



# 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	<0,20
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	<0,20
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	<0,20
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	<0,20

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	0.22	<0,20
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	<0,20
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	<0,20
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	<0,20
.5	30200	146	0.84	<0,10	<0,10	<0,10	0.035	0.4							<0,20
.5	2.49	0.157	<0,15	<0,15	<0,15	<0,038	<0,10								<0,20
.5	19.1	2.13	21.1	<0,10	0.11	2.03	<0,10								<0,20
.5	11.3	0.321	0.22	<0,10	<0,10	<0,020	<0,10								<0,20
.5	<0,050	<0,050	0.24	<0,10	<0,10	0.068	<0,10								<0,20
.5	2390	106	<83,9	<0,10	<0,10	<0,021	<0,10								<0,20
.7	<0,788	<0,788	<1,58	<1,58	<1,58	<0,394	<0,10								<0,20
.7	822	252	8.22	<0,10	0.15	<0,021	4.4								<0,20
.7	<0,05	<0,05	<0,10	<0,10	<0,10	<0,02	<0,10								<0,20
.7	0.071	0.063	0.14	<0,10	<0,10	<0,021	<0,10								<0,20
.7	0.07	<0,050	<0,10	<0,10	<0,10	<0,020	<0,10								<0,20
.7	4130	3400	1580	4.52	1.41	78.3	<0,10								<0,20
.7	0.725	0.115	85.2	<0,10	<0,10	0.041	<0,10								<0,20
.7	23.4	0.334	0.17	<0,10	<0,10	<0,020	<0,10								<0,20
.7	<0,050	<0,050	<0,10	<0,10	<0,10	<0,020	<0,10								<0,20
.7	10500	175	2.17	0.56	<0,10	<0,10	<0,10								<0,20
.7	<0,050	<0,050	<0,10	<0,10	<0,10	<0,020	<0,10								<0,20

- 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

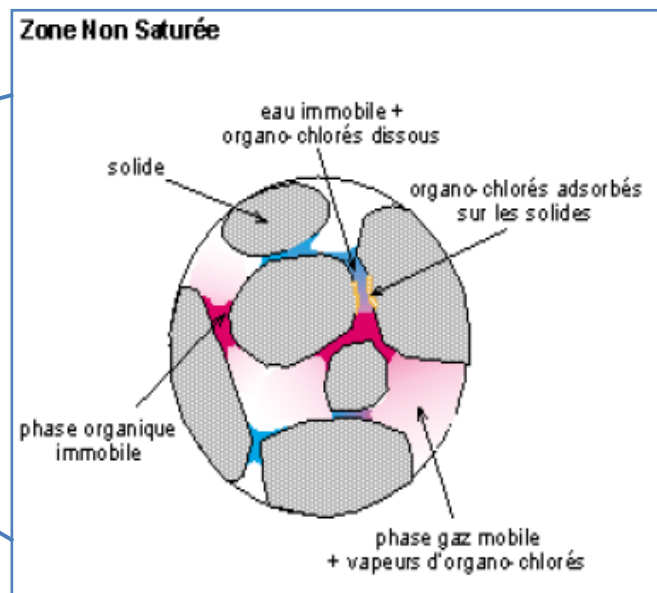
**Organo-chlorés aliphatiques**  
 Caractérisation d'une zone source dans les aquifères

CONNAÎTRE POUR AGIR  
 Guide et cahier techniques

ADMR  
 Association pour le Développement des Matériaux et des Ressources

BURGEAP, ifp, and other logos are visible at the bottom.

# 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 point (°C)	Molecular weight (g/mol)	Molecular weight (g/mol)	Liquid Density (g/cm³)	Water Solubility (mg/L)	Vapor pressure (kPa)	Reference Pv (kPa)	Reference Pv (kPa)
Benzene	80.1	78.11	78.11	0.88	1780	12.7	12.7	12.7
Chlorobenzene	90.5	112.56	112.56	1.11	149	3.3	3.3	3.3
Dichlorobenzene	180.2	147.03	147.03	1.33	15	0.4	0.4	0.4
Trichlorobenzene	204.1	181.50	181.50	1.29	1	0.05	0.05	0.05



## 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 point (°C)	Depth (m)	Coordinate X (m)	Coordinate Y (m)	Coordinate Z (m)	Geology	Porosity	Water Content (%)	Foc	Soil Density (g/cm³)	Dry Matter Content (%)	Tri-nitrobenzene	Trichloroethylene
BP212-1	BP212-1	1.5	1.5	1.5	1.5		0.35	0.35	0.003	2.45	85.5	11.2	0.107
BP212-2	BP212-2	1.5	1.5	1.5	1.5		0.35	0.35	0.003	2.45	85.5	11.2	0.107

## Run – Lancement du calcul

OREOS: Application2.txt - [Calculation]

**Calcul de la répartition basé sur :**

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

(Mariner et al., 1997)

No	Name	Residual	NAPL Sat
46	PZA34-2	0.013	0
47	PZA33-2	0.198	0
48	PZA33-2	0.198	0
49	PZA40-3	0.573	3
50	PZA70-2	0.243	3
51	PZA40-3	0.573	3
52	PZA35-2	0.243	3
53	PZA35-2	0.243	3
54	PZA38-2	0.192	1



## 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	1.5	1.5	1.5	1.5	

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

Denotates (kg/l)	Volume fractions (-)
2.043	4.232E-04

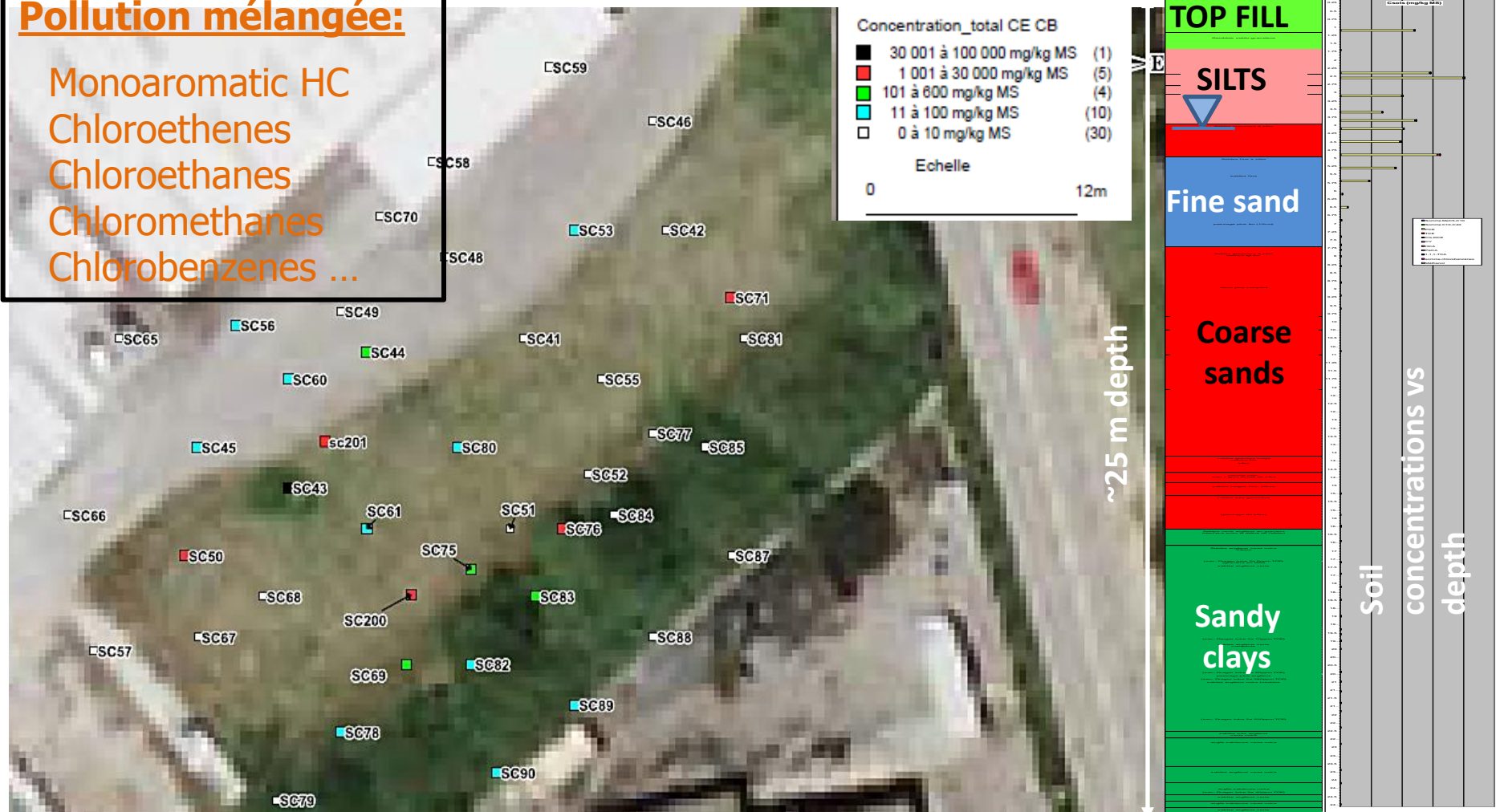
Composition	Tetrachloroed	Trichloroethyl	Sum
Total Albes (mg/kg WS)	494.460	0.187	494.647
Mass in NAPL (mg/kg WS)	334.008	0.060	334.068



# Exemple : caractérisation d'une source

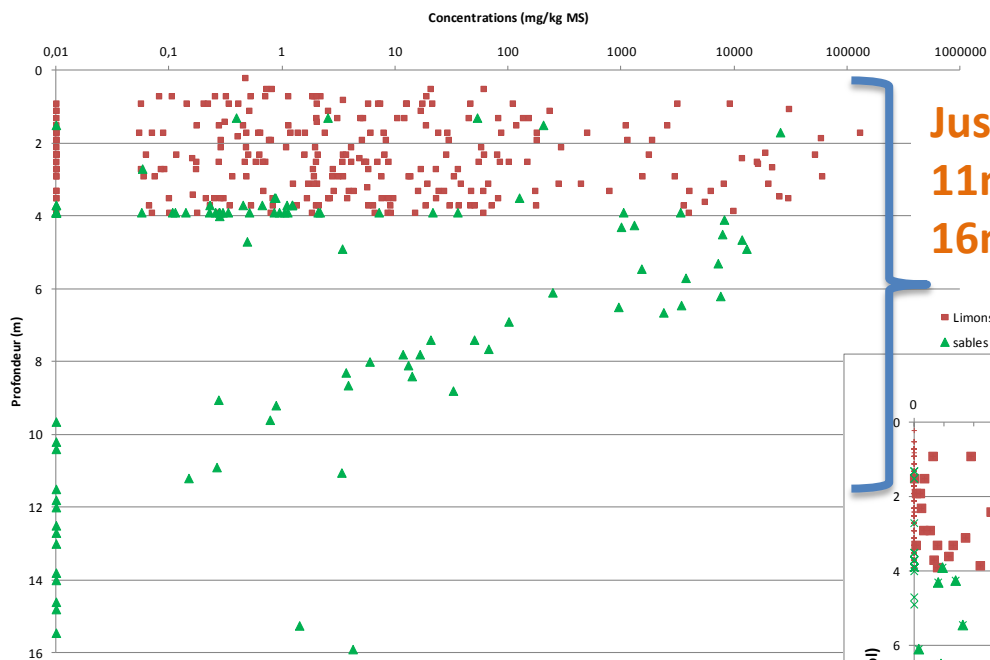
## Pollution mélangée:

Monoaromatic HC  
 Chloroethenes  
 Chloroethanes  
 Chloromethanes  
 Chlorobenzenes ...



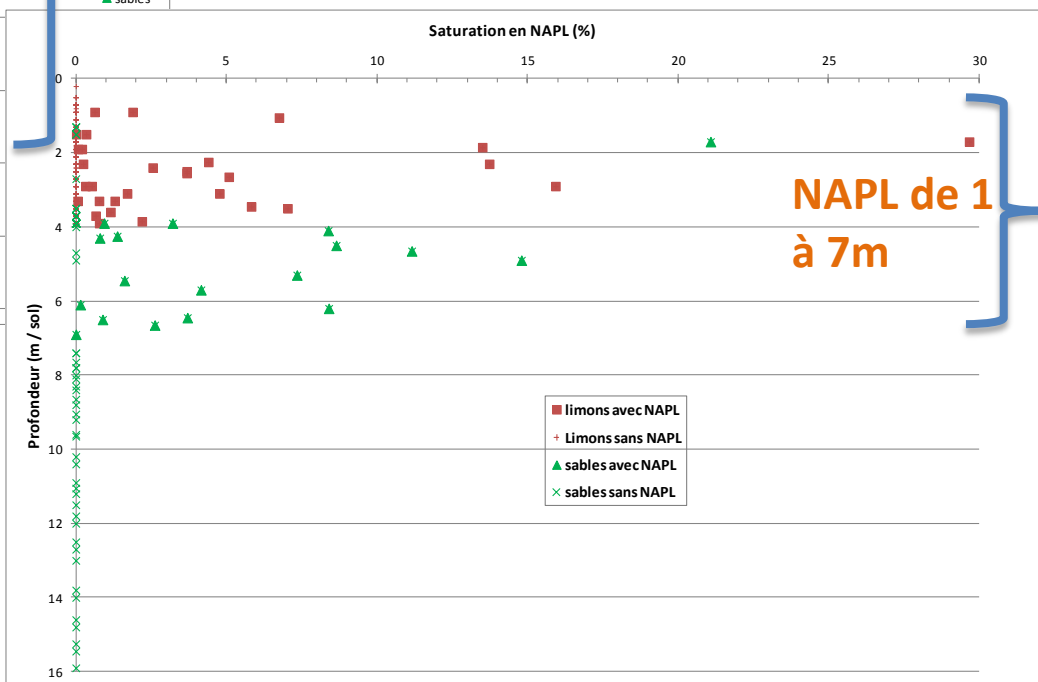
# Exemple : position du NAPL

## 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

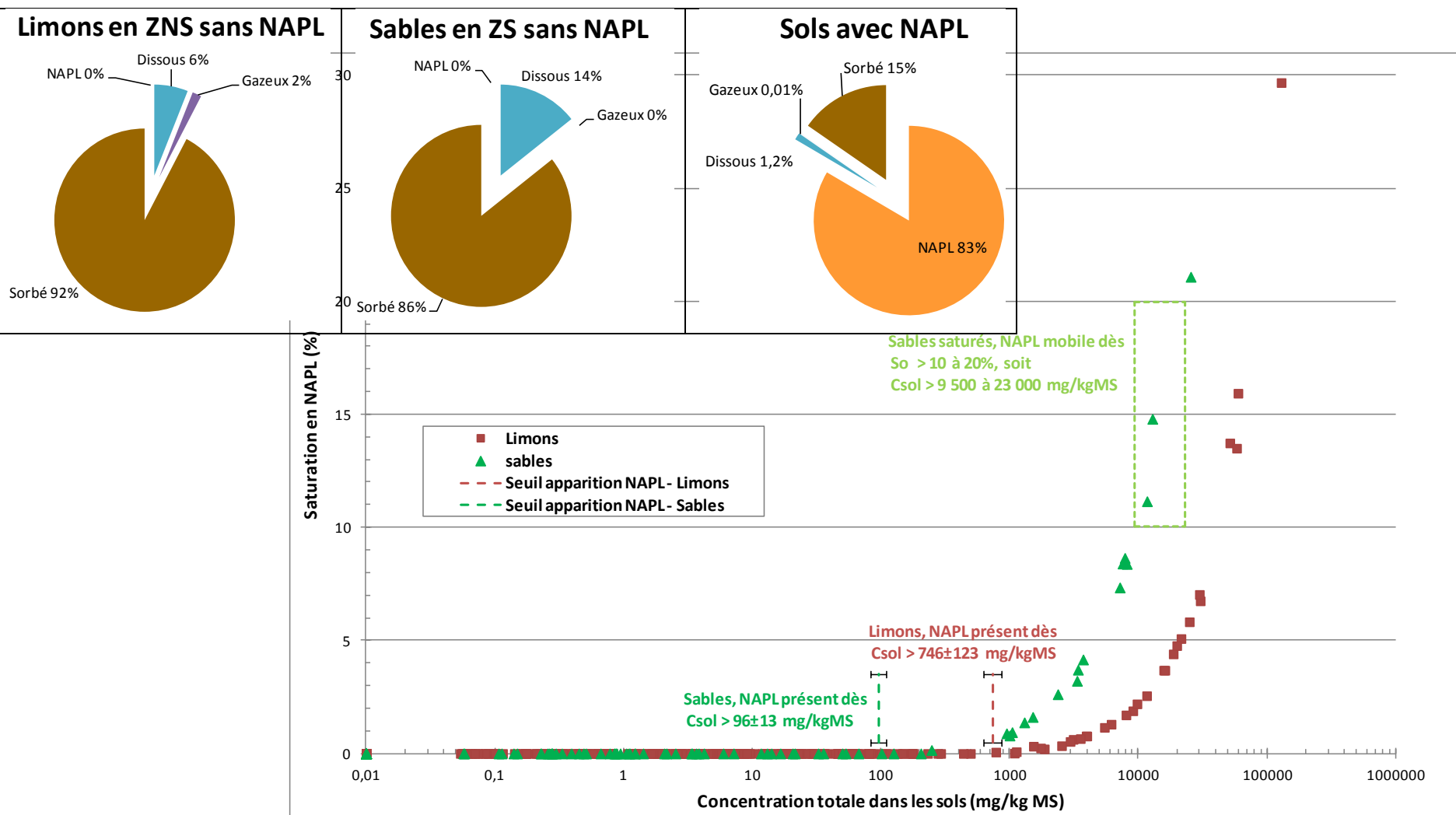
– Pollution partout ? Quel seuil ?

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.

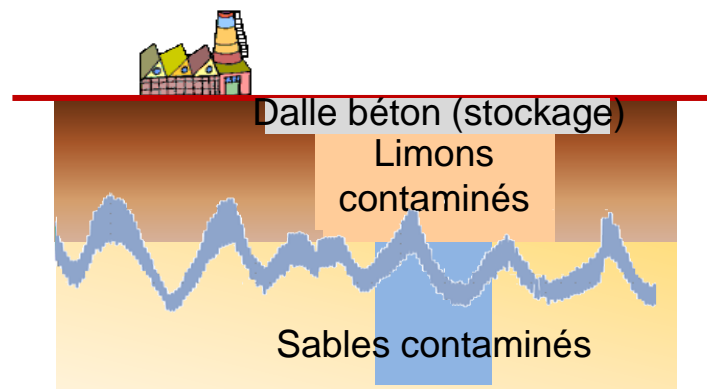


## Bilan de masse

### 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.

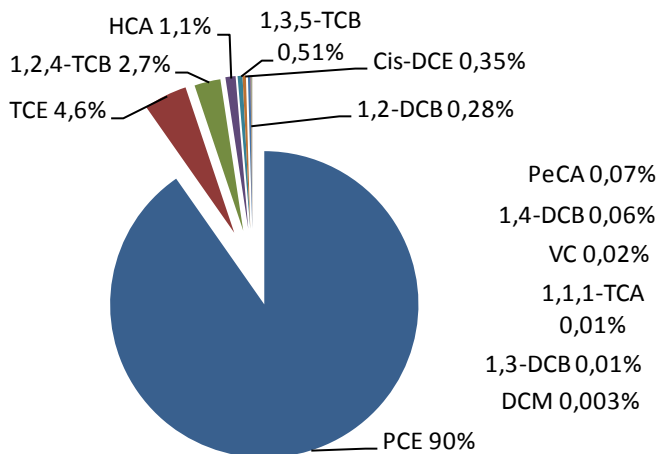




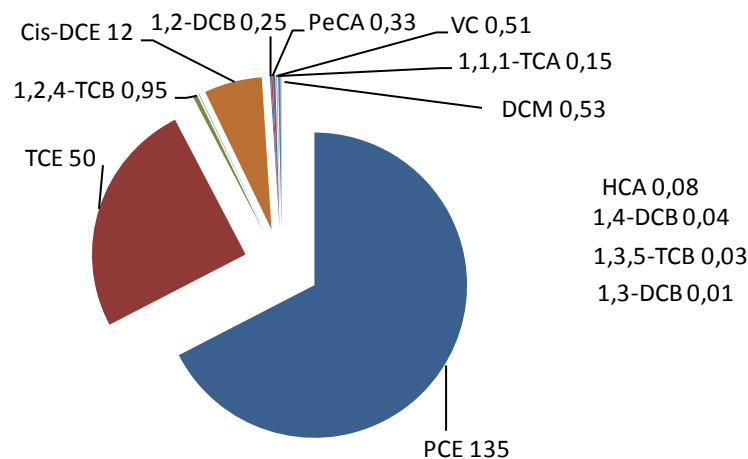
# Exemple : distribution / validation

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

**Composition du NAPL (fraction molaire)**



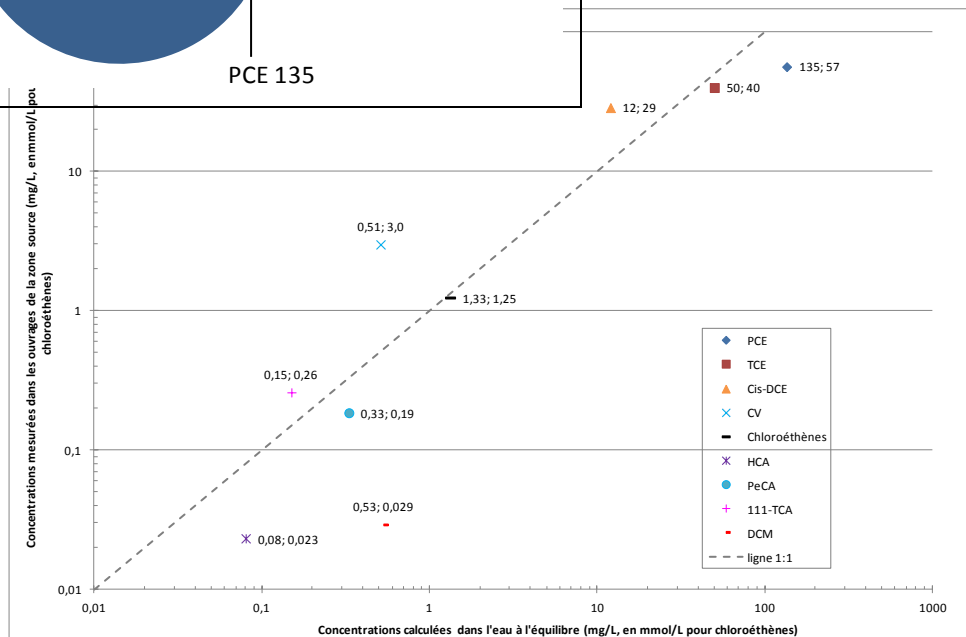
**Concentrations d'équilibre dans l'eau (mg/L)**



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

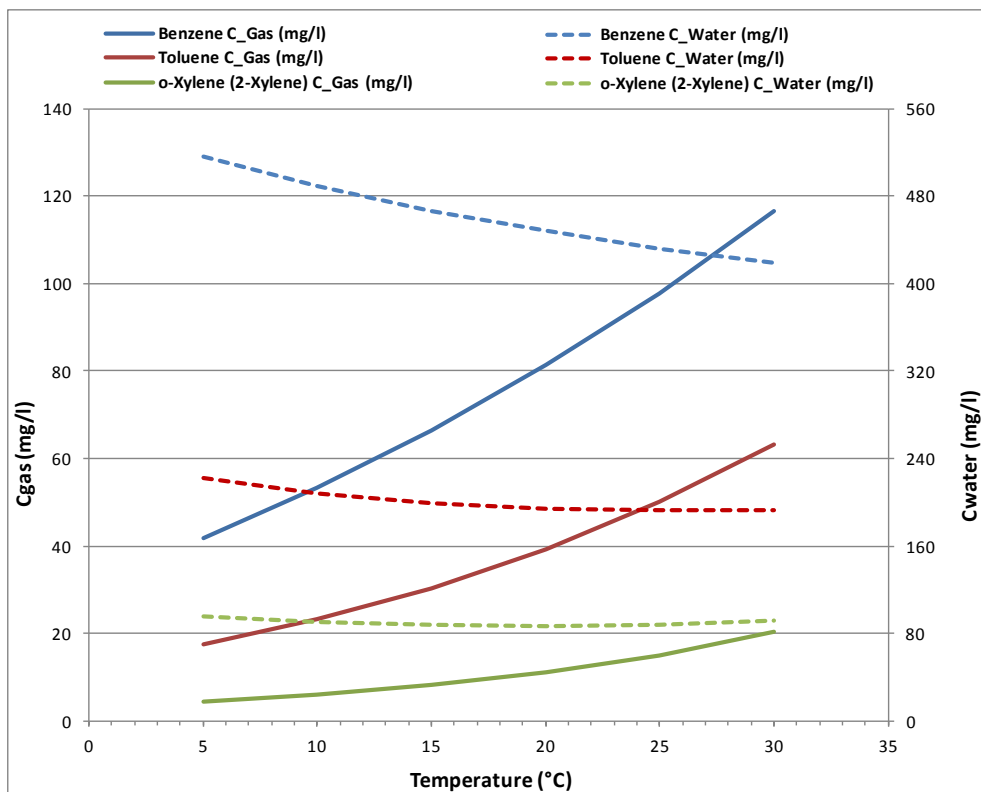
### Validation

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



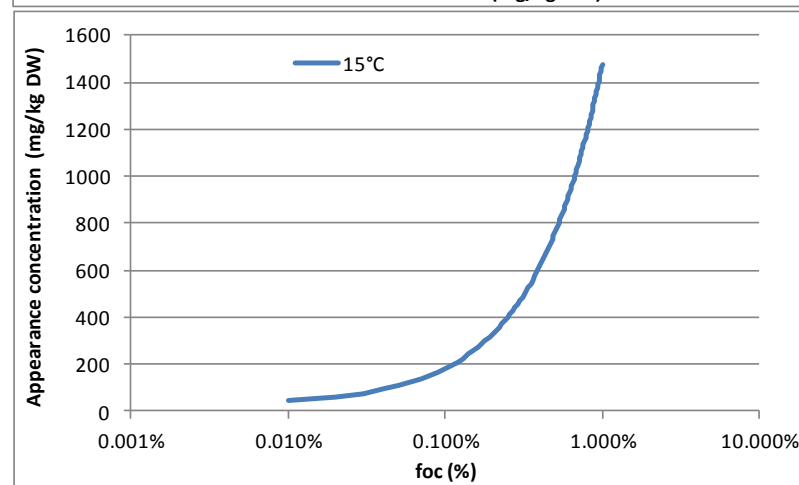
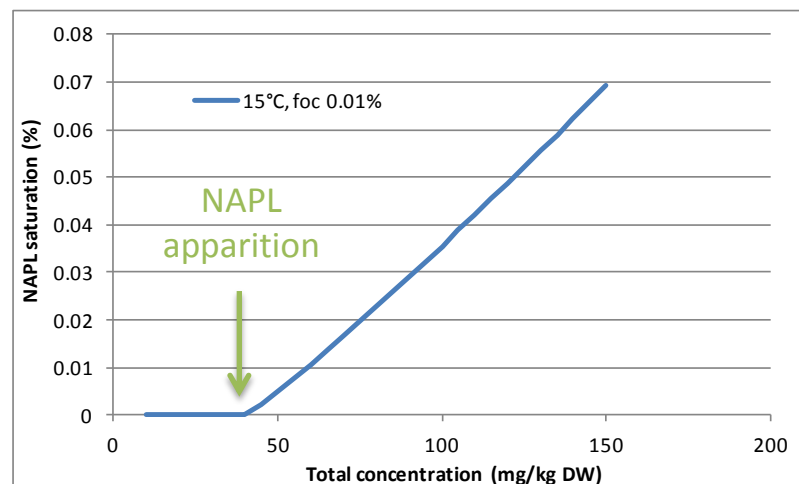
# Etude de sensibilité avec OREOS

## 1. Impact de la temperature 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)