

MODÉLISATION STOCHASTIQUE D'ÉCOULEMENT DES EAUX SOUTERRAINES ET DU TRANSPORT DE CONTAMINANTS DANS LE CADRE DE LA GESTION DES RISQUES ENVIRONNEMENTAUX DES LAGUNES DE MERCIER

Par

Louis-Charles Boutin

Mémoire présenté pour l'obtention du grade de

Maître Sciences (M.Sc.) en sciences de la Terre

Jury d'évaluation

Président du jury

Bernard Giroux
Institut national de la recherche
scientifique

Examineur externe

Julien Walter
Centre d'étude sur les ressources
minérales, Université du Québec à
Chicoutimi

Directeur de recherche

Erwan Gloaguen
Institut national de la recherche
scientifique

Codirecteur de recherche

Richard Martel
Institut national de la recherche
scientifique

AVANT-PROPOS

La révolution industrielle est une période charnière de notre civilisation moderne, car elle a transformé drastiquement la société par l'arrivée de moyens de production, de transport, et de l'organisation de notre société. Au cœur de la révolution industrielle, la maîtrise de nouvelles sources d'énergie tel que l'électricité et le pétrole, a permis d'améliorer significativement les conditions de vies de nos sociétés. Le moteur à combustion est inventé au cours du 19^{ième} siècle, et en 1908, *Ford Motor Company* démocratise la voiture avec le *Model T* ; l'automobile est commercialisée. En parallèle, c'est en 1944 que La Commission hydroélectrique du Québec est adoptée avec un mandat de fournir l'électricité aux municipalités du Québec ; Hydro-Québec est né.

Bien que la révolution industrielle ait permis d'améliorer significativement les conditions de vies, une compréhension globale de l'effet de l'industrialisation sur l'environnement n'est apparue que plusieurs années après la commercialisation de certains produits. Les produits tels que les huiles usées du moteur à combustion et les BPC en sont de bons exemples. Ce n'est qu'à la fin des années 1950 que l'on voit l'émergence d'une conscientisation collective des effets néfastes que peuvent avoir certains produits chimiques sur l'environnement. Au Québec, c'est en 1970 qu'un ministre délégué à l'environnement est nommé pour la première fois.

Au cours de la période de 1950 à 1990, les transformateurs et les condensateurs qui supportent le réseau Québécois d'électricité utilisent des biphenyles polychlorés (BPC) comme isolant (Hydro-Québec TransÉnergie, 2013), produit commercialisé vers la fin des années 1920. L'utilisation de BPC est devenue illégale au Canada seulement en 1977 en raison de ses effets néfastes sur la santé (Murray, 1994).

Pour ce qui est du moteur à combustion, ce n'est qu'en 1988, qu'un groupe de travail sur le recyclage des huiles usées voit le jour, à la demande du Conseil canadien des ministres de

l'Environnement (CCME). Une politique nationale sur la récupération des huiles usées est publiée pour la première fois en 1989 (CCME, 1989a, 1989b).

L'arrivée de l'internet dans les années 2000, contribue en partie à l'échange mondiale des connaissances reliées à l'environnement. De nos jours, les changements climatiques, le réchauffement planétaire et les nouveaux contaminants persistants sont des sujets d'actualité.

Le but visé par cet avant-propos est d'illustrer qu'avec la révolution industrielle et la transformation drastique de nos moyens de production, de transport, et d'organisation de nos sociétés, des problèmes environnementaux ont émergé tel que la pollution de l'eau, des sols et de l'air. Dans certains cas, comme pour le site des anciennes lagunes de Mercier, les conséquences d'une contamination des sols et eaux souterraines peuvent persister sur plusieurs générations. Bien que les techniques de réhabilitation évoluent constamment, il est primordial de revoir périodiquement comment celles-ci peuvent contribuer à optimiser la gestion des sites. Toutefois, pour certains sites contaminés, aucune technique de réhabilitation permet de restaurer la qualité des sols et des eaux souterraines aux conditions initiales. Dans ces cas, il est tout de même pertinent d'évaluer l'efficacité ou l'inefficacité de l'atténuation naturelle. Avant d'initier ma maîtrise, j'ai travaillé à temps partiel pendant deux années à l'INRS avec Dr. Erwan Gloaguen et Dr. Maxime Claprood et contribué au projet des anciennes lagunes de Mercier à titre d'agent de recherche (Claprood et al., 2023). Au cours de ce projet, la caractérisation de la géologie et de l'hydrogéologie du site a été avancée lors de la campagne de terrain de 2020. En complément aux données historiques, des relevés géophysiques de sismique réflexion, le forage de nouveaux puits d'observation, et des essais de perméabilité hydraulique multi-niveaux ont été réalisés. Par la suite, un modèle numérique régional en trois dimensions (3D) de l'écoulement de l'eau souterraine a été construit et calé aux charges hydrauliques en régimes permanent et transitoire mesurées aux puits d'observation et données sur les forages des puits résidentiels de la BDH (banque de données hydrogéologiques du MELCCFP) présents dans le domaine. La méthode

de lissage d'ensemble itératif (*iterative Ensemble Smoother [IES]*) a été utilisée pour assimiler les charges hydrauliques, ainsi un total de 69 réalisations ont été retenues dans l'ensemble calibré afin d'évaluer de manière probabiliste, divers scénarios de piégeage hydraulique. L'optimisation du piège hydraulique avait pour objectif de supporter la conception de la seconde génération de l'usine de traitement des eaux souterraines (UTES II).

Cette maîtrise se veut une continuation des travaux précédents, c'est-à-dire mieux comprendre l'évolution spatio-temporelle du transport de contaminants dissous dans les aquifères de l'esker et du roc fracturé, afin de quantifier l'effet de différents scénarios prédictifs de réhabilitation (incluant la réhabilitation partielle par traitement thermique) sur la migration des panaches. Le second objectif est de synthétiser et faciliter la communication des résultats de modélisation stochastique aux preneurs de décision quant à la gestion à long-terme du site des anciennes lagunes de Mercier.

RÉSUMÉ

Une modélisation numérique de l'écoulement des eaux souterraines et du transport de contaminants au site des anciennes lagunes de la ville de Mercier a été effectuée. Les concentrations mesurées historiquement en benzène et en 1,2-dichloroéthane dans l'eau souterraine ont été sélectionnées pour le calage de l'évolution spatiale et temporelle des panaches de contaminant en utilisant la méthode itérative de lissage d'ensemble. Différents scénarios prédictifs de gestion environnementale du site ont été simulés afin de comparer quantitativement leurs effets sur divers critères environnementaux, économiques et sociaux. Les résultats des simulations ont été colligés dans un fichier numérique interactif de format *HTML*, dans lequel la pondération des critères de l'analyse décisionnelle multicritère peut être modifiée. Ainsi, l'utilisateur peut mieux comprendre l'influence et la sensibilité des critères de décision.

Mots-clés : Modélisation numérique ; transport de contaminants ; méthode itérative de lissage d'ensemble ; analyse décisionnelle multicritère

ABSTRACT

The numerical modelling of groundwater flow and contaminant transport at the old Mercier lagoons was performed. Historical measured benzene and 1,2-dichloroethane concentrations were retained to calibrate contaminant plumes spatial and temporal extents using iterative ensemble smoother method. Different predictive scenarios of site management were simulated for quantitative comparison of their effects on various environmental, economical, and societal criteria. Results from the scenarios have been compiled in a digital interactive *HTML* format, in which multi-criteria decision analysis criteria weight can be modified. As such, the user can better understand the influence and sensitivity of each decision criterion.

Keywords : Numerical modelling ; contaminant transport ; iterative ensemble smoother ; multi-criteria decision analysis

TABLE DES MATIÈRES

AVANT-PROPOS	III
RÉSUMÉ	VII
ABSTRACT	IX
TABLE DES MATIÈRES	XI
LISTE DES FIGURES	XIII
LISTE DES TABLEAUX	XV
LISTE DES ANNEXES	XVII
LISTE DES PLANCHES	XIX
LISTE DES ABRÉVIATIONS	XXI
1 INTRODUCTION	1
1.1 MISE EN CONTEXTE	1
1.2 SITE DES ANCIENNES LAGUNES DE MERCIER	2
1.2.1 <i>Historique de la contamination</i>	3
1.2.2 <i>Revue de littérature du site</i>	6
1.2.3 <i>Modèle Conceptuel</i>	7
2 PROBLÉMATIQUE	11
3 OBJECTIFS	17
4 MÉTHODOLOGIE	19
4.1 CONTAMINANTS	19
4.1.1 <i>Propriétés physiques</i>	19
4.1.2 <i>Partition</i>	20
4.1.3 <i>Mélange</i>	21
4.2 MODÈLE NUMÉRIQUE D'ÉCOULEMENT DES EAUX SOUTERRAINES ET DU TRANSPORT DES CONTAMINANTS	22
4.2.1 <i>Écoulement</i>	22
4.2.2 <i>Transport</i>	23
4.2.3 <i>Dégradation</i>	25
4.2.4 <i>Adsorption</i>	28
4.2.5 <i>Méthodes d'ensemble et assimilation de données</i>	28

4.3	ANALYSE DECISIONNELLE MULTICRITERE	32
4.4	ÉVALUATION DES SCENARIOS PREDICTIFS (ALTERNATIVES)	35
4.5	CRITERES D'EVALUATION	37
5	RÉSULTATS	39
5.1	COMPOSES DU MELANGE DE CONTAMINANTS	39
5.2	MODELES NUMERIQUES HYDROGEOLOGIQUES	45
5.2.1	<i>Modèle régional d'écoulement</i>	<i>47</i>
5.2.2	<i>Modèle local du transport des contaminants</i>	<i>49</i>
5.2.3	<i>Conditions aux limites - écoulement</i>	<i>51</i>
5.2.4	<i>Conditions aux limites - transport.....</i>	<i>51</i>
5.2.5	<i>Paramètres hydrogéologiques</i>	<i>52</i>
5.2.6	<i>Paramètres du solveur numérique.....</i>	<i>60</i>
5.3	VALIDATION DE L'ÉCOULEMENT DU MODELE LOCAL EN REGIME PERMANENT ET TRANSITOIRE	60
5.4	ASSIMILATION DES DONNEES DE LA QUALITE DES EAUX SOUTERRAINES PAR LA METHODE DE LISSAGE	64
5.4.1	<i>Chronique temporelle de la qualité des eaux souterraines</i>	<i>68</i>
5.4.2	<i>Distribution spatiale des panaches de contaminants.....</i>	<i>70</i>
5.4.3	<i>Paramètres calibrés</i>	<i>72</i>
5.5	BILAN DE MASSE DE L'ÉCOULEMENT ET DU TRANSPORT	74
5.6	SIMULATIONS PREDICTIVES DE TRANSPORT DE CONTAMINANTS	78
5.7	ANALYSE DECISIONNELLE MULTICRITERE	83
5.8	LIMITATIONS ET INCERTITUDES	93
6	CONCLUSION.....	97
7	BIBLIOGRAPHIE	103
8	ANNEXE	109
9	PLANCHES	115

LISTE DES FIGURES

FIGURE 1.1 VUE EN PERSPECTIVE 3D DES UNITES HYDROGEOLOGIQUES DU SITE DES ANCIENNE LAGUNES DE MERCIER (TIREE DE MELCC 2023A).....	3
FIGURE 4.1 SOUS-PRODUITS DE DEGRADATION DU TCE (TRICHLOROETHANE)	26
FIGURE 4.2 SOUS-PRODUITS DE DÉGRADATION DU 1,2-DCA (1,2-DICHLOROÉTHANE)	26
FIGURE 4.3 SCHÉMATIQUE DE LA VITESSE DE DÉGRADATION EN FONCTION DE LA CONCENTRATION D'UN COMPOSÉ POUR LES MÉTHODES GÉNÉRALES DE RÉACTIONS CINÉTIQUES	27
FIGURE 4.4 DISTRIBUTION DES POIDS POUR CHACUNE DES MÉTHODES DE PONDÉRATION.....	35
FIGURE 5.1 ÉVOLUTION DES FRACTIONS DE MASSE PAR SOLUBILISATION DU LIL AU Puits F-9	42
FIGURE 5.2 LIMITES DES MODÈLES NUMÉRIQUES D'ÉCOULEMENT ET DE TRANSPORT UTILISÉS AU SITE DES ANCIENNES LAGUNES DE MERCIER	46
FIGURE 5.3 STATISTIQUES DU VOLUME DES CELLULES UTILISÉS DANS LE MODÈLE NUMÉRIQUE LOCAL DU TRANSPORT DES CONTAMINANTS	50
FIGURE 5.4 DISTRIBUTION DES CONDUCTIVITÉS HYDRAULIQUES CALIBRÉES DU MODÈLE RÉGIONAL POUR LES ZONES HÉTÉROGÈNES	56
FIGURE 5.5 HISTOGRAMME DES RESIDUS DE CHARGE HYDRAULIQUE ET STATISTIQUES	61
FIGURE 5.6 DISTRIBUTION VERTICALE DES RÉSIDUS DE CHARGE HYDRAULIQUE DANS LES DÉPÔTS MEUBLES ET LE ROC FRACTURÉ	62
FIGURE 5.7 BRUIT INCORPORÉ AUX CONCENTRATIONS OBSERVÉES PAR PESTPP EN UTILISANT LE POIDS DES OBSERVATIONS POUR LE Puits P-113	66
FIGURE 5.8 STATISTIQUES DU NOMBRE DE PÉCLET – RÉALISATION BASE – JANVIER 2023	77
FIGURE 5.9 INTERVALLE DE CONFIANCE DE 95% DES NOMBRES DE PÉCLET ET COURANT – RÉALISATION 'BASE'	78
FIGURE 5.10 COMPARAISON ENTRE LES CHARGES HYDRAULIQUES SIMULÉES DU MODÈLE RÉGIONAL POUR LES DIFFÉRENTS SCÉNARIOS DE POMPAGE	79

FIGURE 5.11 ANALYSE DE SENSIBILITÉ DE LA POSITION DANS LE RANG EN FONCTION DES SCÉNARIOS PRÉDICTIFS EXCLUS.....	87
FIGURE 5.12 EFFET SUR LE CLASSEMENT D'UNE DIFFÉRENTE PONDÉRATION ENTRE LES CATÉGORIES DE CRITÈRE.	89
FIGURE 5.13 EFFET DE LA MÉTHODE DE PONDÉRATION SUR LE CLASSEMENT.....	90
FIGURE 5.14 ANALYSE DE SENSIBILITÉ DE LA PONDÉRATION DES CRITÈRES D'ÉVALUATIONS SUR LE CLASSEMENT DES DIFFÉRENTS SCÉNARIOS PRÉDICTIFS POUR LA MÉTHODE TOPSIS.....	92

LISTE DES TABLEAUX

TABLEAU 1.1	LITTÉRATURE RELIÉE AU PROJET DES ANCIENNES LAGUNES DE MERCIER	6
TABLEAU 4.1	FACTEURS DE CONVERSION DES CONTENUS MASSIQUES ENTRE SOUS-PRODUITS DE DEGRADATION (AZIZ ET AL., 2000)	28
TABLEAU 4.2	CRITÈRES D'ÉVALUATION	37
TABLEAU 5.1	LISTE SOMMAIRE DES PRINCIPAUX CONTAMINANTS AU SITE POUR LES DIFFÉRENTES FAMILLES DE COMPOSÉS	39
TABLEAU 5.2	COMPOSITION DU LIQUIDE IMMISCIBLE PRÉLEVÉ EN 2021 AU PUITS F-9	41
TABLEAU 5.3	SOMMAIRE DES ÉTUDES DE MODÉLISATION NUMÉRIQUE AU SITE DES ANCIENNES LAGUNES DE MERCIER	46
TABLEAU 5.4	SOMMAIRE DES PARAMÈTRES HYDROGÉOLOGIQUES D'ÉCOULEMENT MESURES ET CALIBRES ...	55
TABLEAU 5.5	SOMMAIRE DES PARAMÈTRES HYDROGÉOLOGIQUES DE TRANSPORT HÉTÉROGÈNES	59
TABLEAU 5.6	SOMMAIRE DES PRINCIPALES COMPOSANTES DU FICHIER DE CONTRÔLE DE L'INVERSION DE PESTPP-IES	64
TABLEAU 5.7	RÉSULTATS DE L'INVERSION PAR PESTPP-IES – FONCTION OBJECTIVE DU 1,2-DCA ET DU BENZÈNE	68
TABLEAU 5.8	RÉSULTATS DE L'INVERSION PAR PESTPP-IES – VARIATION DE LA VALEUR DES PARAMÈTRES – ITERATION 1	73
TABLEAU 5.9	BILANS DE MASSE DE L'ÉCOULEMENT – JANVIER 2023	75
TABLEAU 5.10	BILANS DE MASSE DE TRANSPORT DU 1,2 DCA – JANVIER 2023	75
TABLEAU 5.11	BILANS DE MASSE DE TRANSPORT DU BENZÈNE – JANVIER 2023	75
TABLEAU 5.12	SOMMAIRE DE L'ANALYSE MULTICRITÈRE	86

LISTE DES ANNEXES

<i>ANNEXE I</i> TABLEAU DES PROPRIETES PHYSICO-CHIMIQUES DES CONTAMINANTS	111
---	-----

LISTE DES PLANCHES

PLANCHE A LOCALISATION ET PHYSIOGRAPHIE DU SECTEUR A L'ETUDE	117
PLANCHE B MODELE CONCEPTUEL ET NUMERIQUE DE L'ÉCOULEMENT DES EAUX SOUTERRAINES	118
PLANCHE C MELCC SUIVI DES NIVEAUX ET QUALITE DES EAUX SOUTERRAINES – ANNEE 2021	119
PLANCHE D MODELE HYDROSTRATIGRAPHIQUE ET SOLS CONTAMINES	120
PLANCHE E ÉVOLUTION DU PANACHE DE CONTAMINATION	121
PLANCHE F SUIVI HISTORIQUE DE LA QUALITE DES EAUX SOUTERRAINES	122
PLANCHE G MÉTHODOLOGIE DE MODÉLISATION	123
PLANCHE H FLUX DE MASSE LIGNE DES Z ET AFFLUENT UTES 1,2-DICHLOROÉTHANE	124
PLANCHE I COMPARAISON DES MODÈLES RÉGIONAL ET LOCAL	125
PLANCHE J CONDITIONS AUX LIMITES – ÉCOULEMENT.....	126
PLANCHE K CONDITIONS AUX LIMITES - TRANSPORT	127
PLANCHE L ZONAGE DES UNITES HYDROSTRATIGRAPHIQUES	128
PLANCHE M VALIDATION DE L'ÉCOULEMENT DU MODÈLE LOCAL EN RÉGIME PERMANENT	129
PLANCHE N VALIDATION DE L'ÉCOULEMENT DU MODÈLE LOCAL EN RÉGIME TRANSITOIRE	130
PLANCHE O ASSIMILATION DES CONCENTRATIONS DE 1,2-DCA.....	131
PLANCHE P ASSIMILATION DES CONCENTRATIONS DE BENZÈNE	132
PLANCHE Q SIMULATION DE TRANSPORT HISTORIQUE 1980-2020 DU 1,2-DCA - VUE EN PLAN	133
PLANCHE R SIMULATION DE TRANSPORT HISTORIQUE 1980-2020 DU BENZÈNE - VUE EN PLAN	134
PLANCHE S DISTRIBUTION DES PARAMÈTRES DE TRANSPORT	135
PLANCHE T BILAN DE MASSE – RÉALISATION 21.....	136
PLANCHE U SCÉNARIOS PRÉDICTIONNELS DE TRANSPORT DES CONCENTRATIONS DE 1,2-DCA.....	137

PLANCHE V SCÉNARIOS PRÉDICTIONNELS DE TRANSPORT DES CONCENTRATIONS DE BENZÈNE	138
PLANCHE W ÉVOLUTION TEMPORELLE DU PANACHE 1,2-DCA	139
PLANCHE X ÉVOLUTION TEMPORELLE DU PANACHE DE BENZENE.....	140
PLANCHE Y SCÉNARIOS PRÉDICTIONNELS DE TRANSPORT FLUX DE MASSE ET MASSE TOTALE.....	141
PLANCHE Z TABLEAU DE BORD DE L'ANALYSE DÉCISIONNELLE	142

LISTE DES ABRÉVIATIONS

3D	Trois dimensions
BAPE	Bureau d'audiences publiques en environnement
BRGM	Bureau de recherches géologiques et minières
BPC	Biphényles polychlorés
CA	Chloroéthane
CCME	Conseil canadien des ministres de l'Environnement
COV	Composés organiques volatiles
COSV	Composés organiques semi-volatiles
CMA	Concentration maximale acceptable
CV	Chlorure de vinyle
1,2-DCA	1,2-Dichloroéthane
1,1-DCE	1,1-Dichloroéthène
DCE	Dichloroéthène
DNAPL	<i>Dense non-aqueous phase liquid</i>
ES	<i>Ensemble Smoother</i>
EnKF	<i>Ensemble Kalman Filter</i>
ETH	Éthène
ETHA	Éthane
GOQ	Gouvernement du Québec
HAP	Hydrocarbures aromatiques polycycliques
iES	<i>iterative Ensemble Smoother</i>
INRS	Institut national de la recherche scientifique
ITRC	<i>Interstate Technology and Regulatory Council</i>
KF	Kalman Filter
LID	Liquide immiscible dense
LIL	Liquide immiscible léger
LM	<i>Levenberg-Marquardt</i>
LM-EnRML	<i>Levenberg-Marquardt ensemble randomized maximum likelihood</i>
LNAPL	Light non-aqueous phase liquid
MELCC	Ministère de l'Environnement, de la Lutte contre les changements climatiques
MELCCFP	Ministère de l'Environnement, de la Lutte contre les changements climatiques, de la Faune et des Parcs
NAPL	<i>Non-aqueous phase liquid</i>

1,1,2,2-PCA	1,1,2,2-Tétrachloroéthane
PCE	Tétrachloroéthène
1,1,2,2-PCE	1,1,2,2-Tétrachloroéthène
POP	Polluants organiques persistants
REV	<i>Representative elementary volume</i>
RLRQ	Recueil des lois et des règlements du Québec
1,1,2-TCA	1,1,2-Trichloroéthane
TCE	Trichloroéthène
UTES	Usine de traitement des eaux souterraines
US EPA	<i>United States Environmental Protection Agency</i>

1 INTRODUCTION

1.1 Mise en contexte

La contamination des sols et des eaux souterraines est un problème environnemental qui doit être géré de manière à protéger les récepteurs potentiels tel que la faune, la flore, et les humains. Au Québec, les critères et normes en vigueur pour la qualité des sols et des eaux souterraines ont été établis pour protéger ces derniers (Beaulieu, 2021).

Dans un contexte de gestion d'un site contaminé, il est primordial d'établir un modèle conceptuel du système hydrogéologique et du modèle source-voie-récepteur afin d'identifier les composantes et processus physiques qui peuvent influencer l'évolution temporelle et spatiale de la migration des contaminants. Par la suite, la modélisation numérique de l'écoulement des eaux souterraines et du transport des contaminants peut être utilisée afin de guider le processus décisionnel (Claprood et al., 2023). La modélisation numérique permet d'estimer les flux d'eau et de masse des contaminants, la distribution spatio-temporelle des concentrations, et/ou évaluer l'efficacité de différents scénarios de réhabilitation et/ou de la gestion environnementale du site.

Quant aux travaux de caractérisation des sols et eaux souterraines, ils permettent d'améliorer les connaissances hydrogéologiques spécifiques au site à l'étude et de réduire l'incertitude des paramètres hydrogéologiques utilisés par les modèles numériques.

Les travaux de caractérisation hydrogéologiques, le développement/raffinement du modèle conceptuel et du modèle numérique d'écoulement et de transport des contaminants, est reconnu comme étant un processus itératif (Lefebvre, 2007). L'apport de nouvelles connaissances hydrogéologiques permet de raffiner, valider ou invalider certaines hypothèses ou composantes du système hydrogéologique. Par conséquent, les modèles conceptuels et numériques doivent constamment être revus au fil des années au même rythme que l'évolution des connaissances du site.

Dans le cadre de ma maîtrise, le site contaminé des anciennes lagunes de Mercier a été choisi afin de poursuivre le cycle évolutif du processus de modélisation numérique, tout en mettant l'emphase sur le transport des contaminants. Plusieurs études ont été réalisées au site des anciennes lagunes de Mercier afin de caractériser les propriétés hydrogéologiques ainsi que la qualité des sols et des eaux souterraines. La plus récente étude a été achevée en 2023, avec le rapport sur un modèle d'écoulement régional en 3D de l'écoulement de l'eau souterraine dont les paramètres ont été ajustés pour reproduire les charges hydrauliques en régimes permanent et transitoire en utilisant la méthode d'inversion numérique de lissage itératif d'ensemble (Claprood et al., 2023).

1.2 Site des anciennes lagunes de Mercier

La ville de Mercier est située sur la rive sud du fleuve Saint-Laurent, à approximativement 20 km au sud-ouest de la ville de Montréal et à 5 km au sud de la ville de Châteauguay (Planche A). Ville Mercier est située dans la plaine du Saint-Laurent, une région densément occupée par les territoires agricoles.

À l'extrémité sud-ouest du territoire de la ville de Mercier se situe un esker composé de sable et de gravier, qui a été et est toujours exploité par des sablières et gravières. L'esker est perceptible sur la topographie, car il est surélevé par rapport à la plaine argileuse des environs, toutefois, à l'endroit où des sablières et gravières ont été en exploitation, des dépressions topographiques sont généralement visibles.

Le site des anciennes lagunes de Mercier résulte de l'exploitation de sablières et gravières localisé principalement sur le lot 6 018 029.

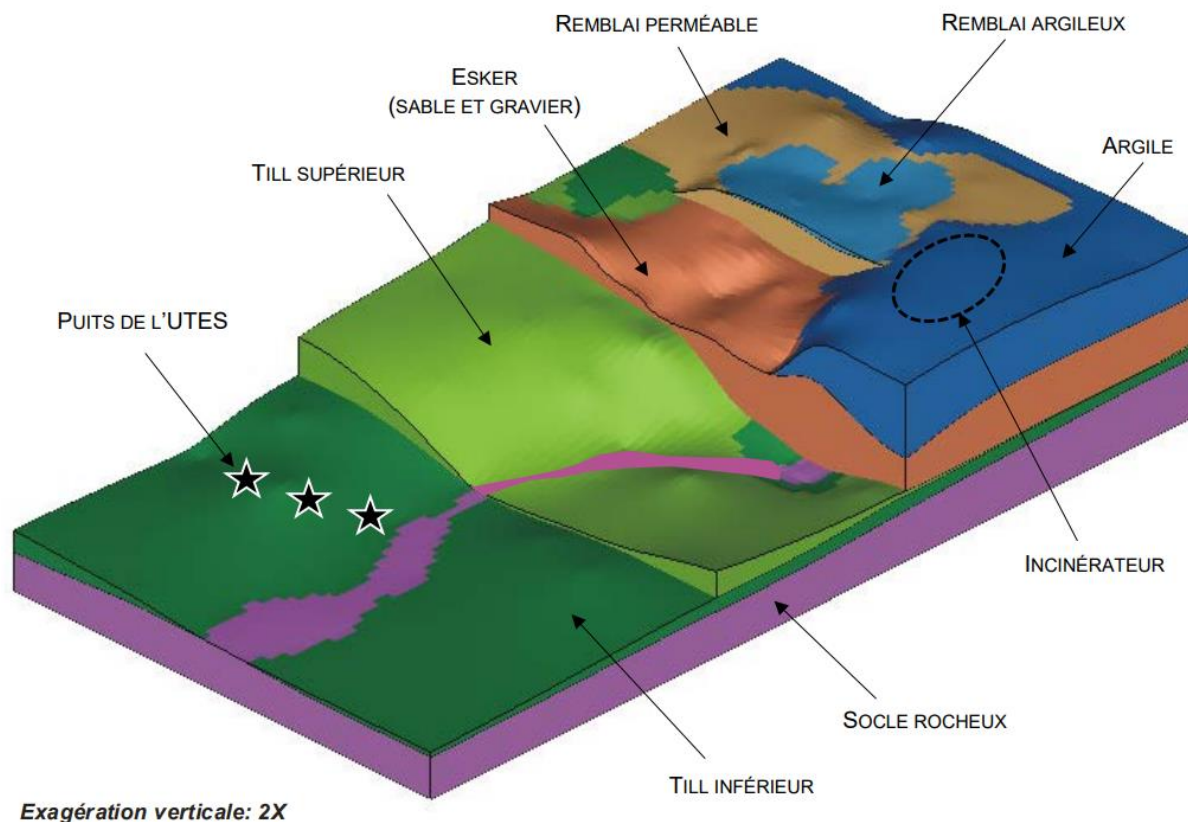


Figure 1.1 Vue en perspective 3D des unités hydrogéologiques du site des anciennes lagunes de Mercier (tirée de MELCC 2023a).

1.2.1 Historique de la contamination

Afin de faire un résumé de l'histoire de la contamination, les informations contenues dans le rapport du Bureau d'audiences publiques en environnement (BAPE) a été consulté (BAPE, 1994).

Un sommaire est présenté ci-dessous :

- Octobre 1968 – Janvier 1969: La Régie des eaux du Québec et le ministère de la Santé autorisaient la compagnie Lasalle Oil Carriers inc. à emmagasiner des déchets organiques liquides dans les lagunes. La composition chimique des déchets des lagunes de Mercier était principalement des huiles légères et denses, des solvants organiques, ainsi que des BPC.
- Début 1970 : Des plaintes sont formulées par certains citoyens qui dénoncent l'emmagasinage des huiles.

- Janvier 1969 – 1972 : Les activités se poursuivent. L'estimation du volume de résidus huileux entreposé au site est de 170,000 m³.
- Mars 1971 : Le gouvernement du Québec approuve la construction d'un incinérateur à proximité des lagunes.
- Octobre 1971 : Les premiers cas répertoriés de puits résidentiels d'alimentation en eau potable contaminés par la migration d'eaux souterraines souillées provenant des lagunes de Mercier sur le boulevard Sainte-Marguerite.
- Janvier 1972 – 1976 : Une conduite d'eau entre les municipalités de Châteauguay et de Mercier qui se prolonge le long du boulevard Sainte-Marguerite et du rang Saint-Joseph en direction de Sainte-Martine est construite.
- Septembre 1972 : Inauguration de l'incinérateur et révocation du permis d'emmagasiner.
- Septembre 1972 - Septembre 1976 : Récupération et incinération des déchets liquides et semi-liquides. Remblayage progressif des lagunes pour faciliter le pompage des résidus liquides.
- Octobre 1980 – Décembre 1980 : 23,887 m³ de boue sont solidifiés selon le procédé Boliden et entreposés dans une cellule creusée dans l'argile à approximativement 500 m à l'est de l'incinérateur.
- Juin 1982 : Autorisation de construction d'une conduite d'alimentation en eau potable à Sainte-Martine et adoption du *Règlement sur la protection des eaux souterraines dans la région de la ville de Mercier* (Gouvernement du Québec, 2018).
- Juillet 1984 : Mise en fonction de l'usine de traitement des eaux souterraines (UTES).
- Mai 1991 : Des barils contenant des BPC et des condensateurs enfouis sont découverts par le ministère de l'Environnement sur le site.

- Mai 1991 – Décembre 1991 : Excavation des sols contaminés au BPC et entreposages sur place sous une toile étanche.
- Été 1993 – Janvier 1994 : Un comité indépendant formé d'experts internationaux est formé avec le mandat de proposer une stratégie d'intervention.
- Avril 1994 : Commission du BAPE.
- Mars 2018 : Annonce par le gouvernement du Québec de la construction d'une nouvelle usine de traitement des eaux souterraines en vue d'optimiser le confinement des contaminants.
- 2020-2025 : Soutien scientifique par l'INRS et élaboration d'un plan de caractérisation et de structuration des efforts de recherche dans le cadre de la conception de la nouvelle usine.

En résumé, le site des anciennes lagunes de Mercier est un site contaminé important au Québec. Il a été contaminé par des millions de litres de déchets liquides depuis la fin des années 1960. Des centaines de milliers de mètres cubes de sol, de roc, et d'eau souterraine ont été contaminés. L'UTES a été mise en fonction en 1984 afin de contrôler hydrauliquement les eaux souterraines contaminées. Au cours des dernières années, le débit moyen de l'affluent à l'usine est estimé à 3,600 m³/jour (Claprood et al., 2023). Le suivi annuel de la qualité des eaux souterraines à partir du réseau régional de puits d'observation a permis de confirmer que les concentrations des différents contaminants des eaux souterraines est stable, et à certains puits, une tendance à la baisse de certains contaminants est observée (MELCC, 2023b).

1.2.2 Revue de littérature du site

Le site des anciennes lagunes de Mercier a fait l'objet de plusieurs études au fil des années. Un sommaire de la revue de littérature pertinente dans le cadre de ce mémoire est présenté au tableau 1.1.

Tableau 1.1 Littérature reliée au projet des anciennes lagunes de Mercier

Référence	Sujet
(Claprood et al., 2023)	Modélisation de l'écoulement de l'eau souterraine par méthode d'ensemble et évaluation de l'effet de différents scénarios de contrôle hydraulique pour l'UTES-II.
(Martel et al., 2023)	Essais en laboratoire afin d'évaluer la performance d'une méthode thermique pour la réhabilitation partielle du site.
(Martel et al., 2021b)	Modélisation 3D des enveloppes de contaminants et élaboration d'un protocole d'essais thermiques en laboratoire.
(MELCC, 2023b, 2022, 2021, 2020a, 2019, 2018)	Rapports annuels de suivi de la qualité des eaux souterraines de la région de Mercier.
(Martel et al., 2018)	Revue de littérature sur les technologies de réhabilitation des sols et des eaux souterraines et réévaluation du potentiel de réhabilitation du site contaminé des anciennes lagunes de Mercier.
(Benchalga, 2014)	Étude des effets toxiques d'une exposition de la truite aux eaux souterraines du site des anciennes lagunes de Mercier.
(Belmeskine, 2012)	Étude écotoxicologique de polluants organiques persistants.
(Nadeau, 2010)	Analyse socio-historique de l'action publique relative au cycle de gestion des déchets dangereux à Mercier.
(Laberge, 2007)	Analyse socio-historique des interventions écocitoyennes.
(Lefebvre, 2007)	Modèle conceptuel hydrogéologique et potentiel de réhabilitation du site.
(Racine, 2005)	Évaluation des différentes alternatives de contrôle du panache d'eau souterraine contaminée.
(Pontlevoy, 2004)	Modélisation hydrogéologique de l'écoulement des eaux souterraines pour supporter la gestion du système aquifère.
(BAPE, 1994)	Le rapport d'enquête et d'audience publique du Bureau d'audiences publiques sur l'environnement du Québec. Résumé de l'historique du site, des enjeux environnementales, inquiétudes et attentes du public, solutions potentielles de la gestion des contaminants à long-terme.

1.2.3 Modèle Conceptuel

Contexte hydrogéologique

Les anciennes lagunes de Mercier sont des dépressions topographiques résultantes de l'exploitation des sables et graviers situés sur le lot 6 018 029 (Planche A).

La figure 1.1 illustre la géologie présente au site, principalement composée de dépôts meubles sur un socle rocheux. Les dépôts meubles ont été divisés selon les unités hydrostratigraphiques suivantes :

- Unité 1 – Remblai et matière organique : Matériaux de remblai au site et hors site lorsque le sol minéral est remanié. Matériaux organiques naturels près des cours d'eaux.
- Unité 2 – Argile : Argile silteuse, et de silt et sable argileux provenant des sédiments marins de la Mer de Champlain.
- Unité 3 – Esker sable et gravier : Sable graveleux et gravier sablonneux composant l'esker.
- Unité 4 – Till : Till inférieur compact ou basal et till supérieur ou remanié.
- Unité 5 – Roc : Socle rocheux fracturé sous les dépôts meubles. Il est constitué principalement d'orthoquartzite (grès) d'âge Cambrien à Ordovicien.

Lorsque la couche de till inférieur est absente et que les sables et graviers de l'esker sont en contact direct avec le roc, des conduits hydrauliques préférentiels sont créés. On définit ces conduits dans cette étude comme des fenêtres au roc. Une coupe du modèle conceptuel de la géologie est illustrée à la planche B, médaillon A. Le sommaire des unités hydrostratigraphiques est également présenté sur la planche B, médaillon B, tandis qu'une coupe du modèle numérique d'écoulement de l'eau souterraine est présentée sur la planche B, médaillon C.

Dans le secteur à l'étude, la recharge des eaux souterraines se fait de façon préférentielle aux endroits où l'esker affleure et aux élévations topographiques plus élevées. La recharge appliquée

dans le modèle numérique régional (Claprood et al., 2023) est présentée à la planche B, médaillon F. Les rivières de l'Esturgeon et Châteauguay représentent principalement des zones de décharge des eaux souterraines.

Régionalement, les niveaux de la nappe d'eau souterraine dans les dépôts meubles reflètent généralement la topographie (planche B, médaillon D). Dans le roc, la direction d'écoulement est de l'est vers l'ouest, avec une composante plus importante vers le sud à proximité du site à l'étude. L'écoulement des eaux souterraines dans les dépôts meubles et le roc interprété par le MELCC en 2021 sont présentés à la planche C (médaillons A et B). À proximité des anciennes lagunes de Mercier, l'influence du piège hydraulique formé par l'exploitation des puits de l'UTES (unité de traitement des eaux souterraines) (P-111, P-112 et P-113) est évidente à la planche C, où l'on retrouve des charges hydrauliques mesurées considérablement plus basses dans les dépôts meubles et le roc.

Source des contaminants

À partir d'octobre 1968, des déchets organiques liquides tels que des huiles légères et denses et des solvants organiques sont emmagasinés dans les anciennes lagunes de Mercier. À partir des échantillons de sols recueillis lors des différentes campagnes de forage et d'excavation, l'étendue de la contamination en phase immiscible dans les sols a été modélisée en 3D et est présentée à la planche D (Martel et al., 2021b).

L'historique de la contamination des eaux souterraines est décrit dans la section 1.2.1 et présenté graphiquement à la planche E. En octobre 1971, sur le boulevard Sainte-Marguerite, les premiers cas de puits résidentiels d'alimentation en eau potable contaminés par les déchets liquides organiques sont répertoriés. C'est en juillet 1984 que l'UTES est mise en production pour effectuer un contrôle hydraulique du panache de contamination. Les anciennes lagunes de Mercier et la migration de LIL (liquide immiscible léger (LIL, *LNAPL*) et liquide immiscible dense ou (LID, *DNAPL*) dans les sables et graviers de l'esker représentent la zone source des

contaminants des eaux souterraines. Aux endroits des fenêtres au roc, le LID peut avoir migré dans les fractures du roc et dans la matrice du roc par diffusion, tel que conceptualisé par les études précédentes (Martel et al., 2021b).

Récepteurs potentiels

Depuis 1982, un règlement a été adopté pour interdire l'exploitation des eaux souterraines dans la région de la ville de Mercier (Gouvernement du Québec, 2018). Ce contrôle administratif réduit significativement le risque de consommation de l'eau souterraine contaminée par des citoyens.

L'efficacité du piège hydraulique sous différents scénarios a été évaluée en 2023 (Claprood et al., 2023), et un suivi régional de la qualité des eaux souterraines aux puits d'observation se poursuit semi-annuellement (MELCC, 2023b, 2022, 2021, 2020a, 2019, 2018). Les résultats de qualité des eaux souterraines sont présentés sur la planche F.

Les eaux souterraines qui se déchargent dans un cours d'eau peuvent constituer un risque pour l'environnement, particulièrement dans la rivière de l'Esturgeon et potentiellement dans la rivière Châteauguay.

2 PROBLÉMATIQUE

L'accès à de l'eau propre à la consommation et en quantité suffisante (e.g. pérennité de la ressource) sont des enjeux primordiaux pour notre société. Au Québec, les dispositions de la loi (Gouvernement du Québec, 2023) visent la protection de l'environnement de même que la sauvegarde des espèces vivantes en protégeant la santé et la sécurité de celles-ci, tout en considérant les réalités des territoires et des collectivités qui y habitent. En tenant compte des conséquences environnementales, économiques et sociales, la loi vise la réduction des émissions de contaminants dans l'air, l'eau et les sols. Ultimement, la loi a pour objectif de protéger, améliorer, restaurer, gérer et mettre en valeur l'environnement collectivement.

Le site des anciennes lagunes de Mercier est l'un des plus importants sites contaminés au Québec et sa gestion environnementale est présentement assurée par le MELCCFP. Le cadre réglementaire québécois définit les critères de qualité des sols et des eaux souterraines (Beaulieu, 2021) afin de protéger l'environnement et définir les objectifs de réhabilitation des terrains contaminés. Au site des anciennes lagunes de Mercier, le BAPE résume très bien le paradoxe qui existe entre les limitations techniques et économiques à réhabiliter le site dans une période de temps raisonnable : *“La commission souligne aussi qu’il ressort du concept de restauration proposé que la décontamination complète de l’eau souterraine est une entreprise de très longue haleine dont les résultats à long terme restent plus qu’incertains.”* (BAPE, 1994). Bien que les règlements exigent la restauration complète, les limites techniques, économiques, et d'acceptabilité sociale permettent actuellement de restaurer complètement le site seulement sur une période pouvant s'échelonner sur plusieurs générations. Par conséquent, la gestion environnementale du site est complexe et les prises de décisions doivent obligatoirement se faire en considérant plusieurs objectifs simultanément (i.e. économique, environnementaux, sociétaux, etc.).

Au site de Mercier, d'un point de vue technique, la présence de contaminants à grande profondeur dans le roc fracturé dont la matrice est poreuse (roche sédimentaire), contribue à l'incertitude quant à la faisabilité d'une restauration complète. En effet, dans un roc fracturé et poreux, deux porosités existent; la porosité primaire entre les grains de la matrice rocheuse et la porosité secondaire provenant des fractures du massif rocheux. Plusieurs études de caractérisation du roc et des porosités ont été réalisées au site de Mercier au fil des ans (CNFS, 1993; Denis, 1991; Poulin, 1977). En plus des porosités, le roc a deux perméabilités; celle des fractures et celle de la matrice rocheuse. Les perméabilités influencent les vitesses d'écoulement et du transport des contaminants, tandis que les porosités influencent la distribution de la masse emmagasinée. En d'autres termes, les fractures fortement perméables transportent rapidement les contaminants, toutefois celles-ci représentent une faible portion de la masse emmagasinée. La matrice rocheuse, quant à elle, est moins perméable que les fractures, néanmoins elle a la capacité d'emmagasiner une masse de contaminant considérablement plus élevée que les fractures par diffusion moléculaire, lorsqu'elle est longuement exposée à un contaminant. Les méthodes de réhabilitations connues sont efficaces dans la porosité secondaire interconnectée avec une forte conductivité hydraulique. Les méthodes de réhabilitations connues sont toutefois inefficaces pour atteindre la porosité primaire, ce qui est la cause de l'incertitude quant à la faisabilité d'une restauration complète du site (Ding et al., 2025).

Le risque que les contaminants du site aient des effets négatifs sur l'environnement (e.g. population, flore et faune) est considéré comme étant avéré, selon le ministère de l'environnement, puisque les concentrations de plusieurs composés dans l'eau souterraine sont au-delà des critères de qualité acceptables. Par exemple, en 2022, les concentrations maximales mesurées dans les puits d'observations de la ligne des Z étaient de 2,600 µg/L en 1,2-DCA, 8,700 µg/L en benzène, 3,100 µg/L en éthylbenzène et de 72,000 µg/L en chlorure de vinyle.

D'un point de vue financier, les coûts de restauration évalués par le BAPE varient selon les scénarios, toutefois les scénarios présentés étaient tous de l'ordre de plusieurs millions de dollars. Les coûts d'opération pour maintenir un contrôle hydraulique sur plusieurs dizaines, voire centaines d'années, doivent donc être considérés dans la gestion à long-terme du site (BAPE, 1994).

Finalement, d'un point de vue collectif, le BAPE a identifié que la participation des citoyens était essentielle à l'élaboration et à la mise en œuvre d'un plan d'action. Tel que démontré par Laberge (Laberge, 2007; Nadeau, 2010), la participation citoyenne a grandement évolué entre 1970 et 2024. Au départ, surtout les résidents immédiats étaient impliqués. Dans les années 1980, des écologistes ont joué un rôle clé dans la mobilisation collective des communautés avoisinantes. Dans les dernières années, le Comité régional des lagunes composé des représentants des municipalités avoisinantes (Mercier, Sainte-Martine, Saint-Isidore, Saint-Urbain-Premier et Châteauguay) œuvre pour assurer un approvisionnement durable en eau potable dans la région. L'eau souterraine est une source d'eau potable importante dans la région, donc, la gestion du site de Mercier est un enjeu majeur pour ce comité.

Récemment, plusieurs études ont été complétées et sont mises à la disposition du public, avec l'objectif de mieux comprendre l'efficacité de certaines options techniques de réhabilitation (Martel et al., 2023, 2021b, 2018) et optimiser le contrôle hydraulique pour supporter la conception de l'UTES-II (Claprood et al., 2023).

Le cadre réglementaire au Canada comporte un volet d'analyse de risque qui permet, dans certains cas, de réévaluer les critères de qualité des eaux souterraines et des sols spécifiques à un site, en démontrant que ces critères ajustés peuvent protéger, de façon équivalente aux critères standard, les récepteurs potentiels, tout en mettant en place des contrôles physiques ou administratifs. Ce cadre réglementaire prescrit l'utilisation de concentrations maximales comme critère de la qualité de l'environnement. Ces critères ne tiennent pas compte des flux de masse

et/ou le bilan massique d'un site. Du point de vue hydrogéologique, une forte concentration dans une unité très peu perméable peut résulter en un faible flux de masse, tandis qu'une faible concentration dans une unité fortement perméable peut résulter en un fort flux de masse. L'effet des flux de masse est donc déterminant dans le processus d'évaluation des impacts sur les récepteurs potentiels. L'expérience française a démontré que le traitement de faibles volumes fortement contaminés donne un résultat optimal d'enlèvement de masse tout en tenant compte de l'aspect économique (Lion et al., 2015). Cette approche est favorisée en France, pour les sites où la restauration complète de la zone source n'est pas envisageable. Cette approche n'est pas acceptée au Québec. Lorsqu'il y a une contamination avérée de l'eau souterraine, la procédure d'intervention prévoit le constat du risque d'effets qui doit mener à la mise en œuvre immédiate de mesures visant à prévenir ou réduire ce risque (Beaulieu, 2021; section 7.8.4.2.2). L'évaluation du risque de migration de la phase dissoute (e.g. dans les eaux souterraines) de la contamination fait partie de ces mesures. Les études toxicologiques réalisées au site de Mercier (Belmeskine, 2012; Benchalgo, 2014) peuvent s'avérer utiles dans le cadre de l'évaluation du risque d'effets sur la santé, les usagers ou l'environnement si l'on peut prédire avec confiance les niveaux potentiels d'exposition. Néanmoins, l'évaluation du risque requiert une bonne compréhension des propriétés physico-chimiques des contaminants qui dictent la partition entre l'eau, le sol et l'air. La migration des contaminants dans les eaux souterraines est le sujet principal de ce mémoire, donc les mécanismes d'atténuation naturelle, dont la biodégradation, la volatilisation, la diffusion, la dispersion hydrodynamique et l'advection doivent être considérés afin que les prédictions des modèles numériques soient réalistes et probables.

En bref, la problématique au site des anciennes lagunes de Mercier est que la réhabilitation complète du site est incertaine, la contamination des sols, du roc et de l'eau souterraine restera vraisemblablement présente sur plusieurs générations pour certains contaminants persistants tel que les BPC. À court-terme, une décision doit être prise dans le cadre de la gestion

environnementale du site, et évaluer les effets de certains scénarios de réhabilitation. La prise de décision doit être faite de manière éclairée, et l'incertitude associée au modèle numérique d'écoulement des eaux souterraines et du transport des contaminants doit être quantifiée pour supporter la prise de décision des différents intervenants au dossier.

3 OBJECTIFS

L'objectif principal de ce mémoire est de mieux comprendre l'évolution spatio-temporel des contaminants selon différents scénarios de gestion environnementale du site. L'utilisation de la modélisation du transport des contaminants a pour but de supporter la prise de décision des différents intervenants au dossier. Plus précisément, on propose d'utiliser les données sur la qualité des eaux souterraines acquises à partir des suivis annuels du réseau régional de puits d'observation et de l'UTES, pour contraindre les paramètres du modèle lors de la phase de calage.

Un second objectif est d'évaluer la performance de la méthode de lissage d'ensemble itératif (*iterative ensemble smoother* [iES]) pour l'assimilation des données historique sur la qualité des eaux souterraines. À cette fin, les 69 réalisations qui ont été retenues lors du calage de l'écoulement en utilisant la méthode iES constitueront l'ensemble de départ (Claprood et al., 2023).

Le troisième objectif est d'utiliser l'ensemble des réalisations afin d'explorer l'incertitude des prédictions associées à différents scénarios de gestion et de restauration du site. L'ensemble des réalisations permettra de quantifier la variation de différents critères d'analyse de performance environnementale, tel que ; le volume, la masse, et les flux de masse à des récepteurs potentiels.

Le quatrième objectif est de considérer l'empreinte écologique des pratiques environnementales des scénarios proposés pour estimer s'il y a un gain écologique réel en bout de ligne (US EPA, 2008). Cet objectif est en lien avec la loi sur l'environnement qui vise à réduire les émissions de contaminants dans l'air, l'eau et les sols tout en protégeant l'environnement. Il s'avère donc important que l'utilisation de l'eau souterraine et les coûts énergétiques d'opération de l'UTES soient considérés dans l'analyse décisionnelle.

Finalement, il ne faut pas négliger l'aspect social dans la prise de décision, tel qu'identifié dans le rapport du BAPE. Donc, les contraintes associées à l'utilisation du territoire et plus particulièrement l'accès à l'eau souterraine devront être à l'avant plan dans cette étude, puisqu'elles sont des enjeux majeurs pour les résidents du secteur.

En résumé, les objectifs de cette maîtrise sont de:

- Mieux comprendre le transport des contaminants dans les eaux souterraines en utilisant la modélisation numérique et en assimilant les concentrations mesurées dans les puits d'observations par la méthode de lissage d'ensemble.
- Estimer grâce à la variabilité des résultats de l'ensemble, l'incertitude de chaque scénario de gestion environnementale du site, et ce pour chacun des critères d'évaluation retenus.
- Supporter la prise de décision en évaluant les effets environnementaux, économiques et sociétaux dans une analyse décisionnelle multicritère des différents scénarios.

L'innovation scientifique de cette démarche est d'utiliser une méthode d'ensemble pour simuler le transport de contaminant pour différents scénarios de restauration d'un site contaminé, tout en utilisant une analyse décisionnelle multicritère pour supporter la prise de décision de gestion environnementale du site.

4 MÉTHODOLOGIE

La méthodologie de cette étude est présentée dans les sections suivantes et de manière succincte et graphique à la planche G. La première phase consiste à construire un modèle régional d'écoulement de l'eau souterraine. Les quatre étapes de sa conception sont ; (1) la construction du modèle hydrostratigraphique, (2) la génération d'un ensemble de réalisations stochastiques des conductivités hydrauliques, (3) la calibration des paramètres aux charges hydrauliques et réponses hydrauliques à l'essai de remontée par la méthode de lissage d'ensemble, et (4) les simulations prédictives de différents scénarios de pompage afin d'évaluer l'efficacité du piège hydraulique. La seconde phase consiste à (1) compiler les données historiques sur le suivi de la qualité des eaux souterraines et identifier les principaux contaminants, (2) calculer l'évolution théorique des solubilités effectives du mélange de composés de la zone source, (3) assimiler les données sur la qualité des eaux souterraines par méthode de lissage d'ensemble, et (4) simuler différents scénarios de gestion environnementale du site et produire une analyse décisionnelle multicritère. Les sections suivantes décrivent les principes et techniques sous-jacentes aux résultats obtenus.

4.1 Contaminants

4.1.1 Propriétés physiques

En 1972, le ministre responsable de la qualité de l'environnement a inauguré l'incinérateur de résidus liquides organiques à Mercier, ce qui représentait un jalon important dans la prise en charge par l'État des déchets industriels. Ces liquides provenaient de plusieurs types d'industries, donc la zone source de contaminants est un mélange de ces différents composés.

Les propriétés physiques telles que la densité et la viscosité des composés jouent un rôle important dans le comportement d'un contaminant. La mobilité d'un contaminant dans l'eau souterraine peut être définie par la vitesse à laquelle le contaminant se déplace dans le milieu

poreux par rapport à celle de l'eau souterraine (Martel et al., 2021a). Un contaminant est mobile lorsque sa solubilité, sa volatilité et sa densité est grande, tout en ayant une faible viscosité. Un contaminant est persistant lorsqu'il est fortement adsorbé aux solides et a une faible solubilité, volatilité et biodégradabilité.

Les propriétés physico-chimiques des principaux composés du mélange de contaminants influencent la partition entre les différentes phases (i.e. gazeuse, liquide immiscible, aqueuse), la mobilité et la persistance de ceux-ci. La première étape consistait à revoir la composition des échantillons d'huiles récupérés, ainsi que les résultats du suivi de la qualité de l'eau souterraine de l'affluent de l'UTES, des puits d'observation sur le profil de la ligne des Z (planche H), ainsi que les puits d'observation du réseau régional de suivi à long-terme. La ligne des Z est un réseau de puits d'observations en aval hydraulique des anciennes lagunes. Ces puits d'observations ont été répartis verticalement et horizontalement de manière à couvrir l'épaisseur saturée de l'esker, les matériaux les plus perméables de cet aquifère. L'analyse de la composition des échantillons d'huiles permet de mieux comprendre les principaux composés susceptibles d'être présent dans l'eau souterraine.

4.1.2 Partition

La distribution des contaminants dans l'air, l'eau et les sols au site est calculée par les coefficients de partition définis par les équations suivantes (Mackay et al., 2015) :

$$K_{ow} = \frac{C_o}{C_w} \quad \text{Équation 4.1}$$

$$K_d = \frac{C_s}{C_w} \quad \text{Équation 4.2}$$

$$K_{oc} = \frac{C_{oc}}{C_w} = \frac{K_d}{f_{oc}} \quad \text{Équation 4.3}$$

$$K_{aw} = \frac{C_a}{C_w} \quad \text{Équation 4.4}$$

$$K_{oa} = \frac{C_o}{C_a}$$

Équation 4.5

avec,

C_a = concentration d'un composé dans l'air

C_o = concentration d'octanol dans l'air

C_s = concentration d'un composé dans les sols

C_{oc} = concentration du carbone organique

C_w = concentration d'un composé dans l'eau

f_{oc} = fraction de carbone organique dans les sols

K_{aw} = coefficient de partition air-eau

K_{oa} = coefficient de partition octanol-air

K_d = coefficient de partition sol-eau

K_{oc} = coefficient de partition carbone organique-eau

K_{ow} = coefficient de partition octanol-eau

4.1.3 Mélange

Le comportement de partition dans les systèmes à phases mixtes tels que celui du site de Mercier (e.g. phase gazeuse, liquide ou solide) est difficile à prédire si la composition exacte du mélange est inconnue. En effet, la solubilité et volatilité effective d'un composé d'un mélange dépendent de leur fraction molaire dans le mélange, tel que décrit par les formes suivantes de la loi de Raoult :

$$p_i = x_i p_i^o; S_i = x_i S_i^o;$$

Équation 4.6

avec,

p_i = pression partielle effective du composé i

p_i^o = pression partielle du composé pur i

x_i = fraction molaire du composé i

S_i = solubilité effective dans l'eau du composé i

S_i^o = solubilité dans l'eau du composé pur i

À partir des analyses de composition réalisées sur les huiles (LIL et LID) collectées aux puits d'observation à proximité de la zone source, les fractions molaires, pressions partielles et

solubilités des composés sont calculées et comparées aux concentrations mesurées dans les eaux souterraines à l'affluent de l'UTES. Le but de cette démarche est de mieux comprendre la séquence anticipée de dissolution des composés chimiques, de valider que les composés présents dans les eaux souterraines sont cohérents avec le modèle conceptuel du mélange de la zone source, et de mieux prédire la composition des composés dissous futurs de l'affluent de l'usine.

4.2 Modèle numérique d'écoulement des eaux souterraines et du transport des contaminants

Il est important que des objectifs soient préalablement définis lorsqu'un modèle numérique d'écoulement des eaux souterraines et du transport de contaminants est utilisé (MELCC, 2020b). Dans le cadre de ce mémoire, les objectifs ont été présentés à la section 3. La modélisation numérique est utilisée pour quantifier l'évolution spatio-temporelle des concentrations dissoutes de contaminants par advection, dispersion et diffusion, et ce, pour différents scénarios de transport de contaminant sous différents scénarios de gestion.

4.2.1 Écoulement

En présumant l'existence d'un volume élémentaire représentatif (i.e. *representative elementary volume* ou REV) (Bear, 1988) qui permet de simuler le comportement de l'écoulement des eaux souterraines, l'équation différentielle de conservation de masse suivante est utilisée afin de décrire le processus d'écoulement de l'eau souterraine:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad \text{Équation 4.7}$$

avec,

x, y, z	=	coordonnées du système cartésien (L)
h	=	charge hydraulique (L)
S_s	=	coefficient d'emménagement spécifique du milieu poreux (L ⁻¹)

K	=	composantes du tenseur de conductivité hydraulique (LT ⁻¹)
t	=	temps (T)

L'équation 4.7 présume que les directions principales du tenseur de conductivité hydraulique sont parallèles au système cartésien choisi. Les autres hypothèses sous-jacentes sont que l'écoulement de l'eau souterraine suit la loi de Darcy, que le sol est saturé en eau et que le champ de conductivité hydraulique et le coefficient d'emmagasinement sont indépendants des concentrations de contaminant et donc constants. Cette dernière hypothèse est requise, car dans le cas où les concentrations des contaminants sont très élevés, elles peuvent influencer la densité et la viscosité de l'eau souterraine, ainsi que la conductivité hydraulique du milieu poreux.

L'équation est résolue par la méthode des éléments finis (i.e FEM ; *finite element method*) à l'aide du logiciel FEFLOW (Diersch, 2013). Le logiciel FEFLOW a la capacité de simuler l'écoulement et le transport de plusieurs composés chimiques en 3D avec un maillage triangulaire structuré, non-structuré et/ou rectilinéaire structuré.

4.2.2 Transport

Le transport de contaminants est souvent simulé en considérant les mécanismes physiques d'advection, de dispersion et de réaction. La variation de la concentration d'un contaminant en fonction du temps est décrite par les équations 4.8 à 4.11, en assumant la direction de l'écoulement longitudinale est parallèle à l'axe x. Les axes y et z sont respectivement les directions transversales horizontale et verticale :

$$D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} - \lambda c = R \frac{\partial c}{\partial t} \quad \text{Équation 4.8}$$

$$R = \frac{v_w}{v_i} = \left(1 + \frac{\rho_b}{n} K_d \right) \quad \text{Équation 4.9}$$

$$D_x = D_m + v \alpha_L; D_{y,z} = D_m + v \alpha_T \quad \text{Équation 4.80}$$

$$\lambda = \frac{\ln 2}{t_{1/2}}$$

avec,

α_L = dispersivité longitudinale (L)

α_T = dispersivité transversale (L)

$c(x, y, z, t)$ = concentration dissous d'un composé (ML^{-3})

D_m = coefficient de diffusion moléculaire (L^2T^{-1})

D_x = dispersion hydrodynamique longitudinale (L^2T^{-1})

D_{yz} = dispersion hydrodynamique transversale horizontal et vertical (L^2T^{-1})

K_d = coefficient de partition sol-eau (L^3M^{-1})

λ = facteur de dégradation biologique ou abiotique (T^{-1})

n = porosité efficace (-)

R = facteur de retard (-)

ρ_b = densité globale; masse totale (sèche) du matériel sur le volume total (ML^{-3})

t = temps (T)

$t_{1/2}$ = demi-vie (T)

v_i = Vitesse moyenne du composé i (LT^{-1})

v = Vitesse de l'eau souterraine dans la direction de l'écoulement (LT^{-1})

v_w = Vitesse moyenne de l'eau (LT^{-1})

x, y, z = coordonnées du système cartésien (L)

Il est à noter, que dans l'équation 4.9, la portion du contaminant qui s'adsorbe au sol ne se dégrade pas. Dans le logiciel FEFLOW, la direction d'écoulement est calculée à chaque nœud du maillage, donc le calcul de la dispersivité tient compte de la direction d'écoulement qui n'est pas nécessairement aligné avec les axes des coordonnées cartésiennes.

La modélisation numérique permet d'évaluer le flux de masse (ITRC, 2010) en utilisant les équations 4.12 et 4.13 :

$$J = q_o \cdot C = -K \cdot i \cdot C$$

Équation 4.102

$$M_d = \int_0^A J dA$$

Équation 4.13

avec,

A = aire d'une coupe du panache de contamination (L^2)

C = concentration d'un composé (ML^{-3})

i = gradient hydraulique (L^{-1})

J = flux de masse du contaminant variable dans l'espace ($\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$)

K = conductivité hydraulique saturée (LT^{-1})

M_d = masse de contaminant qui décharge (MT^{-1})

q_o = flux de Darcy des eaux souterraines ($\text{L}^3\text{L}^{-2}\text{T}^{-1}$)

L'intégration des flux de masse sur l'aire d'une coupe du panache de contamination permet de calculer la masse de contaminant qui y transite. Cette quantité peut être évaluée à différents moments, ce qui permet d'évaluer l'évolution de l'intensité du relargage des contaminants. En comparant le flux de masse simulé à celui mesuré au profil de puits d'observation de la ligne des Z (planche H), il est possible de mieux estimer le flux de relargage de contaminants dissous à partir de la zone source.

4.2.3 Dégradation

Dans l'environnement, certains composés organiques peuvent se dégrader par l'action de bactéries (dégradation biotique) et/ou par l'échange ionique avec certains minéraux (dégradation abiotique). Les réactions de dégradation peuvent se produire sous différentes conditions oxydantes ou réductrices (e.g. bactéries aérobies, réductrice de sulfate, ou méthanogènes en sont des exemples). Au site des anciennes lagunes de Mercier, des réactions de dégradation sont présentes et doivent être considérées dans le cadre des simulations du transport. Les composés organochlorés tels que le trichloroéthylène (TCE) et le 1,2-dichloroéthane (1,2-DCA) sont présents au site des anciennes lagunes de Mercier. Ces composés et leurs sous-produits de dégradation sont présentés aux figures 4.1 et 4.2 (EPA, 2004).

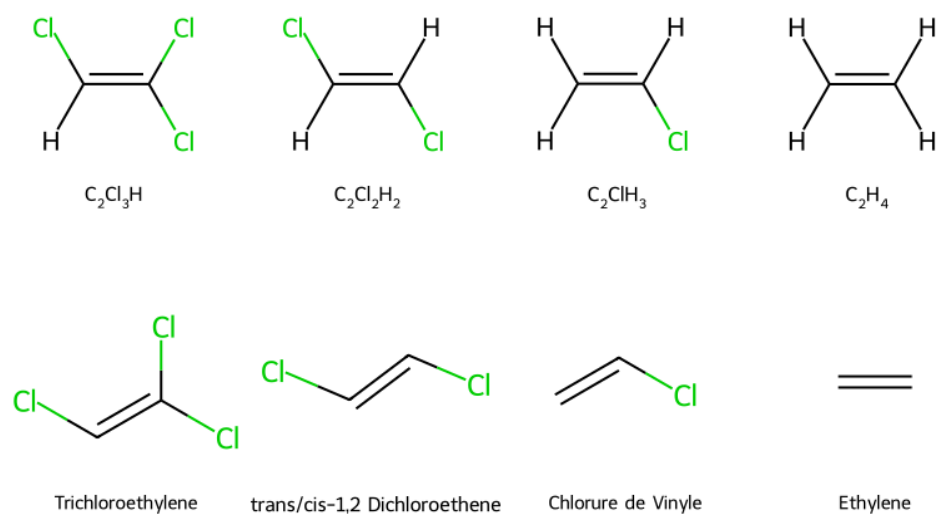


Figure 4.1 Sous-produits de dégradation du TCE (Trichloroéthane)

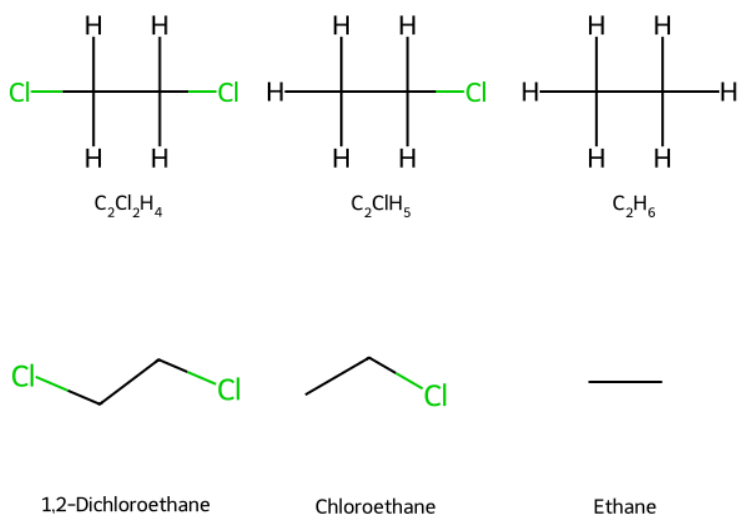


Figure 4.2 Sous-produits de dégradation du 1,2-DCA (1,2-Dichloroéthane)

Les réactions cinétiques de dégradation peuvent être simulées par plusieurs méthodes dans le logiciel FEFLOW. Les méthodes générales sont les suivantes : linéaire, Arrhenius, et Monod. La figure 4.3 illustre de manière schématique la vitesse de dégradation en fonction de la concentration d'un composé pour ces trois méthodes.

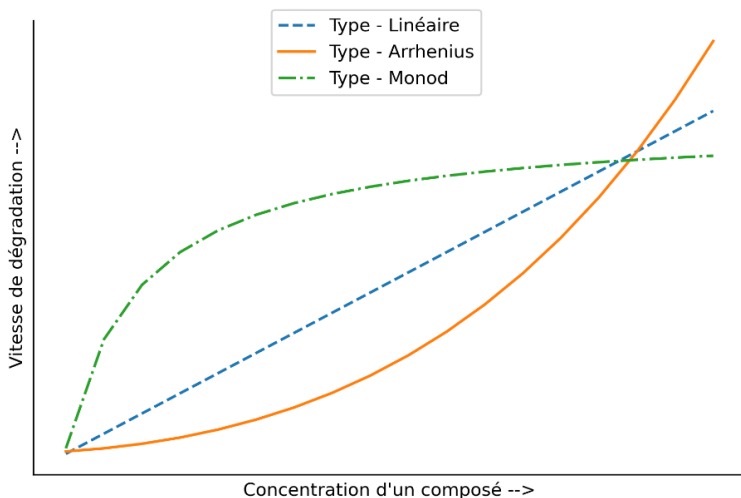


Figure 4.3 Schématisation de la vitesse de dégradation en fonction de la concentration d'un composé pour les méthodes générales de réactions cinétiques

Dans le cadre de ce mémoire, une dégradation de premier ordre a été utilisée (Newell et al., 2002) et définie par l'utilisateur dans FEFLOW. Les équations permettent de calculer les coefficients de dégradation (i.e. coefficient cinétique) des différentes réactions de dégradation d'un composé en sous-produits. Dans le cas de la réaction de déchloration du solvant chloré TCE, de la famille des hydrocarbures aliphatique chlorés éthyléniques, le premier sous-produit de dégradation à la suite de la libération d'un atome de chlore et d'hydrogène est le dichloroéthylène (DCE) avec l'isomérisie cis- ou trans-. Le DCE se dégrade en chlorure de vinyle (CV) et finalement du CV en éthène. Il est à noter que lorsqu'il y a la perte d'un atome de chlore et d'hydrogène, la masse moléculaire du sous-produit est moindre et donc une constante de correction représentant le ratio des masses moléculaires et utilisé dans les formules de réaction pour calculer les contenus massiques (e.g. concentration) des sous-produits. Par exemple, la masse molaire du TCE et du DCE est de 131.4 et 96.9 g/mol, respectivement. Par conséquent, une mole de TCE donne approximativement un facteur de conversion de 0.737 entre la concentration du composé TCE et de son sous-produit le DCE. Ces valeurs sont équivalentes à celles utilisées dans le logiciel BIOCHLOR (Aziz et al., 2000) présentées au tableau 4.1.

Tableau 4.1 Facteurs de conversion des contenus massiques entre sous-produits de dégradation (Aziz et al., 2000)

Famille	Paramètre	Constante de correction (rapport des masses molaires)
Éthène	DCE/TCE	0.737
	CV/DCE	0.645
	ETH/CV	0.450
Éthane	CA/DCA	0.652
	ETHA/CA	0.465

4.2.4 Adsorption

L'adsorption est le phénomène qui survient lorsqu'un atome ou une molécule se fixe à la surface du sol. Le coefficient d'adsorption ou partition sol-eau est calculé à partir de l'équation suivante :

$$K_{Henry} = K_d \times \rho_s \quad \text{Équation 4.14}$$

avec,

K_{Henry} = coefficient d'adsorption Henry dans le logiciel FEFLOW (-)

ρ_s = densité spécifique des solides (ML^{-3})

K_d = coefficient de partition sol-eau (L^3M^{-1})

4.2.5 Méthodes d'ensemble et assimilation de données

La méthode d'assimilation séquentielle par filtre de Kalman (i.e. *Ensemble Kalman Filter* : EnKF) a été introduite par Evensen dans les années 1990 (Evensen, 1994). Bien que cette méthode soit performante, l'une de ses limitations est qu'elle assimile les données au temps présent de façon séquentielle, et donc, la méthode exige le redémarrage des simulations à chaque intervalle de temps afin d'assimiler successivement les nouvelles observations. Le redémarrage est essentiel, puisqu'à l'étape de mise à jour, le gain de Kalman perturbe la valeur des variables d'états (i.e. les conductivités hydrauliques et coefficients d'emménagement). En hydrogéologie,

les variables d'états doivent demeurer constantes au fil du temps, ce qui n'est donc pas cohérent avec l'état du système.

Les méthodes de lissage (i.e. *Ensemble Smoother* : ES) n'ont pas cette contrainte, puisqu'elles tiennent compte de l'ensemble des observations disponibles simultanément, donc les variables d'états demeurent constante en fonction du temps (van Leeuwen and Evensen, 1996). La forme itérative permet de répéter à plusieurs reprises l'algorithme d'assimilation par lissage d'ensemble (*iterative Ensemble Smoother* : iES). Finalement, l'article de Chen et Oliver (Chen and Oliver, 2012) décrit l'amélioration de l'algorithme *Gauss-Newton* itératif, par l'utilisation d'une méthode de régularisation d'inversion *Levenberg-Marquardt* (GLM) et le maximum de vraisemblance randomisé d'ensemble (LM-EnRML). L'algorithme LM-EnRML a été intégré dans le logiciel d'assimilation de données PEST++ (*Parameter ESTimation* ++) grâce au travail de Jeremy White (White, 2018) et est utilisé dans le cadre de ce mémoire.

L'algorithme d'inversion a pour objectif de minimiser l'erreur entre les données mesurées et simulées. Le processus d'inversion est donc un processus de régression linéaire des moindres carrés entre les données mesurées et simulées sous la forme de l'équation 4.15.

$$y = X\beta + \epsilon \quad \text{Équation 4.15}$$

avec,

y = vecteur des observations $(y_1, \dots, y_n)^T$

X = matrice Jacobienne, dérivée partielle de la variation des observations sur les paramètres $(X_{ij} = \frac{\partial y_i}{\partial \beta_j})$

β = vecteur des paramètres $(\beta_1, \dots, \beta_m)^T$

ϵ = bruit sur les observations

La forme de l'algorithme GLM et celle de lissage d'ensemble sont présentés aux équations 4.16 et 4.17, respectivement. L'une des différences principales est qu'au lieu de minimiser la fonction objective sur un vecteur (1 réalisation), une matrice est utilisée (N_e nombre de réalisations de l'ensemble). Pour plus d'information sur la dérivation des équations, voir (Fienen et al., 2024).

$$\hat{\beta}_{i+1} = \hat{\beta}_i + (X^T Q X + \lambda \text{diag}(X^T Q X))^{-1} X^T Q (y - f(\beta_0)) \quad \text{Équation 4.16}$$

avec,

$\hat{\beta}_i$ = vecteur des paramètres calibrés de l'itération précédente qui minimise la différence entre les observations mesurées et simulées

$\hat{\beta}_{i+1}$ = vecteur des paramètres calibrés de l'itération présente

$f(\beta_0)$ = Fonction non-linéaire du vecteur des paramètres

Q = matrice des poids des observations, vecteur transposé des poids multiplié par une matrice identité

$\lambda \text{diag}(X^T Q X)$ = L'approche de Marquardt qui multiplie λ par la diagonale de $X^T Q X$ au lieu de l'approche Levenberg qui utilise une matrice identité

X = matrice jacobienne

y = vecteur des observations

$$\hat{\beta}_{i+1} = \hat{\beta}_i + (X_{emp}^T Q X_{emp} + \lambda \text{diag}(X_{emp}^T X_{emp}))^{-1} X_{emp}^T Q (y - X_{emp} \hat{\beta}_i) \quad \text{Équation 4.17}$$

$$X_{emp} = \frac{\partial y_{emp}}{\partial \beta_{emp}} = \frac{(Y - \bar{Y}) / \sqrt{N_e - 1}}{(B - \bar{B}) / \sqrt{N_e - 1}} \quad \text{Équation 4.18}$$

avec,

X_{emp} = matrice jacobienne empirique

$X_{emp} \hat{\beta}_i$ = action de l'ensemble

B = Paramètres de l'ensemble

\bar{B} = Moyenne des paramètres pour l'ensemble

Y = Observations simulées

\bar{Y} = Moyenne des observations simulées pour l'ensemble

N_e = Nombre de réalisation dans l'ensemble

L'un des atouts majeurs de cette méthode est qu'elle combine l'estimation des paramètres et la quantification de l'incertitude, tout en réduisant significativement le fardeau de calcul qui n'est plus proportionnel au nombre de paramètres à estimer. En effet, en utilisant une matrice jacobienne empirique, il est possible de prendre un sous-ensemble du nombre total de réalisations de l'ensemble pour le calcul, et par conséquent, il n'est pas nécessaire de faire une simulation pour chaque paramètre ajustable, ce qui réduit significativement le temps de calcul comparativement aux méthodes traditionnelles d'inversion. Le résultat de l'inversion est donc un ensemble de paramètres calibrés qui donne des prédictions équiprobables. Ces prédictions

équiprobables permettent de quantifier l'incertitude grâce à la variabilité entre elles pour un scénario donné.

À même les équations de l'algorithme iES d'inversion, le bruit des observations est considéré. Toutefois, dans le cadre de la modélisation numérique, il existe deux principales sources de bruit entre les valeurs mesurées et simulées (Fienen et al., 2024). La première source est intrinsèque aux prises de mesures sur le terrain. Celle-ci ne peut pas être réduite par le modèle numérique, car le bruit est indépendant au modèle. La seconde source de bruit est reliée à l'incertitude épistémique qui provient d'un manque d'observations afin d'informer l'ensemble des paramètres ajustables dans le modèle numérique. Dans ce cas, l'incertitude épistémique peut être réduite par la collecte de données de terrain additionnelles. Lors d'étude de modélisation numérique, il est impossible de différencier entre ces sources de bruit, c'est pourquoi un seul terme est considéré dans les algorithmes d'inversion pour représenter le bruit. Néanmoins, les travaux de modélisation doivent toujours tenir en compte ces deux principales sources de bruit dans l'évaluation de la performance du modèle.

L'algorithme iES permet de dissocier le bruit sur les observations et le poids des observations. En effet y et Q dans l'équation 4.17 sont indépendants et donc ne doivent pas obligatoirement être égaux. Toutefois, le bruit sur les observations est généré automatiquement par PESTPP-iES en utilisant les poids assignés aux observations. En effet, l'algorithme considère le bruit étant égale à l'inverse du poids, et le poids est considéré comme représentant l'écart-type du bruit sur les observations. Fienen et al. (2024) ont démontré que si le bruit sur les observations est faible, l'ensemble des paramètres tend à s'effondrer (Fienen et al., 2024).

Pour sa part, le poids des observations (i.e Q) est utilisé dans le processus d'inversion pour varier l'importance des observations entre elles (i.e. entre les groupes d'observations) et par conséquent contrôler la surface multidimensionnelle de la fonction objective dans l'expression $X^T Q X$. Dans le cas où différents types d'observations ayant plusieurs ordres de grandeurs (i.e.

charges hydrauliques et concentrations d'un contaminant), le poids entre les groupes d'observations devient critique ou bon déroulement de l'inversion.

En résumé, le bruit et le poids des observations sont deux concepts différents et la pondération de ces derniers devrait être évaluée indépendamment.

4.3 Analyse décisionnelle multicritère

L'analyse décisionnelle multicritère est une méthode de calcul qui permet d'évaluer de manière explicite plusieurs critères de décision qui peuvent être conflictuels, afin de choisir la solution optimale. Ce type d'analyse peut être considéré comme un outil d'aide à la décision dans le cadre de la gestion à long terme d'un site contaminée. Le choix et la pondération des différents critères de décision sont une étape déterminante dans ce processus et doivent être alignés avec les objectifs visés par l'analyse décisionnelle.

Plusieurs grandes familles de méthodes d'analyse multicritère existent, mais pour les besoins de cette étude, la méthode *Technique for Order of Preference by Similarity to Ideal Solution* (TOPSIS) a été retenue. Elle consiste à comparer un ensemble de scénarios (i.e. alternatives) sur plusieurs critères prédéfinis. La librairie python *pymcdc* a été utilisée dans cette étude (Kizielewicz et al., 2023). L'algorithme peut être résumé par les étapes et équations suivantes :

- 1) Créer la matrice d'évaluation. Cette matrice est composée de M alternatives par N critères.

$$(a_{ij})_{M \times N} \quad \text{Équation 4.119}$$

- 2) Normaliser la matrice d'évaluation pour chacune des alternatives.

$$\alpha_{ij} = \frac{a_{ij}}{\sqrt{\sum_{i=1}^M (a_{ij})^2}} \quad \text{Équation 4.20}$$

- 3) Calculer la matrice d'évaluation normalisée et pondérée. La somme des poids (ω_j) est égale à 1 suite à la normalisation.

$$\beta_{ij} = \alpha_{ij} * \omega_j \quad \text{Équation 4.21}$$

$$\omega_j = \frac{\omega_j}{\sum_{j=1}^N \omega_j} \quad \text{Équation 4.22}$$

- 4) Définir les valeurs limites pour chacun des critères (i.e. meilleur [$b = best$] et pire [$w = worst$])

$$\beta_j^b = \max_{i=1}^M \beta_{ij} \quad \text{Équation 4.23}$$

$$\beta_j^w = \min_{i=1}^M \beta_{ij} \quad \text{Équation 4.24}$$

- 5) Calculer les distances euclidiennes entre la valeur et les limites de chaque critère.

$$d_i^b = \sqrt{\sum_{j=1}^N (\beta_{ij} - \beta_j^b)^2} \quad \text{Équation 4.25}$$

$$d_i^w = \sqrt{\sum_{j=1}^N (\beta_{ij} - \beta_j^w)^2} \quad \text{Équation 4.12}$$

- 6) Calculer le résultat de similarité de chacune des alternatives à la meilleure et la pire alternative. La distance maximale relative aux valeurs limites représentant le pire résultat est une valeur de 1.0, ce qui est indicateur de l'alternative optimale.

$$s_i = \frac{d_i^w}{d_i^w + d_i^b} \quad \text{Équation 4.13}$$

La pondération des différents critères de décision est une étape déterminante dans le processus de l'analyse décisionnelle. Afin d'évaluer l'effet de la méthode de pondération des critères dans l'analyse TOPSIS sur le rang des différents scénarios prédictifs, un total de 11 méthodes ont été utilisées (Bączkiewicz and Wątróbski, 2023; Wątróbski et al., 2022). Une liste de ces méthodes est présentée ci-dessous :

- EQUAL : Poids égaux assignés à tous les critères.
- ENTROPY : Normalisation par le degré d'importance en utilisant les valeurs absolues transformées par le logarithme décimal. Cette méthode reflète la structure des données et le degré d'hétérogénéité entre les valeurs.
- STD : Écart-type divisé par la somme des poids
- CRITIC (*Criteria Importance Through Intercriteria Correlation*) : Méthode qui accentue les différences entre les critères en tenant compte de l'écart-type et les coefficients de corrélations entre les critères.
- GINI : Coefficient de Gini qui exprime la variabilité des valeurs pour chaque critère.
- MEREC (*Method based on the Removal Effects of Criteria*) : Méthode qui détermine le poids des critères basé sur la variabilité des valeurs. Plus de poids est assigné à une plus grande variabilité.
- STAT VAR : Variance statistique.
- CILOS (*Criteria Impact Loss*) : Méthode qui tient en compte de l'impact d'exclusion des critères.
- IDOCRIW (*Integrated Determination of Objective CRiteria Weights*) : Méthode qui intègre les méthodes ENTROPY et CILOS, ce qui augmente la précision et fiabilité des résultats.
- ANGLE : Poids angulaire. Le poids des valeurs similaires est faible, tandis que le poids est élevé pour les valeurs différentes.
- COEFF VAR : Coefficient de variance qui représente le ratio de l'écart-type sur la moyenne.

Afin d'évaluer systématiquement l'effet de la méthode de pondération des critères dans l'analyse TOPSIS sur le classement des différents scénarios prédictifs, ces 11 méthodes ont été utilisés. La distribution des poids pour chacune de ces méthodes est présentée à la figure 4.4. On constate que certaines méthodes sont similaires à une pondération égale (EQUAL, CRITIC, STAT VAR),

tandis que d'autres méthodes mettent de l'emphase sur des certains critères (Ec3 [ENTROPY, GINI, MEREC, IDOCRIW, COEFF VAR], Ev5 [CILOS]).

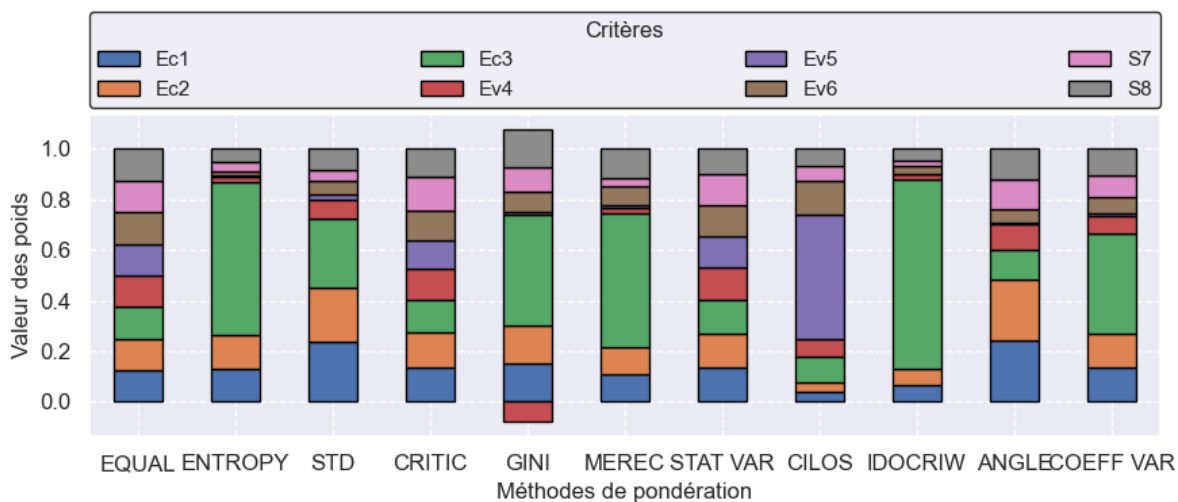


Figure 4.4 Distribution des poids pour chacune des méthodes de pondération

4.4 Évaluation des scénarios prédictifs (alternatives)

À la suite de l'assimilation des données sur la qualité des eaux souterraines, l'ensemble de réalisations permettront d'évaluer de manière quantitative la performance des différents scénarios prédictifs. Les différents scénarios prédictifs ont été définis en partie pour les besoins de cette étude, les recommandations par l'INRS (Claprood et al., 2023) et l'étude sur les essais en laboratoire de l'efficacité du traitement thermique (Martel et al., 2021b). Plus spécifiquement, les scénarios sont les suivants :

- 1) Conditions d'écoulement des eaux souterraines sans contrôle hydraulique (SCH) :
Simulation hypothétique de transport des contaminants en régime d'écoulement naturel sans intervention humaine à la suite du déversement de contaminants depuis 1968. Ce scénario a été défini spécifiquement pour évaluer l'étendue hypothétique maximale de la contamination dissoute, si aucune mesure de gestion environnementale n'avait été prise suite à la contamination.

- 2) Contrôle hydraulique – scénario actuel (SA) : Simulation représentative de l'historique des conditions hydrauliques, soit l'utilisation d'eau souterraine par l'incinérateur jusqu'à son arrêt et l'UTES qui est en opération depuis 1984. Un débit moyen journalier de 3,600 m³/jour de l'UTES a été simulé pour la période de prédiction.
 - a. Puits de l'UTES en fonction à un débit de 3,600 m³/jour entre 1984 et 2060
- 3) Contrôle hydraulique – scénario retenu pour l'UTES-II (Claprood et al., 2023) (SRD) : Scénario SA avec une diminution du débit moyen journalier de l'UTES à 1,800 m³/jour débutant en 2025 pour la période de prédiction.
 - a. Puits de l'UTES en fonction à un débit de 3,600 m³/jour entre 1984 et 2025
 - b. Puits de l'UTES en fonction à un débit de 1,800 m³/jour entre 2025 et 2060
- 4) Contrôle hydraulique – scénario retenu pour l'UTES-II avec réhabilitation partielle de la zone source (SRDT) : Scénario identique au scénario SRD, mais avec une réhabilitation partielle de la zone source. La réhabilitation partielle consiste à éliminer verticalement la contamination existante dans les dépôts de l'esker sous l'étendue des anciennes lagunes. La contamination résiduelle présente dans le roc demeure intacte et les zones où le panache de LIL et LID est présent en dehors de l'étendue des anciennes lagunes demeure une source active.
 - a. Puits de l'UTES en fonction à un débit de 3,600 m³/jour entre 1984 et 2025
 - b. Puits de l'UTES en fonction à un débit de 1,800 m³/jour entre 2025 et 2060
 - c. Dans la zone source, enlèvement de 100% de la masse résiduelle et des conditions aux limites pour le benzène dans les dépôts meubles. L'hypothèse est que la réhabilitation partielle est efficace à 100% pour le 1,2-DCA et le benzène.

Les composés chimiques retenus pour les simulations du transport sont le 1,2-DCA et le benzène. La revue des mesures de concentrations historiques de l'affluent et des puits d'observation, le

temps de simulation pour chaque réalisation de l'ensemble, et le nombre de scénarios prédictifs ont tous influencé le processus décisionnel du nombre de composés retenus.

4.5 Critères d'évaluation

Les critères d'évaluations ont été sélectionnés en tenant compte des conclusions de la meta-analyse faite par Abrams sur un total de 43 publications entre les années 1995 et 2020 portant sur les analyses multicritères appliquées sur des sites contaminés et la sélection de méthodes de réhabilitation (Abrams et al., 2024).

Le tableau 4.2 présente les différents critères retenus pour l'analyse multicritères.

Tableau 4.2 Critères d'évaluation

Classe	Paramètre	Description
Économique	Coûts d'opération UTES (sans électricité)	Le capital initial de construction de l'usine n'a pas été considéré. Estimé à partir des coûts entre la période de 2012 et 2024.
	Coût d'électricité	Estimé en fonction du débit de pompage et la puissance nécessaire des pompes submersibles et les coûts d'opération de l'UTES.
	Coût du traitement thermique	Estimé préliminaire basé sur le coût approximatif d'un projet pilote (Martel et al., 2025)
Environnementale	Flux de masse de 1,2-DCA aux conditions aux frontières – Rivière de l'Esturgeon	Le 1,2-DCA est le contaminant le plus persistant qui a été simulé. Sa quantité dans l'environnement, l'aire simulée de son panache dans les dépôts de l'esker et sa masse totale résiduelle ont été retenues.
	Aire simulée du panache de 1,2-DCA dans les dépôts de l'esker en l'an 2060	
	Masse totale résiduelle simulée de 1,2-DCA en l'an 2060 (>0.1 mg/L)	
Sociétale	Utilisation cumulative des eaux souterraines en l'an 2060	L'accessibilité à la ressource d'eau souterraine est un enjeu important pour les résidents de la région.
	Temps nécessaire pour un retour aux conditions naturelles	Les simulations numériques prédictives ont été contraintes de terminer en l'an 2060. Les résultats ne permettent pas de déterminer de manière quantitative le temps nécessaire au retour aux conditions naturelles. Par conséquent, ce critère est de nature qualitative.

L'ensemble des dimensions techniques (i.e. différents scénarios de réhabilitation), économiques, environnementales et sociales permettent de faire une comparaison quantitative des différents scénarios évalués.

Puisque la méthode d'ensemble génère plusieurs réalisations, chacun des scénarios simulés permet d'obtenir une distribution de résultats équiprobable au lieu d'obtenir une valeur unique ou déterministe. Par conséquent, pour chacun des critères, plusieurs valeurs peuvent être considérées. Afin de simplifier l'analyse multicritères, la moyenne des prédictions a été retenue.

Abrams et al. (2024) suggère également qu'une analyse d'incertitude et de sensibilité devrait être réalisée pour une plus grande transparence quant à la prise de décision de l'alternative optimale.

Un outil de visualisation a été construit afin que l'utilisateur puisse ajuster le poids des différents critères d'évaluations pour évaluer l'incertitude des rangs des différents scénarios.

5 RÉSULTATS

5.1 Composés du mélange de contaminants

Une caractérisation du profil de contamination dans les sols, boues, LIL, LID et eaux souterraines des anciennes lagunes de Mercier a été réalisée par le Gouvernement du Québec en 1998 (Couture, 1998).

Une liste sommaire des principaux contaminants présents au site pour les différentes familles de composés est présentée au tableau 5.1. Les contaminants susceptibles de faire l'objet de simulation du transport sont présentés dans ce tableau.

Tableau 5.1 Liste sommaire des principaux contaminants au site pour les différentes familles de composés

Famille de composés	Nom du Contaminant	Simulation du transport	Commentaire
Composés organiques volatils (COV)	Benzène 1,2-dichloroéthane cis-1,2-dichloroéthène	Oui	Solubilités varient entre 1,790 et 8,600 mg/L pour ces composés Simulation de la dégradation du TCE et TCA en sous-produits sera considérée.
Composés organiques semi-volatils (COSV)	bis2-chloroéthyle éther	Possible	Forte solubilité 10,200 mg/L
Solvants	1,4-dioxane	Possible	Peu ou pas retardé, donc traceur conservateur. Peu ou pas biodégradable.
Phénols	m-Crésol	Possible	Forte solubilité 22,700 mg/L
Hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP)(MELCC, 2023b, 2022, 2021, 2020a, 2019, 2018)	naphtalène	Non	Faible solubilité 31 mg/L.
Biphényles polychlorés (BPC)	IUPAC#16-39	Non	Trichlorobiphényles insolubles dans l'eau. Principalement sorbé aux sols.

La concentration totale en COV des échantillons de LIL et LID a été identifiée comme étant la fraction dominante par une importante marge variant de 71,000,000 à 510,000,000 µg/L dans les

lagunes et représentant entre 7 et 44% de la masse de contaminant organique. Tel qu'indiqué au tableau 5.1, le benzène et le 1,2-DCA ont été sélectionnés pour la simulation numérique dans la famille de COV, car ces deux composés présentent des durées de demi-vie très différentes, et donc, des comportements différents.

Les analyses de COV ont démontré une répartition relativement uniforme des échantillons de LNAPL (forages L-1-A, L-2-A et F-4) avec les trois composés prédominants étant le 1,1-DCE, 1,2-DCA et 1,1,2-TCA, représentant entre 85 à 89% des COV. Les échantillons de la grande lagune (forages L-7-A-EH, L-20-A-EH et F-9) avaient une plus grande variabilité dans la composition des COV avec le 1,1,2,2-PCE dominant. Les composés organiques semi-volatils, BPC, dioxines et furanes et métaux étaient présents en moins grande proportion que les COV.

Dans cette même étude, la genèse et composition chimique des boues est discutée. Les boues ont été formées par le dépôt après décantation de particules solides avec un aspect physique pâteuse et semi-solide. La composition des boues est principalement un mélange de HAP, phénols, BPC, phtalates et métaux. À la suite du remblayage des lagunes, ces composés se sont retrouvés enfouis dans les sols du site.

Plus récemment, l'INRS a récupéré des échantillons de LIL et LID dans cinq puits (F-110-A, MW-12, F-9, L-1-A et F-4) pour la caractérisation de leur composition dans le cadre de la mise en œuvre d'essais de laboratoire visant à vérifier l'applicabilité de la méthode de réhabilitation thermique dans les dépôts meubles contaminés de Mercier (Martel et al., 2023). Puisque des échantillons de ces trois puits avaient déjà fait l'objet d'une caractérisation en 1998, une comparaison de la composition des LIL et LID a pu être effectuée. Entre 1998 et 2021, la densité des liquides immiscibles a diminuée, la viscosité demeure inchangée, et la proportion de COV a diminuée passant de plus de 85% à moins de 8%. La densité, la viscosité et la composition chimique tendent à supporter l'hypothèse selon laquelle les LIL et LID subissent les effets d'une dégradation abiotique et/ou biotique, d'une solubilisation et d'une volatilisation des COV.

La composition des dix principaux composés présents dans le LIL du puits F-9 a été utilisée afin de simuler l'évolution temporelle des fractions de masse du mélange de contaminants en fonction de leur solubilité respective (tableau 5.2).

Tableau 5.2 Composition du liquide immiscible prélevé en 2021 au puits F-9

Composition du Liquide Immiscible	Fraction de masse		F-9 (LIL) (mg/kg)
Dichloro-1,2 éthane ou (1,2-DCA)	w1	0.06757	2100
Trichloro-1,1,2 éthane	w2	0.03539	1100
Tétrachloroéthène	w3	0.41828	13000
Trichloroéthène	w4	0.10940	3400
Toluène	w5	0.10618	3300
Xylènes (o,m,p)	w6	0.12870	4000
Dichloro-1,2 éthène (cis et trans)	w7	0.07079	2200
Chlorure de vinyle (chloroéthène)	w8	0.00676	210
Benzène	w9	0.02156	670
Éthylbenzène	w10	0.03539	1100

En utilisant les équations de solubilité effectives (équation 4.6), la figure 5.1 illustre la séquence théorique de l'évolution des fractions de masse des composés du mélange de contaminant. On peut y voir que le 1,2-DCA est le premier des composés à être dissous, ce qui est cohérent avec les concentrations des contaminants mesurées dans les eaux souterraines. Le chlorure de vinyle et le benzène arrivent en 4^{ième} et 5^{ième} position. Parmi les derniers composés à être solubilisés, on retrouve le toluène, l'éthylbenzène et les xylènes. Il est important de noter que les effets de volatilisation et de dégradation ne sont pas considérés dans ces calculs et donc, cette méthodologie surestime la quantité d'eau nécessaire afin de solubiliser entièrement les contaminants du mélange contenu dans le sol.

Toutefois, le fait que le 1,2-DCA est toujours présent dans l'affluent de l'UTES en 2024 est un indicateur du degré d'épuisement de la zone source est relativement faible. En effet, selon les résultats du modèle de solubilité (figure 5.1), la dissolution complète du 1,2-DCA est atteinte après plus de $1.44 \times 10^4 \text{ m}^3$, soit approximativement 10% du volume d'eau totale requis pour une

dissolution complète ($1.49 \times 10^5 \text{ m}^3$). Tel que mentionné précédemment, les processus de dégradation et volatilisation peuvent influencer grandement la longévité d'un panache de contamination dissous, par conséquent, ce simple modèle des solubilités effectives démontre clairement qu'après plus de cinquante ans suite à la contamination, le site n'est qu'au tout début d'un long processus naturel de dégradation.

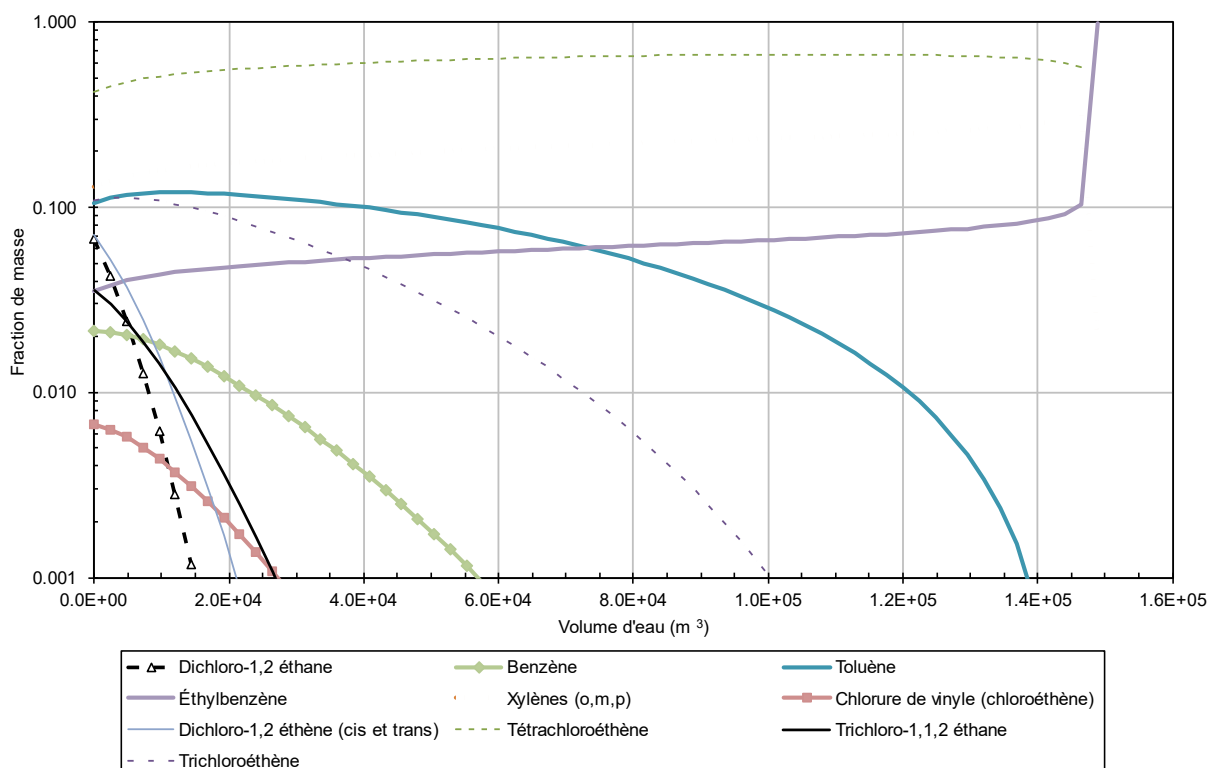


Figure 5.1 Évolution des fractions de masse par solubilisation du LIL au puits F-9

À la figure 5.1, les 10 composés principaux dans la composition du LIL à F-9 ont été utilisés afin de simuler l'évolution des fractions de masse dans 1 m^3 de sol contaminé en fonction du volume d'eau circulé.

En ce qui a trait à la qualité des eaux souterraines à l'UTES, il y a présentement trois types de suivi. Le premier est un suivi mensuel de la qualité de l'affluent de l'UTES avec une batterie complète d'analyse des contaminants. Le second suivi est effectué deux fois par an et fait partie

grâce au programme de suivi des eaux souterraines de la région de Mercier, qui a pour objectif de suivre l'évolution spatiale et temporelle des concentrations des paramètres indicateurs associés à la contamination des anciennes lagunes (MELCC, 2023b, 2022, 2021, 2020a, 2019, 2018). Ce programme a également pour objectif de maintenir une ceinture d'alerte autour du puits municipal de Sainte-Martine, advenant une remise en fonction du prélèvement d'eau souterraine pour l'alimentation en eau potable. Finalement, le troisième suivi est celui de la Ligne des Z (planche H ; 15 puits d'observation), qui est un profil au sud des lagunes pour lequel quelques campagnes d'échantillonnage ont été réalisées afin d'évaluer la qualité d'eau ainsi que le flux de masse des contaminants issus des anciennes lagunes dissous transitant dans l'esker.

Trois des principaux paramètres indicateurs du programme de suivi de la qualité des eaux souterraines de la région de Mercier sont le 1,2-DCA, le benzène et le CV. Ces composés semblent être de bons indicateurs de la qualité des eaux souterraines par rapport au stade de maturité de la solubilisation de la zone source. Un exemple de rapport sur le suivi de la qualité des eaux souterraines du MELCC est présenté à la planche C pour l'année 2021. Les résultats historiques des suivis de la qualité des eaux souterraines avec ceux de l'affluent de l'UTES ont été compilés et sont présentés à la planche D. On peut voir les informations suivantes à la planche D:

- De manière générale, la concentration des indicateurs tend à diminuer avec le temps. Cette observation est supportée par des analyses de tendances avec des tests de Mann-Kendall (MELCC, 2022).
- Le chlorure de vinyle (CV) :
 - Il est présent dans les puits crépinés au roc PO-94-6R et PO-95-7R pratiquement dans tous les échantillons prélevés au cours des dernières années à des concentrations variant entre 2.0 et 5.0 µg/L.

- Il est présent dans les puits crépinés au roc 03097201 et 5M81-B. De fortes variations des concentrations mesurées sont notées et potentiellement liées aux périodes d'arrêt des puits de l'UTES (années 2006 et 2014 plus particulièrement).
- Les concentrations sont faibles dans les puits d'observation PO-21-5S et P-27 crépinés dans l'esker en comparaison des puits PO-94-6R et PO-94-7R crépinés dans le roc.
- Les concentrations au puits PO-94-1S sont à la baisse depuis quelques années.
- Les concentrations à l'affluent de l'UTES sont généralement stables autour de 35 µg/L au cours des dernières années.
- Le benzène :
 - Des concentrations supérieures au critère pour l'eau de consommation sont mesurées uniquement dans l'affluent de l'UTES et le puits d'observation PO-94-1S.
 - La concentration dans l'affluent de l'UTES est relativement stable depuis les années 1990, avec une moyenne de 80 µg/L.
- Le 1,2-DCA:
 - Des concentrations supérieures au critère pour l'eau de consommation sont mesurées presque uniquement dans l'affluent de l'UTES et le puits d'observation PO-94-1S.
 - La concentration dans l'affluent décroît continuellement depuis la mise en fonction de l'usine. Depuis quelques années, la concentration moyenne est approximativement équivalente au critère pour l'eau de consommation de 5.0 µg/L.
 - Il est présent dans les puits crépinés au roc 03097201 et 5M81-B. De fortes variations des concentrations mesurées sont notées et potentiellement liées aux périodes d'arrêt des puits de l'UTES (années 2006 et 2014 plus particulièrement).

Le CV qui se retrouve dans l'environnement peut être produit par la dégradation biologique ou abiotique en condition anaérobie de substances chlorées comme le 1,2-DCA, le TCA, ou le TCE. À 20°C, le CV est sous forme gazeuse, et s'il est dissous dans l'eau souterraine, il se volatilise rapidement et s'adsorbe faiblement sur la matière organique. En condition anaérobie dans l'eau souterraine, le temps de demi-vie est estimé à 57.2 années, mais estimé à moins de 7.7 années en condition aérobie. Il s'agit d'un bon paramètre indicateur que le processus naturel de dégradation des contaminants s'effectue sans l'intervention humaine, ce qui est aussi confirmé par l'évolution de la composition des LIL et LID entre 1998 et 2021.

Finalement, les résultats de qualité des eaux souterraines de la Ligne des Z pour les campagnes de 1995 et 2022 ont été utilisés afin d'estimer le flux de masse du 1,2-DCA et le comparer aux résultats de suivi de l'affluent de l'UTES. Les résultats de cette analyse sont présentés sur la planche H. Le logarithme décimal des conductivités hydrauliques et des concentrations mesurées aux 15 puits d'observation a été utilisé pour l'interpolation des valeurs sur une grille régulière de 5 m latéral par 2 m vertical sur le plan du profil. Les flux de masse ont été calculés en utilisant le gradient hydraulique moyen observé dans l'esker de 0.003 m/m. Le flux de masse de 1,2-DCA en 1995 a été estimé à 1,226 kg/an et à 3 kg/an en 2022. Lorsqu'on compare ces valeurs au flux de masse de l'affluent de l'UTES, qui a été calculé par le produit des débits et des concentrations mesurés, on voit que les résultats sont similaires. Ce résultat démontre clairement que le flux de masse qui passe dans l'esker au niveau du profil de la ligne des Z est récupéré par les puits de l'UTES. Les résultats démontrent également que le flux de masse de 1,2-DCA décroît progressivement depuis la mise en fonction de l'UTES.

5.2 Modèles numériques hydrogéologiques

Historiquement, au moins deux modèles numériques d'écoulement et/ou de transport de contaminants ont été développés au site des anciennes lagunes de Mercier. Le tableau 5.3

résume les principales caractéristiques des modèles et la figure 5.2 présente leurs limites géographiques.

Tableau 5.3 Sommaire des études de modélisation numérique au site des anciennes lagunes de Mercier

Étude	Écoulement	Transport
(Claprood et al., 2023)	Modèle régional FEFLOW (3D) en régime permanent. Validation du modèle en régime transitoire. Ensemble stochastique des paramètres reliés à l'écoulement.	Utilisation du traçage de particules pour évaluer l'efficacité du piège hydraulique selon différents scénarios.
(Pontlevoy 2004)	Modèle régional MODFLOW (2D) en régime permanent et transitoire.	Modèle local FRAC3DVS (3D) et transport simplifié de contaminant pour une période de 20 ans en régime d'écoulement permanent.

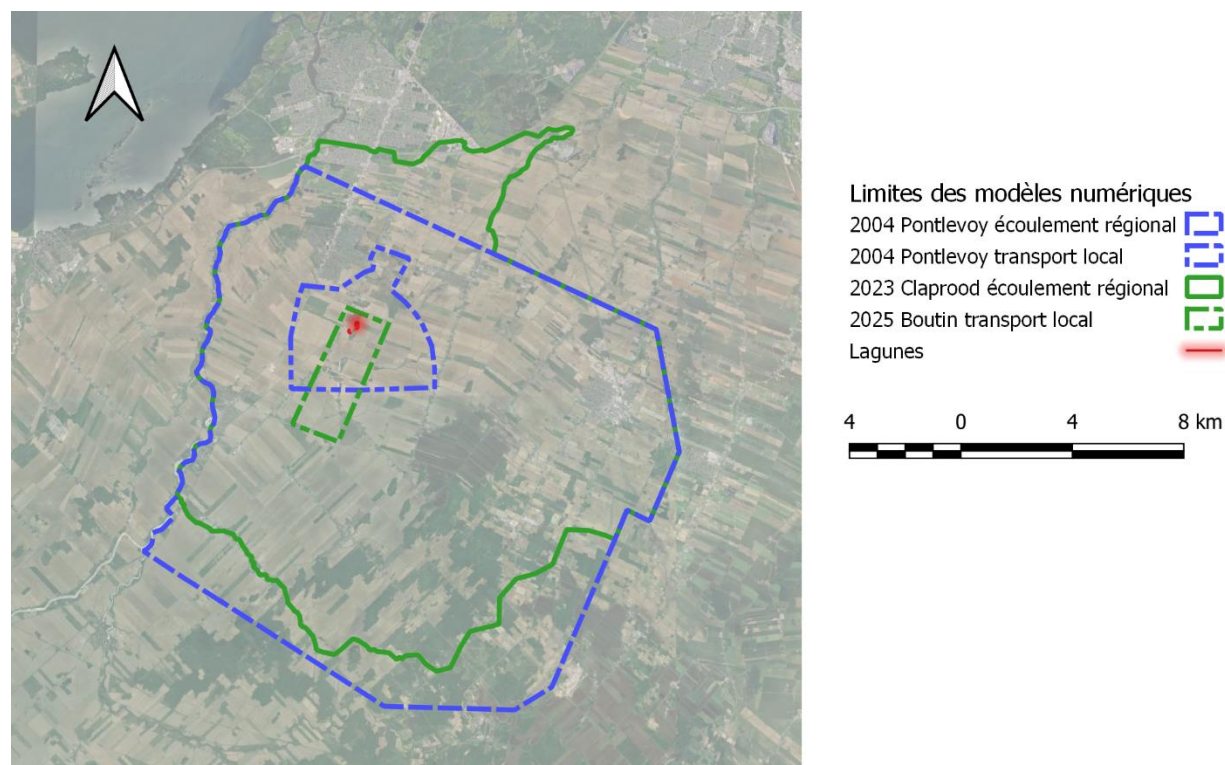


Figure 5.2 Limites des modèles numériques d'écoulement et de transport utilisés au site des anciennes lagunes de Mercier

5.2.1 Modèle régional d'écoulement

Le modèle régional et son ensemble de réalisations stochastiques publiés par l'INRS (Claprood et al., 2023) ont été utilisés afin de développer un modèle local de transport de contaminants. Le modèle régional a été construit à partir du modèle conceptuel hydrogéologique le plus récent, développé en considérant les résultats des dernières campagnes de caractérisation hydrogéologique. Les données suivantes ont été considérées :

- Le système d'information hydrogéologique (SIH);
- Rapports, thèses de doctorat et mémoire de maîtrise traitant du site de Mercier;
- Interprétation des données de sismique réflexion haute résolution acquises par la Commission Géologique du Canada (CGC) (Tremblay et al., 2010);
- Chroniques temporelles d'observations des niveaux d'eau du réseau du MELCCFP;
- Entre 2019 et 2021, quatre campagnes d'acquisition de données hydrogéologiques :
 - Sismique réflexion
 - Forages
 - Diagraphies géophysiques
 - Essais de perméabilité multi-niveaux

La superficie du modèle régional est de 226 km², soit approximativement 18 km x 19.5 km, avec une épaisseur moyenne de 56.6 m. Le modèle est composé de 36 couches avec un nombre de nœuds par couche de 57 257, pour un total de 2 061 252 nœuds (Planche I). La discrétisation verticale du modèle a été complétée afin de représenter les différentes structures des unités hydrostratigraphiques.

Une valeur unique de conductivité hydraulique a été assignée aux unités suivantes : remblai organique, argile, till et le roc sain. Un ratio constant entre la conductivité verticale et horizontale a été assigné à chacune des unités.

L'interpolation par krigeage par l'approche des points-pilotes a été utilisée dans l'unité du roc (2D), et localement dans l'unité du till à l'emplacement des fenêtres au roc (2D). La méthode des bandes tournantes a été utilisée pour la simulation stochastique des propriétés des hydrofaciès F1 Esker et F2 sable et gravier (3D).

Les conditions aux frontières respectent les principaux éléments drainant l'eau de surface de la région à l'étude; la rivière Châteauguay (ouest) et la rivière des Fèves (sud). La ligne de partage des eaux souterraines (ouest) et la forme de l'esker (nord) forment les deux autres limites du modèle régionale.

La recharge effective obtenue lors des travaux de caractérisation complémentaire pour la modélisation de l'écoulement des eaux souterraines à Mercier a été imposée au modèle régional (Ballard et al., 2021). Elle a été fixée lors de l'étape de calibration des paramètres hydrogéologique du modèle d'écoulement.

La calibration des paramètres hydrogéologiques du modèle déterministe régional a été initialisée en utilisant le logiciel PESTPP-GLM (White et al., 2020), avec des observations de niveaux d'eau (total de 969 points de mesure) et des points de contrôle représentant l'élévation du niveau du sol sur une grille régulière (total de 111 points de mesure) afin de s'assurer que les niveaux d'eaux simulés ne dépassent pas l'élévation du sol.

Dans un second temps, les variabilités horizontale et verticale des conductivités hydrauliques dans les hydrofaciès till, F1 Esker, F2 sable et gravier et le roc ont été évaluées en utilisant l'assimilation de données par la méthode de lissage d'ensemble. Les chroniques temporelles (i.e. données de rabattement) lors de deux essais de pompage au site ont été ajoutés aux observations afin de contraindre d'avantage les paramètres hydrauliques (total de 5 645 points de mesures en mode transitoire). Le coefficient d'emmagasinement des unités hydrostratigraphiques a également été estimé lors de cette phase de calibration. Une valeur unique a été estimée pour chacune des unités.

L'ensemble de départ de la méthode d'assimilation (200 réalisations) a été construit en utilisant les résultats de calage du modèle déterministe pour les paramètres avec une valeur unique et en utilisant les méthodes géostatistiques des bandes tournantes et de krigeage.

Les paramètres hydrauliques mis à jour après l'assimilation des données constituent donc l'ensemble de départ pour l'assimilation des chroniques temporelles de la qualité d'eau dans les simulations du transport des contaminants.

L'objectif de cette section est de fournir un aperçu sommaire de l'architecture du modèle régional. Pour de plus amples informations sur ce modèle, le lecteur est invité à consulter le rapport complet (Claprood et al., 2023).

5.2.2 Modèle local du transport des contaminants

L'orientation et la superficie du modèle local du transport des contaminants ont été sélectionnés de manière à :

- Minimiser le volume du modèle;
- Couvrir une étendue latérale optimale des dépôts de sable et gravier de l'esker;
- Maximiser la densité des nœuds et des éléments afin de minimiser la dispersion numérique;
- Minimiser le temps de calcul; et,
- Minimiser l'erreur de convergence des concentrations simulées en utilisant un maillage optimal.

La superficie du modèle local est de 7.8 km^2 , soit approximativement $3.4 \text{ km} \times 4.8 \text{ km}$, avec une épaisseur moyenne de 33.2 m. Le modèle est composé de 32 couches avec un nombre de nœuds par couche de 68 045, pour un total de 2 177 440 nœuds (planche I). Au lieu d'utiliser des éléments triangulaires, une maille rectangulaire (i.e. hexaèdre) favorisant l'uniformité et des angles droits à chacune des cellules a été choisie. Les éléments de la maille ont une taille de

10.5 m x 11.0 m avec une épaisseur variable suivant généralement la discrétisation verticale du modèle régional (planche I). Le volume des cellules varie entre 18.4 et 966.1 m³ avec un volume moyen de 123.7 m³. La distribution du volume des cellules est présentée à la figure 5.3.

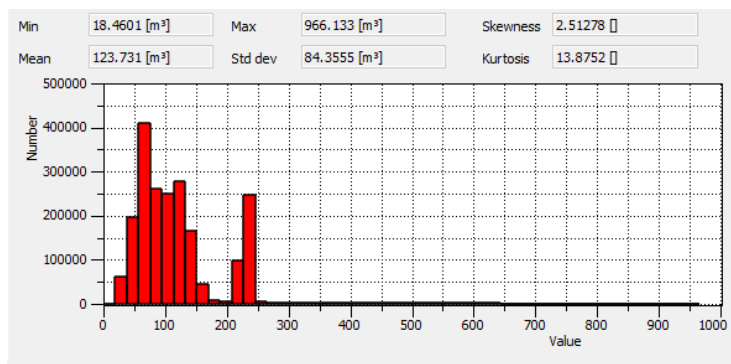


Figure 5.3 Statistiques du volume des cellules utilisés dans le modèle numérique local du transport des contaminants

Il est reconnu que le choix des limites du modèle et du maillage est très important et plusieurs options ont été évaluées. Les limites du modèle de transport de Pontlevoy (2004) sont idéales pour évaluer le transport dans les dépôts de l'esker ainsi que le roc fracturé, car les directions d'écoulement sont vers le sud pour l'esker et vers l'ouest pour le roc fracturé. Toutefois, les résultats de Pontlevoy démontrent que le flux de masse de contaminants se retrouve principalement dans l'esker. Considérant les bénéfices d'avoir une maille rectilinéaire pour le transport des contaminants, une forme rectangulaire a dû être imposée aux limites du modèle. L'orientation des limites a été imposée de sorte qu'elle suive la direction principale d'écoulement de l'eau souterraine dans l'esker. Ainsi, le modèle n'est pas optimal pour simuler le transport dans le roc fracturé de l'aquifère régional.

La planche I permet de voir les structures spatiales des unités hydrostratigraphiques, des conductivités hydrauliques, et la capacité du modèle local à reproduire ces mêmes structures.

5.2.3 Conditions aux limites - écoulement

Les conditions aux limites du modèle local ont été imposées en tenant compte des résultats du modèle régional d'écoulement. La distribution spatiale de la recharge effective a été développée par (Croteau et al., 2010), effectuée avec HELP, et modifiée par Ballard et al. (2022) afin de tenir en compte de l'utilisation de l'eau souterraine dans la région par les municipalités et certains grands préleveurs industriels.

La recharge appliquée au modèle local est dérivée du modèle régional et présentée sur la planche J, avec des valeurs qui varient entre 0.0 et 75.0 mm/an.

En périphérie du modèle local, la réalisation représentant les conditions moyennes de l'ensemble des réalisations du modèle régional a été utilisée afin d'identifier les nœuds des cellules ayant une conductivité hydraulique moyenne supérieure à 10^{-4} m/s. Des charges hydrauliques constantes ont été assignées à ces nœuds, situés principalement dans l'esker et à quelques endroits dans la couche de roc fracturé (planche J).

La base du modèle est simulée comme étant imperméable. Les cellules du périmètre ayant une conductivité hydraulique moyenne inférieure ou égale à 10^{-4} m/s ont également été considérées imperméables.

La rivière de l'Esturgeon représente la zone principale de décharge des eaux souterraines avec une élévation moyenne de 34 m au-dessus du niveau de la mer. Les charges hydrauliques simulées de la réalisation des conditions moyennes du modèle régional sont également illustrées à la planche J.

5.2.4 Conditions aux limites - transport

Dans les lagunes, la zone confirmée de contamination des sols par la présence de LIL et LID (Martel et al., 2021b) a été utilisée comme conditions aux limites pour le benzène et le 1,2-DCA tel que présentée à la planche K.

Les valeurs des concentrations imposées (type I – concentration constante) ont été ajustées au cours du calage de la qualité des eaux souterraines (voir section 5.4). L'historique du flux de masse à l'UTES en 1,2-DCA possède une tendance à la baisse depuis la mise en opération en 1984, ce qui suggère un épuisement partiel de la zone source. Par conséquent, les conditions aux frontières ont été maintenues actives pour une durée de 10 ans entre 1968 et 1978. Pour ce qui est du benzène, le flux de masse observé est stable depuis 1984, donc les conditions limites ont été maintenues actives pour toute la période simulée, soit 100 ans entre 1968 et 2068.

La masse simulée est libre de sortir du domaine par les conditions aux limites d'écoulement de charge constante.

5.2.5 Paramètres hydrogéologiques

5.2.5.1 Écoulement

Plusieurs études de caractérisation géologique et hydrogéologique du site réalisées au cours de la période de 1977 à 2021 ont permis d'acquérir des valeurs de conductivité hydraulique horizontale (K_{xy}) et verticale (K_z) ainsi que du coefficient d'emménagement (S_s). Ces valeurs ont été synthétisées par (Claprood et al., 2023) pour les différentes unités hydrostratigraphiques et un sommaire est fournie au tableau 5.3. Le paramètre K_r est utilisé pour exprimer le rapport de conductivité hydraulique horizontale sur verticale ($K_r = K_{xy}/K_z$).

La planche L illustre le zonage des unités hydrostratigraphiques dans le modèle local de transport, ainsi que la distribution des conductivités hydrauliques mesurées pour chacune des 12 zones présentées au tableau 5.3.

Les paramètres hydrogéologiques calibrés par PESTPP-iES pour le modèle régional d'écoulement (Claprood et al., 2023) sont également synthétisés au tableau 5.4 et à la figure 5.4. La plupart des unités hydrostratigraphiques ont une valeur homogène sur l'ensemble du domaine,

à l'exception des unités suivantes, dont les propriétés varient spatialement par des fonctions géostatistiques :

- Esker_SG3 F1 - Zone 31 (294,027 éléments) : Simulation stochastique par bandes tournantes localement et points-pilotes régionalement.
- Esker_SG3 F2 - Zone 32 (432,174 éléments) : Simulation stochastique par bandes tournantes localement et points-pilotes régionalement.
- Fenêtres potentielles au roc dans le Till_4 intact - Zone 400 (3,054 éléments) : Points-pilotes.
- Roc fracturé - Zone 5 (337,329 éléments) : Points-pilotes représentant la variation spatiale régionale.

Les valeurs de conductivités hydrauliques calibrées sont généralement comprises dans l'intervalle défini par les valeurs minimales et maximales mesurées.

La figure 5.4 montre la distribution des valeurs de K_{xy} calibrées pour l'ensemble des éléments dont les propriétés représentent les unités du roc fracturé, Esker_SG3 F1 et Esker_SG3 F2 pour l'ensemble des 69 réalisations. Pour ce qui est des fenêtres potentielles au roc, le nombre d'éléments représente le nombre de points-pilotes utilisé.

Les distributions obtenues montrent une proportion importante d'éléments avec une valeur égale à la limite supérieure imposée pour les faciès Esker_SG3 F1 et Esker_SG3 F2. Cette tendance est moins marquée pour l'unité du roc fracturé, toutefois elle est également notable. Pour ce qui est de la distribution des conductivités hydrauliques des fenêtres potentielles au roc dans le Till_4 intact, une distribution normale centrée sur une valeur de 8.3×10^{-7} m/s indique que la calibration tend à réduire la connectivité hydraulique entre le roc fracturé et l'esker.

Tel qu'indiqué ultérieurement, les valeurs assignées aux conductivités hydrauliques et aux coefficients d'emmagasinement, qui contrôlent l'écoulement des eaux souterraines ont été fixées

dans le cadre de l'assimilation des données de concentration lors des simulations du transport des contaminants.

Tableau 5.4 Sommaire des paramètres hydrogéologiques d'écoulement mesurés et calibrés

Unité : modèle	Description	Mesure de terrain				Modèle calibré				
		Kxy min (m/s)	Kxy médian (m/s)	Kxy max (m/s)	Nombre de mesures ^{&}	Zonage	Type d'assignation	Kxy (m/s)	Kr (-)	Ss (-)
Remblai et Organique régional		3.3x10 ⁻⁸	2.2x10 ⁻⁶	1.2x10 ⁻⁴	10	1	Uniforme	1.4x10 ⁻⁵	1	3.0x10 ⁻⁴
Remblai et Organique régional remanié	Matériaux remaniés. Propriété assignée à la première couche du modèle.	---	---	---	---	10*	Uniforme	1.4x10 ⁻⁴	1	3.0x10 ⁻⁴
Argile régionale		4.0x10 ⁻¹⁰	N/A	6.4x10 ⁻¹⁰	0	2	Uniforme	2.0x10 ⁻⁷	45.6	3.0x10 ⁻⁴
Argile régionale remaniée	Matériaux remaniés. Propriété assignée à la première couche du modèle.	---	---	---	---	20*	Uniforme	2.0x10 ⁻⁶	45.6	3.0x10 ⁻⁴
Esker_SG3 local		6.9x10 ⁻⁸	2.3x10 ⁻⁵	7.4x10 ⁻⁴	107	Hydrofaciès F1 (unité principale de sable et gravier) 31, 310*	Simulations géostatistiques (bandes tournantes)	[^] 5.0x10 ⁻³	1.2	2.8x10 ⁻²
Esker_SG3 régional		1.4x10 ⁻⁶	6.6x10 ⁻³	1.4x10 ⁻³	50	Hydrofaciès F2 (unité secondaire sable et gravier silteux et/ou argileux) 32, 320*	Simulations géostatistiques (bandes tournantes)	[^] 3.8x10 ⁻⁴	1	3.0x10 ⁻⁴
Till_4 remanié régional	Matériaux remaniés. Propriété assignée à la première couche du modèle.	2.1x10 ⁻⁸	5.6x10 ⁻⁸	4.0x10 ⁻⁵	8	41*	Uniforme	1.4x10 ⁻⁴	147.5	3.0x10 ⁻⁴
Till_4 intact régional		1.8x10 ⁻¹¹	2.0x10 ⁻⁸	8.2x10 ⁻⁸	14	4	Uniforme	6.1x10 ⁻⁷	61.4	3.0x10 ⁻⁴
Till_4 intact local - fenêtres potentielles au roc		---	---	---	---	400	Points pilotes (krigeage)	[^] 1.0x10 ⁻⁶	74.82	6.0x10 ⁻⁵
Roc local		1.0x10 ⁻¹⁰	7.5x10 ⁻⁷	1.6x10 ⁻⁴	73	5	Points pilotes (krigeage)	[^] 5.6x10 ⁻⁵	62.6	5.3x10 ⁻⁵
Roc régional		7.4x10 ⁻¹⁰	9.0x10 ⁻⁷	3.9x10 ⁻⁴	171					

Notes: * Remanié = matériaux parents Kxy multiplié par un facteur de 10

[^] Paramètre variant spatialement. Voir les histogrammes à la figure 5.4

[&] Claprod et al. 2023, Tableau 5

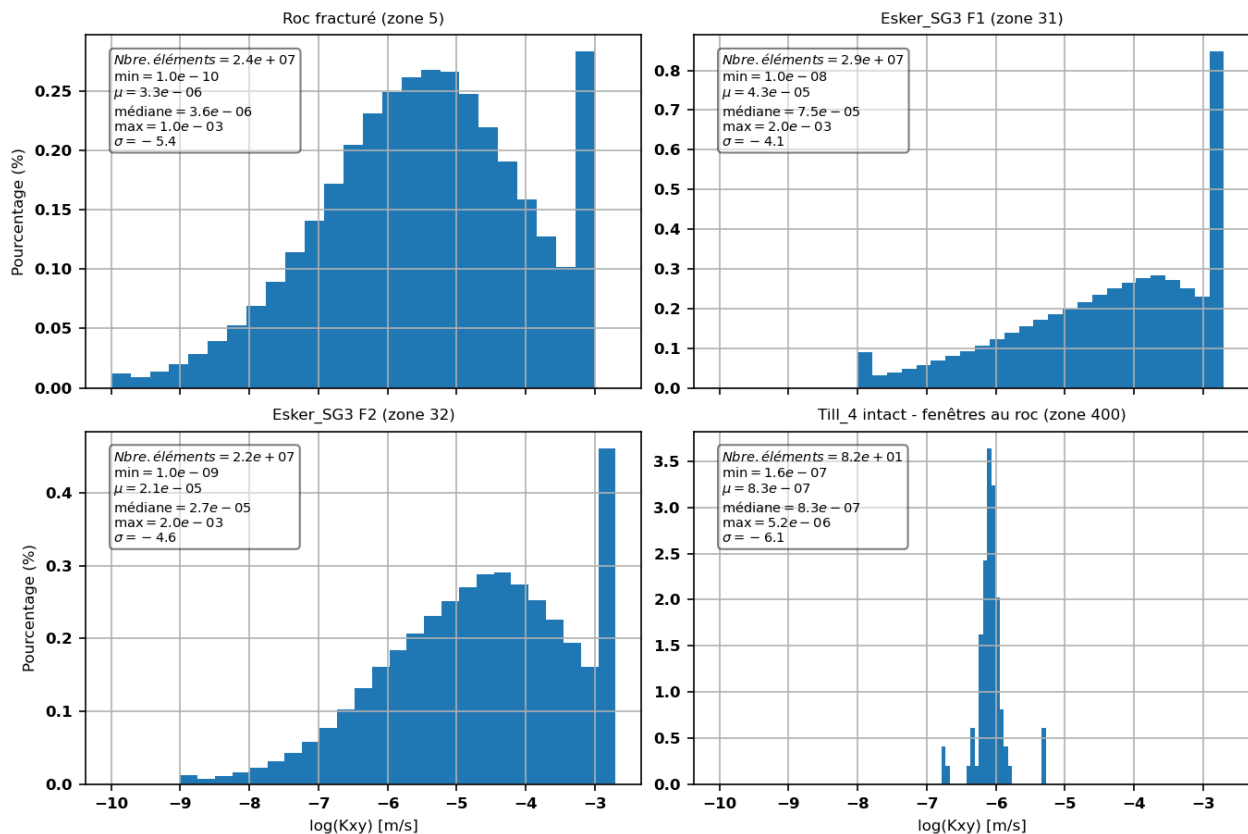


Figure 5.4 Distribution des conductivités hydrauliques calibrées du modèle régional pour les zones hétérogènes

5.2.5.2 Transport

Le sommaire des paramètres retenus pour l'assimilation des données de concentrations en 1,2-DCA et en benzène dans les simulations du transport des contaminants est présenté au tableau 5.5. En utilisant la limite inférieure, la moyenne, et la limite supérieure des paramètres de transport, un ensemble de départ de 69 réalisations a été généré en utilisant des distributions normales aléatoires. Cet ensemble des paramètres de transport complète les paramètres d'écoulement calibrés. Les limites et moyennes des porosités effective et résiduelle ont été basées sur une revue de littérature (McWhorter and Sunada, 1977; Schaap et al., 2001). De manière générale, la valeur assignée de porosité effective moyenne est la plus basse pour le roc

fracturé (5%), suivi de l'argile (10%), du till (20%) et des dépôts de sable et gravier de l'esker (30%).

Les coefficients d'adsorption des différentes unités ont été calculés à partir des équations 4.3 et 4.14 avec les hypothèses suivantes tirées de la littérature :

- La densité spécifique des solides est uniforme avec une valeur de 1.6 kg/m^3
- La valeur de la fraction de carbone organique (f_{oc}) variant entre 0.0018 pour le roc fracturé et 0.0036 pour les dépôts meubles (ITRC, 2015)
- Les coefficients de partition carbone organique-eau (K_{oc}) proviennent de la littérature pour le benzène (58.9 L/kg) et le 1,2-DCA (17.4 L/kg), voir annexe I.

Ainsi, pour le 1,2-DCA, le facteur de retard calculé pour les différentes unités varient entre 1.17 pour les dépôts de l'esker à 2.00 pour le roc fracturé et l'argile. Les coefficients d'adsorption (i.e. partition eau-sol) dans le logiciel FEFLOW varient entre 0.05 pour les dépôts de l'esker et 0.10 pour le roc fracturé et l'argile.

Pour le benzène, les valeurs du facteur de retard pour les différentes unités varient entre 1.57 pour les dépôts de l'esker et 4.39 pour le roc fracturé et l'argile. Les coefficients d'adsorption Henry (K_{Henry}) dans le logiciel FEFLOW varient entre 0.17 pour les dépôts de l'esker et 0.34 pour le roc fracturé et l'argile.

Par conséquent, indépendamment de l'unité hydrostratigraphique, les propriétés physiques du 1,2-DCA font en sorte qu'il est moins retardé que le benzène.

Pour ce qui est des coefficients de dégradation des composés retenus, ils ont tendance à varier considérablement entre différentes études et sites (Newell et al., 2002). Par conséquent, l'incertitude reliée au taux de dégradation est élevée. Il est noté que les taux de dégradation et les temps de demi-vie peuvent être utilisés pour décrire une dégradation de premier ordre (λ). Les taux de dégradation moyens utilisés comme valeurs initiales pour le 1,2-DCA et le benzène

sont de $1.90 \times 10^{-4} \text{ jour}^{-1}$ (demi-vie 3,650 jours) et $9.90 \times 10^{-4} \text{ jour}^{-1}$ (demi-vie 700 jours), respectivement. Les limites supérieures et inférieures imposées ont été calculées à partir des valeurs moyennes supportées par la revue de littérature (Suarez and Rifai, 1999). Les limites supérieures ont été obtenues en multipliant les valeurs moyennes par 10, tandis que les limites inférieures en multipliant les valeurs moyennes par 0.1.

Enfin, les paramètres suivants ont été fixés dans les simulations du transport des contaminants durant l'assimilation des données :

- Dispersivité longitudinale et transversale : Pour maintenir la stabilité numérique, ces paramètres ont été maintenus constants en tenant compte de la discrétisation de la maille. Les valeurs sont de 10 m pour la dispersivité longitudinale et 1 m pour la dispersivité transversale.
- Coefficient de diffusion : Valeur tirée de la littérature de $9.9 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ et $9.8 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ pour le 1,2-DCA et benzène, respectivement (annexe I).

Tableau 5.5 Sommaire des paramètres hydrogéologiques de transport hétérogènes

Unité : modèle	Description	Zone	Paramètre	Porosité effective (fraction)		Porosité résiduelle (fraction)		Coefficient adsorption Benzène (-)		Dégradation Benzène (1/jour)		Coefficient adsorption 1,2-DCA (-)		Dégradation 1,2-DCA (1/jour)	
			Type d'assignation	Min.	Max.	Min.	Max.	Min.	Max.	Min.	Max.	Min.	Max.	Min.	Max.
Remblai et Organique régional		1	Distribution normale	0.15	0.25	0.02	0.12	0.18	0.721	9.90E-05	9.90E-03	0.053	0.213	1.90E-05	1.90E-03
Remblai et Organique régional remanié	Matériaux remaniés. Propriété assignée à la première couche du modèle.	10*	Distribution normale												
Argile régionale		2	Distribution normale	0.05	0.15	0.02	0.12	0.18	0.721			0.053	0.213		
Argile régionale remaniée	Matériaux remaniés. Propriété assignée à la première couche du modèle.	20*	Distribution normale												
Esker_SG3 local	Hydrofaciès F1 (unité principale de sable et gravier)	31, 310*	Distribution normale	0.2	0.4	0.05	0.07	0.09	0.36			0.027	0.106		
Esker_SG3 régional	Hydrofaciès F2 (unité secondaire sable et gravier silteux et/ou argileux)	32, 320*	Distribution normale												
Till_4 remanié régional	Matériaux remaniés. Propriété assignée à la première couche du modèle.	41*	Distribution normale	0.15	0.25	0.02	0.12	0.18	0.721			0.053	0.213		
Till_4 intact régional		4	Distribution normale												
Till_4 intact local - fenêtres potentielles au roc		400	Distribution normale												
Roc fracturé		5	Distribution normale	0.02	0.12	0.005	0.02	0.09	0.36			0.027	0.106		

Notes: * Remanié lié aux propriétés des matériaux parents

5.2.6 Paramètres du solveur numérique

Pour les simulations numériques, les critères de tolérance d'erreur ont été fixés à 1.0×10^{-4} pour la solution d'écoulement et 5.0×10^{-6} pour la solution de transport, sur la norme intégrale euclidienne L2 (moyenne quadratique de l'erreur) avec un maximum de trois itérations du solveur pour chacun des pas de temps.

L'option de remontée au vent du transport (e.g. *upwinding*) a été désactivée, afin de minimiser l'effet de lissage des concentrations.

La formulation mathématique pour le transport des contaminants sélectionnés a été la forme divergente.

Le contrôle automatique des pas de temps a été sélectionné, avec un pas de temps initial de 0.001 jour, et un schéma prédicteur-correcteur avec une précision de premier ordre.

Pour ce qui est du réglage du solveur pour l'écoulement en milieu non-saturé, la forme basée sur les charges hydrauliques de l'équation de Richard (Richards, 1931) a été sélectionnée et les paramètres du modèle régional ont été appliqués.

5.3 Validation de l'écoulement du modèle local en régime permanent et transitoire

Afin de valider que l'écoulement en régime permanent du modèle local soit représentatif des charges hydrauliques mesurées et simulées par le modèle régional (Claprood et al., 2023), une comparaison a été faite et présentée à la planche M, médaillon (A). La comparaison a été effectuée sur les 137 points de mesure des niveaux d'eau compris dans le domaine du modèle local (figure 5.5). L'erreur quadratique (*i.e. Root Mean Square of Error : RMSE*) est de 2.11 et 2.30 m pour le modèle régional et local, respectivement. L'erreur moyenne des différents modèles a été calculée en utilisant la moyenne de l'ensemble des réalisations. L'erreur moyenne du modèle local est supérieure de 0.19 m (9%) à celle du modèle régional. Tel que discuté à la

section 5.2.3, en périphérie du modèle local, la réalisation moyenne de l'ensemble du modèle régional a été utilisée afin d'identifier les nœuds des cellules ayant une conductivité hydraulique moyenne supérieure à 10^{-4} m/s. Cette simplification est identifiée comme étant la source principale des différences entre les charges simulées des modèles et représente une limitation du modèle local, bien que l'erreur supplémentaire de 9% a été jugée acceptable pour poursuivre avec la simulation de transport de contaminant.

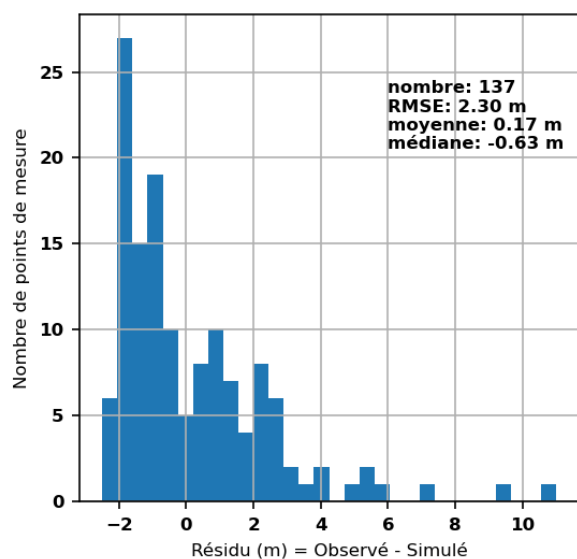


Figure 5.5 Histogramme des résidus de charge hydraulique et statistiques

La figure 5.6 illustre la distribution verticale des résidus pour les charges hydrauliques dans les dépôts meubles et le roc fracturé. Il est noté que les trois points de mesure avec des niveaux d'eau observés plus élevés que 44.20 m au-dessus du niveau de la mer sont reliés à des puits crépinés à une faible profondeur (entre 3 et 8 m sous le niveau du sol). Les crépines sont installées dans le remblai organique (puits bbl-16-a et bbl-20-a) et dans l'esker faciès F1 (puits bbl-12-a).

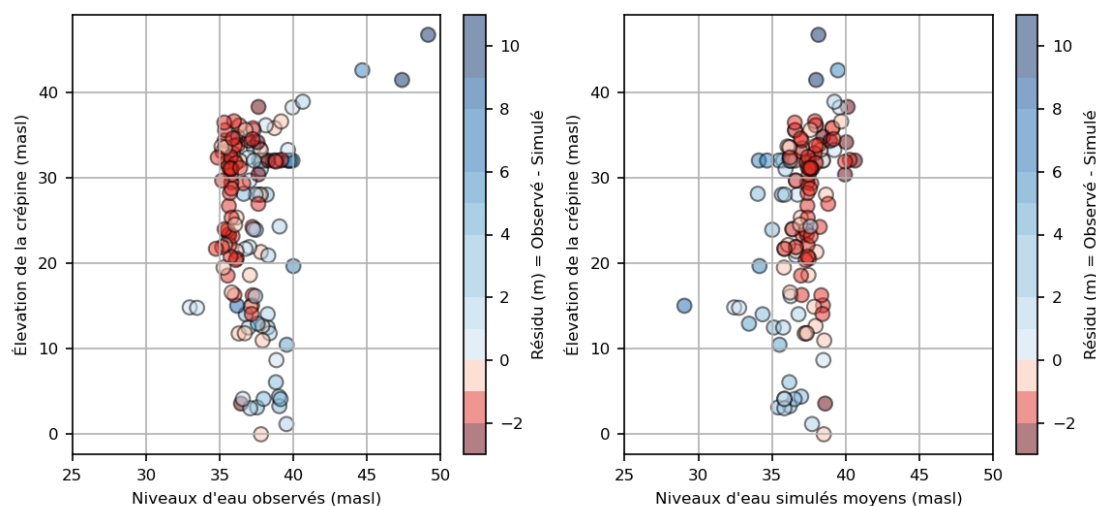


Figure 5.6 Distribution verticale des résidus de charge hydraulique dans les dépôts meubles et le roc fracturé

Dans un second temps, la période entre avril et octobre 2023 a été utilisée afin de simuler en régime transitoire la variation des débits de pompage des puits de l'UTES (planche N, médaillon A). Les rabattements simulés et mesurés sont présentés sur la planche N, médaillon B. Chacune des courbes orange représente une réalisation de l'ensemble. On constate que les pertes de charges observées aux puits d'observation PZ-111, PZ-112 et PZ-113, localisés à moins de 3 m des puits de pompage de l'UTES, ne sont pas bien représentées dans le modèle numérique. Ceci est un comportement attendu d'un modèle numérique avec une résolution de maille de 10 m, puisqu'il n'y a pas suffisamment de nœuds entre le point de mesure et les nœuds représentant les puits de pompage. De plus, le modèle numérique n'est pas conçu afin de simuler les pertes de charges non-linéaires dues au colmatage possible des crépines des puits de pompage ou des observations. De manière générale, le modèle local tend à surestimer les variations des niveaux d'eau aux puits d'observation pour lesquels des mesures en continu ont été enregistrées, à l'exception du puits MW-08 où les variations observées sont sous-estimées. Le puits d'observation MW-08 est situé au nord des lagunes, le point le plus éloigné qui a été suivi, et pratiquement à la limite nord du modèle de transport local. Par conséquent, les conditions aux

frontières pour l'écoulement peuvent avoir un effet sur ce puits d'observation en restreignant les variations des charges hydrauliques simulées lors de variation du débit de pompage de l'UTES ou de l'incinérateur.

On note que la variance simulée dans l'ensemble des réalisations est le produit de la variation des champs de conductivité hydraulique imposée dans l'ensemble, puisque les coefficients d'emmagasinement ont été maintenus constants, donc ils n'influencent pas cette variance. Il est à noter, que très peu d'information transitoire existe historiquement, et qu'avec l'exploitation en continue des eaux souterraines par l'UTES, un régime quasi-permanent existe, l'une des raisons pour laquelle les coefficients d'emmagasinement ont été fixés.

5.4 Assimilation des données de la qualité des eaux souterraines par la méthode de lissage

L'assimilation des données de la qualité des eaux souterraines par la méthode de lissage a été faite à l'aide du logiciel PESTPP-iES. Un sommaire du fichier de contrôle de l'inversion est présenté au tableau 5.6.

Tableau 5.6 Sommaire des principales composantes du fichier de contrôle de l'inversion de PESTPP-iES

Variable	Description	Valeur
Nombre de paramètres	- Écoulement et transport	<u>Total</u> : 1,095,664 <u>Paramètres ajustables</u> : 24 paramètres dégradation 24 paramètres adsorption 12 paramètres porosité 2 paramètres – concentration zone source <u>Paramètres fixes</u> : K_{xy} , K_r , S_s , dispersivité, recharge, coefficient de diffusion
Nombre d'observations	- Charges hydrauliques observées - Chroniques temporelles des concentrations mesurées en 1,2-DCA et benzène	<u>Total</u> : 1,893 1,388 mesures - 1,2-DCA (21 puits) 369 mesures – benzène (21 puits) 137 mesures charge hydrauliques (poids = 0.0)
Changement des paramètres	- Changement de la valeur des paramètres lors de l'exécution de l'algorithme	Changement relatif de 1% de la valeur initiale
++ies_subset_size	- Variable qui permet de préciser le nombre du sous-ensemble à utiliser pour la construction de la matrice jacobienne approximative	4
++ies_drop_conflicts	- Variable qui permet d'ignorer les observations qui sont en dehors de l'intervalle des valeurs simulées	Activé

L'objectif initial du projet était de simuler la dégradation d'un composé chloré en sous-produits comme le trichloroéthylène, donc d'assimiler plusieurs composés, et de contraindre les paramètres de transport avec des mesures de qualité des eaux souterraines. Après l'analyse des données de terrain disponibles du réseau de surveillance de la qualité des eaux souterraines à l'échelle régionale disponibles (voir planche F), il est devenu évident que seuls quelques

paramètres indicateurs (1,2-DCA, CV et benzène) avaient un historique de mesures des concentrations suffisant, autant d'un point de vue spatial que temporel, pour caler un modèle de transport (MELCC, 2023b, 2022, 2021, 2020a, 2019, 2018).

Pour l'ensemble des unités hydrogéologiques, les conductivités hydrauliques ont été fixées. Afin de pouvoir influencer les vitesses de migration des contaminants, les porosités effectives ont été ajustés, puisqu'elles contribuent à définir la vitesse d'écoulement souterrain, $K \times i / n_e$, où i est le gradient hydraulique qui définit le changement de la charge hydraulique dans la direction de l'écoulement souterrain, K la conductivité hydraulique et n_e la porosité effective. Les mesures spatio-temporelles des concentrations en 1,2-DCA et en benzène ont été utilisées simultanément en utilisant l'option *multi-species* dans le logiciel FEFLOW. Les mesures de concentration en logarithme décimal (\log_{10}) ont été utilisées avec des poids égaux (valeur de 10.0). Par défaut, le poids des observations dans le processus d'assimilation avec la méthode iES implémentée dans PESTPP est utilisé pour ajouter du bruit aux observations, tel que décrit préalablement. Les poids représentent l'inverse de l'écart-type de l'erreur de mesure (i.e. le bruit sur les mesures). Par exemple, le bruit sur les concentrations observées au puits P-113 est illustré à la figure 5.7. Le bruit varie approximativement d'un ordre de grandeur, ce qui est consistant avec les observations historiques et donc, jugé adéquat. Tel que décrit précédemment, dans la méthode d'inversion iES, le bruit sur les observations est ajouté dans l'algorithme afin d'évaluer la matrice jacobienne expérimentale et s'assurer de maintenir un niveau minimum de variabilité entre les réalisations de l'ensemble.

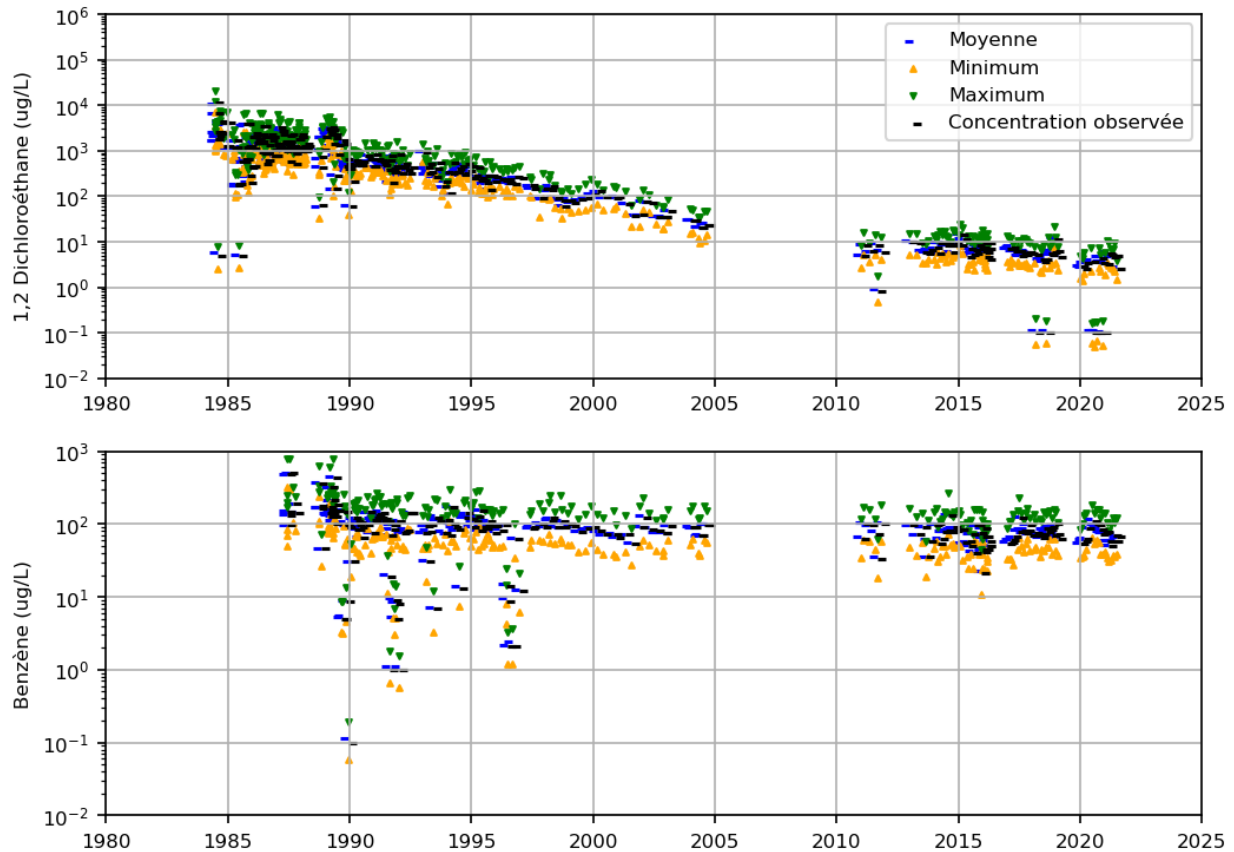


Figure 5.7 Bruit incorporé aux concentrations observées par PESTPP en utilisant le poids des observations pour le puits P-113

À partir de l'ensemble de départ de 69 réalisations des paramètres d'écoulement et de transport, 398 observations (23%) avaient des valeurs supérieures ou inférieures à celles simulées sur un total de 1,757 observations. Ce pourcentage est élevé et il est attribué au fait que le système est hétérogène et que les concentrations observées varient significativement entre deux relevés de terrain, tel qu'illustré à la figure 5.7. Par conséquent, le modèle tend à simuler des concentrations beaucoup plus uniformes et continues par rapport aux résultats de terrain. En utilisant la variable « *ies_drop_conflicts = true* », les observations conflictuelles ont été ignorées par le processus d'assimilation, ce qui permet au processus d'inversion de réduire la variance autour des observations comprises dans l'intervalle des valeurs simulées. Le nombre d'observations retenu par PESTPP-IES est donc de 1,359 (77%). Les observations conflictuelles proviennent

principalement des puits PO-94-1S, P-111, P-112, P-113 et la série de puits sur la ligne des Z. Idéalement, aucune observation ne serait ignorée avec un ensemble de départ qui permet de simuler des concentrations similaires à celles mesurées. Ceci représente donc une limitation à l'assimilation de données par la méthode de lissage d'ensemble, qui ne permet pas de modifier les paramètres de l'ensemble de manière à obtenir une solution qui converge vers une erreur globale inférieure sur l'ensemble des observations. En d'autres mots, le lissage d'ensemble ne permet pas de modifier les paramètres en dehors des valeurs prédéfinies dans l'ensemble de départ, ce qui est fondamentalement différent des autres algorithmes d'inversion plus génériques tel que GML. Pour chacun des paramètres, la variance des valeurs de l'ensemble tend à diminuer à chacune des itérations de lissage.

Par ailleurs, dans les cas où les mesures de qualité d'eau souterraine sont sous le seuil de détection du laboratoire, les valeurs mesurées ont été remplacées pour les besoins de l'inversion numérique par une valeur fixe de $0.1 \mu\text{g/L}$ ($1.0 \times 10^{-4} \text{ mg/L}$). De plus, les concentrations simulées inférieures à $1.0 \times 10^{-4} \text{ mg/L}$ ont été remplacées par une valeur fixe de $1.0 \times 10^{-4} \text{ mg/L}$. Cette stratégie a été jugée nécessaire, car lors des premières tentatives d'inversion, les faibles concentrations, par exemple $1.0 \times 10^{-10} \text{ mg/L}$, avait une très forte influence dans l'inversion, car l'erreur est calculée à la suite d'une transformation du logarithme de base 10. Cette stratégie a permis de mieux informer la fonction objective et de produire de meilleurs résultats.

Le processus d'assimilation des données a été parallélisé sur quatre ordinateurs (Intel Xeon Gold 6242 CPU @2.80GHz 6 cœurs ; mémoire 32GB), car la durée moyenne de chacune des simulations était d'environ 6 heures. L'optimisation finale a pris 12.6 jours, pour exécuter 201 simulations. Au cours de l'assimilation, deux des 69 réalisations de départ ont été éliminées car elles n'avaient pas convergées après 500 minutes (8.3 heures). Les résultats de l'assimilation sont présentés au tableau 5.7. On constate que la diminution de la fonction objective est plus prononcée pour le benzène (diminution de 59%) comparativement au 1,2-DCA (diminution de

17%), toutefois l'erreur initiale sur les concentrations simulées de 1,2-DCA était moindre que celle de benzène. On constate également qu'il n'y a pas d'amélioration notable entre la première et la seconde itération. L'ensemble des paramètres de la première itération a été retenu comme solution calibrée.

Tableau 5.7 Résultats de l'inversion par PESTPP-iES – Fonction objective du 1,2-DCA et du benzène

Itération	Composé	Valeur de la fonction objective de l'ensemble des réalisations				
		Moyenne	Minimum	Maximum	Écart-type	Valeur de la fonction objective
Ensemble de départ	1,2-DCA	66100	33000	178000	26000	100%
Itération 1	1,2-DCA	55000	28900	94100	16700	83%
Itération 2	1,2-DCA	54700	28900	94100	16900	83%
Ensemble de départ	Benzène	2100	661	4620	1100	100%
Itération 1	Benzène	856	643	4600	592	41%
Itération 2	Benzène	856	643	4600	592	41%

5.4.1 Chronique temporelle de la qualité des eaux souterraines

Pour les puits d'observations avec des mesures de concentration, les chroniques temporelles des concentrations simulées et observées de l'ensemble initial et de l'itération 1 sont présentées à la planche O et P pour le 1,2-DCA et le benzène, respectivement.

Planche O – 1,2-DCA

- La moyenne de l'ensemble de départ et de l'itération 1 sont pratiquement semblables pour les puits de l'UTES P-112 et P-113. On constate également que la moyenne des réalisations de l'itération 1 représente d'avantage les concentrations observées au puits P-111.
- L'ensemble de départ et de l'itération 1 sont en mesure de reproduire la variabilité des concentrations observées durant la période de 1984 à 2021, et donc le flux de masse

simulé est représentatif de la zone source. L'assimilation est en mesure d'ajuster convenablement la concentration des conditions limites de la zone source.

- On observe une légère diminution de la moyenne des concentrations simulées de l'itération 1 aux puits 3097201, 5M81-B, 7201 et P-27.
- Les concentrations simulées au puits d'observation PO-94-1S, localisé au sud-est du puits P-111, sont toutes significativement inférieures à celles observées. Tel que discuté, la majorité des observations a été ignorée par le processus d'assimilation par l'utilisation de la variable qui ignore les conflits d'observations pour ce puits.
- Les concentrations simulées au puits d'observation PO-94-5S pour l'itération 1 représentent davantage les concentrations observées.
- Pour ce qui est des puits d'observation sur la ligne des Z, le modèle tend à sous-estimer les concentrations aux puits Z-02-B, Z-03-A, Z-04-A, Z-04-B et Z-05-A. Le modèle tend à bien estimer les concentrations aux puits Z-02-A, Z-02-C, Z-03-B, Z-05-C et Z-06-B. L'utilisation de conditions aux limites homogènes pour représenter les zones sources (planche K) est interprétée comme étant la raison principale pour laquelle les concentrations simulées sont moins variables que celles observées (voir planche H pour la distribution des concentrations observées à la ligne des Z).

Planche P – Benzène

- On constate que la moyenne de l'itération 1 est supérieure à l'ensemble de départ au puits P-113, et s'approche davantage des concentrations observées. On note également que la variance des données mesurées au puits P-113 s'étale sur deux ordres de grandeur durant la période de 1984 à 1998 à l'affluent de l'UTES.
- Les puits d'observation PO-94-1S et PO-94-7R sont les seuls avec un suivi historique des concentrations en benzène outre l'affluent de l'UTES.

- Similaire au composé 1,2-DCA, les concentrations simulées au puits PO-94-1S sont significativement inférieures à celles observées. La zone source étant prescrite à l'étendue des anciennes lagunes, il n'y a pas de mécanismes dans le modèle numérique pour étendre davantage le panache de contamination vers l'est.
- Les crépines des puits d'observation sur la ligne des Z sont pour la plupart localisées à l'intérieur de la zone source (planche K). Puisque cette zone a été utilisée pour assigner les conditions aux limites pour le transport, le modèle simule des concentrations uniformes. L'architecture complexe interne de la zone source n'étant pas représentée dans le modèle, pourrait être la raison principale pour laquelle les concentrations simulées sont significativement moins variables que les concentrations observées.

5.4.2 Distribution spatiale des panaches de contaminants

Les planches Q et R illustrent l'évolution temporelle simulée des panaches de contamination dans les dépôts meubles et le roc fracturé de 1980 à 2020 pour le 1,2-DCA et le benzène, respectivement. L'étendue du faciès F1 de l'esker est présentée afin de mieux comprendre le comportement macroscopique de la migration du panache de contaminant en direction sud vers les conditions aux limites de la rivière de l'Esturgeon. Le domaine du modèle local de transport et quatre points d'observation (PZ-113, 5M81-A, P-27 et PO-94-5S) sont fournis comme points de référence. Puisque les concentrations simulées varient spatialement et temporellement parmi les réalisations de l'ensemble, la probabilité de dépassement a été choisie comme indicateur de la variabilité à même l'ensemble. Le seuil dépassement pour le 1,2-DCA est de 5.0 µg/L et de 0.5 µg/L pour le benzène. Pour chacun des pas de temps, les probabilités de dépassement sont calculées en comptant le nombre de réalisations qui excède le seuil divisé par le nombre total de réalisations (67) et ce pour chacune des cellules du domaine sur une grille régulière d'une résolution de 20 m x 20 m. Ainsi, une probabilité de 100% indique qu'une concentration excédant la valeur seuil a été simulée pour l'ensemble des réalisations. Verticalement, le modèle a été

divisé entre les dépôts meubles (toutes les zones à l'exception de la zone 5; couches 1 à 28) et le roc fracturé (zone 5 ; couches 27 à 33).

Les résultats des simulations de transport permettent de constater que le panache de 1,2-DCA est beaucoup plus étendu que celui du benzène, parce que ce composé est moins dégradé et moins adsorbé (voir sections 4.2.3 et 4.2.4). On constate également qu'en 1980, 56.3% des réalisations simulent un dépassement d'une concentration de 5.0 µg/L pour les dépôts meubles dans le coin nord-ouest du modèle de transport local. Cette probabilité diminue à 35.8% en 2020. Ce résultat suggère que les conditions aux frontières du modèle de transport local contribuent à faire sortir la masse de contaminant. La sortie de masse par les conditions aux frontières en cours de simulation constitue une limitation du modèle, car elle affecte la capacité de faire une comparaison des bilans de masses entre les modèles. Cet aspect doit être considéré lorsque la masse totale dans le système est comparée entre les différents scénarios prédictifs (section 5.7). Ce phénomène est moins prononcé pour les résultats de transport du benzène dans les dépôts meubles avec 31.3% au même endroit, toutefois cela demeure une limitation importante du modèle pour la période précédant 2020. On ne retrouve pas ce phénomène dans l'unité de roc fracturé, il y a toujours moins de 10% des réalisations qui excèdent le seuil à proximité des limites du modèle.

La planche Q suggère que l'étendue du panache de contamination en 1,2-DCA dans les dépôts meubles était maximale vers les années 2000 et que la partie du panache avec de fortes concentrations se résorbe à proximité des puits de l'UTES depuis 1990. Le panache dans le roc fracturé semble colocalisé avec le panache dans les dépôts meubles au sud du site, toutefois, une composante d'est en ouest est visible, ce qui est interprété comme étant l'influence de l'écoulement régional.

Selon les résultats de simulation avec une recharge moyenne annuelle constante en fonction du temps, une zone stagnante semble exister en aval du piège hydraulique des puits de l'UTES dans

les dépôts meubles. Cette zone est située entre les puits d'observation P-27 et PO-94-5S, où l'on voit une récession du front du panache entre les années 2000 et 2020, bien que le panache de contamination demeure présent.

La planche R illustre l'évolution spatio-temporelle des panaches de contamination en benzène dans les dépôts meubles et le roc fracturé. Son contenu suggère que l'étendue était maximale vers les années 1990, et pratiquement circonscrite par le piège hydraulique en 2020, ce qui indique que le piège hydraulique est une mesure efficace pour intercepter ce composé.

5.4.3 Paramètres calibrés

Les paramètres obtenus après l'itération 1 ont été retenus comme paramètres calibrés. Pour visualiser les distributions des paramètres calibrés, la planche S est fournie. On peut y voir la distribution de chacun des paramètres ajustables avant (*pre-*) et après (*post-*) l'assimilation grâce aux diagrammes en boîte et moustaches. Le ratio de la variance entre *pre-* et *post-* assimilation est utilisé comme indicateur des paramètres les plus sensibles aux données de calibration. Une faible valeur du ratio est indicatrice qu'un paramètre est contraint par les observations puisque la variance a grandement diminuée (i.e. la distribution des valeurs pour un paramètre s'effondre par rapport à la distribution initiale) au cours du processus d'assimilation. Dans certains cas, une distribution multimodale a été obtenue, ce qui accroît la variance et donc le ratio devient supérieur à 1.0. Par exemple, le ratio des variances du paramètre de dégradation du 1,2-DCA pour les zones 31 (Esker_SG3_F1) et 32 (Esker_SG3_F2) sont de 1.7 et 0.1, respectivement. Après l'itération 1, la variance a augmenté d'un facteur de 1.7 pour la zone 31, tandis qu'elle a diminué d'un facteur de 0.1 pour la zone 32.

Une autre manière de visualiser la distribution des paramètres de l'ensemble est de comptabiliser le nombre de paramètres qui atteignent leurs limites supérieures ou inférieures. Le tableau 5.8 présente la synthèse du nombre de paramètres à même les 67 réalisations retenues dans

l'ensemble final. On constate que 69.4% des paramètres décrivant l'adsorption du 1,2-DCA ont atteint la limite supérieure et que 50.3% des porosités atteignent la limite inférieure. Directionnellement, une faible porosité augmente la vitesse d'écoulement de l'eau souterraine, tandis qu'une forte adsorption tend à diminuer la vitesse de déplacement du contaminant.

Pour ce qui est des conditions limites de la zone source exprimées par des nœuds à concentration constante dont la concentration était ajustable dans le processus d'inversion, on peut y voir qu'il y a très peu de variation entre la distribution avant et après l'assimilation pour le 1,2-DCA, tandis que l'ensemble des réalisations a convergé vers la limite supérieure de 0.2 mg/L pour le benzène.

Tableau 5.8 Résultats de l'inversion par PESTPP-IES – Variation de la valeur des paramètres – Itération 1

Groupe de paramètre	Nombre de paramètres à leur limite supérieure	% de paramètres à leur limite supérieure	Nombre de paramètres à leur limite inférieure	% de paramètres à leur limite inférieure
Concentration des zones sources	65	48.5	2	1.5
Porosité	480	47.8	505	50.3
1,2-DCA Adsorption	697	69.4	283	28.2
1,2-DCA dégradation	245	24.4	125	12.4
Benzène Adsorption	343	34.1	469	46.7
Benzène dégradation	179	17.8	43	4.3

Les coefficients de dégradation du benzène et du 1,2-DCA sont les deux paramètres avec le plus faible pourcentage de paramètres de l'ensemble à leur limite supérieure ou inférieure, avec moins de 36.8%. Globalement, le nombre de paramètres qui atteignent les limites supérieures et inférieures est relativement élevé pour une seule itération de l'algorithme d'assimilation. On s'attend habituellement à voir une décroissance progressive de la variance de la distribution des paramètres de l'ensemble, ce qui n'a pas eu lieu. Tel qu'expliqué dans la section 4.2.5, l'utilisation du comportement par défaut de PESTPP d'utiliser le poids des observations pour calculer le bruit

des observations peut être en cause, car les mesures de concentrations pour le benzène sont généralement plus élevées que celles du 1,2-DAC, et par conséquent, un débalancement de la fonction objective. Il est également possible qu'en fixant les paramètres qui contrôlent l'écoulement (i.e. les conductivités hydrauliques), certains paramètres de transport tel que les porosités et les coefficients d'adsorption ont pu compenser afin de mieux représenter la distribution spatio-temporelle observée du transport des contaminants. L'assimilation simultanée des données d'écoulement et de transport, ainsi qu'une révision de la stratégie de pondération des observations et du calcul du bruit des observations devraient être considérées lors d'une phase ultérieure au projet. D'un point de vue du processus d'inversion, il est toujours délicat de balancer la fonction objective lorsque différents types d'observations sont utilisés. Toutefois, la séparation du calcul de bruit sur les observations et la pondération de ces dernières devrait faciliter cet aspect (Fienen et al., 2024). Les auteurs démontrent que l'assimilation par lissage d'ensemble itératif est particulièrement sensible au bruit des observations (y) et à la pondération des observations (Q), voir équation 4.17, section 4.2.5.

5.5 Bilan de masse de l'écoulement et du transport

Afin de faire la vérification de la conservation de masse des différentes réalisations du modèle local de transport, trois réalisations ont été choisies aléatoirement pour le scénario actuel (SA) (voir section 4.4). Pour le domaine du modèle, les résultats des bilans de masse sont présentés aux tableaux 5.9, 5.10 et 5.11, pour l'écoulement, le transport du 1,2-DCA et le benzène, respectivement. La planche T, illustre les différents flux d'écoulement pour la réalisation 21, choisie au hasard, afin de mieux comprendre le rôle des différentes conditions aux limites et le bilan de masse du système.

Tableau 5.9 Bilans de masse de l'écoulement – Janvier 2023

Composante	Réalisation : base Intrant (+) / Extrant (-) (m ³ /jour)	Réalisation : 4 Intrant (+) / Extrant (-) (m ³ /jour)	Réalisation : 21 Intrant (+) / Extrant (-) (m ³ /jour)
Charges constantes périphérie	+5,132.1	+5,132.6	+5,131.9
Rivière de l'Esturgeon	-1,725.2	-1,725.0	-1,725.2
Puits	-3,600.0	-3,600.0	-3,600.0
Recharge	+192.3	+192.3	+192.3
Emmagasinement	0.0	0.0	0.0
Bilan de masse	-0.8 (0.023%)	-0.1 (0.002%)	-1.0 (0.020%)

Tableau 5.10 Bilans de masse de transport du 1,2 DCA – Janvier 2023

Composante	Réalisation : base Intrant (+) / Extrant (-) (g/jour)	Réalisation : 4 Intrant (+) / Extrant (-) (g/jour)	Réalisation : 21 Intrant (+) / Extrant (-) (g/jour)
Concentrations constantes	0.000	-0.001	0.000
Puits	-75.394	-66.520	-25.690
Dégradation	-22.264	-42.564	-9.891
Emmagasinement	+97.657	+108.807	+35.577
Bilan de masse	-0.001 (0.001%)	-0.278 (0.258%)	-0.005 (0.013%)

Tableau 5.11 Bilans de masse de transport du benzène – Janvier 2023

Composante	Réalisation : base Intrant (+) / Extrant (-) (g/jour)	Réalisation : 4 Intrant (+) / Extrant (-) (g/jour)	Réalisation : 21 Intrant (+) / Extrant (-) (g/jour)
Concentrations constantes	+665.980	+158.763	+576.960
Puits	-518.080	-130.660	-501.080
Dégradation	-181.900	-28.098	-75.822
Emmagasinement	+62.790	+0.062	+2.311
Bilan de masse	+28.790 (4.323%)	+0.067 (0.042%)	+2.369 (0.411%)

Pour la réalisation 'base' du scénario actuel, en régime permanent, l'entrée d'eau dans le domaine local se fait principalement par les charges constantes des dépôts de l'esker et du roc fracturé en périphérie du modèle (+5132.1 m³/jour ; 96.4%) avec une faible contribution de la recharge (+192.3 m³/jour ; 3.7%). La sortie de l'eau souterraine s'effectue principalement par les puits de l'UTES (-3,600.0 m³/jour ; 70.2%). Les charges constantes représentant la rivière de l'Esturgeon est le second point de sortie de l'eau souterraine (-1725.2 m³/jour ; 33.6%). Ces statistiques sont représentatives des autres réalisations du tableau 5.9.

Le bilan de masse du 1,2-DCA en janvier 2023 montre que les conditions aux limites (i.e. concentrations constantes) sont inactives puisque leur contribution est nulle. Les puits de l'UTES recouvrent entre 61.1 et 72.2% du flux de masse relargué par l'emmagasinement, tandis que la dégradation contribue à une diminution de la masse totale dans le système à raison de 22.8 à 39.1%, pour les trois réalisations inspectées.

Le bilan de masse du benzène en janvier 2023 montre que les conditions aux limites (i.e. concentrations constantes) sont actives et contribuent principalement à l'entrée de masse dans le système. Le relargage du benzène à partir de l'emmagasinement varie entre 0.0 et 9.4%, ce qui est une indication que le panache est relativement stable. Les puits de l'UTES récupèrent entre 74.6 et 86.5% du flux de masse, tandis que la dégradation contribue à la diminution de la masse totale dans le système entre 13.1 et 27.3%. En 2023, l'intensité du flux de masse entrant pour le benzène varie entre 665.98 et 158.76 g/jour, pour les trois réalisations inspectées.

Bref, on constate que le bilan de masse est respecté entre les entrées et sorties avec une erreur de moins de 1% dans la plupart des réalisations inspectées, ce qui est en dessous du critère d'acceptabilité normalement visé de $\pm 10\%$ (MELCC, 2020b). Il est noté que les bilans de l'écoulement et de transport du 1,2-DCA sont supérieurs à celui du benzène.

Pour ce qui est de l'évaluation de la discrétisation spatiale du maillage du modèle numérique, le premier pas de temps de simulation de la réalisation 'base' a été utilisé. Les statistiques du nombre de Péclet (Pe), le rapport entre le taux de transport d'advection et de diffusion, pour tous les éléments est présenté à la figure 5.8. On constate que la valeur maximale est de 1.7 et en moyenne 1.3, ce qui est acceptable considérant que le critère d'acceptabilité normalement visé est ≤ 2.0 .

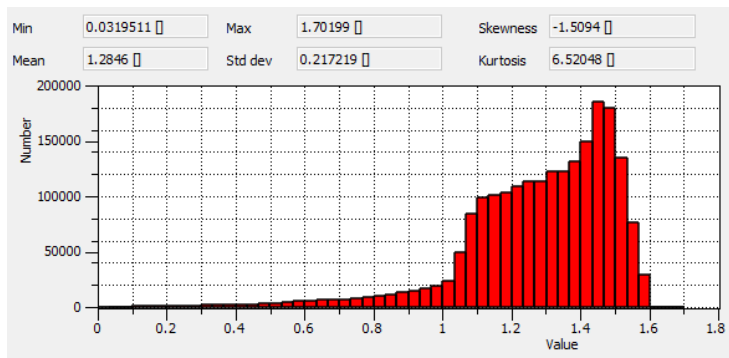


Figure 5.8 Statistiques du nombre de Péclet – Réalisation base – Janvier 2023

Afin de valider la discrétisation temporelle obtenue par l'utilisation du contrôle automatique des pas de temps, le nombre de courant (Co) a été vérifié. Le critère généralement accepté est $Co < Pe/2$. Pour synthétiser l'information de ces nombres (Pe et Co), l'intervalle de confiance de 95% à chaque pas de temps pour la réalisation 'base' est présentée à la figure 5.9. On y constate que la discrétisation spatiale et temporelle respecte les critères d'acceptabilité.

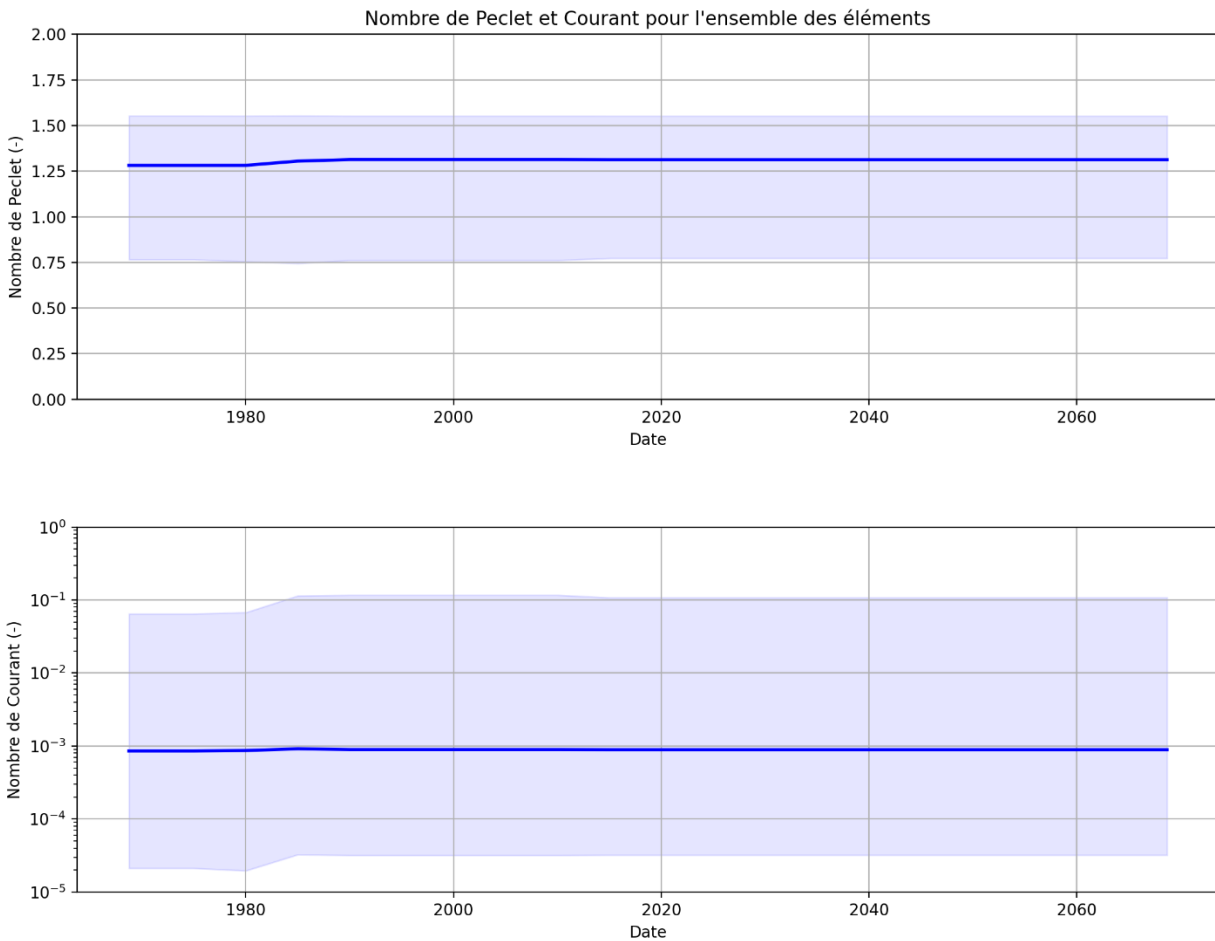


Figure 5.9 Intervalle de confiance de 95% des nombres de Péclet et Courant – Réalisation 'base'

5.6 Simulations prédictives de transport de contaminants

À la suite de l'assimilation des données sur la qualité des eaux souterraines, l'ensemble calibré a permis d'évaluer de manière quantitative la performance des différents scénarios prédictifs suivants (voir section 4.4) :

- 1) Conditions d'écoulement des eaux souterraines sans contrôle hydraulique (SCH)
- 2) Contrôle hydraulique – scénario actuel (SA)
- 3) Contrôle hydraulique – scénario de réduction des débits retenu pour l'UTES-II (SRD)

4) Contrôle hydraulique – scénario retenu pour l'UTES-II avec réhabilitation partielle de la zone source (SRDT)

Il est important de noter que la simulation prédictive sans contrôle hydraulique n'était initialement pas envisagée et, que le domaine du modèle local ainsi que les conditions aux limites latérales d'écoulement influencent significativement les résultats. Plus particulièrement, les charges hydrauliques en aval hydraulique dans le secteur nord-ouest sont plus basses d'au plus 4 m par rapport à la réalisation de conductivité hydraulique moyenne du modèle régional sans capture hydraulique (figure 5.10). Le flux de masse de 1,2-DCA et benzène qui quitte le modèle local à la limite ouest est important pour ce scénario, ce qui tend à sous-estimer l'étendue réelle du panache ainsi que la masse totale simulée. Conséquemment, le lecteur doit en tenir compte lors de l'interprétation des résultats dans l'analyse décisionnelle multicritère.

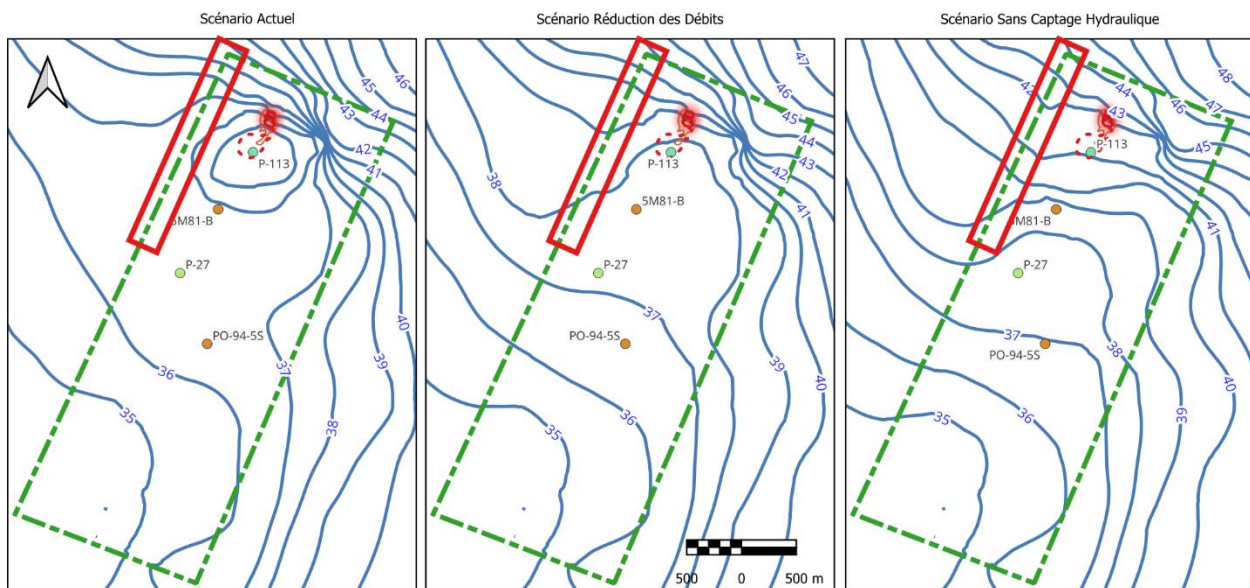


Figure 5.10 Comparaison entre les charges hydrauliques simulées du modèle régional pour les différents scénarios de pompage

L'encadré rouge indique l'endroit pour lequel les conditions aux limites du scénario actuel de la moyenne des réalisations du modèle régional sont sous-estimées dans les scénarios de réduction des débits et sans captage hydraulique. Les isocontours des charges hydrauliques (bleu) sont pour la couche 7 du modèle numérique.

Les concentrations en 1,2-DCA simulées en fonction du temps sont présentées à la planche U, pour les quatre simulations prédictives, et ce, pour quatre puits à différentes positions en aval hydraulique des anciennes lagunes : P-113 (300 m ; affluent de l'UTES), 5M81-B (600 m), P-27 (1,300 m) et PO-94-5S (1,800 m). Plus précisément, le médaillon A de la planche U présente une carte avec la localisation des puits, les courbes des charges hydrauliques dans l'esker en 2020 (couche 7) pour la réalisation base, les limites du modèle local, ainsi que les nœuds de la maille qui représentent la rivière de l'Esturgeon. Le médaillon B présente la somme des débits de pompage simulés pour chacun des quatre scénarios. Les concentrations simulées en fonction du temps pour l'ensemble des réalisations sont présentées aux médaillons C, D, E et F, pour les puits P-113, 5M81-B, P-27 et PO-94-5S, respectivement. Sur chacun des graphiques, la ligne bleue continue représente la moyenne de l'ensemble, tandis que les points noirs représentent les concentrations mesurées. La bande bleue représente l'intervalle simulé des concentrations entre la plus basse et plus haute concentration simulée. On constate que les concentrations prédites du scénario sans captage hydraulique sont plus élevées que les autres scénarios avec des mesures actives de gestion du site. On constate également que les concentrations simulées diminuent graduellement pour les puits les plus loin de la zone source. Il y a exception à l'endroit de P-27, situé à la limite ouest du faciès F1 de l'esker, où la moyenne des concentrations simulées sont plus basses que celles du puits PO-94-5S, plus en aval de la zone source. On note qu'il y a très peu de différence entre les scénarios SA et SRD. Il est possible d'apercevoir une diminution marquée des concentrations de plus d'un ordre de grandeur à P-113 pour le scénario SRDT à la suite d'une réhabilitation partielle en 2030. Finalement, pour ce qui est du scénario hypothétique SCH, on voit une augmentation marquée des concentrations au puits P-113 à la suite de l'arrêt du pompage du puits de l'incinérateur en 2010.

Les concentrations en benzène simulées en fonction du temps sont présentées à la planche V. Les médaillons présentent la même information qu'à la planche U. Les résultats démontrent que

la zone source étant active pour la durée de simulation, les concentrations à l'affluent de l'UTES (P-113) demeurent constantes pour tous les scénarios. L'effet du scénario SRDT a peu d'influence sur les concentrations car la zone source de benzène demeure active à l'extérieure de l'empreinte des anciennes lagunes et dans le roc fracturé. Les résultats du scénario SCH indiquent que la concentration moyenne de l'ensemble au puits PO-94-5S pourrait atteindre une concentration de l'ordre de 10^{-4} mg/L. Les résultats des autres scénarios indiquent que le benzène n'atteint pas le puits PO-94-5S.

Des mosaïques ont été construites pour comparer l'évolution spatiale et temporelle des panaches de contaminants des différents scénarios et ce pour les dépôts meubles et le roc fracturé. Pour visualiser les résultats spatiaux d'un ensemble de réalisations, la probabilité de dépassement d'une concentration a été calculée, tel que définie à la section 4.5.2. Les éléments de la grille avec une probabilité supérieure à un seuil arbitraire de 10% pour la période de 2030 à 2068 ont été retenus. L'année 2068 marque 100 ans depuis le largage des contaminants dans les anciennes lagunes. Les résultats sont présentés à la planche W pour le 1,2-DCA et la planche X pour le benzène.

À la planche W, on constate que l'effet des différents scénarios sur les probabilités de dépassement d'une concentration en 1,2-DCA de 5.0 µg/L est peu visible sur l'étendue du panache de contamination dans les dépôts meubles et le roc fracturé, à l'exception du scénario SCH, qui montre une avancée significative du panache de contaminant jusqu'aux charges constantes représentant la rivière de l'Esturgeon en l'an 2030. Puisque les conditions aux limites de concentration constante ne sont actives que 10 ans, on voit que les probabilités de dépassement et l'étendue du panache de 1,2-DCA commence à diminuer à partir de 2040. De manière générale, l'étendue du panache dans le roc fracturé est moins importante, bien que les probabilités de dépassement demeurent élevées plus longtemps que celles de l'esker. Ceci est

expliqué par une transmissivité plus faible et un coefficient de retard plus élevé dans le roc fracturé.

La planche X présente les probabilités de dépassement d'une concentration en benzène de 0.5 µg/L. On constate que le scénario SRD montre que la masse résiduelle est plus présente en 2040 comparativement au scénario actuel. On constate également que le traitement de la zone source (SRDT) à l'endroit des anciennes lagunes réduit considérablement la probabilité de dépassement à même cette zone. Toutefois, la présence d'une zone source active non-traitée à l'extérieur de l'empreinte des lagunes fait en sorte que le panache est toujours présent à la suite du traitement partiel.

Parmi les critères environnementaux de l'analyse décisionnelle multicritère, la distribution du flux de masse à la rivière de l'Esturgeon ainsi que la masse totale résiduelle du 1,2-DCA doivent être quantifiées. Ces indicateurs de performance environnementale pour les différents scénarios prédictifs sont présentés à la planche Y.

En 2068, le flux de masse moyen du 1,2-DCA a été simulé à une valeur moyenne de 8.0×10^{-5} g/jour pour le scénario SA. Ce flux de masse augmente de 25% (1.0×10^{-4} g/jour) pour les scénarios SRD et SRDT. Le flux de masse prédit pour le scénario SCH est de deux ordres de grandeur supérieurs avec une valeur de 2.0×10^{-2} g/jour, ce qui démontre clairement l'effet bénéfique du piège hydraulique qui a été mis en place en 1984.

Pour ce qui est du flux de masse moyen du benzène en 2068, il varie peu entre les différents scénarios (1.0×10^{-4} g/jour), à l'exception du scénario SCH avec un flux de 1.0×10^{-1} g/jour, soit trois ordres de grandeur supérieurs aux autres scénarios.

Les masses totales de 1,2-DCA et de benzène dans le modèle local sont également présentées à la planche Y pour l'ensemble des éléments du modèle ayant des nœuds avec une concentration ≥ 0.100 mg/L, de ≥ 0.010 à < 0.100 mg/L et de ≥ 0.001 à < 0.010 mg/L. La masse

totale moyenne simulée en 1,2-DCA est maximale vers le début des années 1980 au moment où les conditions limites à concentration constante deviennent inactives. Pour ce qui est du benzène, puisque les conditions limites sont actives tout au long des simulations prédictives, il n'y a pas de diminution évidente comme c'est le cas pour le 1,2-DCA.

On constate que pour le scénario SCH, la masse totale moyenne est maximale pour les trois intervalles de concentration et ce pour le 1,2-DCA et le benzène. Pour le scénario actuel, on peut voir l'effet marqué de diminution de la masse totale lors de la période entre 1984 et 2000 pour les éléments ayant les concentrations les plus fortes (≥ 0.100 mg/L). Pour la même période, la masse totale moyenne de benzène diminue uniquement pour les éléments ayant des concentrations de ≥ 0.010 à < 0.100 mg/L et de ≥ 0.001 à < 0.010 mg/L. Tel qu'illustré à la planche R, ce résultat est interprété comme étant la conséquence de la décroissance de l'étendue du panache de benzène grâce à un piège hydraulique efficace. La masse totale pour les éléments ayant des concentrations ≥ 0.100 mg/L est entièrement contrôlée par les conditions aux limites (100% probabilité de dépassement), c'est pour cette raison que, la diminution de masse est uniquement évidente pour le scénario SRDT, scénario pour lequel une réhabilitation partielle diminue la masse résiduelle de près d'un ordre de grandeur.

5.7 Analyse décisionnelle multicritère

La méthodologie ainsi que les critères retenus pour l'analyse décisionnelle multicritère ont été présentés aux sections 4.3 et 4.5. Le sommaire des résultats obtenus est présenté au tableau 5.12.

Les coûts de fonctionnement de l'UTES pour la période de 2012 à 2024 ont été utilisés pour estimer le coût d'opération et d'électricité annuel moyen. Ces données ont été fournies par le MELCCFP et le coût d'opération annuel moyen a été estimé à 193,171 \$, sans compter les frais reliés à l'électricité, les coûts de rémunération des employés, et l'amortissement de l'UTES. Les

frais annuels moyens d'électricité de l'UTES sont estimés à un montant de 49,214 \$, pour le débit du scénario SA. Pour estimer le coût moyen d'électricité des scénarios SRD et SRDT, la puissance des pompes submersibles présentement en opération a été considérée. Deux pompes de 40 chevaux vapeurs sont utilisées à une efficacité de 70%. Pour un débit de 1,800 m³/j, deux pompes de 25 chevaux vapeurs peuvent fournir à la tâche, ce qui permettrait une économie énergétique estimée à 27%, pour passer de 1,663 à 1,279 kW. La diminution du débit engendre également une économie d'énergie pour l'usine de traitement, donc le prix d'électricité annuel moyen pour ces deux scénarios est estimé à 37,857 \$.

Pour ce qui est du coût de réhabilitation partielle de la zone source, un traitement thermique a été considéré. Les prix obtenus par trois soumissionnaires pour réaliser un essai pilote sur un volume de sol d'approximativement 975 m³ revenait à près de 4,000 \$/m³, ce qui comprenait l'installation des électrodes, des puits d'observation, analyses physico-chimiques du suivi environnementale et l'installation des puits de récupération des fluides et des gaz. Le coût de l'essai pilote a été estimé à 3,000,000 \$. Ce montant a été inclus dans les coûts d'opération de l'UTES pour le scénario SRDT. Le volume de sol à traiter pour l'ensemble du site est estimé à 212,000 m³, donc en assumant une économie d'échelle substantielle à 1,000 \$/m³, le coût de réhabilitation par traitement thermique est estimé à 212,000,000 \$. Cet estimé est sommaire et très incertain. Il est possible qu'une économie d'échelle supérieure soit possible si le nombre de puits d'observation, de récupération des fluides, et d'électrodes est moindre que l'essai pilote, selon les résultats de l'essai.

Les valeurs pour les critères environnementaux proviennent des moyennes des simulations de l'ensemble calibré, tel que présentées à la section 5.6, soit le flux de masse de 1,2-DCA aux conditions limites représentant la rivière de l'Esturgeon, l'aire du panache de 1,2-DCA en l'an 2060 et la masse totale résiduelle simulée de 1,2-DCA en l'an 2060.

L'utilisation des eaux souterraines a été calculée en fonction des débits de pompage de l'UTES pour chacun des scénarios ainsi que le volume d'eau utilisé par le puits de l'incinérateur au nord des anciennes lagunes qui était en fonction jusqu'en 2010.

Finalement, les scénarios ont été ordonnés de manière relative en fonction du temps nécessaire pour que la qualité des eaux souterraines retourne aux conditions naturelles. Le scénario SRDT étant celui qui nécessitera le moins de temps (rang 1), et inversement, le scénario SCH est celui qui nécessitera le plus de temps (rang 4).

Tableau 5.12 Sommaire de l'analyse multicritère

Critères d'évaluation		Unité	Poids	Scénario actuel (SA) ^	Scénario sans capture hydraulique (SCH)	Scénario réduction du débit (SRD)	Scénario réduction du débit et traitement thermique (SRDT) &
Économique (1984-2060) *	Coûts d'opération UTES (sans électricité) +	\$	Ec1	14,681,059 \$	- \$	14,681,059 \$	17,681,059 \$
	Coûts d'électricité	\$	Ec2	3,740,338 \$	- \$	3,342,833 \$	3,342,833 \$
	Coûts du traitement thermique	\$	Ec3	- \$	- \$	- \$	212,000,000 \$
Environnementale	Flux de masse de 1,2-DCA aux conditions aux limites – Rivière de l'Esturgeon	g/j	Ev4	8.0E-05	2.0E-02	1.0E-04	1.0E-04
	Aire simulée du panache de 1,2-DCA en l'an 2060 dans l'esker	m²	Ev5	1,270,400	5,585,200	1,449,200	1,433,200
	La masse totale résiduelle de 1,2-DCA simulée dans le modèle en l'an 2060 (>0.1 mg/L)	Kg	Ev6	100	3000	110	80
Sociétale	Utilisation cumulative des eaux souterraines en l'an 2060 (ressource)	Million m³	S7	104.3	4.6	81.3	81.3
	Temps nécessaire pour que la qualité de l'eau souterraine retourne aux conditions naturelles	Rang	S8	2	4	3	1
Notes: * Dollar de 2024 + Excluant les coûts de rémunération et l'amortissement de l'UTES ^ Scénario actuel (SA) : Premier rang lorsque les critères environnementaux sont favorisés & Scénario réduction du débit et traitement thermique (SRDT) : Premier rang lorsque les critères sociaux sont favorisés							

L'analyse multicritère favorise le scénario SA (Alternative A1) lorsqu'on considère un poids égal pour chacun des critères. La figure 5.11 illustre la sensibilité du classement des différents scénarios si l'un des scénarios est exclu. Sur l'axe horizontal on retrouve les quatre alternatives (scénarios) qui ont été retirées l'une après l'autre. Le marqueur 'nul' signifie qu'aucun scénario n'est exclu, donc le classement est à poids égaux. On constate qu'il y a généralement peu d'inversion dans le classement, mis à part lorsqu'on exclut le scénario SCH (A2), où le scénario SRDT (A4) est promu au deuxième rang et le scénario SRD (A3) est relégué au troisième rang. D'autre part, sans le scénario SA (A1), les scénarios SRDT (A4) et SCH (A2) sont *ex aequo* en deuxième place et en première position, le scénario SRD (A3).

La corrélation pour des rangs est de 62.5% lors du retrait du scénario SCH (A2), ce qui est un indicateur que les rangs des scénarios changent par rapport aux autres permutations. Ce résultat est important car le scénario SCH est hypothétique, donc immatériel car le piège hydraulique de l'UTES a été actif entre 1984 et 2024. Le classement à poids égaux, sans le scénario SCH (A2), est donc SA (A1), SRDT(A4) et SRD (A3).

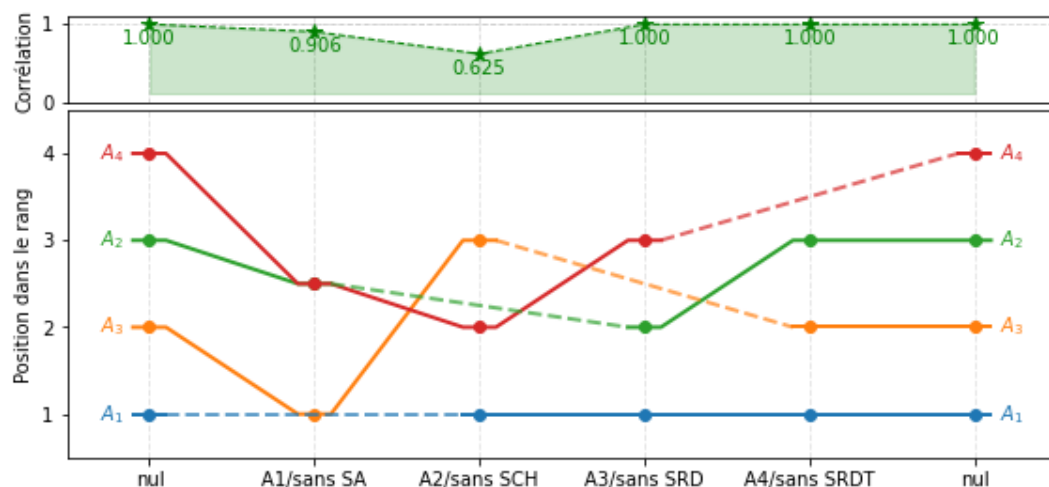


Figure 5.11 Analyse de sensibilité de la position dans le rang en fonction des scénarios prédictifs exclus

Afin de visualiser les résultats de l'analyse multicritère décisionnelle, un tableau de bord pouvant être lu par un navigateur internet (fichier de format *HTML*) a été développé. L'interface graphique est présentée à la planche Z avec une description du contenu. L'objectif principal visé par la création d'un tableau de bord était de mieux interagir avec les résultats obtenus des différents scénarios et présenter l'information de manière concise. Ainsi, l'utilisateur peut voir l'évolution temporelle d'un panache de contaminant en fonction du choix du composé, du scénario de gestion environnementale et de l'unité hydrostratigraphique. Un graphique présente les chroniques temporelles des débits des puits de l'UTES, le volume cumulatif d'eau souterraine extrait, ainsi que les coûts cumulatifs de fonctionnement du scénario sélectionné.

Le second objectif de cet outil décisionnel était de pouvoir explorer la sensibilité de la pondération des différents critères d'évaluation, ce qui a été noté comme un élément manquant dans la plupart des études antérieures multicritères (Abrams et al., 2024). Il est possible d'explorer les résultats d'analyse TOPSIS selon une pondération plus ou moins importante de chacun des critères. Pour l'outil numérique, l'utilisateur a l'option de modifier le poids de chaque critère pour une valeur de 0.01, 0.5 et 1.0. Toutes les combinaisons de poids possibles entre les critères peuvent être sélectionnées afin d'évaluer l'influence sur le classement des scénarios prédictifs. Cette flexibilité d'analyse permet une plus grande transparence quant à la pondération des critères de l'analyse décisionnelle.

Un sommaire de trois cas de pondération extrême est fourni à la figure 5.12. L'axe vertical est le résultat de priorité par similitude à une solution idéale sur une échelle de 0 à 1. Une valeur de 1 indique que le scénario est idéal, donc au premier rang du classement. L'axe horizontal présente les résultats des quatre scénarios, soit de gauche à droite ; SA, SCH, SRD et SRDT. La figure 5.12A représente le rang des scénarios lorsque la pondération est égale entre tous les critères d'analyse. Les graphiques 5.12B, C et D représentent les cas avec une pondération maximale pour les critères économiques, environnementaux et sociaux, respectivement. On constate que

le scénario SA est au premier rang à pondération égale ainsi que pour le cas où les critères environnementaux sont privilégiés. Dans le cas où les critères économiques sont promus, le scénario SCH domine le classement, car il n'y a pas de coûts directement reliés à la contamination des aquifères (esker et roc fracturé), la contamination de la rivière de l'Esturgeon ou la perte de revenu des municipalités et des agriculteurs qui n'ont pas accès à cette ressource en eau. Finalement, si on tient compte des critères sociaux, le scénario SRDT devient au premier rang, car la consommation d'eau souterraine est moindre et le temps nécessaire pour revenir aux conditions initiales est au premier rang. La figure 5.12 résume bien le dilemme existant pour les gestionnaires du site, qui doivent balancer le poids des pressions coercitives exercées par les différentes parties prenantes.

On note également, que le scénario hypothétique SCH, l'inaction à la suite de la contamination, est le plus défavorable lorsque le poids des critères environnementaux est maximal.

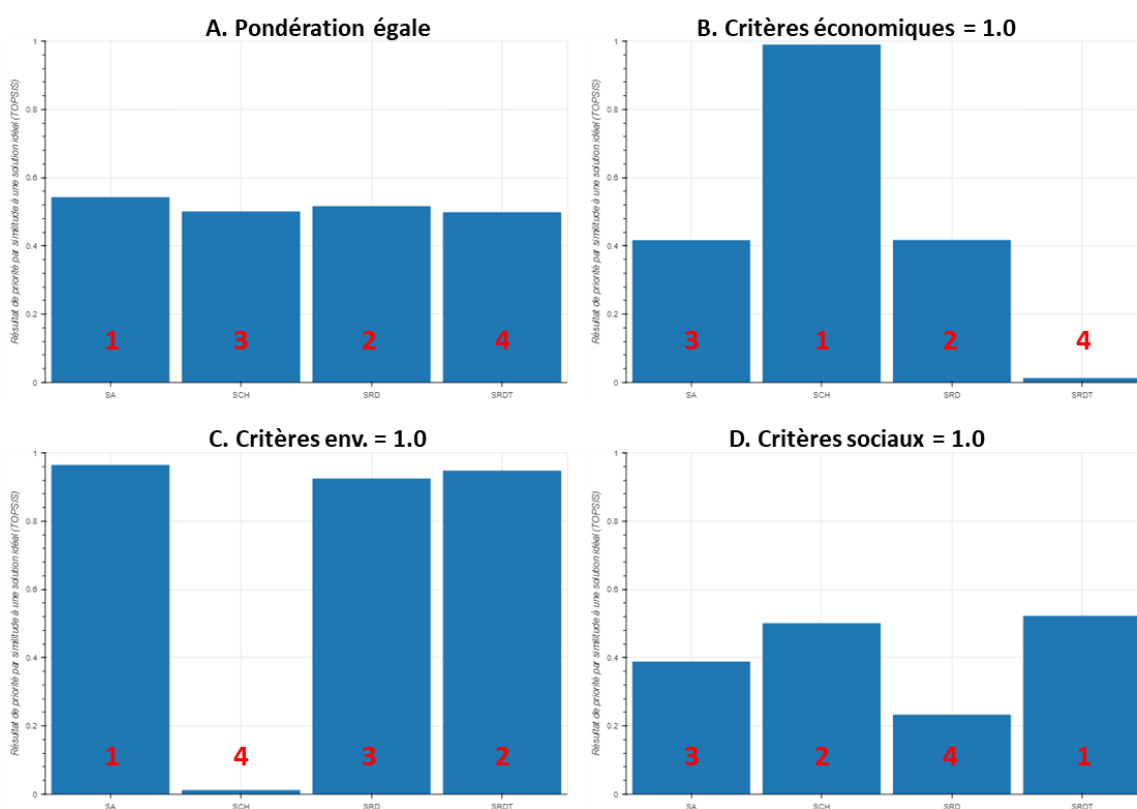


Figure 5.12 Effet sur le classement d'une différente pondération entre les catégories de critère.

Le classement des scénarios prédictifs a été évalué pour chacune des 11 méthodes de pondération présentées à la section 4.3 et les résultats sont présentés à la figure 5.13. On constate que les résultats pour la méthode des poids égaux (EQUAL) sont conformes à la figure 5.12A, avec le scénario SA étant au premier rang, suivi des scénarios SRD, SCH et SRDT. Le rang des scénarios prédictifs entre les méthodes de pondération sont généralement similaires, toutefois on observe que le scénario SCH est plus souvent au premier rang comparativement au scénario SA. Les scénarios SRD et SRDT sont généralement au troisième et quatrième rang. Cette analyse de l'effet de la pondération met en lumière l'importance de la pondération sur les résultats de l'analyse multicritère. La pondération selon la méthode CILOS est la seule qui classe le scénario SCH au dernier rang.

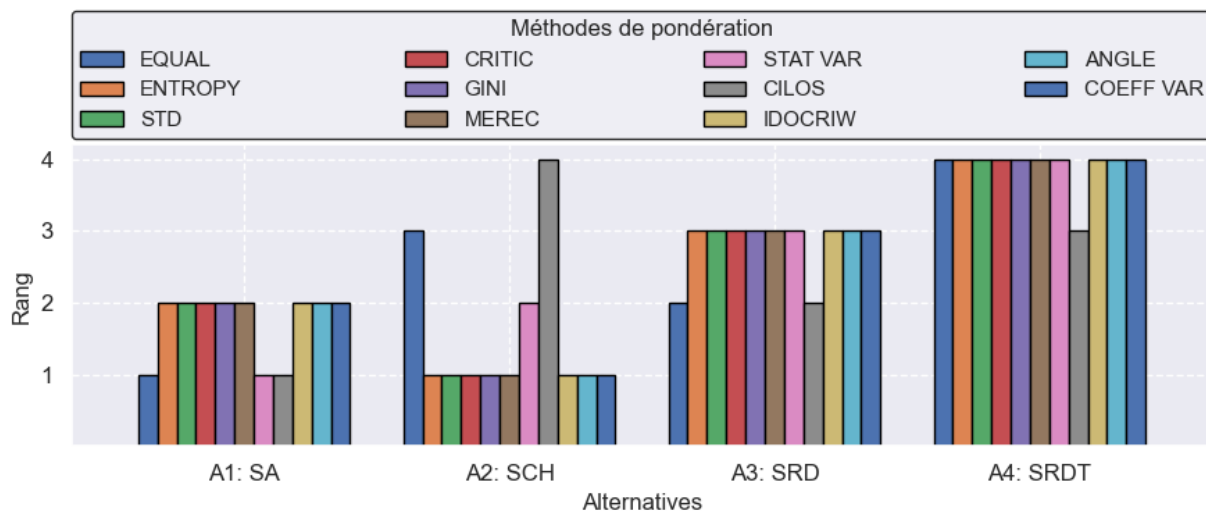


Figure 5.13 Effet de la méthode de pondération sur le classement

Pour terminer, une analyse de sensibilité par rapport au pourcentage de changement du poids de chacun des critères a été réalisée en utilisant -100% et +100% de la valeur des poids égaux.

Les résultats de l'analyse de sensibilité sont présentés à la figure 5.14. Cette analyse permet de mieux comprendre le classement des différents scénarios prédictifs en fonction de l'augmentation ou diminution de la valeur de chacun des critères. Le lecteur est invité à utiliser l'outil numérique et ajuster le poids de tous les critères à une valeur égale de 0.5 et augmenter/diminuer individuellement un critère à la fois. Par exemple, le scénario SCH est au troisième rang lorsque les poids sont égaux (0% de changement). Si l'on regarde l'effet d'augmenter de 100% le poids du critère Ec1 (Coûts d'opération UTES; tableau 5.12), le scénario SCH devient au premier rang, et inversement, si l'on diminue de 100% Ec1, ce scénario est positionné au quatrième rang. Cette figure permet de comprendre que le scénario SRDT est au premier rang lorsque le critère Ec3 (Coûts du traitement thermique) est au moins 40% inférieur aux autres critères ou S8 (Temps nécessaire pour que la qualité de l'eau souterraine retourne aux conditions naturelles) est au moins 80% supérieur aux autres critères. On constate également que le rang du scénario SCH varie entre la première et dernière position pour l'ensemble des critères dans l'intervalle de pourcentage de changement des poids utilisés, à l'exception du critère Ec3.

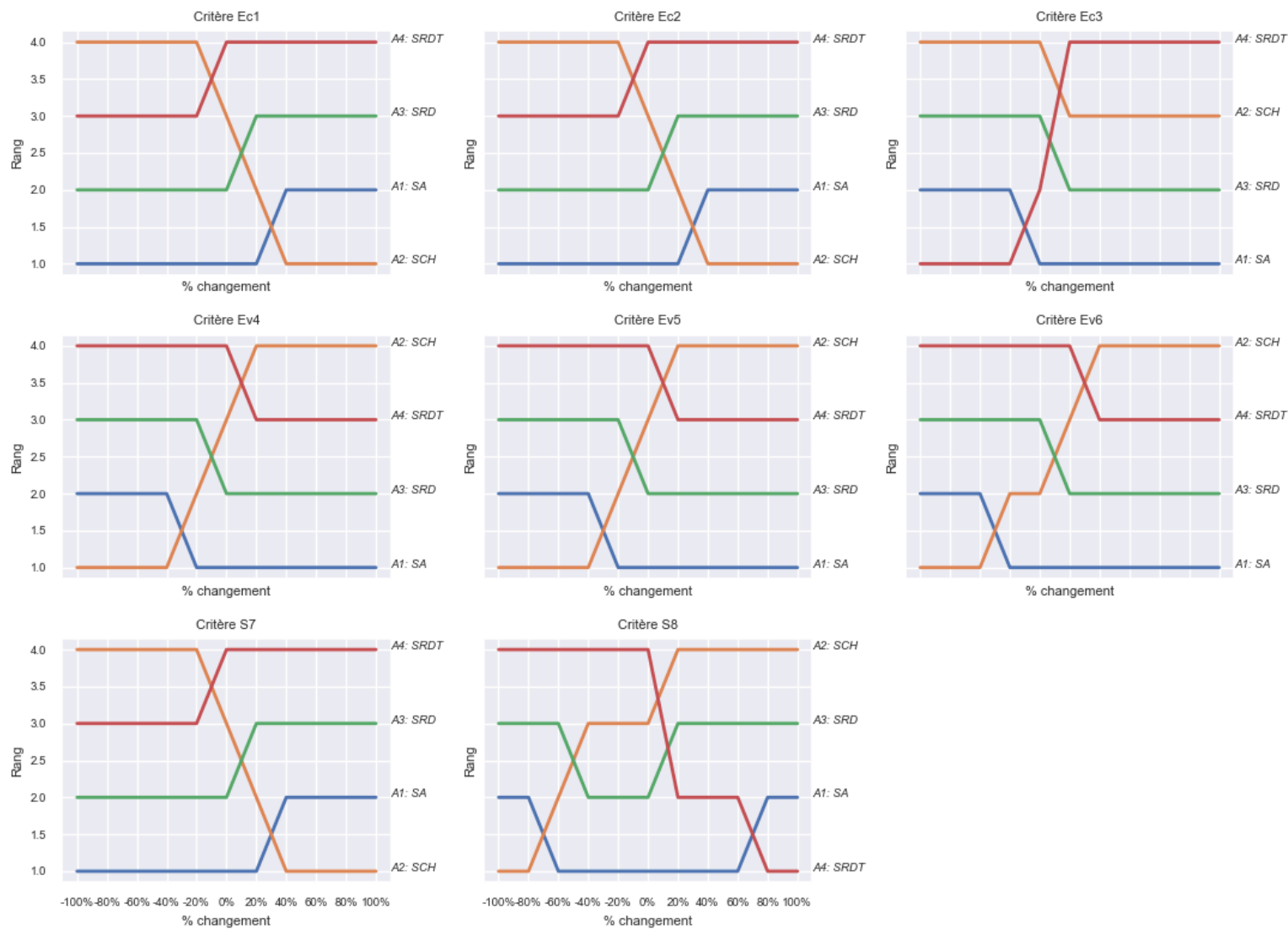


Figure 5.14 Analyse de sensibilité de la pondération des critères d'évaluations sur le classement des différents scénarios prédictifs pour la méthode TOPSIS

5.8 Limitations et Incertitudes

Les limitations d'un modèle peuvent être définies comme étant des restrictions d'utilisation. Pour ce qui est de l'incertitude, elle peut être définie comme étant un état d'esprit dans lequel quelqu'un hésite à croire un fait. Il est important pour toute étude de modélisation numérique de bien définir les limitations et incertitudes ainsi que de les communiquer.

Malheureusement, il n'existe pas de méthode standard pour déterminer l'incertitude d'un modèle, car l'incertitude provient de plusieurs catégories d'information :

- Théoriques : composantes hydrogéologiques inconnues du modèle conceptuel
- Paramétriques : valeur de certains paramètres qui influencent l'écoulement ou le transport de contaminants tel que le taux de dégradation, par exemple.
- Temporelles : événements passés, présents ou futurs qui peuvent changer les conditions d'écoulement ou de transport, par exemple.

L'incertitude paramétrique associée à la non-unicité des paramètres a été explorée en utilisant la méthode de lissage d'ensemble. La sensibilité des paramètres a été décrite précédemment en utilisant le ratio de la variance de ceux-ci, avant et après le calage de l'ensemble.

Les scénarios prédictifs ont permis d'explorer une partie de l'incertitude spatio-temporelle, bien que des incertitudes demeurent sur les conditions passés et futurs du site.

De manière plus spécifique au modèle local de transport, les prochains paragraphes discutent des limites et incertitudes notées au cours des travaux.

Les charges constantes en périphérie du modèle local de transport ont été imposées à partir de la réalisation moyenne du modèle régional en régime permanent au débit de pompage actuel. Idéalement, le processus d'imposition des charges hydrauliques constantes aurait dû être fait individuellement pour chacune des réalisations de l'ensemble, et ce, pour chacun des scénarios

prédictifs. Cette simplification est une limitation en soit, car elle fixe les charges hydrauliques latérales. Toutefois, pour les deux scénarios de réduction des débits de pompage, les charges hydrauliques imposées sont artificiellement inférieures à celles que le modèle régional aurait simulée. Ce biais a pour effet d'augmenter les gradients hydrauliques vers la périphérie du modèle local, et donc à surestimer la migration du flux des contaminants. Pour ce qui est du scénario SCH, les charges hydrauliques en périphérie du modèle local sont quelques mètres inférieurs aux résultats du modèle régional. D'autant plus que le domaine du modèle local a été sous-estimé pour les conditions hydrauliques de ce scénario, l'interprétation des résultats des simulations doit être limitée à l'aspect qualitatif, tel que présenté dans la discussion des résultats (sections 5.5 et 5.6).

Les charges hydrauliques simulées pour les puits bbl-12-a, bbl-16-a et bbl-20-a, crépinés à moins de 8 m de profondeur, sont significativement plus basses que les valeurs observées, ce qui représente une limitation du modèle quant à sa fiabilité de représenter la connectivité hydraulique entre les eaux de surface et les eaux souterraines. Cette composante du système devrait faire l'objet d'une étude, afin de déterminer le degré de connectivité hydraulique entre les eaux peu profondes à proximité des anciennes lagunes et les eaux souterraines (e.g. eaux de surfaces avec un potentiel d'interaction avec les eaux souterraines).

Les coefficients d'emménagement ont été fixés lors de l'assimilation des charges hydrauliques dans le modèle d'écoulement régional. Les coefficients d'emménagement devraient être revus afin de réduire les différences entre les variations des niveaux d'eau simulés et observés. De plus, la paramétrisation du modèle empirique de la conductivité hydraulique en fonction de la saturation devrait être revue à la suite d'acquisition de données de terrain. Cette fonction constitue donc une cause d'incertitude au modèle.

Peu d'échantillons permettent de définir la distribution spatiale de la fraction de carbone organique dans les dépôts meubles et le roc fracturé au site. Des échantillons de terrains pourraient être prélevés afin de réduire l'incertitude de ce paramètre.

La méthode de lissage d'ensemble permet de réduire en moyenne l'erreur par rapport aux mesures, toutefois, contrairement aux algorithmes tel que Gauss-Levenberg-Marquardt (GLM), elle ne permet pas d'augmenter la variance des paramètres de l'ensemble initial, ce qui est une limitation de la méthode en soi. La distribution initiale des paramètres devient donc très importante pour la suite de l'assimilation des données. La représentativité du jeu de données disponible est présentée et discutée à la section 5.2.5. Tel que discuté à la section 5.4, l'assimilation des concentrations a été faite à la suite de la calibration des charges hydrauliques et ceci représente une limite potentielle. L'assimilation de l'ensemble des observations simultanément (charges hydrauliques et concentrations des contaminants) devrait être considérée si le modèle local fait l'objet d'une nouvelle calibration.

Les limites spatiales et la simplification d'une concentration uniforme à même les zones sources limite le modèle local de transport à simuler la variabilité observée des concentrations de 1,2-DCA et de benzène. L'architecture interne de la zone source pourrait être améliorée en utilisant les différents pourcentages de saturation en LIL et LID. De plus, les conditions aux limites de concentration constante ne permettent pas de simuler l'épuisement graduel de la zone source et par conséquent n'ont pas de fin. Si des simulations prédictives à très long terme sont désirées, l'épuisement de la zone source devrait être simulée, particulièrement pour des composés qui ont un comportement similaire au benzène, dont les concentrations sont relativement stable présentement. Ceci devrait être fait en considérant le bilan de masse des sols, ainsi, les conditions aux limites pourront être assignées de manière transitoire, pour qu'elles ne soient plus actives lorsque la masse totale dissoute intrant dans le modèle a épuisé la masse présente estimée dans les sols en fonction de la saturation de LIL et LID.

6 CONCLUSION

L'objectif principal de ce projet de maîtrise était de mieux comprendre l'évolution spatio-temporelle des panaches de contaminants dans l'esker et le roc fracturé au site des anciennes lagunes de Mercier. Le second objectif est de synthétiser et faciliter la communication des résultats de modélisation stochastique aux preneurs de décision quant à la gestion à long-terme du site des anciennes lagunes de Mercier.

Pour ce faire, une revue de l'historique de contamination et des études antérieures a permis de synthétiser le modèle conceptuel hydrogéologique ainsi qu'identifier les informations pertinentes sur la composition des contaminants de la zone source et sur la qualité des eaux souterraines aux alentours du site.

En utilisant le mélange des principaux composés qui constituent la zone source, l'évolution théorique de la séquence de dissolution a été simulée afin de la comparer avec les composés de l'affluent de l'UTES ainsi que du réseau de puits d'observation régional. Cette étape a également permis d'identifier les composés avec un nombre suffisant de mesures de concentrations qui peuvent être utilisées dans la phase de modélisation du transport de contaminant (1,2-DCA et benzène).

À partir du modèle d'écoulement d'eau souterraine régional, un modèle local de transport avec une maille adaptée au transport a été construit. Plusieurs décisions ont été prises quant aux dimensions du domaine, les conditions aux limites d'écoulement et de transport, les composés à simuler, la période et scénarios prédictifs qui devaient être simulés et quels paramètres à ajuster dans le cadre d'assimilation des données. Les paramètres calibrés de l'ensemble du modèle régional qui contrôlent l'écoulement de l'eau souterraine ont été fixés pour cette étude. L'écoulement simulé par le modèle local a été comparé à celui du modèle régional pour fin de validation. Les mesures de variation des niveaux d'eau à l'été et l'automne 2023 ont été utilisées

à cette fin. Les résultats montrent que l'erreur quadratique moyenne des réalisations de l'ensemble du modèle local est supérieure de 9% en comparaison à celle du modèle régional, ce qui est jugée acceptable pour poursuivre avec la simulation de transport de contaminant.

Pour le transport des contaminants, le modèle local a été calibré aux mesures de concentrations de 1,2-DCA et de benzène de l'affluent et du réseau de puits d'observation régional. La méthode de calibration par lissage d'ensemble a permis d'obtenir 67 combinaisons de paramètres équiprobables pour prédire les dimensions spatio-temporelles des panaches de contamination dans l'esker et le roc fracturé. Généralement, le modèle local a été en mesure de reproduire les tendances spatio-temporelles observées des concentrations de 1,2-DCA et de benzène. Quatre scénarios prédictifs de différentes gestions environnementales du site ont été simulés ; scénario actuel, sans capture hydraulique, scénario de réduction des débits et le scénario de réduction des débits et traitement thermique. Les résultats de ces prédictions ont contribué à quantifier les critères de l'analyse décisionnelle multicritère suivant : flux de masse de 1,2-DCA aux conditions aux frontières représentant la rivière de l'Esturgeon, l'aire simulée du panache de 1,2-DCA dans les dépôts de l'esker en l'an 2060, et la masse dissoute totale résiduelle simulée de 1,2-DCA en l'an 2060 pour l'eau souterraine ayant une concentration supérieure à 0.1 mg/L. Finalement, un outil numérique de synthèse des résultats de simulation et de l'analyse décisionnelle multicritère a été construit afin de faciliter la communication des résultats de cet analyse. Cet outil permet de visualiser l'évolution spatio-temporelle entre 1950 et 2068 des panaches de benzène et 1,2-DCA dans l'esker et le roc fracturé, tout en illustrant l'évolution des coûts de fonctionnement et le volume d'eau cumulatif. Il permet également de faire varier le poids de chacun des huit critères de l'analyse multicritères et de visualiser le résultat du classement des différents scénarios de gestion environnementale du site.

Comme l'a si bien évoqué George Edward Pelham Box, un célèbre statisticien britannique, « *tous les modèles sont faux, mais certains sont utiles* » (Box, 1976). La modélisation numérique de

l'écoulement des eaux souterraines et de transport de contaminant n'échappe pas à cet adage. Les systèmes hydrogéologiques sont généralement plus complexes étant donné leur hétérogénéité et anisotropie que leurs représentations numériques (Clement, 2011). Le modèle local de transport de contaminant au site des anciennes lagunes de Mercier n'y fait pas exception. Bien qu'imparfait, l'assimilation de l'historique des concentrations mesurées entre 1983 et 2022 de 1,2-DCA et de benzène dans l'affluent de l'UTES et les principaux puits d'observation par une méthode de lissage d'ensemble a permis de contraindre les paramètres de transport et de simuler un ensemble de prédictions pour différents scénarios de gestion environnementale du site. L'utilisation d'un ensemble de réalisations au lieu d'un seul modèle déterministe (approche plus traditionnelle) a permis d'explorer différents résultats prédictifs équiprobables et ainsi quantifier l'incertitude de ceux-ci.

Bien que le domaine du modèle local et ses conditions aux limites n'avaient pas été initialement conçus pour la simulation du scénario hypothétique sans captage hydraulique (SCH), les résultats de celui-ci ont permis d'estimer l'étendue que les panaches de contamination auraient eu en l'absence d'une intervention humaine. Les résultats combinés des quatre scénarios prédictifs de gestion environnementale (SA, SRD, SRDT, SCH) ont supporté l'analyse multicritère qui considèrerait les coûts et bénéfices environnementaux, sociaux et économiques. Par le développement d'un outil de communication des résultats, l'incertitude à la pondération des critères est prise en compte et contribue à une plus grande transparence dans le choix d'un scénario de gestion environnementale du site.

Les coûts reliés au scénario de réhabilitation partielle par une méthode thermique sont incertains et devraient être revus à la suite des résultats d'un essai pilote, qui devrait réduire l'incertitude quant aux spécifications techniques d'une réhabilitation à pleine échelle.

Il a été démontré avec les travaux que l'assimilation des données de concentrations par la méthode de lissage d'ensemble de plusieurs composés simultanément est possible. Il a été

identifié que la pondération des observations est une étape critique dans le processus. PESTPP-iES utilise la pondération des observations pour générer le bruit sur l'ensemble des observations. À la lumière d'une publication récente (Fienen et al., 2024), il a été démontré que l'assimilation par lissage d'ensemble itératif est particulièrement sensible au bruit des observations et à la pondération des observations. Par conséquent, établir le bruit des observations indépendamment de la pondération des observations devrait être favorisé afin de pouvoir mieux contrôler la formulation de la fonction objective du processus d'inversion. Ceci est d'autant plus important lorsque les observations sont de différents types (concentrations, niveaux d'eau, débits d'un cours d'eau, ...) et de différents ordres de grandeurs.

Plus spécifiquement pour le site des anciennes lagunes de Mercier, étant donné la présence de points d'eau peu profond à proximité des puits de l'UTES qui semblent être permanent, une meilleure connaissance des liens hydrauliques entre les eaux de surface et eaux souterraines devrait être acquise, et le modèle conceptuel revu avant d'entreprendre une nouvelle phase d'amélioration du modèle régional d'écoulement et local de transport.

Finalement, les conditions aux limites représentant la zone source de benzène ont été identifiées comme étant critiques dans le cadre de simulation à très long-terme. Le fait que les conditions limites sous formes de concentrations constantes fait en sorte qu'une masse infinie de benzène dissous peut être injectée dans le système. Un bilan de masse des contaminants présents dans la zone source devrait être considéré pour limiter la masse totale injectée dans de futures simulations prédictives à long-terme.

En espérant que l'exercice ait pu contribuer à une prise de décision éclairée pour la gestion environnementale du site. L'efficacité du piège hydraulique du scénario actuel et du scénario de réduction des débits de l'UTES a été mis en évidence, par la diminution de l'aire des panaches de 1,2-DCA et benzène dans l'esker et le roc fracturé en 2025. Toutefois, considérant la présence de LIL et LID dans la zone source, la séquence de dissolution du mélange, l'épuisement de la

zone source est très incertaine et le seul scénario qui permet de mettre fin à la dissolution de ces composés est la réhabilitation partielle de la zone source. Volontairement, l'auteur ne conclut pas sur lequel des scénarios est favorisé, car la pondération de l'analyse multicritères doit faire l'objet de consultation entre les différents intervenants au dossier, ce qui n'a pas été fait dans cet étude.

7 BIBLIOGRAPHIE

- Abrams, F., Hendrickx, L., Turcanu, C., Sweeck, L., Van Orshoven, J., 2024. Multi-Criteria Decision Analysis to Support the Remediation of Polluted Soils: A Review of Case Studies. *Land* Vol. 13 (6) 887, pp 1-21. <https://doi.org/10.3390/land13060887>
- Aziz, C.E., Newell, C.J., Gonzales, J.R., Haas, P., Clement, T.P., 2000. BIOCHLOR Natural Attenuation Decision Support System User's Manual Version 1.0 (No. EPA/600/R-00/008). National Risk Management Research Laboratory Office of Research and Development USEPA, Cincinnati, Ohio 45268.
- Bączkiewicz, A., Wątróbski, J., 2023. Crispyn—A Python library for determining criteria significance with objective weighting methods. *SoftwareX* Vol. 19 (101541), pp 1-10. <https://doi.org/10.1016/j.softx.2022.101166>
- Ballard, J.-M., Huchet, F., Lefebvre, R., 2022. Modélisation numérique régionale des conditions actuelles et en climat futur des ressources en eau souterraine dans la région des anciennes lagunes de Mercier (Rapport final No. R2120 120 pp). INRS - Centre ETE, Québec.
- Ballard, J.-M., Huchet, F., Raynald, M., Gosselin, J.-S., Lefebvre, R., 2021. Réalisation de travaux de caractérisation complémentaire pour la modélisation de l'écoulement des eaux souterraines à Mercier : conditions des ressources en eau souterraine dans la région et en amont des anciennes lagunes de Mercier (Rapport final No. R2033 88 pp). INRS - Centre ETE, Québec.
- BAPE, 1994. Restauration du lieu contaminé de Mercier rapport d'enquête et d'audience publique (No. ISBN 2-550-09653-3 241 pp). Bureau d'audiences publiques sur l'environnement, <https://numerique.banq.qc.ca/patrimoine/details/52327/50006?docpos=2>, Québec.
- Bear, J., 1988. Dynamics of Fluids in Porous Media. Dover Publications Inc., 794 pp, ISBN 0-486-65675-6, New York.
- Beaulieu, M., 2021. Guide d'intervention - Protection des sols et réhabilitation des terrains contaminés. Ministère de l'Environnement et de la lutte contre les changements climatiques, 326 pp, ISBN 978-2-550-83515-8, <https://www.environnement.gouv.qc.ca/sol/terrains/guide-intervention/guide-intervention-protection-rehab.pdf>, Québec.
- Belmeskine, H., 2012. Étude écotoxicologique du site de Mercier soumis aux impacts de l'incinérateur de déchets dangereux (Doctorat en biologie). Université du Québec, Institut National de la Recherche Scientifique, 208 pp, <https://espace.inrs.ca/id/eprint/574/>, Québec.
- Benchalco, N., 2014. Étude du potentiel toxique des eaux souterraines de Mercier: Impact des anciennes lagunes (Doctorat en biologie). Université du Québec, Institut National de la Recherche Scientifique, 174 pp, <https://espace.inrs.ca/id/eprint/2753/>, Québec.
- Box, G.E.P., 1976. Science and Statistics. *Journal of the American Statistical Association* 71 (356), pp 791-799. <https://doi.org/10.1080/01621459.1976.10480949>
- CCME, (Canadian Council of Ministers of the Environment), 1989a. Code of practice for used oil management in Canada (No. CCME-TS/WM-TRE006E, 51 pp, https://publications.gc.ca/collections/collection_2019/eccc/En108-3-1-6-eng.pdf).

- Industrial Programs Branch, Conservation and Protection, Environment Canada, Ottawa, Ontario.
- CCME, (Canadian Council of Ministers of the Environment), 1989b. Used oil management in Canada: Existing practices and alternatives (No. CCME-TS/WM-TRE007, 91 pp, <https://open-science.canada.ca/handle/123456789/1370>). Industrial Programs Branch, Conservation and Protection, Environment Canada, Ottawa, Ontario.
- Chen, Y., Oliver, D.S., 2012. Ensemble randomized maximum likelihood method as an iterative ensemble smoother. *Mathematical Geosciences* Vol. 44 (1), pp 1-26. <https://doi.org/10.1007/s11004-011-9376-z>
- Claprood, M., Béraud, T., Boutin, L.-C., Gloaguen, E., Martel, R., 2023. Rapport final du Projet: UTES-II Ville Mercier. INRS - Centre ETE, 611 pp, <https://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/souterraines/lagunes-mercier/rapport-final-UTES-II-ville-Mercier.pdf>, Québec.
- Clement, T.P., 2011. Complexities in Hindcasting Models—When Should We Say Enough Is Enough? *Groundwater* Vol. 49 (5), pp 620-629. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.2010.00765.x>
- CNFS, 1993. Caractérisation exhaustive du panache de contamination des anciennes lagunes de Ville Mercier. (No. Volumes 1-5). Ministère de l'environnement du Québec., Québec.
- Couture, Y., 1998. Caractérisation du profil de contamination des lagunes de Ville Mercier (No. 172, 142 pp). Centre d'expertise en analyse environnementale du Québec, Québec.
- Croteau, A., Nastev, M., Lefebvre, R., 2010. Groundwater Recharge Assessment in the Chateauguay River Watershed. *Canadian Water Resources Journal* Vol. 35 (4), pp 451-468. <https://doi.org/10.4296/cwrj3504451>
- Denis, C., 1991. Caractérisation hydrogéologique du substratum rocheux fracturé du site pollué de Ville Mercier. (Mémoire de Maîtrise, 177 pp, <https://doi.org/10.1522/1465565>). Université du Québec à Chicoutimi, Sciences de la Terre., Chicoutimi, Québec.
- Diersch, H.-J., 2013. FEFLOW—Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media. WASY, Institute of Water Resources Planning and System Research Ltd., 996 pp, Berlin, Germany. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-38739-5>
- Ding, X.-H., Feng, S.-J., Zhu, Z.-W., 2025. Analytical model for reactive contaminant back-diffusion from low-permeability aquitards with internal source zones. *Journal of Hydrology* Vol. 646 (132306), ISBN 0022-1694. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2024.132306>
- EPA, 2004. In Situ Thermal Treatment of Chlorinated Solvents: Fundamentals and Field Applications (No. EPA 542-R-04-010, 145 pp, <https://clu-in.org/download/remed/epa542r04010.pdf>). U.S. Environmental Protection Agency, Office of Solid Waste and Emergency Response, Washington, DC 20460.
- Evensen, G., 1994. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics. *Journal of Geophysical Research: Oceans* Vol. 99 (C5), pp 10143-10162. <https://doi.org/10.1029/94JC00572>
- Fienen, M.N., White, J.T., Hayek, M., 2024. Parameter ESTimation With the Gauss–Levenberg–Marquardt Algorithm: An Intuitive Guide. *Groundwater* Vol. 63 (1), pp 93-104. <https://doi.org/10.1111/gwat.13433>
- Gouvernement du Québec, 2023. Loi sur la qualité de l'environnement, RLRQ chapitre Q-2.

- Gouvernement du Québec, 2018. Règlement sur la protection des eaux souterraines dans la région de ville de Mercier, RLRQ chapitre Q-2, r.18.1.
- Hydro-Québec TransÉnergie, 2013. Synthèse des connaissances environnementales pour les lignes et les postes 1973-2013. Gestion des Contaminants. Hydro-Québec, 58 pp, https://www.hydroquebec.com/data/developpement-durable/pdf/15_GestionDesContaminants.pdf, Montréal, QC.
- ITRC, (Interstate Technology & Regulatory Council), 2015. Integrated DNAPL Site Characterization and Tools Selection (ISC-1). Washington, D.C.: Interstate Technology & Regulatory Council, DNAPL Site Characterization Team. www.itrcweb.org/DNAPL-ISC_tools-selection.
- ITRC, (Interstate Technology & Regulatory Council), 2010. Use and Measurement of Mass Flux and Mass Discharge. MASSFLUX-1. Interstate Technology & Regulatory Council, Washington, D.C.: Interstate Technology & Regulatory Council, Integrated DNAPL Site Strategy Team. www.itrcweb.org.
- Kizielewicz, B., Shekhovtsov, A., Sałabun, W., 2023. pymcdm—The universal library for solving multi-criteria decision-making problems. *SoftwareX* Vol. 22 (101368), 8 pp. <https://doi.org/10.1016/j.softx.2023.101368>
- Laberge, M., 2007. La catastrophe écologique de la région de Mercier : Une analyse socio-historique des interventions écocitoyennes, 1986 à 2007 (Mémoire de Maîtrise, 182 pp, <https://archipel.uqam.ca/755/1/M9990.pdf>). Université du Québec à Montréal, Montréal, QC.
- Lefebvre, R., 2007. Contexte hydrogéologique et potentiel de réhabilitation du site des anciennes lagunes de Mercier (Québec), Canada (Rapport final No. R-914, 67 pp). Institut national de la recherche scientifique, Québec.
- Lion, F., Colombano, S., Aubert, N., Boissard, G., 2015. Définir une stratégie de dépollution: approche basée sur la masse de polluant et la capacité de relargage d'une pollution (Rapport final No. BRGM/RP-64350-FR, 216 pp, <https://ssp-infoterre.brgm.fr/fr/rapport/definir-strategie-de-depollution>). Bureau de recherches géologiques et minières (BRGM), Orléans Cedex 2, France.
- Mackay, D., Celsie, A., Parnis, J.M., 2015. The Evolution and Future of Environmental Partition Coefficients. *Environmental Reviews* Vol. 24 (1), pp 101-113. <https://doi.org/10.1139/er-2015-0059>
- Martel, R., Batailler, É., Robert, T., 2021a. Étude de la mobilité des contaminants dans l'eau souterraine (Rapport de recherche, 123 pp, <https://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/souterraines/etude-mobilite-contaminants-eaux-souterraine.pdf>). INRS - Centre ETE, Québec.
- Martel, R., Batailler, É., Robert, T., Bédard, K., Trépanier, L., Boutin, M., Lévesque, R., 2021b. Soutien Scientifique à un projet d'essai de technologies de réhabilitation thermique applicables au site des anciennes lagunes de Mercier : Étude de cas et élaboration d'un protocole d'essais en laboratoire (Rapport de recherche, 101 pp). Institut national de la recherche scientifique, Québec.
- Martel, R., Robert, T., Batailler, É., Boutin, M., Deschênes-Rancourt, C., Trépanier, L., 2018. Revue de littérature sur les technologies de réhabilitation des sols et des eaux souterraines et réévaluation du potentiel de réhabilitation du site contaminé des anciennes lagunes de Mercier (Rapport final No. R1783). Institut national de la recherche scientifique, Québec.

- Martel, R., Robert, T., Lévesque, R., 2023. Soutien scientifique au projet de R&D sur des technologies de réhabilitation applicables au site des ancienne lagunes de Mercier : Réalisation d'essais en laboratoire visant l'applicabilité d'une méthode thermique pour la réhabilitation partielle du Site (Rapport 1 No. R 2156). Institut national de la recherche scientifique, Québec.
- McWhorter, D.B., Sunada, D.K., 1977. Ground-water hydrology and hydraulics. Water Resources Publication LLC, Colorado.
- MELCC, 2023a. Figure 1 - Vue en perscpective 3D des unités hydrogéologiques du site à l'étude [WWW Document]. URL <https://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/souterraines/lagunes-mercier/figure1.pdf> (accessed 6.15.23).
- MELCC, 2023b. Rapport de suivi de la qualité des eaux souterraines de la région de Mercier, Printemps et automne 2022 (<https://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/souterraines/lagunes-mercier/rapport-suivi-eaux-souterraines-mercier-2022.pdf>). Ministère de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques, Québec.
- MELCC, 2022. Rapport de suivi de la qualité des eaux souterraines de la région de Mercier, Printemps et automne 2021 (<https://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/souterraines/lagunes-mercier/rapport-suivi-eaux-souterraines-mercier-2021.pdf>). Ministère de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques, Québec.
- MELCC, 2021. Rapport de suivi de la qualité des eaux souterraines de la région de Mercier, Automne 2020 (<https://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/souterraines/lagunes-mercier/rapport-suivi-eaux-souterraines-mercier-2020.pdf>). Ministère de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques, Québec.
- MELCC, 2020a. Rapport de suivi de la qualité des eaux souterraines de la région de Mercier, Printemps et automne 2019 (<http://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/souterraines/lagunes-mercier/rapport-suivi2019.pdf>). Ministère de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques, Québec.
- MELCC, 2020b. Guide de présentation des travaux de modélisation hydrogéologique (No. 978-2-550-87203- 0, 48 pp, <https://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/souterraines/Guide-modelisation-hydrogeologique.pdf>). Gouvernement du Québec, Québec.
- MELCC, 2019. Rapport de suivi de la qualité des eaux souterraines de la région de Mercier, Printemps et automne 2018 (<https://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/souterraines/lagunes-mercier/rapport-suivi2018.pdf>). Ministère de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques, Québec.
- MELCC, 2018. Rapport de suivi de la qualité des eaux souterraines de la région de Mercier, Printemps et automne 2017 (<https://www.environnement.gouv.qc.ca/eau/souterraines/lagunes-mercier/rapport-suivi2017.pdf>). Ministère de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques, Québec.
- Murray, W., 1994. Santé Humaine et Environnement: Les risques posés par les BPC (No. BP-392F, <https://publications.gc.ca/Collection-R/LoPBdP/BP/bp392-f.htm>).

- Nadeau, G., 2010. Analyse sociohistorique de l'action publique relative au cycle de gestion des déchets dangereux incinérés à Mercier (1972-2008) (Mémoire de Maîtrise, 255 pp). Université du Québec à Montréal, Montréal, QC.
- Newell, C.J., Rifai, H.S., Wilson, J.T., Connor, J.A., Aziz, J.A., Suarez, M.P., 2002. Calculation and Use of First-Order Rate Constants for Monitored Natural Attenuation Studies (No. EPA/540/S-02/500, 28 pp, <https://nepis.epa.gov/Exe/ZyPDF.cgi/10004674.PDF?Dockkey=10004674.PDF>). United States Environmental Protection Agency, Cincinnati, Ohio 45268.
- Pontlevoy, O., 2004. Modélisation hydrogéologique pour supporter la gestion du système aquifère de la région de Ville-Mercier (Mémoire de Maîtrise, 173 pp, <https://espace.inrs.ca/id/eprint/1730/>). Institut national de la recherche scientifique, Québec.
- Poulin, M., 1977. Groundwater contamination near a liquid waste lagoon, Ville Mercier, Québec. (M.Sc. thesis, 158pp). University of Waterloo, Earth Sciences, Waterloo, Ontario.
- Racine, C., 2005. Étude des alternatives de contrôle des panaches d'eau souterraine contaminée par des liquides immiscibles denses et légers, Ville-Mercier, Québec, Canada (Mémoire de Maîtrise, 203 pp, <https://espace.inrs.ca/id/eprint/419/>). Institut national de la recherche scientifique, Québec.
- Richards, L.A., 1931. CAPILLARY CONDUCTION OF LIQUIDS THROUGH POROUS MEDIUMS. *Physics* Vol. 1 (5), pp 318-333. <https://doi.org/10.1063/1.1745010>
- Schaap, M.G., Leij, F.J., Van Genuchten, M.T., 2001. Rosetta: A computer program for estimating soil hydraulic parameters with hierarchical pedotransfer functions. *Journal of hydrology* Vol. 251 (3-4), pp 163-176.
- Suarez, M.P., Rifai, H.S., 1999. Biodegradation Rates for Fuel Hydrocarbons and Chlorinated Solvents in Groundwater. *Bioremediation Journal* Vol. 3 (4), pp 337-362. <https://doi.org/10.1080/10889869991219433>
- Tremblay, T., Hunter, J., Lamontagne, C., Nastev, M., 2010. High Resolution Seismic Survey in a Contaminated Esker Area, Chateauguay River Watershed, Quebec. *Canadian Water Resources Journal / Revue canadienne des ressources hydriques* Vol. 35 (4), pp 417-432. <https://doi.org/10.4296/cwrj3504417>
- US EPA, 2008. Green Remediation: Incorporating Sustainable Environmental Practices into Remediation of Contaminated Sites (Technology Primer No. EPA 542-R-08-002, 56 pp, <https://www.epa.gov/sites/default/files/2015-04/documents/green-remediation-primer.pdf>). Office of Solid Waste and Emergency Response, Cincinnati, Ohio 45242-0419.
- van Leeuwen, P.J., Evensen, G., 1996. Data Assimilation and Inverse Methods in Terms of a Probabilistic Formulation. *Monthly Weather Review* Vol. 124 (12), pp 2898-2913. [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(1996\)124<2898:DAAIMI>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(1996)124<2898:DAAIMI>2.0.CO;2)
- Wątróbski, J., Bączkiewicz, A., Salabun, W., 2022. Version [1.1]—[pyrepo-mcda — Reference Objects based MCDA Software Package]. *SoftwareX* Vol. 19 (101197). <https://doi.org/10.1016/j.softx.2022.101197>
- White, J.T., 2018. A model-independent iterative ensemble smoother for efficient history-matching and uncertainty quantification in very high dimensions. *ENVIRONMENTAL MODELLING & SOFTWARE* Vol. 109, pp 191-201. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2018.06.009>

White, J.T., Hunt, R.J., Fienen, M.N., Doherty, J.E., 2020. Approaches to highly parameterized inversion: PEST++ Version 5, a software suite for parameter estimation, uncertainty analysis, management optimization and sensitivity analysis (Report No. 7-C26), Techniques and Methods. Reston, VA. <https://doi.org/10.3133/tm7C26>

8 ANNEXE

Chemical Properties for Calculation of Impact to Ground Water Soil Remediation Standards

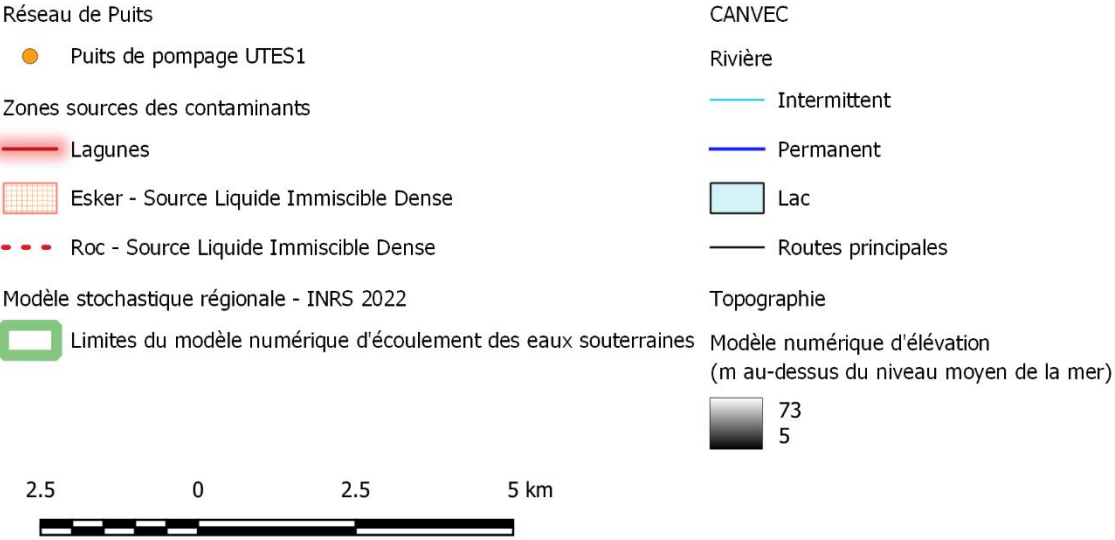
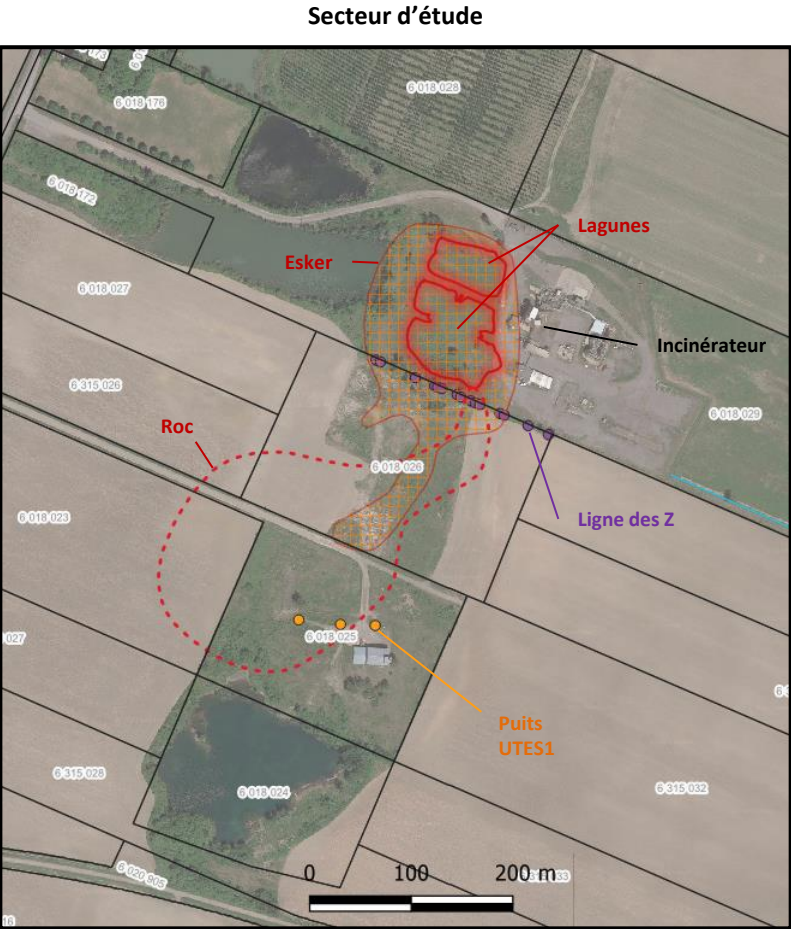
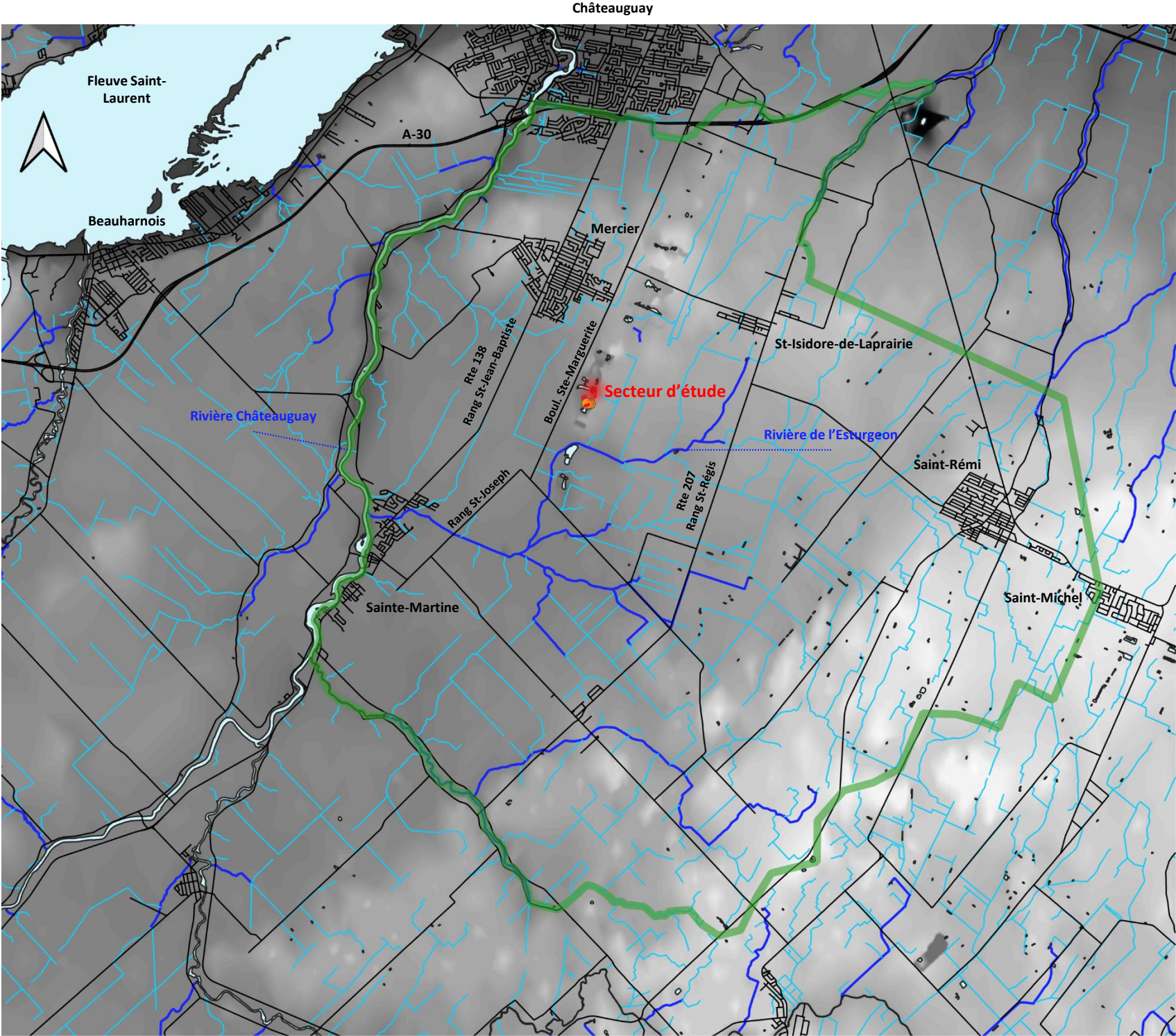
<i>Chemical</i>	<i>CAS Number</i>	<i>Henry's law constant (atm- m³/mol)</i>	<i>Henry's law constant (dimensionless)</i>	<i>Water solubility (mg/L)</i>	<i>Diffusion coefficient in air (cm²/sec)</i>	<i>Diffusion coefficient in water (cm²/sec)</i>	<i>K_{oc} or K_d (L/kg)^a</i>	<i>Soil Saturation Limit (mg/kg)</i>
Acenaphthene	83-32-9	1.55E-04	6.36E-03	4.24E+00	4.21E-02	7.69E-06	7.08E+03	-
Acenaphthylene	208-96-8	1.11E-04	4.51E-03	1.60E+01	4.40E-02	7.50E-06	2.76E+03	-
Acetone (2-propanone)	67-64-1	3.88E-05	1.59E-03	1.00E+06	1.24E-01	1.14E-05	5.75E-01	1.55E+05
Acetophenone	98-86-2	1.10E-05	4.51E-04	6.10E+03	6.00E-02	8.70E-06	3.70E+01	1.39E+03
Acrolein	107-02-8	1.20E-04	4.92E-03	2.10E+05	1.05E-01	1.20E-05	1.00E+00	3.27E+04
Acrylonitrile	107-13-1	1.00E-04	4.10E-03	7.40E+04	1.22E-01	1.30E-05	2.00E+00	1.17E+04
Aldrin	309-00-2	1.70E-04	6.97E-03	1.80E-01	1.32E-02	4.86E-06	2.45E+06	-
Aluminum (total)	7429-90-5	-	-	-	-	-	1.50E+03	-
Anthracene	120-12-7	6.50E-05	2.67E-03	4.34E-02	3.24E-02	7.74E-06	2.95E+04	-
Antimony (total)	7440-36-0	-	-	-	-	-	4.50E+01	-
Arsenic (total)	7440-38-2	-	-	-	-	-	2.60E+01	-
Atrazine	1912-24-9	2.96E-09	1.21E-07	7.00E+01	2.60E-02	6.70E-06	3.60E+02	-
Barium (total)	7440-39-3	-	-	-	-	-	1.70E+01	-
Benzaldehyde	100-52-7	2.67E-05	1.09E-03	3.00E+03	7.30E-02	9.10E-06	2.90E+01	6.34E+02
Benzene	71-43-2	5.55E-03	2.28E-01	1.75E+03	8.80E-02	9.80E-06	5.89E+01	5.22E+02
Benztidine	92-87-5	3.90E-11	1.60E-09	5.00E+02	3.40E-02	1.50E-05	4.70E+01	-
Benzo(a)anthracene (1,2-Benzanthracene)	56-55-3	3.35E-06	1.37E-04	9.40E-03	5.10E-02	9.00E-06	3.98E+05	-
Benzo(a)pyrene	50-32-8	1.13E-06	4.63E-05	1.62E-03	4.30E-02	9.00E-06	1.02E+06	-
Benzo(b)fluoranthene (3,4-Benzofluoranthene)	205-99-2	1.11E-04	4.55E-03	1.50E-03	2.26E-02	5.56E-06	1.23E+06	-
Benzo(ghi)perylene	191-24-2	1.40E-07	5.74E-06	2.60E-04	2.01E-02	5.30E-06	3.86E+06	-
Benzo(k)fluoranthene	207-08-9	8.29E-07	3.40E-05	8.00E-04	2.26E-02	5.56E-06	1.23E+06	-
Beryllium	7440-41-7	-	-	-	-	-	3.50E+01	-
1,1'-Biphenyl	92-52-4	3.00E-04	1.23E-02	6.00E+00	4.04E-02	8.20E-06	8.56E+03	-
Bis(2-chloroethyl)ether	111-44-4	1.80E-05	7.38E-04	1.72E+04	6.92E-02	7.53E-06	1.55E+01	3.17E+03
Bis(2-chloroisopropyl)ether (2,2'-oxybis(1-chloropropane))	108-60-1	7.40E-05	3.03E-03	1.30E+03	6.02E-02	6.40E-06	3.60E+02	1.14E+03
Bis(2-ethylhexyl)phthalate	117-81-7	1.02E-07	4.18E-06	3.40E-01	3.51E-02	3.66E-06	1.51E+07	1.03E+04
Bromodichloromethane (Dichlorobromomethane)	75-27-4	1.60E-03	6.56E-02	6.74E+03	2.98E-02	1.06E-05	5.50E+01	1.83E+03
Bromoform	75-25-2	5.35E-04	2.19E-02	3.10E+03	1.49E-02	1.03E-05	8.71E+01	1.02E+03
Bromomethane (Methyl bromide)	74-83-9	6.24E-03	2.56E-01	1.52E+04	7.28E-02	1.21E-05	1.05E+01	3.12E+03
2-Butanone (Methyl ethyl ketone) (MEK)	78-93-3	5.60E-05	2.30E-03	2.20E+05	8.08E-02	9.80E-06	1.00E+00	3.42E+04
Butylbenzyl phthalate	85-68-7	1.26E-06	5.17E-05	2.69E+00	1.74E-02	4.83E-06	5.75E+04	3.10E+02
Cadmium	7440-43-9	-	-	-	-	-	2.30E+01	-
Caprolactam	105-60-2	3.66E-09	1.50E-07	3.01E+05	6.50E-02	9.00E-06	6.00E+00	-
Carbazole	86-74-8	1.53E-08	6.27E-07	7.48E+00	3.90E-02	7.03E-06	3.39E+03	-
Carbon disulfide	75-15-0	3.03E-02	1.24E+00	1.19E+03	1.04E-01	1.00E-05	4.57E+01	4.68E+02
Carbon tetrachloride	56-23-5	3.04E+02	1.25E+00	7.93E+02	7.80E-02	8.80E-06	1.74E+02	5.17E+02
Chlordane (alpha and gamma forms summed)	57-74-9	4.86E-05	1.99E-03	5.60E-02	1.18E-02	4.37E-06	1.20E+05	-
Chlorobenzene	108-90-7	3.70E-03	1.52E-01	4.72E+02	7.30E-02	8.70E-06	2.19E+02	2.88E+02
Chloroethane	75-00-3	8.80E-03	3.61E-01	5.70E+03	2.71E-01	1.10E-05	1.50E+01	-
Chloroform	67-66-3	3.67E-03	1.50E-01	7.92E+03	1.04E-01	1.00E-05	3.98E+01	1.99E+03
Chloromethane (Methyl chloride)	74-87-3	8.80E-03	3.61E-01	5.30E+03	1.26E-01	6.50E-06	6.00E+00	-
2-Chlorophenol (o-Chlorophenol)	95-57-8	3.91E-04	1.60E-02	2.20E+04	5.01E-02	9.46E-06	3.98E+02	2.09E+04
Chrysene	218-01-9	9.46E-05	3.88E-03	1.60E-03	2.48E-02	6.21E-06	3.98E+05	-
Cobalt (total)	7440-48-4	-	-	-	-	-	4.50E+01	-
Copper (total)	7440-50-8	-	-	-	-	-	4.30E+02	-
Cyanide	57-12-5	-	-	-	-	-	9.90E+00	-
4,4'-DDD (p,p'-TDE)	72-54-8	4.00E-06	1.64E-04	9.00E-02	1.69E-02	4.76E-06	1.00E+06	-
4,4'-DDE (p,p'-DDX)	72-55-9	2.10E-05	8.61E-04	1.20E-01	1.44E-02	5.87E-06	4.47E+06	-
4,4'-DDT	50-29-3	8.10E-06	3.32E-04	2.50E-02	1.37E-02	4.95E-06	2.63E+06	-
Dibenz(a,h)anthracene	53-70-3	1.47E-08	6.03E-07	2.49E-03	2.02E-02	5.18E-06	3.80E+06	-
Dibromochloromethane (Chlorodibromomethane)	124-48-1	7.83E-04	3.21E-02	2.60E+03	1.96E-02	1.05E-05	6.31E+01	7.37E+02
1,2-Dibromo-3-chloropropane	96-12-8	1.50E-04	6.15E-03	1.20E+03	2.12E-02	7.00E-06	7.90E+01	3.74E+02
1,2-Dibromoethane	106-93-4	7.40E-04	3.03E-02	4.20E+03	2.87E-02	8.10E-06	4.60E+01	1.05E+03
1,2-Dichlorobenzene (o-Dichlorobenzene)	95-50-1	1.90E-03	7.79E-02	1.56E+02	6.90E-02	7.90E-06	6.17E+02	2.18E+02
1,3-Dichlorobenzene (m-Dichlorobenzene)	541-73-1	3.10E-03	1.27E-01	1.30E+02	6.92E-02	7.90E-06	7.08E+02	2.06E+02
1,4-Dichlorobenzene (p-Dichlorobenzene)	106-46-7	2.43E-03	9.96E-02	7.38E+01	6.90E-02	7.90E-06	6.17E+02	-
3,3'-Dichlorobenzidine	91-94-1	4.00E-09	1.64E-07	3.11E+00	1.94E-02	6.74E-06	7.24E+02	-
Dichlorodifluoromethane	75-71-8	3.40E-01	1.39E+01	2.80E+02	5.20E-02	1.00E-05	6.60E+01	-

<u>Chemical</u>	<u>CAS Number</u>	<u>Henry's law constant (atm·m³/mol)</u>	<u>Henry's law constant (dimensionless)</u>	<u>Water solubility (mg/L)</u>	<u>Diffusion coefficient in air (cm²/sec)</u>	<u>Diffusion coefficient in water (cm²/sec)</u>	<u>K_{oc} or K_d (L/kg)^a</u>	<u>Soil Saturation Limit (mg/kg)</u>
1,1-Dichloroethane	75-34-3	5.62E-03	2.30E-01	5.06E+03	7.42E-02	1.05E-05	3.16E+01	1.24E+03
1,2-Dichloroethane	107-06-2	9.79E-04	4.01E-02	8.52E+03	1.04E-01	9.90E-06	1.74E+01	1.64E+03
1,1-Dichloroethene (1,1-Dichloroethylene)	75-35-4	2.61E-02	1.07E+00	2.25E+03	9.00E-02	1.04E-05	5.89E+01	8.99E+02
1,2-Dichloroethene (cis) (c-1,2-Dichloroethylene)	156-59-2	4.08E-03	1.67E-01	3.50E+03	7.36E-02	1.13E-05	3.55E+01	8.55E+02
1,2-Dichloroethene (trans) (t-1,2-Dichloroethylene)	156-60-5	9.38E-03	3.85E-01	6.30E+03	7.07E-02	1.19E-05	5.25E+01	1.92E+03
2,4-Dichlorophenol	120-83-2	3.16E-06	1.30E-04	4.50E+03	3.46E-02	8.77E-06	1.59E+02	-
1,2-Dichloropropane	78-87-5	2.80E-03	1.15E-01	2.80E+03	7.80E-02	8.73E-06	4.37E+01	7.13E+02
1,3-Dichloropropene (cis and trans) (summed)	542-75-6	1.77E-02	7.26E-01	2.80E+03	6.26E-02	1.00E-05	4.57E+01	9.29E+02
Diethrin	60-57-1	1.51E-05	6.19E-04	1.95E-01	1.25E-02	4.74E-06	2.14E+04	-
Diethylphthalate	84-66-2	4.50E-07	1.85E-05	1.08E+03	2.56E-02	6.35E-06	2.88E+02	7.88E+02
2,4-Dimethylphenol	105-67-9	2.00E-06	8.20E-05	7.87E+03	5.84E-02	8.69E-06	2.09E+02	-
Di-n-butyl phthalate	84-74-2	9.38E-10	3.85E-08	1.12E+01	4.38E-02	7.86E-06	3.39E+04	7.61E+02
4,6-Dinitro-2-methylphenol	534-52-1	4.30E-07	1.76E-05	2.00E+02	2.93E-02	6.90E-06	1.16E+02	-
2,4-Dinitrophenol	51-28-5	4.43E-07	1.82E-05	2.79E+03	2.73E-02	9.06E-06	1.78E-02	-
2,4-Dinitrotoluene	121-14-2	9.26E-08	3.80E-06	2.70E+02	2.03E-01	7.06E-06	9.55E+01	-
2,6-Dinitrotoluene	606-20-2	7.47E-07	3.06E-05	1.82E+02	3.27E-02	7.26E-06	6.92E+01	-
2,4-Dinitrotoluene/2,6-Dinitrotoluene (mixture)	25321-14-6	4.20E-07	1.72E-05	2.26E+02	1.18E-01	7.16E-06	8.24E+01	-
Di-n-octyl phthalate	117-84-0	6.68E-05	2.74E-03	2.00E-02	1.51E-02	3.58E-06	8.32E+07	3.33E+03
1,2-Diphenylhydrazine	122-66-7	1.50E-06	6.15E-05	6.80E+01	3.17E-02	7.40E-06	7.10E+02	-
Endosulfan I and Endosulfan II (alpha and beta) (summed)	115-29-7	1.12E-05	4.59E-04	5.10E-01	1.15E-02	4.55E-06	2.14E+03	-
Endosulfan sulfate	1031-07-8	2.10E-03	8.61E-02	6.40E+00	1.10E-02	4.40E-06	1.02E+03	-
Endrin	72-20-8	7.52E-06	3.08E-04	2.50E-01	1.25E-02	4.74E-06	1.23E+04	-
Ethylbenzene	100-41-4	7.88E-03	3.23E-01	1.69E+02	7.50E-02	7.80E-06	3.63E+02	1.55E+02
Fluoranthene	206-44-0	1.61E-05	6.60E-04	2.06E-01	3.02E-02	6.35E-06	1.07E+05	-
Fluorene	86-73-7	6.36E-05	2.61E-03	1.98E+00	3.63E-02	7.88E-06	1.38E+04	-
alpha-HCH (alpha-BHC)	319-84-6	1.06E-05	4.35E-04	2.00E+00	1.42E-02	7.34E-06	1.23E+03	-
beta-HCH (beta-BHC)	319-85-7	7.43E-07	3.05E-05	2.40E-01	1.42E-02	7.34E-06	1.26E+03	-
Heptachlor	76-44-8	1.09E-03	4.47E-02	1.80E-01	1.12E-02	5.69E-06	1.41E+06	-
Heptachlor epoxide	1024-57-3	9.50E-06	3.90E-04	2.00E-01	1.32E-02	4.23E-06	8.32E+04	-
Hexachlorobenzene	118-74-1	1.32E-03	5.41E-02	6.20E+00	5.42E-02	5.91E-06	5.50E+04	-
Hexachloro-1,3-butadiene	87-68-3	8.15E-03	3.34E-01	3.23E+00	5.61E-02	6.16E-06	5.37E+04	3.48E+02
Hexachlorocyclopentadiene	77-47-4	2.70E-02	1.11E+00	1.80E+00	1.61E-02	7.21E-06	2.00E+05	7.21E+02
Hexachloroethane	67-72-1	3.89E-03	1.59E-01	5.00E+01	2.50E-03	6.80E-06	1.78E+03	-
2-Hexanone	591-78-6	9.30E-05	3.80E-03	1.80E+04			2.40E+01	3.63E+03
Indeno(1,2,3-cd)pyrene	193-39-5	1.60E-06	6.56E-05	2.20E-05	1.90E-02	5.66E-06	3.47E+06	-
Isophorone	78-59-1	6.64E-06	2.72E-04	1.20E+04	6.23E-02	6.76E-06	4.68E+01	2.96E+03
Lead (total)	7439-92-1	-	-	-	-	-	9.00E+02	-
Lindane (gamma-HCH) (gamma-BHC)	58-89-9	1.40E-05	5.74E-04	6.80E+00	1.42E-02	7.34E-06	1.07E+03	-
Manganese (total)	7439-96-5	-	-	-	-	-	6.50E+01	-
Mercury (total)	7439-97-6	-	-	-	-	-	2.00E-01	-
Methoxychlor	72-43-5	1.58E-05	6.48E-04	4.50E-02	1.56E-02	4.46E-06	9.77E+04	-
Methyl acetate	79-20-9	1.15E-04	4.72E-03	2.40E+05	1.04E-01	1.00E-05	2.00E+00	3.79E+04
Methylene chloride (Dichloromethane)	75-09-2	2.19E-03	8.98E-02	1.30E+04	1.01E-01	1.17E-05	1.17E+01	2.44E+03
2-Methylnaphthalene	91-57-6	5.2E-04	2.13E-02	2.5E+01	5.22E-02	7.75E-06	6.82E+03	-
2-Methylphenol (o-cresol)	95-48-7	1.20E-06	4.92E-05	2.60E+04	7.40E-02	8.30E-06	9.12E+01	-
4-Methylphenol (p-cresol)	106-44-5	7.90E-07	3.24E-05	2.20E+04	7.40E-02	1.00E-05	7.40E+01	-
MTBE (tert-butyl methyl ether)	1634-04-4	5.87E-04	2.40E-02	4.80E+04	1.02E-01	1.00E-05	8.00E+00	8.27E+03
Naphthalene	91-20-3	4.83E-04	1.98E-02	3.10E+01	5.90E-02	7.50E-06	2.00E+03	-
Nickel (total)	7440-02-0	-	-	-	-	-	2.40E+01	-
2-Nitroaniline	88-74-4	1.81E-08	7.42E-07	2.90E+02	7.30E-02	8.00E-06	7.40E+01	-
Nitrobenzene	98-95-3	2.40E-05	9.84E-04	2.09E+03	7.60E-02	8.60E-06	6.46E+01	5.91E+02
N-Nitrosodimethylamine	62-75-9	1.20E-06	4.92E-05	1.00E+06	1.13E-01	1.20E-05	3.00E-01	1.54E+05
N-Nitrosodi-n-propylamine	621-64-7	2.25E-06	9.23E-05	9.89E+03	5.45E-02	8.17E-06	2.40E+01	-
N-Nitrosodiphenylamine	86-30-6	5.00E-06	2.05E-04	3.51E+01	3.12E-02	6.35E-06	1.29E+03	-
PCBs (Polychlorinated biphenyls) (summed)	1336-36-3	2.60E-03	1.07E-01	7.00E-01	1.75E-02	8.00E-06	3.09E+05	4.33E+02
Pentachlorophenol	87-86-5	2.44E-08	1.00E-06	1.95E+03	5.60E-02	6.10E-06	5.10E+03	-
Phenanthrene	85-01-8	2.30E-05	9.43E-04	1.10E+00	3.33E-02	7.50E-06	2.65E+04	-
Phenol	108-95-2	3.97E-07	1.63E-05	8.28E+04	8.20E-02	9.10E-06	2.88E+01	-
Pyrene	129-00-0	1.10E-05	4.51E-04	1.35E-01	2.72E-02	7.24E-06	1.05E+05	-
Selenium (total)	7782-49-2	-	-	-	-	-	1.40E+01	-
Silver (total)	7440-22-4	-	-	-	-	-	2.60E-01	-
Styrene	100-42-5	2.75E-05	1.13E-01	3.10E+02	7.10E-02	8.00E-06	7.76E+02	5.33E+02
Tertiary butyl alcohol (TBA)	75-65-0	9.05E-06	3.71E-04	1.00E+06	9.85E-02	1.14E-05	2.00E+00	-

<i>Chemical</i>	<i>CAS Number</i>	<i>Henry's law constant (atm-m³/mol)</i>	<i>Henry's law constant (dimensionless)</i>	<i>Water solubility (mg/L)</i>	<i>Diffusion coefficient in air (cm²/sec)</i>	<i>Diffusion coefficient in water (cm²/sec)</i>	<i>K_{oc} or K_d (L/kg)^a</i>	<i>Soil Saturation Limit (mg/kg)</i>
1,1,2,2-Tetrachloroethane	79-34-5	3.45E-04	1.41E-02	2.97E+03	7.10E-02	7.90E-06	9.33E+01	1.01E+03
Tetrachloroethene (PCE) (Tetrachloroethylene)	127-18-4	1.84E-02	7.54E-01	2.00E+02	7.20E-02	8.20E-06	1.55E+02	1.11E+02
Thallium (total)	7440-28-0	-	-	-	-	-	<i>4.80E+01</i>	-
Toluene	108-88-3	6.64E-03	2.72E-01	5.26E+02	8.70E-02	8.60E-06	1.82E+02	2.89E+02
Toxaphene	8001-35-2	6.00E-06	2.46E-04	7.40E-01	1.16E-02	4.34E-06	2.57E+05	-
1,2,4-Trichlorobenzene	120-82-1	1.42E-03	5.82E-02	3.00E+02	3.00E-02	8.23E-06	1.78E+03	1.12E+03
1,1,1-Trichloroethane	71-55-6	1.72E-02	7.05E-01	1.33E+03	7.80E-02	8.80E-06	1.10E+02	6.09E+02
1,1,2-Trichloroethane	79-00-5	9.13E-04	3.74E-02	4.42E+03	7.80E-02	8.80E-06	5.01E+01	1.14E+03
Trichloroethene (TCE) (Trichloroethylene)	79-01-6	1.03E-02	4.22E-01	1.10E+03	7.90E-02	9.10E-06	1.66E+02	5.90E+02
Trichlorofluoromethane	75-69-4	9.70E-02	3.98E+00	1.10E+03	4.26E-02	1.00E-05	1.14E+02	9.44E+02
2,4,5-Trichlorophenol	95-95-4	4.33E-06	1.78E-04	1.20E+03	2.91E-02	7.03E-06	2.34E+03	-
2,4,6-Trichlorophenol	88-06-2	7.79E-06	3.19E-04	8.00E+02	3.18E-02	6.25E-06	9.99E+02	-
Vanadium (total)	7440-62-2	-	-	-	-	-	<i>1.00E+03</i>	-
Vinyl chloride	75-01-4	2.70E-02	1.11E+00	2.76E+03	1.06E-01	1.23E-06	1.86E+01	-
Xylenes (total)	1330-20-7	6.73E-03	2.76E-01	1.75E+02	7.69E-02	8.44E-06	3.86E+02	1.68E+02
Zinc (total)	7440-66-6	-	-	-	-	-	<i>2.30E+01</i>	-

a Values in italics are K_d values

9 PLANCHES

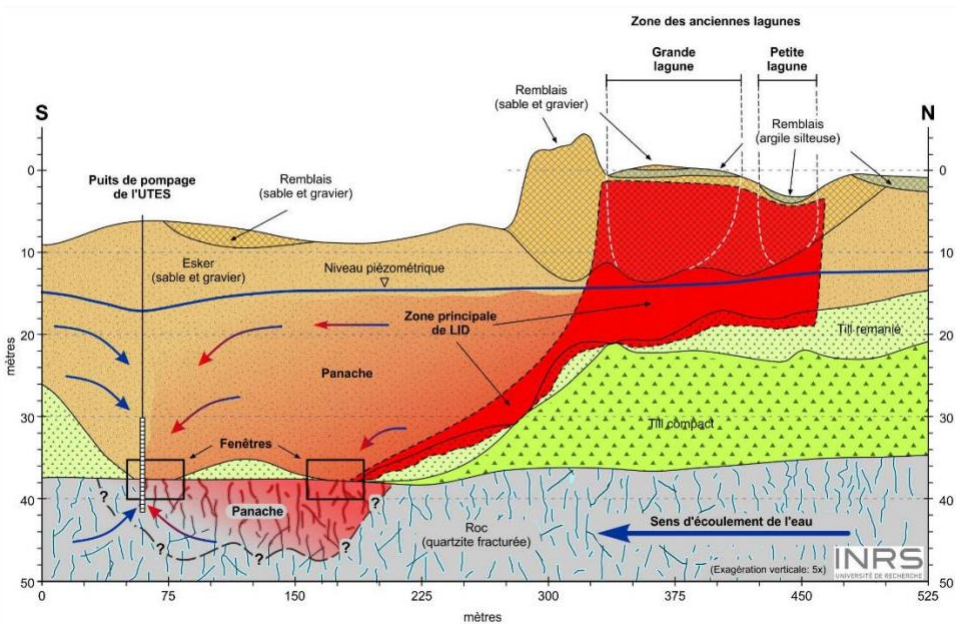


Lagunes de Mercier
Modélisation stochastique par méthode d'ensemble

Localisation et physiographie
du secteur à l'étude

Date:	Avril 2025	Mémoire de maîtrise	Auteur: Louis-Charles Boutin
			Planche A

A. Coupe schématique du modèle conceptuel du site des anciennes lagunes de Mercier

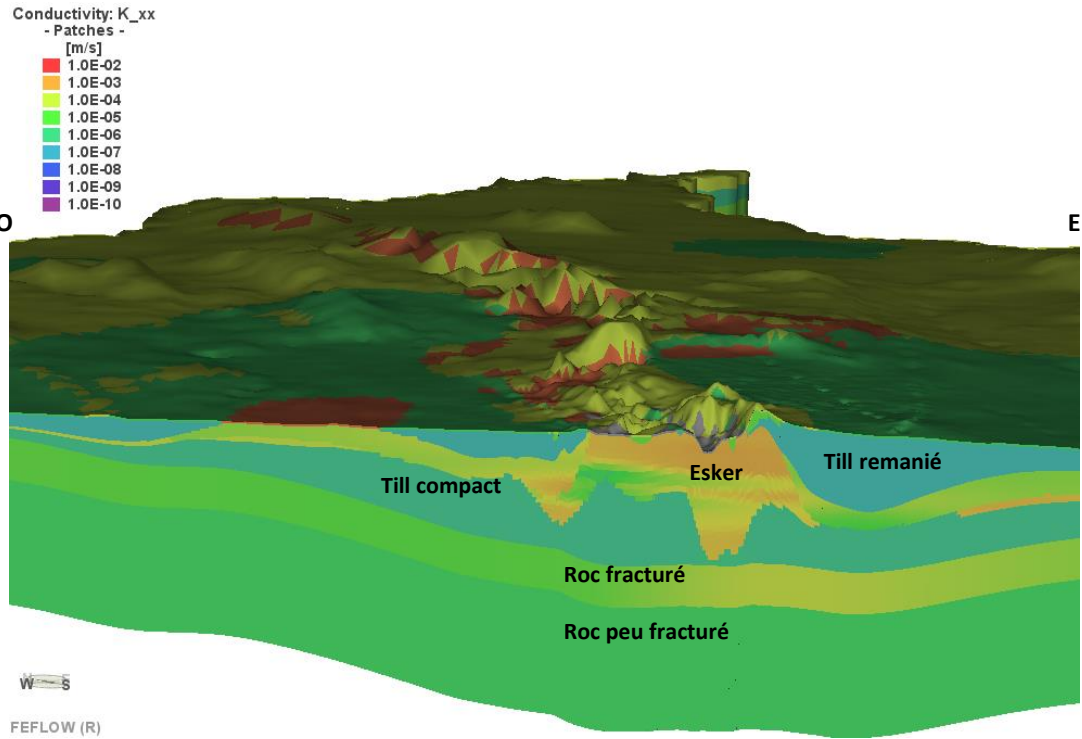


Référence: Martel et al. 2018, elle-même adaptée du rapport du BAPE, 1994

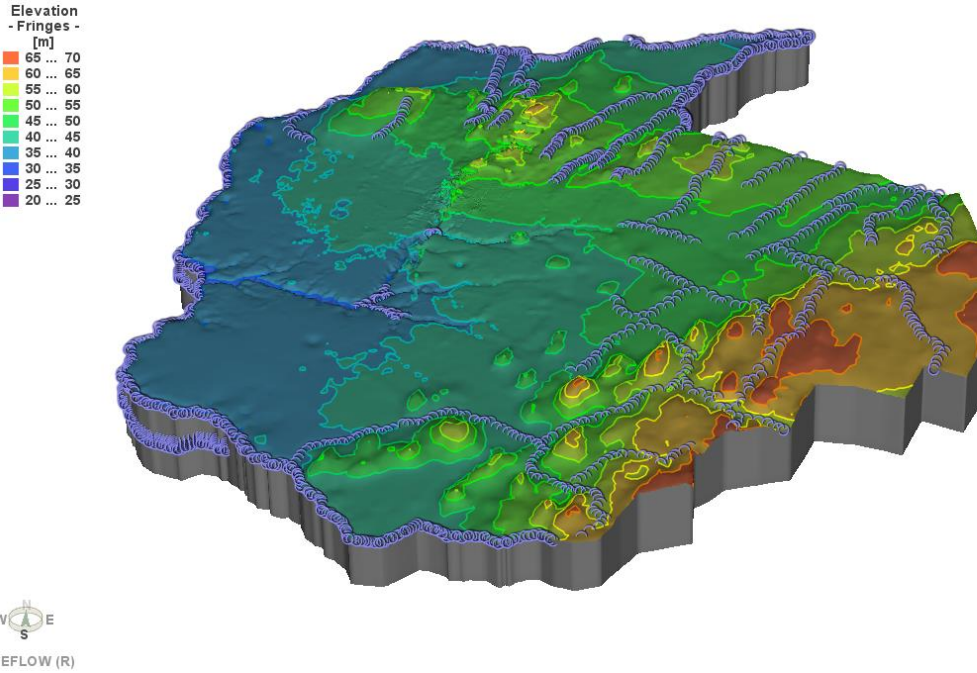
B. Unités hydrostratigraphiques

Unité	Description
#1 Remblai et matière organique	Matériaux de remblai au site et hors site lorsque le sol minéral est remanié. Matériaux organiques naturels près des cours d'eaux.
#2 Argile	Argile silteuse, et de silt et sable argileux provenant des sédiments marins de la Mer de Champlain.
#3 Esker sable et gravier	Sable graveleux et gravier sablonneux composant l'esker.
#4 Till	Till inférieur compact ou basal et till supérieur ou remanié.
#5 Roc	Socle rocheux fracturé sous les dépôts meubles. Il est constitué principalement d'orthoquartzite (grès) d'âge Cambrien à Ordovicien.

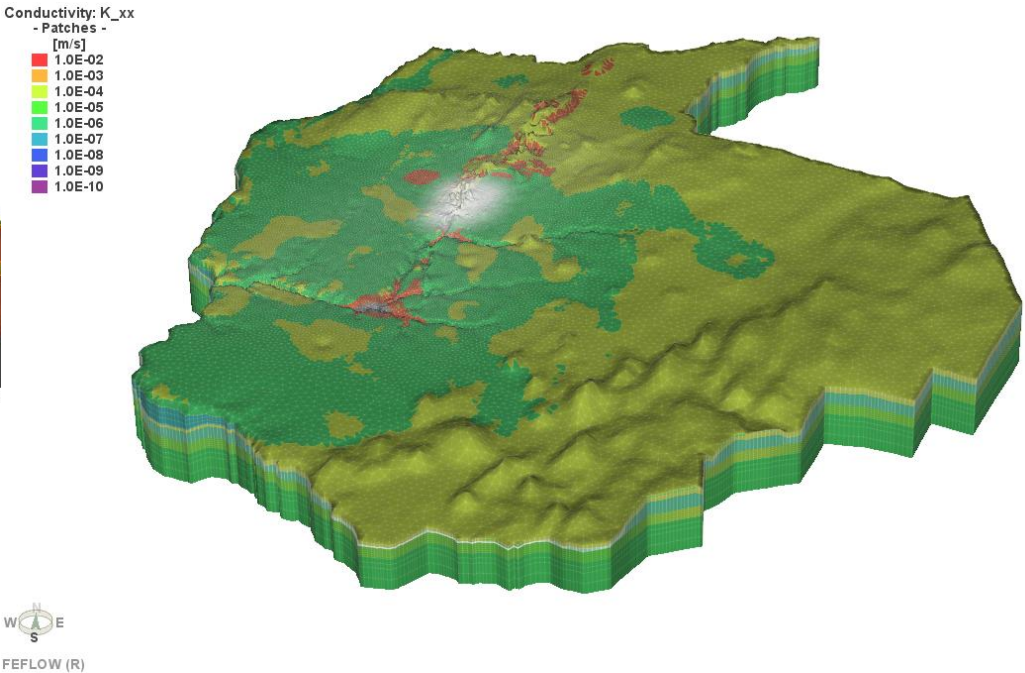
C. Transect ligne des Z – Modèle régional FEFLOW



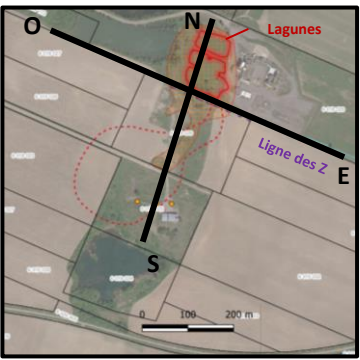
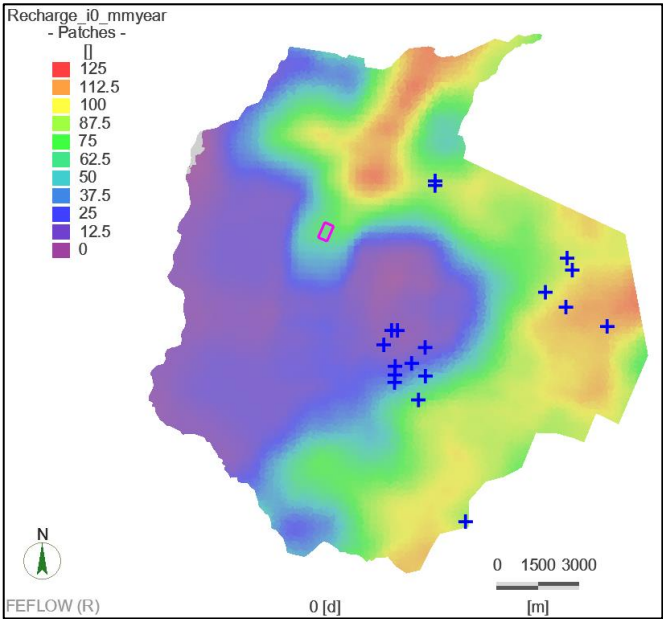
D. Topographie régionale



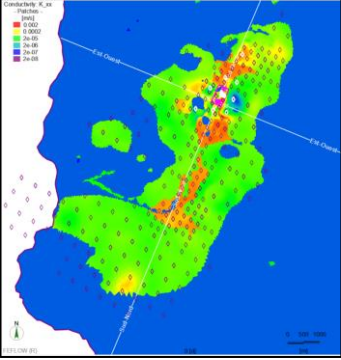
E. Conductivités hydrauliques



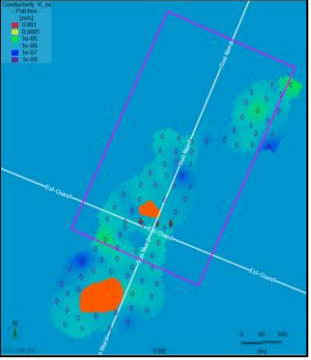
F. Recharge (mm/an)



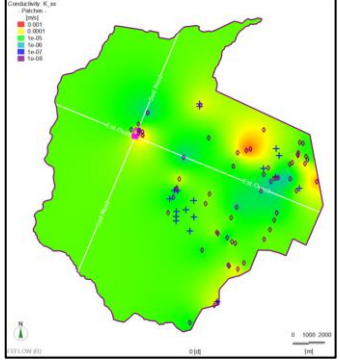
Points-pilotes et valeurs de la conductivité hydraulique krigée pour l'esker



Points-pilotes et valeurs de la conductivité hydraulique fenêtres au roc



Points-pilotes et valeurs de la conductivité hydraulique pour le roc



Lagunes de Mercier
Modélisation stochastique par méthode d'ensemble

Modèle conceptuel et numérique de
l'écoulement des eaux souterraines

Date: Avril 2025 Mémoire de maîtrise Auteur: Louis-Charles Boutin
Planche B

A. Dépôts meubles

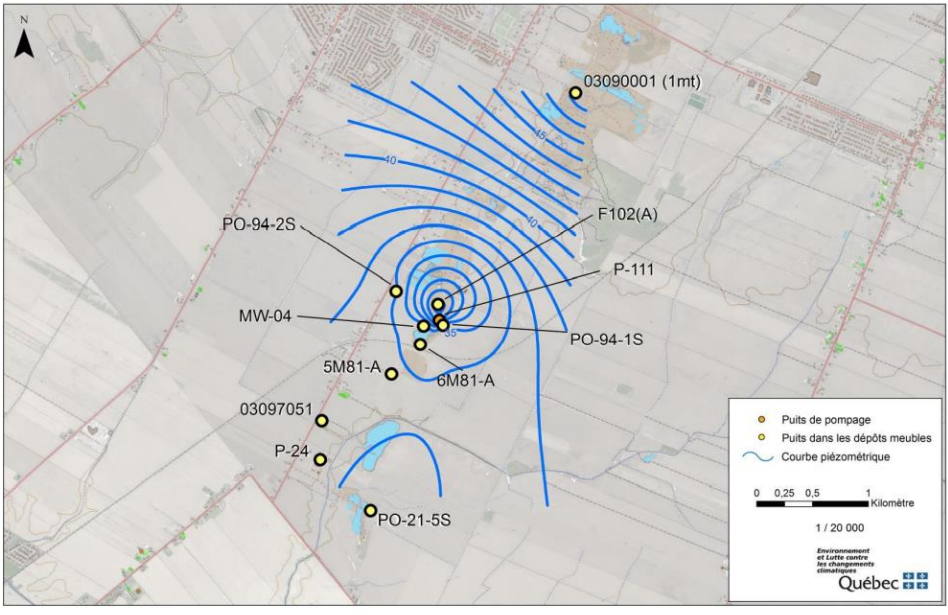


Figure 6 Distribution des isopiezies dans les dépôts meubles – Printemps 2021

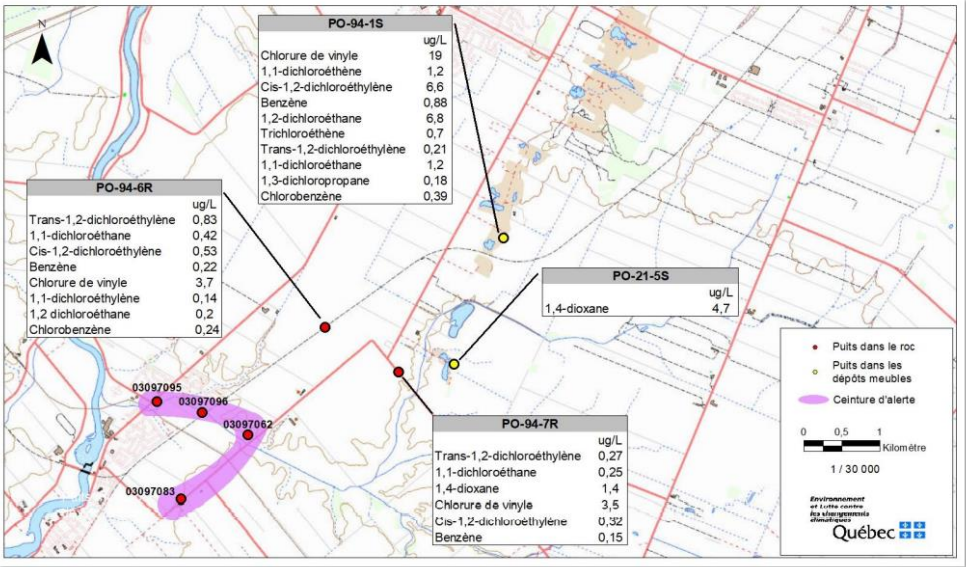


Figure 8 Puits d'observation avec substances détectées – Printemps 2021

B. Roc

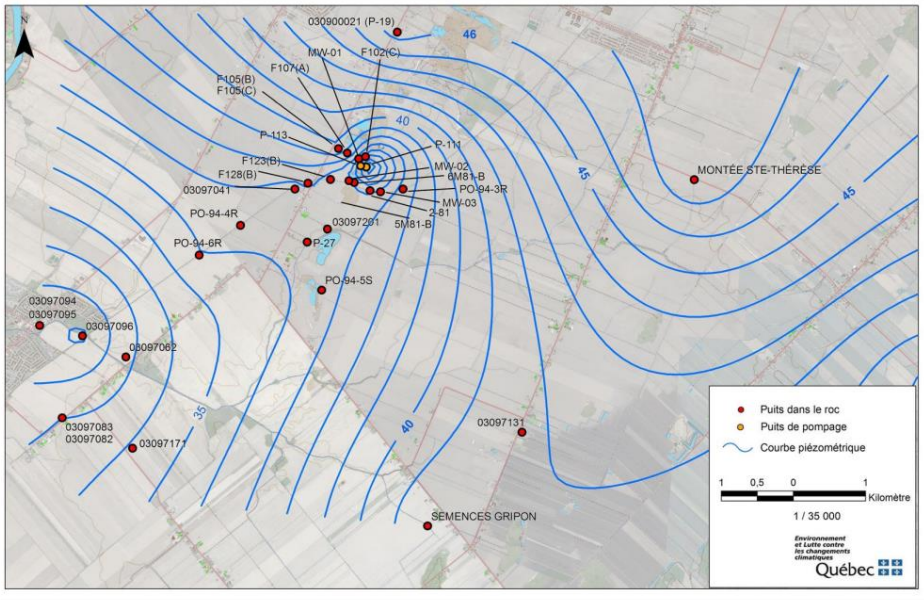


Figure 4 Distribution des isopiezies dans le roc – Printemps 2021

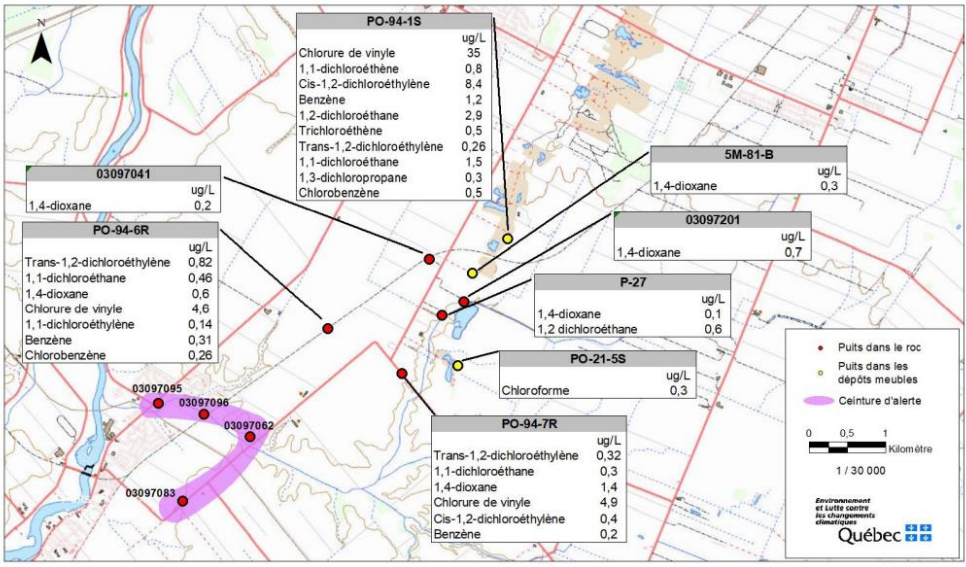


Figure 9 Puits d'observation avec substances détectées – Automne 2021

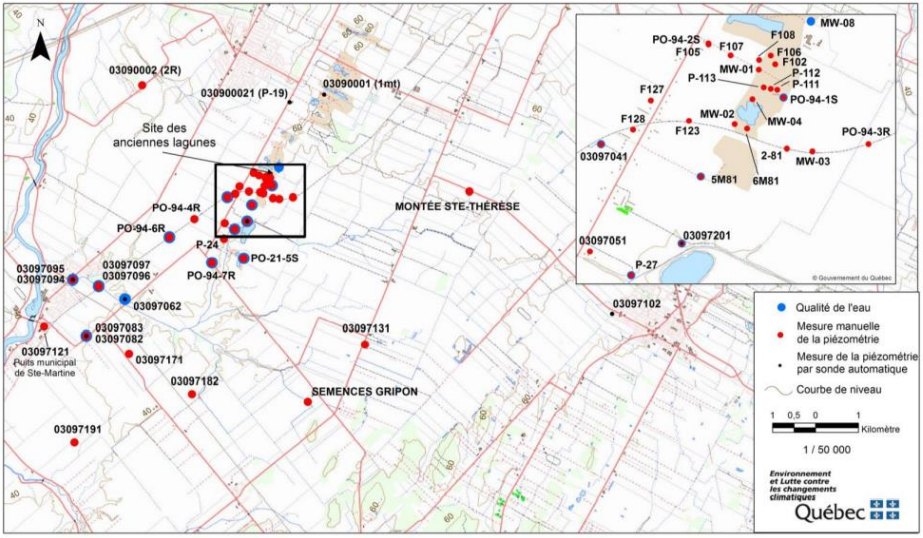


Figure 3 Localisation des puits retenus pour la campagne de caractérisation 2021

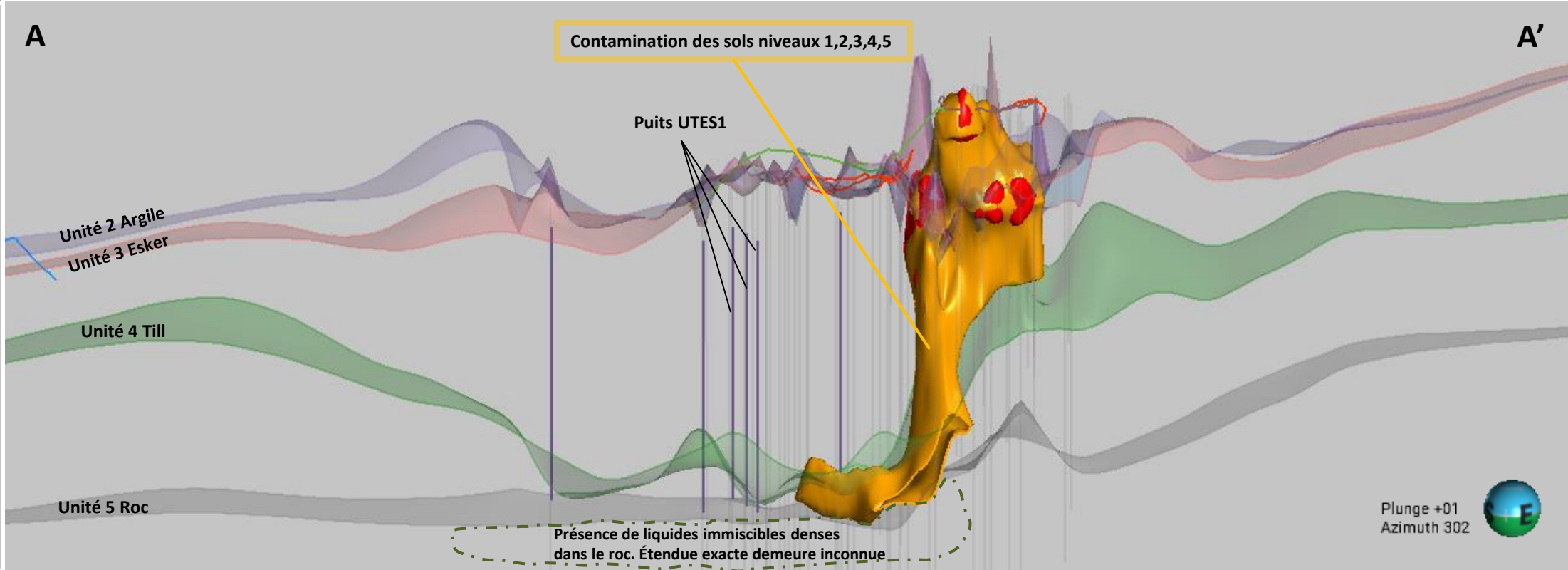
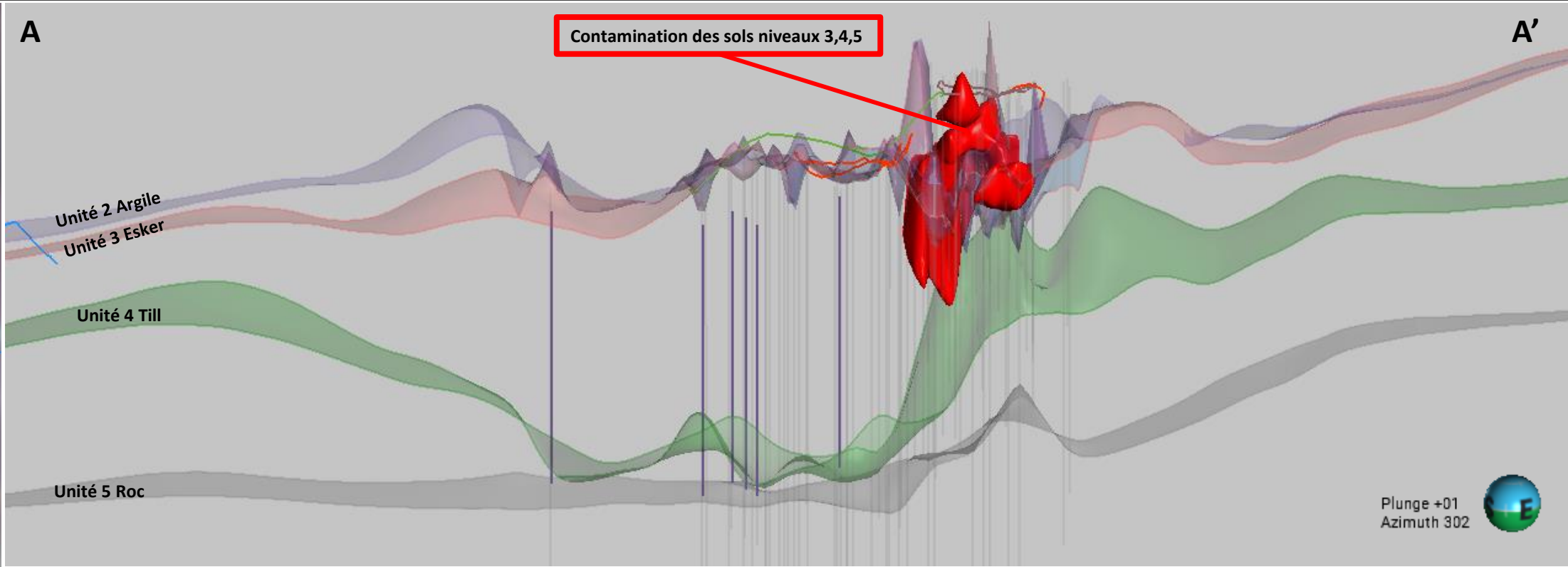
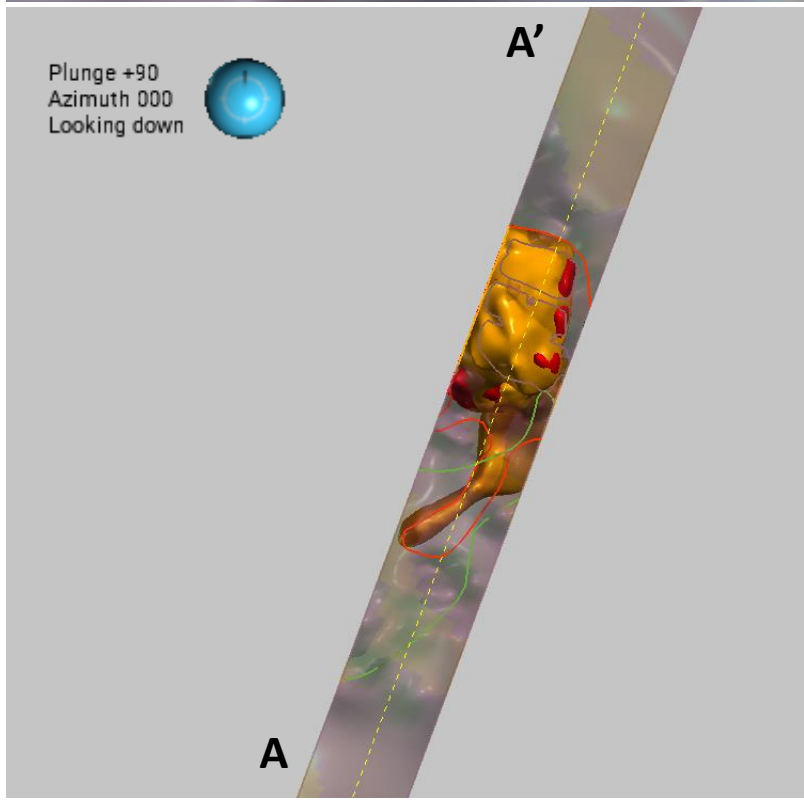
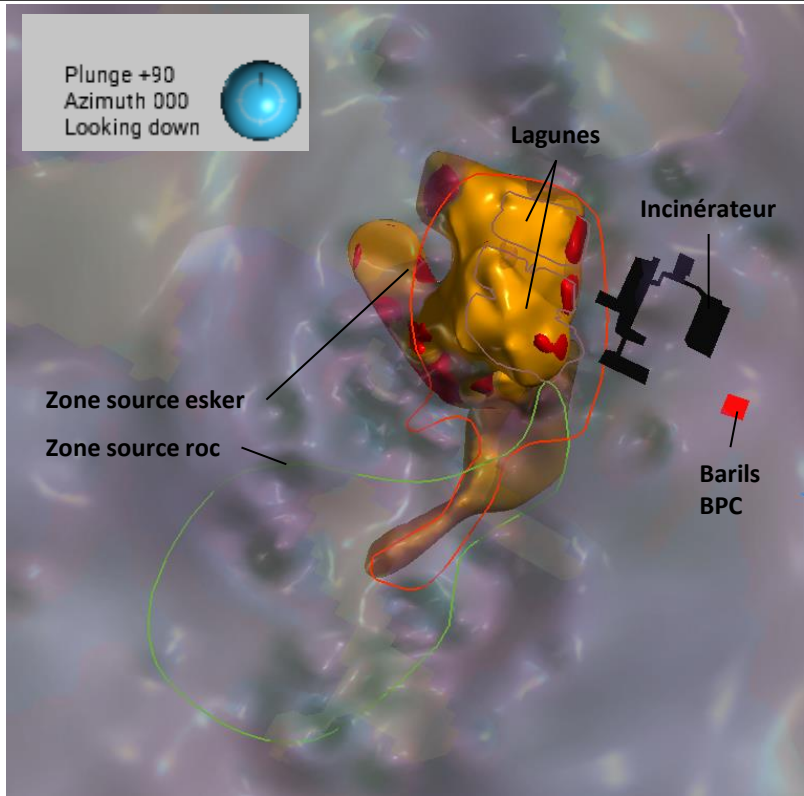
Référence: MELCC, 2021. Rapport de suivi de la qualité des eaux souterraines de la région de Mercier, Automne 2020. Ministère de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques, Québec.



Lagunes de Mercier
Modélisation stochastique par méthode d'ensemble

MELCC Suivi des niveaux et qualité des eaux
souterraines – Année 2021

Date: Avril 2025 Mémoire de maîtrise Auteur: Louis-Charles Boutin



Code niveau de contamination	Description
0	Absence de contamination
1	Disséminée
2	Uniforme
3	Imprégnée
4	Imprégnée à consistante
5	Consistante

R. Martel *et al.*, « Soutien Scientifique à un projet d'essai de technologies de réhabilitation thermique applicables au site des anciennes lagunes de Mercier : Étude de cas et élaboration d'un protocole d'essais en laboratoire ». INRS, mai 2021.

INRS
Institut national
de la recherche
scientifique

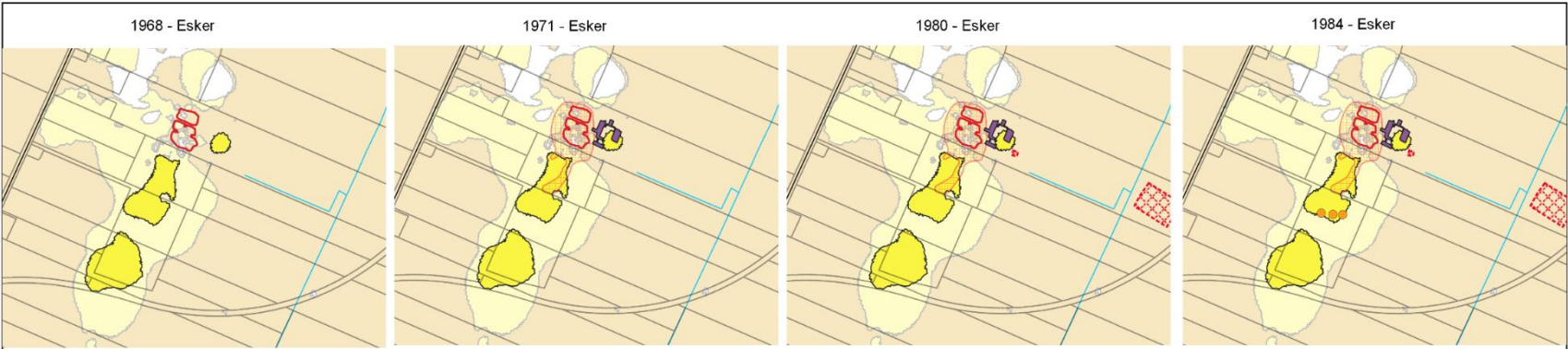
Lagunes de Mercier
Modélisation stochastique par méthode d'ensemble

**Modèle hydrostratigraphique et sols
contaminés**

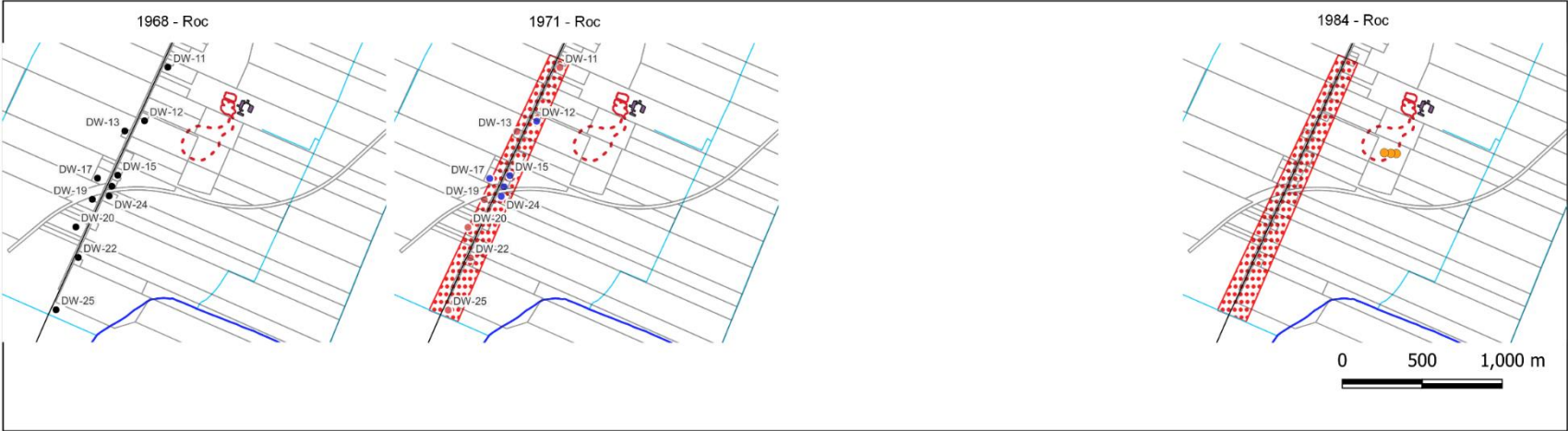
Date: Avril 2025 Mémoire de maîtrise Auteur: Louis-Charles Boutin

Planche

D



1968 - début de l'entreposage des huiles organiques dans les anciennes lagunes
1971 - Puits résidentiels contaminés dans le roc (Groupe de travail de réhabilitation Mercier 1993: Figure 2-5)
1972 - L'incinérateur entre en production et le réseau d'aqueduc est construit.
1980 - Cellule Boliden construite approximativement 500 m à l'est de l'incinérateur
1984 - Mise en fonction de l'usine de traitement des eaux (UTES1) - Puits 111, 112 et 113



Lots

□ Sélection - Lots du cadastre rénové

Interprétation limites panache dissous

--- 1988-1989 (Martel et Ayotte)

--- 1991-1992 (CNFS)

1971 Puits résidentiels contaminés (Groupe Travail Réhabilitation Mercier 1993 Figure 2-5)

Réseau de puits

Puits résidentiels

• odeur

• odeur et NAPL

• Puits de pompage UTES1

Suivi de la qualité de l'eau

• Contamination non-détectée

• Contamination détectée

Géologie

Zones modèle numérique

Sable et Gravier - Zone 31

Sable et Gravier - Zone 32

Fenêtres au roc

Zones sources

Cellule Boliden et BPC

Incinérateur

Petite et Grande anciennes lagunes

Esker - Source Liquide Immiscible Dense

Roc - Source Liquide Immiscible Dense

CANVEC

Rivière

Intermittent

Non identifié

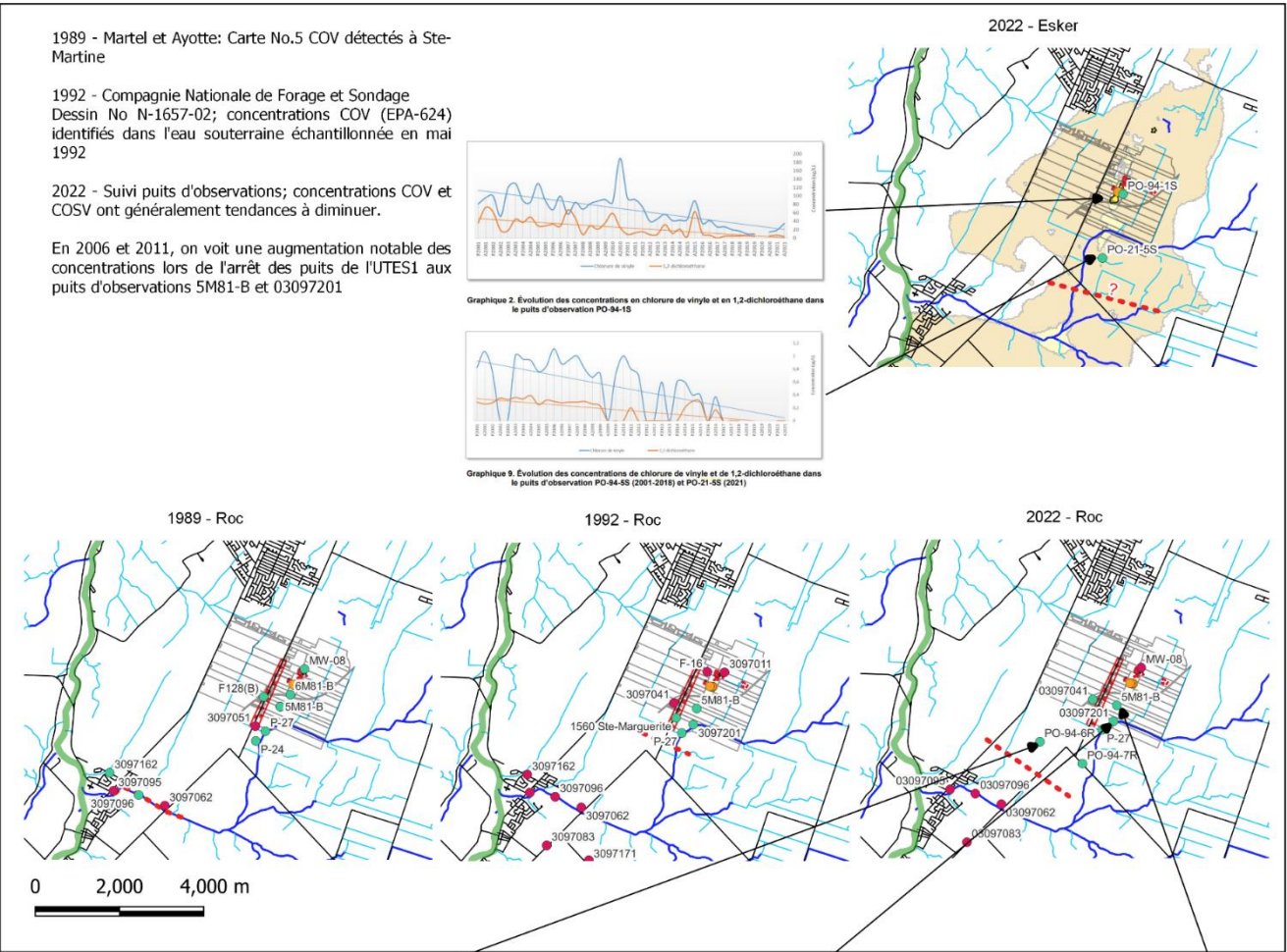
Permanent

Lac

Routes principales

Modèle stochastique régionale - Claprood 2023

Limites du modèle numérique d'écoulement des eaux souterraines

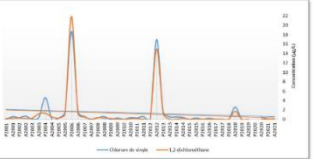
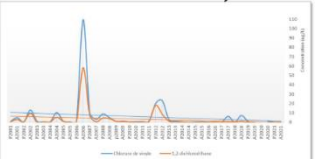
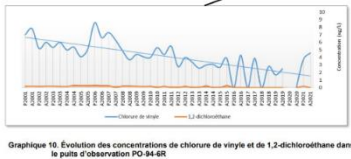
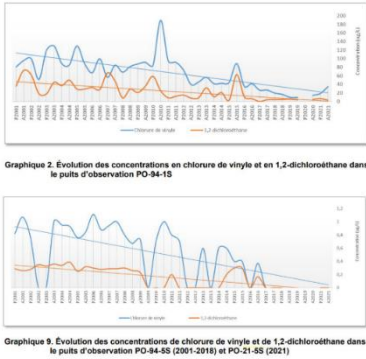


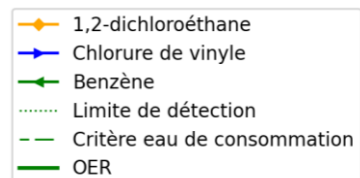
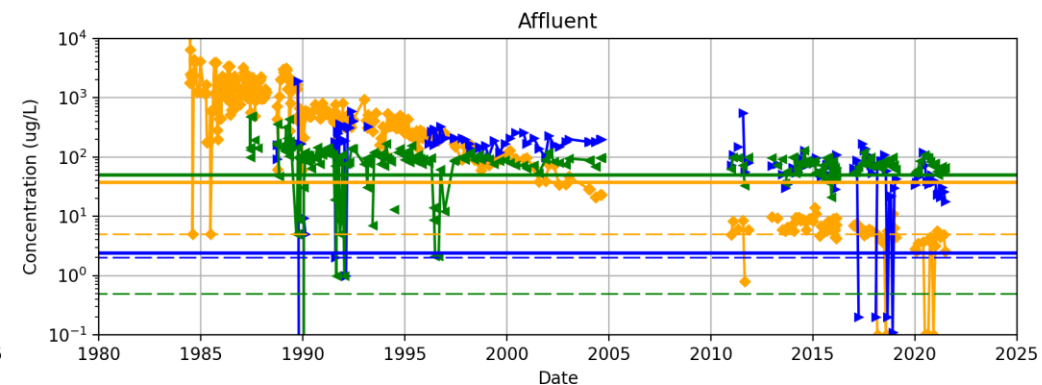
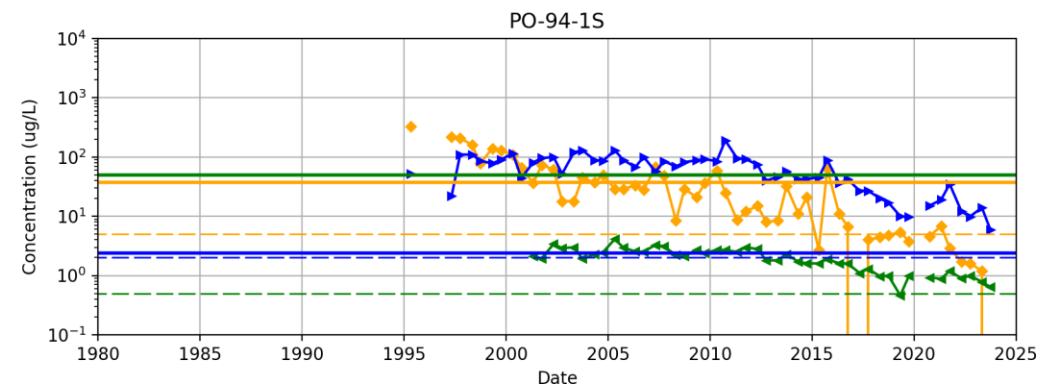
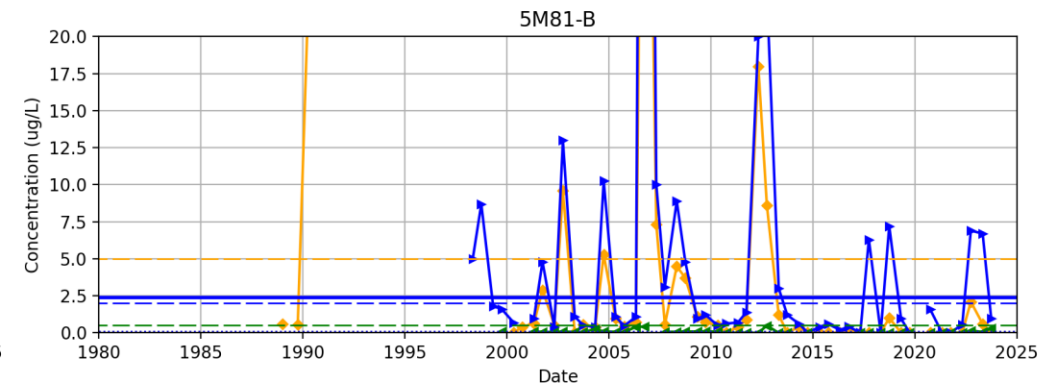
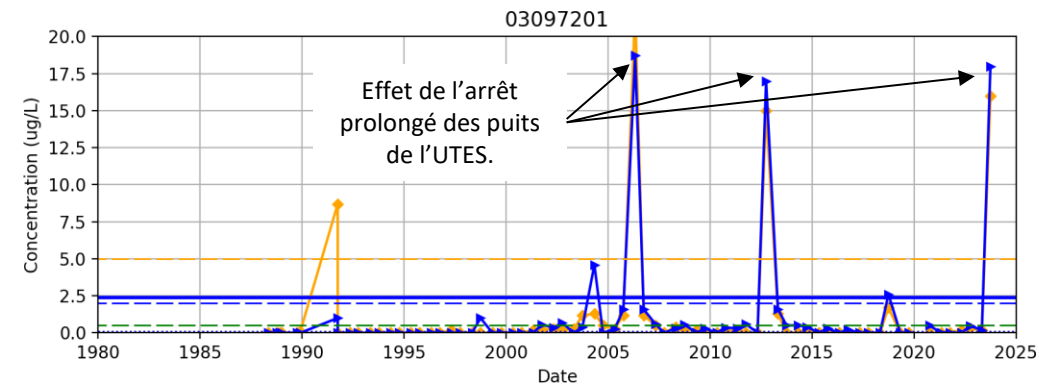
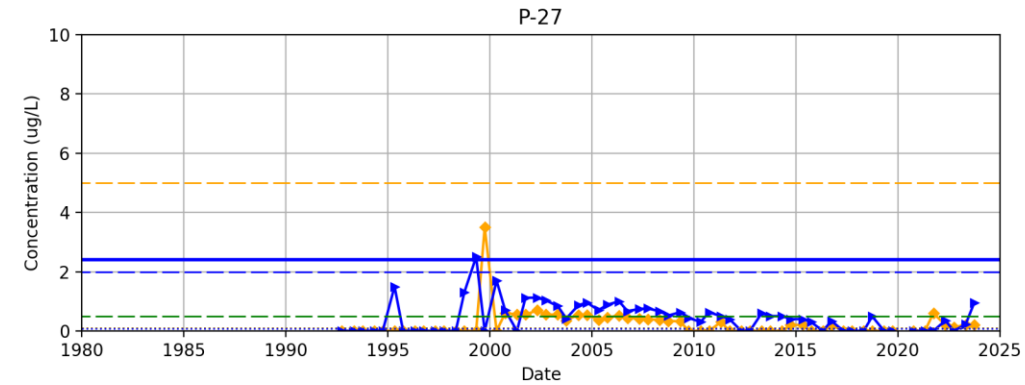
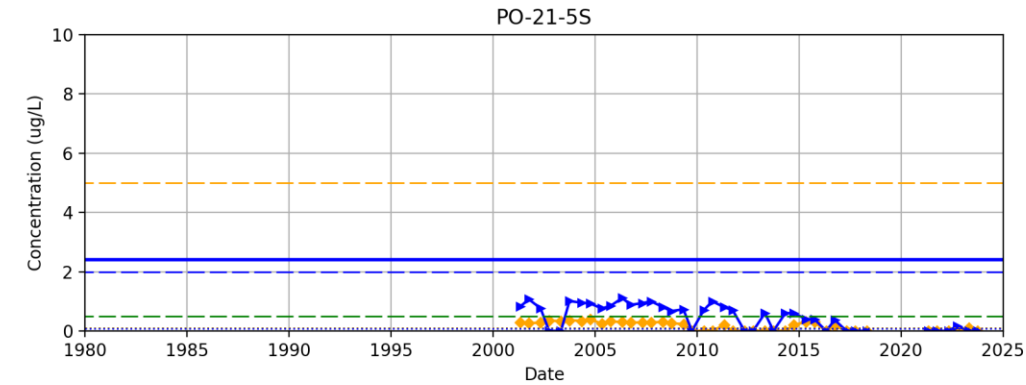
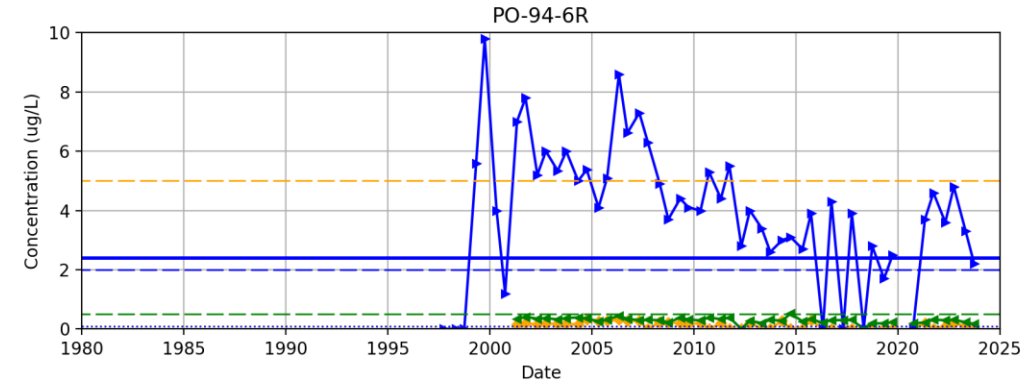
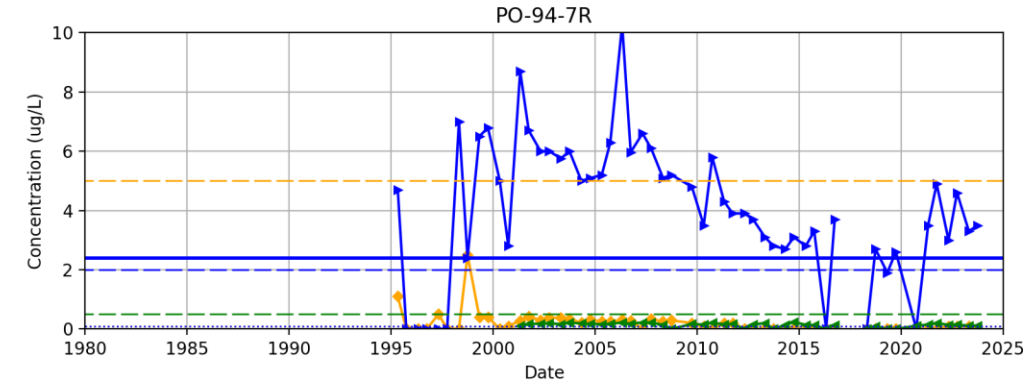
1989 - Martel et Ayotte: Carte No.5 COV détectés à Ste-Martine

1992 - Compagnie Nationale de Forage et Sondage Dessin No N-1657-02; concentrations COV (EPA-624) identifiés dans l'eau souterraine échantillonnée en mai 1992

2022 - Suivi puits d'observations; concentrations COV et COSV ont généralement tendances à diminuer.

En 2006 et 2011, on voit une augmentation notable des concentrations lors de l'arrêt des puits de l'UTES1 aux puits d'observations SM81-B et 03097201





OER: Objectifs environnementaux de rejet



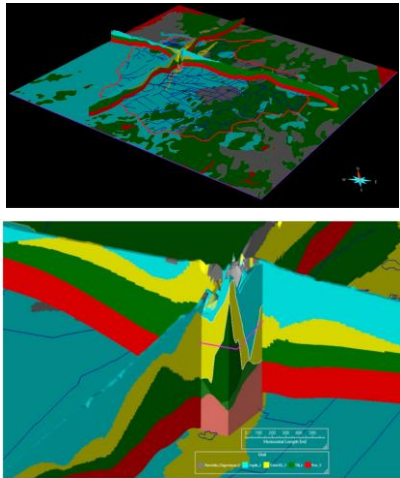
Lagunes de Mercier
Modélisation stochastique par méthode d'ensemble

Suivi historique de la qualité des eaux souterraines

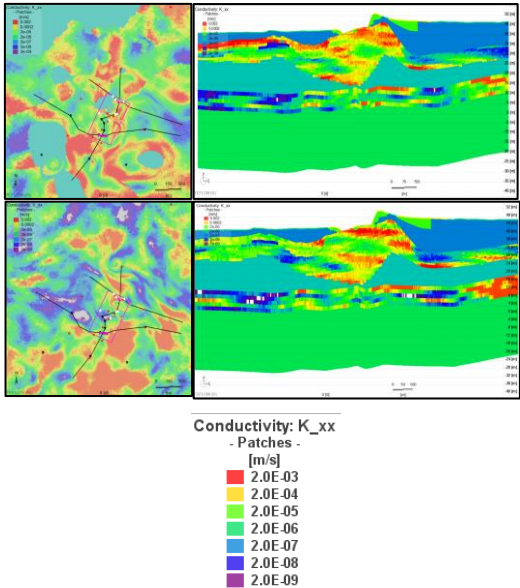
Date: Avril 2025 Auteur: Louis-Charles Boutin
Planche

Écoulement

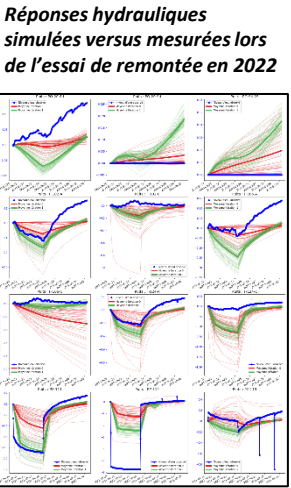
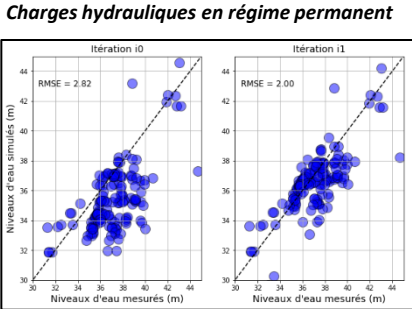
Étape 1: Construction du modèle hydrostratigraphique dans GOCAD en utilisant les données de forage et de sismique réfraction.



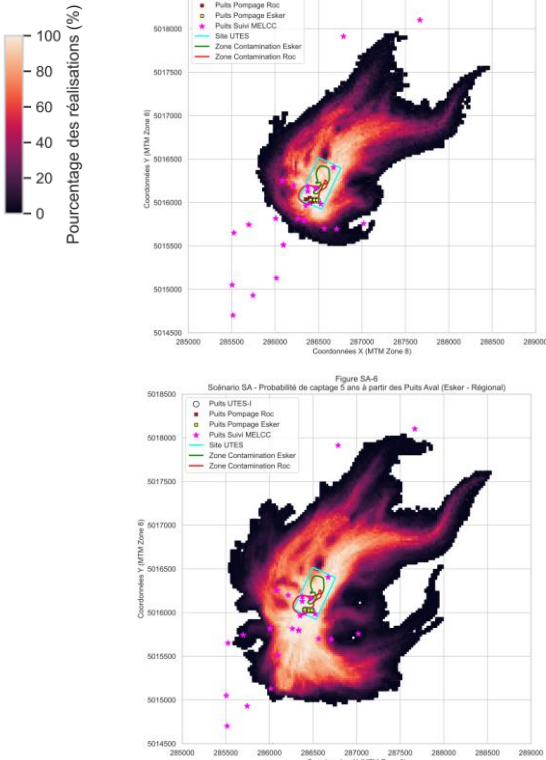
Étape 2: Génération d'un ensemble de réalisations stochastiques des conductivités hydrauliques. Points-pilotes pour les fenêtres au roc et le roc. Bandes tournantes pour les matériaux de l'esker.



Étape 3: Calibration des paramètres aux charges hydrauliques et réponses hydrauliques à l'essai de remontée par la méthode de lissage d'ensemble en utilisant PEST++IES (iterative Ensemble Smoother).



Étape 4: Simulations prédictives de différents scénarios de pompage afin d'évaluer les probabilités de succès du piège hydraulique.

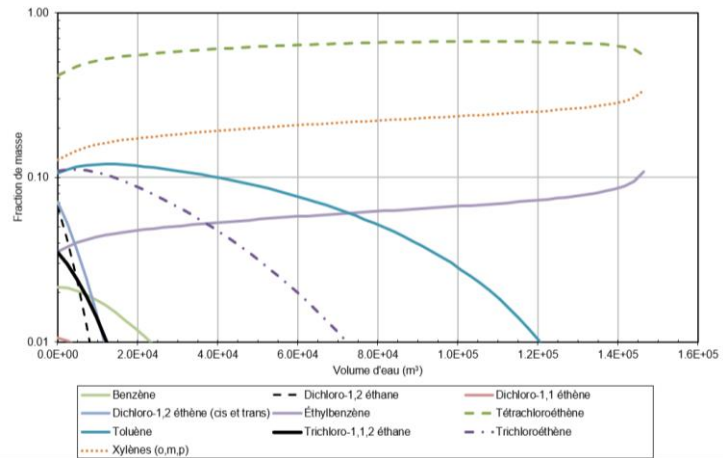


Transport

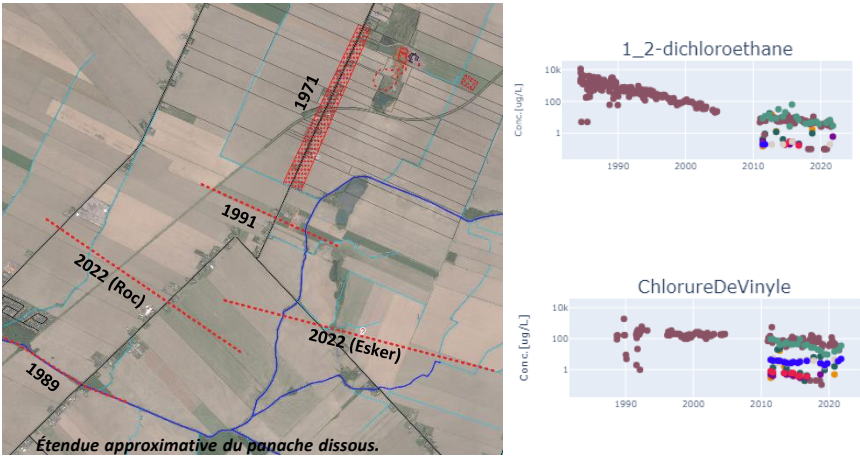
Étape 1: Compilation des données historiques sur le suivi de la qualité des eaux souterraines et Identification des principaux contaminants.



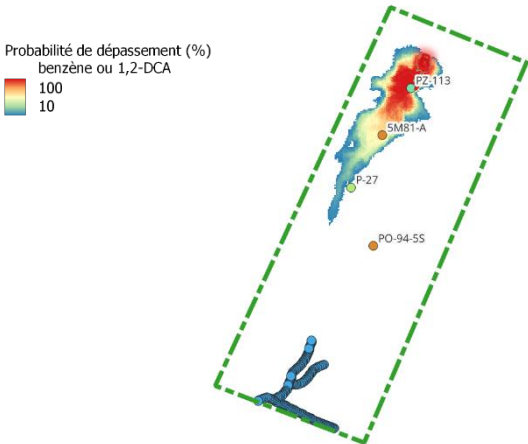
Étape 2: Calcul de l'évolution des solubilités des composés présents dans la zone source.

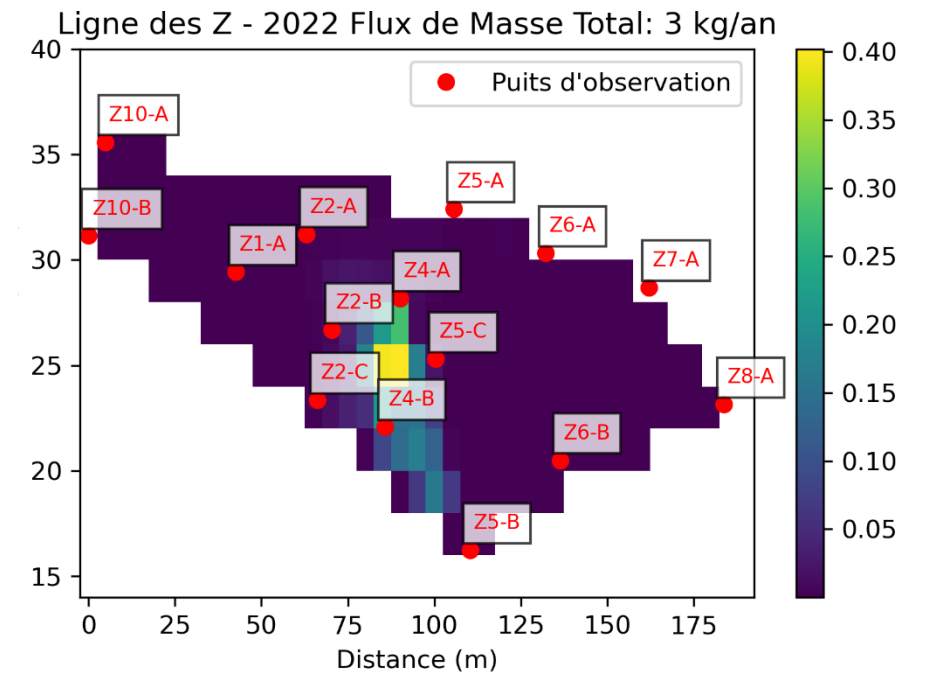
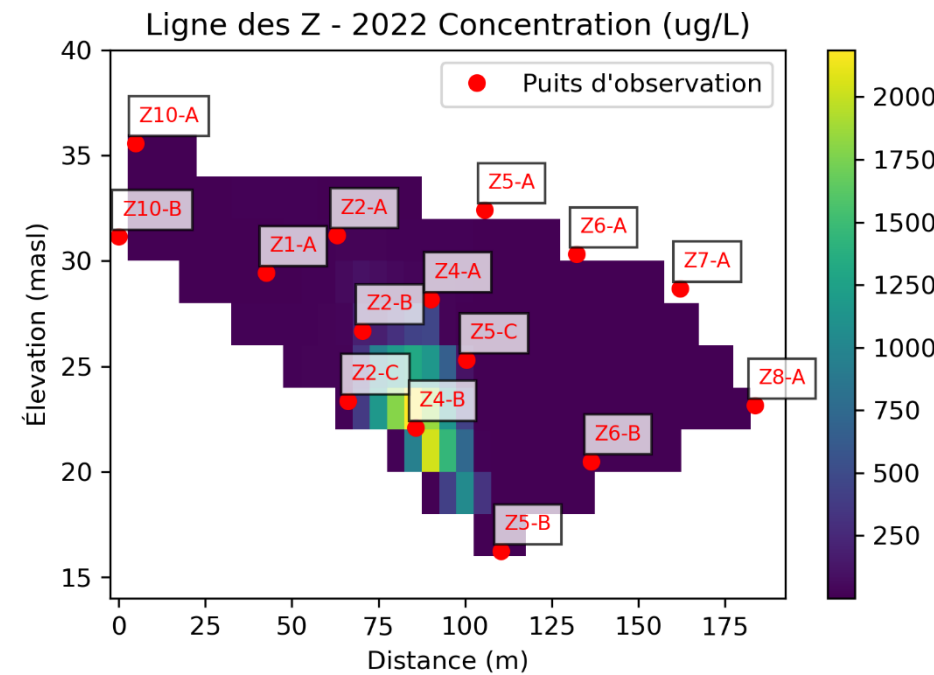
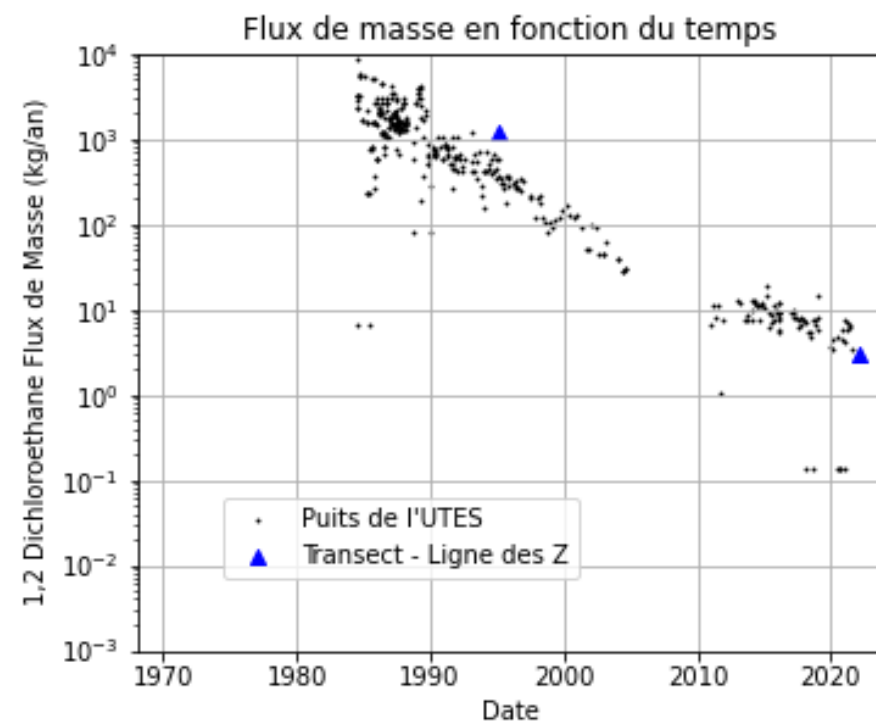
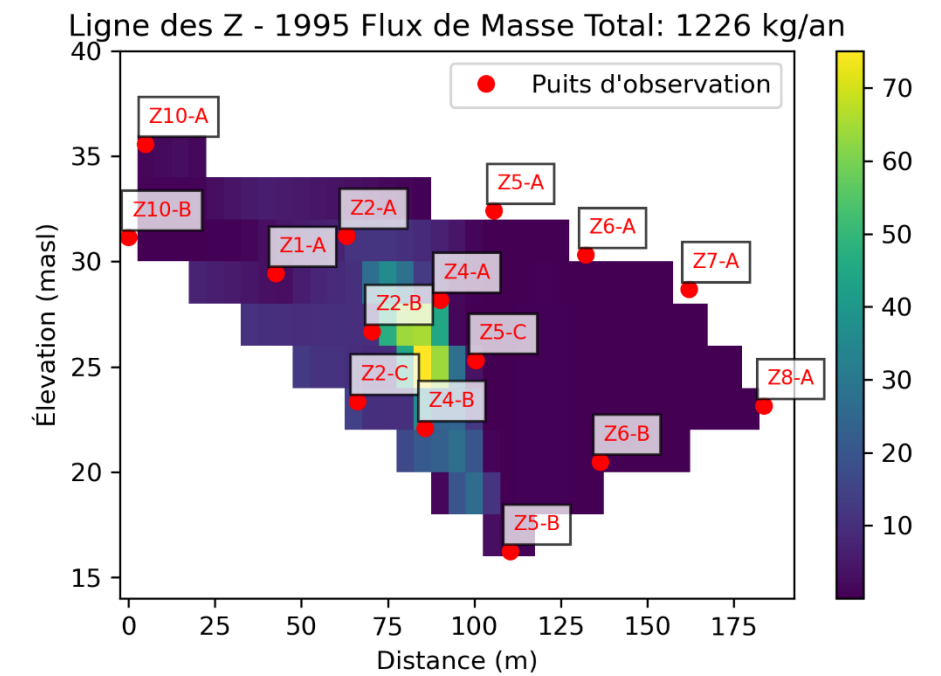
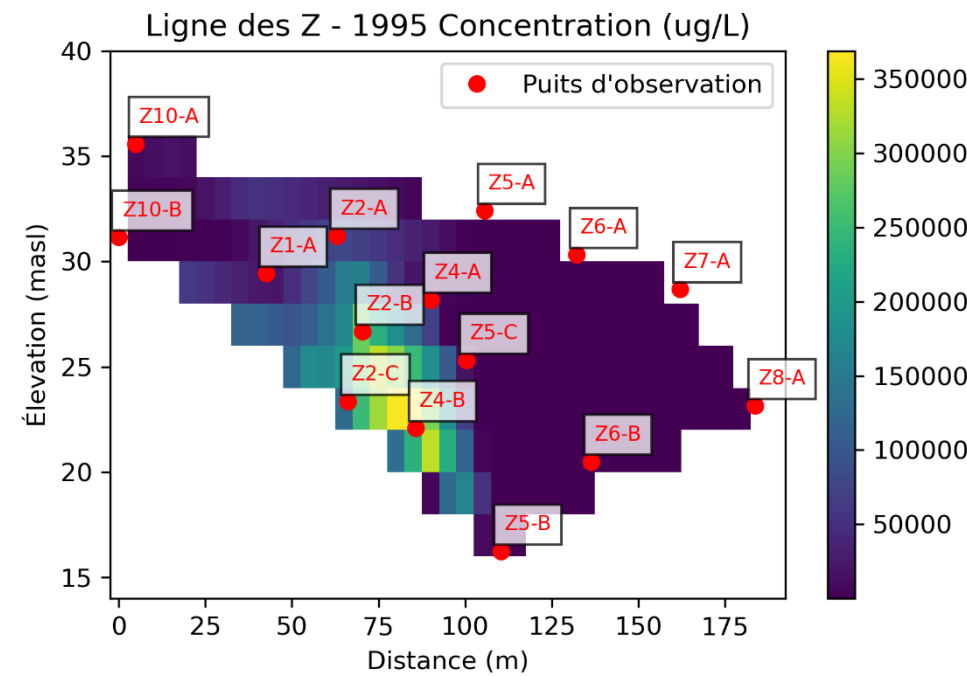
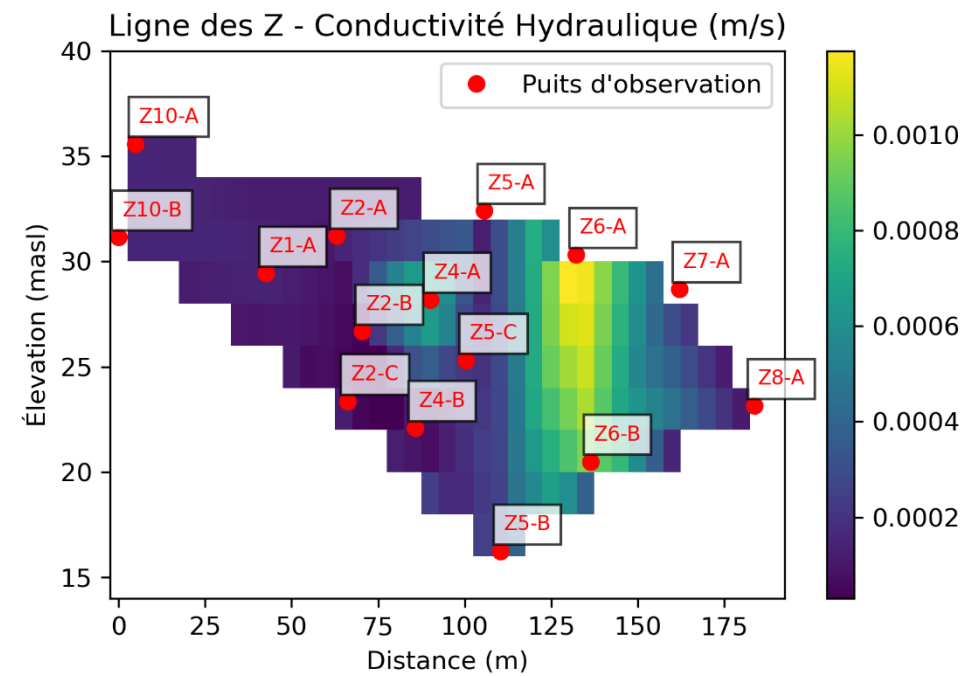


Étape 3: En utilisant l'ensemble calé aux charges hydrauliques, assimilation des données historiques de qualité des eaux souterraines et validation qualitative de la migration du front du panache de contamination.



Étape 4: Simulations prédictives de différents scénarios de restauration partielle de la zone source et analyse décisionnelle multicritère.





$$J = q_o \cdot C = -K \cdot i \cdot C$$

$$M_d = \int_0^A J dA$$

A = aire d'un transect du panache de contamination (L²)

C = concentration d'un composé (ML⁻³)

i = gradient hydraulique (LL⁻¹)

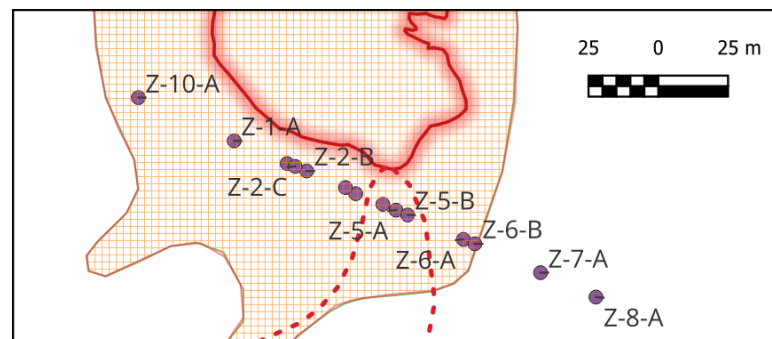
J = flux de masse du contaminant variable dans l'espace (ML⁻²T⁻¹)

K = conductivité hydraulique saturée (LT⁻¹)

M_d = masse de contaminant qui décharge (MT⁻¹)

q_o = flux de Darcy des eaux souterraines (L³L⁻²T⁻¹)

Gradient
hydraulique
constant:
0.003 m/m



- Puits sur la ligne des Z
- Lagunes
- Esker - Source Liquide Immiscible Dense
- Roc - Source Liquide Immiscible Dense

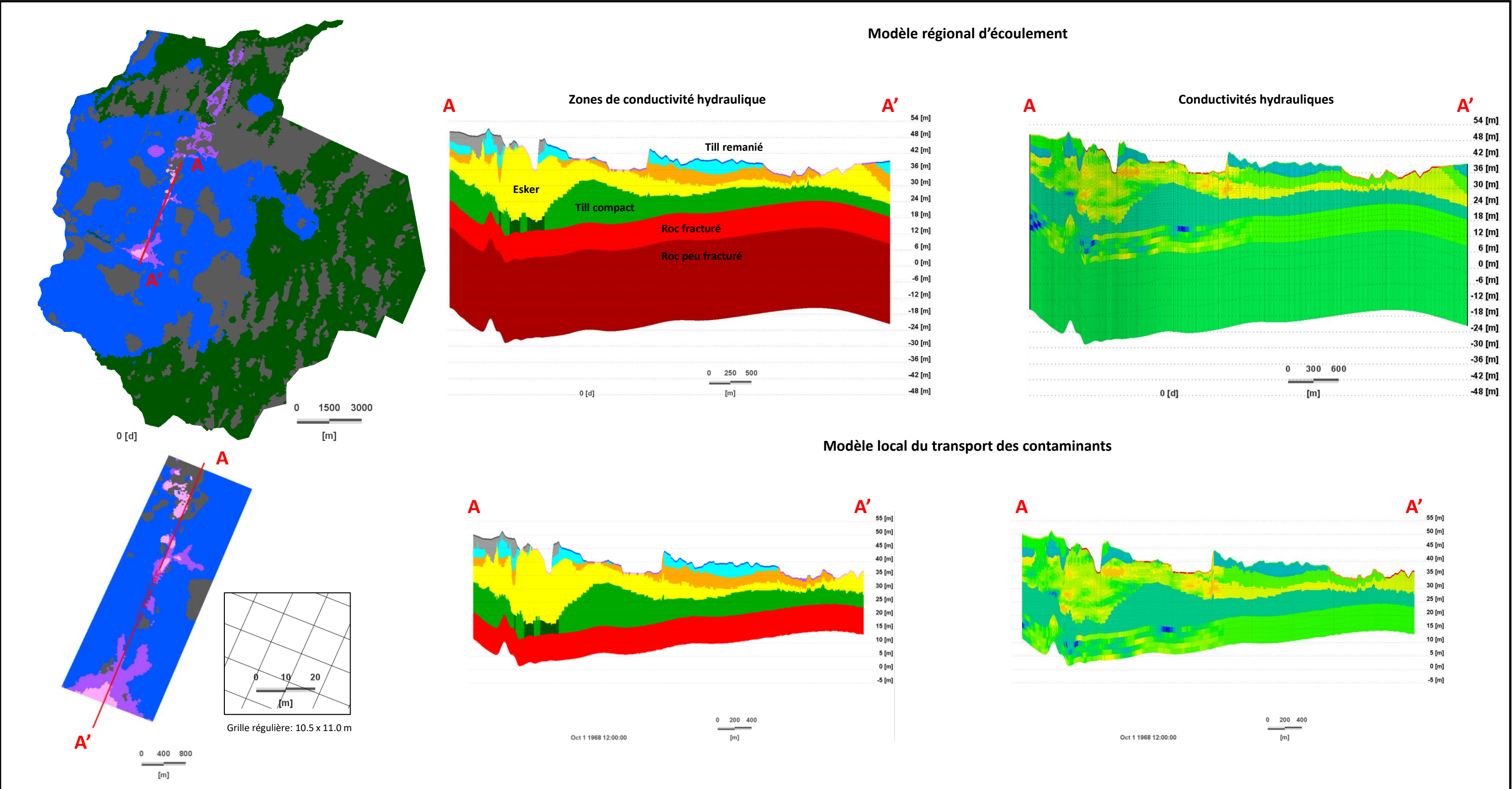
INRS
Institut national
de la recherche
scientifique

Lagunes de Mercier
Modélisation stochastique par méthode d'ensemble

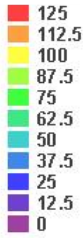
Flux de masse
Ligne des Z et Affluent Utes
1,2-Dichloroéthane

Date: Avril 2025 Auteur: Louis-Charles Boutin
Planche

H



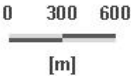
Recharge (mm/a)



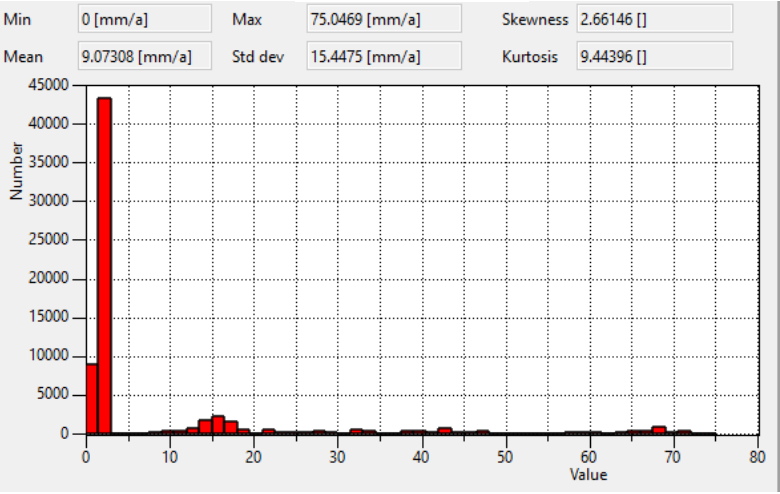
Condition limite – charge constante 34 masl



FEFLOW (R)

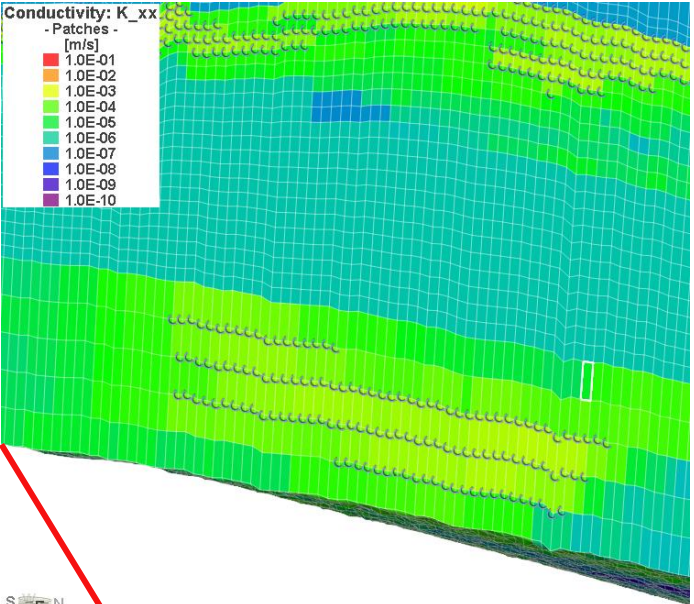
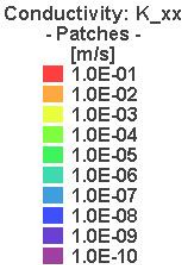


Recharge (mm/a)



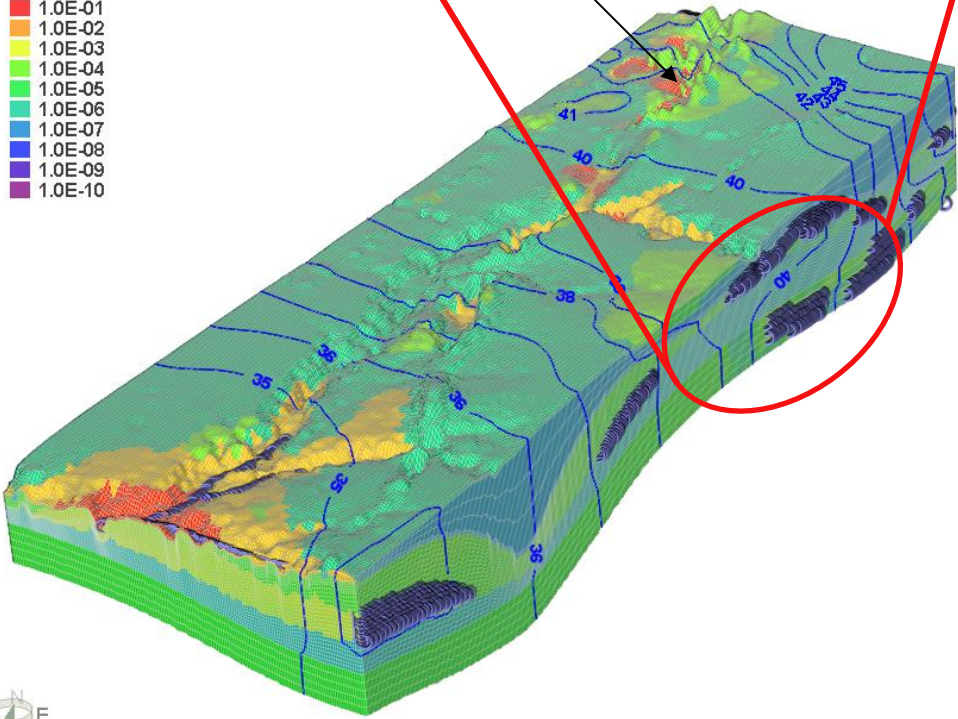
Slice 1, Layer 1

Anciennes lagunes



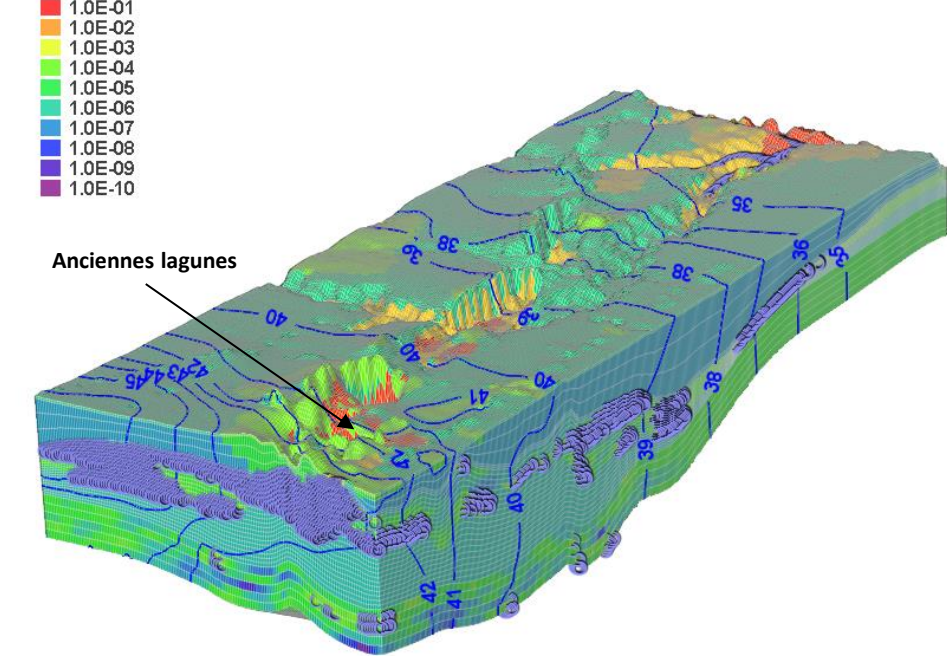
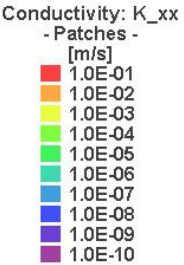
S E N
FEFLOW (R)

Anciennes lagunes



FEFLOW (R)

Vue vers le nord



FEFLOW (R)

Vue vers le sud

Charges constantes assignées aux nœuds des cellules ayant une conductivité hydraulique moyenne supérieure à 10^{-4} m/s.

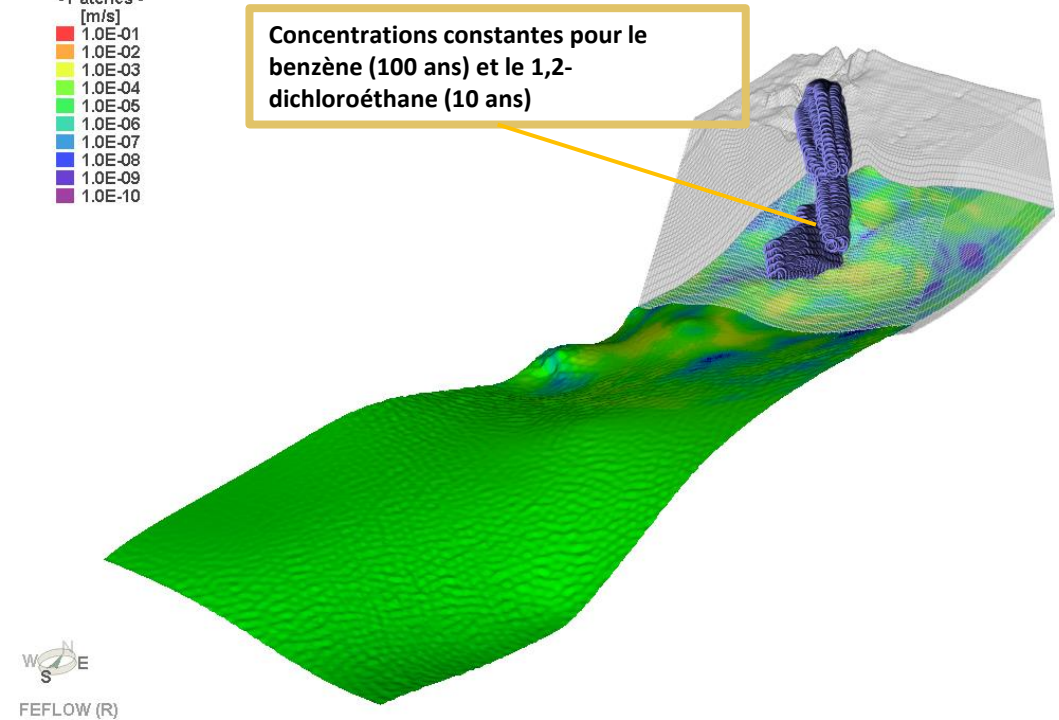
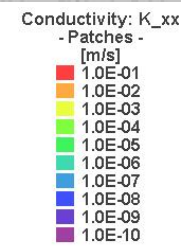
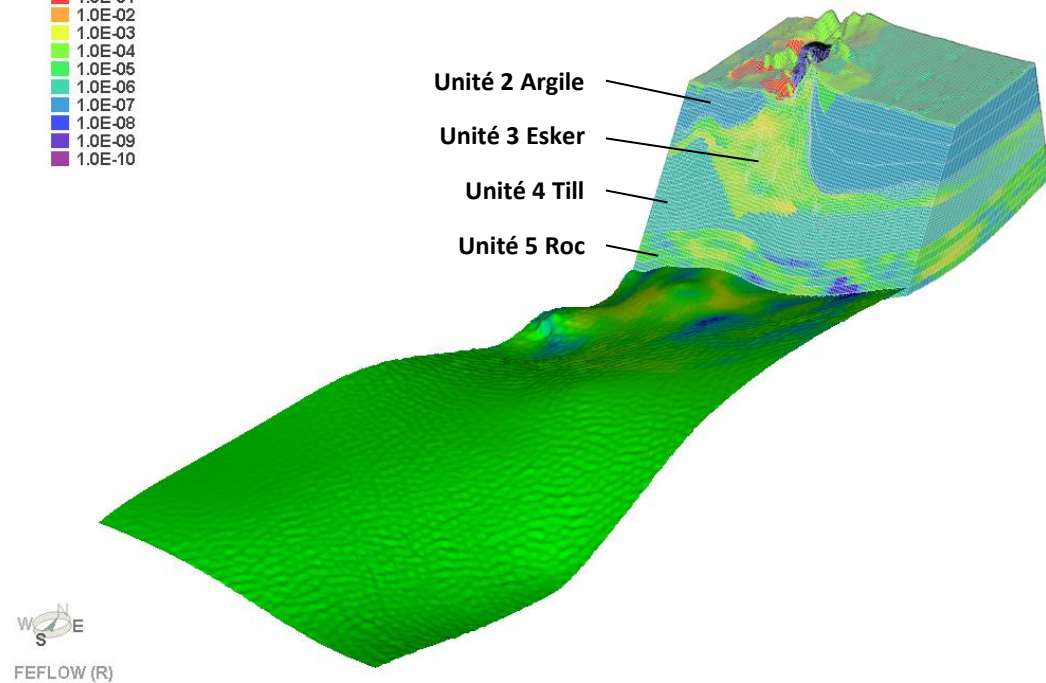
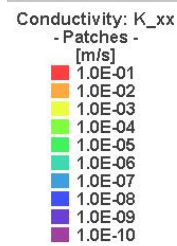
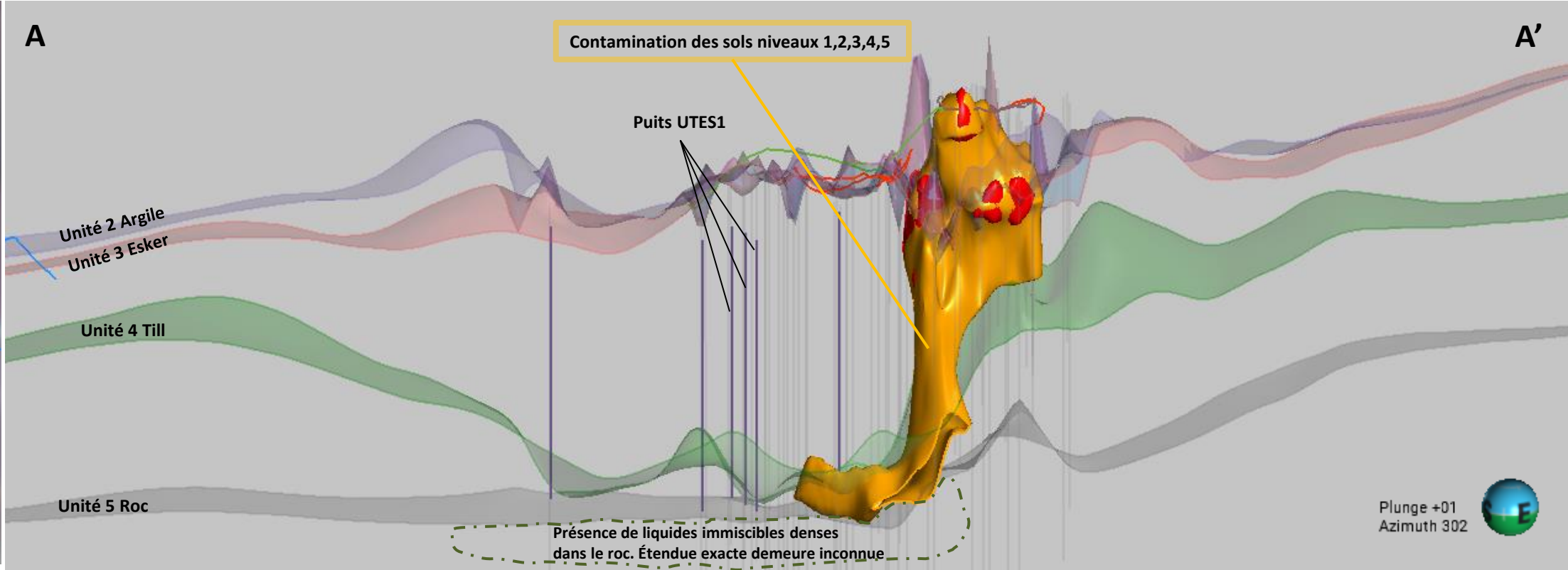
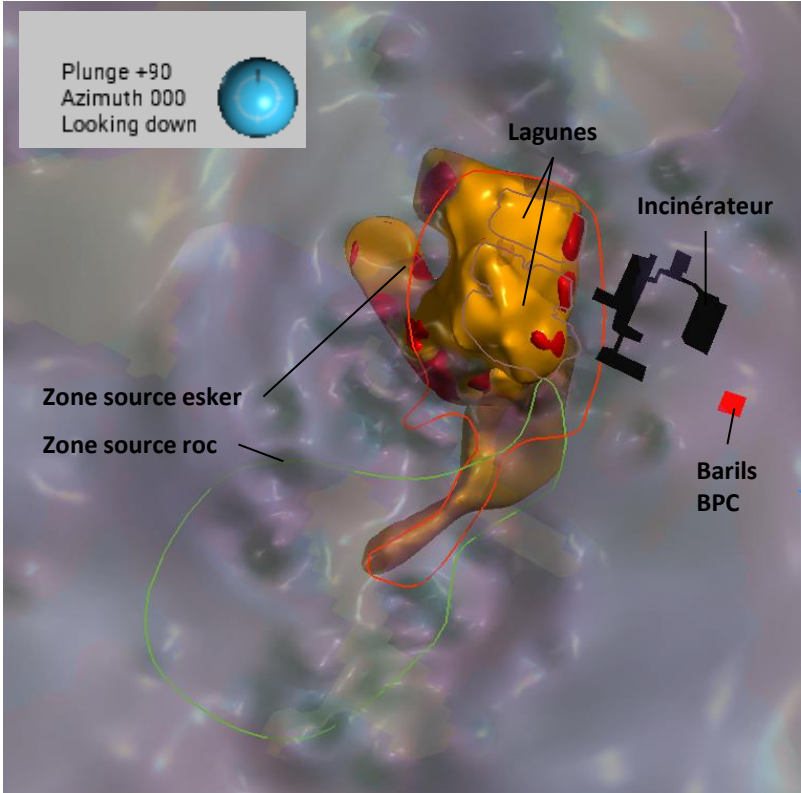
Charge hydraulique imposée égale à la réalisation des conditions moyennes du modèle régional.

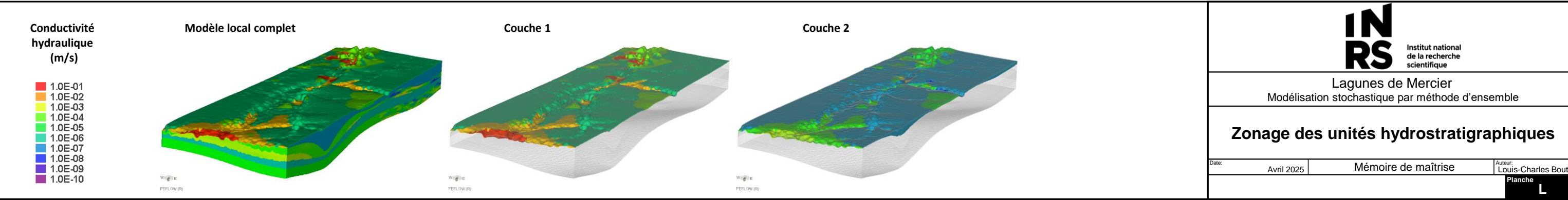
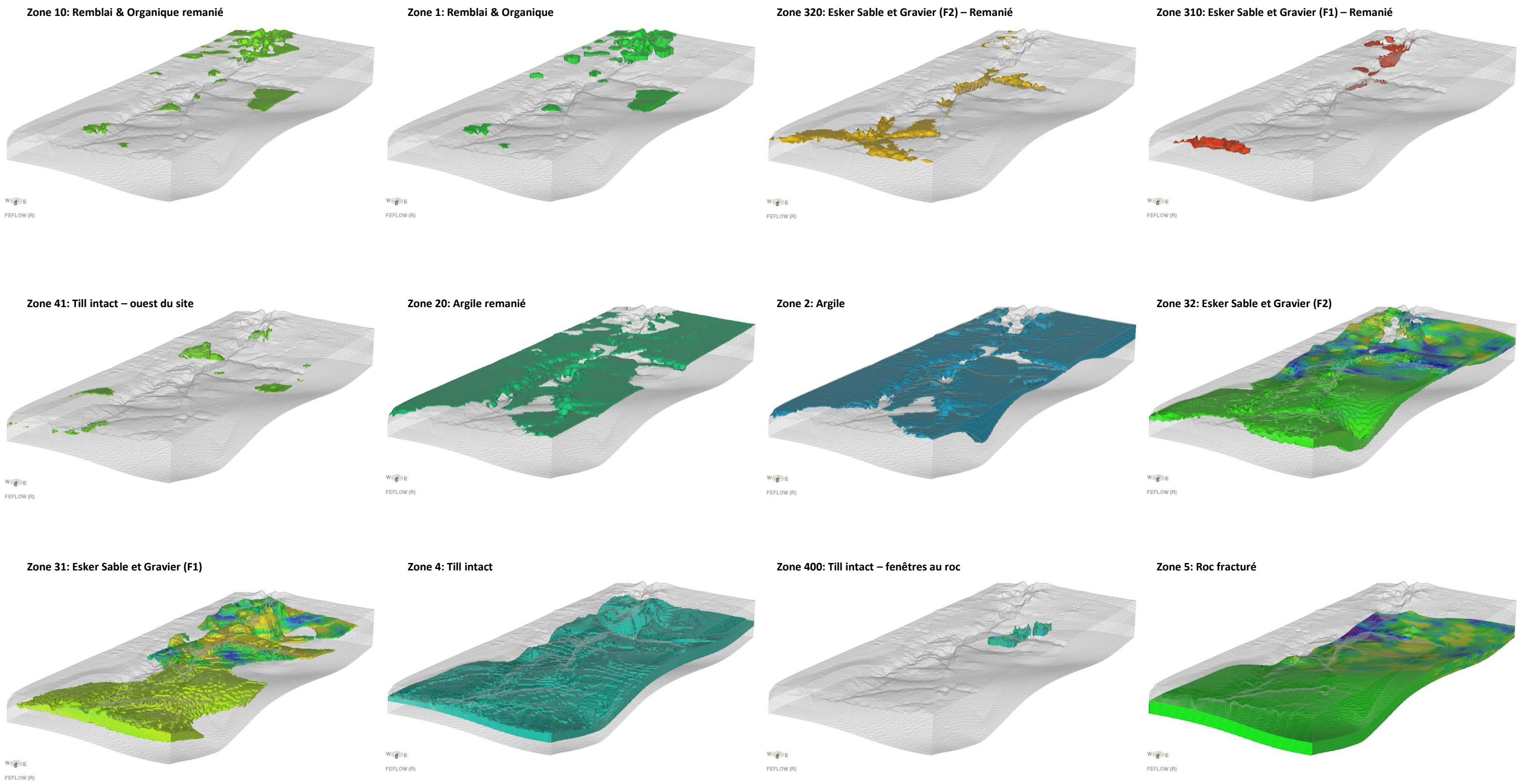


Lagunes de Mercier
Modélisation stochastique par méthode d'ensemble

Conditions aux limites - écoulement

Date: Avril 2025 Mémoire de maîtrise Auteur: Louis-Charles Boutin





INRS

Institut national de la recherche scientifique

Lagunes de Mercier

Modélisation stochastique par méthode d'ensemble

Zonage des unités hydrostratigraphiques

Date:Avril 2025

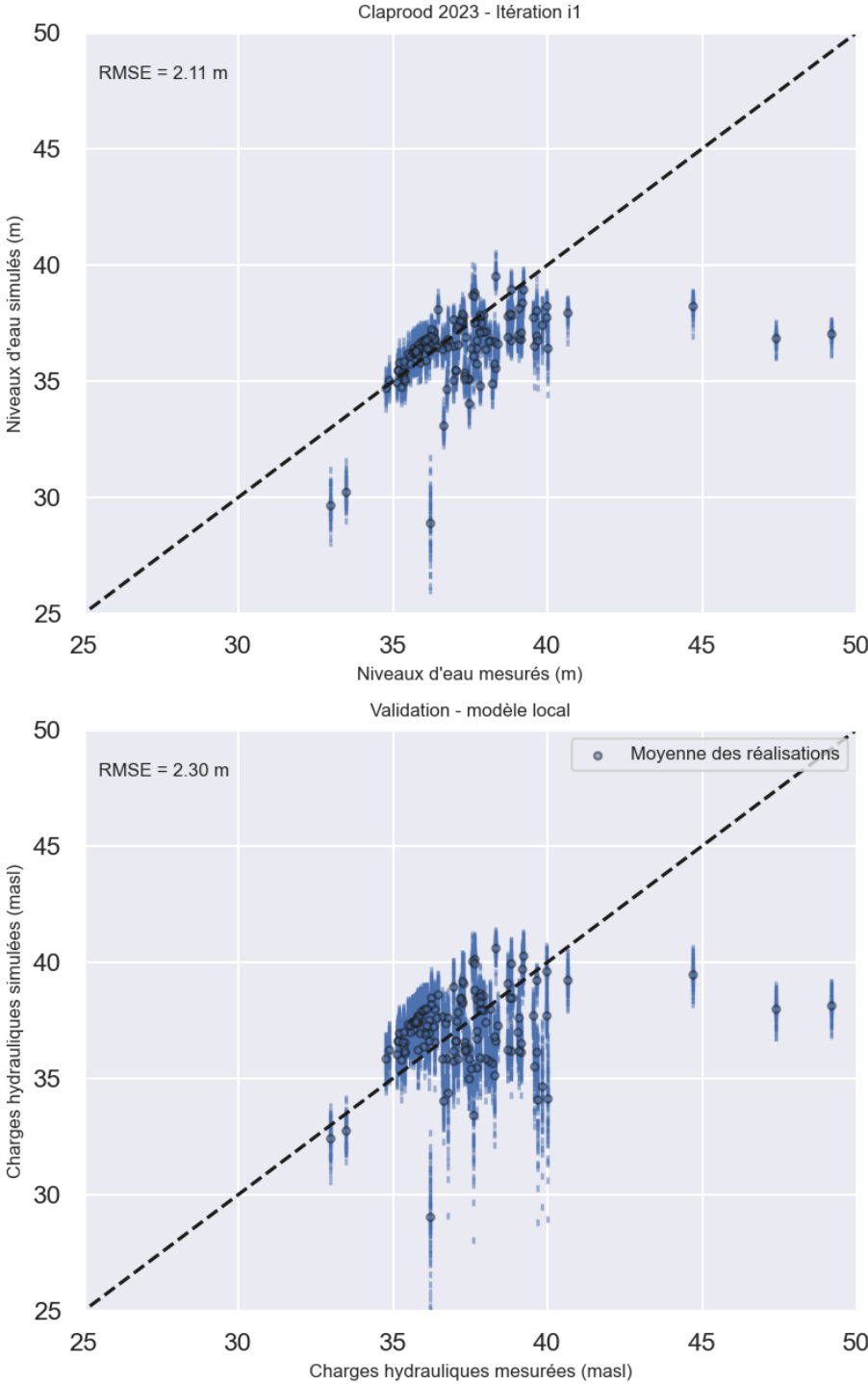
Mémoire de maîtrise

Auteur:Louis-Charles Boutin

Planche

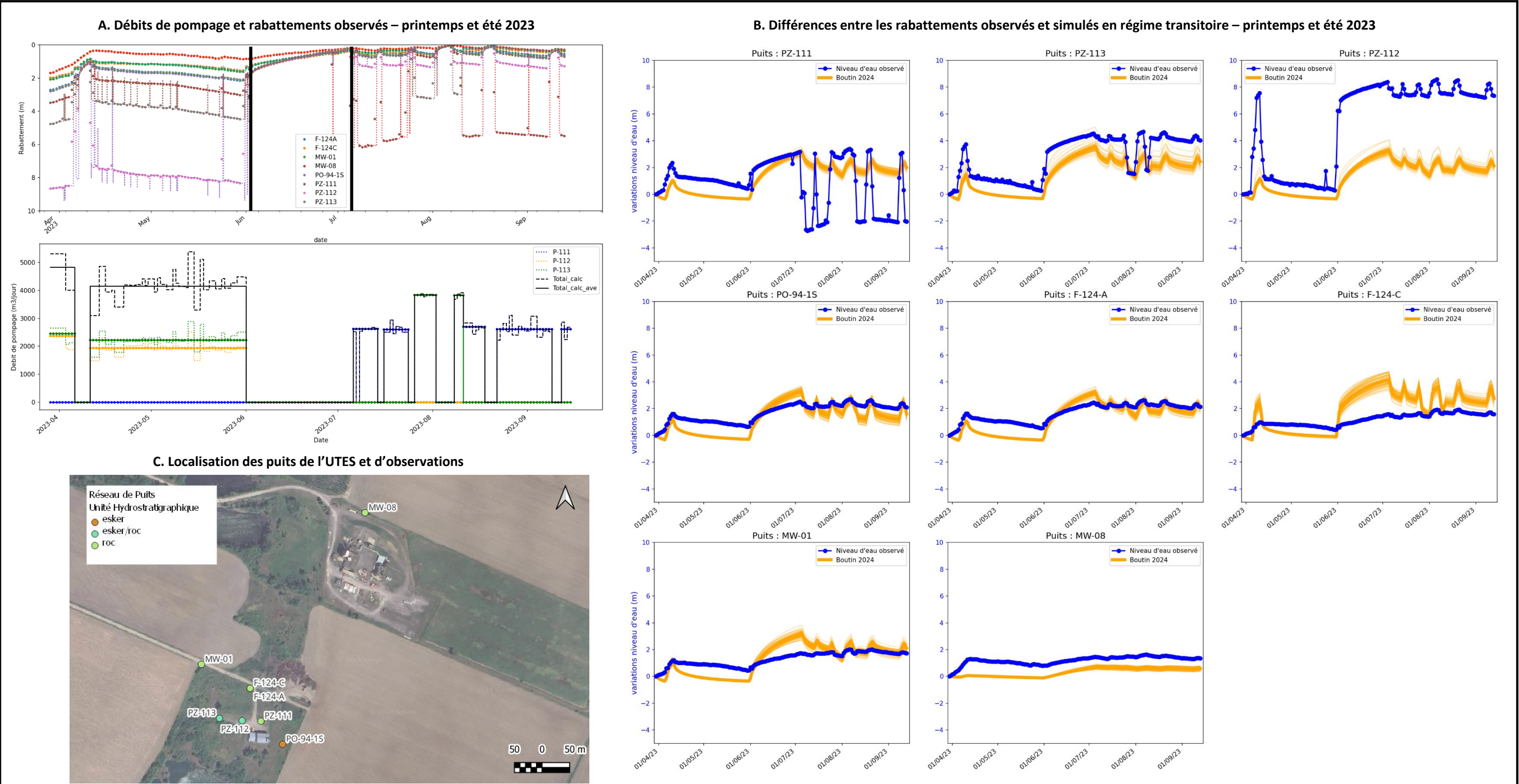
L

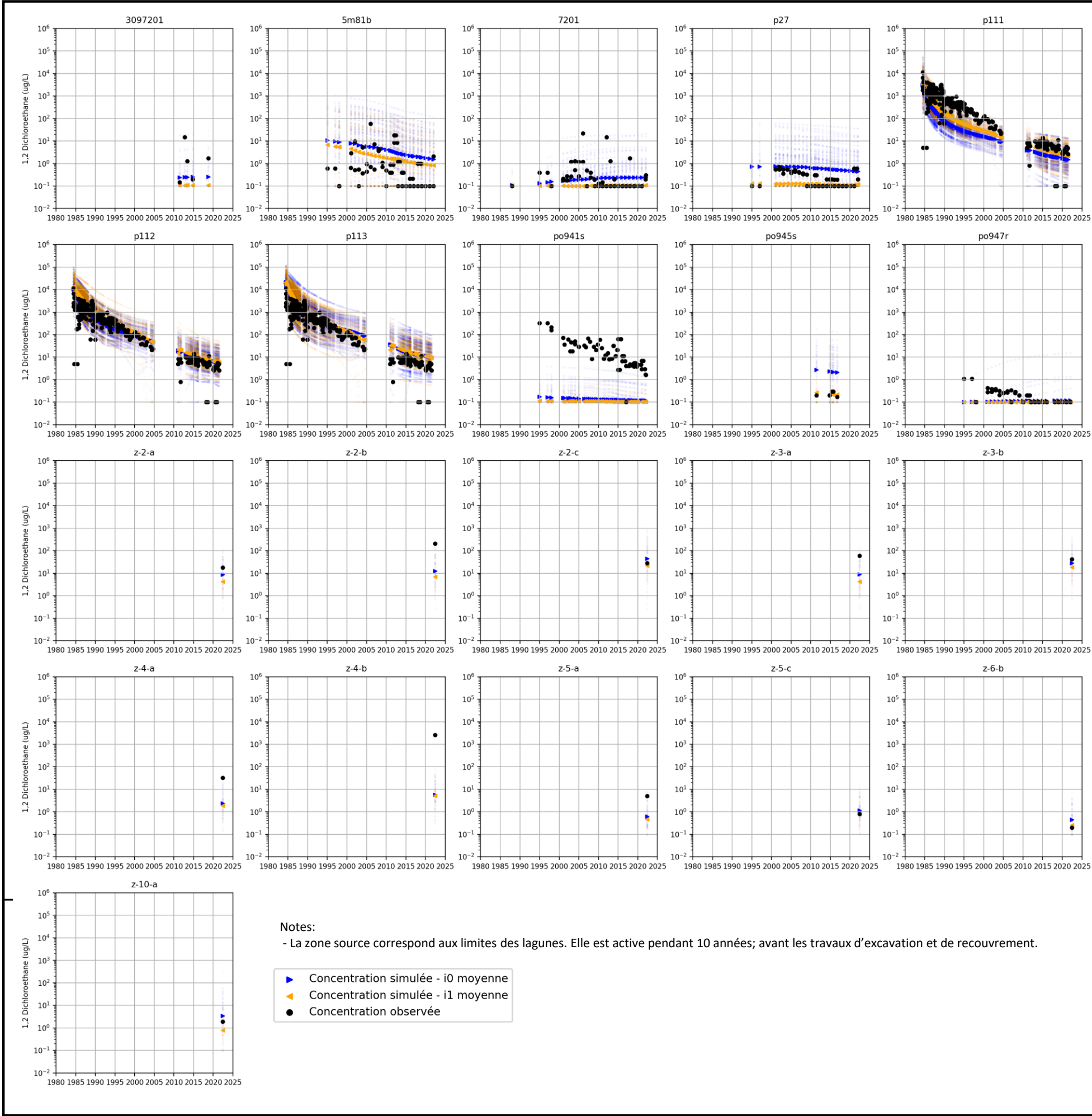
A. Différences entre les charges hydrauliques observées et simulées en régime permanent

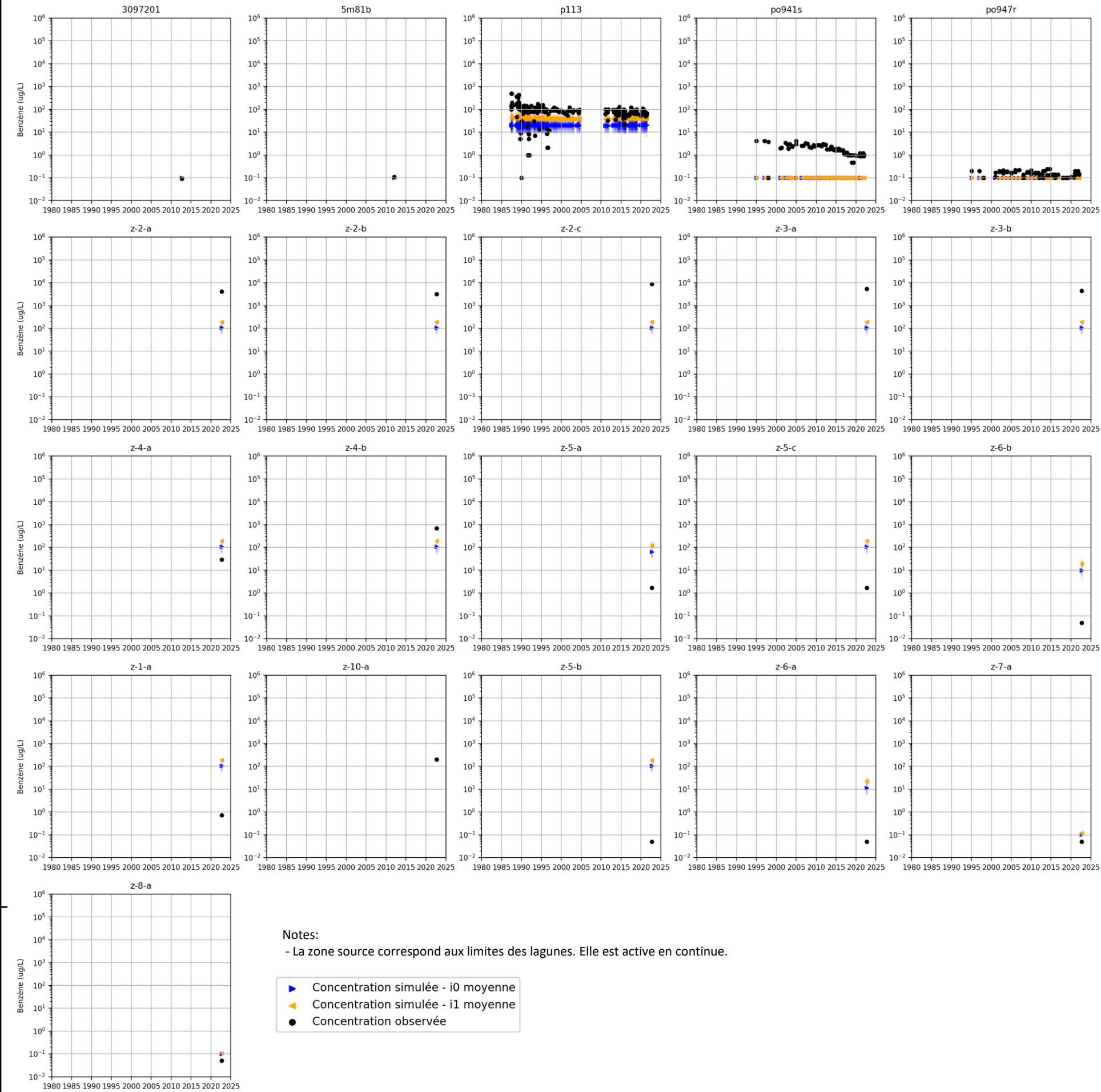


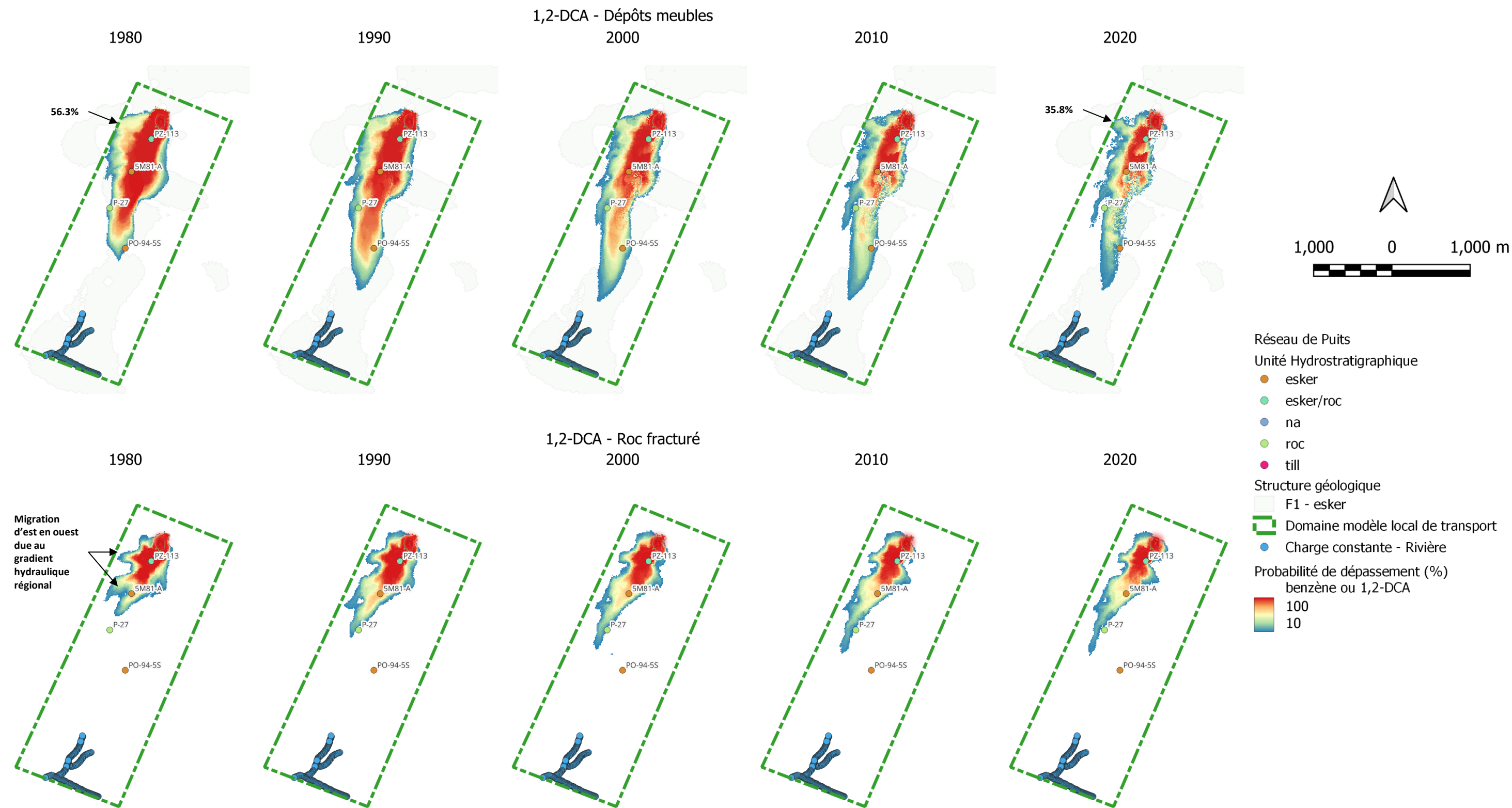
B. Distribution spatiale des résidus sur les charges hydrauliques





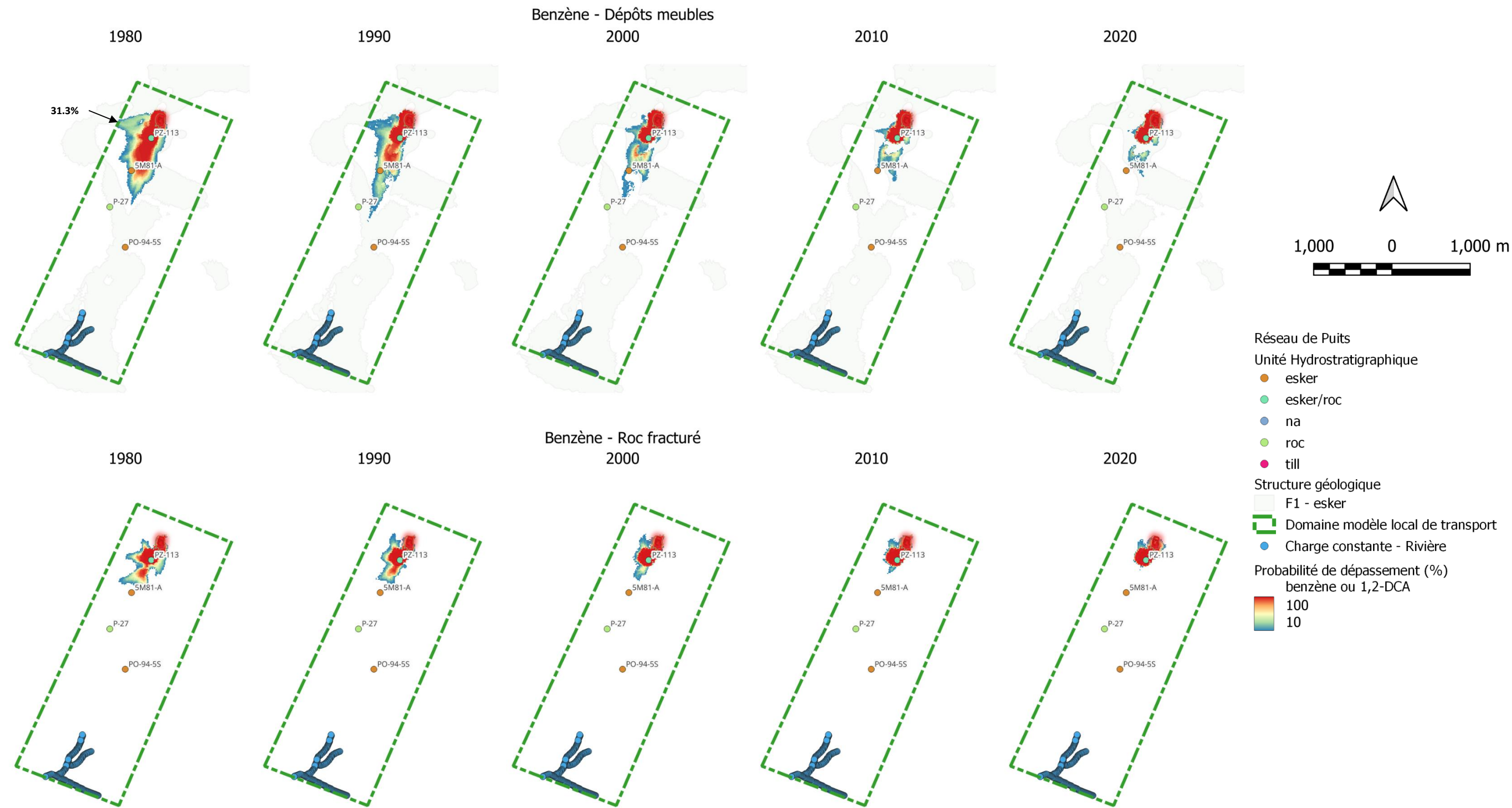






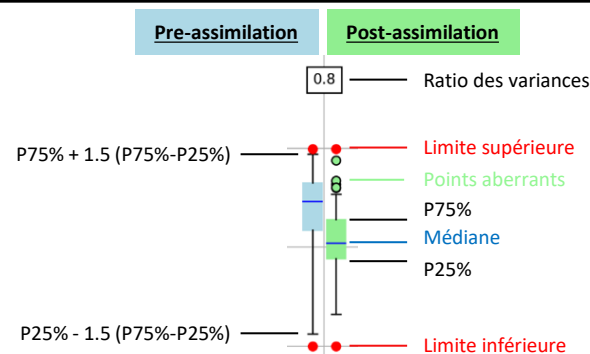
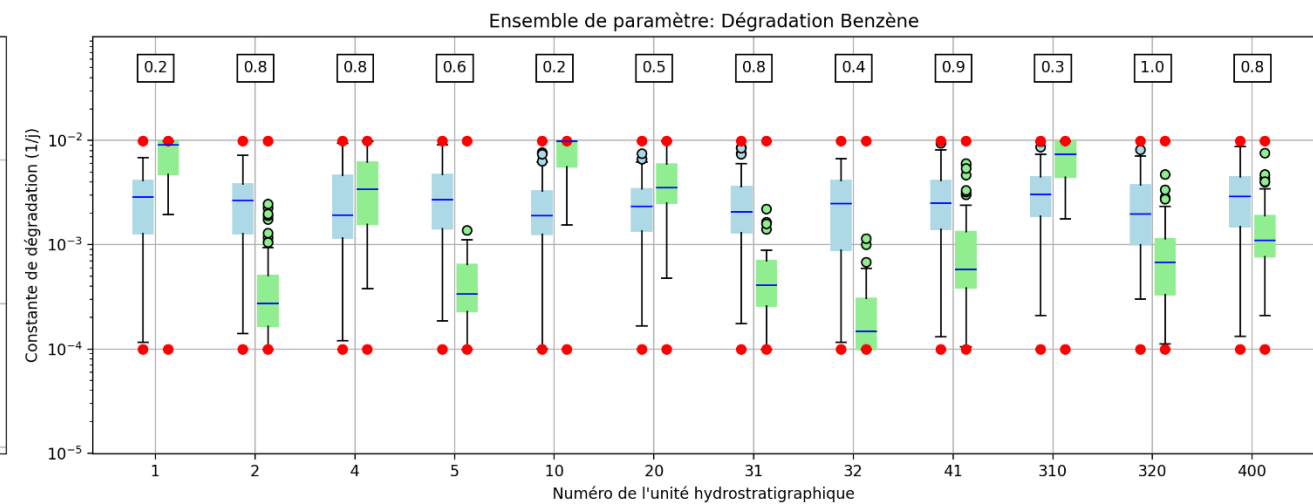
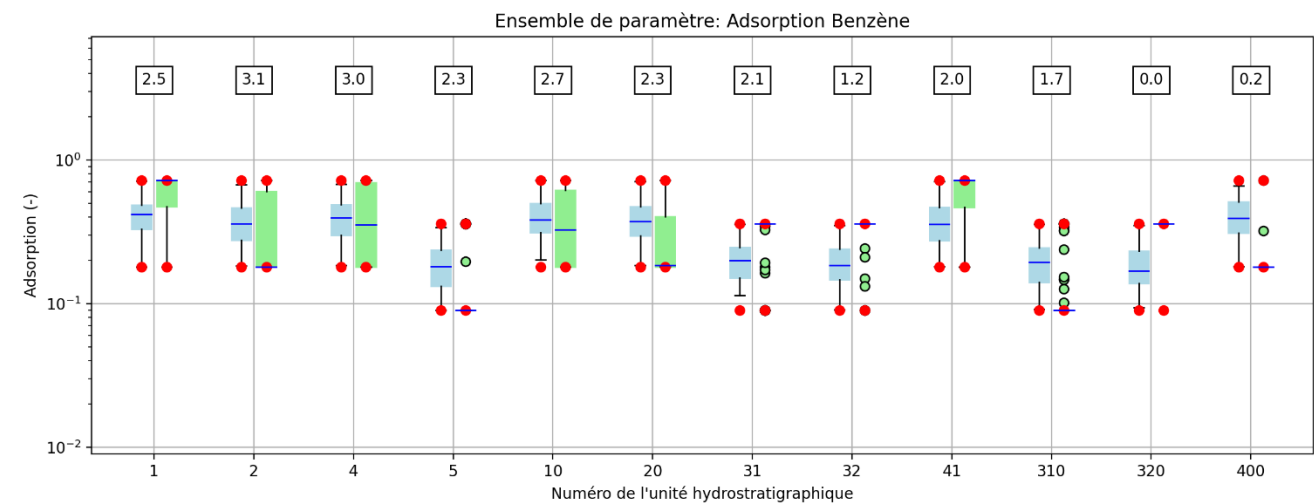
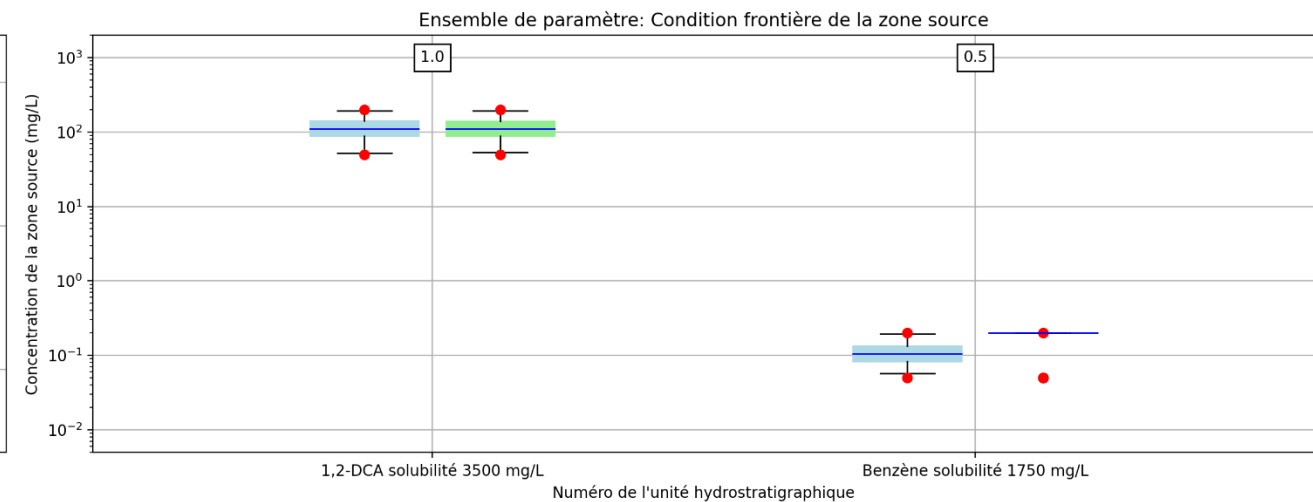
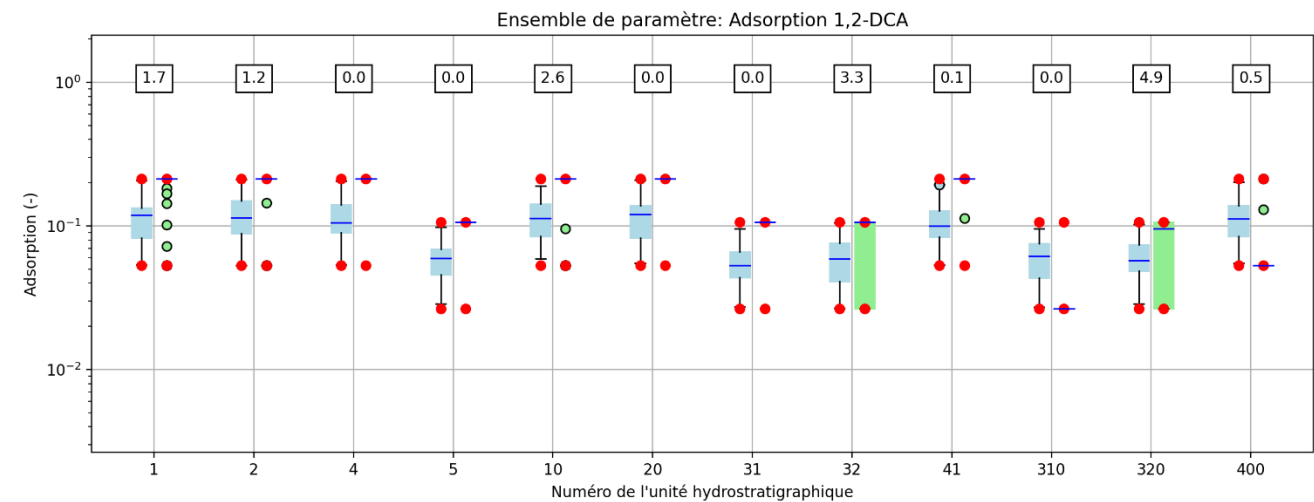
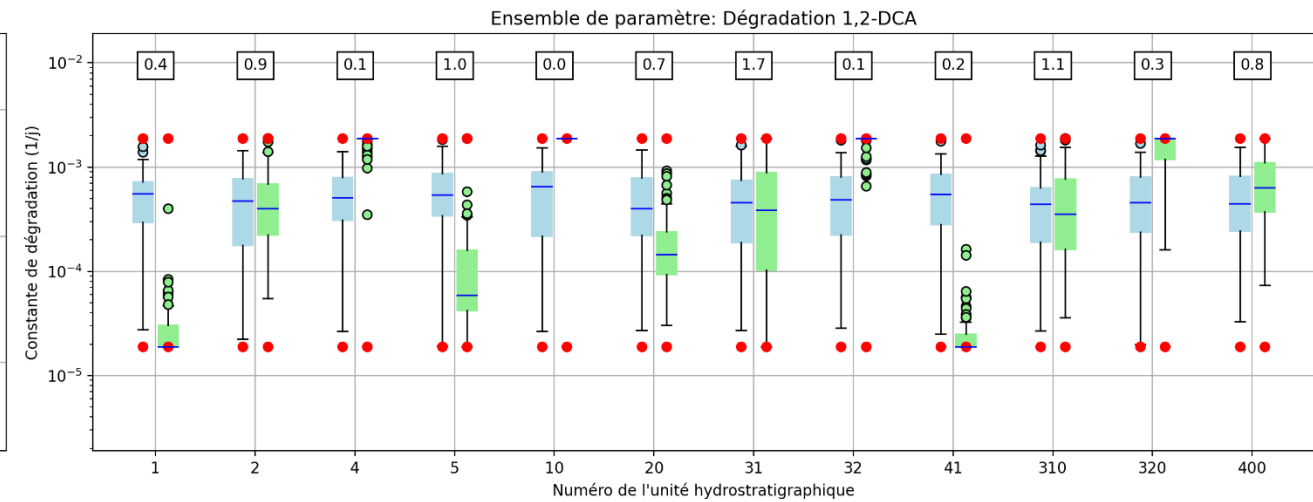
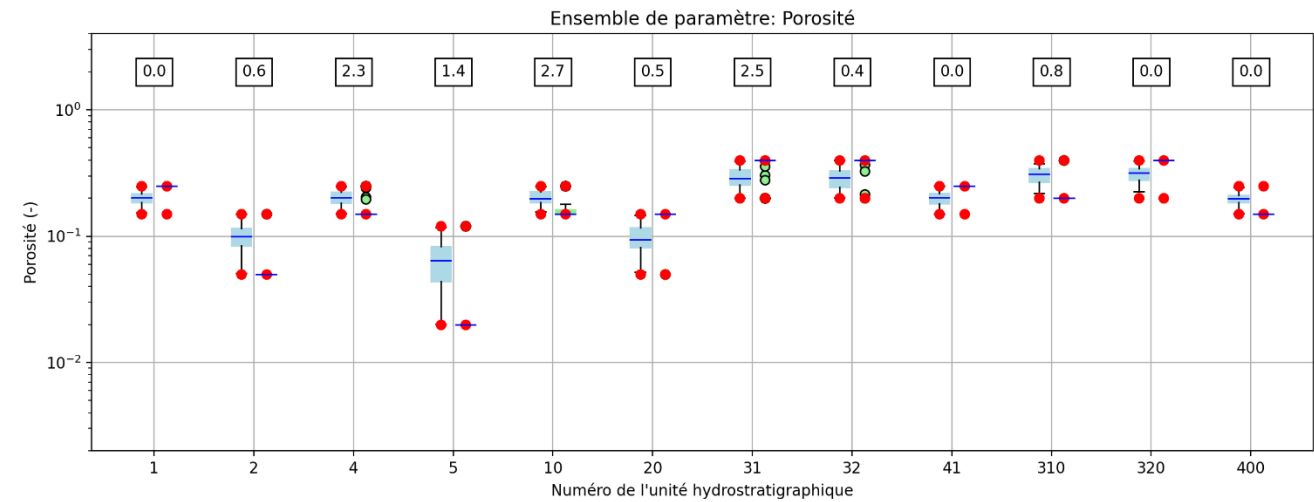
Notes:
Dépôts meubles (couches 1 à 28)
Roc fracturé (couches 27 à 33)

Probabilité de dépassement d'une concentration de 1,2-dichloroéthane de 5.0 ug/L



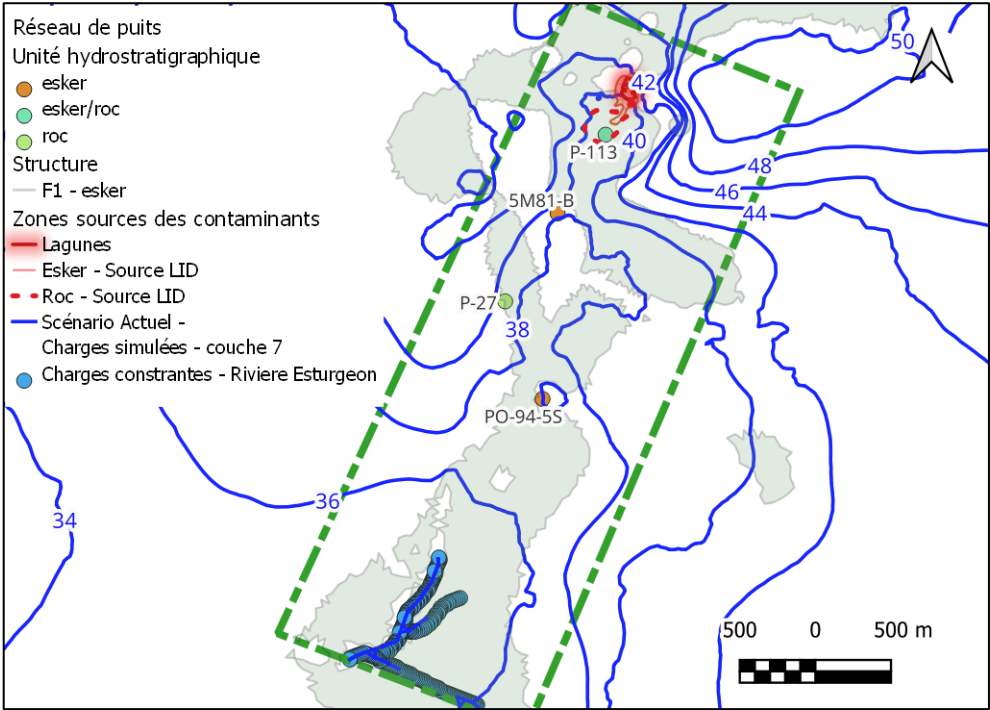
Notes:
Dépôts meubles (couches 1 à 28)
Roc fracturé (couches 27 à 33)

Probabilité de dépassement d'une concentration de benzène de 0.5 ug/L

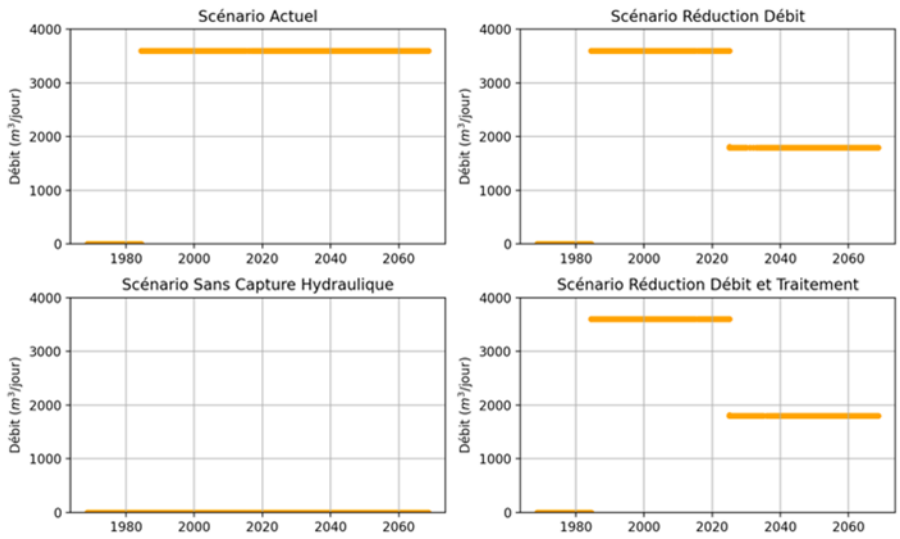


Unité	Zone
Remblai et Organique régional	1
Argile régional	2
Till_4 intact régional	4
Roc fracturé	5
Remblai et Organique régional remanié	10
Argile régional remanié	20
Esker_SG3 F1 (unité principale de sable et gravier)	31
Esker_SG3 F2 (unité secondaire sable et gravier silteux et/ou argileux)	32
Till_4 remanié régional	41
Esker_SG3 F1 (unité principale de sable et gravier) remanié	310
Esker_SG3 F2 (unité secondaire sable et gravier silteux et/ou argileux) remanié	320
Till_4 intact local - fenêtres poeintielles au roc	400

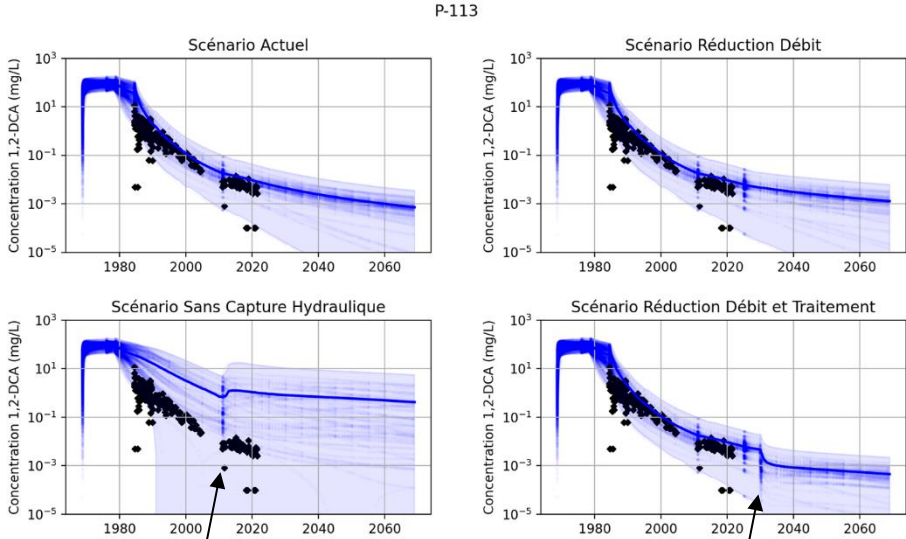
A. Carte de Localisation



B. Débits de pompage



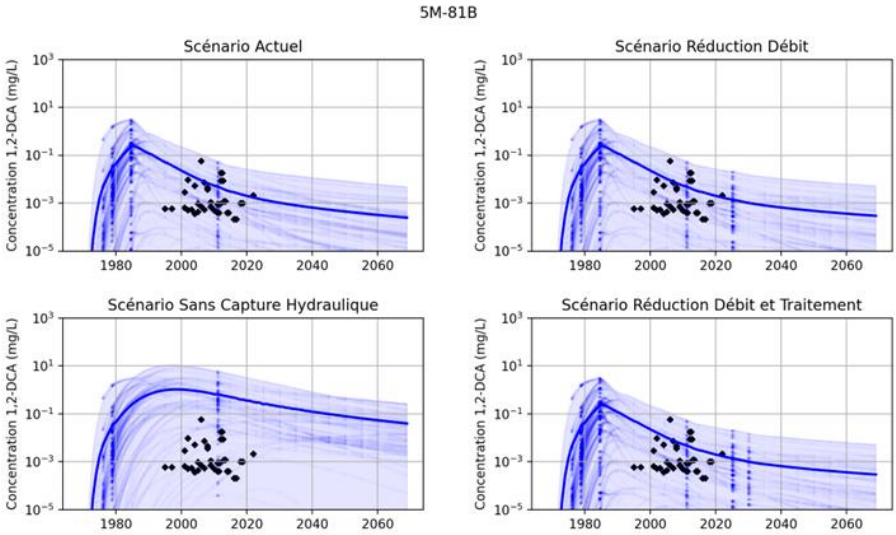
C. Concentrations P-113



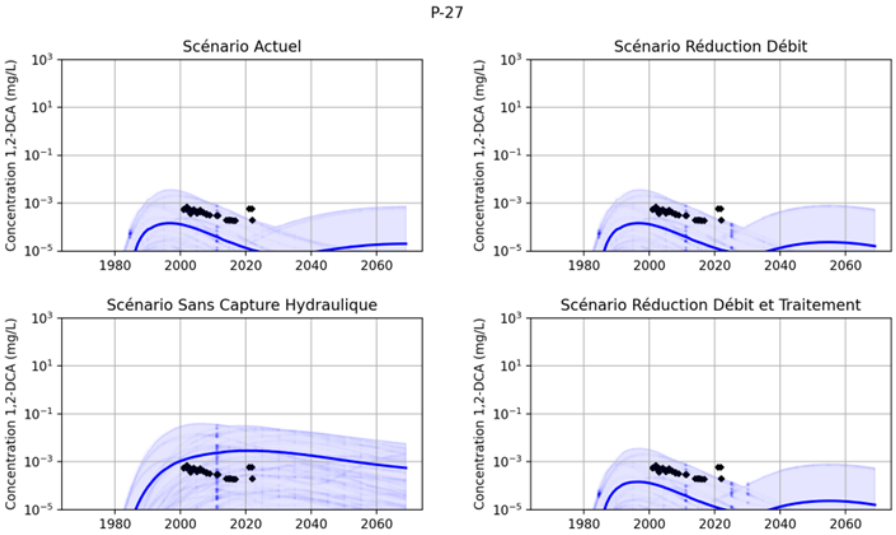
Effet de l'arrêt des puits de Clean Harbor en 2010 en amont hydraulique des lagunes.

Diminution marquée des concentrations à la suite d'une réhabilitation partielle en 2030.

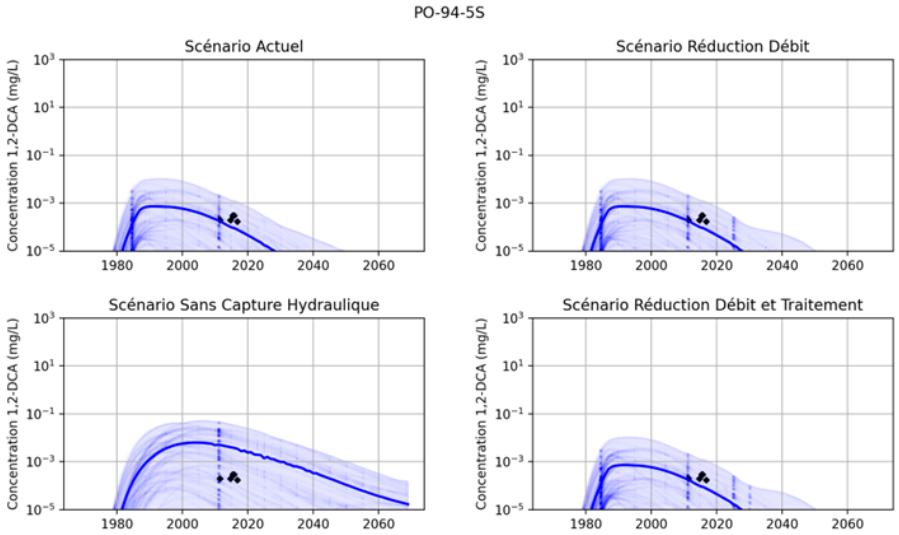
D. Concentrations 5M81-B



E. Concentrations P-27



F. Concentrations PO-94-5S



Notes:

- La somme des débits de pompage des puits de l'UTES
- Concentration moyenne de l'ensemble
- Concentration mesurée
- Intervalle entre la concentration minimale et maximale simulée par l'ensemble

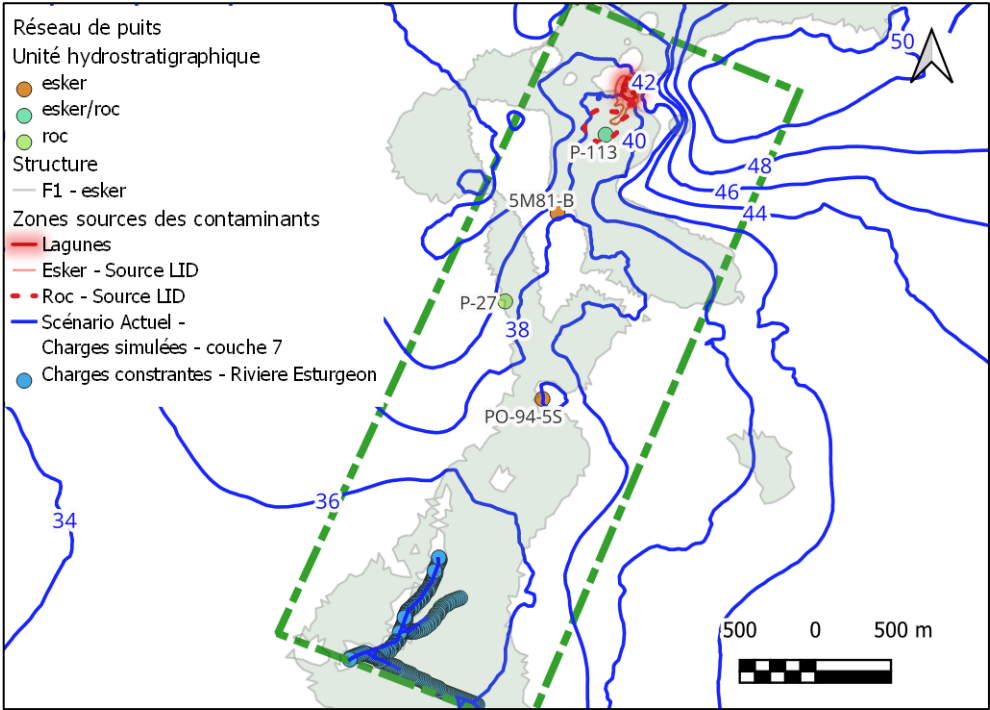


Lagunes de Mercier
Modélisation stochastique par méthode d'ensemble

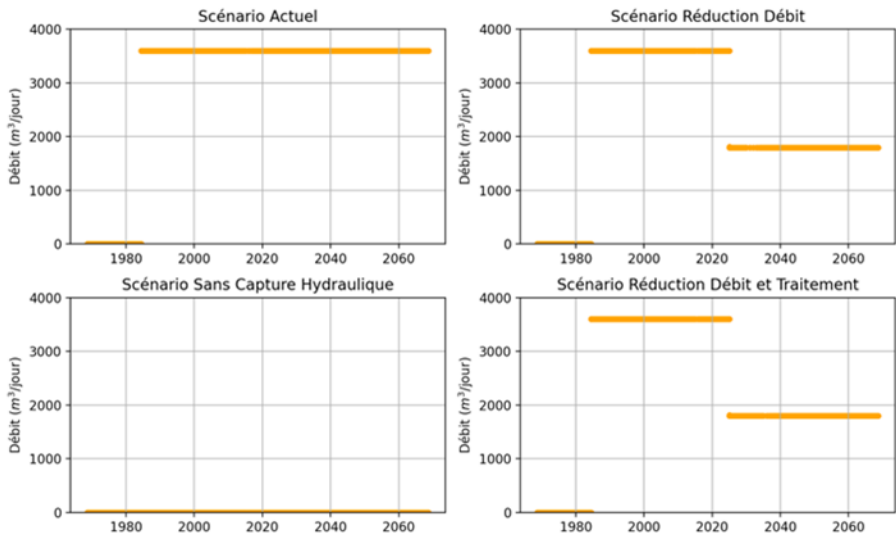
Scénarios prédictifs de transport des
concentrations de 1,2-DCA

Date: Avril 2025
Auteur: Louis-Charles Boutin
Mémoire de maîtrise
Planche U

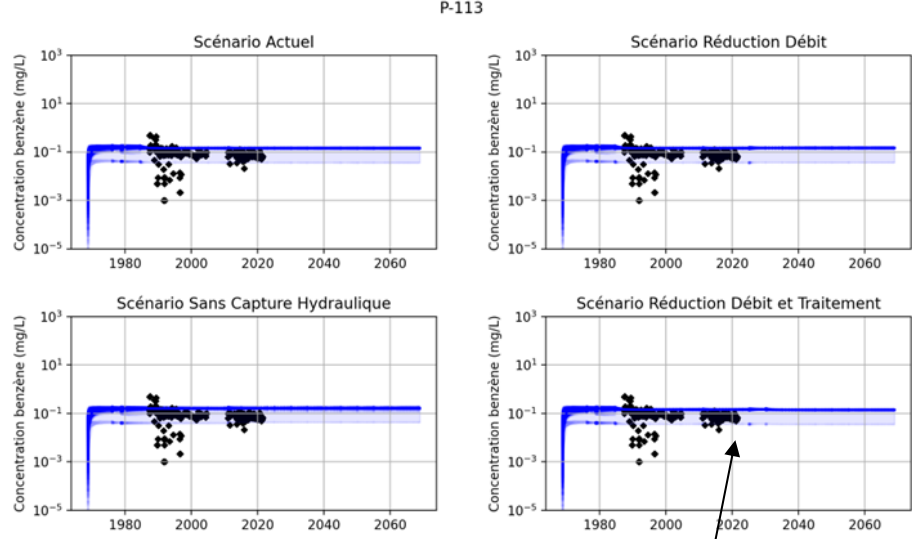
A. Carte de Localisation



B. Débits de pompage

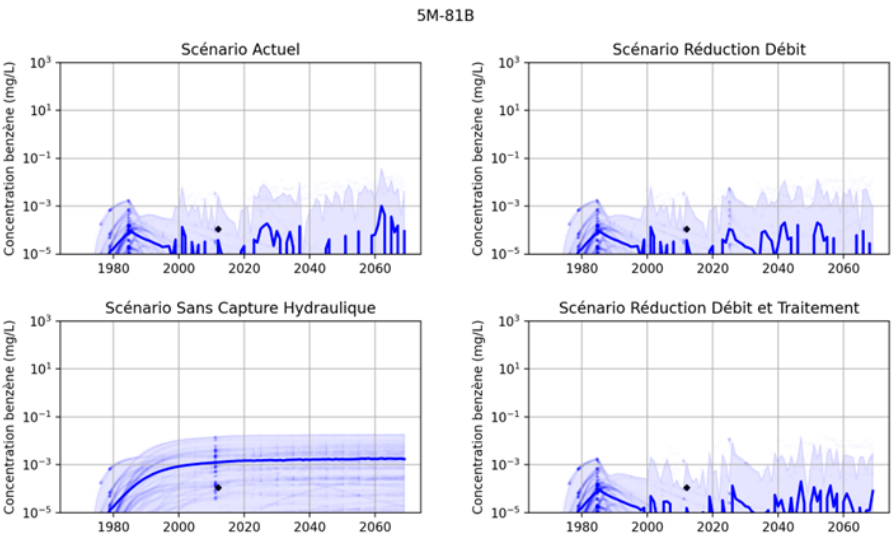


C. Concentrations P-113

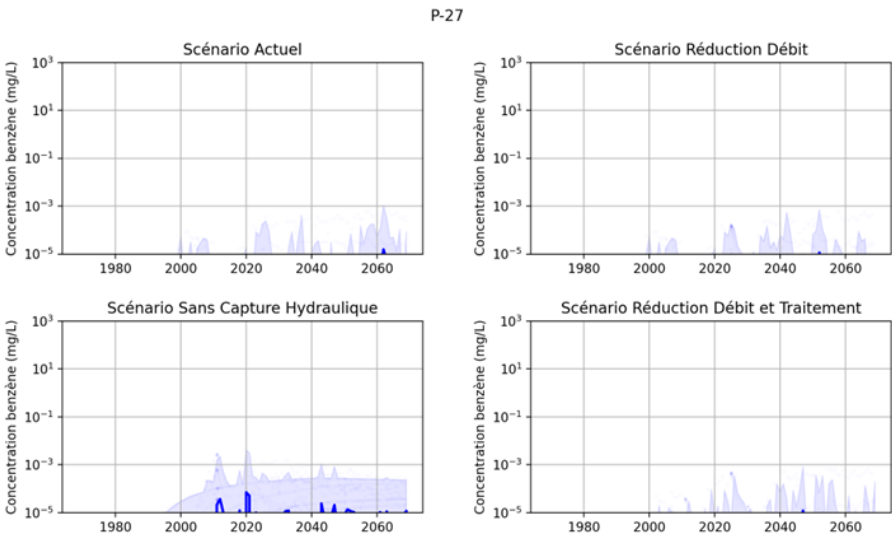


Peu d'influence sur les concentrations en benzène au puits P-113, car la zone source dans le roc et à l'extérieur des lagunes demeure active.

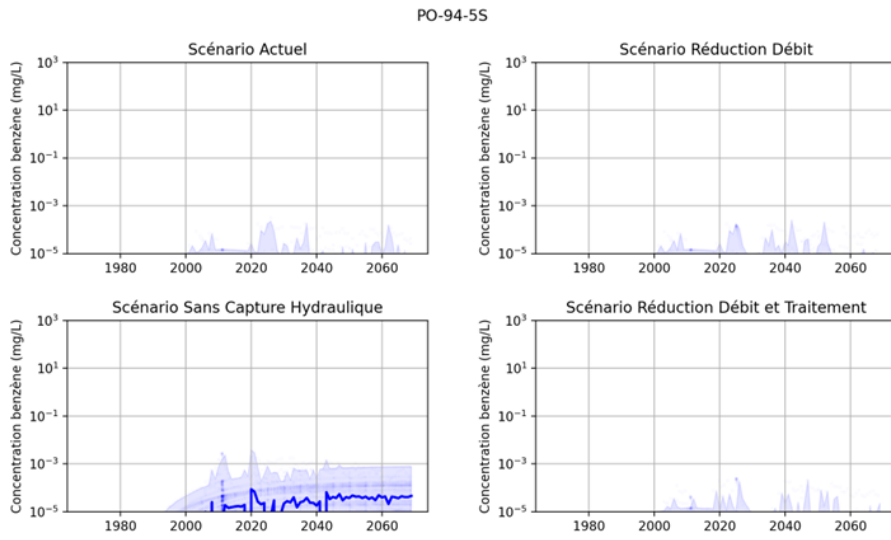
D. Concentrations 5M81-B



E. Concentrations P-27



F. Concentrations PO-94-5S



Notes:

La somme des débits de pompage des puits de l'UTES

Concentration moyenne de l'ensemble

Concentration mesurée

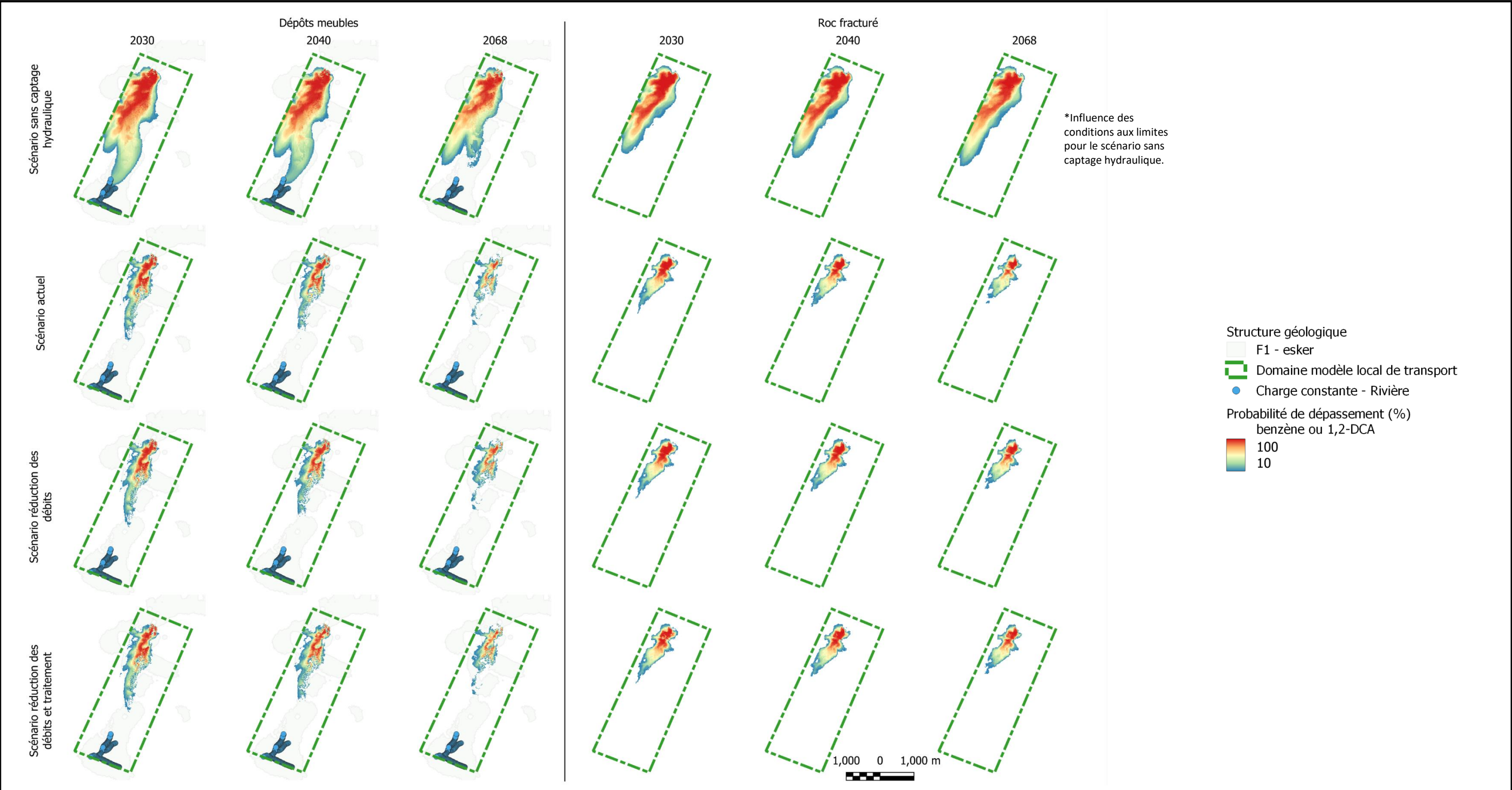
Intervalle entre la concentration minimale et maximale simulée par l'ensemble

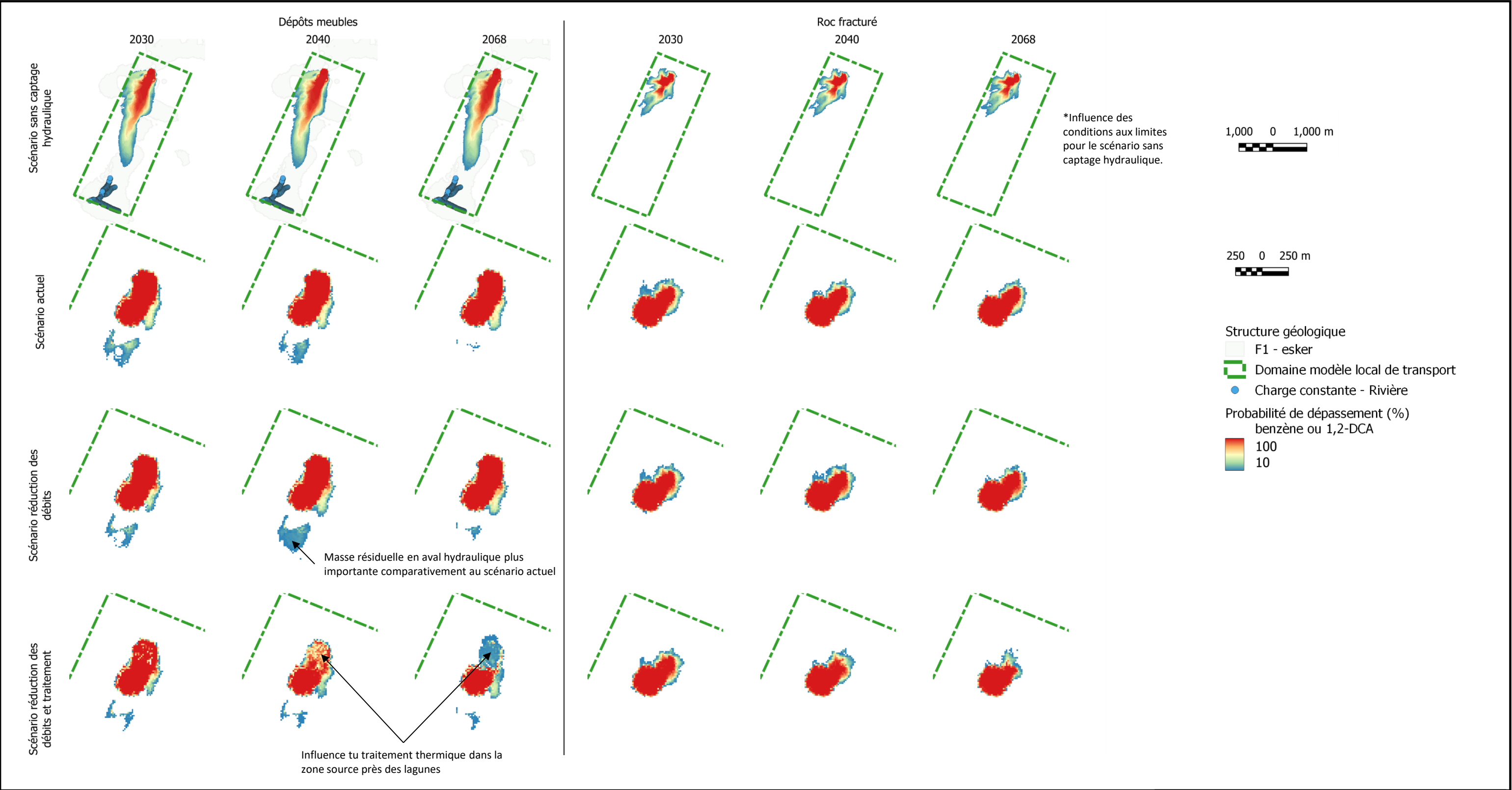


Lagunes de Mercier
Modélisation stochastique par méthode d'ensemble

Scénarios prédictifs de transport des concentrations de benzène

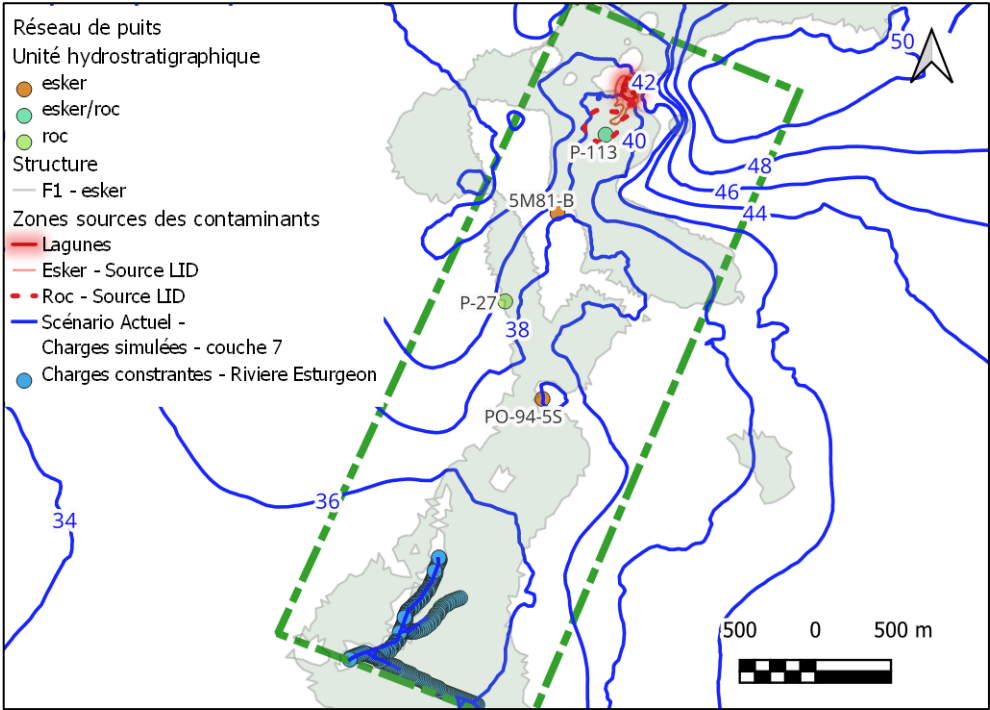
Date:	Avril 2025	Mémoire de maîtrise	Auteur: Louis-Charles Boutin
			Planche V



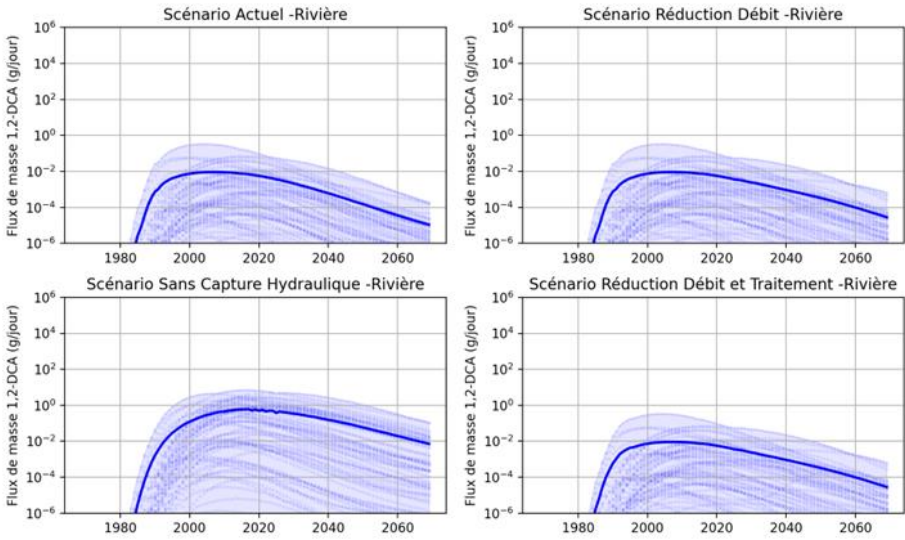


<p>Notes:</p> <p>Dépôts meubles (couches 1 à 28)</p> <p>Roc fracturé (couches 27 à 33)</p> <p>Probabilité de dépassement d'une concentration de benzène de 0.5 ug/L</p>	<p>INRS Institut national de la recherche scientifique</p>		
	<p>Lagunes de Mercier</p> <p>Modélisation stochastique par méthode d'ensemble</p>		
	<p>Évolution temporelle du panache de benzène</p>		
	Date: Avril 2025	Mémoire de maîtrise	Auteur: Louis-Charles Boutin
			Planche X

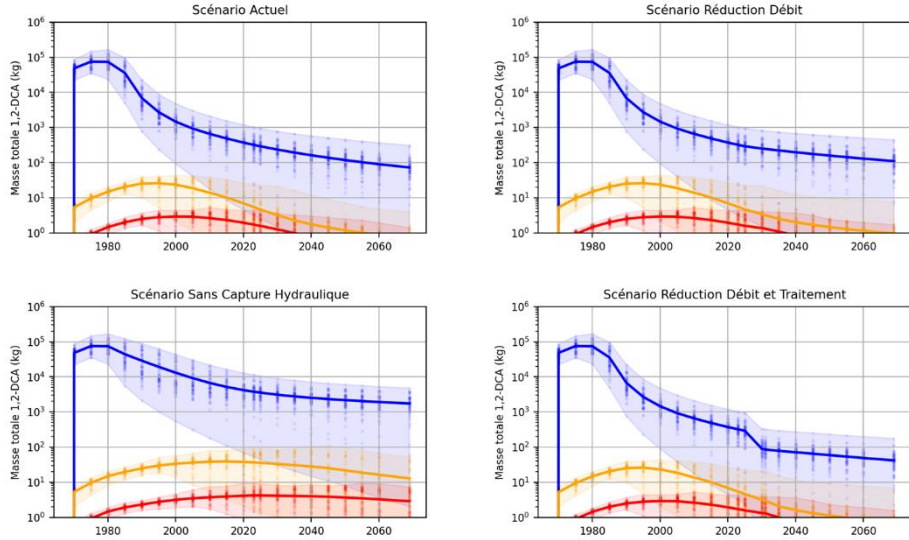
A. Carte de Localisation



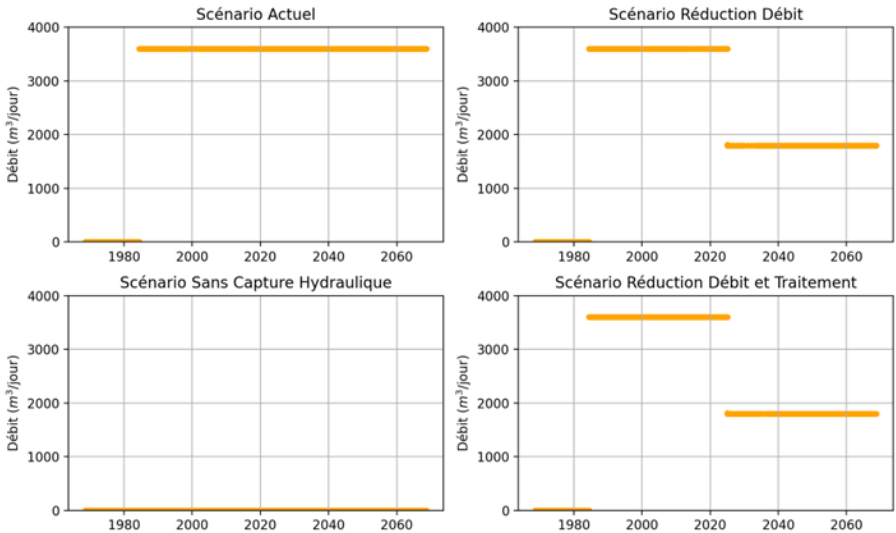
B. 1,2 DCA – Flux de masse à la Rivière de l’Esturgeon



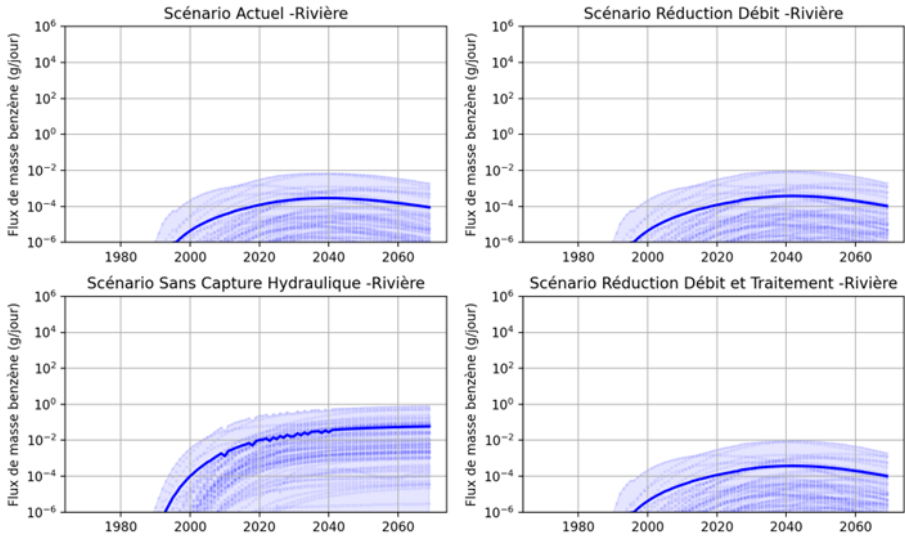
C. 1,2 DCA – Masse totale dans le domaine



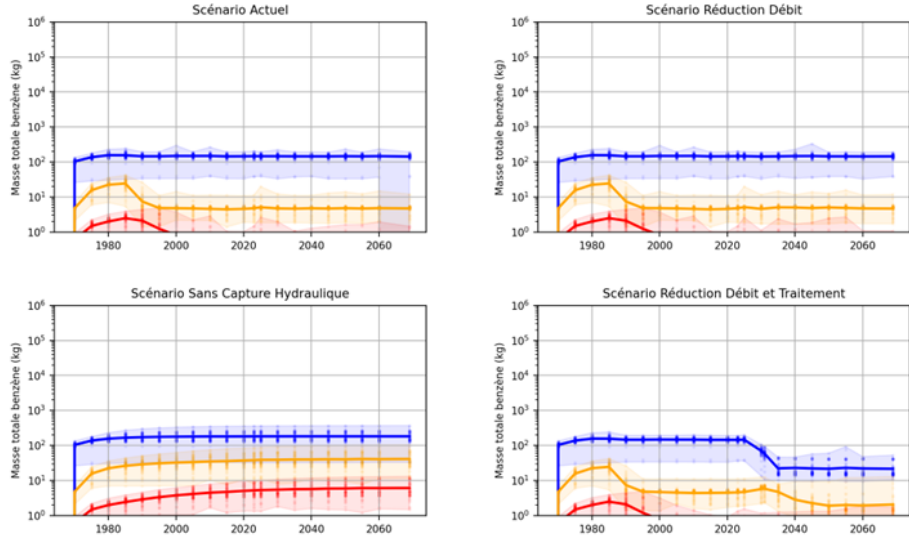
D. Débits de pompage



E. Benzène – Flux de masse à la Rivière de l’Esturgeon

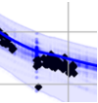


F. Benzène – Masse totale dans le domaine



Notes:

- La somme des débits de pompage des puits de l’UTES
- Flux de masse moyen de l’ensemble



Intervalle entre le flux de masse minimum et maximum simulé par l’ensemble

Intervalle des concentrations pour le calcul de la masse totale dans le domaine du modèle local de transport.

- ≥ 0.1 mg/L
- ≥ 0.01 et < 0.1 mg/L
- ≥ 0.001 et < 0.01 mg/L



Lagunes de Mercier
Modélisation stochastique par méthode d'ensemble

Scénarios prédictifs de transport
flux de masse et masse totale

