



# OREOS, une application pour caractériser la pollution organique dans les échantillons de sol

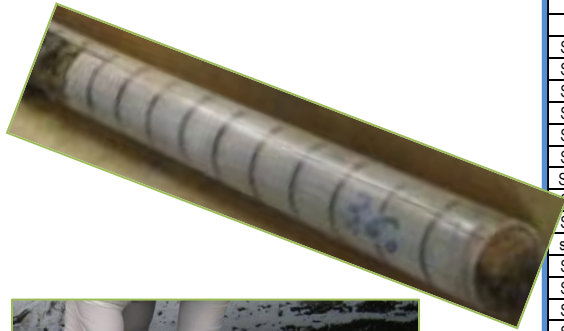
J. Chastanet, S. Kaskassian, J.-M. Côme



Logiciel issu d'un projet R&D cofinancé par l'ADEME Rhone-Alpes – dispositif INNOV'R avec l'appui scientifique de Michel Quintard, de l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse

# Contexte : les polluants organiques

- L'étude de pollution de sol est généralement basée sur l'analyse d'échantillons de sol prélevés sur site



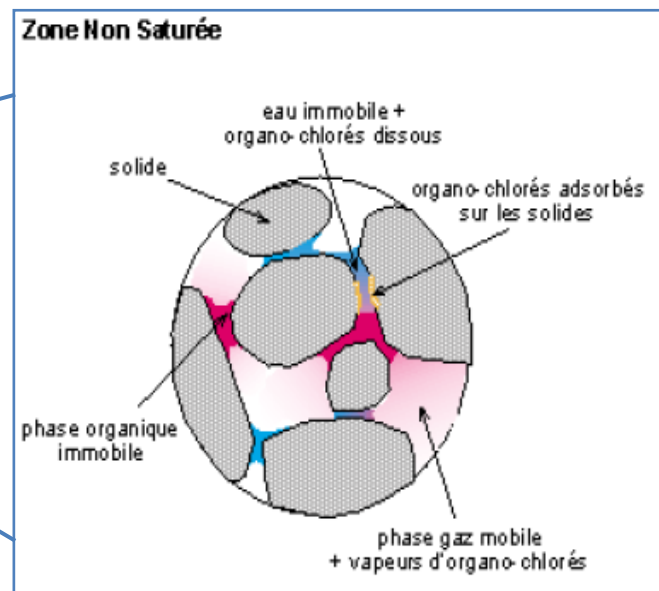
Sample	DW	Petroleum Hydrocarbons (mg/kg DW)										
		%	MeC5-C8	>C8-C10	C10-C12	C12-C16	C16-C20	C20-C24	C24-C28	C28-C32	C32-C36	C36-C4
SC40	0.5	90	<1,0	<1,0	0.03	0.94	1.80	5.78	10.17	13.05	13.41	9.92
SC82	0.5	92.3	<1,0	<1,0	0.76	6.36	3.63	7.22	14.40	18.34	18.27	3.72
SC49	0.7	83.3	<1,0	<1,0	0.26	1.51	4.95	10.67	15.62	20.06	21.59	16.34

Sample	DW	Chlorinated Aliphatic Hydrocarbons (mg/kg DW)														
		PCE	TCE	Cis-DCE	1,1-DCE	Trans-DCE	CV	HCA	PeCa	1,1,1,2-PCA	1,1,2,2-PCA	1,1,1-TCA	1,1,2-TCA	1,1,1-DCA	1,2-DCA	
SC69	0.9	48.9	11.1	0.33	<0,10	<0,10	<0,020	<0,20	<0,20	<0,10	<0,20	<0,10	<0,20	<0,10	<0,10	<0,10
SC73	0.9	20	0.477	<0,10	<0,10	<0,10	<0,020	<0,20	<0,20	<0,10	<0,20	<0,10	<0,20	<0,10	<0,10	<0,10
SC81	0.9	0.808	0.242	<0,10	<0,10	<0,10	<0,020	<0,20	<0,20	<0,10	<0,20	<0,10	<0,20	<0,10	<0,10	<0,10
sc201	1.05	3.43	<0,050	<0,10	<0,10	<0,10	<0,022	<0,23	<0,23	<0,10	<0,23	<0,10	<0,23	<0,10	<0,10	<0,10
SC44	1.1	<0,050	<0,050	<0,10	<0,10	<0,10	0.115	<0,24	<0,24	<0,10	<0,24	<0,10	<0,24	<0,10	0.22	<0,10
SC60	1.3	3000	119	1.59	<0,10	<0,10	0.053	<0,20	<0,20	<0,10	<0,20	0.55	<0,20	<0,10	<0,10	<0,10
SC76	1.3	6.43	0.088	<0,10	<0,10	<0,10	<0,021	<0,21	<0,21	<0,10	<0,21	<0,10	<0,21	<0,10	<0,10	<0,10
SC88	1.4	<0,051	<0,051	<0,10	<0,10	<0,10	<0,025	<0,25	<0,25	<0,10	<0,25	<0,10	<0,25	<0,10	<0,10	<0,10
5	30200	146	0.84	<0,10	<0,10	<0,10	0.035	0.4	<0,20	<0,10	<0,20	<0,10	<0,20	<0,10	<0,10	<0,10
5	2.49	0.157	<0,15	<0,15	<0,15	<0,038	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
5	19.1	2.13	21.1	<0,10	0.11	2.03	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
5	11.3	0.321	0.22	<0,10	<0,10	<0,020	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
5	<0,050	<0,050	0.24	<0,10	<0,10	0.068	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
7	2390	106	<83.9	<0,10	<0,10	<0,021	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
7	<0,788	<0,788	<1,58	<1,58	<1,58	<0,394	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
7	822	252	8.22	<0,10	0.15	<0,021	4.4	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
7	<0,05	<0,05	<0,10	<0,10	<0,10	<0,02	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
7	0.071	0.063	0.14	<0,10	<0,10	<0,021	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
7	0.07	<0,050	<0,10	<0,10	<0,10	<0,020	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
7	4130	3400	1580	4.52	1.41	78.3	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
7	0.725	0.115	85.2	<0,10	<0,10	0.041	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
7	23.4	0.334	0.17	<0,10	<0,10	<0,020	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
7	<0,050	<0,050	<0,10	<0,10	<0,10	<0,020	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
7	10500	175	2.17	0.56	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10
7	<0,050	<0,050	<0,10	<0,10	<0,10	<0,020	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10	<0,10



- Comment interpréter ces résultats ?
  - en l'absence de valeurs guide
  - pour la délimitation de la zone source et sa quantification
  - dans le contexte d'une évaluation de risques (transferts) / choix des techniques de dépollution

# Questions clés



- Les polluants sont ils présents sous forme de phase organique ?
- Si oui, en quelle quantité (saturation de la phase organique) ? La phase est elle mobile ( $S_{napl} > S_{or}$ , HCT flottant par ex.) ?
- Quel seuil de  $C_{sols}$  définit la zone source ? -> où est la source et quel est son volume ?
- En quelle proportion sont les phases du sol (NAPL, eau, gaz, solide) ?
- Quelles sont les concentrations (de polluants) dans la nappe, l'air des sols... ?

**L'objectif d'OREOS : répondre à ces questions**

# Présentation du logiciel



## Base de données des paramètres physico-chimiques

- Masse molaire, densité liquide, solubilité, pression de vapeur, Koc**  
[130 composés parmi HC monoaromatique, chlorés, HAP, TPH, alcanes...]

Name	Boiling	Melting	Molecular Weight	Molecular Weight	Liquid Density	Water Solubility	Vapor pressure
Benzene	80.1	5.5	78.11	78.11	0.879	1790	12.7
Chlorobenzene	112.2	-33.3	112.56	112.56	1.106	0.51	0.13
Dichlorobenzene	180.9	17.2	147.03	147.03	1.283	0.05	0.01
Trichlorobenzene	234.1	21.3	181.72	181.72	1.293	0.002	0.0005



## Input – Caractérisation des échantillons & analyse de sensibilité

OREOS: Application2.txt - [Sample Characterization input]

**Paramètres du sol : porosité, teneur en eau, teneur en carbone organique**  
[mesurés en labo ou issu de la littérature]

**Pollution : concentrations sol (mg/kg)**  
[mesurée en labo]

Name	Boiling	Melting	Coordinate	Coordinate	Coordinate	Geology	Porosity	Water Content	Foc	Soil Density	Dry Matter Content	Trichloroethylene	Trichloroethylene
BP212-1	80.1	5.5	1.5	1.5	1.5		0.121	0.001	0.001	1.5	0.001	0.001	0.001
BP212-2	80.1	5.5	1.5	1.5	1.5		0.121	0.001	0.001	1.5	0.001	0.001	0.001

## Run – Lancement du calcul

OREOS: Application2.txt - [Calculation]

**Calcul de la répartition basé sur :**

- Équation d'équilibre thermodynamique
- Équation d'état
- Bilan de masse

Residual NAPL Sat

No	Name	Boiling	Melting	Coordinate	Coordinate	Coordinate	Geology	Porosity	Water Content	Foc	Soil Density	Dry Matter Content	Trichloroethylene	Trichloroethylene
46	PZA34-2	80.1	5.5	1.5	1.5	1.5		0.121	0.001	0.001	1.5	0.001	0.001	0.001
47	PZA33-2	80.1	5.5	1.5	1.5	1.5		0.121	0.001	0.001	1.5	0.001	0.001	0.001
48	PZA33-2	80.1	5.5	1.5	1.5	1.5		0.121	0.001	0.001	1.5	0.001	0.001	0.001
49	PZA40-3	80.1	5.5	1.5	1.5	1.5		0.121	0.001	0.001	1.5	0.001	0.001	0.001
50	PZA70-2	80.1	5.5	1.5	1.5	1.5		0.121	0.001	0.001	1.5	0.001	0.001	0.001
51	PZA40-3	80.1	5.5	1.5	1.5	1.5		0.121	0.001	0.001	1.5	0.001	0.001	0.001
52	PZA35-2	80.1	5.5	1.5	1.5	1.5		0.121	0.001	0.001	1.5	0.001	0.001	0.001
53	PZA35-2	80.1	5.5	1.5	1.5	1.5		0.121	0.001	0.001	1.5	0.001	0.001	0.001
54	PZA38-2	80.1	5.5	1.5	1.5	1.5		0.121	0.001	0.001	1.5	0.001	0.001	0.001



## Output – Résultats et outil d'analyse

OREOS: Application2.txt - [Sample Characterization Output]

**Averaged Distribution of Mass in Phases**

**NAPL Saturation**

**Averaged Molar Fraction in NAPL (-)**

Name	Boreshole	Depth	X	Y	Z	Geo
PZA33-1	PZA33	1.5	1.5	1.5	1.5	

NAPL Saturation (%) yes 0.121 Computed Dry Matter (%) 0.843

Denovates (kg/l)

Denovates (kg/l)	Water	Gas	Porosity	NAPL	Wet
2.043	1.613	1.000	1.303E-03	0.350	4.232E-04

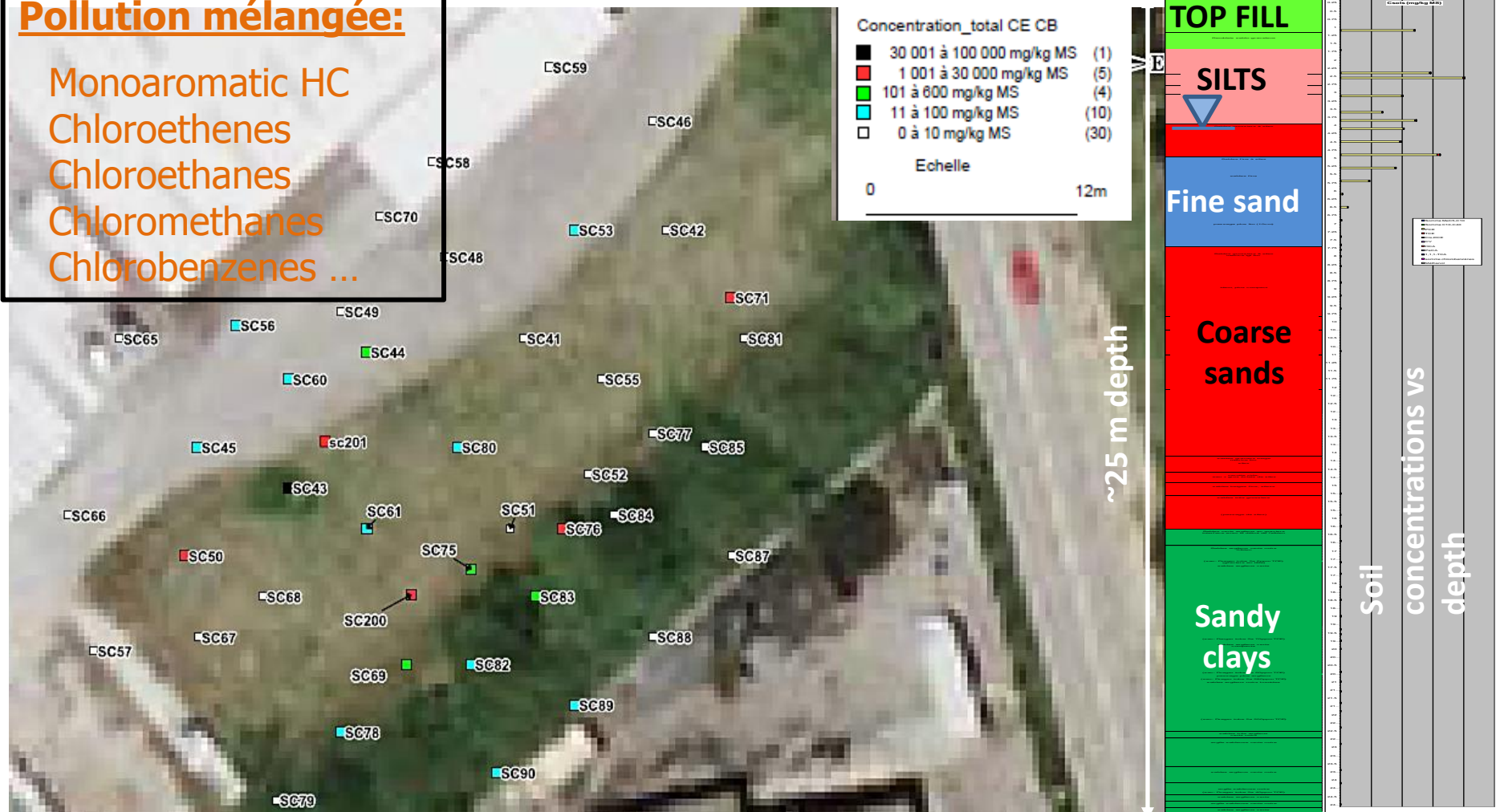
Composition

Composition	Tetrachloroed	Trichloroethyl	Sum
Total Albes (mg/kg W/S)	494.460	0.187	494.647
Mass in NAPL (mg/kg W/S)	334.008	0.060	334.068

# Exemple : caractérisation d'une source

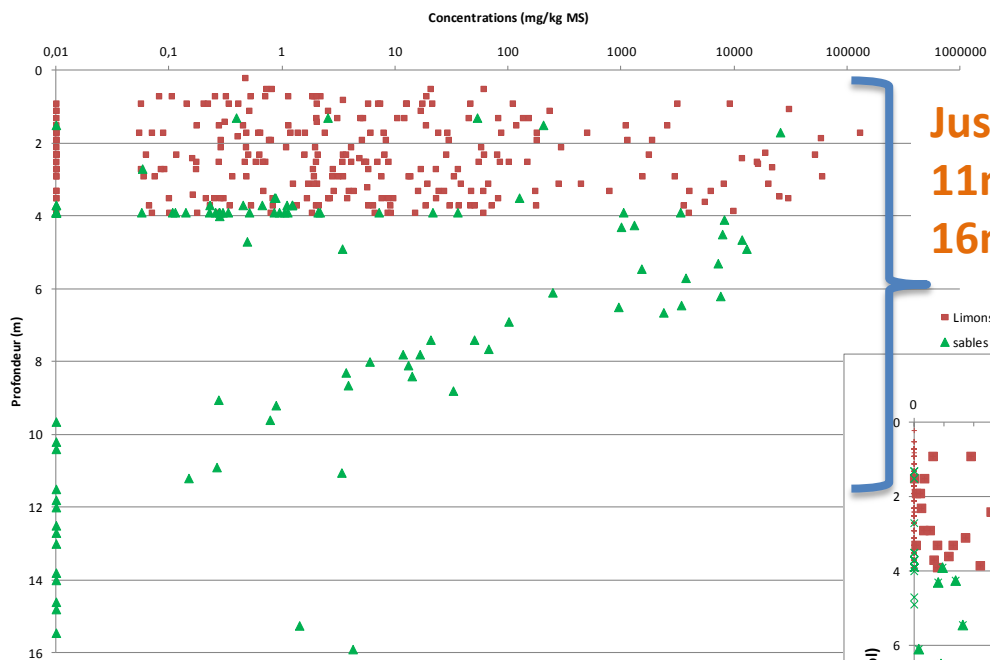
## Pollution mélangée:

Monoaromatic HC  
 Chloroethenes  
 Chloroethanes  
 Chloromethanes  
 Chlorobenzenes ...



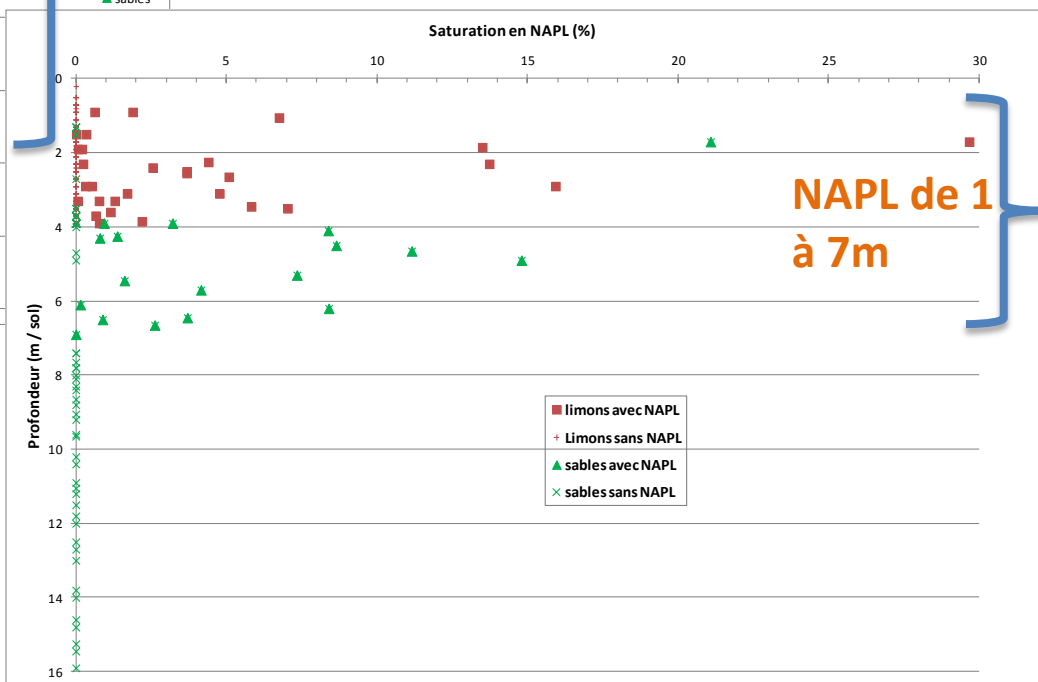
# Exemple : position du NAPL

## Concentrations dans les sols (mg/kg DW) - Mesures



Jusqu'à  
 11m voire  
 16m ??

Saturation en NAPL (%) -  
Calculée par OREOS  
avec les analyses de  
concentrations dans les sols

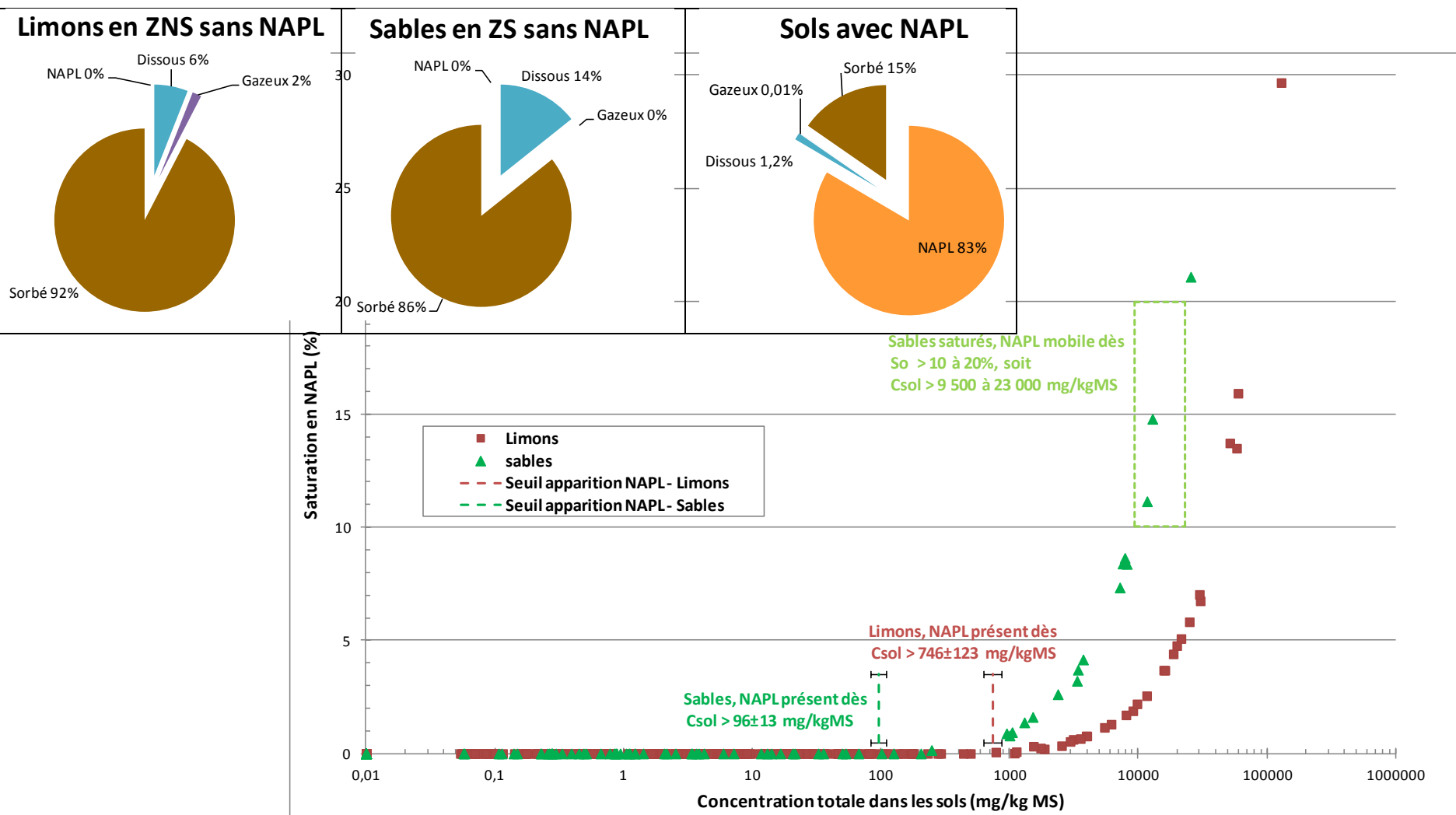


NAPL de 1  
 à 7m

- Csol de <LQ à 129,173 mg/kg MS
  - Pollution partout ? Quel seuil ?
- 63 échant. sur 338 où Csol < 0.1 ppm

- Snapl de 0 to 30%
- Source est délimitée : là où Snapl > 0, c.à.d. 48 échant.

# Exemple: seuil d'apparition du NAPL



- Seuils # 100 mg/kg MS dans les sables & # 750 mg/kg MS dans les limons
- NAPL mobile dès  $C_{tot} > 9\ 500$  mg/kg MS dans les sables

# Exemple : délimitation 3D de la source

## Remblais & limons : 1-4 m prof.

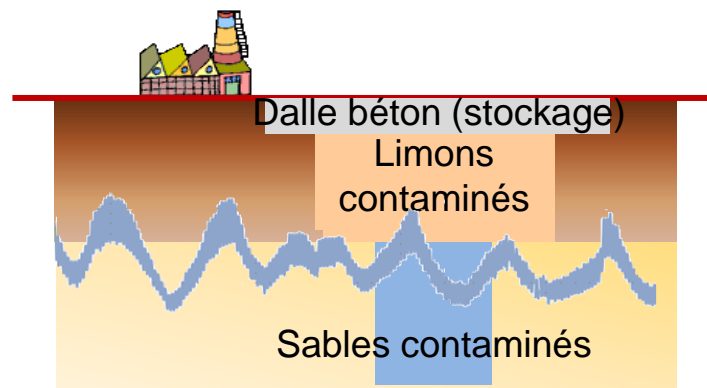


## Bilan de masse

### Remblais et limons :

- 330 à 410m<sup>2</sup> : zone polluée (1-4m de prof.)
- **Cl-VOC: 5 à 20 tonnes**
- Huile de coupe : 0.9 à 1.9 tonnes

## Sables fins : 4-7 m de prof.

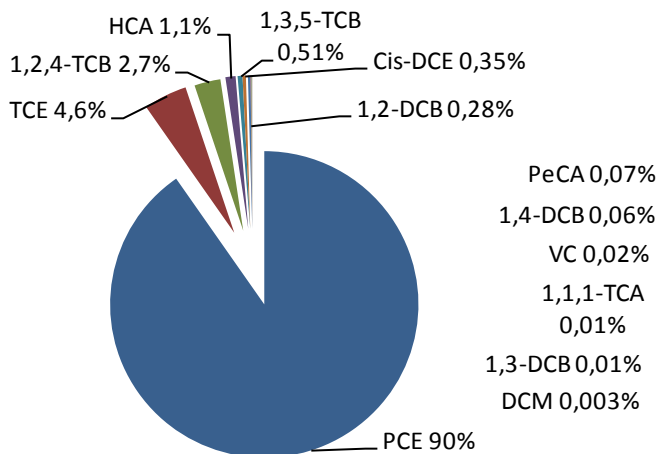




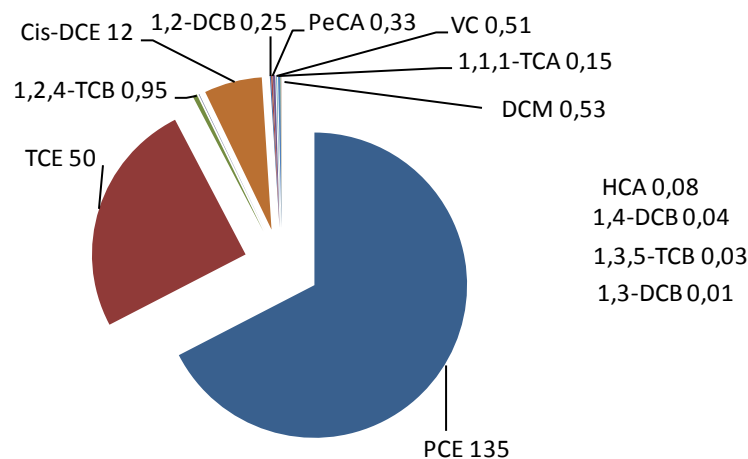
# Exemple : distribution / validation

## Composition du NAPL / concentrations d'équilibre dans l'eau en contact avec le NAPL

**Composition du NAPL (fraction molaire)**



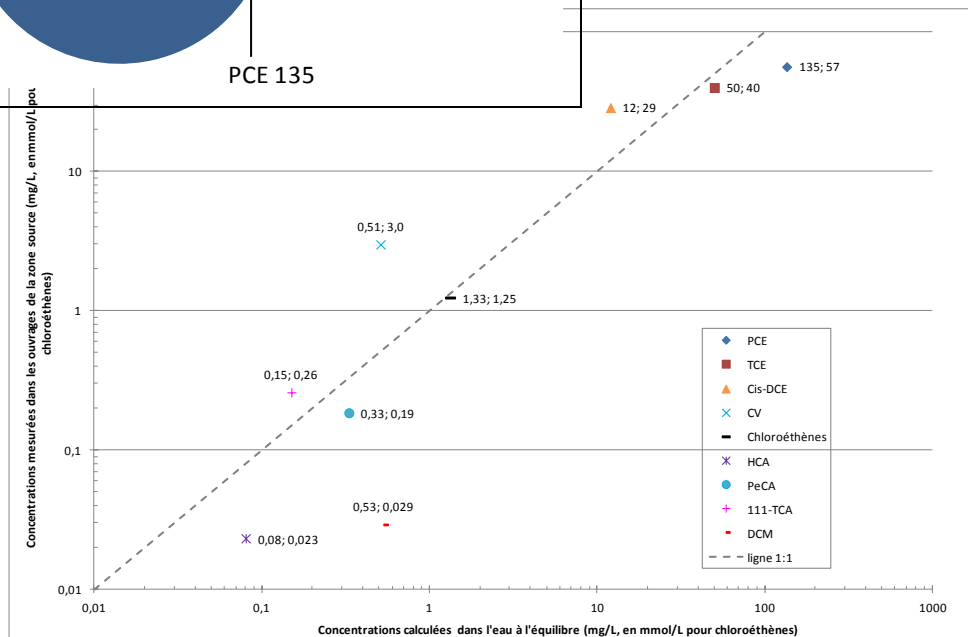
**Concentrations d'équilibre dans l'eau (mg/L)**



**Différence de prépondérance NAPL / Nappe (solubilité sélective des polluants du mélange)**

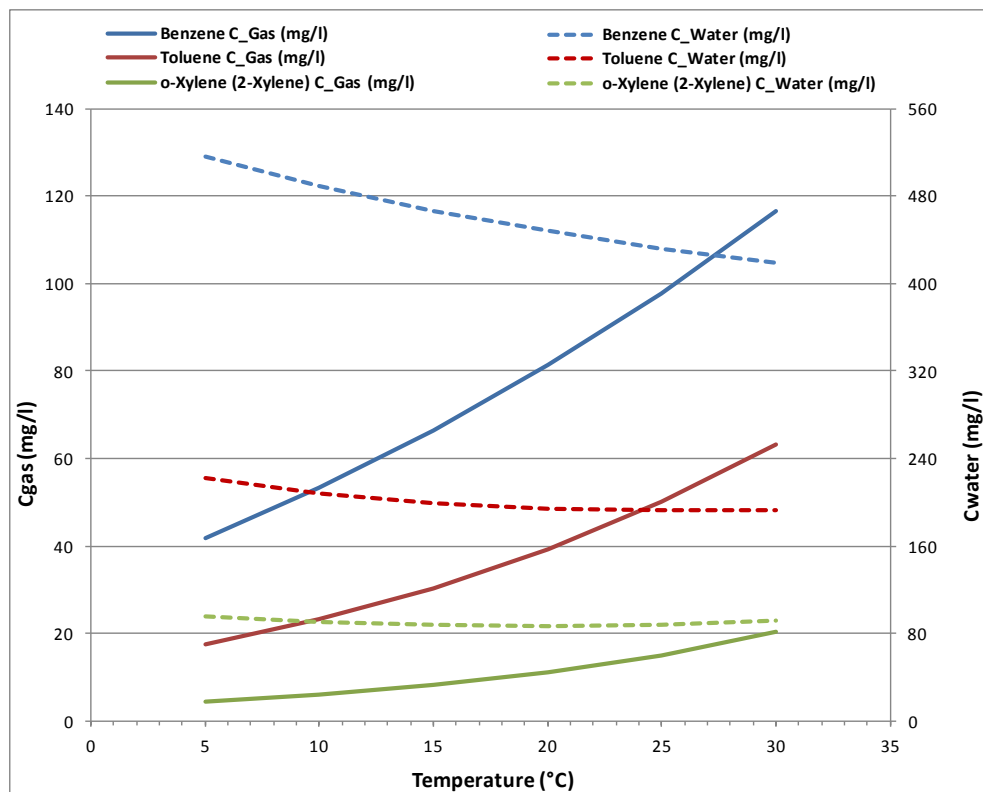
### Validation

**Dans l'eau de nappe (zone source) :  
 Bonne corrélation Conc. Calculées  
 (OREOS) / Mesurées**



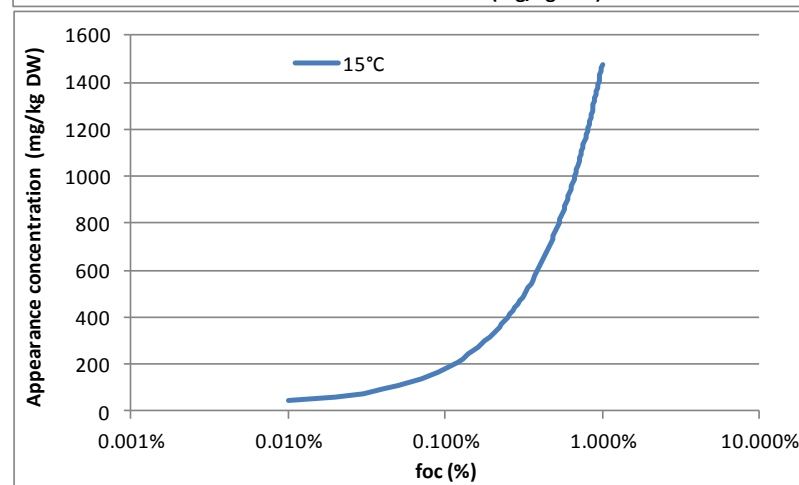
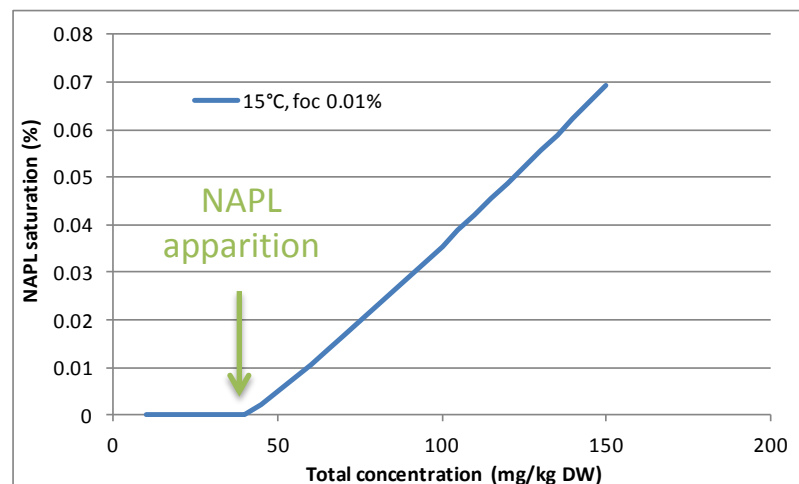
# Etude de sensibilité avec OREOS

## 1. Impact de la température sur Cw et Cgas



- Benzene / Toluene / o-Xylene = 33% each
- $\theta = 30\%$ ,  $\theta_w = 7.5\%$ ,  $foc = 0.01\%$

## 2. Apparition de NAPL influencée par la foc





**Merci de votre attention**

<http://www.oreos-software.com>

[oreos@burgeap.fr](mailto:oreos@burgeap.fr)