and computer codes. Literature survey on metal-organic compound interaction
4 to 15	QUB - EERC laboratory/Questor centre. Experimental work on reaction kinetics and equilibria. Initial design and coding of routines for biogeochemical model subroutine.
16-21	BNFL - further coding of computer routines and incorporation into modelling program. Testing and calibration of new routines using appropriate data from contaminated sites(s).
22-36	QUB - remaining work on computer codes, program calibration and writing up thesis.

Depending on the availability of published information on metal-organic compound reaction kinetics and equilibria, there will be a greater or lesser need for experimental work in the laboratory.

Budget

The student would be supported by a DENI CAST award. A supplement of £1000 (or £2000 for those with a first class honours degree) will be paid.

Résumé :

Les sociétés industrielles utilisent et produisent un très grand nombre de substances qui sont susceptibles d'engendrer une pollution des milieux naturels et notamment du sol, sous-sol et nappes phréatiques. Il est donc nécessaire d'estimer l'impact d'une pollution accidentelle ou chronique, réelle ou potentielle, en terme de risque. La modélisation, en permettant la simulation du devenir des polluants dans les sols peut constituer un outil d'aide à la décision, soit en vue de la prévention de la pollution de la ressource ou de la réparation de nuisances déjà existantes.

Dans ce rapport, nous présentons dans un premier temps l'état de l'art sur la modélisation de transfert de polluants dans les sols. Nous abordons ensuite les principaux outils existants sur le marché à l'heure actuelle, et les principaux organismes et laboratoires travaillant dans ce domaine, en France tout particulièrement.

A l'issue de cette étude, il est possible de dégager les principales questions et les problèmes qui restent posés concernant la modélisation du transport des polluants dans les sols et qui pourront faire l'objet d'études ultérieures. Quatre points se sont dégagés :

- la sensibilité des modèles aux différents paramètres d'entrée et la hiérarchisation des paramètres clés,
- la réalisation d'une base de données faisant l'état de l'art des études modélisation réalisées dans le cadre des sites pollués,
- la mise au point d'indicateurs de mobilité d'un polluant dans un sol,
- le domaine d'application et la pertinence des modèles.

Summary :

Industrial companies use and produce numerous substances which can induce a pollution of our environment and specially of soil and groundwater. Thus, it's necessary to estimate the risk of an environmental impact from an accidental or chronic, real or potential pollution. Modelling, which allow the simulation of pollutant migration, can be used as a decision support system, either for the pollution control and prevention of the resource, or for the monitoring of the remediation of polluted sites.

In the first part of this study, we established a state of the art on modelling of pollutant migration in soils. In the second part, we focused on the main simulation tools currently available on the market, and on the main agencies or laboratories working on this subject, especially in France.

At the end of this study, we drew some conclusions concerning modelling of pollutant migration in soils and the main points which will form the subject of further studies :

- sensitivity analysis of model to input parameters and ranking of the main parameters,
- achievement of a database on the state of the art of the results on modelling realized on case studies,
- development of a mobility indicator of pollutant in soil,
- application field and relevance of the models.

Mots clés : sols pollués, polluants, migration, modélisation, simulation, logiciels.

Key words : polluted soils, pollutants, migration, modelling, simulation, software.