

MÉMOIRE DE MAÎTRISE

INRS-EAU

"APPLICATION DE LA MODÉLISATION MATHÉMATIQUE
AU PROBLÈME DE CONTAMINATION DES EAUX SOUTERRAINES
DUE À L'ÉPANDAGE DE RÉSIDUS HUILEUX SUR LE SOL"

PAR

CLÉMENT DROLET

DIRECTEUR

JEAN-PIERRE VILLENEUVE

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

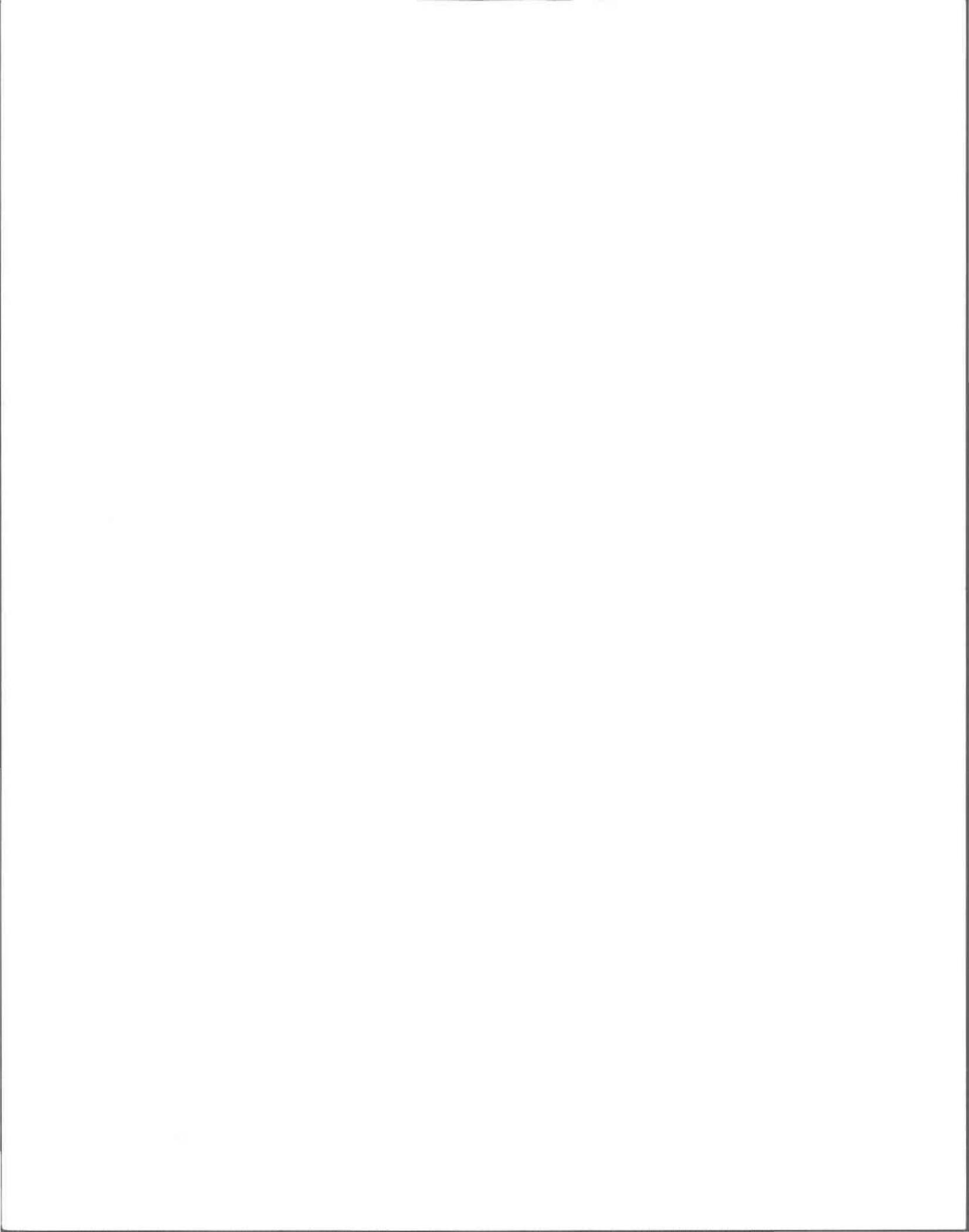
2700, rue Einstein

Case postale 7500

Ste-Foy (Québec)

G1V 3B4

Novembre 1987



REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier mon directeur de mémoire, le docteur Jean-Pierre Villeneuve, mon correcteur interne, le docteur Pierre G.C. Campbell ainsi que messieurs Olivier Banton, Pierre Lafrance et Claude Robert pour leurs précieux conseils et pour le temps qu'ils m'ont accordé lors de la réalisation de cette étude.

De plus, je tiens à remercier mesdames Lise Raymond, Ody Giroux et Hélène Giroux, ainsi que messieurs Sylvain Deschênes et André Parent pour leur excellente collaboration et pour le très grand soin qu'ils ont porté à la réalisation technique du document.



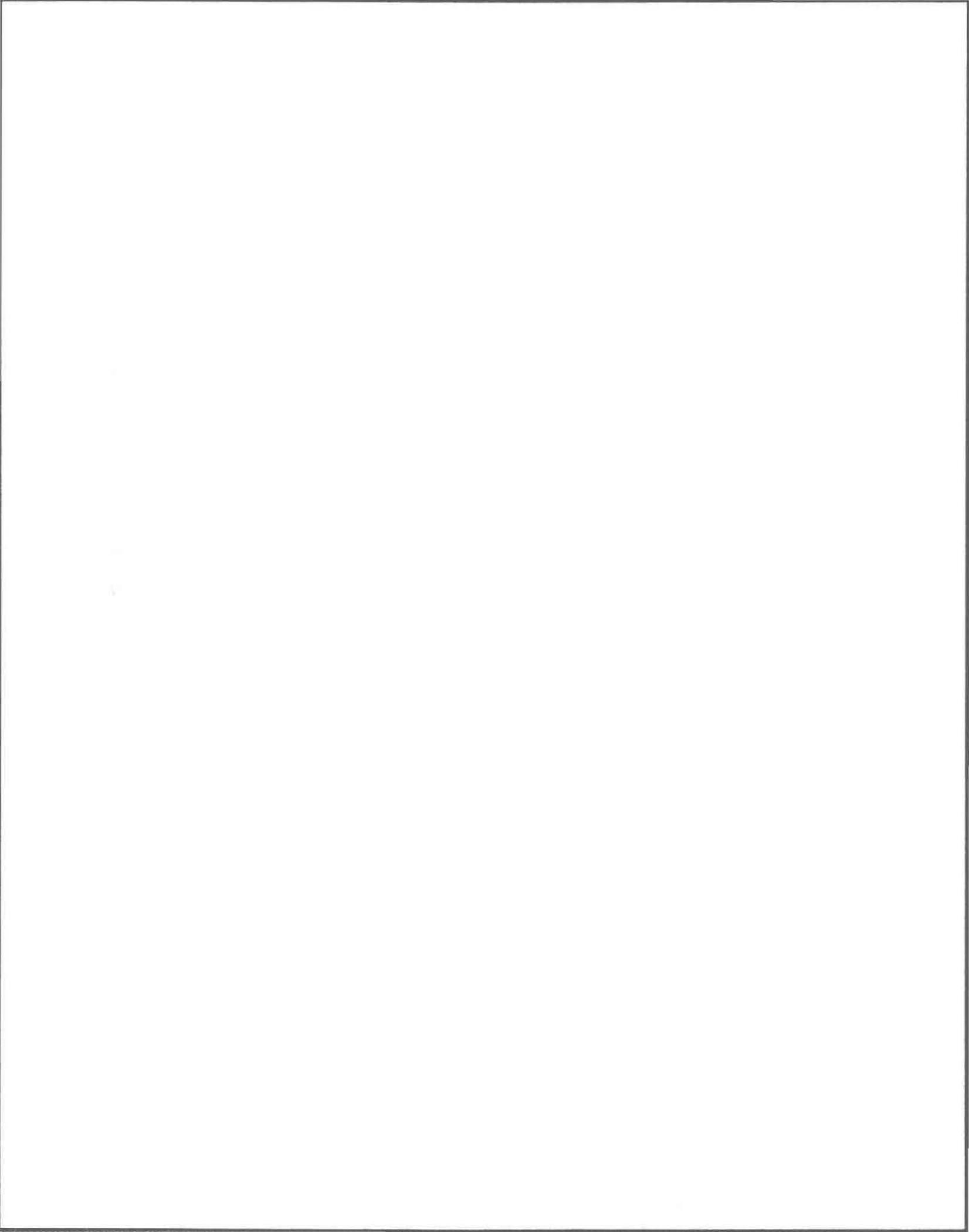
RÉSUMÉ

Le but de la présente étude est de démontrer l'applicabilité de la modélisation mathématique à un cas québécois de risque de contamination des eaux souterraines dû à l'épandage de résidus huileux sur le sol.

Ce type d'épandage a été considéré dans la présente étude parce qu'il constitue une pratique de plus en plus souvent proposée par les entreprises pétrolières, aux autorités du ministère de l'Environnement pour traiter et disposer de cette catégorie de déchets industriels.

D'autre part, c'est le modèle "Pesticide Root Zone Model" (PRZM) qui a été choisi pour effectuer les simulations parce qu'il a été conçu dans le but d'évaluer des cas de migration de contaminants vers les eaux souterraines pour des situations présentant plusieurs analogies avec les épandages de résidus huileux. De plus, ce modèle est relativement simple d'utilisation et représente un outil de gestion qui pourrait être avantageusement exploité par les milieux gouvernementaux.

Les diverses simulations effectuées dans la présente étude concernent la migration verticale de trois hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP); le benzo(a)pyrène, le phénanthrène et le pyrène, à travers un till argileux. De plus, les valeurs des paramètres hydrologiques ont été choisies afin de représenter le mieux possible les conditions prévalantes dans la région de Montréal, où se trouvent les entreprises pétrolières susceptibles de pratiquer

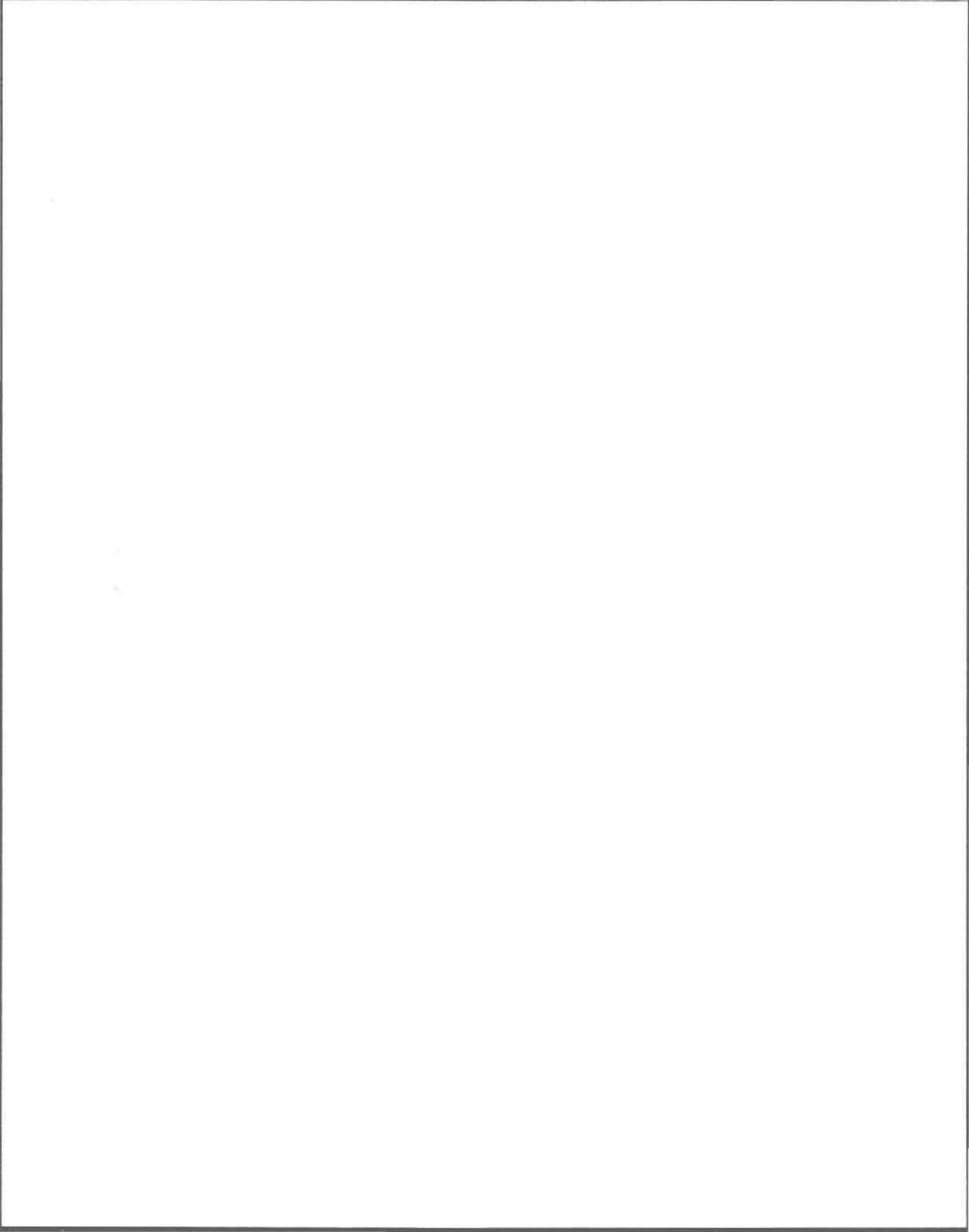


l'épandage de résidus huileux sur le sol, comme moyen de traitement et de disposition de leurs déchets industriels.

Les différentes simulations effectuées ont permis de déterminer la profondeur de migration des contaminants étudiés et le degré d'accumulation de ceux-ci dans le milieu souterrain. De plus l'influence du taux de dégradation des contaminants, de la granulométrie du sol et du contenu en matière organique du sol sur le destin des contaminants ont été évalués.

Les principales conclusions de la présente étude sont à l'effet que:

- 1) Bien que le phénanthrène soit le plus mobile des trois contaminants étudiés, il ne migre pas, tant dans la phase adsorbé au sol que dans la phase dissoute, à plus de 50 cm de profondeur en concentration supérieure à la limite de détection.
- 2) Les trois HAP étudiés se retrouvent principalement dans la phase adsorbé au sol et très peu dans la phase dissoute.
- 3) Le taux de dégradation des contaminants a une très grande influence sur la persistance de ceux-ci dans le milieu souterrain. Le benzo(a)pyrène qui a un taux de dégradation très élevé ne s'accumule pas dans le sol ou dans l'eau de la zone vadose, même pour une période de plusieurs années d'épandages. Par ailleurs, le phénanthrène qui a un faible taux de dégradation, s'accumule dans le sol, au cours des deux premières années d'épandage.



- 4) La granulométrie du sol n'a qu'une faible influence sur les concentrations calculées de HAP dans les phases dissoutes et adsorbés au sol.
- 5) Lorsque le contenu en matière organique du sol est élevé, les HAP sont davantage concentrés dans la phase adsorbée au sol et ils migrent moins en profondeur.

Mentionnons également que, par la multitude de cas théoriques pouvant être l'objet de simulations telles que celles incluses à la présente étude, il a été démontré que la modélisation mathématique constitue un outil pouvant aider les gestionnaires à déterminer les conditions optimales minimisant la migration de contaminants dans le sol suite à des épandages de résidus huileux.

Enfin, dans le but d'amélioration la justesse ou la représentativité des prédictions des modèles mathématiques appliqués à des cas d'épandage de résidus huileux sur le sol, il est recommandé de favoriser la recherche dans les domaines concernant: 1) la détermination des coefficients de partition des contaminants entre les phases huile, eau et sol; 2) la détermination du taux de dégradation des contaminants organiques mentionnés au tableau 1.2, dans les phases huile, eau et sol; et 3) la détermination de l'importance de la compétition entre divers contaminants pour les sites d'adsorption et modélisation mathématique de cette compétition.

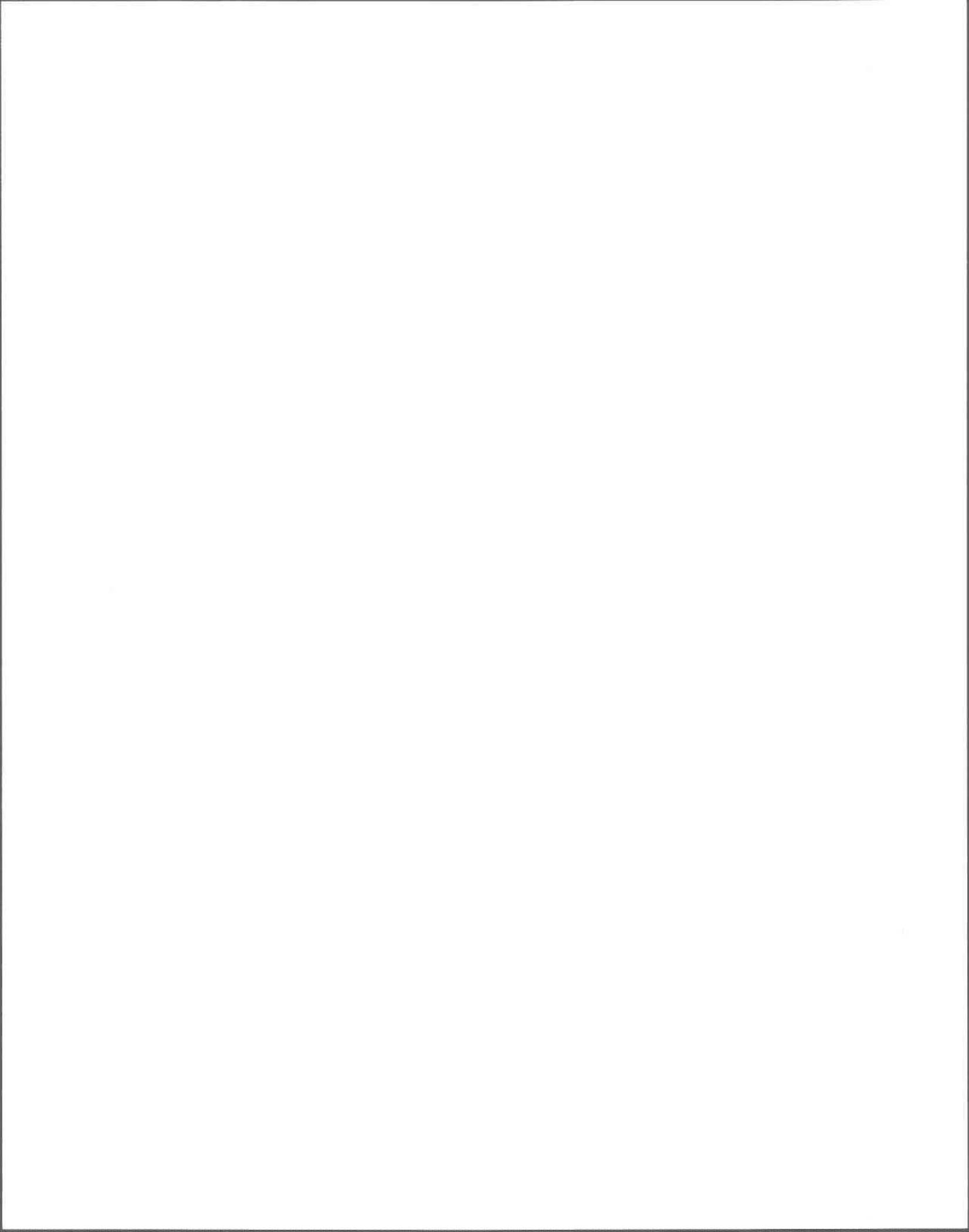
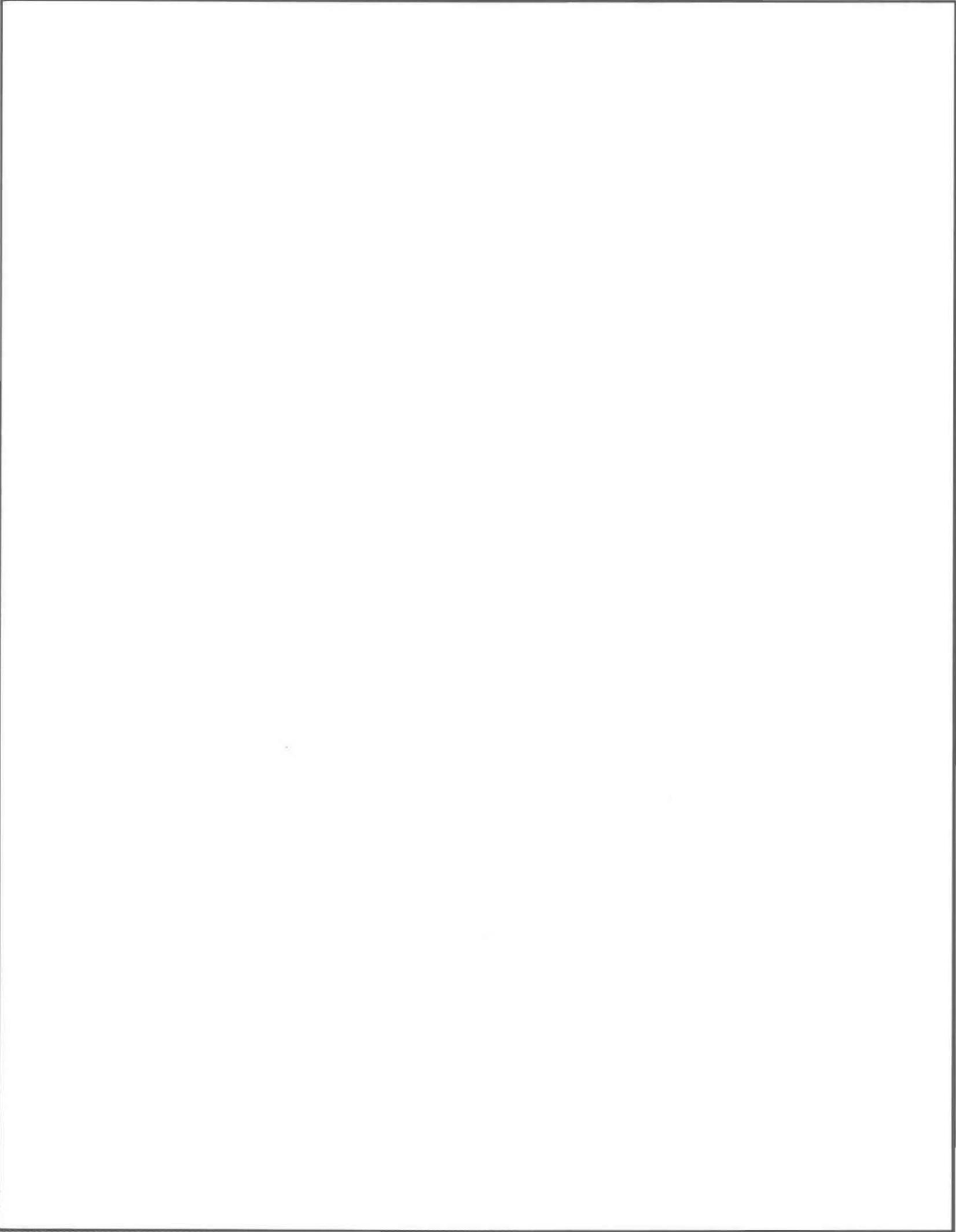
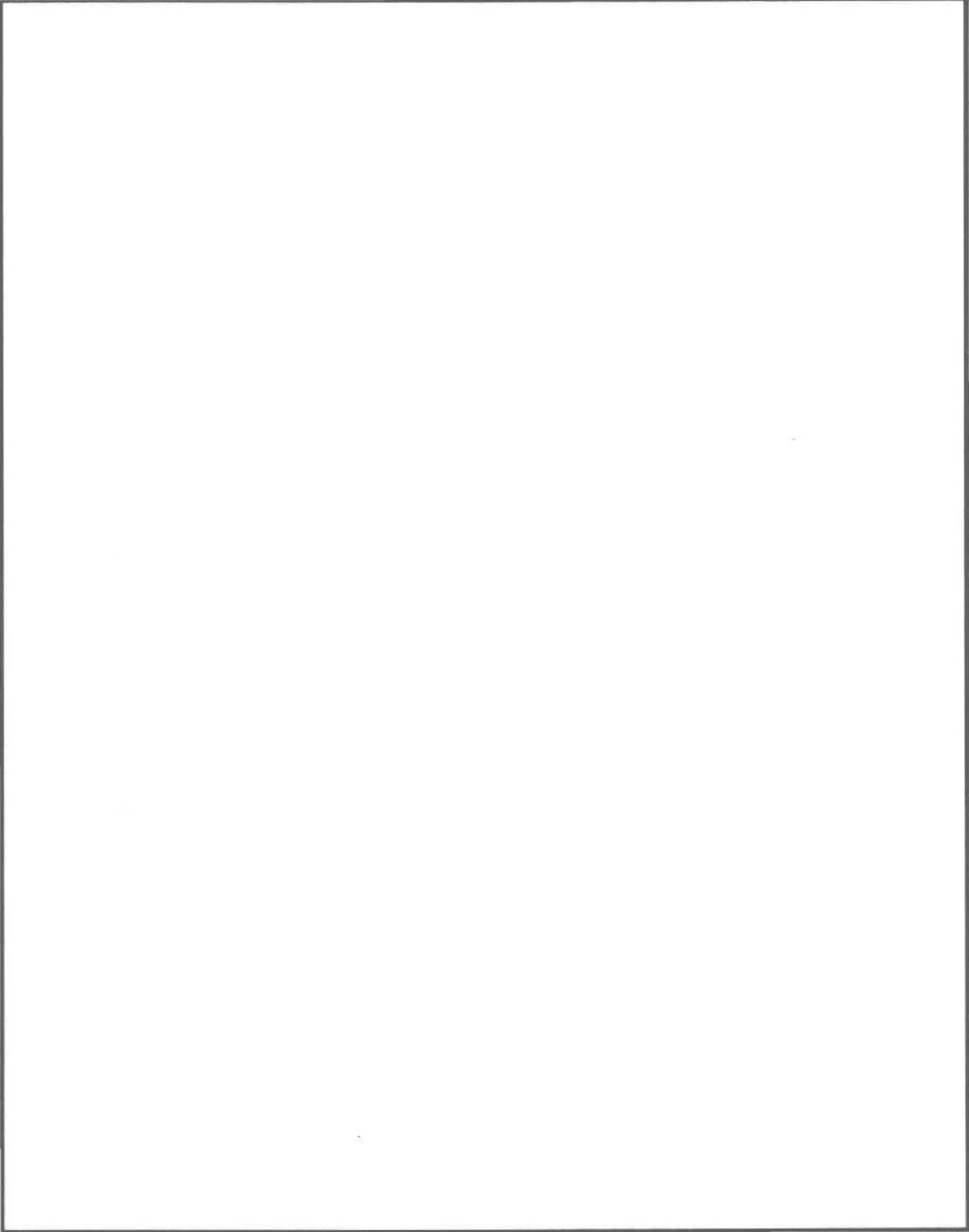


TABLE DES MATIÈRES

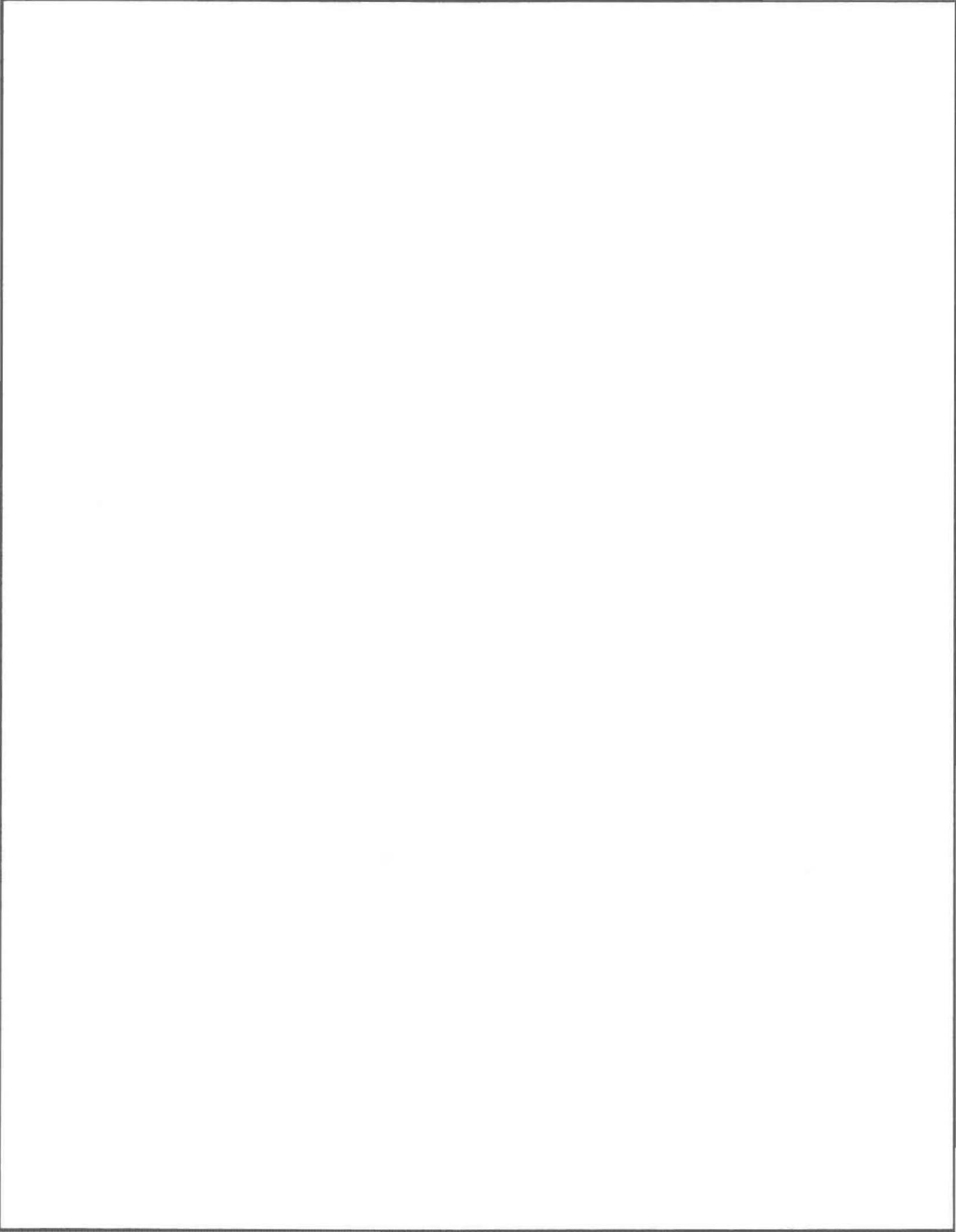
	<u>Page</u>
REMERCIEMENTS	i
RÉSUMÉ	ii
TABLE DES MATIÈRES	v
LISTE DES TABLEAUX	viii
LISTE DES FIGURES	ix
PROBLÉMATIQUE	1
INTRODUCTION	5
1. ÉPANDAGE DE RÉSIDUS HUILEUX SUR LE SOL	9
1.1 Historique	9
1.2 Aspects légaux	10
1.3 Aspects techniques	11
1.3.1 Caractéristiques des résidus huileux	11
1.3.2 Prétraitement des résidus huileux	12
1.3.3 Dégradation des résidus huileux	12
1.3.4 Épandage sur le sol	17
1.4 Migration de contaminants	17
2. ANALOGIES ENTRE L'ÉPANDAGE DE RÉSIDUS HUILEUX ET L'ÉPANDAGE DE PESTICIDES	19
2.1 Analogies	19
2.2 Différences	20



	<u>Page</u>
3. LES MODÈLES MATHÉMATIQUES	25
3.1 Les principes de la modélisation mathématique	25
3.1.1 Les modèles déterministes	25
3.1.2 Les modèles stochastiques	29
3.2 Utilisations et limitations des modèles	30
4. LE MODÈLE "PESTICIDE ROOT ZONE MODEL"	33
5. APPLICATION DU MODÈLE PRZM À UN CAS D'ÉPANDAGE DE RÉSIDUS HUILEUX SUR LE SOL	35
5.1 Données d'entrée	35
5.1.1 Fichier météorologique	35
5.1.2 Paramètres hydrologiques	36
5.1.3 Paramètres de culture des plantes	36
5.1.4 Paramètres du sol	36
5.1.5 Paramètres des contaminants	37
5.2 Simulation pour le Benzo(a)pyrène	40
5.3 Simulation pour le Phénanthrène	43
5.3.1 Profil de migration du phénanthrène pour 2 années d'épandage .	44
5.3.2 Profil de migration du phénanthrène pour huit années d'épandage	46
5.3.3 Profil de migration du phénanthrène en fonction de la granulométrie du sol	47

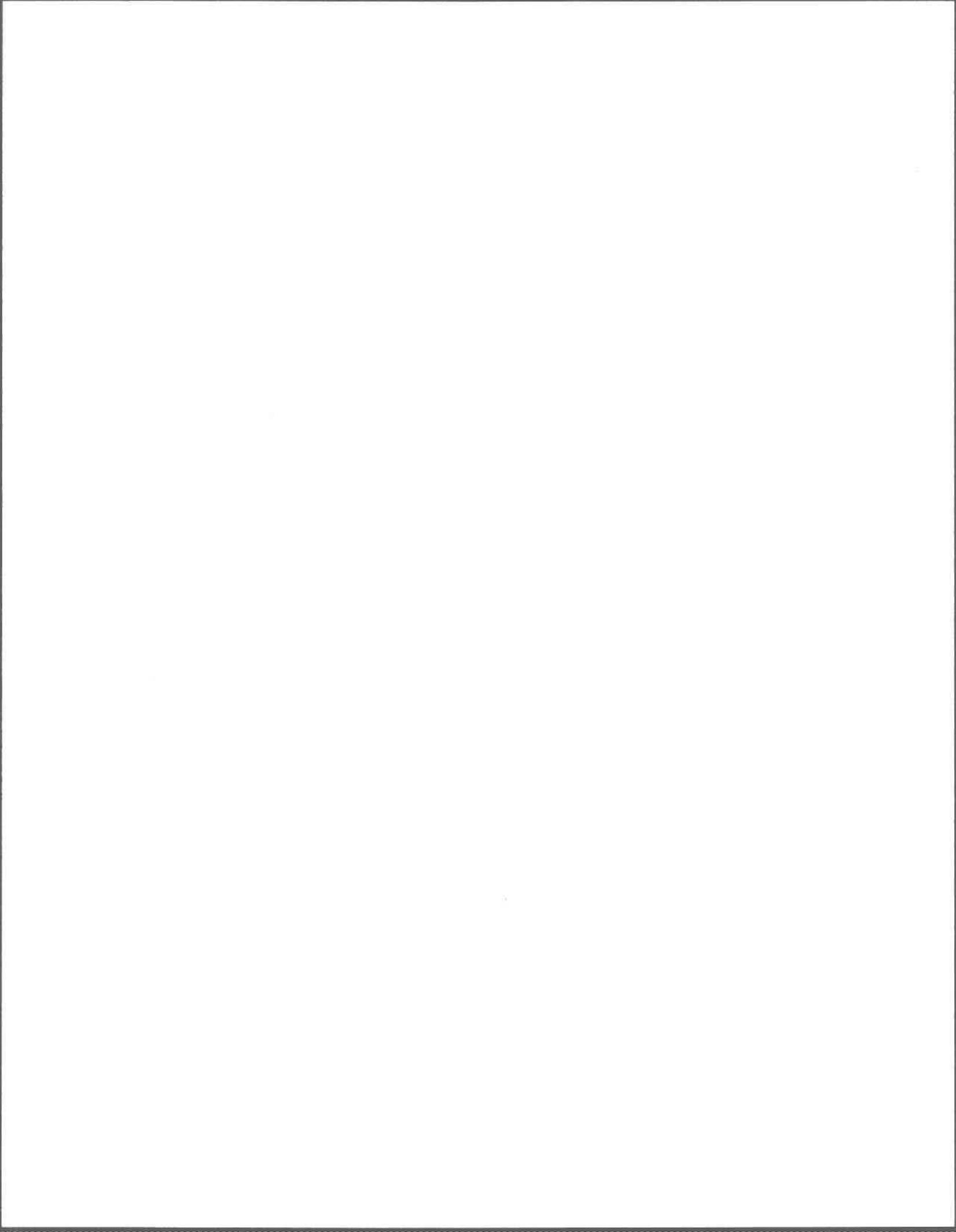


	<u>Page</u>
5.3.4 Profil de migration du phénanthrène en fonction du pourcentage de matière organique dans le sol	50
5.4 Simulation pour le Pyrène	53
6. CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS	57
RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES	61
ANNEXE 1: LES MODÈLES MATHÉMATIQUES	67
ANNEXE 2: LE MODÈLE "PESTICIDE ROOT ZONE MODEL"	87
ANNEXE 3: DONNÉES D'ENTRÉE DU MODÈLE PRZM	111



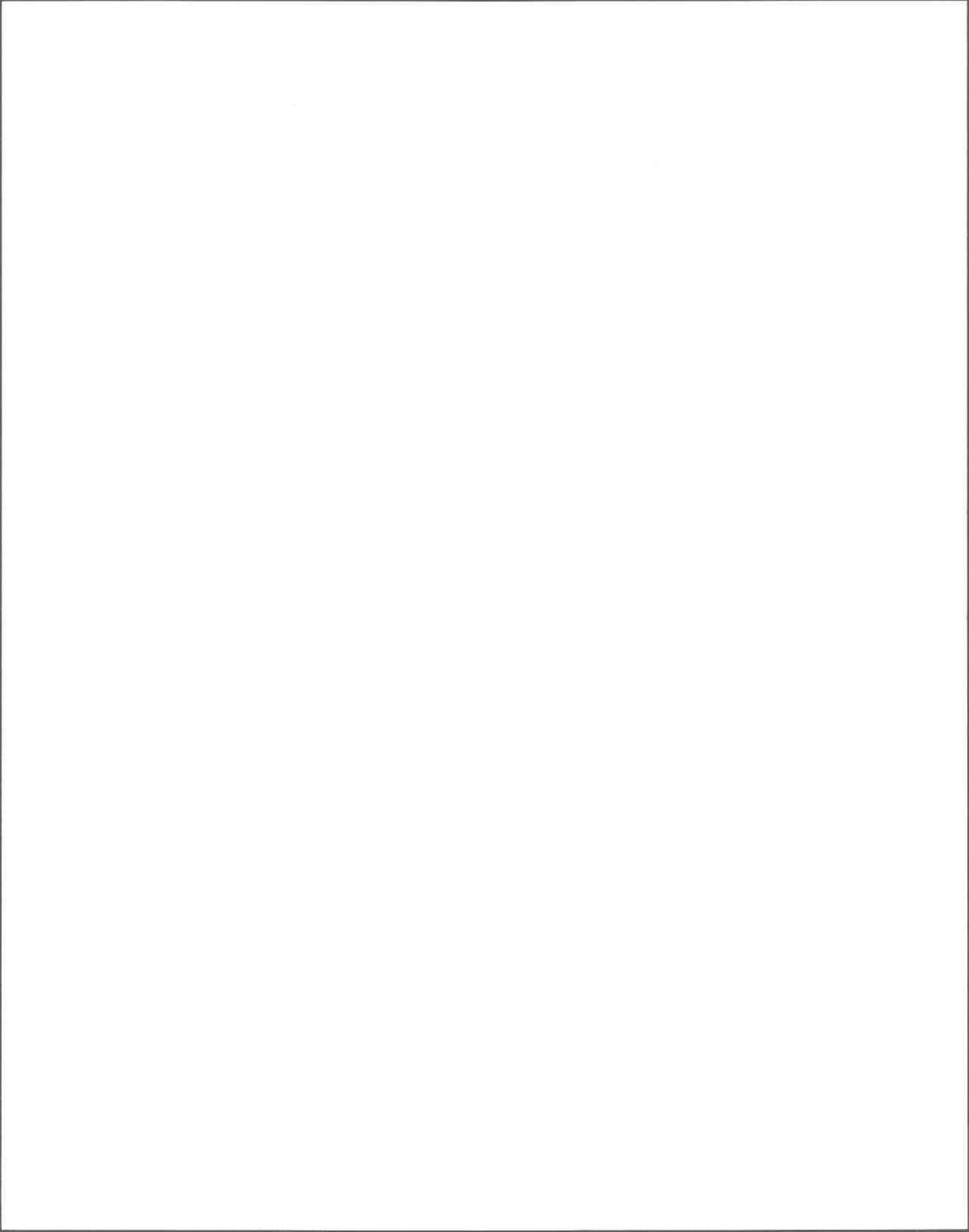
LISTE DES TABLEAUX

	<u>Page</u>
1.1 Caractéristiques des boues huileuses épandues sur le sol, au Canada	13
1.2 Concentrations moyennes de certains contaminants dans les résidus huileux	14
2.1 Caractéristiques physico-chimiques de quelques pesticides et hydrocarbures	21
5.1 Caractéristiques physico-chimiques de quelques hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP)	39
5.2 Concentration de phénanthrène dissous et adsorbé après huit années d'épandage	48
5.3 Concentration de phénanthrène dissous et adsorbé en fonction du pourcentage de matière organique dans le sol	51



LISTE DES FIGURES

	<u>Page</u>
5.1 Concentration de benzo(a)pyrène adsorbé en fonction du temps	42
5.2 Concentration de benzo(a)pyrène adsorbé en fonction de la profondeur	42
5.3 Concentration de phénanthrène adsorbé en fonction du temps	45
5.4 Concentration de phénanthrène adsorbé en fonction de la profondeur	45
5.5 Concentration de phénanthrène adsorbé pour 8 années d'épandage ..	48
5.6 Concentration de phénanthrène adsorbé en fonction de la granulométrie (à 20 cm)	49
5.7 Concentration de phénanthrène adsorbé en fonction de la granulométrie (à 40 cm)	49
5.8 Concentration de pyrène adsorbé en fonction du taux de dégradation	55
A2.1 Modèle compartimentaire du transport des pesticides dans le sol .	89
A2.2 Schéma de la structure du modèle PRZM	109



PROBLÉMATIQUE

Au Québec, environ 20% de la population s'alimente en eau potable à partir de l'eau souterraine. Pendant très longtemps, cette ressource a été considérée comme source d'eau pure et ne faisait l'objet que de traitements très rudimentaires (adoucissement, désinfection, etc...) avant consommation. Toutefois, depuis les vingt à trente dernières années, la contamination sans cesse grandissante des eaux de surface nous incite à utiliser davantage l'eau souterraine en tant que source d'eau potable. L'eau souterraine représente donc une précieuse ressource qu'il faut protéger des sources de contamination.

Depuis les années 1950 à 1960, la forte expansion démographique et industrielle au Québec a engendré une production sans cesse croissante de déchets domestiques et industriels. Non seulement la quantité de déchets industriels augmente toujours, mais la nature et les caractéristiques physico-chimiques de ces déchets sont de plus en plus variées. Puisqu'il n'existe à l'heure actuelle au Québec que très peu d'usines spécialisées dans l'élimination des déchets industriels (ex: Stalex à Blainville et Tricil à Ville-Mercier), ces derniers sont souvent entreposés ou disposés sur le sol avec des mesures de confinement très rudimentaires. De plus, mentionnons que l'utilisation de pesticides constitue également une forme d'épandage de produits chimiques toxiques sur le sol.

La lixiviation par les eaux d'infiltration de tous ces déchets et produits potentiellement toxiques peut entraîner des contaminants vers les eaux souterraines et ainsi altérer la qualité de celles-ci.

On a déjà observé et mesuré au Québec, plusieurs cas de contamination des eaux souterraines, particulièrement dans des zones urbaines et industrielles (réf.: communications personnelles, Direction des Substances Dangereuses, Ministère de l'Environnement du Québec). Les contaminants peuvent provenir de sources diffuses (ex.: épandage de pesticides ayant contaminé la nappe d'eau souterraine dans la région de Portneuf) ou ponctuelles (ex: lieu d'élimination de déchets industriels ayant contaminé les eaux souterraines à Ville-Mercier).

Le problème étant connu et posé, il importe alors de faire des recherches afin de mieux comprendre et de pouvoir prédire le destin des contaminants dans le milieu souterrain. Plusieurs points méritent une attention particulière quant à l'analyse et à la prédiction de l'évolution des contaminants potentiellement toxiques dans le milieu souterrain, tels: l'efficacité du milieu souterrain à dégrader et/ou à retenir les contaminants organiques lors de leur transport, la vitesse de transport des polluants par rapport à la vitesse d'écoulement de l'eau souterraine, les mécanismes de transformation des composés toxiques dans le milieu souterrain, etc...

En se servant des principes, des lois et des processus généraux qui contrôlent le cheminement et le destin des contaminants, il est possible de traiter et d'étudier individuellement les cas de pollution d'eau souterraine. Par la suite, en intégrant ces principes, lois et processus dans des modèles généraux et transposables il sera alors possible de simuler et de prédire le mouvement des contaminants dans le milieu souterrain pour plusieurs sites. Ces

modèles prouveront leur utilité lorsque les cas de contamination seront trop nombreux pour être étudiés cas par cas sur le terrain.

Les modèles doivent être basés sur une compréhension adéquate des principaux processus qui influencent le destin des contaminants en milieu souterrain, à savoir:

- A) Transport: . convection ou advection
- . diffusion
- . dispersion hydrodynamique
- B) Réaction: . adsorption / désorption
- . dégradation (chimique et biologique)

Ces divers processus sont traduits en relations mathématiques qui sont résolues analytiquement ou à l'aide de méthodes numériques (ex.: éléments finis). Ces solutions constituent des modèles mathématiques simulant ces processus, ce qui facilite l'analyse des problèmes de contamination.

Au Québec, dans les divers milieux gouvernementaux, très peu de gestionnaires utilisent des modèles simulant le transport des contaminants et l'altération de la qualité de l'eau souterraine. L'application de tels modèles à divers cas de contamination des eaux souterraines permettrait de mieux connaître l'évolution et de prédire le devenir des substances polluantes dans le milieu souterrain ainsi que de faire un choix plus rationnel des sites d'échantillonnage et des fréquences de mesures de contrôle à ces sites.

La présente étude vise donc à déterminer l'applicabilité d'un modèle mathématique ayant déjà été éprouvé aux États-Unis, à un cas québécois de risque de contamination des eaux souterraines dû à l'épandage de déchets industriels sur le sol.

INTRODUCTION

Le 15 octobre 1985, le gouvernement du Québec adoptait le Règlement sur les déchets dangereux, se donnant ainsi un pouvoir légal d'intervention dans le domaine de la gestion des déchets dangereux.

Ce règlement stipule, entre autres, que les entreprises de l'industrie de raffinage du pétrole devront avoir disposé, au plus tard le 15 octobre 1987, de divers types de résidus d'hydrocarbures présents sur leur propriété au moment de l'adoption du règlement. Les modes de disposition autorisés par le règlement sont l'incinération dans un lieu dont le choix a été approuvé pour traiter ce type de déchets, ou le recyclage par une méthode reconnue. D'autre part, le règlement permet aux entreprises d'obtenir du sous-ministre de l'Environnement, une autorisation leur permettant d'effectuer certains traitements des résidus avant d'en disposer (Ministère de l'Environnement du Québec, 1985). Pour ce faire, les entreprises doivent fournir des documents détaillés décrivant les divers projets de traitement qu'elles comptent entreprendre pour diminuer le contenu en contaminants des résidus. Le choix du mode de disposition finale (enfouissement, incinération, etc...) des résidus est ensuite dépendant de l'efficacité du traitement appliqué à ces résidus.

L'avenue empruntée par les entreprises pétrolières pour disposer de leurs résidus d'hydrocarbures a donc été de proposer certaines techniques de traitement des résidus huileux, comportant dans plusieurs cas une phase

d'épandage sur le sol. Cette pratique avait déjà été employée par ces entreprises au Québec, au cours des années 1970 et début 1980, alors que le gouvernement ne faisait que tolérer ce type de traitement et n'avait pas de politique bien établie face à ce procédé de traitement. Maintenant que les entreprises pétrolières proposent à nouveau ce procédé d'épandage de résidus huileux sur le sol, il est important pour le gouvernement de prendre position pour l'autorisation ou non de cette pratique. Pour ce faire, il doit entre autres évaluer quels sont les risques de contamination des sols et des eaux souterraines associés à ce procédé.

Plusieurs études expérimentales faites sur l'épandage de résidus huileux sur le sol démontrent qu'il n'y a que peu ou pas de contaminants qui atteignent les eaux souterraines (Overcash et Pal, 1979; PACE, 1981; Parr et al., 1983; Streebin, 1985a). Toutefois, la majorité de ces études ont été faites aux États-Unis où les conditions climatiques et les caractéristiques des sols sont différentes de celles qui prévalent au Québec. De plus, les cas d'épandage de résidus huileux sur le sol au Québec ne datent que d'une dizaine d'années et les risques de contamination à long terme pour l'environnement sont inconnus à l'heure actuelle.

Les modèles mathématiques de transport peuvent alors jouer un rôle important, en simulant sur une longue période les effets de l'épandage de résidus huileux sur le sol, ceci en tenant compte des conditions climatiques existantes au Québec. Ces modèles prédisent la quantité (en charge ou en concentration) de contaminant qui serait susceptible d'atteindre les eaux

souterraines et celle qui resterait adsorbée sur le sol et/ou subirait une dégradation. De tels modèles constituent donc des outils qui pourraient aider les autorités gouvernementales à décider de l'acceptabilité ou non du traitement de résidus huileux par épandage sur le sol.

Le modèle mathématique "Pesticide Root Zone Model" (PRZM), développé en 1984 par l'Agence de protection environnementale des États-Unis (USEPA), a notamment pour but d'évaluer les charges de pesticide pouvant migrer plus profondément que la zone racinaire des plantes, suite à un épandage en zone agricole (Carsel et al., 1984a). Cette problématique est analogue à l'épandage de résidus huileux sur le sol, et c'est la raison pour laquelle le modèle PRZM a été choisi pour effectuer la présente étude.

L'objectif principal de l'étude est donc de déterminer l'applicabilité du modèle PRZM à un cas d'épandage de résidus huileux sur le sol, au Québec. Les objectifs spécifiques de ce travail sont:

- 1) l'évaluation de la charge de contaminant pouvant atteindre les eaux souterraines à partir d'un lieu d'épandage de résidus huileux (à court et à long terme);
- 2) l'évaluation de l'influence du taux de dégradation sur la charge de contaminant pouvant atteindre les eaux souterraines;
- 3) l'évaluation de l'influence de la granulométrie sur le destin des contaminants dans le milieu souterrain;

- 4) l'évaluation de l'influence de la quantité de matière organique dans le sol, sur le destin des contaminants dans le milieu souterrain.

Également, cette étude pourra servir à sensibiliser les milieux gouvernementaux aux possibilités d'utilisation de ce type de modèle pour la gestion des déchets dangereux (outil décisionnel). Afin d'atteindre ces objectifs, nous effectuons dans un premier temps une description du procédé d'épandage de résidus huileux sur le sol (chapitre 1), puis nous décrivons les analogies entre l'épandage de résidus huileux et l'épandage de pesticides (chapitre 2). Une description générale des modèles mathématiques de transport sera par la suite donnée (chapitre 3), ainsi que les principales caractéristiques du modèle PRZM (chapitre 4). Ce modèle sera appliqué à diverses situations d'épandages en conditions québécoises (chapitre 5), et un chapitre résumera les conclusions et recommandations de l'étude (chapitre 6).

1. ÉPANDAGE DE RÉSIDUS HUILEUX SUR LE SOL

1.1 Historique

Les résidus produits par les raffineries de pétrole ont été traités de diverses façons par le passé. Les pratiques les plus fréquemment employées depuis les années 1950 ont été l'enfouissement, l'incinération, le lagunage et l'épandage sur le sol.

Depuis un peu plus d'une dizaine d'années, les diverses réglementations environnementales concernant les normes d'effluents des raffineries de pétrole sont devenues plus sévères. De plus, le prix du pétrole a augmenté considérablement au cours de cette période. Pour palier à ces contraintes, l'industrie pétrolière a développé différentes techniques de récupération des hydrocarbures basées sur les principes de sédimentation, de flottation, de filtration, de centrifugation, de bio-oxydation, etc. Ces divers procédés de traitement et de récupération d'hydrocarbures ont toutefois conduit à l'accumulation d'une quantité importante de résidus. Ces derniers possèdent une faible valeur calorifique et sont coûteux à incinérer. D'autre part, l'enfouissement de ce type de résidus n'est plus une méthode environnementalement acceptable. Le lagunage de son côté ne constitue qu'une solution temporaire.

Alors que ces modes de disposition devenaient de moins en moins utilisés par les entreprises pétrolières, l'épandage sur le sol devenait une

pratique de plus en plus courante pour traiter les résidus huileux. Cette technique est présentement utilisée au Canada, aux États-Unis et dans plusieurs pays d'Europe. En 1979, 68% des raffineries de pétrole au Canada pratiquaient l'épandage de résidus huileux sur le sol (PACE, 1981).

1.2 Aspects légaux

Au Canada, il n'existe à l'heure actuelle aucune réglementation spécifique à l'épandage de résidus huileux sur le sol. Les aspects légaux concernant cette pratique sont inclus dans les diverses législations provinciales relatives à la gestion des déchets. Donc, dans la plupart des provinces, les projets de traitement et de disposition de résidus huileux par épandage sur le sol sont étudiés un à un, par les autorités du Ministère de l'Environnement de la province concernée. Celui-ci émet par la suite un certificat d'autorisation si le procédé proposé est environnementalement acceptable (PACE, 1981).

Au Québec, les projets d'épandage de résidus huileux sont soumis à l'article 8 du Règlement sur les déchets dangereux: celui-ci stipule que la pratique de ce genre d'activité de traitement et de disposition d'un déchet dangereux nécessite l'obtention d'un certificat d'autorisation du sous-ministre de l'Environnement, conformément à l'article 22 de la loi sur la qualité de l'Environnement.

Les résidus huileux provenant des fonds de réservoirs, les boues de séparateurs API (American Petroleum Institute) et les résidus huileux provenant

d'unités de flottation à air dissous sont classés comme déchets dangereux au Québec, selon les alinéas 65, 66 et 67 de l'annexe I du Règlement sur les déchets dangereux (Ministère de l'Environnement du Québec, 1985). De plus, selon l'article 111 de ce règlement, les entreprises pétrolières ont jusqu'au 15 octobre 1987 pour disposer des résidus huileux mentionnés plus haut, de façon conforme aux articles 53 et 107 du règlement. Dans ce contexte, quelques entreprises pétrolières de l'Est de Montréal ont proposé au gouvernement du Québec l'épandage de résidus huileux sur le sol comme mode de traitement et de disposition.

1.3 Aspects techniques

La technique d'épandage de résidus huileux sur le sol a pour but de favoriser la dégradation microbologique des hydrocarbures qu'ils contiennent.

1.3.1 Caractéristiques des résidus huileux

Les résidus huileux produits par les raffineries de pétrole proviennent principalement: des fonds de réservoirs, des séparateurs API, de la biomasse de l'unité biologique de traitement des eaux usées, des sédiments de l'unité de flottation à air dissous ainsi que des terres contaminées par des déversements accidentels. Ils contiennent différentes proportions d'hydrocarbures, de solides et d'eau, selon leur origine. Les boues biologiques contiennent généralement très peu d'hydrocarbures, alors que les boues de fonds de réservoirs sont celles qui en contiennent le plus (voir tableau 1.1).

Les principaux contaminants de ces résidus sont les hydrocarbures aromatiques monocycliques et polycycliques, les phénols, les hydrocarbures aliphatiques et les métaux (PACE, 1981). Le tableau 1.2 donne un aperçu des concentrations moyennes de contaminants pouvant se trouver dans les résidus huileux.

1.3.2 Prétraitement des résidus huileux

Avant leur épandage sur le sol, les résidus huileux peuvent être prétraités afin d'en diminuer leur contenu en hydrocarbures. Le prétraitement peut consister en une bio-oxydation ou en une digestion aérobie dans un réacteur biologique.

1.3.3 Dégradation des résidus huileux

La fraction organique des résidus huileux peut en partie être biodégradée par diverses espèces de bactéries, de champignons microscopiques et de levures, présents de façon naturelle dans la majorité des sols. Le taux de biodégradation des hydrocarbures dépend des facteurs suivants (PACE, 1981):

- a) Le type d'hydrocarbure: lorsque le résidu huileux contient de fortes concentrations de contaminants toxiques tels le naphthalène, le benzène, le toluène, les phénols, etc., cela peut inhiber la dégradation microbienne.

Tableau 1.1: Caractéristiques des boues huileuses épanchées sur le sol au Canada (PACE, 1981).

	HYDROCARBURES	EAU	SOLIDES
	intervalle, % en poids (moyenne)	intervalle, % en poids (moyenne)	intervalle, % en poids (moyenne)
1. Boues de fonds de réservoirs	0-100 (36)	0-50 (7)	0-90 (58)
2. Boues de fonds de séparateurs API	0-70 (16)	0-95 (51)	5-70 (33)
3. Boues de l'unité de flottation à air dissous	2-5 (4)	75-96 (89)	0-20 (7)
4. Boues biologiques du système de traitement des eaux usées	0-1 (<1)	85-98 (94)	2-15 (6)

Tableau 1.2: Concentrations moyennes de certains contaminants dans les résidus huileux.

Contaminant	Concentration ppm	Référence	Contaminant	Concentration ppm	Référence
Hydrocarbures aromatiques polycycliques:			Hydrocarbures aromatiques monocycliques:		
Acénaphène	39	A	Benzène	1 à 43	A
Acénaphthylène	7,9	A	Toluène	1 à 263	D
Anthracène	0,1 à 598	A	Ethylbenzène	1 à 392	D
Benzo(a)anthracène	0,2 à 5150	A et D	m,p- xylènes	1 à 1338	D
Benzo(a)pyrène	15,1 à 58	B et D	o-xylène	1 à 470	A
Benzo(k)fluoranthène	3 à 48,6	B			
Chrysène	6,4 à 256	D			
Fluoranthène	85 à 1530	A			
Fluorène	53 à 94	A			
Naphtalène	111 à 278	B			
Phénanthrène	1 à 3900	A			
Pyrène	42 à 1370	A			
Autres contaminants organiques:			Métaux:		
Chloroforme	0,06	A	Cd	0,4 à 5	C
Dichlorométhane	5,4 à 448	B	Cr	10 à 7352	C
1,1-dichloroéthylène	0,5 à 3,1	B	Co	1 à 110	C
Mésitylène	13,1 à 80	A	Cu	9 à 958	C
N-nitrosodiphénylamine	120 à 890	A	Hg	2,1 à 8	C
Bis(2-éthylhexyl)phthalate	0,16 à 0,6	A	Mn	39 à 1050	C
Di-N-butylphthalate	0,53 à 225	A	Ni	12 à 2000	C
Phénols	2,5 à 5,7	C	Pb	21 à 800	C
Biphényles polychlorés	0,04 à 0,08	D	V	3 à 2125	C
			Zn	90 à 3025	C

A - Société d'Ingenierie Cartier, 1986 a B - Société d'Ingénierie Cartier 1986b C - PACE, 1981
D - Société d'Ingénierie Cartier 1987

- b) La disponibilité des éléments nutritifs: le sol doit contenir de l'azote, du phosphore et du potassium afin de favoriser la dégradation par les micro-organismes.
- c) La disponibilité de l'oxygène: l'oxygène provenant de l'air par diffusion et de l'eau de percolation (oxygène dissous) permet aux bactéries aérobies de dégrader les hydrocarbures.
- d) L'humidité du sol: un degré d'humidité optimal du sol favorise les échanges de gaz dissous et de déchets à travers les membranes cellulaires des micro-organismes. Si le sol est trop peu humide, il n'y aura que peu ou pas d'activité microbologique et si le sol est constamment sursaturé d'eau, des conditions anaérobiques (indésirables) pourront se développer.
- e) L'acidité du sol: elle affecte la solubilité et la disponibilité des nutriments et des contaminants du sol, et par le fait même, l'activité métabolique des microorganismes. Celle-ci est optimale dans un sol d'acidité à peu près neutre (pH: 6,0 à 8,0).
- f) La température: l'activité des micro-organismes du sol diminue lorsque la température est inférieure à 10°C ou supérieure à 47°C.

- g) La granulométrie du sol: elle influence le temps de rétention des hydrocarbures et de l'eau d'infiltration dans le sol. Un sol de granulométrie très fine (argile, silt, etc...) est peu perméable et le temps de rétention des contaminants y est en conséquence plus long que dans un sol de granulométrie plus grossière (sable, gravier, etc...).

- h) La densité de population de micro-organismes: elle est généralement plus grande dans la première couche de sol (0 à 15 cm); une application d'hydrocarbures à plus de 15 cm de profondeur ne favorisera donc pas la dégradation.

- i) Le taux d'épandage des résidus huileux: un taux trop élevé limitera la disponibilité de l'oxygène et des éléments nutritifs pour les micro-organismes.

En plus de la biodégradation, les hydrocarbures épandus sur le sol peuvent se volatiliser ou se dégrader par photo-oxydation (Overcash et Pal, 1979; Parr et al., 1983; Streebin, 1985b).

La fraction d'hydrocarbures qui ne subit pas la biodégradation, la volatilisation ou la photo-oxydation, est sujette à la lixiviation par les eaux de percolation. Celles-ci pourront donc favoriser la migration de certains contaminants vers les eaux souterraines (Bierl et Thomas, 1984).

1.3.4 Épandage sur le sol

L'épandage des résidus huileux sur le sol se fait généralement sur des superficies (de 1 à 10 hectares) de terrain bien délimité, sur les propriétés mêmes des raffineries de pétrole. Afin de limiter l'érosion, il est préférable que le terrain choisi ne présente qu'une très faible pente. De plus, un sol peu perméable permettra d'éviter une trop grande infiltration des eaux de précipitation. La période la plus propice à l'épandage dans le sud du Québec s'étend de juin à septembre inclusivement. La température plus froide dans le reste de l'année limite grandement l'activité des micro-organismes du sol et, par le fait même, la biodégradation est alors très peu efficace.

La majorité des projets d'épandage de résidus huileux comporte un labourage périodique du sol afin d'optimiser la surface de contact avec les hydrocarbures, favorisant ainsi la disponibilité de l'oxygène pour les micro-organismes.

Enfin, un programme de suivi environnemental de la qualité des eaux souterraines et des sols accompagne généralement les projets d'épandage de résidus huileux sur le sol.

1.4 Migration de contaminants

La majorité des études faites à ce jour, sur la dégradation de résidus huileux suite à un épandage sur le sol, conclue que la migration des

contaminants dans le sol ou vers les eaux souterraines est très faible à court terme si le projet est bien géré (Brown, 1984). Les risques de contamination à long terme sont toutefois peu connus et il est admis que dans le cas de sols perméables contenant peu de matières organiques, il peut y avoir migration de contaminants vers les eaux souterraines (Wilson, 1983).

Enfin, à notre connaissance, aucune étude détaillée de persistance et de migration n'a été faite dans des conditions climatiques telles que celles qui prévalent au Québec. Signalons par ailleurs qu'à Port-Crédit en Ontario, il y a présentement une étude d'envergure concernant les impacts d'un lieu d'épandage de résidus huileux, sur l'environnement.

2. ANALOGIES ENTRE L'ÉPANDAGE DE RÉSIDUS HUILEUX ET L'ÉPANDAGE DE PESTICIDES

Ce chapitre vise à établir quelques analogies et différences entre l'épandage de résidus huileux et l'épandage de pesticides sur le sol. Une telle comparaison nous permettra de justifier l'application du modèle PRZM à divers cas d'épandage de résidus huileux sur le sol.

2.1 Analogies

Dans les deux cas, la principale préoccupation environnementale concerne la migration de contaminants organiques à partir de la surface du sol, vers les eaux souterraines. Les deux procédés consistent à épandre une certaine charge de contaminants organiques sur une grande superficie de sol, ce qui constitue dans les deux cas une source potentielle de contamination diffuse.

Dans le cas d'un épandage de résidus huileux, la charge de contaminants appliquées sur le sol peut être calculée en connaissant la concentration de ces contaminants dans les résidus huileux (voir le Tableau 1.2), et la charge de résidus huileux appliquée sur le sol (de l'ordre de 500 000 kg/ha par année (PACE, 1981)).

D'autre part, la charge de pesticides épandus sur le sol est généralement beaucoup plus faible (environ 1 à 4 kg/ha par année (Carsel et al., 1984a)) que celle de contaminants organiques contenus dans les résidus huileux épandus sur le sol.

Dans un cas comme dans l'autre, ce sont les mêmes processus de transport vers les eaux souterraines qui agissent sur les contaminants. Le transport s'effectue verticalement, de la surface du sol jusqu'à la zone saturée, au travers de la zone vadose. D'autre part, les phénomènes de photo-oxydation, de volatilisation et de biodégradation agissent aussi bien sur les pesticides que sur les hydrocarbures.

Également, les solubilités, et par le fait même les coefficients de partition sol-eau du contaminant, de plusieurs hydrocarbures spécifiques sont du même ordre de grandeur que ceux de certaines classes de pesticides. De plus, les taux de dégradation dans le sol de certains pesticides et de quelques hydrocarbures sont comparables (voir le Tableau 2.1). Enfin, dans les deux cas l'épandage ne s'effectue qu'en période printanière ou estivale.

2.2 Différences

L'absence de végétation ou de culture à la surface du sol dans le cas des épandages de résidus huileux constitue une différence évidente par rapport aux cas d'applications de pesticides. Une autre importante différence entre l'épandage de résidus huileux et l'application de pesticides sur le sol est la présence, dans le premier cas, de plusieurs contaminants organiques et inorganiques contenus dans une matrice boueuse, alors que dans le second cas le contaminant organique (le pesticide) est accompagné d'une phase inerte de composition moins variée que la matrice de résidus huileux. Les effets synergiques dus à cette différence peuvent donc influencer le destin des

Tableau 2.1: Caractéristiques physico-chimiques de quelques pesticides et hydrocarbures.

	Solubilité dans l'eau (mg/l)	Coefficient de partition octanol-eau (log K_{ow})	Taux de dégradation dans le sol (jour ⁻¹)
Pesticides¹			
(nom chimique):			
- Basalin	0,7	-	0,0169
- Chlordane	-	4,47	0,0020 - 0,0007
- Méthoxychlor	0,1	5,08	0,0046 - 0,0033
- Parathion	24	3,81	0,2961 - 0,0046
- Trifluralin	24	4,75	0,0956 - 0,0026
Hydrocarbures			
aromatiques			
polycycliques ²			
(HAP):			
- Anthracène	0,073	4,45	0,0097
- Fluoranthène	0,260	5,33	0,0131
- Phénanthrène	1,29	4,46	0,0061
- Pyrène	0,135	5,32	0,0220
- Benzo(a)pyrène	0,004	6,04	0,1031

¹ (Carsel et al., 1984b)

² (PACE, 1985)

contaminants à la surface et dans le sol. En effet, dans les cas d'épandage de résidus huileux il devrait y avoir davantage d'interactions physico-chimiques entre les divers contaminants organiques et inorganiques présents, que dans le cas d'épandage de pesticides.

L'épandage de résidus huileux sur le sol a pour effet de modifier la structure physico-chimique et biologique du sol (Parr et al., 1983). Ces modifications peuvent influencer les processus d'infiltration, de sorption, d'activité microbologique et d'oxygénation du sol (Parr et al., 1983; et PACE 1981). Lors d'un épandage, l'huile contenue dans les résidus enrobe les particules de sols et si une trop grande quantité de résidus est appliquée sur le sol, celui-ci peut devenir obstrué et conséquemment l'infiltration d'eau dans le sol sera grandement diminuée. L'eau de précipitation aura donc tendance à ruisseler à la surface du sol plutôt qu'à s'y infiltrer. Dans le cas où une quantité modérée de résidus huileux est épandue sur un sol régulièrement labouré, la porosité de ce sol peut augmenter et l'activité microbologique a alors de meilleures conditions pour dégrader les hydrocarbures (PACE, 1981).

Il est également important d'évaluer l'influence de la phase huileuse sur les mécanismes d'infiltration des contaminants dans le sol. Pour ce faire, il faudrait idéalement connaître le coefficient de partition du contaminant entre les principales phases concernées, soit: sol-eau, sol-huile et huile-eau. Dans le cas des phases sol-eau, la valeur du coefficient de partition peut être calculée pour divers contaminants. Toutefois, le calcul ou la mesure du coefficient de partition d'un contaminant entre les phases sol-huile et huile-eau est difficile à obtenir, et déborde le cadre de la présente étude.

Il est cependant important de mentionner que la présence de la phase huileuse dans le sol modifiera la densité du milieu, et que la viscosité de cette phase diminuera probablement la vitesse de migration verticale des contaminants. Tout en migrant dans le sol, les contaminants des résidus huileux seront en contact avec le sol, l'eau interstitielle du sol et la phase gazeuse du sol. Dans le cas des pesticides, la formulation de ceux-ci est conçue pour favoriser le passage des contaminants dans l'eau interstitielle du sol ainsi que dans le sol lui-même et dans sa phase gazeuse. Dans le cas des résidus huileux, les contaminants auront davantage tendance à rester dans la matrice huileuse des résidus. De plus, cela aura pour effet d'augmenter la valeur effective du coefficient de distribution. Le calcul de cette augmentation pourra être approximé en connaissant la fraction de matière organique qui est ajoutée au sol, à cause de l'épandage de résidus huileux.

D'autre part, la présence de plusieurs contaminants sur le sol pourrait amener une compétition entre eux pour les sites d'adsorption sur les particules de sol, si la concentration de contaminants était plus grande que la concentration de sites, ce qui est toutefois peu probable. La compétition entre les contaminants organiques pour les sites d'adsorption n'a toutefois pas, à ce jour, fait l'objet d'études détaillées. Jusqu'à maintenant, la plupart des études faites en laboratoire concerne la migration d'un seul contaminant organique à travers une colonne de sol de caractéristiques données (PACE, 1985).

Également, l'addition d'une trop grande quantité de résidus huileux sur le sol peut diminuer l'efficacité des échanges gazeux et ainsi provoquer un déficit d'oxygène disponible par rapport à la demande des micro-organismes. Dans ce cas, des conditions anaérobies peuvent se développer avec les problèmes d'odeurs nauséabondes qui les accompagnent (Parr et al., 1983).

Enfin, les sols sur lesquels les résidus huileux sont épanchés prennent généralement une teinte foncée qui absorbe davantage le rayonnement solaire. En conséquence, la température de ces sols est généralement plus élevée que celle d'un même type de sol n'ayant pas reçu de résidus huileux. Cette température légèrement plus élevée favoriserait l'activité des micro-organismes et, par le fait même, la dégradation des hydrocarbures (Parr et al., 1983).

3. LES MODÈLES MATHÉMATIQUES

Ce chapitre a pour but de résumer les principales notions impliquées dans la modélisation mathématique du destin des contaminants dans le milieu souterrain.

3.1 Les principes de la modélisation mathématique

Un modèle, au sens large, est un outil cognitif permettant de comprendre le fonctionnement d'un système réel. Il est une représentation abstraite de la réalité. Le modèle, qui découle de certaines hypothèses, sert à vérifier celles-ci et lorsqu'elles se révèlent exactes, permet aux scientifiques de formuler des prédictions fiables et d'élaborer de nouvelles hypothèses.

Les modèles mathématiques sont des modèles où les phénomènes à l'étude sont décrits à l'aide de relations mathématiques précises. Ils ont l'avantage de pouvoir représenter des phénomènes très complexes ou très simples et de permettre le calcul de prédictions quantitatives.

Il existe plusieurs types de modèles mathématiques (Villeneuve et al., 1984).

3.1.1 Les modèles déterministes

Ces modèles utilisent des équations mathématiques décrivant des relations causales (ou processus déterministes) ayant cours dans le milieu

souterrain. Ce type de modèle mathématique permet des prédictions quantitatives dont la précision et l'exactitude dépendent de la pertinence des équations et de la précision des données d'entrée.

Les modèles déterministes sont des plus utilisés en hydrogéologie et on en distingue deux types;

- A) Les modèles empiriques: qui ne servent qu'à relier, à l'aide d'équations mathématiques générales choisies arbitrairement, les entrées et sorties du système hydrogéologique étudié. Ils utilisent une fonction de transfert dont la forme et les paramètres sont déterminés par calibration. Ces modèles ont un caractère plus descriptif (interpolation) que prédictif (extrapolation).

- B) Les modèles conceptuels: les plus courants des modèles hydrogéologiques déterministes. Ils sont composés d'expressions mathématiques supposées décrire correctement le fonctionnement du système hydrogéologique. Ils sont donc particulièrement destinés à produire des prédictions quantitatives.

Le développement des modèles conceptuels se fait selon les principes de l'analyse des systèmes, ce qui constitue une approche réductionniste. Ainsi, le système hydrogéologique est décomposé et chacun des processus élémentaires différents qu'on y observe reçoit une attention particulière. Il en découle un ensemble de modèles

mathématiques simples (composantes) représentant chacun des processus, et la combinaison de ces composantes, en respectant la structure du système réel, permet de simuler les interactions et le comportement du système hydrogéologique. La simulation se fait via la résolution du système d'équations obtenu. Il n'existe cependant pas de modèle hydrogéologique conceptuel général. Il en existe en fait une multitude qui diffèrent soit par les processus dont ils tiennent compte, soit par les techniques mathématiques utilisées pour la résolution du système d'équations, soit encore par la dimensionnalité du problème (uni-, bi- ou tridimensionnel; régime permanent ou transitoire de l'écoulement, etc...).

La première étape dans la conception d'un modèle consiste à choisir les processus les plus importants, car il y a peu à gagner à modéliser des processus qui ont une influence négligeable sur le comportement global du système. Dans le cas d'un modèle de contamination des eaux souterraines, les processus qu'il nous importe plus particulièrement de modéliser sont:

- . Transport: . advection
- . dispersion

- . Réaction: . adsorption / désorption
- . dégradation.

Une description de la modélisation de chacun de ces processus est donnée à l'annexe 1.

Par ailleurs, il existe une particularité aux modèles de contamination des eaux souterraines. Comme c'est le mouvement de l'eau souterraine qui est le principal moteur du transport des contaminants, et que ce processus a déjà reçu une grande attention de la part des modélisateurs, il est logique d'utiliser un modèle hydrogéologique déjà existant pour obtenir le champ des vitesses du mouvement de l'eau et d'utiliser ces résultats comme données d'entrée pour le modèle de transport des contaminants. Il est admis que lorsque les concentrations des contaminants sont faibles, on peut négliger les effets des substances transportées sur les propriétés hydrodynamiques de l'écoulement de l'eau souterraine. De plus, le milieu souterrain se divisant en deux zones hydrauliques distinctes (la zone vadose et la zone saturée), il est courant d'y appliquer des modèles différents puisque les processus de transport y sont différents.

La multitude de modèles utilisables peut être classée en ordre de complexité et il revient à l'utilisateur de choisir le modèle qui lui convient, en fonction des données disponibles, des types de résultats désirés et des caractéristiques du lieu en cause.

Généralement, les modèles se présentent sous forme d'équations différentielles qui sont résolues pour des domaines variés, avec des conditions limites variées. La résolution des équations peut être faite à l'aide de solutions analytiques ou par des calculs numériques.

Dans le cas des problèmes simples, il est possible d'obtenir une formulation explicite de la fonction solution, c'est-à-dire la solution analytique du problème. On parle alors de modèles analytiques. Ces derniers ont l'avantage que, une fois la solution obtenue, il n'est pas nécessaire d'effectuer le travail mathématique de dérivation et la solution peut être réutilisée à volonté, pour divers problèmes semblables, en utilisant les valeurs des paramètres appropriés à chaque cas. De plus, la fonction solution peut être dérivée afin de représenter la distribution de la variable modélisée (vitesse, concentration, etc...) dans un domaine choisi. Cette nouvelle fonction nous permettra alors de calculer en tous points du domaine, la valeur de la variable modélisée.

En ce qui concerne les problèmes à géométrie complexe, il existe différentes méthodes de résolution, telles la méthode des différences finies et celle des éléments finis. Cette dernière est maintenant la plus utilisée en hydrogéologie, à cause de sa souplesse et de sa puissance. Cependant son emploi requiert l'utilisation d'un ordinateur étant donné la complexité des calculs à effectuer. Le modèle PRZM utilise pour sa part la méthode des différences finies.

3.1.2 Les modèles stochastiques

Ces modèles utilisent des relations mathématiques afin de prédire la probabilité de réalisation d'un évènement donné. Ils peuvent être utilisés lorsqu'il est possible de considérer que les variables d'entrée du modèle ont

une distribution de probabilité. En hydrogéologie les modèles stochastiques sont issus de l'intégration des résultats de l'approche déterministe à une approche stochastique des modèles et hypothèses intervenant dans la modélisation du transport des contaminants. Par exemple, dans le cas de problèmes de migration dans la zone vadose, on suppose d'abord que l'équation déterministe classique de convection-dispersion est valide pour une colonne de sol limitée latéralement. Ensuite, on effectue des simulations répétitives avec ce modèle déterministe en utilisant des distributions aléatoires des propriétés hydrauliques du sol. Les résultats de ces simulations fournissent des données statistiques sur l'ensemble des conditions représentant la variabilité spatiale des paramètres. Cette démarche est appelée modélisation stochastique ou approche de type stochastique (Villeneuve et al., 1987b).

3.2 Utilisations et limitations des modèles

Les modèles mathématiques en hydrogéologie servent entre autres à la prédiction de l'évolution des contaminants dans l'eau souterraine. Ces prédictions permettent de répondre à de nombreuses interrogations relatives à l'étendue de la contamination, à la concentration des polluants, à leur vitesse de déplacement, aux effets prévisibles des mesures correctrices envisagées et à la rationalisation des campagnes d'échantillonnage prévues.

Ce genre d'informations peut permettre une rationalisation de la gestion de la ressource d'eau souterraine. Toutefois, le grand nombre de modèles disponibles oblige le gestionnaire intéressé à utiliser un de ceux-ci, à

faire un choix. Les facteurs guidant ce choix sont: les processus importants et leur modélisation, les méthodes de solution des systèmes d'équation, la disponibilité des données et la gravité de la contamination. Il est évidemment inutile d'utiliser un modèle dont une partie (un processus) ne contribue en rien à l'objectif visé ou à la décision qui doit être prise suite à l'utilisation du modèle. De plus, un modèle inutilement complexe requiert un effort accru dans les calculs et la prise de données. C'est pourquoi il est toujours préférable d'utiliser le modèle le plus simple possible.

L'utilisation de modèles complexes à plusieurs dimensions ou à géométries complexes requiert de l'utilisateur beaucoup d'efforts au niveau de l'interprétation des résultats. En effet, plus un modèle est complexe, plus il est difficile pour l'utilisateur de retrouver les causes ou les processus qui provoquent les variations entre les résultats calculés par le modèle et les mesures faites sur le terrain (la réalité). L'utilisateur doit fournir sous une forme adéquate une quantité importante d'informations nécessaires à la mise en oeuvre d'un modèle complexe. Parfois même, la rareté des informations disponibles empêche tout simplement l'utilisation d'un modèle complexe.

Pour plus de sécurité, l'utilisation d'un modèle doit toujours être accompagnée d'une analyse de sensibilité, c'est-à-dire que l'on doit vérifier l'effet de variations dans les valeurs des paramètres sur les prédictions du modèle. L'analyse de sensibilité sert à évaluer la précision des prédictions, à tester la robustesse du modèle et à indiquer quel est le paramètre dont l'incertitude limite le plus la représentativité des résultats du modèle.

Malheureusement, la mesure indépendante de chaque paramètre d'un modèle n'est pas toujours possible. Un terrain peu connu ou un modèle trop empirique font que les paramètres doivent être évalués par calibration. Il s'agit de déterminer, par essais et erreurs, les valeurs des paramètres qui permettent la meilleure reproduction des comportements connus et mesurés du système souterrain. Bien sûr, la calibration seule ne valide pas le modèle car les estimations des paramètres ainsi obtenues incluent par compensation toutes les inadéquations du modèle (processus négligés, simplifications etc...). De plus, la calibration par essais et erreurs est un procédé parfois subjectif. Enfin, la validation d'un modèle n'est obtenue que suite à une calibration la plus juste possible à un site, et à une transposition à d'autres sites où les résultats prédits par le modèle sont près de la réalité. La confiance en un modèle ne vient qu'après de nombreuses utilisations fructueuses.

En conclusion, nous venons de voir que les modèles, malgré les avantages déjà cités, présentent suffisamment de difficultés pour en limiter l'usage. C'est pourquoi il est toujours indiqué d'utiliser les modèles les plus simples.

4. LE MODÈLE "PESTICIDE ROOT ZONE MODEL"

Le modèle "Pesticide Root Zone Model" (PRZM) est un modèle mathématique qui a été développé dans le but d'évaluer le mouvement ou le destin des pesticides dans et sous la zone racinaire des plantes, et subséquemment d'évaluer les quantités (en charge et en concentration) de ces contaminants organiques qui peuvent atteindre les eaux souterraines. Il a été développé par l'Agence de Protection Environnementale des États-Unis (USEPA) en 1984, dans le but d'obtenir un outil de gestion concernant les risques d'atteinte à la qualité des eaux souterraines dus à l'épandage de pesticides sur le sol.

Le modèle PRZM est un modèle compartimentaire utilisé pour simuler le mouvement des contaminants dans la couche non-saturée du sol, à l'intérieur et sous la zone racinaire des plantes. Les deux principales composantes du modèle sont l'hydrologie et le transport des contaminants.

La composante hydrologique est basée sur l'équation universelle d'érosion des sols et sur la "curve number technique" du Service de Conservation des sols des États-Unis, et permet de calculer l'érosion et le ruissellement en fonction de données météorologiques (température moyenne mensuelle, précipitation quotidienne, etc...). L'évapotranspiration est calculée à partir des données de bac d'évaporation ou estimée à l'aide de formules empiriques. D'autre part, le mouvement de l'eau dans le sol est établi en fonction des concepts de capacité au champ, de point de flétrissement et de saturation du sol.

Afin d'obtenir les concentrations de contaminant dans le sol et dans l'eau interstitielle, les notions suivantes sont considérées dans les calculs de la composante du transport des contaminants: l'assimilation des contaminants par les plantes; le ruissellement de surface; l'érosion; la dégradation des contaminants, le transport vertical des contaminants; les pertes de contaminants sur le couvert végétal (contaminants qui n'atteignent pas le sol); la dispersion et le facteur de retard.

Le modèle PRZM fonctionne sur un micro-ordinateur et utilise une solution numérique par différences finies, écrit en FORTRAN standard. Il a été testé avec succès pour un pesticide tel l'aldicarbe, dans les cas suivants: culture de la patate dans les états de New-York et du Wisconsin, culture du citronnier en Floride et culture du maïs en Georgie (Carsel et al., 1984b). La méthode la plus simple pour représenter les résultats d'une application du modèle PRZM est sous forme de profils de concentrations dans le sol, ou sous forme de quantité (en charge ou en concentration) de contaminants migrant sous la zone racinaire des plantes, en fonction du temps. D'autre part, il est également possible de représenter les résultats obtenus pour plusieurs simulations faites sur une longue période pour différentes années à un même lieu et pour un même contaminant, à l'aide de graphique représentant la fréquence de dépassement en fonction des quantités (en charge ou en concentration) de contaminant migrant sous la zone racinaire.

La description de la théorie et de la structure du modèle PRZM est fournie à l'annexe 2.

5. APPLICATION DU MODÈLE PRZM À UN CAS D'ÉPANDAGE DE RÉSIDUS HUILEUX SUR LE SOL

Ce chapitre comprend une brève description des données d'entrée et une interprétation des résultats de l'application du modèle PRZM à un cas d'épandage de résidus huileux sur le sol. Toutes les données d'entrées ont été déterminées de façon à représenter le plus fidèlement possible une situation réelle d'épandage dans la région de Montréal.

Ainsi, les simulations faites à l'aide du modèle PRZM nous permettront d'évaluer l'importance de la contamination des sols et des eaux souterraines due à cette technique de traitement de résidus huileux pour des conditions existantes dans le secteur des raffineries de l'Est de l'Île de Montréal.

5.1 Données d'entrée

5.1.1 Fichier météorologique

Ce fichier contient les mesures quotidiennes de précipitation et de température moyenne enregistrées à la station météorologique localisée à l'aéroport international de Dorval dans la région de Montréal, du 1er janvier 1960 au 31 décembre 1974. Cette station et cette période ont été choisies parce que les données qu'on y retrouve sont complètes et représentent bien les conditions climatiques de la région de Montréal.

5.1.2 Paramètres hydrologiques

L'évapotranspiration est calculée à partir des données quotidiennes de température moyenne. D'autre part, le coefficient de fonte de neige a été fixé à 0,5 cm par °C au-dessus du point de congélation afin de représenter le plus précisément possible la forte fonte des neiges au printemps dans la région de Montréal, et en tenant compte du fait que la valeur de ce facteur est fixée à 0,46 cm par °C au-dessus du point de congélation aux États-Unis (Carsel et al., 1984a).

5.1.3 Paramètres de culture des plantes

Puisque dans la pratique d'épandage de résidus huileux sur le sol il y a absence de végétation, les valeurs des paramètres tels: interception par le couvert végétal, profondeur des racines, couverture et poids du feuillage, assimilation de contaminant par les plantes, etc... ont toutes été fixées à zéro ou près de zéro, de façon à ce qu'elles aient une influence négligeable sur les résultats des simulations.

5.1.4 Paramètres du sol

Les caractéristiques du sol ont été déterminées à partir d'une série d'analyses effectuées sur des échantillons de sols de l'est de Montréal (Société d'Ingénierie Cartier, 1986a). Ces caractéristiques sont les suivantes: 15% de gravier, 37% de sable, 29% de silt, 19% d'argile et 0,5% de matières organiques.

D'autre part, afin d'évaluer l'influence des caractéristiques granulométriques du sol sur les résultats du modèle, deux simulations supplémentaires ont été faites dans le cas du phénanthrène. La première représente un épandage sur un sol contenant 50% de sable et 10% d'argile et la seconde, sur un sol contenant 30% de sable et 25% d'argile. Le reste des fractions granulométriques de ces deux sols comporte de 40 à 45% de gravier et de silt. Toutefois, les paramètres d'entrée du modèle PRZM, concernant les caractéristiques granulométriques du sol, ne tiennent compte que des fractions de sable et d'argile.

Ces trois granulométries différentes peuvent également être interprétées comme représentant la variabilité spatiale des caractéristiques du sol. Les résultats des trois simulations correspondantes permettront alors d'évaluer l'influence de la granulométrie du sol sur la migration des contaminants.

5.1.5 Paramètres des contaminants

Le choix des contaminants à introduire dans le modèle PRZM, a été basé sur la liste des contaminants organiques présents dans les résidus huileux (voir Tableau 1.2) ainsi que sur leurs caractéristiques physico-chimiques suivantes: solubilité dans l'eau, coefficient de partition octanol-eau, et taux de dégradation dans le sol.

En ce qui a trait au taux de dégradation dans le sol, l'étude de PACE (1985) est particulièrement intéressante puisque les taux qu'on y retrouve suivent une cinétique du premier ordre et ont été calculés à partir d'essais en laboratoire, faits dans des conditions analogues à celles d'un épandage de résidus huileux sur le sol. Toutefois, cette étude ne traite que des hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP). Pour ces raisons, les contaminants dont le comportement a été simulé par le modèle PRZM, ont été choisis dans cette famille d'hydrocarbures.

Parmi les HAP étudiés (PACE, 1985) le plus mobile et le moins mobile dans les sols ont été choisis. La mobilité est ici déterminée en fonction de la solubilité dans l'eau et du coefficient de partition octanol-eau. C'est ainsi que des sept HAP étudiés, le phénanthrène a été choisi parce qu'il devait être le plus mobile et le benzo(a)pyrène parce qu'il devait s'avérer le moins mobile (Tableau 5.1).

D'autre part, considérant que dans l'étude de PACE (1985) les taux de dégradation des HAP ont été calculés à partir d'essais faits sur un sol différent de celui de l'est de Montréal, il apparaissait alors intéressant de faire une analyse de l'influence du taux de dégradation sur la propagation d'un HAP de mobilité moyenne. Donc, le pyrène a été retenu pour cette analyse et diverses valeurs de taux de dégradation lui ont été assignées. Ces valeurs représentent l'étendue de celles que l'on retrouve pour les HAP, dans le Tableau 5.1

Tableau 5.1: Caractéristiques physico-chimiques de quelques hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) (PACE, 1985).

HAP	Solubilité dans l'eau (mg/l)	Coefficient de partition octanol-eau (log K_{ow})	Taux de dégradation dans le sol (cinétique du 1er ordre) (jour ⁻¹)
Phénanthrène	1,29	4,46	0,0061
Anthracène	0,073	4,45	0,0097
Fluoranthène	0,260	5,33	0,0131
Pyrène	0,135	5,32	0,0220
Benzo(a)anthracène	0,014	5,61	0,0080
Chrysène	0,002	5,61	0,1179
Benzo(a)pyrène	0,004	6,04	0,1031

5.2 Simulation pour le benzo(a)pyrène

Les données d'entrée spécifiques au benzo(a)pyrène sont les suivantes:

- taux d'application sur le sol = 25 kg/ha par année
- coefficient de distribution, $K_d = 3380$

Le taux d'application sur le sol a été déterminé en considérant un épandage de 500 000 kg de résidus huileux (PACE, 1981) contenant 50 ppm de benzo(a)pyrène (voir Tableau 1.2), par hectare et par an. D'autre part, le coefficient de distribution K_d a été calculé à partir de l'équation de Karickhoff (Carsel et al., 1984a):

$$\log K_{oc} = \log K_{ow} - 0,21$$

et de la relation entre K_{oc} et K_d

$$K_d = K_{oc} \left(\frac{\% \text{ carbone organique}}{100} \right)$$

À cause de sa très faible solubilité et de son coefficient de distribution très élevé, le benzo(a)pyrène ne se retrouve qu'en très faibles concentrations dans la phase dissoute. Il n'est présent en concentration

supérieure à la limite de détection dans l'eau (0,001 mg/l), que lors du premier mois d'épandage, et ce, seulement dans les 10 premiers cm de sol. Aucun bilan de charge de benzo(a)pyrène passant à la nappe d'eau souterraine n'a donc été calculé puisqu'il n'atteint pas celle-ci selon les prédictions du modèle, et ce, même pour une simulation effectuée sur une période de plus de dix ans.

Les figures 5.1 et 5.2 présentent les résultats de l'application du modèle PRZM à un épandage de benzo(a)pyrène sur le sol, selon les conditions mentionnées précédemment et pour un épandage au mois de mai, une seule fois par année. Ce sont les concentrations de benzo(a)pyrène (B(a)P) adsorbé au sol qui ont été utilisées pour faire les figures 5.1 et 5.2 puisqu'elles sont nettement plus grandes que celles retrouvées en phase liquide.

On remarque sur la figure 5.1 que la concentration de benzo(a)pyrène diminue très rapidement et que, à 10 cm de profondeur, seulement deux (2) mois après chaque épandage les concentrations sont déjà inférieures à la limite de détection (0,2 ppm) de ce contaminant dans le sol. La concentration maximale dans cet horizon est d'environ 5 ppm de benzo(a)pyrène adsorbé au sol, lors du premier mois d'épandage. Cette diminution très rapide des concentrations de benzo(a)pyrène est due au taux de dégradation élevée de ce contaminant. De plus, on peut observer sur la figure 5.1 qu'il n'y a pas d'effet d'accumulation de contaminant dans le sol lors de la deuxième année d'épandage.

Figure 5.1 - Concentration de B(a)P adsorbé en fonction du temps

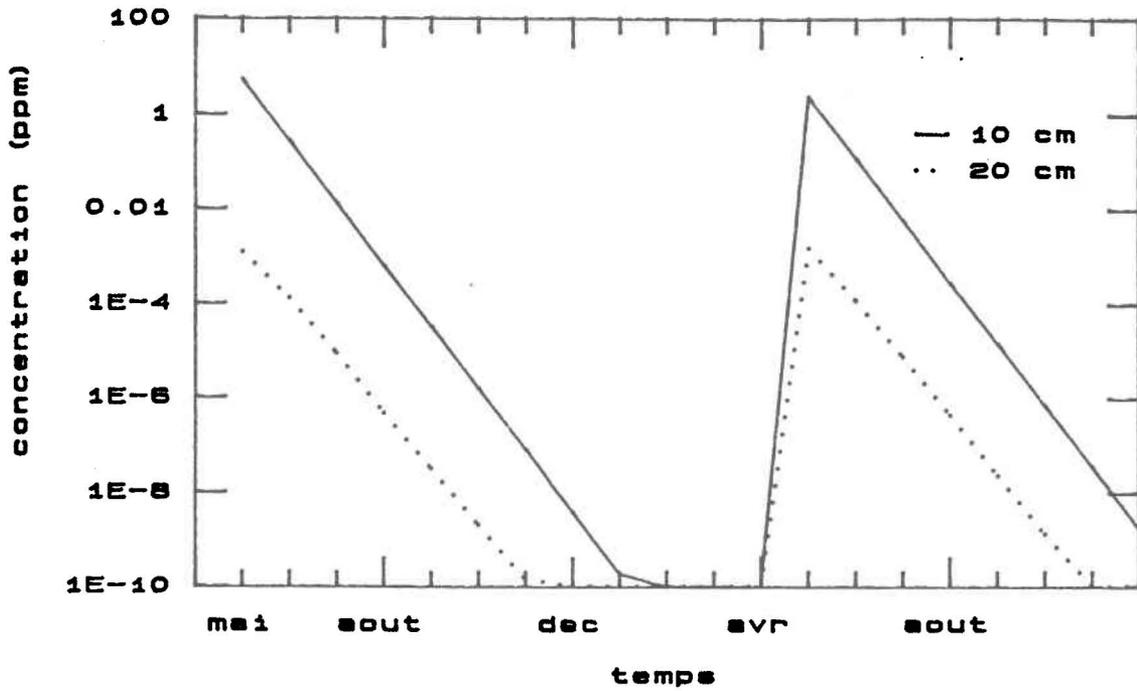
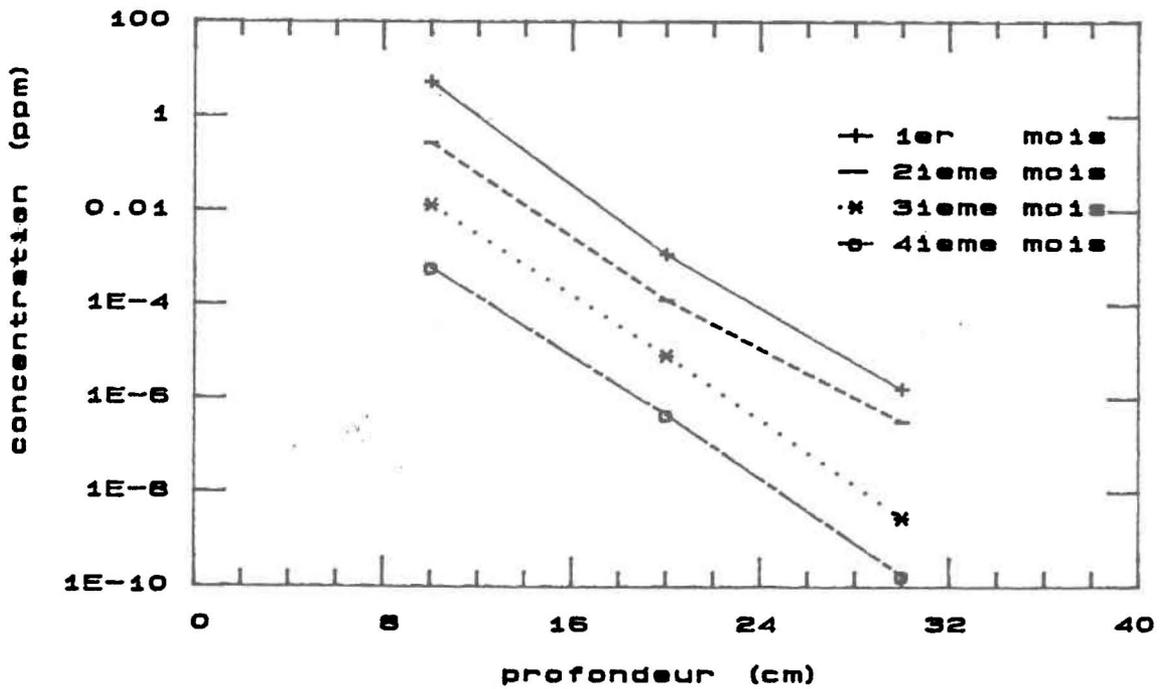


Figure 5.2 - Concentration de B(a)P adsorbé en fonction de la profondeur



En ce qui concerne les profondeurs de sol de 20 cm et plus, on remarque que les concentrations de benzo(a)pyrène adsorbé sont inférieures à la limite de détection dès le mois d'épandage et diminuent là aussi très rapidement à cause du fort taux de dégradation de ce contaminant.

La figure 5.2 permet de visualiser ces observations, en fonction de la profondeur du sol.

5.3 Simulation pour le phénanthrène

Les données d'entrée spécifiques au phénanthrène sont les suivantes :

- taux d'application sur le sol = 1500 kg/ha par année
- coefficient de distribution $K_d = 89$

Le taux d'application sur le sol a été déterminé en considérant un épandage de 500 000 kg de résidus huileux (PACE, 1981) contenant 3000 ppm de phénanthrène (voir Tableau 1.2), par hectare et par an. Le coefficient de distribution a été calculé de nouveau selon la méthode de Karickhoff, telle que décrite dans le cas du benzo(a)pyrène à la section 5.2.

Bien qu'il soit plus mobile que le benzo(a)pyrène, le phénanthrène est peu soluble et possède tout de même un coefficient de distribution élevé. En conséquence, ce sont les concentrations adsorbées au sol qui ont été utilisées pour décrire la migration de ce contaminant dans le sol. En ce qui a

trait au phénanthrène dans la phase dissoute, il n'atteint la nappe d'eau souterraine qu'en quantité négligeable et en concentration inférieure à 1×10^{-21} mg/l, douze mois après le premier épandage.

5.3.1 Profil de migration du phénanthrène pour 2 années d'épandage

Les figures 5.3 et 5.4 représentent les résultats de l'application du modèle PRZM à un épandage de phénanthrène sur le sol, selon les conditions décrites précédemment et pour un épandage unique effectué au mois de mai, chaque année.

Sur la figure 5.3, on observe une diminution lente et régulière de la concentration de phénanthrène adsorbé à 10 cm de profondeur, jusqu'à l'épandage de l'année suivante. Plus en profondeur, à 20 cm, 30 cm et 40 cm, on remarque qu'il y a une accumulation au cours des quinze premiers mois et que les concentrations se stabilisent par la suite. D'autre part, les résultats à 50 cm et plus de profondeur sont tous inférieurs aux limites de détection dans la phase dissoute (0,00004 mg/l) et dans la phase adsorbée (0,1 ppm).

On remarque sur la figure 5.3, qu'à 30 et 40 cm de profondeur, il y a une hausse de concentration lors des mois d'automne et en avril. Cette hausse est probablement due à une importante infiltration d'eau à ces périodes de l'année. La très forte hausse de concentration au mois de mai est causée par le nouvel épandage annuel.

La figure 5.4 permet de visualiser la vitesse de migration du phénanthrène dans le sol. Lors du premier mois d'épandage, les concentrations de phénanthrène sont supérieures à la limite de détection jusqu'à une profondeur d'environ 28 cm, alors que douze mois après ce premier épandage cette profondeur atteint environ 37 cm.

5.3.2 Profil de migration du phénanthrène pour huit ans d'épandage

Une simulation sur huit (8) années d'épandage a été faite afin de déterminer le degré d'accumulation à long terme du phénanthrène dans le sol et dans l'eau interstitielle. On remarque sur la figure 5.5 que les concentrations sont stabilisées dès la première année à 10 cm de profondeur, alors qu'elles le sont après la deuxième année dans les compartiments de sol de 20, 30 et 40 cm de profondeur.

Dans le tableau 5.2, on retrouve les concentrations de phénanthrène dissous et adsorbé après huit(8) années d'épandage, au mois de décembre. Ces concentrations, tant dans la phase dissoute que dans la phase adsorbée au sol, sont supérieures à la limite de détection jusqu'à 40 cm de profondeur, et ce, plus de 7 mois après l'épandage effectué au mois de mai de chaque année. Dans les 10 premiers cm de sol, elles représentent 15 à 20% des concentrations calculées lors de l'épandage, au mois de mai de chaque année.

5.3.3 Profil de migration du phénanthrène en fonction de la granulométrie du sol

Les figures 5.6 et 5.7 représentent les concentrations de phénanthrène adsorbé au sol à 20 et à 40 cm de profondeur, en fonction du temps et de la granulométrie de ce sol. On observe que pour une variation de composition en sable de 30% à 50% et en argile de 25% à 10%, on obtient une diminution de concentration (adsorbée ou dissoute) de 5% dans le compartiment de 20 cm et de 13% dans celui de 40 cm, quinze (15) mois après le premier épandage.

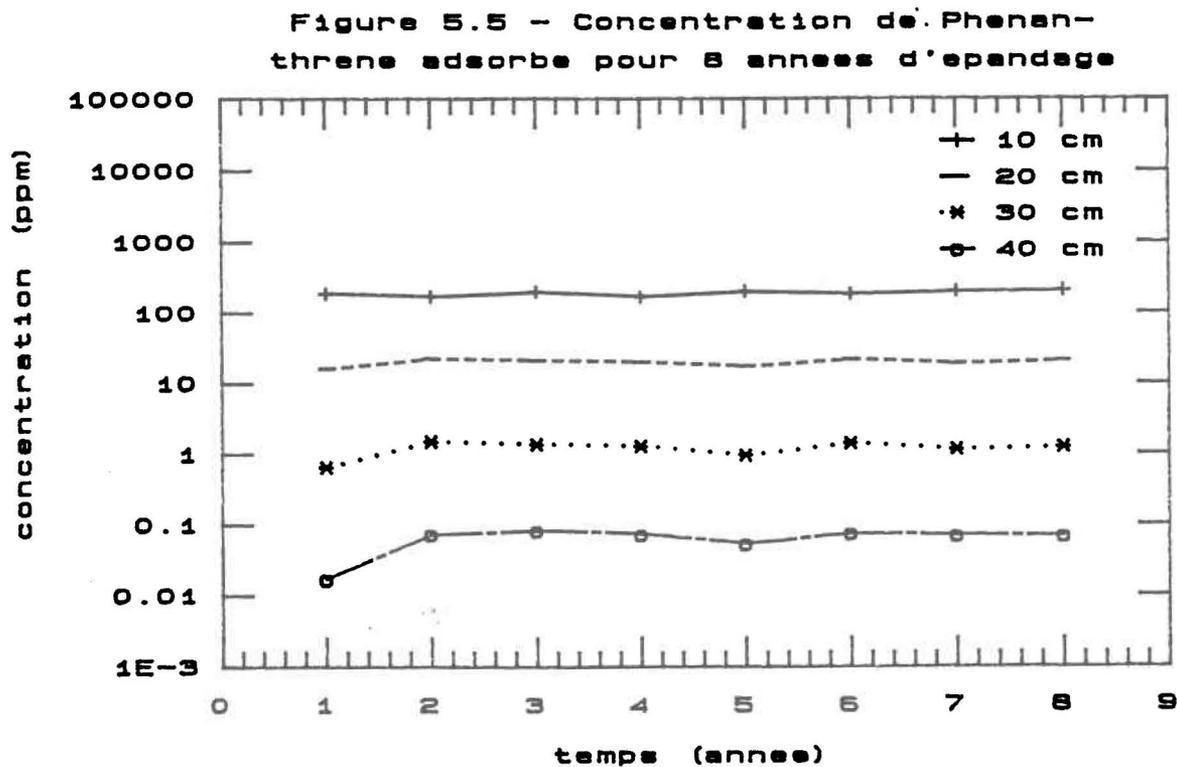
Le sol le moins sableux et le plus argileux contient des concentrations plus élevées de phénanthrène par rapport à l'autre sol, probablement parce qu'il retarde l'écoulement et retient alors davantage la contamination. On observe également que l'écart de concentration entre les deux types de sols prend environ 6 à 8 mois avant de s'annuler à 20 cm, et qu'il en prend plus de 12 à 15 mois, à 40 cm de profondeur.

En conclusion, l'influence de la granulométrie du sol sur la migration et les concentrations des contaminants dans le sol est relativement peu importante pour les conditions prévalentes dans la présente étude.

Tableau 5.2: Concentration de phénanthrène dissous et adsorbé après huit années d'épandage

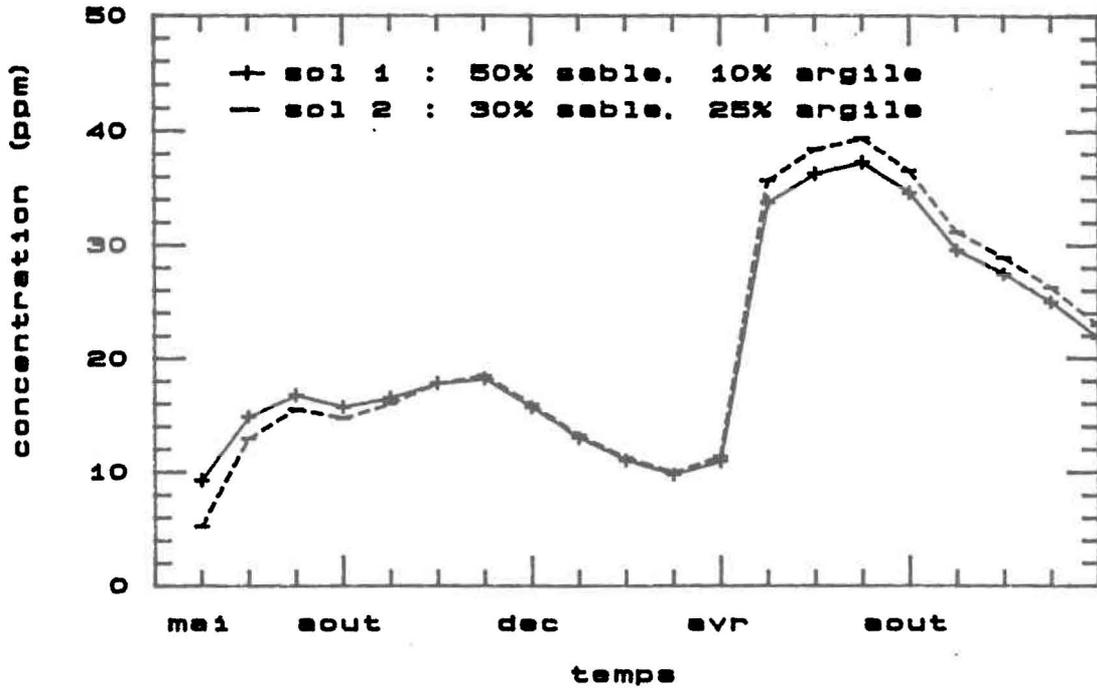
Compartment de sol (cm)	Concentration de phénanthrène*	
	phase dissoute (mg/l ou ppm)	phase adsorbée (mg/kg ou ppm)
0 - 10	2,0	175,0
10 - 20	0,23	20,9
20 - 30	0,016	1,41
30 - 40	0,0009	0,08

*: au mois de décembre



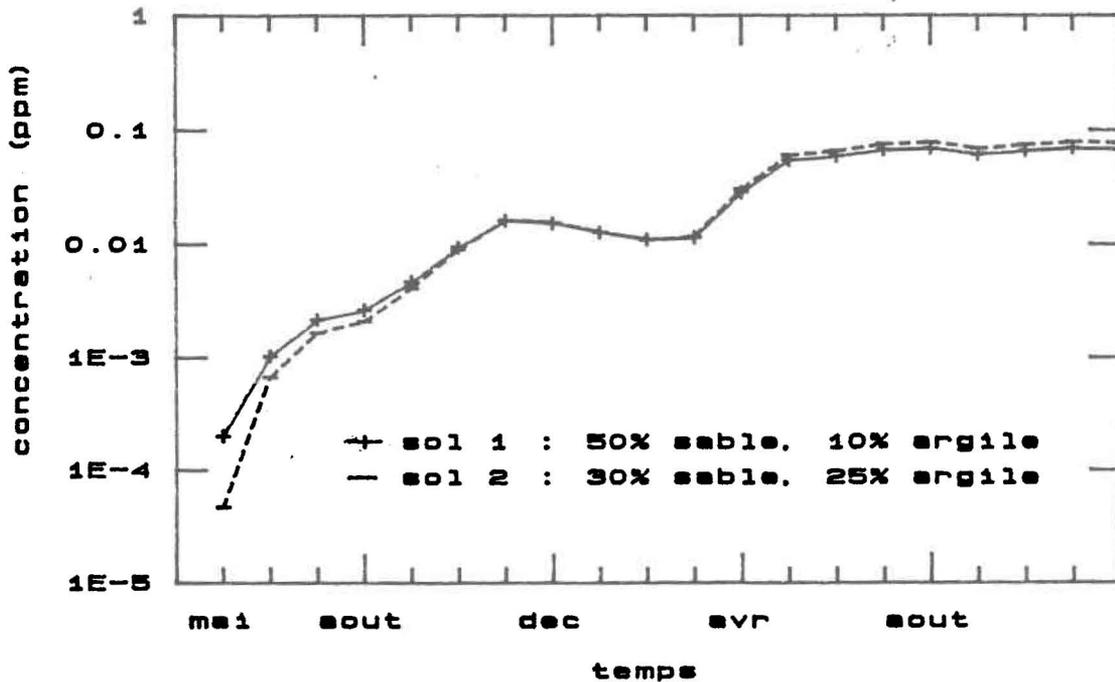
N.B.: concentration au mois de decembre de chaque année

Figure 5.6-Concentration de Phenanthrene adsorbé en fonction de la granulometrie



N.B.: a 20 cm de profondeur

Figure 5.7-Concentration de Phenanthrene adsorbé en fonction de la granulometrie



N.B. : a 40 cm de profondeur

5.3.4 Profil de migration du phénanthrène en fonction du pourcentage de matière organique dans le sol

Une simulation supplémentaire a été faite pour le phénanthrène afin d'évaluer l'influence de l'apport en matière organique provenant de la phase huileuse des résidus, sur la migration de ce contaminant dans le sol.

En supposant une application par hectare, de 500 000 kg de résidus huileux (densité = 1,0) contenant 8% d'hydrocarbures, on en déduit un épandage d'environ 4 kg d'hydrocarbures par mètre carré. De plus, en supposant que l'application des résidus huileux est faite dans les 10 premières cm de sol (densité \approx 2,0) et en posant que les hydrocarbures sont de la matière organique à 100%, on peut calculer que l'épandage des résidus huileux sur le sol représente un apport supplémentaire de 2,0% de matière organique au sol. En ajoutant donc ce 2,0% au 0,5% de matière organique contenu dans le sol naturel, tel que posé dans les autres simulations de la présente étude, on obtient alors 2,5% de matière organique dans le sol pour la présente simulation.

Le tableau 5.3 présente les concentrations de phénanthrène en phase dissoute et en phase adsorbée au sol dans les 40 premiers cm de sol, en fonction du pourcentage de matière organique contenu dans ce sol.

On remarque qu'en ce qui a trait à la phase adsorbée au sol, la concentration de phénanthrène dans les 10 premiers cm dans le sol contenant

Tableau 5.3: Concentration de phénanthrène dissous et adsorbé en fonction du pourcentage de matière organique dans le sol.

Compartiment de sol (cm)	Sol* contenant 0,5% de matière organique		Sol* contenant 2,5% de matière organique	
	Concentration de phénanthrène** phase dissoute (mg/l)	Concentration de phénanthrène** phase adsorbé (mg/kg)	Concentration de phénanthrène** phase dissoute (mg/l)	Concentration de phénanthrène** phase adsorbé (mg/kg)
0 - 10	1,901	169,2	0,5942	264,4
10 - 20	0,2525	22,56	0,0134	5,979
20 - 30	0,0166	1,478	0,0002	0,0753
30 - 40	0,0008	0,074	<0,0001	0,0008

* Sol contenant 15% de gravier, 37% de sable, 29% de silt et 19% d'argile.

** au mois de décembre de la deuxième année d'épandage.

2,5% de matière organique est supérieure d'environ 55% à celle que l'on retrouve dans le sol qui n'en contient que 0,5%. Plus en profondeur (de 10 à 40 cm) toutefois, les concentrations de phénanthrène adsorbée au sol contenant 2,5% de matière organique sont toutes nettement inférieures à celles calculées pour un sol en contenant 0,5%.

D'autre part les concentrations de phénanthrène dans la phase dissoute du sol contenant 2,5% de matière organique sont toutes nettement inférieures à celles du sol qui en contient 0,5%.

En conclusion, dans un sol contenant 3,5% de matière organique, le phénanthrène sera davantage adsorbé dans les 10 premiers cm par rapport à un sol contenant moins de matière organique. Plus en profondeur (i.e.: à plus de 10 cm), le phénanthrène migrera en concentration moins grande dans un sol contenant 2,5% de matière organique, par rapport en un sol en contenant moins.

D'autre part, les concentrations de phénanthrène en phase dissoute migrant dans un sol contenant 2,5% de matière organique, seront moins grandes que celles calculées pour un sol qui en contient moins, à cause de la grande influence du pourcentage de matière organique du sol, sur le coefficient de distribution du contaminant.

Enfin, il est important de mentionner ici que toutes les autres simulations de la présente étude ont été faites en considérant un sol contenant 0,5% de matière organique parce que cette valeur représente le contenu moyen en

matière organique des sols que l'on retrouve sur les terrains des raffineries de pétrole de l'Est de Montréal (réf.: communication personnelle, Ministère de l'Environnement du Québec). De plus, les simulations faites avec cette valeur permettent de prédire le degré de migration des contaminants dans la condition la plus favorable à la migration, i.e. avec un certain facteur de sécurité. Enfin, bien que lors de la période d'épandage de résidus huileux le pourcentage de matière organique dans le sol soit près de 2,5%, cette situation ne dure que peu de temps puisqu'il y a volatilisation, photooxydation et biodégradation de plusieurs hydrocarbures spécifiques, quelques mois seulement après l'épandage.

5.4 Simulation pour le pyrène

Les données d'entrée spécifiques au pyrène sont les suivantes:

- taux d'application sur le sol = 500 kg/ha par année
- coefficient de distribution, $K_d = 644$

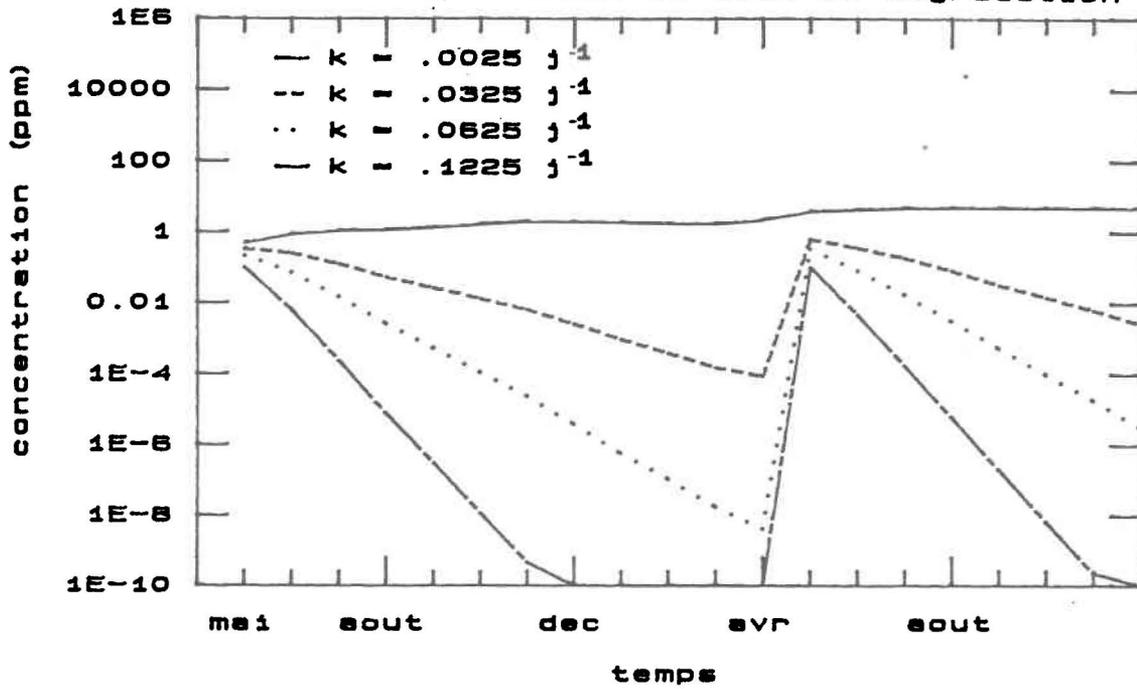
Le taux d'application sur le sol a été déterminé en considérant un épandage de 500 000 kg de résidus huileux (PACE, 1981) contenant 1000 ppm de pyrène (voir Tableau 1.2), par hectare et par année. Le coefficient de distribution a été calculé à partir de l'équation de Karickhoff, telle que décrite pour le benzo(a)pyrène à la section 5.2.

Dans le cas du pyrène, nous avons cherché à déterminer l'influence du taux de dégradation sur la mobilité d'un HAP moyennement soluble et ayant un coefficient de partition moyen pour cette famille d'hydrocarbures. Quelques simulations ont donc été faites pour le pyrène, avec un taux de dégradation variant de $0,0025 \text{ j}^{-1}$ à $0,1225 \text{ j}^{-1}$, ce qui couvre l'étendue des valeurs de taux de dégradation des HAP étudiés par PACE (1981) (voir Tableau 5.1).

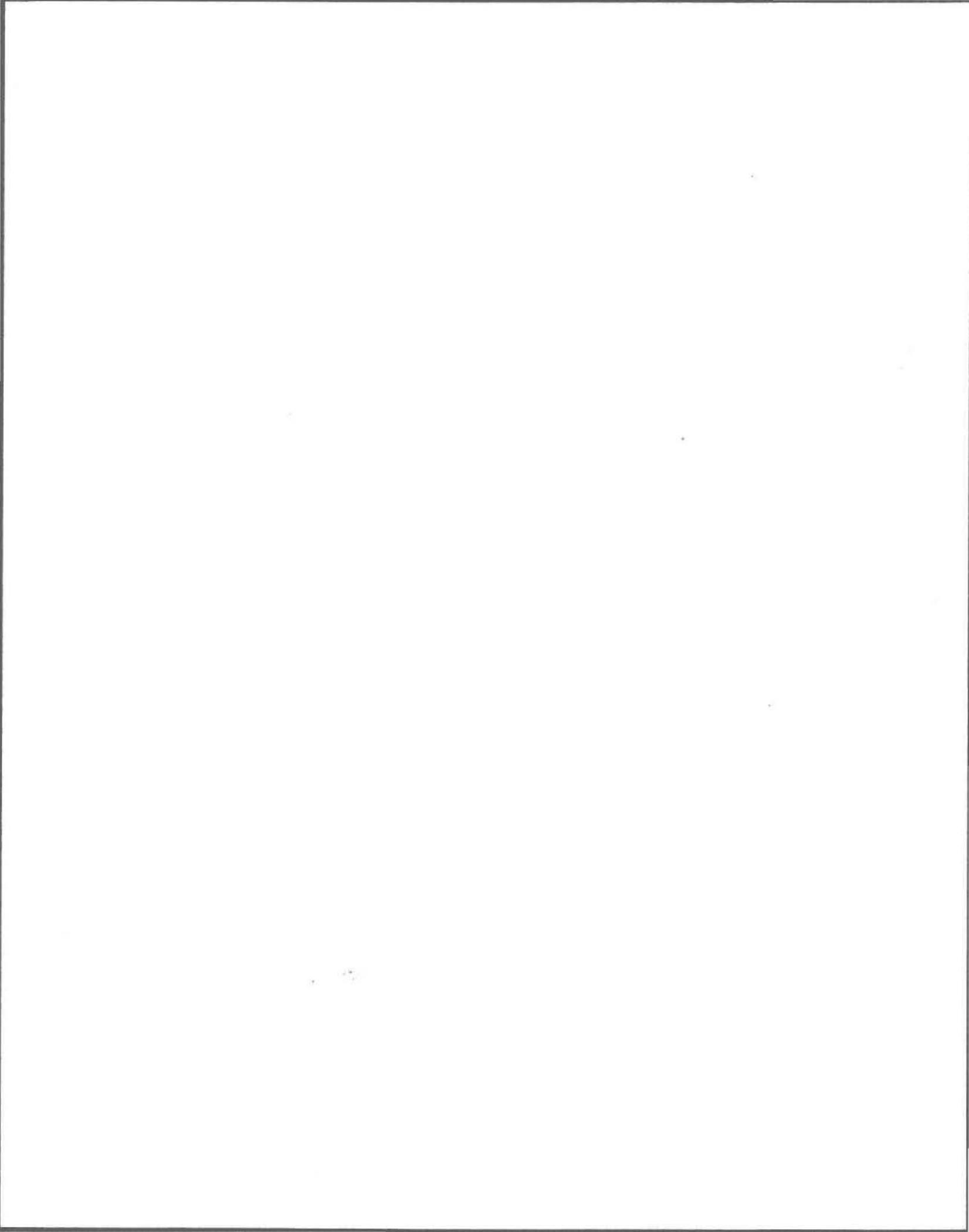
On remarque sur la figure 5.8 que dans les cas où le taux de dégradation est supérieur à $0,0325 \text{ j}^{-1}$, il n'y a aucune accumulation annuelle de pyrène adsorbé au sol. De plus, les concentrations à 20 cm de profondeur sont inférieures à la limite de détection (0,4 ppm) trois (3) mois seulement après l'épandage, dans ces cas. Ce n'est que dans le cas où le taux de dégradation est très faible, soit $0,0025 \text{ j}^{-1}$, que l'on observe une accumulation de pyrène lors du deuxième épandage.

Enfin, mentionnons qu'on observe de très fortes variations de concentrations de pyrène adsorbé lorsque le taux de dégradation est le double de sa valeur moyenne (environ $0,0625 \text{ j}^{-1}$) ou qu'il est diminué de moitié. Ces variations de concentrations sont de l'ordre de plusieurs dizaines à quelques centaines de fois la valeur calculée avec le taux de dégradation moyen.

Figure 5.8 - Concentration de Pyrene adsorbé en fonction du taux de dégradation



N.B. : à 20 cm de profondeur



6. CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS

L'application du modèle PRZM à l'étude de la migration des HAP dans le sol de l'est de l'Île de Montréal suite à un épandage d'environ 500,000 kg de résidus huileux par hectare et par année, nous permet de tirer les conclusions suivantes:

- 1) Le benzo(a)pyrène se dégrade très rapidement et ne s'accumule pas dans le sol ou dans l'eau de la zone vadose même sur plusieurs années d'épandages. La profondeur de migration de ce contaminant, en concentrations supérieures à la limite de détection, n'est que de 10 cm dans le sol, et ce, seulement lors du premier mois suivant l'épandage.
- 2) Le phénanthrène est un HAP relativement mobile et peu dégradé, qui est susceptible de s'accumuler dans le sol et dans l'eau de la zone vadose au cours des deux premières années d'épandage. Après deux ans, il n'y a plus d'accumulation due aux autres épandages. La profondeur de migration de concentrations détectables de ce contaminant atteint 40 cm pour la phase adsorbée au sol et pour la phase dissoute.
- 3) Une variation de la granulométrie du sol, consistant en une diminution de 50% à 30% en sable (i.e.: une réduction de 40%) et une augmentation de 10% à 25% en argile (i.e.: une hausse de 150%),

entraîne pour le phénanthrène une augmentation de concentration de seulement 5% dans les phases dissoute et adsorbée à 20 cm de profondeur, et de 13% à 40 cm de profondeur.

- 4) Le contenu en matière organique du sol influence beaucoup la profondeur de migration des contaminants ainsi que la distribution de ceux-ci entre la phase dissoute et la phase adsorbée au sol. Dans le cas du phénanthrène, les résultats des simulations démontrent que celui-ci se retrouve davantage dans les 10 premiers cm de sol et qu'il est en proportion plus grande dans la phase adsorbé au sol que dans la phase dissoute, lorsque le sol contient une fraction plus importante de matière organique.

- 5) L'influence du taux de dégradation sur la migration du pyrène est très importante. Les variations de concentrations de pyrène adsorbé au sol ou dissous sont très fortes lorsque le taux de dégradation est le double de sa valeur moyenne (environ $0,0625 \text{ j}^{-1}$) ou qu'il est diminué de moitié. Ces variations de concentrations sont de l'ordre de plusieurs dizaines à quelques centaines de fois la valeur calculée avec le taux de dégradation moyen.

- 6) Pour tous les HAP mentionnés au Tableau 5.1, les concentrations dans la phase adsorbée sont beaucoup plus grandes que dans la phase dissoute, à cause des coefficients de partition très élevés de cette famille de contaminants.

- 7) Pour des valeurs de K_{ow} comparables, les HAP ayant un faible taux de dégradation sont les plus susceptibles de migrer dans le sol et de s'accumuler au cours des années.
- 8) L'accumulation en concentration appréciables de certains HAP, tel le phénanthrène, dans le sol peut entraîner des limitations d'usages dans les secteurs utilisés pour l'épandage de résidus huileux (Ministère de l'environnement du Québec, 1987).
- 9) Également, une accumulation de HAP dans le sol peut altérer la qualité des eaux de surface, considérant que le ruissellement sur les surfaces utilisées pour l'épandage de résidus huileux peut entraîner des matières particulières en suspension.

Ces conclusions sur la migration verticale des HAP, concordent avec celles de Brown (1984), de Streebin (1985a) et de PACE (1981), qui mentionnent que suite à un épandage de résidus huileux sur le sol, les hydrocarbures ne migrent pas à plus de 50 à 60 cm de profondeur et se dégradent dans cette partie du sol.

Par ailleurs, les résultats obtenus avec les HAP se comparent avec ceux de Villeneuve et al. (1987a) qui ont montré la très grande sensibilité du modèle PRZM par rapport à la variabilité du taux de dégradation dans le cas de pesticides appliqués en zone agricole. Également au sujet de ces taux de dégradation, l'étude de PACE (1985) confirme qu'une application répétée de

résidus huileux sur le sol peut produire une accumulation dans le sol des HAP ayant une faible vitesse de dégradation.

D'autre part, l'application de la modélisation mathématique au problème de contamination des sols et de l'eau souterraine, due à l'épandage de résidus huileux, permet de simuler une multitude de cas différents d'épandage. Les résultats de ces simulations peuvent aider les gestionnaires à déterminer les conditions optimales de la technique d'épandage de résidus huileux, afin de minimiser la migration des contaminants. Il serait alors possible de déterminer: le taux d'application, le nombre d'application annuelles, les périodes de l'année les plus propices à l'épandage, le type de sol limitant le plus la migration, les contaminants les plus critiques à contrôler, etc...

Enfin, afin d'améliorer la justesse ou la représentativité des prédictions des modèles mathématiques appliqués aux cas de migration de contaminants suite à l'épandage de résidus huileux sur le sol, il est recommandé de favoriser la recherche dans les domaines suivants:

- détermination du coefficient de partition des contaminants entre les phases huile, eau et sol;
- détermination du taux de dégradation des contaminants organiques mentionnés dans le Tableau 1.2, dans les phases huile, eau et sol;
- détermination de l'importance de la compétition entre divers contaminants pour les sites d'adsorption, et modélisation mathématique de cette compétition.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Anderson, M.P. (1979).

"Using models to simulate the movement of contaminants through groundwater flow systems". Dans: CRC Crit. Rev. Environ. Control., 9: 97-156.

Bierl, R., Kaa, W. et Thomas, W. (1984).

"Spatial and temporal concentration gradients of PAH (fluoranthène, benzo(a)pyrène), BHC and 2,4-D in samples of soil, Soil water and ground water in an agricultural research area". Fresenius Z. Anal. Chem. 319: 172-179.

Brown, K.W.S. (1984).

"Evaluation of subsurface conditions at refinery land treatment sites". Texas Ann. University, NTIS, PB84-102/69, 131 p.

Cameron, D.R. et Klute, A. (1977).

"Convective-dispersive solute transport with a combined equilibrium and kinetic adsorption model". Water Resour. Res., 13(1): 183-188.

Carsel, R.F., Smith, C.N., Mulkey, L.A., Dean, J.D. et Jowise, P. (1984a).

"Users manual for the Pesticide Root Zone Model (PRZM), Release I". USEPA Research Laboratory, Office of Research and Laboratory, 216 pp.

Carsel, R.F., Smith, C.N. et Parrish, R.S. (1984b).

"Modeling differences Between Conventional and Conservation Tillage on Pesticide Leaching". USEPA Research Laboratory, 22 pp.

Davidson, J.M., Ou, L.T., Rothwell, D.F., Rao, P.S.C. et Wheeler, W.B. (1980).

"Adsorption, movement and biological degradation of large concentrations of selected pesticides in soils". University of Florida, USEPA report no EPA-600/2-80-124, NTIS PB 81-111056, 110 pp.

Dieulin, A., Matheron, G. et De Marsily, G. (1981).

"Growth of the dispersion coefficient with the mean travelled distance in porous media". Sci. Tot. Environ., 21: 319-328.

Karickhoff, S.W. (1979).

"Sorption kinetics of hydrophobic pollutants in natural sediments". Dans: "Contaminants and sediments, vol. II: Transport, fate and case studies". Ann Arbor Science, Michigan, p. 193-205.

McCarthy, P.L., Reinhard, M. et Rittwahn, B.E. (1981).

"Trace organics in groundwater". Env. Sci. and Technology, 15(1): 40-51.

Ministère de l'Environnement du Québec. (1985).

"Règlement sur les déchets dangereux". Loi sur la qualité de l'Environnement (Q-2, r.12.1): 289-290.28.

Ministère de l'Environnement du Québec. (1987).

"Politique de gestion de projets de réhabilitation de sols contaminés",
Direction Générale du Milieu Terrestre, Direction des Substances
Dangereuses, Québec, 29 pp.

Overcash, M.R. et Pal, D. (1979).

"Design of land treatment systems for industrial wastes". Ann Arbor
Science, Michigan, 684 pp.

PACE (Petroleum Association for Conservation of the Canadian Environment).
1981).

"Lands spreading of sludges at Canadian petroleum facilities". PACE Report
No 81-5A, Ottawa, 97 pp.

PACE (Petroleum Association for Conservation of the Canadian Environment).
(1985).

"The persistence of polynuclear aromatic hydrocarbons in soil". PACE
Report No 85-2, Ottawa, 52 pp.

Parr, J.F., Marsh, P.B. et Kla, J.M. (1983).

"Land Treatment of Hazardous Wastes". U.S. Department of Agriculture,
Noyes Data Corporation, New-Jersey, 418 pp.

Rao, P.S.C., Davidson, J.M., Jessup, R.E. et Selim, H.M. (1979).

"Evaluation of conceptual models for describing nonequilibrium
adsorption-desorption of pesticides during steady-flow in soils". Soil
Sci. Soc. Am. J., 43: 22-28.

Roberts, P.V. et Valocchi, A.J. (1981).

"Principles of organic contaminants behavior during artificial recharge".
Sci. Tot. Environ., 21: 161-172.

Société d'Ingénierie Cartier, 2045 Stanley, Montréal. (1986a).

"Hydrogeological study and soil investigation at the Petro-Canada Anjou refinery". Volume. 2, 367 pp.

Société d'Ingénierie Cartier, 2045 Stanley, Montréal. (1986b).

"Technical assessment report of the biooxydation project of the ville d'Anjou Petro-Canada property". Montréal, 39 pp.

Société d'Ingénierie Cartier, 2045 Stanley, Montréal, (1987).

"Hydrogeological study and soil investigation at the Petro-Canada Anjou refinery", additionnal characterization. Volume 5, 300 p.

Streebin, L.E. (1985a).

"Land Treatment of Petroleum refinery sludges". Oklahoma University,
NTIS PB85-148-708, 333 pp.

Streebin, L.E. (1985b).

"Closure evaluation for petroleum residue land treatment". Oklahoma University, NTIS PB85-115822, 219 p.

Villeneuve, J.P., Campbell, P.G.C., Isabel, D. et Wilson, L. (1984).

"Étude de la compréhension des phénomènes de contamination des eaux souterraines au Québec par les pesticides". Université du Québec, INRS-Eau, rapport no 178, 310 pp.

Villeneuve, J.P., Lafrance, P., Banton, O., Fréchette, P. et Robert, C. (1987a).

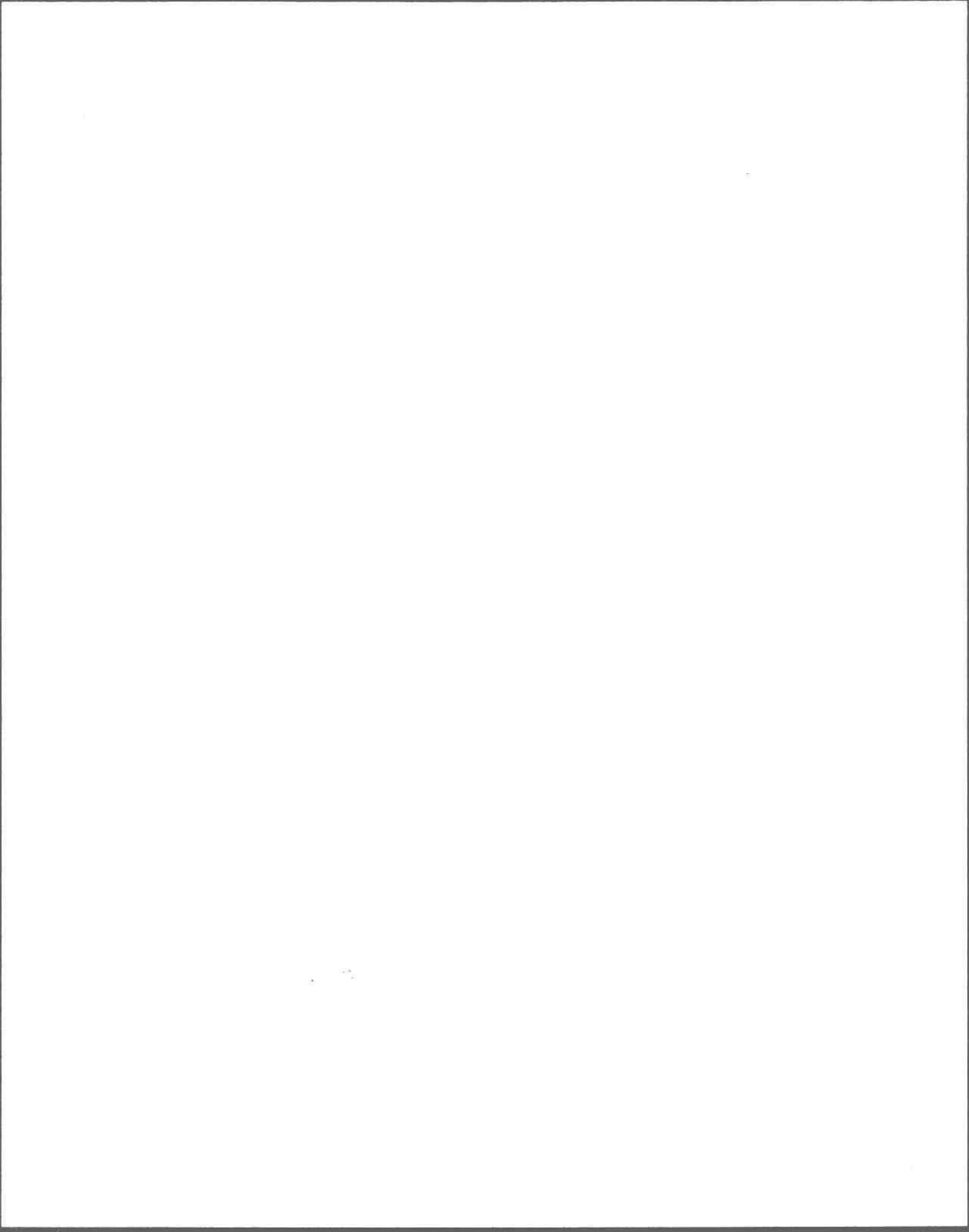
"A sensitivity analysis of adsorption and degradation parameters in predicting pesticide transport through soils". J. Contaminat. Hydrol. (Soumis pour publication).

Villeneuve, J.P., Banton, O., Lafrance, P., Blanchette, C. et Deschênes, S. (1987b).

"Développement d'un nouvel outil simple et adaptable pour l'évaluation de la vulnérabilité des eaux souterraines à la contamination par les pesticides". Université du Québec, INRS-Eau, rapport scientifique no 232, 278 pp.

Wilson, J.T. (1983).

"Transport and fate of selected organic pollutants in a sandy soil". NTIS report # PB83-116921, Robert S. Kerr Environmental Research Lab., Oklahoma, 8 pp.



ANNEXE 1

LES MODÈLES MATHÉMATIQUES

(Tiré de Villeuve et al., 1984)

ANNEXE 1

A.1 LES MODÈLES MATHÉMATIQUES

A1.1 Les modèles des processus importants dans le transport

Roberts et Valocchi (1981) et McCarthy et al. (1981) identifient quatre processus déterminants pour modéliser le destin des composés organiques dans l'eau souterraine. Ce sont l'advection, la dispersion, l'adsorption et la dégradation.

A1.1.1 L'advection

L'advection (aussi appelée convection) est le transport des contaminants en solution, dans l'eau en mouvement. La vitesse des contaminants non-réactifs transportés par advection est donc égale à la vitesse de l'eau qui les transporte.

Pour modéliser le processus d'advection dans le milieu souterrain, il est nécessaire d'utiliser un artifice conceptuel qui consiste à représenter le milieu réel hétérogène par un milieu continu macroscopiquement homogène. Cette simplification permet l'emploi de puissantes techniques mathématiques développées pour solutionner les problèmes de mécanique des milieux continus.

Voyons d'abord comment fonctionnent les modèles hydrogéologiques de la zone saturée. En tenant compte de l'équation de Darcy, du concept de charge hydraulique et du concept de conservation des masses, on peut dériver l'équation de Laplace qui exprime le déplacement de l'eau souterraine dans un petit volume de milieu poreux homogène.

$$\frac{\partial^2 H}{\partial x_i^2} = 0$$

où H = charge hydraulique (m)

x_i = coordonnées (x_1, x_2, x_3) (m)

C'est en résolvant cette équation pour des domaines ayant des conditions limites correspondants à la géométrie du lieu concerné que le mouvement des eaux souterraines est étudié. La solution de l'équation de Laplace nous donne la valeur de H en tous points.

En dérivant l'équation de Laplace pour obtenir la valeur du gradient hydraulique "i", et en multipliant cette valeur par la conductivité hydraulique K, on obtient la vitesse de Darcy:

$$V_D = K i$$

$$\text{où } i = \frac{\partial H}{\partial x_i}$$

et V_D = vitesse de Darcy (m/sec)

K = conductivité hydraulique (m/sec)

i = gradient hydraulique (sans dimension)

Cette vitesse de Darcy est un concept macroscopique. Au niveau microscopique le milieu poreux n'est pas un milieu continu homogène et l'eau n'occupe que les pores. La vitesse réelle moyenne de l'eau est donc plus grande et égale au rapport de la vitesse de Darcy par la porosité du milieu:

$$\bar{v} = \frac{V_D}{n}$$

où v = vitesse réelle moyenne (m/sec)

n = porosité (sans dimension)

On peut obtenir une bonne approximation de la porosité si l'on connaît la nature du matériau composant le milieu souterrain.

De la même façon que dans l'équation de Laplace, c'est le principe de conservation de la masse qui nous permet de dériver l'équation d'advection. Soit un volume infinitésimal de milieu poreux saturé, traversé par un courant d'eau de vitesse v , transportant par advection un contaminant de concentration C . Ce transport est décrit par:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\bar{v} \frac{\partial C}{\partial x}$$

où C = concentration du contaminant (g/L)

t = temps (sec)

\bar{v} = vitesse réelle moyenne (m/sec)

Ce modèle de l'advection est parfaitement exact et la seule cause d'inadéquation peut être l'emploi d'un champ de vitesse erroné. Les erreurs de calculs de la vitesse \bar{v} peuvent provenir de mauvaises estimations de la porosité n et de la conductivité hydraulique K.

En résumé, la modélisation de l'advection dans la zone saturée repose essentiellement sur la modélisation de l'écoulement en milieu poreux et il est donc avantageux d'utiliser l'un des nombreux modèles hydrogéologiques actuellement disponibles. Il y en aura toujours un correspondant ou ajustable à la géométrie du lieu et au degré de précision désiré, compte tenu de la qualité des données disponibles.

En ce qui concerne la modélisation mathématique du processus d'advection dans la zone vadose (ou insaturée) du sol, il suffit d'ajouter à l'équation d'advection déjà présentée, un terme qui tient compte de la fraction immobile de l'eau retenue. D'autre part, certains s'appuient sur des modèles d'infiltration pour calculer le mouvement de l'eau dans la zone vadose, mais le

principal problème réside dans le caractère instable et l'hétérogénéité des phénomènes observés dans cette zone. Les événements de précipitations sont hautement aléatoires et les interférences de la végétation font que les conditions régnant dans la zone insaturée du sol sont très variables et difficilement prévisibles. Les tentatives de modélisation conceptuelles du transport par advection dans la zone vadose sont donc difficiles à réaliser. Toutefois, une chose est sûre, c'est que dans la zone vadose le transport par advection est essentiellement vertical.

A1.1.2 La dispersion

À l'échelle microscopique, la dispersion est causée par des différences de vitesse de l'eau dans les pores. Si l'on pouvait définir exactement le champ des vitesses dans chaque pore, il serait possible de simuler le transport de tout soluté en ne tenant compte que des processus d'advection et de diffusion. Toutefois, comme il est impossible de décrire les milieux poreux avec une telle précision, nous devons nous contenter de connaître la vitesse moyenne de l'eau dans un volume élémentaire. Alors, comme nous l'avons fait avec l'advection, nous utilisons un milieu continu homogène équivalent, et nous imaginons un processus que nous appelons dispersion.

La dispersion produit un effet similaire à celui de la diffusion, bien que d'une ampleur différente. C'est pourquoi les premiers modèles de dispersion ont été inspirés par des modèles de diffusion. Fick nota en 1855 une analogie entre la diffusion et le transfert de chaleur par conduction. Il adopta donc l'équation de Fourier et énonça que le taux de transfert par diffusion au

travers une section unitaire est proportionnel au gradient des concentrations normales à cette section.

$$F = - D_m \frac{\partial C}{\partial L}$$

où F = taux de transfert (kg/sec.m²)

D_m = coefficient de diffusion (m²/sec)

C = concentration (kg/m³ ou g/L)

L = longueur dans la direction perpendiculaire à la section (m)

Fick avait donc introduit le coefficient de diffusion " D_m ", et c'est cette même équation qui fût utilisée par analogie comme premier modèle de la dispersion hydrodynamique en milieu poreux, en remplaçant le coefficient de diffusion par un coefficient de dispersion " D ".

Si comme nous l'avons fait avec l'advection, nous appliquons la loi de la conservation de la masse à un volume infinitésimal où les processus d'advection et de dispersion ont cours, nous pouvons obtenir l'équation suivante:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \bar{v} \frac{\partial C}{\partial x}$$

où C = concentration (kg/m^3 ou g/L)

t = temps (sec)

D = coefficient de dispersion (m^2/sec)

x = distance (m)

\bar{v} = vitesse réelle moyenne (m/sec)

Il s'agit de l'équation d'advection-dispersion qui est à la base de la quasi-totalité des modèles actuels de transport de soluté dans l'eau souterraine.

D'autre part, il a été démontré et vérifié par l'expérience que le coefficient de dispersion hydrodynamique D est proportionnel à la vitesse v , par la relation:

$$D = \alpha \bar{v}$$

où D = coefficient de dispersion (m^2/sec)

α = dispersivité (m)

v = vitesse réelle moyenne (m/sec)

Cette nouvelle constante α est une propriété caractéristique de chaque matériau. La dispersivité se décompose en dispersivité longitudinale α_L et dispersivité transversale α_t , la première ayant des valeurs (mesurées en laboratoire) de l'ordre de 0.1 mm à 10 mm et la seconde étant plus faible d'un facteur de 5 à 20 fois.

Les valeurs de dispersivité mesurées sur le terrain à l'aide de traceurs sont cependant plus grandes d'un ou de plusieurs ordres de grandeur que celles mesurées en laboratoire (Anderson, 1979). Ce phénomène a reçu le nom d'effet d'échelle ("scale effect"). Cet effet est causé par l'inadéquation du modèle Fickien de la dispersion.

Dieulin et al. (1981) ont démontré que lorsqu'on suppose une distribution gaussienne des vitesses et une corrélation spatiale de ces vitesses (i.e. pas d'indépendance comme dans le modèle Fickien), le comportement n'est plus Fickien. Il ne le devient qu'après un laps de temps dépendant de la distance où il n'y a plus de corrélation des vitesses. Le modèle Fickien n'est donc valable qu'asymptotiquement.

Il ressort de tout ceci que l'effet d'échelle est dû au fait que le transport de contaminants dans l'eau souterraine s'effectue au travers d'hétérogénéités de plus en plus importantes, à mesure que la contamination s'étend de plus en plus loin de son lieu d'origine, d'où une dispersivité croissante.

Dans le but de corriger les inadéquations du modèle d'advection-dispersion Fickien, deux approches différentes sont utilisées. La première consiste à utiliser une simulation stochastique et la seconde à utiliser un coefficient de dispersion variable. Cependant, la nécessité d'ajuster le coefficient de dispersion n'est justifiable que dans les cas de prédiction du transport et de l'étalement initial d'une source de pollution ponctuelle, ce qui ne s'apparente pas vraiment aux cas d'épandages de résidus huileux sur les sols.

En conclusion, l'équation d'advection-dispersion Fickienne est valable en tout temps pour simuler le déplacement des contaminants de sources diffuses, en utilisant la dispersivité asymptotique.

Dans la zone vadose, la dispersivité est également observée. Toutefois, dans le cas d'un problème de migration verticale (ex.: à travers une colonne de sol), il est superflu de tenir compte de la dispersivité dans la zone non-saturée du sol. Il est préférable de s'en tenir aux mécanismes d'advection, d'adsorption et de dégradation.

A1.1.3 L'adsorption-désorption

Le processus d'adsorption-désorption, impliqué dans le destin de plusieurs contaminants organiques dans les eaux souterraines, a également fait l'objet d'un effort de modélisation. Cependant, considérant le manque de connaissances concernant les mécanismes d'adsorption-désorption spécifiques à chaque contaminant organique, il faut se limiter à des modèles assez généraux pour ce processus.

L'incorporation de ce type de modèle général dans les modèles d'advection-dispersion se fait par l'ajout, dans l'équation d'advection-dispersion, d'un terme q qui permet de respecter le bilan de masse.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\bar{v} \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + q$$

où C = concentration (kg/m^3 ou g/L)

t = temps (sec)

\bar{v} = vitesse réelle moyenne (m/sec)

x = distance (m)

D = coefficient de dispersion (m^2/sec)

q = terme de perte/gain ($\text{kg/m}^3/\text{sec}$)

L'adsorption correspond à une perte (q négatif) et la désorption à un gain (q positif).

Considérant que les vitesses de circulation de l'eau souterraine sont généralement très faibles, il est habituel de postuler que les réactions d'adsorption-désorption peuvent être adéquatement modélisées à l'aide d'équations représentant un équilibre instantané réversible.

La plus utilisée de ces équations est celle de l'isotherme de Freundlich, qui décrit la relation entre la quantité de substance adsorbée et la concentration dans la solution à l'équilibre. À de faibles concentrations, cette isotherme est usuellement représenté par un simple coefficient de partition K_D (adsorption linéaire):

$$S = K_D C$$

où S = concentration de substance adsorbée (kg/kg)

K_D = coefficient de partition (m^3/kg)

C = concentration de substance en solution (kg/m^3 ou g/L)

Ainsi, le terme désorption/adsorption ajouté à l'équation d'advection-dispersion devient:

$$q = - \frac{\rho}{n} \frac{\partial S}{\partial t}$$

où ρ = densité du sol (kg/m^3)

n = porosité (adimensionnel)

Les termes q , S et t ont déjà été définis plus haut.

L'équation complète d'advection-dispersion et de l'adsorption/désorption est donc:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\rho}{n} \frac{\partial S}{\partial t}$$

Si l'on pose:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial S}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t} = K_D \frac{\partial C}{\partial t}$$

On obtient alors:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\rho}{n} (K_D \frac{\partial C}{\partial t})$$

ou

$$(1 + \frac{\rho}{n} K_D) \frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Le résultat est que le front de propagation d'un contaminant adsorbé, simulé par ce modèle, est retardé par rapport à la propagation d'un contaminant non-réactif. En fait dans le modèle, tout se produit exactement comme si la vitesse de convection est diminuée d'un facteur "R" appelé facteur de retard:

$$R = 1 + \frac{\rho}{n} K_D$$

Cependant, l'hypothèse d'un équilibre instantané et de la complète réversibilité du processus d'adsorption/désorption a été mise en doute par quelques chercheurs (Davidson et al., 1980; Rao et al., 1979). En effet, le modèle d'adsorption-désorption à l'équilibre prédit des courbes de concentration symétriques, alors que les courbes expérimentales observées sont souvent asymétriques avec un effet de queue. Cet effet peut être dû à une adsorption incomplètement réversible ou lente. Des modèles cinétiques de

l'adsorption-désorption ont donc été proposés, dont le plus simple et le plus utilisé est une équation de cinétique du premier ordre:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = k_1 \frac{n}{\rho} C - k_2 S$$

où k_1 = coefficient d'adsorption (sec^{-1})

k_2 = coefficient de désorption (sec^{-1})

S = concentration de la phase adsorbé (kg/kg)

C = concentration dans la phase liquide (kg/m^3)

Ce modèle, couplé au modèle d'advection-dispersion, permet dans une certaine mesure de simuler les courbes de concentrations asymétriques. Cependant la détermination de k_1 et k_2 est difficile.

On peut également, comme Cameron et Klute (1977) l'ont fait, utiliser simultanément le modèle d'équilibre et le modèle cinétique du premier ordre pour obtenir le modèle d'adsorption-désorption suivant:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = k_1 \frac{n}{\sigma} C - k_2 S + K_D \frac{n}{\sigma} \frac{\partial C}{\partial t}$$

où σ = densité (kg/m^3)

Compte tenu de l'état actuel des connaissances et des problèmes rencontrés dans l'utilisation pratique des modèles, il est préférable de se limiter aux modèles les plus simples possibles, en ce qui concerne les modèles d'adsorption-désorption. Cette constatation est d'autant plus vraie que le coefficient de partition K_D du modèle d'équilibre instantané et réversible est facilement estimable, alors que les coefficients des modèles cinétiques ne peuvent être obtenus que par le calage du modèle aux résultats expérimentaux.

En l'absence de mesures en laboratoire pour déterminer la valeur de K_D , il est possible d'évaluer celui-ci indirectement pour les contaminants peu solubles ou hydrophobes et qui ont donc tendance à s'adsorber (K_D élevé). Il a été observé que ces contaminants hydrophobes sont principalement adsorbés sur la matière organique et que par conséquent, leur K_D est directement proportionnel à la fraction de carbone organique f_{oc} contenue dans le sol (Karickhoff 1979).

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

où K_{oc} = coefficient de partition eau-carbone organique (m^3/kg)

f_{oc} = fraction de carbone organique dans le sol (adimensionnel)

K_D = coefficient de partition sol-eau (m^3/kg)

D'autre part, Karickhoff (1979) ont évalué le K_{oc} de plusieurs composés et ont trouvé une très forte corrélation entre le coefficient de partition eau-matière organique et le coefficient de partition eau-octanol K_{ow} .

$$K_{oc} = 0,63 \cdot K_{ow}$$

Cette relation est très utile car la valeur de K_{ow} est souvent disponible dans la littérature pour la plupart des composés ou peut être mesurée rapidement en laboratoire. Cette relation n'est toutefois valable que si la concentration du contaminant n'excède pas la demi de sa solubilité et si la fraction de matière organique excède 0.1% (McCarthy et al., 1981).

Enfin, il est important de noter que l'utilisation du modèle d'équilibre instantané et réversible requiert tout de même un minimum de connaissances sur la nature du sol. En effet, il faut connaître, à l'aide de mesures sur le terrain, la fraction de matière organique f_{oc} pour évaluer le K_D .

Dans la zone vadose, il est possible de calculer un facteur de retard à partir du K_D et de prédire la vitesse de déplacement du contaminant. Pour ce faire, il faut toutefois connaître la vitesse d'infiltration de l'eau.

A1.1.4 La dégradation

Le terme dégradation englobe un ensemble de processus qui ont comme résultat la disparition irréversible d'une certaine concentration de contaminant. La dégradation inclue principalement: la volatilisation, l'hydrolyse, la photolyse et la biodégradation.

La diversité et la complexité des mécanismes de dégradation rendent impossible le développement d'un modèle conceptuel précis et détaillé. Il faut donc se contenter de modèles empiriques généraux ou de modèles conceptuels partiels ne s'appliquant qu'à modéliser grossièrement un seul des mécanismes de dégradation.

Comme dans le cas de l'adsorption, ces modèles sont utilisés conjointement avec l'équation d'advection-dispersion par l'ajout d'un terme de perte/gain permettant de respecter le bilan de masse.

Le modèle de dégradation le plus simple consiste à utiliser un coefficient de dégradation dans une équation cinétique du premier ordre:

$$q = k_b C$$

où q = terme de perte/gain ($\text{kg/m}^3 / \text{sec}$)

k_b = constante de dégradation (sec^{-1})

C = concentration du contaminant (kg/m^3)

Les modèles plus complexes de dégradation sont surtout des modèles de bio-dégradation. Ils utilisent l'équation de Monod qui décrit la croissance d'une population bactérienne utilisant un substrat.

Il reste beaucoup de travail à faire dans le domaine de la modélisation des processus de dégradation des contaminants, et il faut se

contenter actuellement des modèles simples comme le coefficient de dégradation considéré à partir d'une cinétique de réaction d'ordre 1.

Le modèle PRZM tient compte de la dégradation des contaminants en incluant un coefficient de dégradation propre à ce contaminant (voir chapitre 4).

A.2 La résolution des systèmes

Les modèles mathématiques précédemment décrits sont de peu d'utilité pratique dans leur forme différentielle. Cependant, la mécanique des milieux continus nous donne les outils nécessaires à la résolution de ces systèmes d'équations différentielles appliquées à des domaines définis par des propriétés spatiales et des conditions limites. Il s'agit donc de choisir les processus, leurs représentations mathématiques, la géométrie du domaine, ses propriétés et les conditions limites.

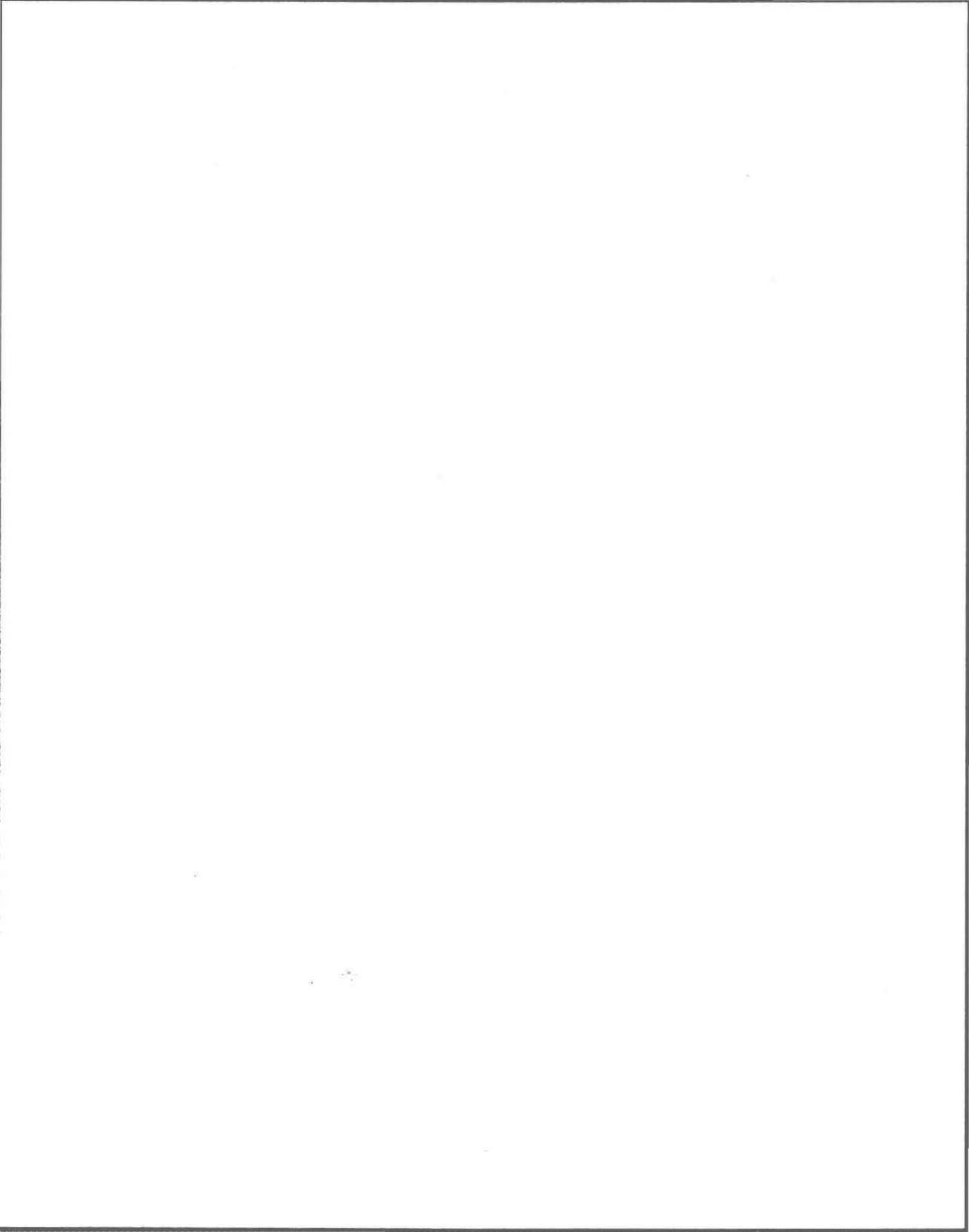
Ces modèles doivent alors être résolus mathématiquement afin d'obtenir la distribution des concentrations dans le domaine étudié. Une fois choisis, les processus et leur représentation mathématique, le modélisateur doit déterminer le domaine d'application, c'est-à-dire qu'il doit fixer un cadre de référence borné où s'appliquera le système d'équations différentielles du modèle. La portion d'aquifère modélisée est donc représentée par un volume continu imaginaire à l'intérieur duquel les concentrations, les vitesses et autres variables d'état sont gouvernées par le système d'équations

différentielles. La résolution d'un tel système requiert la connaissance des conditions limites et utilise les techniques de l'analyse mathématique (calcul différentiel et intégral).

La résolution de ce type de problème peut être très complexe, voire même impossible. Cependant, par l'emploi de représentations géométriques simplifiées et de conditions limites également simplifiées, la complexité du problème peut être diminuée et des solutions approximatives sont alors possibles.

La première façon de simplifier le problème consiste à réduire le nombre de dimensions en utilisant les symétries. Ainsi, certains domaines souterrains peuvent être représentés par des domaines bidimensionnels ou unidimensionnels si on néglige les variations dans les autres directions.

On peut également simplifier le problème en se restreignant à l'utilisation de limites rectilignes régulières où les conditions sont des états constants ou des flux normaux constants.



ANNEXE 2

LE MODÈLE "PESTICIDE ROOT ZONE MODEL"

(Tiré et traduit de Carsel et al., 1984a)

ANNEXE 2

A.2 LE MODÈLE "PESTICIDE ROOT ZONE MODEL"

A2.1 Théorie

Le modèle PRZM est issu de la représentation conceptuelle d'un profil de sol divisé en compartiments, tel qu'illustré à la figure A1.1. En se référant à cette figure, il est possible d'écrire les équations de conservation de masse pour la colonne de sol représentée.

Pour l'horizon de surface du sol, on peut écrire les équations suivantes:

$$\frac{A \Delta x \partial(C_w \theta)}{\partial t} = -J_D - J_V - J_{DW} - J_U - J_{QR} - J_{ADS} + J_{DES} + J_{APP} + J_{FOF} \quad (A2-1)$$

et

$$\frac{A \Delta x \partial(C_s \rho_s)}{\partial t} = -J_{DS} - J_{ER} - J_{DES} + J_{ADS} \quad (A2-2)$$

- où A = surface de la section de la colonne de sol (longueur²)
 Δx = épaisseur, dans le sens de la profondeur, du compartiment de sol (longueur)
 C_w = concentration de contaminant dissous (Masse/longueur³)
 C_s = concentration de contaminant sorbé au sol (Masse cont./Masse sol)

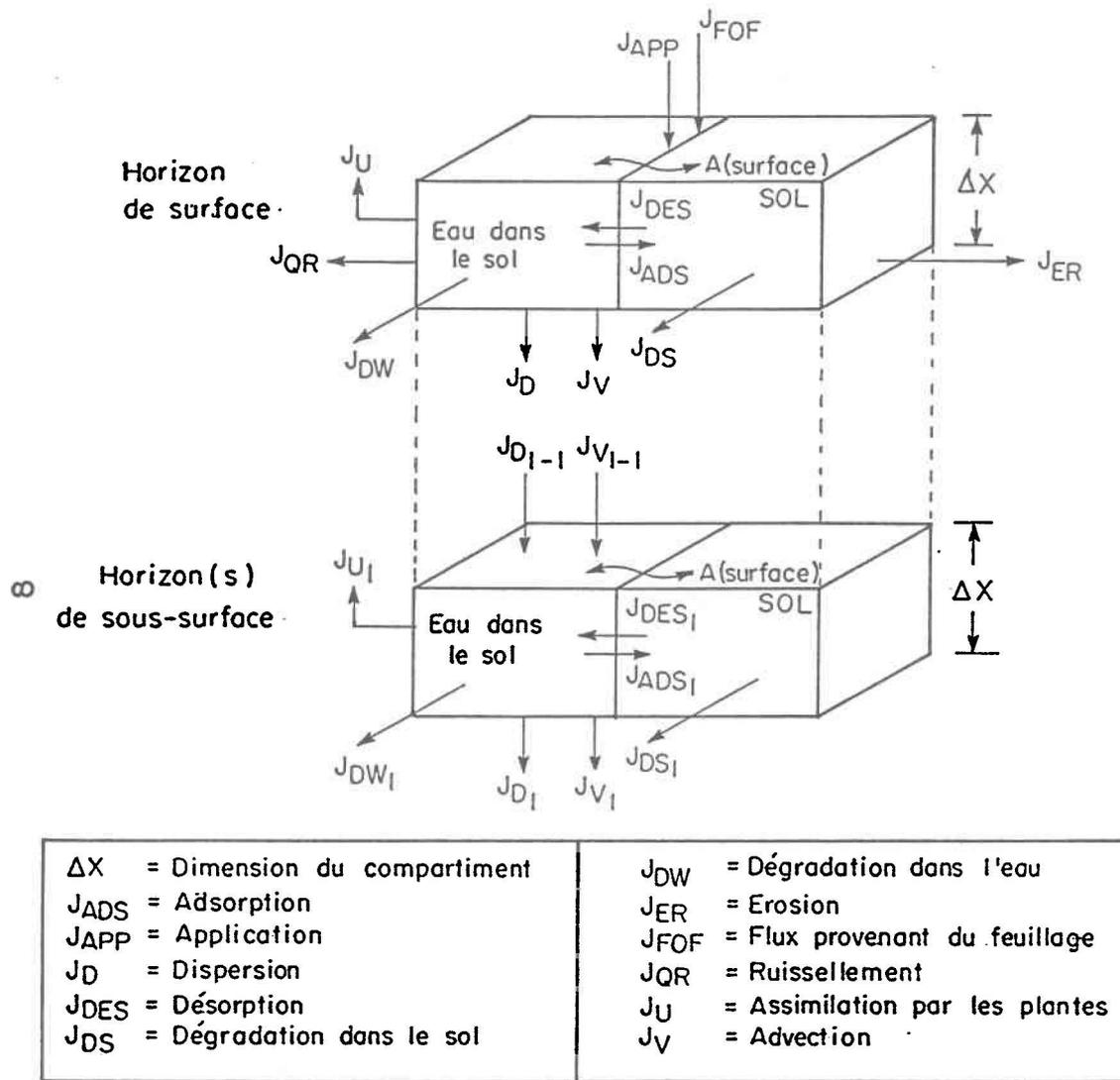


Figure A2.1: Modèle compartimentaire du transport des pesticides dans le sol.

- θ = contenu, en volume, d'eau dans le sol (longueur³/longueur³)
- ρ_s = densité du sol (masse/longueur³)
- t = temps (temps)
- J_D = taux de variation de la masse de contaminant par dispersion
(Masse/temps)
- J_V = taux de variation de la masse de contaminant par advection
(Masse/temps)
- J_U = taux de variation de la masse de contaminant dû à
l'assimilation de la phase dissoute, par les plantes
(Masse/temps)
- J_{QR} = taux de variation de la masse de contaminant par enlèvement
par le ruissellement (Masse/temps)
- J_{APP} = taux de variation de la masse de contaminant par épandage de
celui-ci (Masse/temps)
- J_{FOF} = taux de variation de la masse de contaminant dû au délavage
des plantes (Masse/temps)
- J_{DS} = taux de variation de la masse de contaminant par
transformation de la phase sorbée sur le sol (Masse/temps)
- J_{DW} = taux de variation de la masse de contaminant par
transformation de la phase dissoute (Masse/temps)
- J_{ER} = taux de variation de la masse de contaminant par érosion
(Masse/temps)
- J_{ADS} = taux de variation de la masse de contaminant par adsorption
(Masse/temps)
- J_{DES} = taux de variation de la masse de contaminant par desorption
(Masse/temps)

L'équation A2-1 représente le taux de variation de la masse de contaminant sous forme dissoute, alors que l'équation A2-2 représente le taux de variation de la masse de contaminant adsorbé au sol.

On remarque que si l'on pose l'hypothèse d'un équilibre instantané du phénomène de l'asorption-désorption, on aura alors:

$$J_{ADS} = J_{DES}$$

En ce qui concerne l'horizon du sous-sol, les équations de conservation de la masse sont semblables aux équations A2-1 et A2-2 sauf que les termes J_{QR} , J_{FOF} et J_{ER} ne sont pas considérés. De plus le terme J_{APP} n'est considéré dans la couche de sous-sol que dans les cas où le contaminant est incorporé dans le sol et non seulement à la surface.

Définissons maintenant de façon plus explicite chacun des termes des équations A2-1 et A2-2.

- a) le terme advectif, J_V , décrit le mouvement des contaminants dans l'écoulement global et peut s'écrire sous la forme:

$$J_V = \frac{A \Delta x \partial(C_w \theta v)}{\partial x}$$

où v = vitesse d'écoulement de l'eau dans le sol (cm/jour)

x = dimension de profondeur dans le sol (cm)

b) la dispersivité et la diffusion sont combinées et décrites à l'aide de la loi de Fick:

$$J_D = - \frac{A \Delta x D \partial^2 (C_w \theta)}{\partial x^2}$$

où D = coefficient de dispersivité-diffusion, posé comme étant constant (cm²/jour)

c) la dégradation d'un contaminant organique dans ou sur le sol peut être causée par des processus tels: l'hydrolyse, la photolyse ou la biodégradation. Si l'on suppose que ces processus suivent tous une cinétique du premier ordre, on peut les combiner en un seul coefficient de dégradation. De plus si l'on pose comme hypothèse que le taux de dégradation dans la phase dissoute est le même que dans la phase adsorbée au sol, on peut alors écrire:

$$J_{DW} = K_s C_w \theta A \Delta x$$

$$J_{DS} = K_s C_s \rho_s A \Delta x$$

où K_s = constante de dégradation du premier ordre (jour⁻¹)

- d) l'assimilation des contaminants organiques par les plantes est modélisée en posant comme hypothèse que le taux d'assimilation est directement proportionnel au taux de transpiration de la plante. Si le contaminant est transporté de façon passive par l'eau de transpiration, on obtient alors:

$$J_U = f C_w \Theta \epsilon A \Delta x$$

- où f = fraction du volume total en eau de l'horizon de sol considéré, utilisé pour l'évapotranspiration (sans dimension)
 ϵ = facteur d'efficacité d'assimilation (sans dimension)

- e) la perte de contaminant due à l'érosion est décrite de la façon suivante:

$$J_{ER} = \frac{a X_e r_{om} K_d C_w A}{A_w}$$

- où a = facteur de conversion des unités
 X_e = perte de sédiments par érosion (tonne/jour)
 r_{om} = proportion d'"enrichissement" pour la matière organique (g/g)
 K_d = coefficient d'adsorption (cm³/g)
 A_w = superficie de l'aquifère (cm²)

f) la perte de contaminant due au ruissellement est exprimée par:

$$J_{QR} = \frac{Q}{A_w} C_w A$$

où Q = épaisseur d'eau de ruissellement par jour (cm/jour)

g) les contaminants tels les pesticides peuvent être appliqués directement sur le sol ou sur le feuillage des plantes selon le type de traitement désiré. Il faut donc répartir cette application entre la surface du sol et le couvert végétal. Le modèle PRZM propose deux options pour effectuer cette répartition. La première consiste simplement à répartir l'application de pesticides selon la proportion de sol couverte par le feuillage des plantes par rapport à celle qui ne l'est pas. La deuxième option définit une fraction "F" de l'application de pesticide, qui est interceptée par les plantes, soit:

$$F = 1 - \exp(-uW_o)$$

où u = paramètre de filtration (m^2/kg)

W_o = densité de surface des plantes, sur une base de poids sec (kg/m^2)

- h) les contaminants qui sont appliqués sur le couvert végétal peuvent par la suite être transportés sur la surface du sol, par l'effet de délavage dû aux précipitations.

Le terme J_{FOF} peut alors être défini par l'expression suivante:

$$J_{\text{FOF}} = E P_r M A$$

où E = coefficient d'extraction (cm^{-1})

P_r = épaisseur de précipitation par jour (cm/jour)

M = masse de contaminants à la surface des plantes, par surface de section A (g/cm^2)

- i) la masse de contaminants organiques présente sur le feuillage des plantes peut également être sujette à la dégradation, dont le taux est donné par l'expression suivante:

$$A \frac{dM}{dt} = - K_f M A - J_{\text{FOF}} + A_F b$$

où K_f = constante de dégradation du premier ordre, pour le feuillage (jour^{-1})

A_F = taux d'application du contaminant organique sur les plantes ($\text{g}/\text{hectare}$)

b = facteur de conversion des unités

j) l'adsorption et la désorption sont posées comme étant linéaires et atteignant des conditions d'équilibre réversible instantané dans la matrice sol-eau. Cette hypothèse permet de relier la concentration de contaminant dissous à celle dans la phase adsorbée, selon l'expression suivante:

$$C_s = K_d C_w$$

Cette dernière expression nous permet de combiner les équations A2-1 et A2-2 en une seule équation exprimée en termes de concentrations de contaminants dissous:

$$\frac{\partial [C_w (\theta + K_d \rho_s)]}{\partial t} = D \frac{\partial^2 (C_w \theta)}{\partial x^2} - \frac{\partial (C_w \theta v)}{\partial x} \quad (A2-3)$$

$$- C_w \left[K_s (\theta + K_d \rho_s) + f\theta\epsilon + \frac{Q}{\Delta x} + \frac{a X_e r_{om} K_d}{A_w \Delta x} \right]$$

$$+ \frac{J_{APP}}{\Delta x} \left[\frac{1-F}{A} + F E P_r M \right]$$

Cette équation est résolue dans le modèle PRZM avec $f\theta\epsilon = 0$ dans la couche de surface, avec $\frac{Q}{\Delta x} = 0$, $\frac{a X_e r_{om} K_d}{A_w \Delta x} = 0$, $J_{APP} = 0$ (sauf dans le cas de contaminants incorporés dans le sol) et $E_{P_r} M = 0$ dans la couche de sol comprenant les racines des plantes et avec, en plus de ceux-ci, $f\theta\epsilon = 0$ pour la couche de sol située sous la zone racinaire des plantes.

L'équation A2-3 est une variante des modèles d'advection-dispersion les plus souvent utilisés comme base de modélisation de la qualité des eaux souterraines. Il est toutefois nécessaire de développer des équations additionnelles afin d'évaluer les variables v et θ qui ne sont généralement pas connues ou mesurées sur le terrain. Pour ce faire on peut combiner l'équation de continuité à la loi de Darcy pour obtenir:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] \quad (A2-4)$$

où K = conductivité hydraulique

ϕ = potentiel hydraulique

$$\text{et } v = -K \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (A2-5)$$

Donc en général, les équations A2-3, A2-4 et A2-5 doivent être résolues de façon couplée. Toutefois, lorsque les concentrations en solution sont très faibles et n'influencent pas l'écoulement, alors les équations de transport et d'écoulement peuvent être découplées.

En conclusion, la prise en considération dans les équations A2-3, A2-4 et A2-5 de tous ces processus (infiltration à la surface du sol, évapotranspiration de l'humidité du sol, assimilation des contaminants par les plantes, taux et temps variables d'application de contaminants organiques et pertes dues au ruissellement et à l'érosion) rend complexe la résolution du modèle PRZM pour plusieurs raisons. Premièrement, les équations décrivent le transport vertical à un point donné alors que les conditions des sols peuvent être différentes d'un point à un autre du terrain. Il faut donc supposer que les conditions déterminées en un point du lieu sont représentatives de l'ensemble du lieu. En d'autres mots, le problème est d'avoir suffisamment de données sur les caractéristiques physiques du système à modéliser. Deuxièmement, les caractéristiques verticales des sols sont aussi très variables et la détermination de leur variabilité peut encourir des dépenses majeures. De plus, la charge et la conductivité hydraulique, ainsi que leurs relations avec le contenu en humidité de certains types de sols, ne peuvent possiblement pas être représentées par des fonctions simples telles les équations A2-4 et A2-5.

Donc, la précision des résultats obtenus, suite à la résolution mathématique des équations A2-3, A2-4 et A2-5 par des méthodes numériques, dépend de l'exactitude et de la précision des valeurs données aux paramètres inclus dans ces équations. Les résultats obtenus nous renseignent sur les processus importants à considérer dans ce type de risque de contamination, et nous permettent d'en avoir une meilleure compréhension.

A.2 Application de la théorie au modèle PRZM

Avant de développer des solutions aux équations dérivées à la section A.1, il est important de revoir plus en détail les plus importants principes impliqués dans la lixiviation de contaminants organiques appliqués à la surface du sol. Le processus reliant les précipitations à l'infiltration et au ruissellement doit alors être décrit en détail. Le mouvement de l'eau dans le sol est fonction de l'humidité qu'on y retrouve. Les diverses cultures considérées ont chacune leurs propres caractéristiques de croissance, de taux de transpiration, etc... Les procédés de transformation des contaminants organiques peuvent varier selon la profondeur et l'humidité du sol. De plus, l'objectif visé par l'utilisation du modèle est de développer des solutions les plus exactes possibles à partir de données généralement accessibles.

L'équation A2-4 peut être résolue de façon numérique si le contenu en humidité du sol (θ) et la vitesse réelle dans les pores (v) sont connus pour chaque intervalle de temps (t). De plus, si l'on estime des valeurs moyennes de θ et de v pour plusieurs secteurs du lieu d'application, la solution du modèle n'est alors plus restreinte à un point de ce lieu. L'exactitude de cette approche est toutefois intimement liée à la précision de la fonction de distribution décrivant la variabilité spatiale de θ et v .

Les composantes hydrologiques de l'équation A2-3 peuvent être découplées, résolues séparément et ensuite être utilisées afin de solutionner cette équation à divers intervalles de temps. C'est cette approche qui a été

choisie dans le modèle PRZM. Trois composantes du modèle doivent donc être résolues: le bilan hydrique de la colonne de sol, l'érosion à la surface du sol et le transport physico-chimique dans le sol.

A2.2.1 Équation du bilan hydrique

Cette équation est partagée entre trois horizons de sol spécifiques: la zone de surface du sol, la zone racinaire des plantes et la zone sous-jacente non-saturée du sol. Les équations sont alors les suivantes:

a) zone de surface: $(SW)_1^{t+1} = (SW)_1^t + P + SM - I_1 - Q - E_1$

b) zone racinaire: $(SW)_i^{t+1} = (SW)_i^t + I_{i-1} - U_i - I_i$

c) zone sous-jacente: $(SW)_i^{t+1} = (SW)_i^t + I_{i-1} - I_i$

où $(SW)_i^t$ = contenu en eau du sol, dans la strate "i" de la zone concernée, au temps "t", (cm)

P = précipitation sous forme de pluie, moins la portion interceptée par le couvert végétal, (cm/jour)

SM = fonte de neige (cm/jour)

Q = ruissellement (cm/jour)

E_i = évaporation (cm/jour)

U_i = transpiration (cm/jour)

I_i = percolation sortant de la zone i (cm/jour)

Afin d'évaluer le contenu en humidité de chaque horizon de sol mentionné plus haut, il faut calculer le ruissellement, la fonte de neige, l'évaporation, la transpiration et la percolation.

L'évapotranspiration est estimée à partir du potentiel d'énergie disponible pour ce processus. Ce potentiel d'énergie est calculé à l'aide des données de bac d'évaporation et de température de l'air.

La précipitation est une donnée d'entrée du modèle et est répartie en neige et en pluie selon que la température est inférieure ou supérieure à 0°C. Les précipitations sont d'abord en partie interceptées par le couvert végétal et ensuite lorsqu'elles ont comblé la capacité d'emmagasinement de la couche de surface du sol, le reste est disponible pour le ruissellement.

Le calcul du ruissellement est un élément-clé de l'équation du bilan hydrique du modèle PRZM. Ce calcul permet de répartir les précipitations entre le ruissellement de surface et l'eau d'infiltration disponible pour la lixiviation. Il est basé sur une modification de l'approche par "curve number" du "USDA Soil Conservation Service". Cette méthode a été retenue parce qu'elle a démontré sa fiabilité depuis plusieurs années, parce que les données d'entrée sont généralement disponibles (aux États-Unis, au moins) et aussi parce qu'elle évalue le ruissellement en fonction du type de sol, de son utilisation et du mode de gestion de l'exploitation agricole.

Le modèle PRZM a toutefois modifié cette méthode pour y inclure la fonte des neiges. Celle-ci est évaluée pour les jours où il y a un couvert nival et où la température de l'air est au-dessus de 0°C.

$$SM = C_M T$$

où C_M = facteur de fonte de neige (cm/°C.jour)

T = température moyenne de la journée (°C)

Lorsque la température moyenne de la journée est inférieure à 0°C, les précipitations de cette journée s'accumulent sur le couvert nival.

La demande quotidienne en évapotranspiration est divisée entre l'évaporation à partir du couvert végétal, l'évaporation à partir du sol et la transpiration des plantes. La demande totale est d'abord estimée puis est ensuite soutirée séquentiellement du couvert végétal puis de chaque couche de sol jusqu'à ce que le point de flétrissement soit atteint ou que la demande totale ait été satisfaite. L'évaporation est supposée effective jusqu'à une profondeur déterminée par l'utilisateur du modèle. Le reste de la demande est obtenu par la transpiration des plantes à partir de cette profondeur déterminée, jusqu'à la base de la couche de sol comprenant la zone racinaire.

L'évapotranspiration est également limitée par la disponibilité en humidité du sol. Le potentiel d'évapotranspiration peut ne pas être satisfait si le contenu en eau disponible du sol n'est pas suffisant pour combler la demande. Le modèle PRZM modifie alors le potentiel de la façon suivante:

$$ET_p = ET_p \quad \text{si} \quad SW \geq 0.6 FC$$

$$ET_p = SMFAC * ET_p \quad \text{si} \quad WP \leq SW \leq 0.6 FC$$

$$ET_p = 0 \quad \text{si} \quad SW \leq WP$$

où FC = capacité au champ du sol

WP = point de flétrissement du sol

SMFAC = facteur d'humidité du sol

Le facteur d'humidité du sol est fixé de façon à réduire linéairement l'évapotranspiration afin de respecter les limites des équations mentionnées plus haut.

Lorsque les données de bac d'évaporation sont disponibles, l'évapotranspiration peut alors être calculée de la façon suivante:

$$ET_p = C_p * PE$$

où PE = évaporation à partir du bac (cm/jour)

C_p = facteur du bac ou "pan factor" (adimensionnel)

En l'absence de données de bac d'évaporation, l'évapotranspiration est estimée par:

$$ET_p = 14\ 000 L_d^2 (SVD)$$

où L_d = heures d'ensoleillement possible par jour (heures/jour)

SVD = densité de vapeur à saturation, à la température moyenne de l'air (g/cm^3)

et

$$SVD = 0,622 (SVP)/(R_g * T_{abs})$$

où SVP = pression de vapeur d'eau à saturation; à la température absolue de l'air (mbar)

R_g = constante des gaz

T_{abs} = température absolue moyenne de l'air ($^{\circ}K$)

Le dernier terme à définir dans l'équation du bilan hydrique est la percolation. Le modèle PRZM comporte deux options pour évaluer celle-ci.

Option 1:

Dans cette option, la percolation est calculée en fonction de la capacité au champ et du point de flétrissement.

Ces deux concepts servent à définir deux états de référence dans chaque couche de sol, pour prédire s'il y aura percolation ou non. Lorsque le taux de saturation est plus grand que la capacité au champ, il y a alors percolation et l'eau en excès est évacuée dans la couche inférieure de sol. Le modèle suppose que tout le profil de sol se draine en une journée. La limite

inférieure de contenu en eau du sol correspond au point de flétrissement qui peut être atteint s'il y a peu ou pas de précipitations et une forte évapotranspiration.

Cette méthode de calcul de la percolation est plus exacte pour les sols à perméabilité élevée (sols sablonneux) que pour les sols à faible perméabilité (sols argileux).

Option 2:

Cette option s'applique aux sols argileux ou à faible perméabilité. Pour ce type de sols, le contenu en eau peut excéder la capacité au champ pour une longue période de temps et la percolation se fera sur une période plus longue qu'une journée. Afin de palier à cette contrainte, un ajustement doit être apporté au contenu en eau de chaque couche de sol, à la fin de chaque intervalle de temps "t":

$$\theta_i^{t+1} = (\theta_i^{t*} - \theta_{fci}) \exp(-\alpha \Delta t) + \theta_{fci}$$

- où θ = contenu en eau de la couche de sol (cm^3/cm^3)
- θ_{fc} = contenu en eau à la capacité au champ (cm^3/cm^3)
- α = paramètre de taux de drainage (jour^{-1})
- t^* = intervalle de temps considéré (jour)

Dans cette option, lorsqu'une couche de sol a un contenu en eau plus grand que le taux de saturation, le modèle redistribue alors l'excès d'eau aux couches sus-jacentes.

A2.2.2 Équation de l'érosion

Cette équation est nécessaire afin d'évaluer la quantité de contaminants adsorbée sur les particules de sol, perdue ou enlevée par l'érosion. Le modèle PRZM utilise un intervalle de temps journalier et l'équation universelle des sols, modifiée ("MUSLE"), pour évaluer l'érosion:

$$X_e = a (v_r q_p)^{0.56} KLSCP$$

- où v_r = volume de ruissellement par jour (m^3)
 q_p = ruissellement maximal de l'évènement de précipitation (m^3/sec)
 K = facteur d'érosion du sol
 LS = facteur de pente et longueur de terrain
 C = facteur de recouvrement du sol
 P = facteur de pratique de conservation
 a = facteur de conversion des unités

La majorité des termes de cette équation sont obtenus par d'autres calculs dans le modèle ou dans la littérature.

Enfin, le dernier terme à définir dans l'équation de transport est la proportion d'enrichissement due à la matière organique (r_{om}). L'érosion est un

processus sélectif qui, lors d'un évènement de ruissellement, entrainera davantage de petites particules telles la matière organique, que des particules grossières. On parle d'enrichissement en proportion parce que les contaminants organiques tels les pesticides sont davantage adsorbés par la matière organique que par d'autres particules. Cette proportion d'enrichissement est calculée par l'équation empirique suivante:

$$\ln (r_{om}) = 2 + 0.2 \ln (X_e/A_w)$$

A2.2.3 Équation du transport chimique

L'équation différentielle partielle d'ordre deuxième, décrivant le transport global des contaminants (équation A2-3), doit être résolue pour des conditions limites appropriées. Pour ce faire, les calculs de contenu en eau du sol, vitesse d'écoulement dans les pores, érosion et ruissellement sont considérés individuellement et résolus séparément. Les valeurs résultantes ainsi obtenues sont considérées comme constantes pour l'intervalle de temps spécifique auquel elles ont été calculées. Ces valeurs sont ensuite utilisées en tant que coefficients dans le calcul par différence finie de l'équation du transport chimique (équation A2-3).

Les conditions limites de la solution numérique sont:

$$C_{w_{i-1}} \theta_{i-1} = 0 \quad \text{pour } i=1$$

et

$$\frac{C_{w_{i+1}} \theta_{i+1} - C_{w_i} \theta_i}{\Delta x} = 0 \quad \text{pour } i=N$$

où N = nombre total de compartiments de sol.

Ces conditions correspondent à une concentration nulle de contaminants à la surface du sol et à un gradient de concentration de zéro à la surface inférieure du profil de sol.

A2.3 Structure du modèle PRZM

La structure du modèle PRZM est représentée par un diagramme d'énoncés en langage Fortran, à la figure A2.2.

Les principales fonctions traitées par le modèle sont les suivantes:

- a) entrée de données;
- b) calculs du contenu en eau du sol, à partir de ses caractéristiques granulométriques;
- c) calcul du coefficient de partition K_d , à partir de modèles de solubilité dans l'eau;
- d) passage des données d'entrée aux résultats ou "sorties" du modèle, par filières;
- e) détermination de la croissance de la partie racinaire des plantes;
- f) entrée des données météorologiques;

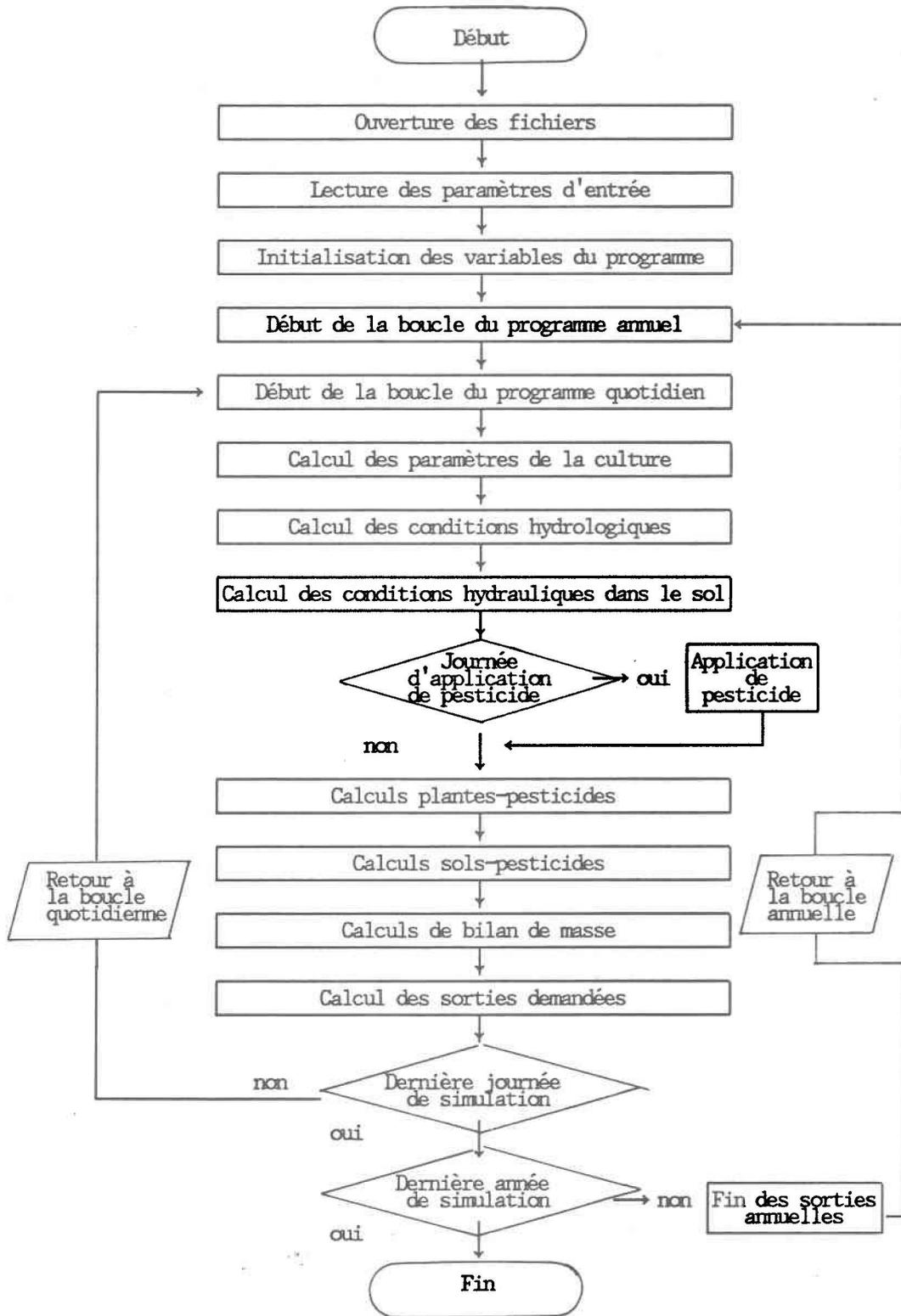


Figure A2.2: Schéma de la structure du modèle PRZM.

- g) calcul de l'interception des précipitations, par le couvert végétal;
- h) calcul du partage des précipitations entre la neige et la pluie;
- i) calcul de l'évapotranspiration;
- j) calcul de la fonte de neige;
- k) calcul des facteurs d'assimilation des contaminants par les plantes;
- l) détermination des "curve numbers" à partir des périodes de culture et de l'humidité du sol;
- m) calcul du ruissellement et de l'infiltration;
- n) calcul des caractéristiques hydrauliques du sol;
- o) calcul du transport des contaminants dans le sol;
- p) calcul des taux d'application de contaminants sur le sol;
- q) calcul de la répartition des contaminants dans l'eau et dans le sol;
- r) calcul des flux et de l'emmagasinement des contaminants dans le sol et dans l'eau;
- s) vérification des données d'entrée;
- t) calcul de la dégradation et du lessivage des contaminants appliqués sur le couvert végétal;
- u) calcul de l'érosion et de la perte de contaminants due à l'érosion.

Le modèle PRZM est un modèle modulaire qui contient plusieurs sous-routines calculant ces fonctions.

ANNEXE 3

EXEMPLE DE FICHER DES DONNÉES D'ENTRÉE DU MODÈLE PRZM

ANNEXE 3

Les données d'entrée incluses au fichier suivant, ont été utilisées par le modèle PRZM, pour la simulation d'un épandage de phénanthrène sur un sol contenant 2,5% de matière organique (voir la section 5.3.4):

```
*** epandage,phenan,Montreal ***
010560          311262
***parametres hydrologiques ****
0.800   0.500   1   10.0           1           1
8.900   10.200  11.70 13.30       14.70       15.40
15.00   14.30   12.30 10.70       9.30        8.50
0
1
1       0.0     10.0   1.0           1  91   91   91
15
170660  180660  190660   1
150661  160661  170661   1
160662  170662  180662   1
150663  160663  170663   1
150664  160664  170664   1
150665  160665  170665   1
150666  160666  170666   1
150667  160667  170667   1
150668  160668  170668   1
150669  160669  170669   1
150670  160670  170670   1
150671  160671  170671   1
150672  160672  170672   1
150673  160673  170673   1
150674  160674  170674   1
***** parametres du phenan *****
15
190560  1500.00   0.0
110561  1500.00   0.0
220562  1500.00   0.0
160563  1500.00   0.0
120564  1500.00   0.0
200565  1500.00   0.0
250566  1500.00   0.0
270567  1500.00   0.0
260568  1500.00   0.0
220569  1500.00   0.0
190570  1500.00   0.0
230571  1500.00   0.0
270572  1500.00   0.0
140573  1500.00   0.0
200574  1500.00   0.0
***** parametres du sol *****
150.0     0.0     15     0           1           0     0
1
1       150.0   1.35   0.0   0.0061   0.117   0.0
       37.0   19.0   2.5   445.0
0       0
ATR     YEAR     5     EST     MNTH           1 CONC     MNTH  1
```