

R/1

RP-50609

DOCUMENT PUBLIC

*Avis sur une étude d'impact relative à des
travaux de compactage
SNCF – Valenton II (Val-de-Marne)*

Etude réalisée dans le cadre des opérations de Service public du BRGM 00-EAU-514

**décembre 2000
BRGM/RP-50609-FR**



Sommaire

1	Introduction	4
2	Objectifs de l'étude et résultats obtenus.....	5
3	Analyse de la modélisation hydrodynamique	6
3.1	Analyse globale	6
3.2	Analyse détaillée	6
3.2.1	Contexte hydrogéologique	6
3.2.2	Délimitation de la zone modélisée et conditions imposés aux limites	7
3.2.3	Type de modèle mis en œuvre	8
3.2.4	Evaluation de la recharge de la nappe	8
3.2.5	Calage	8
3.2.6	Simulation du compactage - Conclusions	9
4	Analyse de la simulation de pollutions	10
4.1	rappel sur les Processus généraux de pollution et sur le comportement de quelques polluants	10
4.1.1	Description générale.....	10
4.1.2	Précisions sur les polluants non miscibles à l'eau	11
4.1.3	Rétention par la phase solide : sorption et retard de propagation.....	14
4.1.4	Dégradation du TCE.....	15
4.1.5	Conclusion	16
4.2	Données utilisées par ATE.....	17
4.2.1	Porosité et dispersivité.....	17
4.2.2	Paramètres de sorption et facteur de retard.....	17
4.2.3	Dégradation	18
4.3	Hypothèses prises en compte pour les simulations	19
4.3.1	Pollution accidentelle	19
4.3.2	Pollution diffuse.....	19
5	Conclusion	21

1 Introduction

Dans le cadre des actions du BRGM d'appui scientifique et technique aux services chargés de la police de l'eau, la Direction Départementale de l'Équipement du Val-de-Marne a sollicité l'appui technique du Service Géologique Régional d'Ile-de-France sur un projet de création d'une zone imperméabilisée de 7 hectares pour la construction d'un terminal de transport combiné sur le site de Valenton II.

Dans le cadre de cet aménagement la SNCF prévoit un compactage dynamique du sol (constitué entre autres d'ordures ménagères et de déchets industriels). Ces travaux présentant un risque de relargage de polluants et de contamination des eaux souterraines, il a été demandé à la SNCF une étude d'impact pour évaluer quantitativement ce risque. La DDE souhaite l'avis du BRGM sur cette étude, en particulier sur les résultats quantitatifs (temps de transfert et taux de pollution).

Ce dossier a été examiné sur la base des documents suivants :

- Rapport réalisé par ATE pour la SNCF en juin 2000 : SNCF – Valenton II , impact d'une contamination liée aux travaux de compactage sur les plans d'eau alimentés par la nappe – simulation de l'écoulement et du transfert de masse dans la nappe

2 Objectifs de l'étude et résultats obtenus

L'étude réalisée par *ATE* pour le compte de la SNCF détermine à l'aide d'un modèle hydrodynamique et hydrodispersif les impacts d'un chantier (site de Valenton II) sur une nappe sous jacente s'écoulant dans des formations très hétérogènes (alluvions et matériaux de remblayage).

Les impacts simulés sont relatifs :

- d'une part au compactage du site pour la mise en place d'une plate forme inter-nodale ;
- d'autre part à une éventuelle pollution générée par les travaux. (pollution diffuse sur l'ensemble du site et pollution ponctuelle accidentelle).

La simulation de ces pollutions possibles a été faite en retenant deux types de substances :

- un hydrocarbure aliphatique chloré : le Trichloroéthylène (TCE)
- un hydrocarbure aliphatique : l'Hexane

Les conclusions tirées des simulations réalisées sont les suivantes :

- **impact du compactage sur la nappe négligeable** : 30 à 35 cm de surélévation des niveaux au droit du site et atténuation rapide à l'amont. A l'aval, diminution des niveaux de quelques cm seulement ;
- **impact négligeable également d'une pollution accidentelle**. Plus particulièrement, le site protégé de la "Plage bleue" ne serait jamais atteint par un polluant (TCE, Hexane) déversé accidentellement (à la limite du chantier le plus proche de la Plage bleue) ;
- **impact négligeable d'une pollution diffuse**.

Dans ce qui suit, on analysera la démarche de modélisation, la pertinence des données utilisées et des hypothèses faites et enfin on tentera d'apprécier la fiabilité des résultats obtenus par *ATE*.

3 Analyse de la modélisation hydrodynamique

3.1 ANALYSE GLOBALE

D'une façon générale, la mise en œuvre d'un modèle hydrodynamique **utilisé à des fins de prévision** doit comporter, après construction, 3 phases :

- une **phase de calage**, réalisée à partir des cartes piézométriques et/ou de chroniques piézo-métriques ;
- une **phase de validation**, si le nombre ou la longueur des chroniques disponibles le permet (données non utilisées pour la phase de calage) ;
- une **analyse de sensibilité** afin de déterminer un intervalle de variation des résultats obtenus face aux inévitables incertitudes dues à l'insuffisance de mesures .

Remarque : un calage réalisé à partir d'un état piézométrique considéré comme relativement stationnaire (régime dit "permanent") et considéré comme correct peut se révéler totalement erroné en phase transitoire (l'information utilisée en régime permanent étant insuffisante pour lever les incertitudes et les compensations entres paramètres). C'est la raison pour laquelle un calage en régime transitoire est préférable à un calage en régime permanent si les données le permettent (chroniques piézométriques et cartes à différentes dates).

Le rapport ATE ne fait aucune mention d'une phase de validation et d'une analyse de sensibilité.

Par ailleurs, si la phase de calage (régime permanent ? régime transitoire ?) est bien annoncée dans le rapport (page 13), elle n'est aucunement décrite. Qui plus est, **la nécessaire comparaison et l'analyse des écarts** entre niveaux simulés et niveaux observés n'est pas présentée (comparaison avec la carte piézométrique de 1991 du rapport BETURE SETAME par exemple).

Les valeurs introduites a priori dans un modèle (par exemple perméabilités et infiltrations) sont en général modifiées au cours du calage. Le rapport ATE n'en fait pas mention. Pourtant, il est dit pour l'infiltration, dont la valeur est inconnue, que "le calage du modèle permettra d'en apprécier la grandeur réelle" (page 9).

Compte tenu de ces lacunes importantes, il nous apparaît difficile d'apprécier la validité des résultats obtenus, dépendant de la qualité du calage réalisé.

3.2 ANALYSE DETAILLEE

3.2.1 Contexte hydrogéologique

- *Milieu d'écoulement*

La nappe modélisée est une nappe qui s'écoulait initialement dans un milieu alluvionnaire constitué de sables et graviers. L'exploitation dont elle a fait l'objet a engendré de nombreuses excavations comblées par la suite avec des matériaux très hétérogènes déversés sans compactage (ordures ménagères, matériaux de démolition, matériaux de découverte de carrière,...). Les alluvions non remaniées sont peu représentées.

• ***Épaisseur et substratum***

Le substratum de ce système alluvionnaire remanié, dont l'épaisseur est de l'ordre de 10 m environ (d'après sondages et coupes géologiques), est constitué par des marnes de l'Eocène supérieur.

• ***Perméabilité***

Les valeurs retenues par ATE sont :

pour les alluvions : 10^{-4} m/s (mesures par essais Lefranc)
pour les anciennes décharges : 2.10^{-5} m/s.
pour la zone compactée : 10^{-6} m/s

A l'issue du processus de calage le champ de perméabilités peut différer du champ initial (en zonation et valeurs).

• ***Piézométrie***

La nappe fait l'objet d'un suivi piézométrique depuis plusieurs années par le DSEA. Des cartes ont été établies en Avril et Octobre 1980, en Février 1987, en Mars 1988 et en Juillet 1991. Seule la carte de 1991 semble avoir été utilisée par ATE.

En hautes eaux, la nappe est à environ 2 m du sol dans la zone du projet (-1.80 en Novembre 1996). Le battement entre basses eaux et hautes eaux est de 1 m à 1.5 m au droit et en amont du site. Le gradient est d'environ 0.1 % en basses eaux et de 0.09 % en hautes eaux.

3.2.2 Délimitation de la zone modélisée et conditions imposés aux limites

Le domaine modélisé correspond à une zone alluvionnaire de 55 km², limité à l'Ouest par la Seine, à l'Est par la Marne et se refermant au nord à la confluence de ces deux cours d'eau. La frontière sud correspond aux horizons du Ludien moyen.

Sur ces limites ont été imposées des conditions de :

- potentiel le long des deux cours d'eau (ils correspondent aux niveaux des cours d'eau);

- flux nul au Sud (limite correspondant à une ligne de courant déduite de la piézométrie, de direction Est-Ouest).

Ces conditions sont classiques pour un tel contexte.

3.2.3 Type de modèle mis en œuvre

Bien que cela ne soit pas explicitement dit, il s'agit vraisemblablement d'un modèle 2D (x,y) aux différences finies (mailles carrées ou rectangulaires, *de taille non précisée*).

Remarque : le type de modèle choisi est important, particulièrement dans le cas où il est utilisé pour traiter un problème de transport de masse. En effet, pour éviter, avec un schéma aux différences finies, les problèmes de "diffusion numérique" conduisant à des valeurs de concentrations plus atténuées, des contraintes portant sur la taille des mailles et sur le pas de temps de la simulation du transport sont à respecter (contraintes fixées par le critère de Peclet et le critère de Courant).

Le type de régime hydraulique de la modélisation hydrodynamique (permanent ou transitoire) n'est pas précisé. *Il s'agit vraisemblablement d'un régime permanent*, le calage se faisant à partir de la carte piézométrique de 1991 du rapport BETURE SETAME (mentionné page 13).

Il existe néanmoins des cartes établies à d'autres dates :

- cartes d'Avril et d'Octobre 1980,
- cartes de Février 1987 et mars 1988

cartes qui auraient dû justifier un calage en régime transitoire ou tout au moins une validation du calage effectuée en utilisant les cartes supplémentaires.

3.2.4 Evaluation de la recharge de la nappe

Une recharge moyenne annuelle a été estimée à partir des données de pluie et d'ETP sur 20 ans. La valeur obtenue est de 110 mm /an .

Le rapport précise que cette valeur est à moduler en fonction des différentes zones du site et que le calage du modèle " permettra d'en apprécier la grandeur réelle" (p. 9).

Cette valeur moyenne de 110 mm qui est une valeur moyenne annuelle ne devrait pas être prise en compte pour un calage se faisant sur une carte de basses eaux. La valeur de recharge à introduire devrait correspondre à la période considérée pour le calage, et devrait donc être inférieure.

3.2.5 Calage

Cette phase n'est absolument pas décrite dans le rapport. Le calage a été vraisemblablement réalisé en régime permanent à partir de la carte des basses eaux de Juillet 1991 (il est simplement mentionné "état hydrodynamique de 1991", p. 13). Les valeurs des paramètres dont il a été dit qu'elles seraient modulées lors du calage ne sont pas mentionnées (cf § 1.2.4. ci dessus).

3.2.6 Simulation du compactage - Conclusions

L'impact du compactage a été jugé négligeable : augmentation des niveaux de 35 cm au plus au centre du chantier.

Pour évaluer les résultats de la simulation, des éléments d'appréciation essentiels manquent, en particulier la comparaison entre piézométrie observée et piézométrie simulée. La qualité de la simulation dépend en effet de leur bonne adéquation.

Par ailleurs, la détermination des sites susceptibles d'être atteints par une pollution repose sur le calcul de trajectoires. Or celles-ci sont bien sûr fonction du champ de charges hydrauliques calculées. Si celui-ci est approximatif (mauvais calage), les trajectoires seront elles-mêmes peu précises.

Enfin, il aurait fallu que l'impact des travaux soit aussi évalué dans un contexte climatique pluvieux en prenant en compte une recharge de la nappe plus importante que la moyenne.

4 Analyse de la simulation de pollutions

Le rapport *ATE* ne présentant que partiellement la problématique du transport de masse, il nous a paru utile d'en préciser les différents aspects afin de faciliter la compréhension de l'analyse critique de ce rapport. On trouvera également en annexe des précisions sur les mécanismes de transfert.

4.1 RAPPEL SUR LES PROCESSUS GENERAUX DE POLLUTION ET SUR LE COMPORTEMENT DE QUELQUES POLLUANTS

4.1.1 Description générale

Qu'il s'agisse d'une pollution diffuse ou d'une pollution accidentelle (déversement d'hydrocarbures...), le schéma général de contamination des eaux est le même : le point de départ est la surface du sol puis le transit vertical dans la zone dite non saturée (ZNS) surplombant la nappe, l'arrivée à la nappe puis le cheminement sub-horizontale du polluant dans celle-ci avec étalement progressif du panache de pollution (beaucoup plus prononcé suivant la direction de l'écoulement).

Tout au long du trajet des processus physiques et chimiques d'intensité variable selon la nature des milieux traversés et les caractéristiques du polluant contribueront à réduire les niveaux de concentration initiaux.

- Lorsque le polluant est miscible à l'eau, la modélisation de sa propagation est relativement simple (au plan théorique tout au moins) les mécanismes fondamentaux étant la convection (entraînement du polluant à la vitesse moyenne de l'eau) et la dispersion dû à l'hétérogénéité du milieu (cf annexe)
- Par contre, dans le cas où le polluant forme une phase fluide distincte de l'eau (par exemple, pollutions par des hydrocarbures) la situation est beaucoup moins simple.

Une fraction du polluant est soluble et susceptible de passer dans la nappe; dans la zone non saturée une autre fraction peut se trouver sous forme gazeuse, cette phase vapeur pouvant également rester confinée au voisinage de la surface libre de la nappe du fait de sa densité.

Par rapport aux pollutions miscibles, les mécanismes fondamentaux sont les mêmes (convection et dispersion) mais ils sont à l'œuvre simultanément dans plusieurs phases et dépendent des lois de comportement de chaque phase. De plus, la densité du polluant par rapport à l'eau induira des "figures" de pollution très différentes selon qu'elle est inférieure ou supérieure à celle de l'eau.

Il s'agit donc d'un problème particulièrement complexe à traiter dans son ensemble. Une telle pollution conduit en effet à un mélange de phases (eau, huile, air, vapeur) et à

un mélange d'espèces : plusieurs composants carbonés avec leurs propres caractéristiques physiques (densité, viscosité, ...).

Chaque phase en déplacement (avec passage possible d'une phase à l'autre) véhicule plusieurs composants, susceptibles de passer d'une phase à l'autre (par dissolution, vaporisation, condensation), y compris d'interagir avec la phase solide (adsorption - désorption) et de subir différents types de dégradation.

4.1.2 Précisions sur les polluants non miscibles à l'eau

4.1.2.1 Polluants plus lourds que l'eau

Leur migration jusqu'à la nappe peut être très rapide surtout si la teneur en eau de la ZNS est faible. Une fois dans la nappe, ils continuent à migrer vers le bas jusqu'à ce qu'ils aient atteint soit le substratum soit une intercalation peu-perméable. Ils peuvent alors rester piégés dans les irrégularités du substratum ou bien migrer dans le sens du pendage de celui-ci, éventuellement dans le sens contraire de la direction générale de l'écoulement de la nappe (figure 1).

Il en est ainsi du **trichloroéthylène**, dont les caractéristiques physico-chimiques sont résumées dans le tableau 1 ci-dessous :

Densité de la phase liquide (/ eau à 20 °)	1.46
Densité de la phase vapeur (/ air)	4.53
Viscosité à 20 ° (en Pa.s)	0.57 10 ⁻³ (eau = 1.008 10 ⁻³)
Solubilité à 25 ° C (mg/l)	1100
Tension de vapeur (en Pa)	7710
Constante de Henry (Pa.m ³ /mole)	719
Coefficient de partage octanol - eau (en log)	2.29 (mesure)

Tableau 1- caractéristiques physico-chimiques du Trichloroéthylène

Remarque: le coefficient de partage octanol/eau ou K_{ow} permet d'approcher le caractère hydrophobe ou hydrophile d'un produit. : c'est le rapport des concentrations du produit dans l'octanol et dans l'eau. Sa valeur est donné en logarithme décimal

Le TCE est un produit moyennement soluble dans l'eau et qui aura tendance du fait de sa densité (et aussi de sa viscosité inférieure à celle de l'eau) à migrer rapidement vers le bas. C'est un produit qui est aussi très volatil (constante de Henry > 500 et pression de vapeur >133). La phase vapeur, du fait de sa densité, aura tendance à s'accumuler au dessus de la surface libre de la nappe.

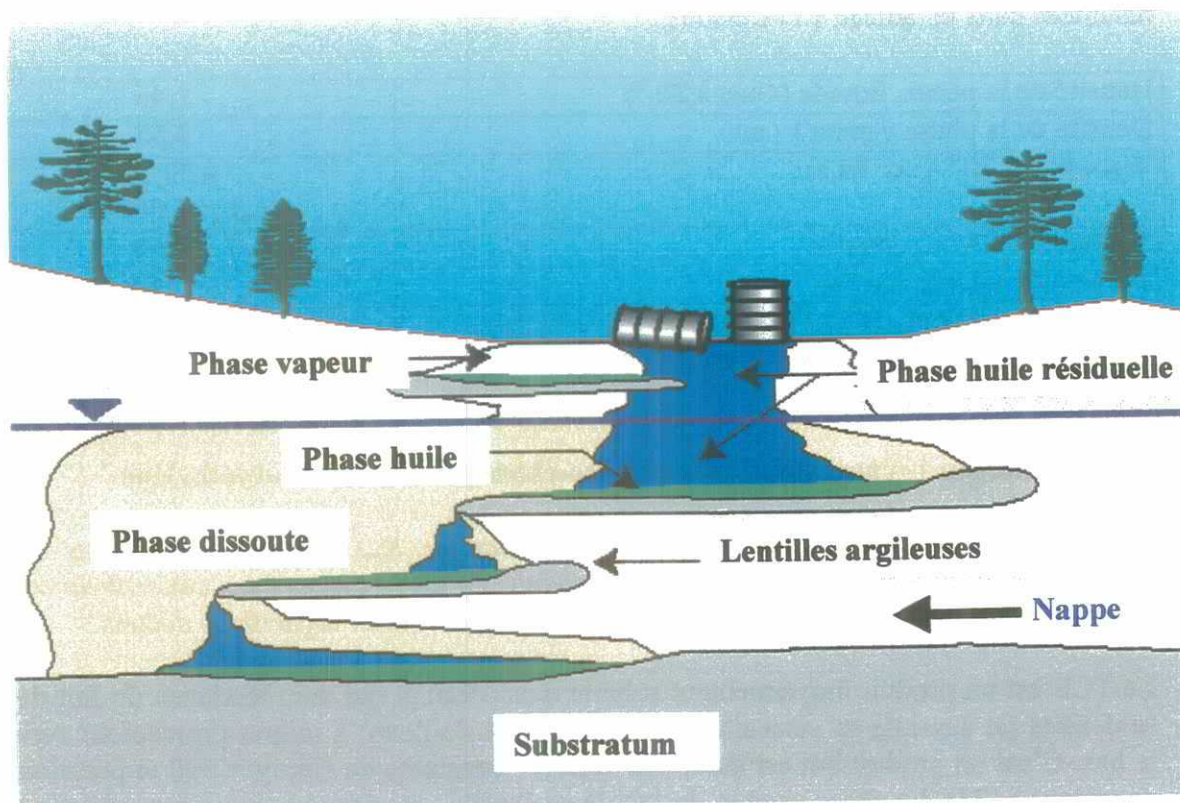
4.1.2.2 Polluants plus légers que l'eau.

La quantité déversée doit être suffisante pour qu'il y ait constitution d'une phase continue sinon la pollution se manifesterait sous la forme de gouttelettes d'huile piégées dans les pores constituant autant de micro-sources de pollution par relâchement dans la phase eau des composants solubles.

S'il y a constitution d'une phase "huile" non miscible et continue, celle-ci va migrer vers la nappe sous l'influence de la gravité et des forces capillaires, ces dernières induisant de plus un étalement latéral.

La phase "huile" en déplacement peut être enveloppée d'une phase gazeuse formée par la vaporisation des composants les plus volatils.

Si la nappe est atteinte, les composants solubles passeront dans la phase eau et seront entraînés par convection et dispersion. La quantité de polluant restant à l'état de phase distincte continuera de se déplacer lentement sous l'effet de ses propres gradients de pression en exerçant sur la nappe une action qui en déprimera légèrement la surface. Cette fraction du polluant au dessus de la nappe (le corps d'imprégnation) représente une source de pollution durable pour la nappe.



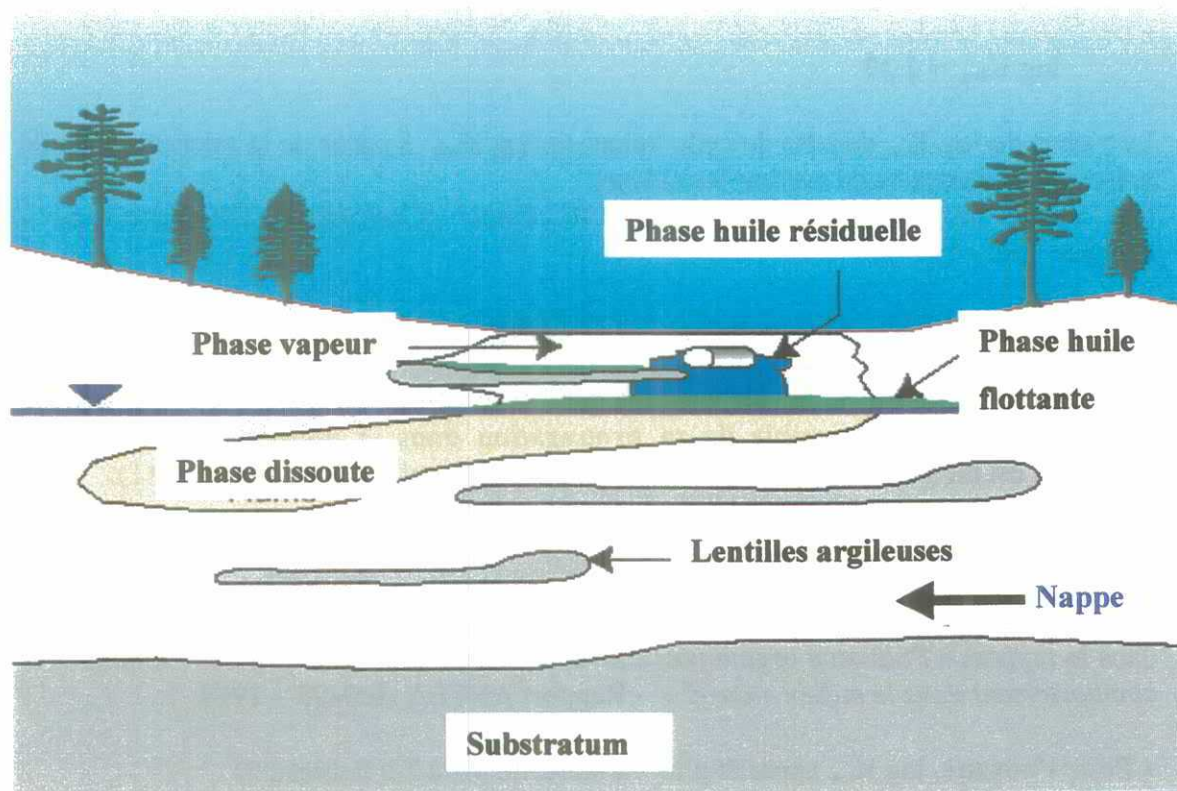
Extrait de : *Natural attenuation of chlorinated solvents in groundwater : principles and practices* (1997)
Industrial Members of the Bioremediation of Chlorinated Solvents Consortium of the Remediation Technologies Development Forum (RTDF)

Figure 1 – Schématisation d'une pollution par un polluant plus dense que l'eau

L'Hexane appartient à cette catégorie de polluants. Ces caractéristiques physico-chimiques sont données dans le tableau 2 ci-dessous :

Densité de la phase liquide (/ eau à 20 °)	0.66
Densité de la phase vapeur (/ air)	
Viscosité à 20 ° (en Pa.s)	0.3 10 ⁻³ (eau = 1.008 10 ⁻³)
Solubilité à 20 ° C (mg/l)	9.5
Tension de vapeur (en Pa)	13300
Constante de Henry (Pa.m ³ /mole)	
Coefficient de partage octanol - eau (en log)	3.17 à 3.94 (calculs)

Tableau 2- caractéristiques physico-chimiques de l'Hexane



Extrait de : *Natural attenuation of chlorinated solvents in groundwater : principles and practices* (1997)
Industrial Members of the Bioremediation of Chlorinated Solvents Consortium of the Remediation
Technologies Development Forum (RTDF)

Figure 2 – Schématisation d'une pollution par un polluant moins dense que l'eau

4.1.3 Rétention par la phase solide : sorption et retard de propagation

4.1.3.1 Affinité pour la phase solide

La référence des valeurs utilisées par ATE et des éléments de calcul étant également absents du rapport, on rappelle ci-dessous les principales notions s'appliquant aux phénomènes de rétention.

L'affinité d'un polluant pour la phase solide est quantifiée par deux grandeurs liées entre elles :

- d'une part le K_{ow} , coefficient de partage octanol/eau (cf § 2.1.1. ci-dessus)
- d'autre part le K_{oc} , coefficient de partage avec le carbone organique, calculable à partir du K_{ow} par une relation du type : $\log K_{oc} = a \log K_{ow} + b$

Pour un produit hydrophile, $\log K_{oc} < 2$ et pour un produit hydrophobe $\log K_{oc} > 4$

Pour le trichloro éthylène (TCE), on a :

$$\log K_{ow} = 2.29$$

La valeur de $\log K_{oc}$ déduite de cette valeur de $\log K_{ow}$ à partir de la relation générale présentée ci-dessus varie suivant les auteurs.

Une valeur moyenne est donnée par C.W. Fetter (Contaminant Hydrogeology – Prentice Hall - 1999) :

$$\log K_{oc} = 2.07, \quad \text{soit } K_{oc} = 117.5 \text{ ml/g}$$

Ces valeurs font du TCE un produit peu susceptible de subir une adsorption induisant un retard sensible de sa propagation dans la nappe. Dans le rapport d'ATE, il est dit au contraire que le TCE est « une molécule peu mobile » (p. 11).

Autres sources de valeurs

Pour une même valeur de $\log K_{ow}$, une valeur de $\log K_{oc}$ égale à 2.10 est mentionnée dans le rapport « *Polluants organiques courants : caractéristiques physico-chimiques et comportement dans le milieu naturel* » - Rapport ANTEA A00495 – 1994

- Pour l'hexane, $\log K_{ow}$ apparaît plus variable, de 3.2 à 3.9 (tableau 2)

$$\begin{aligned} \text{pour } \log K_{ow} = 3.2, \quad \log K_{oc} = 3.0 \quad \text{et } K_{oc} = 998 \\ \text{pour } \log K_{ow} = 3.9, \quad \log K_{oc} = 3.7 \quad \text{et } K_{oc} = 5000 \end{aligned}$$

L'hexane est donc beaucoup plus susceptible d'être adsorbé que le TCE et se rapproche de la catégorie des produits hydrophobes pour lesquels $\log K_{oc} > 4$.

4.1.3.2 Facteur de retard

Connaissant K_{oc} et la fraction de carbone organique dans l'aquifère f_{oc} (exprimée en fraction massique) on peut en déduire le coefficient de partage avec la phase solide K_d ($K_d = K_{oc} \cdot f_{oc}$) puis le facteur de retard, fonction de K_d , intervenant dans l'équation du transport (cf annexe)

♦ **Trichloroéthylène :**

Suivant les valeurs prises par f_{oc} , on aura donc les valeurs possibles suivantes de K_d et de R .

Fraction massique de carbone organique	$K_d = K_{oc} \cdot f_{oc}$ $= 117.5 \cdot f_{oc}$ (l / kg)	Facteur de retard R (porosité =20%)	
		$\rho_a = 1.5$	$\rho_a = 1.8$
0.001	0.117	1.88	2.05
0.002	0.234	2.75	3.11
0.005	0.587	5.4	6.28

Le facteur de retard R a été calculé pour deux valeurs de la densité apparente du milieu (apparente car elle intègre la porosité du milieu, cf annexe) : $\rho_a = 1.5$ et $\rho_a = 1.8$

La connaissance de la fraction de carbone organique est donc essentielle dans l'évaluation du K_d et donc dans celle du facteur de retard.

Des valeurs plus faibles encore, inférieures à 1.5, se rencontrent, par exemple dans l'article récent suivant, décrivant une modélisation complexe de solvants chlorés dans un aquifère alluvial de sables et graviers (site de la base aérienne de Dover aux USA) :

Natural attenuation of chlorinated ethene compounds : model development and field scale application at the Dover site (T.P. Clement et al., Journal of Contaminant Hydrology – Vol 42, p.113-140 , 2000).

Dans cette étude, le facteur de retard estimé pour le TCE est de 1.2

♦ **Hexane :**

Fraction massique de carbone organique	$K_d = K_{oc} \cdot f_{oc}$ $= 998 \cdot f_{oc}$ (l / kg)	Facteur de retard R (porosité=20%)	
		$\rho_a = 1.5$	$\rho_a = 1.8$
0.001	0.998	8.5	9.98

4.1.4 Dégradation du TCE

L'aptitude des solvants chlorés à être biodégradés est largement reconnue, mais dans les eaux souterraines, il est difficile de quantifier ces transformations en raison de l'hétérogénéité du milieu, de la diversité des conditions physico-chimiques y régnant et de la méconnaissance du type et de la quantité de bactéries présentes.

En conditions aérobie le TCE ne se dégraderait pas significativement, à moins d'une stimulation des bactéries indigènes par exemple par du méthane (A. Bourg, C. Mouvet, D.N. Lerner - 1992 - *A review of the attenuation of trichloroethylene in soils and aquifers*. Quarterly Journal of Engineering Geology Vol 25, p. 359-370).

Par contre en conditions anaérobie le TCE peut se dégrader suivant des processus abiotiques (par voies chimiques uniquement) ou biotiques (impliquant des micro-organismes). Dans ce dernier cas, il existe une chaîne de dégradations produisant du dichloro-éthylène, puis du chlorure de vinyle dégradé à son tour en éthylène.

Chaque étape de déchloration est théoriquement plus lente que la précédente et le processus peut ne pas parvenir au stade ultime. Il peut donc y avoir accumulation de produits dérivés, par exemple du chlorure de vinyle (Industrial Members of the Bioremediation of Chlorinated Solvents Consortium of the Remediation Technologies Development Forum (RTDF) - "*Natural attenuation of chlorinated solvents in groundwater : principles and practices*", 1997)

Il résulte de la complexité de ces processus une grande variabilité des cinétiques de dégradation (supposées le plus souvent du premier ordre et traduites par des constantes de dégradation). En termes de demie vie, l'intervalle de variation est très large, allant de quelques centaines de jours à quelques milliers.

Par exemple, dans l'article cité ci-dessus, au § 2.1.3, (*Natural attenuation of chlorinated ethene compounds : model development and field scale application at the Dover site* (T.P. Clement et al., Journal of Contaminant Hydrology – Vol 42, p.113-140 , 2000), le temps de demie-vie du TCE obtenu par calage du modèle de pollution (calage à partir des mesures de TCE faites dans la nappe), varie suivant les zones de 770 jours à 6160 jours (en conditions anaérobie).

4.1.5 Conclusion

En résumé, nous reproduisons ci-dessous la traduction de la conclusion d'un article consacré au trichloroéthylène:

*« Le TCE, qu'il soit sous sa forme non miscible à l'eau ou sous forme dissoute, qu'il soit présent dans un milieu non saturé en eau ou dans un milieu saturé, est susceptible de migrer rapidement (**quite fast**). Une vaporisation partielle pourra conduire à une atténuation des concentrations de même qu'une dégradation. Le TCE dissous est faiblement adsorbé et sa rétention par la phase solide n'induit qu'un faible retard à la migration ("**very poor retardation**") . Une transformation abiotique est probablement insignifiante en conditions naturelles. Les transformations biotiques sont favorisées par des conditions anaérobie. Le TCE est donc susceptible de migrer facilement dans les sols et les aquifères et de contaminer d'importants volumes de nappe (**large groundwater volumes may be contaminated**) . »*

4.2 DONNEES UTILISEES PAR ATE

4.2.1 Porosité et dispersivité.

La porosité intervenant dans l'entraînement d'un polluant est la porosité dite cinématique (cf annexe) correspondant à la fraction des vides où l'eau est réellement mobile.

Les valeurs retenues par ATE pour cette porosité (appelée dynamique, p. 10) sont :

- 20 % dans les alluvions
- 5 % dans les remblais
- 2% dans les zones compactées

La porosité cinématique est en principe déterminée en interprétant des traçages (injection d'un traceur artificiel et analyse de la courbe de restitution). Faute d'expérimentation, des valeurs supposées correspondre au type de milieu étudié sont la plupart du temps choisies. Il en est sans doute ainsi des valeurs retenues par ATE.

La valeur de 20 % est peut être un peu forte pour une porosité cinématique et celle de 5 % peut être un peu faible, compte tenu de la nature des remblais.

La dispersion, à l'origine de l'étalement longitudinal et transversal d'une pollution, est sous la dépendance de paramètres caractéristiques du milieu appelés dispersivité (cf annexe). Il y a une dispersivité longitudinale et une dispersivité transversale. Les valeurs retenues par ATE pour ces paramètres (appelés improprement coefficients de dispersion, p.10) sont :

$$\alpha_L = 10 \text{ m}$$

$$\alpha_T = 1 \text{ m}$$

Comme pour la porosité cinématique, les dispersivités sont déterminées en interprétant des traçages.

Les valeurs retenues ici sont classiques et respectent le rapport de 1/10 généralement admis entre dispersivités longitudinale et transversale. Elles nous semblent cependant un peu faibles compte tenu de la grande hétérogénéité du site modélisé susceptible d'entraîner une dispersion sensible du polluant.

4.2.2 Paramètres de sorption et facteur de retard

4.2.2.1 Cas du TCE

La valeur retenue pour le K_{ow} est de 240 soit $\log K_{ow} = 2.38$. Elle s'écarte donc légèrement de la valeur la plus fréquemment rencontrée dans les bases de données : $\log Kow = 2.29$ soit $Kow = 195$ (cf paragraphe ci-dessus) .

La valeur du coefficient d'adsorption K_d calculée par ATE à partir de cette valeur de K_{ow} (*sans précision des termes de passage*) est de

$$K_d = 0.84 \text{ pour une fraction massique de carbone organique } f_{oc} = 0.001$$

Le facteur de retard n'est pas mentionné dans le rapport ATE . En reprenant les valeurs de porosité de 20 % et de masse volumique de 1800 kg/m³, ce facteur de retard serait égal à

R = 8.6 pour $K_d = 0.84$ au lieu de **R = 2** comme calculé ci-dessus (cf. § sur le facteur de retard) ou des valeurs inférieures à 2 citées dans la littérature.

Soit un retard à la propagation non négligeable si ce facteur est effectivement appliqué au transport (non mentionné explicitement).

4.2.2.2 Cas de l'Hexane

La valeur retenue pour le K_{ow} est de 8709 soit $\log K_{ow} = 3.94$ valeur correspondant à la borne supérieure du tableau 2 ci-dessus.

La valeur du coefficient d'adsorption K_d calculée par ATE à partir de cette valeur de K_{ow} (*sans précision des termes de passage*) est de :

$K_d = 29.3$ pour une fraction massique de carbone organique $f_{oc} = 0.001$

Soit un facteur de retard important R = 220 (contre 8.5 calculé ci-dessus).

De telles valeurs du facteur de retard appliquées à l'équation du transport induiront non seulement un ralentissement de la propagation mais aussi une atténuation des concentrations.

4.2.3 Dégradation

Le choix fait par ATE des constantes de dégradation apparaît arbitraire et en tout cas non argumenté:

demi-vie de 300 jours pour le TCE
demi-vie de 3 ans pour l'hexane.

Concernant le TCE, la valeur de 300 jours choisie pour la demi-vie, est plutôt une valeur minimale par rapport aux valeurs le plus souvent citées. Elle implique donc une rapide disparition du produit.

Pour l'Hexane, il s'agit d'une supposition, "faute d'une valeur parfaitement connue" (p.11 du rapport).

La prise en compte de ces constantes dans les simulations ne peut conduire qu'à une minimisation des concentrations simulées .

Indépendamment de ces valeurs qui ont été retenues par ATE, il aurait aussi été souhaitable de moduler les constantes de dégradation en fonction des zones rencontrées par le polluant au cours de sa migration, zones sans doute plus ou moins réductrices, plus ou moins riches en matière organique, en fonction de la nature des remblais.

4.3 HYPOTHESES PRISES EN COMPTE POUR LES SIMULATIONS

4.3.1 Pollution accidentelle

La source de pollution (TCE et Hexane) a été simulée en imposant une concentration correspondant à la limite de solubilité C_{\max} du produit (condition dite d'injection à concentration imposée).

Dans ce cas, on suppose qu'un flux d'eau "pure" amont se charge au contact de la phase non miscible d'une concentration égale à cette concentration maximale C_{\max} .

Théoriquement, en supposant qu'il y a une masse de produit M_p (kg) susceptible de se solubiliser et qu'il y a un flux d'eau constant Q_{nappe} (m^3/s) se chargeant de la fraction soluble, on a : $C_{\max} \cdot Q_{\text{nappe}} \cdot T = M_p$ (T étant la durée d'émission).

M_p est de 323 kg pour le TCE et de 145 kg pour l'hexane (p.12).

$C_{\max} = 1100$ mg/l pour le TCE et 9.5 mg/l pour l'hexane.

ATE fait l'hypothèse que la masse M_p source de pollution est la masse totale du produit déversé, prenant un parti maximaliste(sévère mais plus sécuritaire) en ne tenant pas compte de la dégradation et de la volatilisation du produit (p.12) ni de la phase piégée dans la zone non saturée (la quantification est, il est vrai, difficile).

Comme mentionné page 12, la durée d'injection T est bien fonction de la limite de solubilité des produits, mais aussi, comme le montre la relation ci-dessus du flux d'eau Q_{nappe} .

Les durées théoriques d'émission obtenues par ATE, sans qu'il soit fait mention d'un flux d'eau, sont de :

- 7 ans pour le TCE
- 346 ans pour l'Hexane.

Il est difficile de vérifier la pertinence de ces chiffres.

4.3.2 Pollution diffuse

Il est difficile de porter une appréciation sur la simulation étant donné le peu d'éléments fournis dans le rapport (p.26). Il en résulte une série de questions concernant les deux aspects suivants de la simulation.

1) On peut s'étonner des estimations qui sont faites de la vitesse réelle d'écoulement et de la durée de parcours entre le chantier et la plage bleue (p. 28 du rapport) . En effet, un logiciel de modélisation hydrodynamique capable de calculer des trajectoires peut aussi fournir les caractéristiques de ces trajectoires, c'est à dire leur longueur et les temps de parcours entre différents points. Il n'est donc nul besoin de faire des estimations globalisantes puisque les caractéristiques des zones traversées intervenant dans les calculs (perméabilités, porosités, gradients d'écoulements) sont nécessairement prises en comptes.

Par ailleurs les temps de parcours étant directement proportionnels à la porosité cinématique (cf annexe 1.2), l'incertitude sur les porosités se répercute directement sur eux. **Le temps de parcours de 17 ans annoncé (p.28) peut tout aussi bien être divisé par 2 ou 3** (d'autant plus qu'il peut exister des cheminements préférentiels compte tenu de l'hétérogénéité du milieu).

2) La façon dont la pollution diffuse est traitée n'est pas clairement explicitée. Pour quelle raison la simulation de la pollution s'effectue t-elle en deux temps (p.26), injection d'abord puis migration ? Comment cette injection est-elle réalisée : s'agit-il d'un flux de masse partant de la surface du sol et se diluant dans les mailles au droit du chantier ? Que faut-il entendre par concentration d'injection ? S'agit-il de la concentration maximale après dilution ou bien s'agit-il de la concentration du produit dans la lame d'eau infiltrée ? Comment expliquer que les concentrations au niveau du chantier puissent être de l'ordre de 100 % de la concentration d'injection puisqu'il doit y avoir dilution ?

Quoiqu'il en soit, une analyse de sensibilité sur les paramètres aurait été, là aussi, indispensable.

5 Conclusion

Quelle que soit la simulation effectuée (pollutions accidentelles avec TCE ou Hexane et pollution diffuse), compte tenu des lacunes constatées, des choix faits par ATE (hypothèses et données) et de la démarche même de modélisation, il est difficile de souscrire aux résultats obtenus dont la plupart sont d'ailleurs invérifiables.

Les constats faits à l'issue des simulations de pollutions accidentelles - pollution localisée du TCE autour du point d'injection (p.20), faible extension du panache de contamination pour l'hexane (p.24) - ne sont que le reflet des valeurs des paramètres de sorption et de dégradation introduits dans le modèle. Ces valeurs ne peuvent que retarder la propagation et minimiser les niveaux de concentration et, de plus, ne s'accordent pas avec celles généralement admises et utilisées.

Quant à la simulation de la pollution diffuse, elle suscite plus de questions qu'elle n'apporte de réponses.

La modélisation de pollutions de nappes occasionnées par des produits tels que le TCE ou hydrocarbures divers est indéniablement une tâche difficile. Elle doit s'appuyer non seulement sur une bonne connaissance de l'hydrodynamique mais aussi sur une appréciation des conditions bio-physico-chimiques susceptibles d'être rencontrées dans l'aquifère. Une étude bibliographique poussée doit permettre de compléter les éléments manquants et toute simulation doit être accompagnée d'une analyse de sensibilité, indispensable pour tenir compte des incertitudes pouvant peser sur des paramètres jouant un rôle important dans les processus de transport, d'adsorption et de dégradation. Enfin, un logiciel approprié doit être utilisé pour traiter ces problèmes dans leur complexité.

Par ailleurs, s'il est bien sûr légitime d'adopter des hypothèses simplificatrices, celles-ci doivent rester réalistes et cohérentes entre elles : on peut par exemple ne simuler que la fraction du polluant dissoute dans l'eau, mais elle doit être évaluée aussi précisément que possible en tenant compte de la fraction résiduelle piégée dans la zone non saturée, de la vaporisation, ... Ces calculs peuvent être menés à l'aide de formules appropriées intégrant les caractéristiques du produit.

ANNEXE

MÉCANISMES GÉNÉRAUX DU TRANSPORT DE MASSE

La propagation d'éléments **dissous** dans une nappe est sous la dépendance des principaux mécanismes suivants:

- 1) La **convection**, qui est l'entraînement de l'élément à la vitesse moyenne de l'eau .
- 2) La **dispersion**, qui provoque l'étalement du nuage de pollution sous l'effet de l'hétérogénéité du milieu.
- 3) les **échanges avec la phase solide et la phase eau immobile**. Ces échanges induisent un retard à l'avancement du polluant et atténuent les teneurs. La vitesse de ces échanges est réglée par une cinétique.
Dans certains cas, lorsqu'il y a adsorption des éléments sur la matrice solide, il est possible de rendre compte du retard à l'avancement par l'intermédiaire d'un simple coefficient appelé facteur de retard.
- 4) la **dégradation** ou la **biodégradation** pour certains éléments.

1. CONVECTION ET TEMPS DE PARCOURS

1.1. Vitesse réelle

Un flux d'eau Q (en m^3/s) passant au travers d'une section S de milieu poreux véhicule une concentration C (en kg/m^3). Par définition, le flux de masse par convection au travers de la section S est le produit du débit Q par la concentration C :

$$\Phi_{conv} = Q.C \quad [kg/s]$$

La section réelle S_r au travers de laquelle le flux d'éléments dissous passe est inférieure à la section géométrique S car il faut tenir compte de l'existence des grains solides et d'une fraction d'eau dite " immobile " qui ne participe pas à l'écoulement.

On définit donc une porosité dite cinématique qui correspond à la fraction d'eau mobile dans le milieu poreux et qui est bien sûr inférieure à la porosité totale ; c'est le rapport de la section réelle d'écoulement à la section totale :

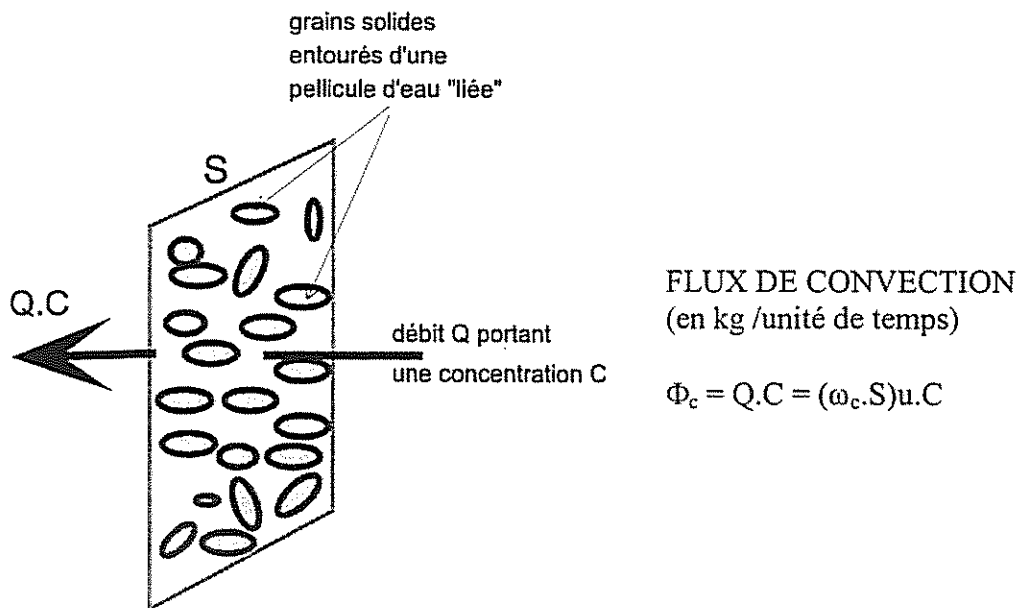
$$\omega_c = \frac{S_r}{S}$$

La section réellement offerte au passage de l'eau est donc : $S_r = \omega_c.S$ et la vitesse de l'eau dans cette section S , appelée vitesse réelle, est alors :

$$u = \frac{Q}{\omega_c S} = \frac{V_{Darcy}}{\omega_c}$$

Le flux de convection est alors :

$$\Phi_{conv} = Q.C = (\omega_c.S)u.C$$

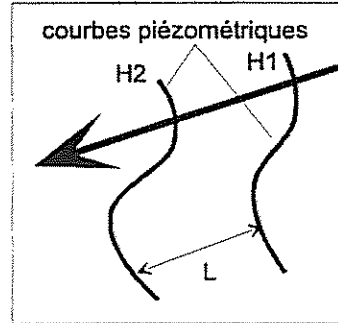
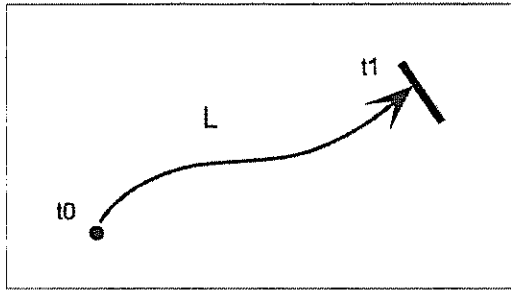


- Q est le flux d'eau traversant la section S (en m³/unité de temps)
- C est la concentration (en kg/m³)
- ω_c est la porosité cinématique
- u est la vitesse de l'eau (en m/s)

Figure 1 - Flux de masse par convection au travers d'une section S de milieu poreux.

2. Temps de parcours par convection pure

C'est le temps t_p mis par un élément chimique véhiculé à la vitesse u définie ci-dessus pour parcourir une distance L dans un milieu poreux.



Ce temps est donné par (cf § 2.2.2) $t_p = \omega_c \frac{L}{K.J}$

Le temps de parcours est donc directement proportionnel à la porosité cinématique : plus celle-ci sera petite, plus le temps de parcours sera bref et inversement.

Quelques valeurs :

Perméabilité K (m/s)	Gradient J (%)	Porosité cinématique (%)	Vitesse réelle (m/an)
10^{-4} m/s	0.5	5	315 m/an
$2 \cdot 10^{-4}$ m/s	0.75	2.5	1890 m/an

De faibles incertitudes sur les paramètres, jouant toutes en sens défavorable en terme de sécurité, par exemple un facteur 2 sur la perméabilité (en augmentation), un facteur 1.5 sur le gradient (en augmentation) et un facteur 2 sur la porosité (diminution) peut donc induire une différence d'estimation appréciable sur les vitesses. Dans le tableau ci-dessus, on passe ainsi de 315 m/an à 1890 m/an, soit 6 fois plus (d'où des temps de parcours divisés par 6).

2. DISPERSION

La dispersion est liée à l'hétérogénéité du milieu poreux à petite et grande échelle ; elle est à l'origine de "l'étalement" d'un panache de pollution et contribue à diluer les concentrations.

De même qu'il existe un flux de convection, il existe aussi un flux de dispersion. Celui-ci est supposé proportionnel au gradient de la concentration C (loi de Fick) . Au travers d'une section S on a, en faisant intervenir la porosité cinématique:

$$\Phi_{\text{DISP}} = -\omega_c . S . D \frac{dC}{dx} \quad [\text{kg/s}]$$

D est le coefficient de dispersion (m^2/s). Il existe un coefficient de dispersion longitudinale (suivant le sens de l'écoulement) et 2 coefficient de dispersion transversaux (suivant les 2 directions orthogonales, horizontale et verticale). Les coefficients de dispersion sont proportionnels à la vitesse effective u de l'eau :

$$\begin{aligned} D_L &= \alpha_L . u \\ D_T &= \alpha_T . u \end{aligned}$$

α_L et α_T sont les **dispersivités** longitudinale et transversale, exprimées en m. Pour une nappe, les valeurs de α_L sont de l'ordre du m à la centaine de m et plus (il existe un effet d'échelle lié aux hétérogénéités du milieu, cf § 2.3.3.2. suivant).

On considère en général que α_T (suivant oy) vaut le dixième de α_L . Suivant la verticale Oz on admet que α_T est de l'ordre de $\alpha_L / 100$.

3. ADSORPTION ET FACTEUR DE RETARD

Le facteur de retard intervient dans le cas d'une adsorption de l'élément considéré sur la phase solide en supposant une cinétique linéaire, instantanée et réversible. Dans ce cas, on montre que le facteur de retard est multiplicatif de la porosité.

Il est donné par :

$$R = 1 + \frac{\rho_d}{\omega} K_d$$

K_d est le coefficient de partage (en m^3/kg) ; il définit la distribution de l'élément entre la phase eau et la phase solide à l'équilibre.

ω est la porosité,

ρ_d est la masse volumique (sèche) du terrain (en kg/m^3)

Pour un même substance, selon la composition minéralogique de la phase solide, le K_d peut varier de plusieurs ordres de grandeurs.

Il est en général bien corrélé avec la teneur en carbone organique du milieu f_{oc} (exprimé en fraction massique) et l'on a la relation suivante :

$$K_d = K_{oc} \cdot f_{oc}$$

K_{oc} , appelé coefficient de partage carbone organique / eau caractérise l'affinité du composé vis à vis de la matière organique.

On montre qu'il existe une très bonne corrélation entre ce coefficient de partage K_{oc} et le coefficient de partage octanol/eau noté K_{ow} , égal au rapport entre les concentrations à l'équilibre du produit dans l'octanol et dans l'eau.

La relation entre K_{oc} et K_{ow} est de la forme :

$$\log K_d = a \log K_{ow} + b$$

BRGM
Service Géologique Régional d'Ile-de-France
7, rue du Théâtre – 91884 Massy – France
Téléphone : (33) 01.69.75.10.25 – Télécopieur 01.60.11.73.57