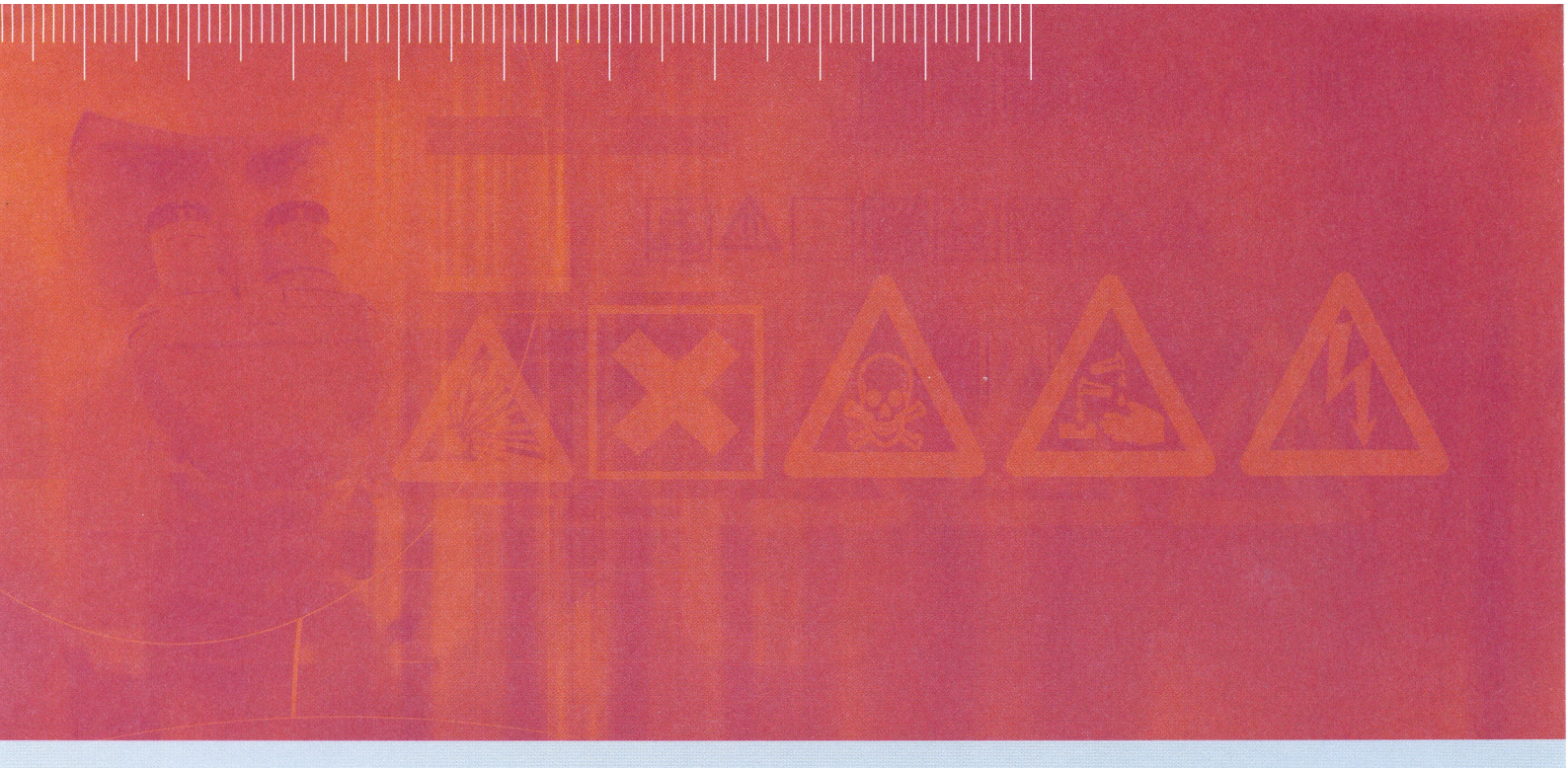


RAPPORT D'ÉTUDE 01/08/2010

N° DRC-08—94882-16675C

Jeux d'équations pour la modélisation des expositions liées à la contamination d'un sol ou aux émissions d'une installation industrielle

INERIS

maîtriser le risque
pour un développement durable

Jeux d’équations pour la modélisation des expositions liées à la contamination d’un sol ou aux émissions d’une installation industrielle

MINISTERE DE L’ECOLOGIE, DU DEVELOPPEMENT DURABLE ET DE LA MER

PRÉAMBULE

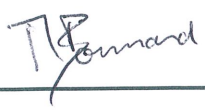
Le présent rapport a été établi sur la base des informations fournies à l'INERIS, des données (scientifiques ou techniques) disponibles et objectives et de la réglementation en vigueur.

La responsabilité de l'INERIS ne pourra être engagée si les informations qui lui ont été communiquées sont incomplètes ou erronées.

Les avis, recommandations, préconisations ou équivalent qui seraient portés par l'INERIS dans le cadre des prestations qui lui sont confiées, peuvent aider à la prise de décision. Etant donné la mission qui incombe à l'INERIS de par son décret de création, l'INERIS n'intervient pas dans la prise de décision proprement dite. La responsabilité de l'INERIS ne peut donc se substituer à celle du décideur.

Le destinataire utilisera les résultats inclus dans le présent rapport intégralement ou sinon de manière objective. Son utilisation sous forme d'extraits ou de notes de synthèse sera faite sous la seule et entière responsabilité du destinataire. Il en est de même pour toute modification qui y serait apportée.

L'INERIS dégage toute responsabilité pour chaque utilisation du rapport en dehors de la destination de la prestation.

	Rédaction	Vérification	Approbation
NOM	R. BONNARD	M. ISMERT	M. RAMEL
Qualité	Ingénieur de l'unité Impact Sanitaire et Exposition	Responsable de l'unité Impact Sanitaire et Exposition	Responsable du pôle Risques et Technologies Durables
Visa			

Ce document a été élaboré grâce à la participation de différentes personnes internes et externes à l'INERIS (voir section 3 de la partie A de ce document).

Personnes ressources de l'INERIS consultées

Nom	**Domaine de modélisation**
Gay Guillaume	Emission de polluant gazeux à partir du sol
Hazebrouck Benoît	Emission de polluant gazeux à partir du sol
Hulot Corinne	Emission de polluant gazeux à partir du sol Inhalation de poussières Absorption cutanée
Quiot Fabrice	Eaux souterraines

Relecteurs internes à l'INERIS de la première version datée du 16/04/2009

Nom	**Sections relues**
Bour Olivier	B-1.4 Eaux souterraines
De Saint-Jores Jérémy	Ensemble du document
Grammont Vincent	Ensemble du document
Hulot Corinne	Ensemble du document
Mandin Corinne	Ensemble du document

Relecteurs externes à l'INERIS de la première version datée du 16/04/2009

Nom	**Organisation**	**Sections relues**
Belleville Denis	Institut de Santé Publique du Québec (INSPQ)	A, B-2 à B-4
Beaugelin Karine	Institut de Radioprotection et de Sureté Nucléaire (IRSN)	B-1.5 Eaux superficielles
Boyer Patrick	Institut de Radioprotection et de Sureté Nucléaire (IRSN)	B-1.5 Eaux superficielles
Ciffroy Philippe	Electricité de France (EDF-R&D)	Ensemble du document
François Matthieu	Service d'Analyse de Risque (QSAR)	Ensemble du document
Garnier-Laplace Jacqueline	Institut de Radioprotection et de Sureté Nucléaire (IRSN)	A, B-3 et B-4
Gonze Marc-André	Institut de Radioprotection et de Sureté Nucléaire (IRSN)	B-1.1. Sol
Ledizes-Maurel Severin	Institut de Radioprotection et de Sureté Nucléaire (IRSN)	B-1.6 Produits végétaux
Loranger Sylvain	Service d'Analyse de Risque (QSAR)	Ensemble du document
Metivier Jean-Michel	Institut de Radioprotection et de Sureté Nucléaire (IRSN)	B-1.4 Eaux souterraines
Maurau Sylvaine	Electricité de France (EDF-R&D)	Ensemble du document
Mourlon Christophe	Institut de Radioprotection et de Sureté Nucléaire (IRSN)	B-1.2 Air extérieur B-1.3 Air intérieur B-2 Estimation des niveaux d'exposition
Nicoulaud Valérie	Institut de Radioprotection et de Sureté Nucléaire (IRSN)	B-1.1 à 1.5

Relecteurs internes à l'INERIS de la version présente

Nom	**Sections relues**
Bour Olivier	B-1.4 Eaux souterraines
Denys Sébastien	B-1.6 Produits végétaux
Floch-Barneaud Adeline	B-1.1. Sol
Gay Guillaume	B-1.2 Air extérieur B-1.3 Air intérieur
Gouzy Aurélien	B-1.5 Eaux superficielles
Malherbe Laure	B-1.1.2.2.1.1, B-1.1.2.2.1.2 et B-1.2.3

TABLE DES MATIERES

LISTE DES PERSONNES RESSOURCES CONSULTEES ET DES RELECTEURS 3

GLOSSAIRE 10

ABREVIATIONS 13

RESUME 14

PARTIE A

1. INTRODUCTION 15

2. CHAMP D'APPLICATION DU DOCUMENT 16

3. ELABORATION DU DOCUMENT 17

4. VUE D'ENSEMBLE DES APPROCHES D'ESTIMATION PRESENTEES ... 18

5. CARACTERISTIQUES DES MODULES DE CALCUL ET DES EQUATIONS 23

6. CONDITIONS D'UTILISATION DES MODULES DE CALCUL ET DES EQUATIONS PRESENTES 24

7. MODE DE PRESENTATION DES EQUATIONS 27

PARTIE B

1. ESTIMATION DES CONCENTRATIONS DANS LES MILIEUX..... 28

1.1. Milieu « sol » 28
1.1.1. Partition du polluant entre les différentes phases du sol 29
1.1.1.1. Cas où la limite de solubilité n'est pas atteinte 30
1.1.1.2. Cas où la limite de solubilité est atteinte 32
1.1.2. Concentration de polluant dans la couche de sol en surface 34
1.1.2.1. Bilan massique du polluant dans le sol en surface 35
1.1.2.2. Apports au sol de surface 36
1.1.2.2.1. Estimation des dépôts atmosphériques au sol 36
1.1.2.2.1.1. Calcul du dépôt sec 36
1.1.2.2.1.2. Calcul du dépôt humide 37
1.1.2.2.1.3. Calcul des fractions gazeuse et particulaire 38
1.1.2.2.1.4. Somme des flux atmosphériques de polluant au sol 40
1.1.2.2.2. Calcul des autres apports 40
1.1.2.2.3. Calcul de l'apport total au sol 41
1.1.2.3. Pertes à partir du sol 42
1.1.2.3.1. Pertes par lixiviation 43
1.1.2.3.2. Pertes par ruissellement 45
1.1.2.3.3. Pertes par érosion 47
1.1.2.3.3.1. Calcul de la masse de sol détachée et transportée par érosion hydrique 49
1.1.2.3.3.2. Remarques sur l'estimation des pertes par érosion 50
1.1.2.3.4. Pertes par volatilisation 52
1.1.2.3.5. Pertes par dégradation 55
1.1.2.3.6. Limites communes à la prise en compte des différents phénomènes d'atténuation et conditions d'utilisation de leurs expressions mathématiques 56
1.1.2.4. Calcul de la concentration dans la couche de sol en surface au temps t 58
1.1.2.5. Calcul de la concentration moyenne dans le sol sur la période d'exposition 60
1.1.2.5.1. Cas de paramètres constants et d'une période d'exposition se terminant avant la fin des émissions 61
1.1.2.5.2. Cas de paramètres constants et d'une période d'exposition se terminant après la période d'émission 63

1.2. Milieu « air extérieur»....66
1.2.1. Emission de polluants sous forme particulaire à la surface du sol 66
1.2.2. Emission de polluants gazeux à la surface du sol 69
1.2.2.1. Cas d'un sol contaminé 69
1.2.2.1.1. Calcul du flux de diffusion à la surface du sol 70
1.2.2.1.2. Limites associées à cette approche et modèles alternatifs 73
1.2.2.1.2.1. Prise en compte de remontées capillaires jusqu'à la surface 73
1.2.2.1.2.2. Quantité maximale de polluant émis dans l'air à partir du sol 75
1.2.2.1.2.3. Approche pour une source de polluants affleurant à la surface du sol 76
1.2.2.1.3. Calcul des coefficients de diffusion dans l'air et l'eau du sol 78
1.2.2.2. Cas d'une nappe contaminée 79
1.2.3. Dispersion atmosphérique et calcul de la concentration dans l'air à partir d'un flux à la surface du sol 83

1.3. Milieu « air intérieur » 86
1.3.1. Approche dérivée du modèle VOLASOIL 87
1.3.1.1. Flux total d'émission à travers la zone insaturée du sol 88
1.3.1.1.1. Expression des différents flux 88
1.3.1.1.2. Calcul du flux total dans le cas d'une monocouche 90
1.3.1.1.3. Calcul du flux total dans le cas multicouche 91
1.3.1.1.4. Calcul du flux d'air de convection 94
1.3.1.1.4.1. Perméabilité à l'air moyenne 95
1.3.1.1.4.2. Perméabilité à l'air d'un sol 95
1.3.1.1.4.3. Perméabilité de la dalle d'un plancher 96

1.3.1.2. Cas d'une nappe contaminée 97
1.3.1.3. Impact des hypothèses sous-tendant le modèle 100
1.3.2. Concentration de polluant gazeux dans l'air intérieur 102
1.3.2.1. Concentration de polluant gazeux dans la zone du bâtiment où a lieu l'émission 103
1.3.2.2. Concentration de polluant gazeux dans l'air du lieu de vie 104

1.4. Milieu « eaux souterraines » 107
1.4.1. Dispersion dans la nappe 107
1.4.1.1. Ecoulement des eaux souterraines 109
1.4.1.1.1. Equation de base de l'écoulement (équation de Darcy) 109
1.4.1.1.2. Approche simplifiée pour estimer la vitesse et le temps de transfert 110
1.4.1.2. Transport des polluants en phase dissoute et milieu saturé 111
1.4.1.2.1. Estimation des coefficients de dispersion effective 113
1.4.1.2.2. Estimation des coefficients de dispersion cinématique 113
1.4.1.2.3. Estimation du coefficient de diffusion moléculaire dans la nappe 114
1.4.1.3. Solution de Domenico 115
1.4.1.4. Autres modèles disponibles et démarche recommandée pour estimer le transport des polluants en milieu saturé 117
1.4.2. Apport de polluant à la nappe à partir d'une source « sol » 118

1.5. Milieu « eaux superficielles » 120
1.5.1. Cas d'une contamination par un rejet canalisé 121
1.5.1.1. Calcul de la concentration dans l'eau au point de rejet 121
1.5.1.2. Calcul de la concentration dans l'eau à l'aval du rejet 121
1.5.1.3. Estimation du facteur d'élimination 123
1.5.1.3.1. Calcul du facteur de sédimentation 124
1.5.1.3.2. Calcul du facteur de volatilisation 125
1.5.1.4. Limites de l'approche développée pour un rejet ponctuel 128
1.5.2. Cas d'une contamination diffuse par l'atmosphère et le sol 129
1.5.2.1. Apports à partir de l'atmosphère et du sol 131
1.5.2.1.1. Apports à partir de l'atmosphère 131
1.5.2.1.2. Apports à partir du sol 133
1.5.2.1.2.1. Apport par érosion 133
1.5.2.1.2.2. Apport par ruissellement 134
1.5.2.2. Estimation du facteur d'élimination 136
1.5.2.3. Limites associées au modèle 137
1.5.3. Approches à utiliser dans le cas d'un rejet ponctuel et d'une contamination diffuse concomitante 139
1.5.4. Concentration de polluant sous forme dissoute dans l'eau 142
1.5.5. Concentrations dans la couche sédimentaire superficielle 142

1.6. Produits végétaux 144
1.6.1. Concentration dans la plante liée au prélèvement direct à partir du sol 146
1.6.2. Concentration dans la plante liée au dépôt particulaire à partir de l'atmosphère 148
1.6.2.1. Estimation à partir du dépôt sur les parties consommables 149
1.6.2.1.1. Calcul du dépôt particulaire 149
1.6.2.1.2. Calcul de la concentration dans les parties consommables de la plante 150
1.6.2.2. Estimation à partir du dépôt sur la partie foliaire et du transfert vers les parties consommées 153
1.6.2.2.1. Calcul de la concentration dans la partie foliaire 153
1.6.2.2.2. Calcul des concentrations dans les autres organes de la plante 155
1.6.2.3. Comparaison des deux approches d'estimation 156
1.6.3. Concentration dans la plante liée à l'absorption de polluant sous forme gazeuse 157
1.6.3.1. Calcul basé sur le facteur de bioconcentration air-plante 157
1.6.3.2. Calcul à partir du dépôt gazeux 158
1.6.3.3. Comparaison des deux approches 159
1.6.4. Concentration dans la plante liée au dépôt de particules issues du sol 160
1.6.4.1. Utilisation de la fraction de particules attachées à la plante 161
1.6.4.2. Utilisation de la vitesse de dépôt des particules 162
1.6.4.3. Comparaison des deux approches et remarques complémentaires sur leur utilisation 163

1.6.5. Concentration dans la plante liée à l'eau d'irrigation 164
1.6.6. Remarques sur l'absence de prise en compte des phénomènes de transfert secondaires 164

1.7. Produits animaux 165
1.7.1. Animaux domestiques 166
1.7.1.1. Doses d'exposition des animaux 166
1.7.1.2. Concentrations dans les tissus animaux 167
1.7.1.2.1. Approche stationnaire 167
1.7.1.2.2. Approche dynamique 169
1.7.1.2.2.1. Concentration dans l'organisme animal 169
1.7.1.2.2.2. Concentration dans les produits excrétés (lait et œufs) 171
1.7.1.2.3. Temps nécessaire pour atteindre l'état stationnaire et estimation des coefficients de transfert 173
1.7.2. Animaux sauvages 175
1.7.2.1. Approche stationnaire 175
1.7.2.2. Approche dynamique 176

2. ESTIMATION DES NIVEAUX D'EXPOSITION 179

2.1. Exposition par inhalation 179

2.2. Exposition par ingestion de sol 181

2.3. Exposition par ingestion d'aliments 184
2.3.1. Calcul des concentrations dans les produits d'origine végétale et animale consommés par l'homme 184
2.3.2. Calcul de la dose d'exposition liée à l'ingestion d'aliments 185

2.4. Exposition du nourrisson par ingestion de lait maternel 187
2.4.1. Concentration dans le lait maternel 187
2.4.1.1. Estimation basée sur le coefficient de transfert 187
2.4.1.2. Estimation basée sur le taux de perte du polluant 188
2.4.1.2.1. Cas où la constante d'élimination dans le lait maternel est connue 188
2.4.1.2.2. Estimation selon l'approche de l'US EPA 191
2.4.1.2.2.1. Concentration dans la fraction lipidique du lait maternel 192
2.4.1.2.2.2. Estimation du facteur d'élimination 195
2.4.1.2.2.3. Concentration dans la fraction aqueuse du lait 196
2.4.1.3. Commentaires sur le calcul de la concentration dans le lait maternel 198
2.4.2. Dose d'exposition du nourrisson par ingestion de lait maternel 199

2.5. Exposition par contact cutané 201
2.5.1. Modélisation de l'absorption cutanée : généralités et principes 201
2.5.2. Absorption de polluant à partir d'une eau contaminée 202
2.5.2.1. Cas des substances organiques 204
2.5.2.2. Cas des substances inorganiques 207
2.5.2.3. Conditions d'application et incertitudes liées au modèle 208
2.5.3. Absorption de polluant à partir d'un sol contaminé 210
2.5.3.1. Estimation à partir du taux d'absorption 210
2.5.3.2. Estimation par le calcul du flux de transfert 211
2.5.3.2.1. Méthode de l'US EPA (1992) 212
2.5.3.2.2. Méthode de McKone et al. 215
2.5.3.2.2.1. Estimation du coefficient de transfert de masse à travers la couche de sol et la couche limite d'air 217
2.5.3.2.2.2. Estimation du coefficient de transfert de masse à travers la couche de sol et la peau 219
2.5.3.2.2.3. Estimation du coefficient de diffusion multiphasique dans la couche de sol 220
2.5.3.2.2.4. Estimation du coefficient de diffusion dans la couche cornée (D_{cc}) et du coefficient de partage couche-cornée-sol (K_{cc_sol}) 222
2.5.3.2.2.5. Longueur de la zone de diffusion dans la couche de sol 226

2.5.3.2.3. Avantages et limites des approches basées sur le flux de transfert 226
2.5.4. Doses d'exposition liées au contact cutané 228
2.5.4.1. Calcul de la dose d'exposition externe au contact de la peau 228
2.5.4.2. Calcul de la dose absorbée par contact cutané 229

3. ESTIMATION DES NIVEAUX DE RISQUE 231

3.1. Calcul du niveau de risque pour les effets à seuil 232

3.2. Calcul du niveau de risque pour les effets sans seuil 233

4. DISTINCTION ENTRE CONCENTRATIONS, DOSES, RISQUES ATTRIBUABLES A UNE OU PLUSIEURS SOURCES DE CONTAMINATION ET CONCENTRATIONS, DOSES ET RISQUES TOTAUX 235

5. BIBLIOGRAPHIE 237

ANNEXE : MATRICE D'INTERACTIONS ENTRE LES DIFFERENTS MILIEUX (ENSEMBLE DES MECANISMES DE TRANSFERT ET VOIES D'EXPOSITION JUSQU'A L'HOMME 247

GLOSSAIRE

ANALYSE DES RISQUES RESIDUELS (ARR) : Evaluation quantitative des risques sanitaires réalisée sur des expositions résiduelles, c'est-à-dire sur les expositions attendues après application du plan de gestion.

Extrait de la circulaire du 8 Février 2007 sur les installations classées (Prévention de la pollution des sols - Gestion des sols pollués) : « Lorsque les caractéristiques du plan de gestion ne permettent pas de supprimer toutes les possibilités de contact entre les pollutions et les personnes, les risques sanitaires potentiels liés aux expositions résiduelles doivent être évalués et appréciés. L'analyse des risques résiduels (ARR) est l'outil dédié à cet effet.».

ATTENUATION NATURELLE : Terme regroupant tous les processus faisant intervenir des phénomènes de dispersion, dilution, adsorption, dégradation chimique ou biologique ayant pour effet de réduire la masse, le volume, la concentration, la disponibilité ou la toxicité d'une pollution.

BIOACCUMULATION : Processus d'accumulation d'une substance dans un organisme vivant, via la chaîne alimentaire ou un écosystème. Processus d'échange entre un être vivant et son milieu, entraînant des concentrations plus élevées à l'intérieur de cet organisme que dans son environnement ou sa nourriture.

BIOAMPLIFICATION : Processus d'accumulation successive d'une substance de bas en haut d'une pyramide alimentaire.

BIOCONCENTRATION : Processus d'accumulation d'une substance dans un organisme vivant, par captation directe à partir du milieu environnant. Exemple : une substance présente dans l'eau peut être bioconcentrée par les poissons par les branchies et l'épiderme

BIODISPONIBILITE : Aptitude d'une substance présente dans l'environnement à être prélevée et absorbée par un organisme vivant et disponibilité pour interagir avec les processus métaboliques de cet organisme.

BRUIT DE FOND : Concentration représentative ambiante en un élément, en un composé, ou en une substance dans un milieu donné, d'un territoire donné. Elle tient compte des concentrations naturelles (fond pédogéochimique naturel) et de celles provenant éventuellement de sources d'origine anthropique diffuses (comme les pollutions diffuses par engrais ou pesticides liées aux pratiques agricoles usuelles, trafic routier). Il peut aussi être défini comme la concentration habituelle dans un milieu donné, en l'absence de contamination locale.

DOSE ADMINISTREE : Quantité de substance apportée à un organisme et en contact avec les barrières de cet organisme (parois intestinales, alvéoles pulmonaires, peau). Elle s'exprime généralement en masse de substance par unité de masse corporelle de l'organisme et de temps.

DOSE ABSORBEE : Quantité de substance ayant pénétré les barrières de l'organisme suite à un contact. La dose absorbée correspond à la dose interne. Elle peut être estimée comme le produit de la dose externe par le taux d'absorption de la substance. Elle s'exprime généralement en masse de substance par unité de masse corporelle de l'organisme et par unité de temps.

DOSE EXTERNE : Quantité de substance en contact avec les barrières de l'organisme (parois intestinales, alvéoles pulmonaires, peau). Elle s'exprime généralement en masse de substance par unité de masse corporelle et par unité de temps.

DOSE INTERNE : cf. dose absorbée.

DOSE JOURNALIERE D'EXPOSITION : Dose (interne ou externe) de substance reçue par jour par l'organisme rapportée à la masse corporelle de l'organisme.

FACTEUR DE BIOCONCENTRATION : Dans ce document, cette expression désigne le rapport de la concentration dans le tissu animal sur la concentration dans le milieu d'exposition de l'animal (eau dans le cas d'organismes aquatiques, aliments dans le cas d'autres animaux).

FACTEUR DE BIODISPONIBILITE : Fraction de la dose externe d'une substance qui pénètre dans l'organisme et est disponible pour interagir avec les processus métaboliques de cet organisme.

FACTEUR DE BIODISPONIBILITE RELATIVE : Rapport du facteur de biodisponibilité d'une substance présente sur une matrice particulière sur le facteur de biodisponibilité de cette même substance sous une forme de référence. Exemple : le facteur de biodisponibilité relative du plomb pour le sol est généralement calculé comme le rapport du facteur de biodisponibilité du plomb ingéré à partir d'une matrice sol sur le facteur de biodisponibilité du plomb ingéré sous forme d'acétate de plomb.

FACTEUR DE BIOTRANSFERT: Dans ce document, cette expression désigne le rapport de la concentration dans le tissu animal sur la dose journalière d'exposition externe (ou dose journalière d'exposition administrée à l'animal).

EXPOSITION AIGUË : Exposition de courte durée, allant de quelques secondes à quelques jours.

EXPOSITION CHRONIQUE : Exposition persistante, continue ou discontinue, se produisant sur une longue période, allant d'une année à la vie entière.

EXPOSITION SUBCHRONIQUE : Exposition de durée intermédiaire entre une exposition aiguë et une exposition chronique, allant de quelques jours à un an.

FOND GÉOCHIMIQUE: Concentration naturelle en un élément, en un composé ou en une substance dans un milieu donné, en l'absence de tous apports extérieurs spécifiques, tels que ceux dus à l'activité humaine.

MILIEUX ENVIRONNEMENTAUX : Les milieux environnementaux désignent l'air, les eaux souterraines, les eaux superficielles, les sols, les sédiments.

MILIEUX D'EXPOSITION : Les milieux d'exposition désignent précisément les milieux au contact desquels se trouve la cible étudiée. Dans le cas des populations humaines, il peut s'agir par exemple de l'air à l'intérieur des habitations, de l'eau du robinet, de la couche de sol superficiel, mais aussi des aliments.

MODE D'EXPOSITION : Descriptif des conditions d'exposition à une substance toxique. Le mode d'exposition peut être direct (ingestion de sols et de poussières à partir d'une source sol, inhalation de gaz et de poussières provenant d'une source atmosphérique) ou indirect (ingestion de produits de consommation susceptibles d'être eux-mêmes pollués, comme les produits du jardin).

QUANTITATIVE STRUCTURE ACTIVITY RELATIONSHIP (QSAR) : Relation statistique établie pour un ensemble de substances ou de composés et servant à estimer la valeur d'un paramètre de cette substance ou de ce composé à partir de sa structure ou d'une ou plusieurs de ses caractéristiques physico-chimiques (exemple : relation donnant le facteur de bioconcentration d'une substance dans le poisson en fonction du coefficient de partage octanol-eau de cette substance.

RISQUES RESIDUELS : Risques résultant d'une exposition à des concentrations résiduelles (cf. analyse des risques résiduels)

SCHEMA CONCEPTUEL D'EXPOSITION : Représentation et/ou description synthétique du site, de son environnement, de sa population comprenant toutes les informations recueillies lors des phases d'enquête et de diagnostic, et permettant une présentation claire et simplifiée de la problématique rencontrée sur le site étudié. Le schéma conceptuel d'exposition facilite la compréhension des mécanismes conduisant à l'évaluation des risques, en particulier l'identification des relations entre les sources de pollution, les différents milieux de transfert et d'exposition et les populations riveraines.

TRANSFERT : Migration de substances sous quelque forme que ce soit (dissoute, liquide, gazeuse) dans un ou plusieurs milieux (ex. : à travers ou à la surface d'un sol, causée par l'eau, l'air et les activités humaines, ou bien par les organismes du sol).

VOIE D'ADMINISTRATION : Voie par laquelle une substance pénètre dans l'organisme. Il existe trois voies d'administration différentes : l'inhalation, l'ingestion et le contact cutané qui peuvent être différenciées en fonction du milieu de transfert concerné :

- inhalation d'une substance sous forme gazeuse ou adsorbée sur des poussières, ou de vapeur d'eau contaminée,
- ingestion directe de sol, d'aliments (végétaux cultivés sur le site, animaux élevés sur le site), d'eau contaminée,
- absorption cutanée par contact avec un sol, des poussières et /ou de l'eau (bain, douche, activités nautiques, ...) contaminés.

VOIE D'EXPOSITION : Voie de passage d'une substance de la source vers une cible. Une voie d'exposition inclut une source, un point d'exposition et une voie d'administration. Si le point d'exposition diffère de la source, il existe également un mécanisme de propagation et un compartiment intermédiaire où le polluant est transporté (exemple : ingestion de légumes autoproduits).

ABREVIATIONS

2,3,7,8 TCDD : 2,3,7,8 TétraChloroDibenzoDioxine

BaP : Benzo(a)Pyrène

ERS : Evaluation des Risques Sanitaires

HAP : Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques

ICPE : Installation Classée pour la Protection de l'Environnement

PCB : PolyChloroBiphényls

PCDD : PolyChloroDibenzoDioxines

PCDF : PolyChloroDibenzoFurannes

QSAR : Quantitative Structure Activity Relationship

RESUME

L'évaluation des risques sanitaires liés à l'aménagement d'un site pollué ou à l'implantation d'une installation industrielle nécessite de modéliser les niveaux d'exposition de la population à partir des différentes sources/milieux de l'environnement, via plusieurs modes de transfert et voies d'administration des polluants.

Ce document présente les approches de calcul utilisées par l'INERIS dans le cadre de l'évaluation des expositions liées à un site pollué ou à une installation industrielle.

Il est divisé en deux parties :

- la première (partie A) indique le domaine d'application du document, offre une description générale des approches de modélisation présentées et rappelle les principes sur lesquels un évaluateur doit se baser pour sélectionner l'approche adéquate ;
- la seconde (partie B) donne, pour chaque type de transfert et chaque voie d'exposition, le modèle conceptuel, les équations et les conditions d'utilisation de ces équations (hypothèses, limites, incertitudes).

  Les voies traitées dans ce manuel concernent l'inhalation, l'ingestion et le contact cutané. Les milieux environnementaux et d'exposition considérés sont les sols, la nappe, les eaux superficielles, l'air extérieur, l'air intérieur, les végétaux, les produits animaux et le lait maternel.

Ce document vise à fournir des approches de calculs pratiques et relativement simples permettant de répondre aux questions classiques de l'évaluation des risques. Ces approches doivent être sélectionnées et utilisées en fonction du schéma conceptuel défini et plus généralement du contexte de chaque étude.

Ce document ne décrit pas en revanche un modèle intégré avec des modules de calcul couplés, permettant de représenter le bilan massique d'un polluant dans l'environnement.

L'INERIS ne prétend pas non plus fournir un état de l'art en matière de modélisation. Au fil des travaux, les approches de modélisation pourront évoluer et des mises à jour de ce manuel pourront être réalisées. Il sera accompagné par la suite de documents complémentaires sur la définition des paramètres utilisés dans les équations.

Grâce à ce manuel décrivant en détail l'origine des équations utilisées, les hypothèses sur lesquelles elles se basent et les limites associées, l'INERIS souhaite contribuer au développement d'une expertise de meilleure qualité en :

- favorisant l'harmonisation des pratiques,
- facilitant le travail des évaluateurs de risques,
- améliorant la transparence des études.

PARTIE A : OBJECTIF DU DOCUMENT ET PRESENTATION GENERALE DES MODELES

1. INTRODUCTION

L'évaluation des risques sanitaires liés à l'aménagement d'un site pollué ou à l'implantation d'une installation industrielle nécessite de modéliser les niveaux d'exposition de la population à partir des différentes sources/milieux de l'environnement, via plusieurs modes de transfert et voies d'administration des polluants.

De nombreux modèles multimédia d'exposition existent, notamment dans le domaine des sols pollués pour évaluer ces niveaux d'exposition et les risques sanitaires associés. L'INERIS a analysé un certain nombre de ces outils de calculs (INERIS, 2001, 2002a,b,c, 2004a, 2007a). Pourtant, aucun de ces modèles n'est apparu complet ou suffisamment adapté pour répondre aux besoins et aux spécificités relatives à chaque analyse de risque. L'INERIS a donc développé ses propres outils à partir des équations et des données disponibles dans la littérature pour mener à bien ses études.

Au travers des travaux réalisés depuis quinze ans, à l'INERIS, en évaluation des risques, certains aspects de la modélisation des transferts et des expositions ont fait l'objet d'analyses ou de recherches plus poussées que d'autres. Au cours des années, des méthodes de calcul parfois différentes ont été développées selon le domaine d'étude (Evaluation Détaillée des Risques pour les sols pollués, évaluation des risques sanitaires pour les Installations Classées Pour l'Environnement, voire évaluation de risques liées aux substances nouvelles ou existantes).

Ce document vise à synthétiser les résultats de ces travaux et à présenter les approches de calcul retenues dans le cadre du processus d'évaluation intégrée des expositions liées à un site pollué ou à une installation industrielle, pour :

- favoriser l'harmonisation des pratiques,
- faciliter le travail des évaluateurs de risques,
- contribuer à une plus grande transparence des études.

Il ne prétend pas constituer un état de l'art en matière de modélisation, mais représente l'état des pratiques de l'INERIS dans ce domaine. Ainsi, au fil des travaux et des acquis des équipes, ces approches de modélisation pourront, dans l'avenir, évoluer et des mises à jour de ce document pourront être réalisées.

Ce document est divisé en deux parties :

- la première (partie A) présente les objectifs et le domaine d'application du document, ainsi qu'une description générale des modèles de calcul développés dans la seconde partie ;
- cette seconde partie (partie B) donne, pour chaque type de transfert et chaque voie d'exposition, le modèle conceptuel, les équations et les conditions d'utilisation de ces équations (hypothèses, limites, incertitudes).

Ce document sera accompagné par la suite de guides et de notes sur la définition des paramètres utilisés dans les équations. Certains paramètres peuvent jouer un rôle très sensible dans les modèles utilisés (Bonnard, 1997, rapports INERIS 2005a, 2006). Les guides présenteront les éléments importants à prendre en compte dans la définition des valeurs et pourront proposer une méthode pour choisir et attribuer des valeurs aux paramètres en fonction de la sensibilité du modèle à ces paramètres, des objectifs de l'étude et de la qualité des données disponibles.

2. CHAMP D'APPLICATION DU DOCUMENT

Les approches de modélisation regroupées dans ce document visent à estimer les niveaux d'exposition et les niveaux de risque d'une population, liés à une source de pollution industrielle ou à un sol contaminé, à une échelle locale.

Sur le plan réglementaire, la circulaire du 8 Février 2007 sur les installations classées (Prévention de la pollution des sols - Gestion des sols pollués) et la circulaire 15 mai 2007 (BPSPR/2007 – 128/VD) présentent l'évaluation des risques sanitaires comme « un outil parmi d'autres permettant la gestion des risques chroniques ». Elles indiquent que l'évaluation des risques sanitaires a pour objectif de valider le plan de gestion d'un site contaminé par une analyse des risques résiduels. Dans le cadre des études d'impact des installations classées pour l'Environnement (ICPE), l'évaluation des risques est présentée comme un outil devant permettre de hiérarchiser les priorités d'action, de valider des choix de procédés et d'orienter le plan de surveillance.

Les approches de modélisation présentées dans ce document peuvent être utilisées pour répondre à ces objectifs.

Certaines de ces approches de calcul peuvent aussi servir dans le cadre de travaux particuliers, comme la confrontation de résultats de mesure avec ceux de la modélisation ou l'identification d'une source de contamination. Toutefois, pour de telles applications, le choix des hypothèses doit être guidé par un souci de réalisme et le degré de précision des calculs doit normalement être supérieur à celui utilisé pour vérifier que les risques résiduels après réhabilitation d'un site sont acceptables. Des approches moins majorantes, plus complètes (prise en compte par exemple des phénomènes de pertes subis par un milieu) et plus complexes peuvent ainsi se révéler nécessaires.

Les équations développées dans la partie B sont présentées sans référence à une durée d'exposition, afin de leur conserver un caractère générique et permettre leur application pour estimer les niveaux d'exposition liés à des expositions aiguës[1] (de quelques secondes à quelques jours), subchroniques[1] (de quelques jours à quelques années) ou chroniques[1] (d'une année à la vie entière).

[1] Définition donnée par l'US EPA, 1989

En revanche, les méthodes d'estimation de l'exposition des travailleurs chargés de la dépollution d'un site ou des personnes travaillant dans une installation en fonctionnement et en contact direct avec les polluants ne sont pas traitées dans ce document. La dispersion des rejets accidentels (tels que les fuites à la surface d'un sol ou dans un sol), n'est pas non plus traitée.

3. ELABORATION DU DOCUMENT

L'élaboration de ce document repose sur cinq phases :

- une phase d'interviews d'ingénieurs, appartenant à différentes équipes de la Direction des Risques Chroniques, pratiquant ou ayant pratiqué des travaux de modélisation de l'exposition à partir d'une source de contamination environnementale. Les équipes travaillant sur la modélisation des concentrations de pesticides dans l'environnement ont aussi été consultées. En revanche, les travaux liés à l'exposition des consommateurs n'ont pas été considérés.

  A ce stade, les outils de calcul pertinents ont été listés ;

- une phase de rédaction où l'ensemble des équations de calcul correspondantes a été décrit. A cette occasion, certains points ont pu être approfondis, afin de préciser les limites d'utilisation de ces modèles ou bien pour généraliser leur formulation, et ainsi les rendre applicables dans d'autres contextes (par exemple application d'une équation développée pour des substances organiques à des substances inorganiques) ;

- une phase de revue interne ;

- une phase de revue par des organismes externes ;

- une phase de correction du document et de réponses aux commentaires apportées par les relecteurs externes. Ce travail a donné lieu à la rédaction d'un second rapport intitulé « *Commentaires des relecteurs du rapport « Jeux d'équations pour la modélisation des expositions liées à la contamination d'un sol ou aux émissions d'une installation industrielle », version datée du 16/04/09 et réponses apportées par l'INERIS »* et référencé DRC-10-109450-02656 ;

  Au terme de ce processus, les deux documents ont été soumis à un contrôle final, correspondant à la procédure qualité propre à l'INERIS avant la diffusion de tous rapports.

4. VUE D'ENSEMBLE DES APPROCHES D'ESTIMATION PRESENTEES

La méthode d'estimation des niveaux d'exposition et de risques procède selon le schéma suivant :

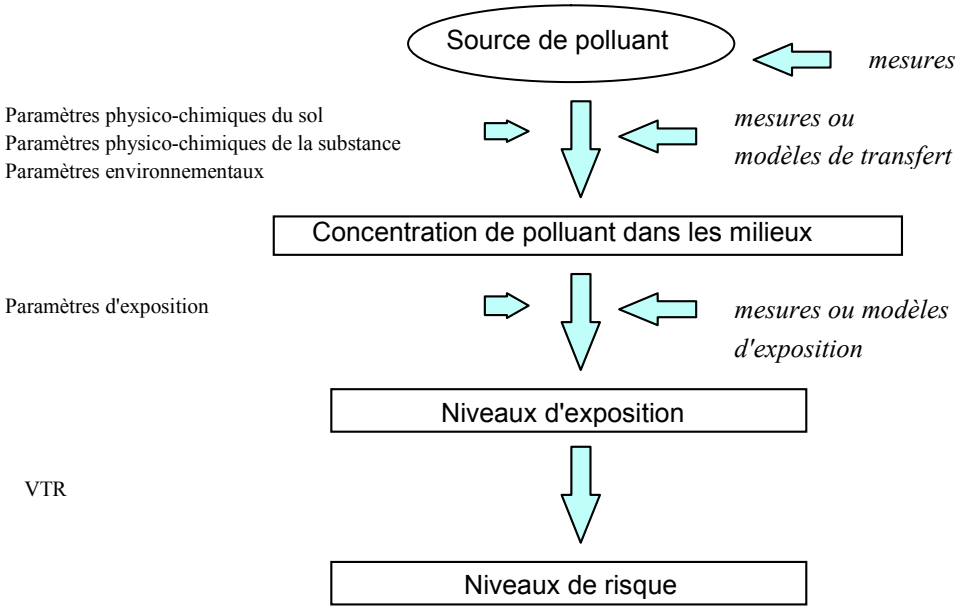


Figure 1 : Schéma de principe de la démarche de quantification de l'exposition

En fonction des données d'entrée disponibles, l'ensemble du processus de modélisation doit être déroulé à partir de la caractérisation de la source, ou bien seulement une partie, à partir des mesures de polluants dans les milieux environnementaux ou des mesures dans les milieux d'exposition[2].

Suivant le schéma de la figure 1, la partie B présente de manière successive les ensembles d'équations dédiées à l'estimation des concentrations dans les milieux, des niveaux d'exposition, puis des niveaux de risque.

Mais, les modules de calcul présentés ne couvrent pas toutes les situations. Ces modules correspondent aux jeux d'équations mis en œuvre par l'INERIS, dans le cadre d'évaluations de risques sanitaires, principalement pour des sites industriels, jusqu'au moment de la rédaction du présent rapport.

[2] Dans le cadre réglementaire de la gestion des installations classées (circulaire du 8 Février 2007 sur les installations classées - Prévention de la pollution des sols - Gestion des sols pollués, circulaire BPSPR/2007 – 128/VD du 15 mai 2007), l'impact d'une installation en fonctionnement depuis plusieurs années ou d'un site contaminé doit reposer sur des mesures réelles de contamination des différents milieux. Ces mesures seront interprétées au travers de la démarche d'interprétation des milieux. Dans ce cadre, un calcul de risque ne sera effectué que, si d'une part les mesures indiquent que les milieux d'exposition sont dégradés par rapport à l'état initial, et si d'autre part aucune valeur réglementaire de gestion n'existe pour interpréter ces mesures.

Certains milieux (milieu marin) ou certains mécanismes de transfert (dispersion des polluants dans un estuaire, retour au sol des polluants par les fèces des animaux ou après sénescence des végétaux, entrainement des polluants dans le sol par battement de la nappe) peuvent ne pas avoir été traités par la modélisation ou uniquement dans des conditions limitées (par exemple, modélisation pour des concentrations de polluants inférieures à la limite de solubilité). De fait, les modules de calcul développés sont essentiellement centrés sur un environnement terrestre, même si une section est consacrée à des approches simplifiées permettant de traiter le devenir des polluants dans les eaux souterraines et dans les eaux superficielles. Quant à la dispersion atmosphérique des polluants, elle est abordée, mais l'ensemble des équations n'est pas traité de manière explicite, car si les résultats sont utilisés pour l'ERS, cette partie de l'étude est généralement traitée à part.

Le document traite du devenir de contamination dont le terme source peut se situer dans le sol, la nappe, qui peut consister en un rejet atmosphérique canalisé ou diffus dans l'atmosphère ou correspondre à un rejet ponctuel dans les eaux superficielles. Toutefois, les méthodes d'estimation de ces termes sources ne sont pas abordées dans ce document. Concrètement, dans les études de sols pollués, le volume et la concentration de polluant de la source sont définis à partir du diagnostic approfondi. Dans le cas d'ICPE, l'ERS est réalisée à partir de mesures sur le flux d'émission, d'estimations basées sur des facteurs d'émissions ou à partir des valeurs limites fixées par l'arrêté préfectoral.

Finalement, la Figure 2 résume de manière schématique tous les milieux, mécanismes de transfert et voies d'exposition décrits dans la partie B du document.

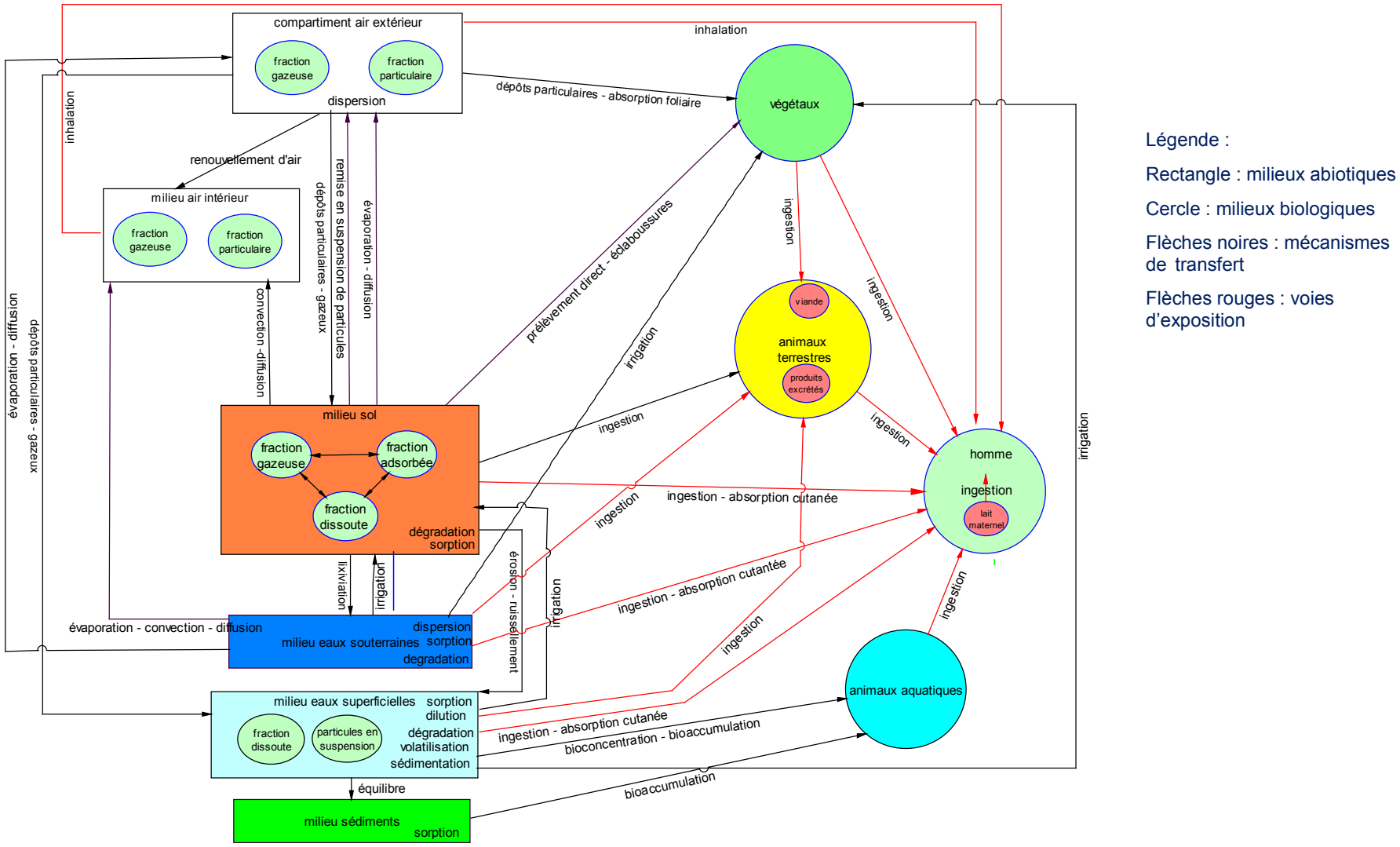
La Figure 3 représente la même chose sous la forme d'une matrice carrée. Chacun des éléments diagonaux de la matrice, éléments en (i, i), correspond à un des milieux étudiés et présentent les processus internes à ce milieu i. Les éléments en dehors de la diagonale, éléments en (i, j) avec $i \neq j$, décrivent les transferts allant du milieu i au milieu j.

Le lecteur notera que, sur la figure 3, certains phénomènes de transfert apparaissent avec une police normale, alors que d'autres sont notés en gras. Les mécanismes inscrits avec une police normale ne sont traités, dans la partie B du document, qu'en tant que phénomènes d'apport de polluant du milieu amont i vers le milieu aval j. Ceux apparaissant en gras sont traités à la fois, comme un mécanisme d'apport du milieu amont i vers le milieu aval j, et comme un processus de perte pour le milieu i. Quant aux phénomènes inscrits dans des rectangles représentant des milieux environnementaux (cf. Figure 2) ou dans des éléments (i,i) de la matrice (cf. Figure 3), ils ne sont traités dans le document qu'en tant que mécanismes de perte pour le milieu i. C'est le cas, par exemple, pour le mécanisme de sédimentation qui apparaît dans le rectangle ou la case correspondant aux « eaux superficielles ». Ce phénomène de transfert a été inscrit sous la mention « eaux superficielles » et non entre les cases « eaux superficielles » et « sédiments », car il peut ou non être pris en compte par l'évaluateur dans son modèle, en tant que mécanisme de perte de polluant pour les eaux superficielles, mais ce processus n'est pas pour l'instant utilisé dans le document pour estimer la concentration dans la couche sédimentaire.

L’absence de lien entre la prise en compte de l’apport de polluant d’un milieu i à un milieu j par un mécanisme de transfert d’une part et la prise en compte de la perte de polluant occasionnée pour le milieu i par ce mécanisme d’autre part est liée à l’utilisation d’approches de modélisation simplifiée (cf. section 5). Elle entraîne le non respect du bilan massique du polluant dans l’environnement. En revanche, les méthodes de calcul où les pertes subies par un milieu (ou les diminutions d’apport) ne sont pas nécessairement prises en compte permettent d’obtenir des estimations prudentes des niveaux d’exposition et de risques. Les incertitudes liées au fait d’avoir négligé ces phénomènes de perte peuvent ensuite être testées en réintégrant ces mécanismes de perte ou en comparant les quantités de polluant transférées du milieu i au milieu j à la quantité estimée de polluant dans le milieu i.

Enfin, même si tous les mécanismes de transfert et voies d’exposition considérées ont été regroupés au sein d’une même matrice, les équations présentées pour chacun de ces mécanismes peuvent correspondre à des conditions ou des hypothèses de calcul différentes, voire opposées (exemples : approche basée sur l’hypothèse d’une source de polluant dans le sol à l’état stationnaire pour le calcul des émissions vers l’air contre approche prenant en compte des phénomènes de perte dans le sol pour estimer l’évolution de la concentration de polluant dans le sol au cours du temps). Ces différentes équations doivent donc être sélectionnées et utilisées de manière raisonnée, en fonction de l’objectif de l’étude et du schéma conceptuel (cf. section 6 de la partie A).

Par conséquent, les figures 2 et 3 offrent une vue synthétique des différents mécanismes de transfert et voies d’exposition traités dans la partie B, au travers des différentes méthodes de calcul développées. Mais, elles ne doivent pas être comprises comme la représentation schématique d’un modèle global où les mécanismes de transfert seraient nécessairement couplés.



Légende :

Rectangle : milieux abiotiques

Cercle : milieux biologiques

Flèches noires : mécanismes de transfert

Flèches rouges : voies d'exposition

Figure 2 : Milieux, mécanismes de transfert et voies d'exposition décrits dans le document

Sol Dégradation Sorption	**Diffusion** Evaporation Remise en suspension de particules	Convection Diffusion	**Lixiviation**	**Ruissellement** **Erosion**		Prélèvement direct à partir du sol Eclaboussures	Ingestion	Ingestion Absorption cutanée
Dépôts particulaires et gazeux	Air extérieur Dispersion	Renouvellement d'air		Dépôts particulaires et gazeux		Dépôts particulaires Absorption foliaire de polluant gazeux		Inhalation de gaz et particules
		Air intérieur						Inhalation de gaz et particules
Irrigation	Evaporation Diffusion	Evaporation Convection Diffusion	Eaux souterraines Dispersion Dégradation Sorption			Irrigation	Ingestion	Ingestion Absorption cutanée
Irrigation				Eaux superficielles Dilution Volatilisation Sédimentation Dégradation Sorption	Equilibre	Irrigation	Ingestion Bioconcentration Bioaccumulation	Ingestion Absorption cutanée
					Sédiments Sorption		Bioaccumulation	
						Végétaux	Ingestion	Ingestion
							Animaux	Ingestion
								Humains Ingestion de lait maternel

Figure 3 : Matrice d'interaction entre les différents milieux (seuls les mécanismes et voies pris en compte dans la partie B apparaissent)

5. CARACTERISTIQUES DES MODULES DE CALCUL ET DES EQUATIONS

Bon nombre des équations utilisées par l'INERIS sont proches ou identiques à celles présentes dans des modèles multimédia, comme HHRAP (US EPA, 2005), RISC (Spence Environmental Engineering, 2004), RBCA Tool Kit (Groundwater Services Inc, 1998) ou HESP (van den Berg, 1994). Bien que les concepts sur lesquels reposent ces modèles soient généralement les mêmes, les simplifications et les hypothèses faites en aval conduisent souvent à des équations et des valeurs de paramètres différents.

Dans ces approches assez simples, les concentrations dans les milieux sont estimées par la représentation mathématique de phénomènes de convection, de diffusion et de dégradation. Les concentrations dans les milieux y sont généralement calculées en prenant en compte la concentration dans le ou les milieu(x) amont(s) ou source(s) A, mais sans tenir compte des transferts secondaires du milieu B vers le milieu A. A titre d'exemple, le transfert du sol vers les plantes (transfert racinaire) est pris en compte, mais pas le transfert de polluant de la plante au sol par la chute des feuilles au sol. De la même manière, la quantité de polluant particulaire arrivant au sol via l'air est généralement calculée à partir du dépôt atmosphérique, sans déduction de la quantité de particules interceptée par les plantes. Déduire la quantité de particules interceptée par les feuilles impliquerait, en compensation, d'ajouter la quantité de particules éliminées des feuilles par la suite, par l'action du vent et de la pluie, et de tenir compte de la fraction de végétaux qui, in fine, retourne au sol (pour ne pas sous-estimer la concentration de polluant dans le sol). La prise en compte de ces phénomènes est délicate : leur importance dépend de nombreux facteurs (type de polluant, taille des particules type de végétaux, conditions météorologiques, stade de croissance des végétaux) et les données nécessaires pour les quantifier paraissent insuffisantes. Les approches présentées en section B sont donc des approches simplifiées, qui peuvent être en contradiction avec le principe de conservation de la masse.

L'ensemble de ces équations ne permet pas non plus de construire un modèle entièrement couplé, prenant en compte tous les mécanismes de transfert d'un polluant entre les différents milieux. Par exemple, en présence à la fois d'une émission atmosphérique de COV à la cheminée d'une installation et d'une source de COV dans les sols, il est possible à l'aide des équations de la partie B d'estimer la concentration de polluant inhalé à l'intérieur et à l'extérieur en tenant compte de la dispersion du flux émis à la cheminée et du flux émis à partir de la source sol par convection et diffusion. En revanche, pendant le fonctionnement de l'installation, le flux de revolatilisation lié au polluant gazeux déposé ne peut pas être pris en compte. Ce flux peut, toutefois, être considéré comme négligeable par rapport aux deux autres.

Les approches développées dans ce document sont donc des approches relativement simples, qui ne permettent pas nécessairement d'établir le bilan massique d'un polluant dans la biosphère, mais qui ont pour objectif de répondre aux questions motivant les évaluations de risques menées sur des sites.

Dans le même esprit, ce document adopte des méthodes pratiques pour estimer les expositions, qui ne correspondent pas à une représentation des véritables phénomènes de transfert. Ainsi, pour le calcul des expositions mettant en jeu une couche de sol d'épaisseur z (ingestion directe de sol, ingestion de végétaux), la concentration de polluant dans cette couche sol est estimée en supposant que la quantité de polluant déposée à la surface est répartie sur cette hauteur. Même si la quantité de polluant perdue par cette couche (par exemple par lixiviation) peut être déduite, le gradient de concentration du polluant dans la couche n'est pas calculé (cf. section 1.1.2 de la partie B).

En revanche, contrairement à certains des modèles cités ci-dessus, les concentrations de polluant dans les milieux ne sont pas données, dans ce document, uniquement à l'état stationnaire. Elles sont aussi souvent exprimées, en fonction du temps. Ces expressions peuvent être utiles, en particulier, pour évaluer des expositions aiguës, suivre l'évolution de la concentration dans une matrice, prendre en compte des conditions d'exposition variables dans le temps,…. Le lecteur notera ainsi que la plupart des paramètres des équations présentées ci-dessous peuvent, eux-mêmes, être définis comme des paramètres dépendant du temps (dans les limites d'utilisation précisées pour ces équations et à condition qu'elles ne reposent pas sur l'hypothèse d'atteinte de l'état stationnaire). Toutefois, pour des raisons de lisibilité, la dépendance au temps des différents paramètres d'entrée n'est pas retranscrite dans les équations présentées.

Lorsqu'elles existent, les solutions analytiques des équations différentielles présentées sont données, mais une résolution numérique est bien sûr possible.

6. CONDITIONS D'UTILISATION DES MODULES DE CALCUL ET DES EQUATIONS PRESENTES

Comme indiqué dans les guides d'évaluation des risques existants (MATE, 2000, INERIS, 2003), tous les mécanismes de transfert et voies d'exposition répertoriés n'ont bien sûr pas à être modélisés dans une étude. En fonction de l'usage du site, des caractéristiques du polluant étudié et du site, un schéma conceptuel d'exposition spécifique au site doit être défini. Concernant le mode d'élaboration du schéma conceptuel, le lecteur pourra se reporter au document du Ministère chargé de l'Environnement (MEDAD, 2007c)

A partir de ce schéma conceptuel, des objectifs de l'étude et des moyens disponibles, les algorithmes et les équations appropriés pour une étude donnée doivent être sélectionnés, pour reconstruire un outil d'estimation des expositions spécifique à l'étude. Comme rappelé dans le document présentant la démarche d'Analyses des Risques Résiduels (MEDAD, 2007d), « la sélection des « modèles » de transfert et des valeurs des paramètres d'entrée associés (paramètres environnementaux, paramètres physico-chimiques des substances, des sols…) est adaptée aux spécificités de l'étude ».

En premier lieu, il faut veiller à ce que tous les phénomènes qui peuvent concourir à un accroissement des concentrations dans les milieux d'exposition soient pris en compte. Ainsi, en fonction du type de contamination, certains mécanismes de transfert seront pertinents et d'autres pas. Par exemple, dans le cas d'un sol contaminé par des polluants volatils, le transfert des polluants de la source vers l'habitat doit être considéré. Il y aura distinction entre la concentration de polluant (et donc de l'exposition par inhalation) à l'extérieur et à l'intérieur des bâtiments. Dans le cas d'émissions de polluants volatils aux cheminées d'une installation industrielle, seule la dispersion atmosphérique est modélisée, et la concentration à l'intérieur des bâtiments, attribuable à l'installation, peut être, dans une première approche, assimilée à la concentration à l'extérieur. En fonction des propriétés des substances, de l'usage du site,…, certaines voies d'exposition sont négligeables et un calcul rapide et majorant peut suffire à le démontrer. Par exemple, l'absorption cutanée, l'inhalation de gaz et de particules par les animaux sont des voies d'exposition qui s'avèrent souvent négligeables par rapport aux autres modes d'exposition pris en compte.

En fonction du type de substance, certains modèles pourront être adaptés ou non. Les relations empiriques de type QSAR (Quantitative Structure Activity Relationship) sont ainsi établies à partir d'un ensemble de substances au caractéristiques physico-chimiques données. A titre d'exemple, les substances avec un coefficient de partage octanol-eau élevé, comme le benzo(a)pyrène (BaP) ou la 2,3,7,8 tétrachlorodibenzodioxine (2,3,7,8 TCDD), ne font pas partie du domaine de validité de la relation de Potts and Guys modifiée, recommandée par l'US EPA (2004d) pour estimer le coefficient de perméabilité cutanée d'un polluant à travers la couche cornée à partir de l'eau.

Dans certains cas, une approche volontairement majorante peut être recherchée. Si l'objectif est de démontrer le caractère acceptable du risque résiduel lié à la solution de gestion retenue, ce type d'approche de calcul, qui tend à majorer le risque, peut s'avérer suffisante et évite de sous-estimer les concentrations dans le sol ou les teneurs prédites dans d'autres milieux environnementaux ou d'exposition. La représentation de certains phénomènes peut ainsi être volontairement omise, l'évaluateur privilégiant alors le principe de prudence sur la notion de réalisme. Par exemple, les phénomènes d'atténuation naturelle des polluants dans le sol (comme l'érosion, le ruissellement, la dégradation, la volatilisation, la lixiviation) peuvent être pris en compte en tant que phénomènes d'apports de polluants aux milieux avals (eaux superficielles, air, eaux souterraines), mais la perte subie par le sol n'est alors pas être déduite de la source sol.

La complexité du modèle à utiliser doit aussi être appréciée en fonction du niveau de précision requis dans les résultats et des moyens disponibles pour mener l'étude.

Ainsi, la prise en compte dans le détail de phénomènes physiques, chimiques et biologiques peut, dans certains cas, nuire à la lisibilité du modèle. La recherche de précision ou/et de réalisme peut s'opposer à l'objectif de transparence des études.

De plus, la qualité d'un résultat de calcul dépend à la fois de la représentativité des équations et des données d'entrée utilisées. Un modèle complexe nécessite des données d'entrée plus nombreuses. Un tel outil utilisé avec des données sensibles définies par défaut, par manque de temps ou d'argent, perd son intérêt.

En dehors de situations, qui seraient à définir par les Ministères chargés de l'Environnement et de la Santé où des approches génériques pourraient être utilisées, l'emploi d'un module de calcul relève d'une analyse au cas par cas et donc de l'expertise de l'évaluateur.

Dans cet esprit, plusieurs approches de modélisation peuvent parfois être décrites pour un même mécanisme de transfert dans la suite du document. Les hypothèses et les limites de chaque approche sont alors présentées pour faciliter le choix de celle qui est la plus adaptée en fonction de l'étude. La présentation de plusieurs approches peut également favoriser la réalisation de l'étape d'évaluation des incertitudes. Lorsque les connaissances scientifiques sont trop limitées pour privilégier un modèle par rapport à un autre, la réalisation d'une analyse comparative des résultats des différents modèles disponibles constitue un élément important de l'évaluation des incertitudes et donc de l'étape de caractérisation du risque. L'introduction des phénomènes de perte subis par un milieu, lors de cette étape, peut également permettre de tester l'impact d'hypothèses majorantes posées initialement, consistant à ignorer les phénomènes d'élimination ou d'atténuation naturelle du polluant.

Pour répondre aux besoins d'une évaluation des risques liés à un site contaminé ou aux émissions d'une ICPE, il est donc possible d'utiliser :

- les approches de calcul développées dans la partie B du document,
- des valeurs mesurées. Les valeurs mesurées intègrent généralement un bruit de fond (d'origine anthropique et/ou géochimique), en plus de l'impact de la source de contamination étudiée. L'usage de ces données doit donc se faire en cohérence avec l'objectif recherché (cf. section 4 de la partie B) ;
- des valeurs modélisées issues de modèles mathématiques plus complexes, si le besoin s'en fait sentir. Les équations décrites ici restent relativement simples. Chaque milieu est représenté par un (ou parfois plusieurs) compartiment(s) dont la concentration est supposée uniforme. Le recours à des modèles à 1,2 ou 3 dimensions peut s'avérer nécessaire dans certains cas, par exemple pour estimer le transfert des polluants du sol vers la nappe ou les concentrations dans les eaux d'une rivière.

Mais, dans tous les cas, la sélection des méthodes d'estimation et l'interprétation des résultats obtenus doit tenir compte des hypothèses sur lesquelles ces approches se fondent.

7. MODE DE PRESENTATION DES EQUATIONS

Dans la partie B du document, pour chaque mode de transfert et voie d'exposition, sont décrits les phénomènes physico-chimiques et biologiques en jeu, les hypothèses et/ou simplifications faites et le raisonnement mathématique aboutissant à l'expression de la concentration, de la dose ou du niveau de risque. Pour faciliter la compréhension et l'utilisation des expressions finales obtenues, sans avoir à se reporter à une autre section du document, chacune d'elles est accompagnée d'un cartouche rappelant les paramètres intervenant dans cette expression.

Ce cartouche se présente sous la forme suivante :

Symbole	Désignation	Dimensions	Unités	Statut
C_{wd}	Concentration dissoute dans l'eau	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E

Pour éviter de réduire la validité des expressions présentées à un seul système d'unités, les dimensions de chaque paramètre de l'équation sont données.

Cinq grandeurs fondamentales permettent d'exprimer les dimensions des différents éléments constitutifs des équations présentées :

- la longueur représentée par le symbole L,
- la masse représentée par le symbole M,
- le temps représenté par le symbole T,
- la température représentée par le symbole K,
- le nombre de moles représenté par le symbole Mol.

Un jeu d'unités classiquement utilisées pour définir les paramètres de l'équation est fourni à titre d'exemple. En fonction de l'étude, de la durée totale de l'exposition et de l'échelle temporelle utilisée pour définir les paramètres (journalière, mensuelle, annuelle,…), d'autres unités peuvent être employées.

Enfin, le statut indique au lecteur si un paramètre d'une équation :

- doit être calculé en amont : C,
- doit être défini en tant que donnée d'entrée : E (il peut s'agir d'un résultat de mesure ou d'une méthode de calcul externe aux approches d'estimation décrites ici),
- est défini comme une donnée interne au modèle : I.

PARTIE B : PRESENTATION DES EQUATIONS

Dans cette partie du document sont présentées successivement les approches de calcul correspondant à l'estimation :

- des concentrations dans les milieux (section 1),
- des niveaux d'exposition (section 2),
- des niveaux de risques (section 3).

L'estimation de la concentration de polluant dans le lait maternel (milieu biologique relatif à l'homme) est traitée dans la partie consacrée aux niveaux d'exposition.

1. ESTIMATION DES CONCENTRATIONS DANS LES MILIEUX

1.1. MILIEU « SOL »

Après arrêt d'une activité industrielle, le milieu sol constitue souvent la principale source d'exposition. Dans le cas d'une installation en fonctionnement émettant des rejets atmosphériques, les expositions (hormis l'inhalation directe de polluant) dépendent dans une large mesure des concentrations dans le milieu sol, qui constitue un réceptacle important de la contamination atmosphérique. La détermination de la concentration de polluant dans les sols constitue donc une des premières étapes du processus d'estimation des expositions.

A partir de la concentration dans les sols, les flux de polluant vers les autres milieux environnementaux (air, eaux souterraines, eaux superficielles) sont estimés, ainsi que la contamination des végétaux, et l'exposition des animaux et des personnes par inhalation, ingestion de sol et contact cutané (cf. Figure 2 et Figure 3).

Mais, selon le processus considéré, la couche de sol mise en jeu est différente. Pour la prise en compte des phénomènes d'érosion, de ruissellement, pour l'ingestion de sol ou le contact cutané, on s'intéresse à la couche superficielle du sol. Pour le transfert racinaire vers les végétaux, c'est la zone d'emprise des racines des végétaux qui doit être considérée. Enfin, dans le cas du transfert gazeux du sol vers l'atmosphère ou vers l'air intérieur d'un bâtiment, les polluants peuvent être mobilisés sur une épaisseur bien plus importante. Or, le sol peu rarement être considéré comme homogène sur toute sa profondeur. Plusieurs couches, dont les propriétés sont supposées homogènes (exemples : teneur en carbone organique, teneur en eau, porosité,…) sont donc souvent définies pour représenter le compartiment sol.

Ainsi, pour l'émission de polluant gazeux d'une source, située à une profondeur z dans le sol, vers l'atmosphère ou vers un bâtiment, on considère la concentration de polluant dans le sol au niveau de la source et les propriétés

des couches de sol situées entre la source et la surface d'émission. Dans ce cas, qui correspond à une contamination passée[3], la concentration dans le sol est déterminée par la mesure. Pour l'émission de polluant sous forme particulaire dans l'atmosphère, l'ingestion de sol, le contact cutané et le transfert racinaire, on s'intéresse à la concentration moyenne de polluant dans la couche de sol s'étendant de la surface à la profondeur d'intérêt (la hauteur du sol bêché ou labouré pour le transfert vers les végétaux cultivés, le ou les premiers centimètres pour les autres processus cités). Cette couche de sol pouvant être contaminée à partir des rejets futurs d'une installation industrielle, l'estimation de sa concentration nécessite le recours à la modélisation. Ce chapitre est donc principalement consacré à l'estimation de la concentration de polluant dans une couche de sol dont le toit est situé à la surface du sol.

1.1.1. PARTITION DU POLLUANT ENTRE LES DIFFERENTES PHASES DU SOL

Le sol étant un milieu multiphasique (air, eau, solide), et le devenir du polluant dans le sol dépendant de la partition du polluant entre ces différentes phases, la présente section est consacrée aux relations pouvant être décrites entre les concentrations de polluant dans les différentes phases du sol.

Selon la concentration du polluant dans le sol, celui-ci peut se présenter sous trois ou quatre phases. Le polluant dans le sol est :

- adsorbé sur les particules du sol,
- sous forme dissoute dans l'eau du sol,
- sous forme gazeuse dans l'air du sol,
- sous la forme d'une phase non miscible, quand la limite de solubilité dans l'eau du sol est atteinte.

Classiquement, **les modèles sont basés sur l'hypothèse selon laquelle les polluants se trouvent à l'équilibre entre ces différentes phases et que cet équilibre est atteint de manière immédiate.** Cette hypothèse permet d'établir des relations mathématiques entre les concentrations de polluant présent dans les différentes phases. Mais cette hypothèse ne tient pas compte de la cinétique des transferts. Des tests en laboratoire montrent toutefois un établissement rapide de l'équilibre (par exemple 24-28 heures entre le sol et l'eau interstitielle) (van den Berg, 1994, cité dans le rapport INERIS, 2005b). Cette hypothèse est également conservatoire pour les pollutions anciennes car elle ne tient pas compte des possibilités d'irréversibilité dans l'adsorption des polluants, notamment pour les contaminations anciennes).

[3] Dans le cas d'une installation future ou d'une installation en fonctionnement, les émissions de polluants dans l'air à partir d'une source, située en profondeur dans le sol, suite à l'accumulation de polluants déposés à la surface, qui migreraient ensuite dans le sol, ne sont pas prises en compte. Elles peuvent en effet être considérées comme négligeables par rapport aux émissions directes dans l'air (pour que cette hypothèse ne soit pas vérifiée, il faudrait que les émissions passées ayant généré une pollution en profondeur dans le sol aient été beaucoup plus importantes que les émissions présentes ou futures, et dans ce cas, la source sol créée serait étudiée en tant que telle).

1.1.1.1. CAS OU LA LIMITE DE SOLUBILITE N'EST PAS ATTEINTE

Dans ce cas, les concentrations dans l'air du sol, l'eau du sol et sur les particules du sol se calculent à partir des équations suivantes :

$$m_s = m_{ps} + m_{es} + m_{as}$$ Équation 1.1.1

avec m_s : masse totale de polluant dans le sol,

m_{ps} : masse de polluant adsorbée sur les particules du sol,

m_{es} : masse de polluant dissoute dans l'eau du sol,

m_{as} : masse de polluant dans l'air du sol.

et $$m_s = MV_s \times V \times C_s$$ Équation 1.1.2

avec MV_s : masse volumique apparente du sol,

V : volume de sol considéré,

C_s : concentration de polluant dans le sol (exprimée par rapport au poids de sol sec).

$$m_{ps} = MV_{ps} \times V_{ps} \times C_{ps} = MV_{ps} \times V \times (1 - \theta - \alpha) \times C_{ps} = MV_s \times V \times C_{ps}$$ Équation 1.1.3

avec MV_{ps} : masse volumique des particules du sol,

V_{ps} : volume occupé par les particules,

C_{ps} : concentration de polluant adsorbé sur les particules,

θ : fraction volumique occupée par l'eau du sol,

α : fraction volumique occupée par l'air du sol.

$$m_{es} = V_{es} \times C_{es} = V \times \theta \times C_{es}$$ Équation 1.1.4

avec V_{es} : volume occupé par l'eau du sol,

C_{es} : concentration de polluant dans l'eau du sol.

$$m_{as} = V_{as} \times C_{as} = V \times \alpha \times C_{as}$$ Équation 1.1.5

avec V_{as} : volume occupé par l'air du sol,

C_{as} : concentration de polluant dans l'air du sol.

Si **la relation entre la concentration adsorbée sur les particules est linéaire** par rapport à la concentration dissoute dans l'eau du sol (ce qui ne tient pas compte des possibilités d'irréversibilité dans l'absorption des polluants, notamment pour les contaminations anciennes), on écrit :

$$K_d = \frac{C_{ps}}{C_{es}}$$ *(équation de Freundlich :* $K_d = \frac{C_{ps}}{(C_e)^n}$ *avec n=1)* Équation 1.1.6

avec K_d : coefficient de partition particules du sol / eau du sol.

Par ailleurs la concentration dans l'eau et l'air du sol sont reliées par la constante de Henry, telle que :

$$H' = \frac{C_{as}}{C_{es}}$$ Équation 1.1.7

avec H' : constante de Henry exprimée sous forme adimensionnelle :

$$H' = \frac{H}{R \times T_s}$$ Équation 1.1.8

avec H : constante de Henry ($L^2.M.T^{-2}.Mol^{-1}$)

R : constante des gaz parfaits ($L^2.M.T^{-2}.K^{-1}.Mol^{-1}$)

T_s : température du sol (K)

En utilisant les équations 1.1.1 à 1.1.5, on peut écrire :

$$MV_s \times V \times C_s = MV_s \times V \times C_{ps} + V \times \theta \times C_{es} + V \times \alpha \times C_{as}$$ Équation 1.1.9

et d'après les équations 1.1.6 à 1.1.9, on peut déduire :

$$C_s = C_{ps} + \frac{\theta}{MV_s} \times C_{es} + \frac{\alpha}{MV_s} \times C_{as}$$ Équation 1.1.10

$$C_{es} = C_s \times \frac{1}{\left(K_d + \frac{\theta}{MV_s} + \frac{\alpha \times H}{MV_s \times R \times T_s} \right)}$$ Équation 1.1.11

$$C_{as} = C_s \times \frac{1}{\left(\frac{K_d \times R \times T_s}{H} + \frac{\theta \times R \times T_s}{H \times MV_s} + \frac{\alpha}{MV_s} \right)}$$ Équation 1.1.12

et $$C_{ps} = C_s \times \frac{1}{\left(1 + \frac{\theta}{MV_s \times K_d} + \frac{\alpha \times H}{MV_s \times R \times T_s \times K_d} \right)}$$ Équation 1.1.13

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
C_{es}	Concentration de polluant dans l'eau du sol	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C_{as}	Concentration de polluant dans l'air du sol	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C_{ps}	Concentration de polluant adsorbé sur les particules	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
C_s	Concentration de polluant dans le sol (exprimé en fonction du poids sec du sol)	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
K_d	Coefficient de partition particules du sol / eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
MV_s	Masse volumique apparente du sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
α	Fraction volumique occupée par l'air du sol	-	-	E
θ	Fraction volumique occupée par l'eau du sol	-	-	E
H	Constante de Henry	$L^2.M.T^{-2}.Mol^{-1}$	$Pa.m^3.mol^{-1}$	C ou E
R	Constante des gaz parfaits	$L^2.M.T^{-2}.K^{-1}.Mol^{-1}$	$8,31\ J.K^{-1}.mol^{-1}$	I
T_s	Température du sol	K	K	E

Remarque :

1. C_s est généralement exprimée par rapport au poids sec (soit la quantité de polluant présente dans les différentes phases : m_s, divisée par le poids des particules sèches : MV_{ps} x V x (1-θ-α) ou MV_s x V).
2. α, θ, K_d et T_s peuvent varier en fonction des conditions environnementales. Néanmoins, la fréquence et l'impact des variations considérées doit être suffisamment faible pour être compatible avec l'installation d'un état d'équilibre du polluant entre les différentes phases du sol.

1.1.1.2. CAS OU LA LIMITE DE SOLUBILITE EST ATTEINTE

Dans ce cas, il existe une phase non miscible de polluant dans le sol.

Si la substance est pure, la limite de solubilité est atteinte quand la concentration dans le sol est égale à C_{sL}, avec :

$$C_{sL} = S \times \left(K_d + \frac{\theta}{MV_s} + \frac{\alpha \times H}{MV_s \times R \times T_s} \right)$$ Équation 1.1.14

et alors :

$$C_{es} = S$$ Équation 1.1.15

et $$C_{as} = \frac{H}{R \times T_s} \times S$$ Équation 1.1.16

D'après l'équation des gaz parfaits : $$\frac{C_{as}}{1000 \times M} = \frac{P_{vap}}{R \times T_s}$$ Équation 1.1.17

avec M : masse molaire du polluant (le facteur 1000 au dénominateur tient compte du fait que la masse molaire est classiquement exprimée en $g.mol^{-1}$ alors que la concentration dans l'air du sol est supposée donnée ici en $mg.m^{-3}$)

On peut donc aussi écrire à saturation :

$$C_{as} = \frac{P_{vap} \times M \times 1000}{R \times T_s}$$ Équation 1.1.18

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
C_{sL}	Concentration de polluant dans le sol (exprimée en fonction du poids sec du sol) à la limite de solubilité	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C
C_{es}	Concentration de polluant dans l'eau du sol	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C_{as}	Concentration de polluant dans l'air du sol	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
S	Solubilité du polluant	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	E
K_d	Coefficient de partition particules du sol / eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
MV_s	Masse volumique apparente du sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
α	Fraction volumique occupée par l'air du sol	-	-	E
θ	Fraction volumique occupée par l'eau du sol	-	-	E
P_{vap}	Pression de vapeur du polluant	$M.L^{-1}.T^{-2}$	Pa	E
M	Masse molaire du polluant	$M.Mol^{-1}$	$g.mol^{-1}$	E
H	Constante de Henry	$L^2.M.T^{-2}.Mol^{-1}$	$Pa.m^3.mol^{-1}$	C ou E
R	Constante des gaz parfaits	$L^2.M.T^{-2}.K^{-1}.Mol^{-1}$	8.3143 J K^{-1} mol^{-1}	I
T_s	Température du sol	K	K	E

Si la substance est présente dans un mélange, la loi de Raoult conduit à écrire :

$$C_{sL,j} = x_j \times S \times \left(K_d + \frac{\theta}{MV_s} + \frac{\alpha \times H}{MV_s \times R \times T_s} \right)$$ Équation 1.1.19

$$C_{es,j} = x_j \times S$$ Équation 1.1.20

$$C_{as,j} = x_j \cdot \frac{P_{vap,j} \times M_j \times 1000}{R \times T_s}$$ Équation 1.1.21

avec $$x_j = \frac{C_{s,j} / M_j}{\sum_j C_{s,j} / M_j}$$ Équation 1.1.22

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{sL,j}$	Concentration du polluant j dans le sol (exprimée en fonction du poids sec du sol) à la limite de solubilité	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C
$C_{s,j}$	Concentration du polluant j dans le sol	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
$C_{es,j}$	Concentration du polluant j dans l'eau du sol	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{as,j}$	Concentration du polluant j dans l'air du sol	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
S	Solubilité du polluant	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	E
R	Constante des gaz parfaits	$L^2.M.T^{-2}.K^{-1}.Mol^{-1}$	8.3143 J K^{-1} mol^{-1}	I
T_s	Température du sol	K	K	E
$P_{vap,j}$	Pression de vapeur du polluant j	$M.L^{-1}.T^{-2}$	Pa	E
M_j	Masse molaire du polluant j	$M.Mol^{-1}$	$g.mol^{-1}$	E
x_j	Fraction molaire du polluant j dans le mélange	-	-	C ou E

Remarque : Ces équations supposent une répartition homogène du polluant dans le sol. En réalité, le polluant, souvent apporté en produit concentré au départ, pourra se répartir de manière hétérogène dans le sol (notamment du fait de sa viscosité), laissant des vides et des zones de fortes concentrations. Par conséquent, une phase non miscible peut exister pour des quantités de polluant dans le sol inférieures à celles déterminées d'après les équations ci-dessus (INERIS, 2005b).

1.1.2. CONCENTRATION DE POLLUANT DANS LA COUCHE DE SOL EN SURFACE

La concentration de polluant dans une couche de sol à l'instant t dépend de la concentration de polluant à l'instant initial et des quantités de polluant apportées à cette couche et perdue par cette couche entre l'instant initial et l'instant t.

Les mécanismes de perte qui peuvent concourir à la réduction de la concentration de polluant dans le sol sont :

- la lixiviation,
- la volatilisation,
- la dégradation (biologique et abiotique).

La couche de sol située à la surface du sol peut également subir des pertes dues :

- à l'érosion par l'eau et le vent,
- au ruissellement,
- voire au prélèvement racinaire des végétaux.

L'impact de ces mécanismes de perte étant difficile à quantifier et les incertitudes associées étant importantes, ces mécanismes de perte sont souvent négligés dans les évaluations de risques sanitaires, dans un souci de simplification et de prudence. En l'absence d'apport, la concentration dans le sol est alors considérée constante au cours du temps. A l'inverse, tant qu'il y a des apports de polluant au sol, si les phénomènes de perte cités ci-dessus ne

sont pas pris en compte, la concentration de polluant estimée dans le sol augmente. Si les apports et les pertes sont pris en compte, la concentration dans le sol peut atteindre un niveau stationnaire. Mais, ce niveau stationnaire peut ne pas être atteint avant la fin de la période de dépôt étudiée.

La section 1.1.2.2 est consacrée à l'estimation des apports. Les méthodes d'estimation des pertes sont présentées en section 1.1.2.3 et l'expression des concentrations de polluant dans le sol attribuables à la (ou aux) source(s) de pollution étudiée(s) en fonction du temps est donnée dans la section 1.1.2.4.

Comme indiqué dans le chapitre 3, les risques subchroniques et chroniques sont estimés à partir de l'exposition moyenne des cibles sur des périodes d'exposition (d_{exp}) allant de quelques jours à plusieurs années. Dans certains cas, en fonction des outils de calcul utilisés, il peut être plus pratique pour les évaluateurs d'estimer l'exposition moyenne sur la période d_{exp} à partir des concentrations moyennes dans les milieux d'exposition sur cette période, plutôt que d'estimer cette exposition comme la moyenne de niveaux d'exposition ponctuels calculées à différents pas de temps. Si la concentration moyenne dans les milieux sur la période d_{exp} peut s'exprimer sous la forme d'une expression analytique, cette approche permet d'éviter de calculer les concentrations et les expositions en de très nombreux pas de temps. Elle suppose, néanmoins, que les paramètres d'exposition de la cible puissent être considérés comme constants pendant la période considérée. La section 1.1.2.5 donne ainsi la concentration moyenne de polluant dans le sol sur une période donnée pour différents cas.

1.1.2.1. BILAN MASSIQUE DU POLLUANT DANS LE SOL EN SURFACE

La quantité de polluant dans le sol est calculée à partir du bilan massique du polluant dans la masse de sol considérée.

On écrit :

$$\frac{dm_s}{dt} = D_s \times S_s \times Z_s \times MV_s - \sum_i \left[FM_s\right]_i \qquad \text{Équation 1.1.23}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
m_s	Masse de polluant dans le sol	M	mg	Cou E
D_s	Apport de polluant au sol par unité de temps	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.s^{-1}$	C ou E
$\left[FM_s\right]_i$	Masse de polluant perdue par le sol par le phénomène d'atténuation i par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
MV_s	Masse volumique apparente du sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
Z_s	Epaisseur de la couche de sol où s'accumule le polluant	L	m	E
S_s	Surface de la zone considérée	L^2	m^2	E

Remarque : Les apports de polluant au sol et les pertes de polluant à partir du sol, présentés par la suite ne tiennent compte que des sources de contamination locales (sur et autour du site), sans prise en compte des sources de polluant ubiquitaires d'origine anthropique et du bruit de fond pédogéochimique naturel. D'une manière générale, les équations décrites dans la section 1.1.2 sont donc données pour le calcul des quantités (m_s) et des concentrations de polluant dans le sol attribuables aux sources de pollution sur et autour du site (C_s), hors bruit de fond. Pour la distinction entre concentrations attribuables et concentrations totales et l'estimation des concentrations totales, le lecteur se reportera à la section 4.

1.1.2.2. APPORTS AU SOL DE SURFACE

1.1.2.2.1. ESTIMATION DES DEPOTS ATMOSPHERIQUES AU SOL

Les apports à la surface du sol peuvent être de nature particulaire et gazeuse. Dans les deux cas, il y a une fraction sèche et une fraction humide.

La prise en compte des dépôts au sol dans le cadre d'évaluation de risques sanitaires est pertinente pour des polluants semi-volatils (comme les PCB) ou non volatils (comme les métaux). Pour des polluants volatils (comme le benzène), l'exposition par ingestion et contact cutané qui découle des transferts de l'air vers le sol, sont négligeables par rapport à l'exposition par inhalation.

Les dépôts au sol sont soit mesurés, soit estimés à l'aide d'un modèle de dispersion atmosphérique.

La mesure est généralement réalisée à l'aide de collecteurs de retombées totales. Il existe aussi des collecteurs de dépôts humides.

Dans les modèles de dispersion atmosphériques, les dépôts sont estimés à partir des concentrations atmosphériques. Les principes de calcul utilisés dans ces modèles sont présentés dans les sections 1.1.2.2.1.1 et 1.1.2.2.1.2 suivantes.

1.1.2.2.1.1. CALCUL DU DEPOT SEC

Le dépôt sec de polluant au sol (défini par unité de temps et de surface) est proportionnel à la concentration de polluant dans l'air près du sol :

$$D_{\text{sec}} = v_d \times C_a(x,y,0) \qquad \text{Équation 1.1.24}$$

avec C_a (x,y,0) : concentration de polluant dans l'air au niveau du sol,

v_d : vitesse de déposition.

La vitesse de déposition comprend une composante diffusive ($v_{d'}$) et une composante gravitationnelle (v_s).

Le dépôt par diffusion concerne les gaz et les particules. Il est dû à trois phénomènes :

- le transport aérodynamique à travers la couche atmosphérique de surface, sous l'effet des mouvements turbulents,

- le transport à travers la très fine couche d'air stagnant située juste au-dessus du sol sous la couche de surface. Il est dû à la diffusion moléculaire (pour les gaz) ou au mouvement brownien (pour les particules),
- l'absorption par la surface (pour les gaz), l'adhésion à la surface (pour les particules).

Le dépôt par gravité est propre aux particules.

En l'absence de données sur les vitesses de déposition, ces dernières peuvent être estimées comme l'inverse d'une somme de plusieurs résistances.

Pour les gaz, la vitesse de déposition est considérée comme l'inverse de trois résistances :

$$v_d = \frac{1}{r_a + r_b + r_s}$$ Équation 1.1.25

Avec r_a : la résistance aérodynamique,

r_b : la résistance de sous-couche laminaire,

r_c : la résistance de surface.

Ces termes de résistance dépendent du polluant, de la nature de la surface et de la vitesse du vent.

Pour les particules, la vitesse de déposition est estimée selon les modèles, soit comme :

$$v_d = \frac{1}{r_a + r_b + r_a \times r_b \times v_s}$$ Équation 1.1.26

(Seinfeld et Pandis, 1998)

avec v_s : vitesse gravitaire,

soit comme :

$$v_d = \frac{v_s}{1 - \exp(-v_s / v_{d'})}$$ Équation 1.1.27

(Venkatram et Pleim, 1999)

avec $v_{d'}$: vitesse diffusive,

$$v_{d'} = \frac{1}{r_a + r_b}$$ Équation 1.1.28

1.1.2.2.1.2. CALCUL DU DEPOT HUMIDE

Deux grands types de processus participent au dépôt humide : le lessivage dans les nuages (*rainout* ou *in-cloud scavenging*), et le lessivage sous les nuages (*washout* ou *below-cloud scavenging*). Le premier type correspond aux transformations qui se produisent à l'intérieur des nuages ; le second, à l'incorporation des polluants dans les précipitations.

Cet ensemble complexe de réactions est généralement modélisé par le biais d'un coefficient de lessivage ($\Lambda_{lessivage}$), qui multiplié par la concentration dans l'air (C_a) donne la quantité de polluant capturée dans les précipitations par unité de temps et de surface. Le dépôt humide de polluant au sol peut être calculé en intégrant cette quantité sur la colonne verticale d'air. En supposant l'atmosphère homogène sur cette colonne et la capture irréversible, il est défini par l'équation suivante :

$$D_{humide} = \int_0^{\infty} \Lambda_{lessivage} \times C_a dz \qquad \text{Équation 1.1.29}$$

Le coefficient de lessivage dépend notamment du polluant, de la granulométrie des particules, du taux de précipitation et de la taille des gouttelettes (Sportisse, 2007).

En l'absence de données pour $\Lambda_{lessivage}$, ce paramètre peut être estimé selon la formule suivante :

$$\Lambda_{lessivage} = A \times P^B \qquad \text{Équation 1.1.30}$$

avec P : précipitations,

A, B : coefficients.

1.1.2.2.1.3. CALCUL DES FRACTIONS GAZEUSE ET PARTICULAIRE

Pour les polluants pouvant exister à l'état gazeux et à l'état particulaire à température ambiante, le calcul des concentrations atmosphériques et des dépôts est effectué pour la fraction gazeuse d'une part, et la fraction particulaire d'autre part, en appliquant à l'émission les fractions particulaires et gazeuses estimées à température ambiante. Cette approche repose sur l'hypothèse d'une chute de température rapide du flux de polluant après émission.

Les fractions de polluant en phases particulaire (F_p) et gazeuse (F_g) s'écrivent :

$$F_p = \frac{C_{ap}}{C_{ag} + C_{ap}} = \frac{K_{pg}}{1 + K_{pg}} \qquad \text{Équation 1.1.31}$$

et $$F_g = 1 - F_p \qquad \text{Équation 1.1.32}$$

avec C_{ag} : concentration de polluant dans l'air en phase gazeuse,

C_{ap} : concentration de polluant dans l'air en phase particulaire,

K_{pg} : coefficient de partage particule/gaz.

D'après le modèle d'adsorption de Junge (1977) (revu par PanKow, 1987),

$$K_{pg} = \frac{c \times S_T}{P^{\circ}_{vap,L}} \qquad \text{Équation 1.1.33}$$

D'où $$F_p = \frac{c \times S_T}{P^{\circ}_{vap,L} + c \times S_T} \qquad \text{Équation 1.1.34}$$

et $$F_g = \frac{P^{\circ}_{vap,L}}{P^{\circ}_{vap,L} + c \times S_T}$$ Équation 1.1.35

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
F_g	Fraction de polluant sous forme gazeuse	-	-	C ou E
F_p	Fraction de polluant sous forme particulaire	-	-	C ou E
$P_{vap,L}$	Pression de vapeur du polluant en phase liquide	$M.L^{-1}.T^{-2}$	atm	C ou E
c	Constante de Junge	$M.T^{-2}$	$1,7.10^{-4}$ atm.cm	I
S_T	Surface moyenne des particules d'aérosols par volume d'air	L^{-1}	$cm^2.cm^{-3}$	E

Bidleman (1988) donne pour S_T différentes valeurs en fonction du contexte environnemental.

Bien que Junge attribue une valeur constante à c, ce paramètre dépend en fait de la différence entre la chaleur de désorption de la surface de la particule et la chaleur de vaporisation du polluant.

Si le polluant est solide à température ambiante, sa pression de vapeur en phase liquide peut être calculée par l'expression suivante :

$$\ln\left(\frac{P^{\circ}_{vap,L}}{P^{\circ}_{vap,S}}\right) = \frac{\Delta S_f}{R} \times \frac{(T_m - T_a)}{T_a}$$ Équation 1.1.36

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$P_{vap,L}$	Pression de vapeur du polluant en phase liquide	$M.L^{-1}.T^{-2}$	atm	C ou E
$P_{vap,S}$	Pression de vapeur du polluant en phase solide	$M.L^{-1}.T^{-2}$	atm	E
$\Delta S_f/R$	Rapport de l'entropie de fusion sur la constante des gaz parfaits	-	6,79 (-)	I
T_m	Température de fusion du polluant	K	°K	E
T_a	Température de l'air	K	°K	E

Remarques :

1. Dans ses travaux d'évaluation des risques liés aux dioxines, l'US EPA (2004c) a comparé les résultats fournis par l'équation de Junge avec des données de mesure pour les hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP), les pesticides organochlorés, les polychlorobiphényls (PCB), les polychlorodibenzodioxines (PCDD) et les polychlorodibenzofurannes (PCDF). Dans le cas des HAP, les résultats de mesure et de modélisation sont très proches. Dans le cas, des PCB et des pesticides organochlorés, le modèle tend à surestimer la fraction particulaire, mais cette surestimation est encore plus importante dans le cas des PCDD et PCDF (avec pour cet essai, un pourcentage de TCDD et de TCDF sous forme particulaire dans l'air compris entre 43 et 65% d'après le modèle et entre 11 et 18% d'après les mesures). Pourtant, compte tenu des problèmes liés au dispositif de prélèvement, l'US EPA, dans ce travail d'évaluation, a préféré utiliser les résultats issus de la modélisation par rapport à ceux issus de la mesure.

2. Il existe d'autres approches (basées notamment sur le coefficient de partition octanol-air) qui, d'après certains auteurs (Harner et al, 1998), permettent d'estimer les fractions de polluant sous formes gazeuse et particulaire de manière plus précise. Ces approches alternatives n'ayant pas été analysées et n'ayant encore jamais utilisées par l'INERIS, ne sont pas présentées ici.

1.1.2.2.1.4. SOMME DES FLUX ATMOSPHERIQUES DE POLLUANT AU SOL

Le flux total de polluant au sol est égal à la somme des flux gazeux et particulaire.

Le dépôt particulaire au sol peut être composé d'un flux sec et d'un flux humide (particules lessivées par les précipitations).

$$D_{ps} = D_{pss} + D_{phs}$$ Équation 1.1.37

Le dépôt gazeux au sol peut être composé d'un flux sec (flux de diffusion) et d'un flux humide (lessivage et dissolution des gaz dans l'eau).

$$D_{gs} = D_{gss} + D_{ghs}$$ Équation 1.1.38

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
D_{ps}	Flux de polluant au sol sous forme particulaire	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
D_{pss}	Flux de polluant particulaire au sol sous forme sèche	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	E
D_{phs}	Flux de polluant particulaire au sol sous forme humide	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	E
D_{gs}	Flux de polluant au sol sous forme gazeuse	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
D_{gss}	Flux de polluant gazeux au sol sous forme sèche	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	E
D_{ghs}	Flux de polluant gazeux au sol sous forme humide	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	E

Remarque : certains modèles ne fournissent pas les dépôts gazeux humide et sec. Des méthodes simplifiées (non utilisées par l'INERIS) existent pour les estimer (cf. Whelpdale, 1982 ou US EPA, 1998).

1.1.2.2.2. CALCUL DES AUTRES APPORTS

D'une manière générale, les flux de polluant apportés au sol peuvent être estimés comme le produit de la quantité de matrice apportée (engrais, boues) par la concentration de polluant dans cette matrice. Selon la nature de cette matrice, le polluant pourra en revanche présenter une biodisponibilité et une mobilité différente. Cet aspect doit être pris en compte dans la détermination des valeurs attribuées aux paramètres des substances chimiques (coefficient de partage particules-eau du sol, coefficient de transfert sol-plante,…).

Dans le cas d'un dépôt par irrigation, on peut écrire :

$$D_{ir,s} = C_{e,ir} \times I_r$$ Équation 1.1.39

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$D_{ir,s}$	Flux de polluant au sol par irrigation	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
I_r	Irrigation	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
$C_{e,ir}$	Concentration de polluant dans l'eau d'irrigation	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E

Remarque : Le sol peut également être contaminé par une nappe polluée et les mouvements de battement de cette nappe. Ce mécanisme de contamination du sol n'est pas traité dans ce document.

1.1.2.2.3. CALCUL DE L'APPORT TOTAL AU SOL

Les flux de polluant apportés sont supposés dilués dans une zone de sol de hauteur Z_s, d'où :

$$D_s = \frac{\sum_i D_{i,s}}{MV_s \times Z_s}$$ Équation 1.1.40

Comme indiqué plus haut, plusieurs couches de sol sont considérées en fonction de l'usage de la zone et du phénomène de transfert étudié (par exemple, pour l'estimation de la contamination des végétaux par transfert racinaire à partir du sol, Z_s peut être définie en fonction de la profondeur de la zone d'emprise racinaire des végétaux, tandis que pour estimer les transferts et les expositions par contact avec le sol superficiel, une couche de sol très superficielle de 1 ou 2 cm peut être prise en compte si le sol n'est pas labouré ou bêché régulièrement).

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
D_s	Dépôt total de polluant au sol	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.s^{-1}$	C ou E
$D_{i,s}$	Flux i de polluant au sol	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
MV_s	Masse volumique apparente du sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
Z_s	Epaisseur de la couche de sol où s'accumule le polluant	L	m	E

Remarque :

D_s est inversement proportionnel à Z_s. Toute surestimation de Z_s conduit donc à sous-estimer D_s et inversement.

Or, il faut souligner que si la définition de Z_s repose sur des conditions agronomiques, ce mode de représentation reste conventionnel et ne correspond pas à une représentation physique des phénomènes réels permettant de connaître le gradient de polluant dans les sols. Dans le cas d'un dépôt continu à la surface du sol et en l'absence d'action d'homogénéisation du sol, la concentration dans le sol présente en effet un gradient négatif en fonction de la profondeur. L'action des organismes du sol (souris, vers de terre,…) et le labourage tendent à homogénéiser la concentration de polluant dans le sol. Toutefois, le labour est une action ponctuelle renouvelée une ou deux fois par an. Entre deux labours, si le dépôt à la surface du sol est

important par rapport à la concentration moyenne dans la couche de sol labourée, alors la concentration présentera effectivement un gradient négatif avec la profondeur.

1.1.2.3. PERTES A PARTIR DU SOL

La concentration de polluant dans le sol peut être réduite au cours du temps par les phénomènes de lixiviation, d'érosion, de ruissellement, de volatilisation ou de dégradation.

Ces phénomènes de perte peuvent être pris en compte ou non pour l'estimation des concentrations de polluant dans le sol.

L'absence de prise en compte conduit à surestimer la concentration de polluant dans le sol, qui tend alors à augmenter indéfiniment avec les apports. Leur prise en compte, au contraire, peut conduire à une sous-estimation de la concentration dans le sol (donc de la concentration des milieux contaminés à partir du sol et de l'exposition). Or, l'impact de ces phénomènes étant très variable, leur estimation est délicate.

Les différents phénomènes de perte ou d'atténuation cités ci-dessus peuvent être considérés de manière globale. Après revue de la littérature, l'US EPA (2004c) a ainsi défini un facteur global de perte k (tel que $\sum [FM_s]_i = k \times m_s$) pour représenter l'atténuation des dioxines dans une couche de sol de hauteur donnée.

La vitesse d'atténuation d'un polluant dans un sol dépend des propriétés du sol (pH, teneur en matière organique,…), des caractéristiques du polluant ou du mélange de polluants présents (concentrations,...) et de la configuration du site (pente, couverture végétale,…). L'utilisation d'une vitesse d'atténuation définie à partir de données de terrain (correspondant aux différents mécanismes de perte enjeu) est donc à privilégier. La vitesse d'atténuation mesurée dans une couche de sol donnée n'étant pas nécessairement représentative pour d'autres conditions, il faut aussi être vigilant sur le protocole d'estimation de cette valeur.

Mais, parfois la quantité de polluant perdue par un sol est estimée comme la somme des quantités perdues du fait de chacun des phénomènes d'atténuation (cf. US EPA, 2005). Si chacune de ces quantités est estimée de manière indépendante, sans prise en compte de la concomitance des différents phénomènes, les quantités de polluant perdues peuvent être surestimées (la quantité de polluant disponible pour chacun de ces phénomènes étant surestimée).

Des méthodes d'estimation de l'impact des différents phénomènes d'atténuation de la pollution dans le sol sont présentées dans les sections suivantes. Elles font appel à des paramètres qui peuvent s'avérer difficiles à définir et l'incertitude liée à leur estimation peut être élevée. A travers ces méthodes simples, **chaque phénomène d'atténuation** est de fait **considéré de manière indépendante aux autres**.

Outre les hypothèses énoncées dans les sections relatives à chacun de ces mécanismes, le lecteur devra se reporter à la section 1.1.2.3.6 présentant les limites communes à ces différentes expressions et la manière de les utiliser.

Remarque : les phénomènes de perte liés au transfert racinaire des polluants du sol vers les végétaux ne sont pas pris en compte. On notera que dans un certain nombre de cas, le transfert des polluants du sol vers les plantes est compensé par le fait qu'une partie des végétaux peut, après récolte, rester sur place et être réincorporée au sol ou être consommée par des animaux, dont les fèces peuvent également retourner au sol.

1.1.2.3.1. PERTES PAR LIXIVIATION

La masse de polluant sortant de la couche de sol considérée, par unité de temps, du fait de la lixiviation est égale à :

$$\left[FM_s\right]_l = R_{ech} \times S_s \times C_{es} \qquad \text{Équation 1.1.41}$$

avec C_{es} : concentration de polluant dans l'eau du sol,

S_s : surface de sol considérée,

R_{ech} : flux de lixiviation.

1. **Si la concentration de polluant dans le sol est inférieure à la limite de solubilité et si l'équilibre multiphasique est atteint**, on peut écrire, grâce à l'équation 1.1.11 :

$$\left[FM_s\right]_l = \frac{R_{ech} \times S_s}{K_d + \frac{\theta}{MV_s} + \frac{\alpha \times H}{MV_s \times R \times T_s}} \times C_s \qquad \text{Équation 1.1.42}$$

avec K_d : coefficient de partage particules du sol/eau du sol,

θ : fraction volumique occupée par l'eau du sol,

α : fraction volumique occupée par l'air du sol,

H : constante de Henry,

R : constante des gaz parfaits,

T_s: température du sol,

C_s : concentration de polluant dans le sol,

MV_s : masse volumique apparente du sol.

Par ailleurs, si $\alpha \times \frac{H}{R \times T_s} \prec\prec \theta + K_d \times MV_s$

(hypothèse selon laquelle la fraction de polluant présent dans la phase gazeuse est négligeable par rapport à la somme des fractions de polluant adsorbé sur les particules et dissous dans l'eau), on peut écrire :

$$\left[FM_s\right]_l = \frac{R_{ech} \times S_s}{K_d + \frac{\theta}{MV_s}} \times C_s \qquad \text{Équation 1.1.43}$$

Dans ce cas, un facteur de perte par lixiviation (k_l) peut être défini tel que :

$$\left[FM_s\right]_l = MV_s \times Z_s \times S_s \times k_l \times C_s \qquad \text{Équation 1.1.44}$$

et $k_l = \frac{R_{ech}}{\left(MV_s \times K_d + \theta\right) \times Z_s}$

avec Z_s : hauteur de la couche de sol. Équation 1.1.45

2. **Si la limite de solubilité est atteinte**, la perte par lixiviation ne s'exprime pas en fonction de la concentration dans le sol (C_s).

   D'après la section 1.1.1.2,

   si le polluant est en phase pure, on peut écrire :

$$\left[FM_s\right]_l = R_{ech} \times S \times S_s \qquad \text{Équation 1.1.46}$$

   avec S : solubilité du polluant dans l'eau,

   si le polluant est présent dans un mélange, on peut écrire :

$$\left[FM_s\right]_{l,j} = R_{ech} \times x_j \times S \times S_s \qquad \text{Équation 1.1.47}$$

   avec x_j : fraction molaire du polluant j dans le mélange

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$[FM_s]_l$	Masse de polluant sortant de la couche de sol par lixiviation par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
k_l	Facteur de perte par lixiviation	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
R_{ech}	Flux de lixiviation	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
K_d	Coefficient de partage particules du sol/eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
Z_s	Hauteur de la couche de sol	L	m	E
θ	Fraction volumique occupée par l'eau du sol	-	-	E
MV_s	Masse volumique apparente de la couche de sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
S	Solubilité du polluant dans l'eau	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	E
x_j	Fraction molaire du polluant j dans le mélange (cf. équation 1.1.22)	-	-	C ou E

Remarque : Le temps de résidence de l'eau dans le sol est déterminant dans l'atteinte de l'équilibre chimique de l'eau lixiviée. Aussi, les expressions 1.1.41 et 1.1.42 peuvent surestimer les pertes.

Expression du flux de lixiviation

Le flux de lixiviation est calculé en effectuant le bilan hydrique des apports d'eau au sol et des pertes d'eau subies par le sol sur une période T donnée.

Le bilan hydrique d'un sol est généralement défini avec un pas de temps (ΔT_i) d'une journée ou bien d'une décade. On a :

$$R_{ech} = \frac{1}{\sum \Delta T_i} \times \max\left[(P + I_r - RO - E_T) \times \Delta T_i - (RU - R);0\right] \qquad \text{Équation 1.1.48}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
R_{ech}	Flux de lixiviation	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
E_T	Evapotranspiration	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
I_r	Irrigation	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
P	Précipitations	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
RO	Ruissellement	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
RU	Réserve utile en eau du sol	L	m	E
R	Réserve en eau du sol	L	m	E
ΔT_i	Pas de temps	T	s	E

La réserve utile RU est égale à la différence de hauteur d'eau entre la capacité au champ et le point de flétrissement. RU dépend du type de sol.

Remarque :

Si le flux de lixiviation (R_{ech}) est estimé à partir de données annuelles comme dans US EPA (2005) et si au bout d'une année, la réserve utile en eau du sol est effectivement reconstituée, on est amené à écrire :

$$R_{ech} = P + I_r - RO - E_T \qquad \text{Équation 1.1.49}$$

L'évapotranspiration réelle sur un site est calculée à partir de l'évapotranspiration potentielle. L'évapotranspiration potentielle (évapotranspiration d'un sol engazonné et saturé en eau) est donnée par METEOFRANCE ou peut être estimée par différentes méthodes (Thorthwaite, 1948 ; Penman, 1948). L'évapotranspiration réelle est calculée en tenant compte de la réserve en eau dans le sol au cours du temps, ainsi que du couvert végétal et de son stage phénologique (FAO, 1998).

1.1.2.3.2. PERTES PAR RUISSELLEMENT

Les modèles HHRAP (US EPA, 2005), CalTOX (University of California, 1993, 1997) et SimpleBox (RIVM, 1996), notamment, intègrent une perte de polluant dans le sol par ruissellement de la forme :

$$\left[FM_s\right]_r = RO \times S_s \times C_{es} \qquad \text{Équation 1.1.50}$$

avec $\left[FM_s\right]_r$: masse de polluant perdue par ruissellement par unité de temps,

C_{es} : concentration de polluant dans l'eau du sol,

S_s : surface de sol considérée,

RO : ruissellement.

1. **Si la concentration de polluant dans le sol est inférieure à la limite de solubilité et si l'équilibre multiphasique est atteint**, on peut écrire, grâce à l'équation 1.1.11 :

$$\left[FM_s\right]_r = \frac{RO \times S_s}{K_d + \frac{\theta}{MV_s} + \frac{\alpha \times H}{MV_s \times R \times T_s}} \times C_s \qquad \text{Équation 1.1.51}$$

avec K_d : coefficient de partage particules du sol/eau du sol,

θ : fraction volumique occupée par l'eau du sol,

α : fraction volumique occupée par l'air du sol,

H : constante de Henry,

R : constante des gaz parfaits,

T_s : température du sol,

C_s : concentration de polluant dans le sol,

MV_s : masse volumique apparente du sol.

Par ailleurs, si $\alpha \times \frac{H}{R \times T_s} \prec\prec \theta + K_d \times MV_s$

(hypothèse selon laquelle la fraction de polluant présent dans la phase gazeuse est négligeable par rapport à la somme des fractions de polluant absorbé sur les particules et dissous dans l'eau), on peut écrire :

$$\left[FM_s\right]_r = \frac{RO \times S_s}{K_d + \frac{\theta}{MV_s}} \times C_s \qquad \text{Équation 1.1.52}$$

Dans ce cas, un facteur de perte par ruissellement (k_r) peut être défini tel que :

$$\left[FM_s\right]_r = MV_s \times Z_s \times S_s \times k_r \times C_s \qquad \text{Équation 1.1.53}$$

et $$k_r = \frac{RO}{\theta \times Z_s \times \left(1 + \frac{MV \times K_d}{\theta}\right)} \qquad \text{Équation 1.1.54}$$

avec Z_s : hauteur de la couche de sol.

2. **Si la limite de solubilité est atteinte**, la perte par ruissellement ne s'exprime pas en fonction de la concentration de polluant dans le sol (C_s).

   D'après la section 1.1.1.2,

   si le polluant est en phase pure, on écrit de manière équivalente à l'équation 1.1.50 :

   $$\left[FM_s\right]_r = RO \times S \times S_s \qquad \text{Équation 1.1.55}$$

   avec S : solubilité du polluant dans l'eau,

   et si le polluant est présent dans un mélange en phase non miscible, on écrit de manière équivalente à l'équation 1.1.50 :

   $$\left[FM_s\right]_{r,j} = RO \times x_j \times S \times S_s \qquad \text{Équation 1.1.56}$$

   avec x_j : fraction molaire du polluant j dans le mélange

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$[FM_s]_r$	Masse de polluant perdue par ruissellement par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
k_r	Facteur de perte par ruissellement	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
RO	Ruissellement	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
K_d	Coefficient de partage particules du sol/eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
Z_s	Hauteur de la couche de sol	L	m	E
θ	Fraction volumique occupée par l'eau du sol	-	-	E
MV_s	Masse volumique apparente de la couche de sol considérée	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
S	Solubilité du polluant dans l'eau	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	E
x_j	Fraction molaire du polluant j dans le mélange : (cf. équation 1.1.22)	-	-	C ou E

Remarques :

1. Le ruissellement peut être estimé à l'aide de coefficients de ruissellement empiriques (Chow, 1964). Le ruissellement moyen est obtenu en multipliant les coefficients par les précipitations moyennes.

   Le ruissellement peut aussi être estimé sur une base journalière par la méthode du Soil Conservation Service de l'USDA. Cette méthode tient compte des précipitations, du type de sol, des conditions hydrologiques du sol, du type de couvert et de l'humidité du sol. Elle est décrite dans le rapport de l'US EPA intitulé « A screening procedure for toxic and conventional pollutants in surface and ground water – Part I (revised – 1985).

2. Les équations ci-dessus supposent que :
   - la concentration de polluant dans la couche de sol soit uniforme,
   - toute l'eau qui ruisselle sur le sol soit à l'équilibre avec la concentration de polluant dans le sol. Pour des raisons de cinétique, l'utilisation de ces équations dans le cas d'une parcelle contaminée tend à surestimer fortement la perte de polluant par ruissellement. Ces relations sont plus adaptées pour des zones de la taille d'un bassin versant. Elles devraient donc être réservées à ce type de contexte, en prenant en compte la concentration moyenne de polluant dans le sol sur cette zone.

1.1.2.3.3. PERTES PAR EROSION

Pour les sites contaminés, les pertes par érosion correspondent au détachement et au transport de particules du sol du site étudié vers une zone de dépôt située en dehors du site d'intérêt. On distingue l'érosion liée au vent et celle liée à l'eau.

La masse de polluant sortant du site étudié du fait de l'érosion par unité de temps est égale à :

$$[FM_s]_{er} = X_e \times S_s \times C_s \qquad \text{Équation 1.1.57}$$

avec C_s : concentration de polluant dans le sol,

S_s : surface de la zone considérée,

X_e : masse de sol détachée et transportée par érosion hydrique par unité de surface et de temps.

Dans le cas d'un polluant présentant une concentration supérieure à la limite de solubilité, l'intérêt de la prise en compte de l'érosion doit être évalué en fonction des propriétés physiques de la pollution. Si celle-ci, se présente sous un aspect pulvérulent, l'utilisation de la relation 1.1.57 sera pertinente. En revanche, le détachement et le transport de particules du sol sera limité par une pollution présentant un aspect visqueux.

Un facteur de perte par érosion (k_{er}) peut être défini, tel que :

$$\left[FM_s\right]_{er} = MV_s \times Z_s \times S_s \times k_{er} \times C_s \qquad \text{Équation 1.1.58}$$

et $$k_{er} = \frac{X_e}{MV_s \times Z_s} \qquad \text{Équation 1.1.59}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\left[FM_s\right]_{er}$	Masse de polluant sortant du site par érosion par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
k_{er}	Facteur de perte par érosion	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
X_e	Masse de sol détachée et transportée par érosion hydrique par unité de surface et de temps	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$kg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
MV_s	Masse volumique apparente de la couche de sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
S_s	Surface de la zone considérée	L^2	m^2	E
Z_s	Hauteur de la couche de sol	L	m	E

1.1.2.3.3.1. CALCUL DE LA MASSE DE SOL DETACHEE ET TRANSPORTEE PAR EROSION HYDRIQUE

L'érosion peut être due à l'action du vent et de l'eau.

La quantité de polluant exportée du sol dans l'air est en fait due à l'action mécanique du vent et à celle du passage des véhicules. La quantité remise en suspension par l'action éolienne peut être estimée à partir du flux d'émission de particules inhalables J_{part_10pm}, donné par l'équation empirique de Cowherd et al. (présentée dans la section 1.2.1). Cowherd et al. donnent également une relation empirique pour estimer le flux de particules remises en suspension par des véhicules circulant sur des routes non goudronnées. Les pertes de polluant par le sol liées à l'action du vent ne sont généralement pas prises en compte dans les modèles multimédia et jusqu'alors l'INERIS ne les a jamais considérées. En fait, l'incertitude sur la quantité réellement évacuée en dehors du site par dispersion atmosphérique est grande. CalTOX (University of California, 1993, 1997), un des rares modèles à considérer la mise en suspension des particules du sol dans l'air, suppose ainsi que la quantité de particules mise en suspension à partir du sol est égale à celle se déposant sur le sol.

En France, le principal mécanisme d'érosion est l'érosion hydrique (toutefois en région côtière, l'érosion éolienne peut être importante) (ADEME et al., 2001).

Les pertes liées à l'érosion de l'eau peuvent être exprimées à partir de l'Equation Universelle de Perte des Sols (connue dans la terminologie anglaise sous le sigle USLE), qui donne **la masse moyenne de sol perdue sur le long terme** (moyenne annuelle ou saisonnière) à une échelle locale. Il convient de noter que cette équation ne permet pas d'estimer les pertes de sol liées à des événements orageux particuliers.

D'après l'Equation Universelle de Perte des Sols (ADEME et al, 2001) on a :

$$X_e = 3{,}17.10^{-9} * R_f * K_f * C_f * P_f * L_f * S_f \qquad \text{Équation 1.1.60}$$

avec $3{,}17.10^{-9}$: facteur de conversion pour passer des tonnes par hectare et par an à des kilogrammes par mètre-carré et par seconde ;

R_f : facteur d'érosivité des pluies. R_f représente l'influence des précipitations sur l'érosion. Ce facteur est basé sur la fréquence et l'intensité des pluies. En France, R_f peut varier de près de deux ordres de grandeur. La carte de Pihan (1986) reproduite dans le document de l'ADEME et al. permet d'estimer les valeurs par région ;

K_f : facteur d'érodabilité des sols. K_f reflète l'influence des propriétés du sol sur l'érosion. Ce facteur tient compte de la cohésion des sols et de leur résistance à la dislocation et au transport. D'après l'ADEME et al., *« l'érodabilité est très forte pour les sables fins et les limons peu plastiques. Elle décroît lorsque la proportion d'argile et/ou de matière organique augmente ».* L'érodabilité peut être définie à partir d'abaques en fonction de la teneur en sables, en limons, en matières organiques, en fonction de la structure du sol et de sa perméabilité. Ces abaques sont disponibles dans le document de l'ADEME et al. ;

C_f : facteur tenant compte de l'état de surface du sol. C_f tient compte de l'état de surface du sol et est défini par rapport à une condition standard (sol maintenu en jachère labourée). Une valeur de 1 correspond à un sol nu, tandis qu'une valeur de 0,1 ou moins sera attribuée à un sol couvert de végétation. Pour des cultures maraîchères, l'US EPA (1998) recommande des valeurs comprises entre 0,1 et 0,7 ;

P_f : facteur tenant compte de l'aménagement antiérosif du terrain. En l'absence de dispositif particulier pour réduire l'érosion, une valeur de 1 doit être affectée à P_f. Des valeurs plus faibles sont utilisées dans le cas d'aménagements particuliers ;

S_f : facteur d'inclinaison de pente ;

L_f : facteur de longueur de pente.

Wischmeier et al. (1978) propose un tableau pour estimer le produit des facteurs L_f et S_f. Mais, ces paramètres peuvent aussi être estimés par les relations suivantes :

$$L_f = \sqrt{3.28 * l} \Big/ 100 \qquad \text{Équation 1.1.61}$$

$$S_f = 0.76 + 0.53 * p + 0.076 * p^2 \qquad \text{Équation 1.1.62}$$

avec l : longueur de la pente (m)

et p : inclinaison de la pente (%).

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
X_e	Masse de sol détachée et transportée par érosion hydrique par unité de surface et de temps	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$kg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
L_f	Facteur de longueur de pente	-	-	C ou E
S_f	Facteur d'inclinaison de pente	-	-	C ou E
R_f	Facteur d'érosivité des pluies	T^{-1}	an^{-1}	E
K_f	Facteur d'érodabilité des sols	$M.L^{-2}$	$tonne.ha^{-1}$	E
C_f	Facteur d'état de la surface du sol	-	-	E
P_f	Facteur d'aménagement antiérosif	-	-	E

1.1.2.3.3.2. REMARQUES SUR L'ESTIMATION DES PERTES PAR EROSION

La quantité de polluant perdue à partir du sol par érosion est estimée différemment par l'US EPA. D'après les documents de 1998 et 2005, on devrait écrire :

$$\left[FM_s\right]_{er} = X_e \times SD \times ER \times S_s \times C_{ps} \qquad \text{Équation 1.1.63}$$

avec $\left[FM_s\right]_{er}$: masse de polluant perdue par érosion par unité de temps,

X_e : masse de sol détachée et transportée par érosion hydrique par unité de surface et de temps,

C_{ps} : concentration de polluant sur les particules du sol,

ER : ratio d'enrichissement,

SD : ratio entre la masse de matériau transporté en aval de la zone contaminée et la quantité érodée.

Pour estimer X_e, l'US EPA recommande, comme ci-dessus, l'utilisation de l'équation Universelle de Perte de Sol.

En revanche, l'US EPA introduit deux nouveaux termes pour estimer la perte de polluant à partir du sol :

- le ratio d'enrichissement (ER). Ce facteur permet de tenir compte du fait que ce sont les particules les plus légères (avec un ratio surface sur volume et une teneur en matière organique plus élevés) qui sont les plus facilement érodées, et que ces particules présentent des concentrations en polluants plus élevées que le sol *in situ*. Ce facteur peut donc aussi être introduit dans les équations 1.1.57 et 1.1.59. Toutefois, en l'absence de mesures, l'attribution de valeurs à ce paramètre reste difficile. Ainsi, l'US EPA ne propose que des valeurs par défaut, indépendantes du type de sol, même si les valeurs attendues pour ce paramètre sont plus élevées pour les sols sableux que pour les sols limoneux ou silteux (US EPA, 1998) ;
- le « sediment delivery ratio » (SD). Ce facteur est utilisé pour tenir compte du fait que sur une zone donnée, une partie des particules du sol arrachées et transportées par le phénomène d'érosion est redéposée sur la même zone. L'application de ce paramètre, défini à partir des travaux de Vanoni (1975) sur différents bassins versants, semble pertinente pour des surfaces relativement importantes, du type d'un bassin versant. Au niveau d'une parcelle, l'Equation Universelle de Perte de Sols permet d'estimer la quantité de particules qui se détache et qui est déplacée en dehors de la parcelle : l'utilisation du ratio SD n'apparaît donc pas nécessaire.

De plus, il convient de remarquer que l'US EPA ne tient compte que de la pollution présente sur les particules du sol. Elle ne tient pas compte du polluant dans la fraction aqueuse (la fraction gazeuse peut effectivement être considérée comme négligeable). Pour bon nombre de polluants étudiés dans les évaluations de risques (qui sont des polluants présentant une forte affinité avec les particules), l'omission de la fraction aqueuse n'est pas sensible. Mais, si l'on veut généraliser la relation définissant la quantité de polluant perdue par érosion à partir du sol, il semble préférable d'utiliser la concentration de polluant dans le sol (C_s), plutôt que la fraction adsorbée sur les particules, car on peut supposer que l'eau entourant les particules est localement à l'équilibre avec celles-ci.

Finalement, dans le cadre des évaluations de risques liées aux retombées d'incinérateurs, l'US EPA (2005), recommande d'affecter la valeur 0 au facteur de perte par érosion, considérant que sur une zone donnée la quantité de sol perdue au profit de la zone avale est compensée par la quantité de sol en provenance de la zone amont. In fine, la définition de la quantité de polluant perdue par érosion doit donc tenir compte de la configuration du site et du niveau de contamination à l'amont du site :

- si la zone à l'amont de la zone étudiée n'est pas contaminée par la ou les sources étudiées (hors contamination liée au bruit de fond), l'équation 1.1.59 peut être utilisée pour définir un facteur de perte nette par érosion (k_{er}) pour la zone d'étude ;

- pour une parcelle à l'amont de la zone étudiée ayant la même surface, les mêmes caractéristiques (quantité de sol perdue identique) et le même niveau de contamination, le phénomène d'érosion aura un effet nul sur la contamination des sols de la zone d'étude et le facteur de perte nette par érosion (k_{er}) sera nul ;
- pour une parcelle à l'amont de la zone étudiée ayant un niveau de contamination C_s^e différent (hors contamination liée au bruit de fond), l'érosion se traduira par un effet de dilution ou de concentration. L'équation 1.1.59 ne pourra plus être utilisée et la concentration de polluant dans le sol (C_s) attribuable à la source étudiée ne pourra pas être estimée par les équations 1.1.72 et 1.1.74. Les équations 1.1.76 et 1.1.77, donnant respectivement la masse et la concentration de polluant dans la couche de sol, devront être utilisées avec :

$$\left[FM_s\right]_{er} = S_s \times X_e \times (C_s - C_s^e) \qquad \text{Équation 1.1.64}$$

La concentration de polluant dans le sol à l'amont du bassin versant (C_s^e) sera estimée avant C_s.

L'équation 1.1.64 suppose que la parcelle située à l'amont ait la même surface et les mêmes caractéristiques que celle étudiée. Dans le cas contraire, la quantité de sol apportée par la parcelle située à l'amont devra être évaluée en tenant de la surface et de la quantité X_e propres à cette parcelle. Dans le cas de zones de surface importante, l'utilisation du facteur SD (sediment delivery ratio) peut devenir pertinente (cf. méthode d'estimation en section 1.5.2.1.2.1).

1.1.2.3.4. PERTES PAR VOLATILISATION

La diminution de la concentration dans le sol par volatilisation ne concerne que les substances organiques.

Dans l'équation 1.1.23, présentant l'expression du bilan massique du polluant dans le sol en surface, le flux de transfert de l'atmosphère vers le sol est pris en compte par l'estimation des dépôts atmosphériques. Dans cette équation, le terme de perte par volatilisation $\left[FM_s\right]_v$ représente donc le flux de transfert du sol vers le compartiment atmosphérique.

Dans le cas d'une source sol, ce flux peut être estimé en utilisant le modèle de Jury et al. (1990).

Une expression simplifiée de ce modèle est obtenue, lorsque **la diffusion est considérée comme seul phénomène de transfert dans le sol**. Dans ce cas, on peut écrire :

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = DU_a \times \frac{\partial^2 C_s}{\partial z^2} \qquad \text{Équation 1.1.65}$$

avec C_s : concentration de polluant dans le sol,

z : distance à partir de la surface du sol,

DU_a : coefficient de diffusion multiphasique dans la couche de sol étudiée (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol),

$$DU_a = \frac{D_e \times \frac{\theta^{\frac{10}{3}}}{n^2}}{H'} + D_a \times \frac{\alpha^{\frac{10}{3}}}{n^2}$$ Équation 1.1.66

avec D_e : coefficient de diffusion dans l'eau,

H' : constante de Henry (exprimée sous forme adimensionnelle).

θ : fraction volumique occupée par l'eau du sol,

α : fraction volumique occupée par l'air du sol,

n : porosité du sol ($n=\alpha+\theta$).

L'origine de l'équation 1.1.66 est présentée en section 1.2.2.1.3.

Pour une couche de sol présentant une concentration de polluant uniforme $C_s(0)$, à l'instant initial, de la surface (z=0) à une profondeur H_0 et une concentration dans l'air nulle, la résolution de l'équation 1.1.65 donne un flux d'émission :

$$\left[FM_s(t)\right]_v = MV_s \times C_s(0) \times S_s \times \sqrt{\frac{DU_a}{\pi \times \left(\frac{K_d \times MV_s}{H'} + \frac{\theta}{H'} + \alpha\right) \times t}} \times \left(1 - \exp^{-\frac{H_o^2 \times \left(\frac{K_d \times MV_s}{H'} + \frac{\theta}{H'} + \alpha\right)}{4 \times DU_a \times t}}\right)$$ Équation 1.1.67

(Conditions initiales : $C_s=C_s(0)$ à t=0, C_s= 0 pour t=0 et $z>H_0$, C_s=0 pour t>0 et z=0).

Cette équation suppose aussi une **couche de sol isotrope,** une **concentration du polluant dans le sol inférieure à la limite de solubilité** et **le respect de l'équilibre multiphasique.** Par ailleurs, **l'effet de la couche stagnante d'air à la surface du sol est négligé.**

En présence de plusieurs couches de sol contaminées aux propriétés différentes ou si la couche de sol polluée d'épaisseur H_0 est recouverte par une épaisseur de sol non contaminée de hauteur L, le flux de polluant perdu par volatilisation peut être estimé selon le principe de superposition. Dans ce dernier cas, on peut écrire :

$$\left[FM_s(t)\right]_v = \left[FM_s(t)\right]_{v,H0+L} - \left[FM_s(t)\right]_{v,L}$$ Équation 1.1.68

$$\left[FM_s(t)\right]_v = MV_s \times C_s(0) \times S_s \times \sqrt{\frac{DU_a}{\pi \times \left(\frac{K_d \times MV_s}{H'} + \frac{\theta}{H'} + \alpha\right) \times t}}$$

d'où

$$\times \left(\exp^{-\frac{L^2 \times \left(\frac{Kd \times MVs}{H'} + \frac{\theta}{H'} + \alpha\right)}{4 \times DUa \times t}} - \exp^{-\frac{(H_O + L)^2 \times \left(\frac{Kd \times MVs}{H'} + \frac{\theta}{H'} + \alpha\right)}{4 \times DUa \times t}} \right)$$

Équation 1.1.69

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\left[FM_s(t)\right]_v$	Flux de transfert d'une source de polluant dans le sol vers le compartiment atmosphérique, par volatilisation au temps t	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
$C_s(0)$	Concentration de polluant dans la couche de sol contaminée de hauteur H_o à l'instant initial	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	E
K_d	Coefficient de partage particules du sol/eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
DU_a	Coefficient de diffusion multiphasique de la couche de sol (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
D_e	Coefficient de diffusion du polluant dans l'eau	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	E
D_a	Coefficient de diffusion du polluant dans l'air	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	E
d_a	Hauteur de la couche limite d'air au-dessus du sol	L	m	E
H'	Constante de Henry sous forme adimensionnelle $(H' = \frac{H}{R \times T_s})$	-	-	C ou E
n	Porosité du sol (fraction volumique) : $n=\alpha+\theta$	-	-	C ou E
θ	Fraction volumique occupée par l'eau du sol	-	-	E
α	Fraction volumique occupée par l'air du sol	-	-	E
H_o	Epaisseur de la couche de sol contaminée à l'instant initial	L	m	E
L	Epaisseur de sol non contaminé au-dessus de la couche contaminée à l'instant initial	L	m	E
S_s	Surface de la zone considérée	L^2	m^2	E
MV_s	Masse volumique apparente de la couche de sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E

Remarques :

1. Les expressions présentées dans cette section sont applicables dans le cas d'une source de polluant incluse dans la couche de sol Z_s. Elles ne sont pas adaptées pour estimer le flux de transfert des substances déposées à la surface du sol vers l'atmosphère pour une installation industrielle en cours de fonctionnement. En effet, elles concernent une **quantité finie de polluant présente initialement dans le sol** et **non un apport continu** et s'expriment en fonction de la concentration dans le sol à l'instant 0.

En revanche, après arrêt de l'installation, le polluant déposé et présent dans le sol peut être considéré comme une source sol, et il est possible d'utiliser les expressions ci-dessus, avec la concentration calculée dans la couche de sol à cet instant.

2. Par ailleurs, la masse de polluant perdue par volatilisation dépendant de la hauteur de la zone polluée (H_0), le calcul d'un bilan massique pour la couche d'intérêt Z_s à partir de l'équation 1.1.67 ou 1.1.69 n'a pas de sens (et ne doit pas être utilisé pour calculer la concentration de polluant restant dans le sol au cours du temps) si la source de polluant s'étend en-deçà de Z_s.
3. La section 1.2.2 présente d'autres expressions (1.2.25, 1.2.31) pour estimer le flux d'émission (nette) à partir du sol. Ces expressions sont basées premièrement sur l'hypothèse d'un gradient de polluant nul dans le sol, ce qui suppose un régime permanent et un état de la source stationnaire, et deuxièmement sur l'hypothèse d'une diffusion du polluant au travers d'une couche de sol d'une hauteur L constante. Ces hypothèses ne sont pas adaptées pour estimer la réduction de la quantité de polluant au cours du temps dans un sol : elles peuvent conduire à surestimer les pertes de polluant à partir du sol et à sous-estimer la concentration restante de polluant dans le sol de manière potentiellement importante.

1.1.2.3.5. PERTES PAR DEGRADATION

Les pertes par dégradation peuvent être liées à des phénomènes biologiques (dus à des agents microbiens) ou abiotiques (par hydrolyse, photolyse, oxydation…).

Dans de nombreux modèles, les pertes par dégradation sont supposées suivre une cinétique d'ordre 1. Pourtant, en présence par exemple d'une enzyme ou d'un catalyseur, les réactions de dégradation suivent plutôt une cinétique d'ordre 2.

Malgré tout, l'hypothèse d'une cinétique d'ordre 1 est souvent considérée comme acceptable pour de faibles concentrations de polluant. Certains modèles (comme MEPAS (Streile et al., 1996)) utilisent également cette hypothèse pour des concentrations supérieures à la limite de solubilité.

Selon l'hypothèse d'une cinétique d'ordre 1, on peut écrire :

$$\left[FM_s\right]_d = MV_s \times Z_s \times S_s \times k_{\deg} \times C_s \qquad \text{Équation 1.1.70}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$[FM_s]_d$	Masse de polluant perdue par dégradation par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
k_{deg}	Facteur de perte par dégradation	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
C_s	Concentration de polluant dans le sol	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E

1.1.2.3.6. LIMITES COMMUNES A LA PRISE EN COMPTE DES DIFFERENTS PHENOMENES D'ATTENUATION ET CONDITIONS D'UTILISATION DE LEURS EXPRESSIONS MATHEMATIQUES

Les approches développées pour estimer les pertes de polluants à partir du sol sont des approches simplifiées.

Le calcul de la concentration de polluant dans les phases mobiles (air et eau du sol) effectué dans les sections 1.1.2.3.1, 1.1.2.3.2 et 1.1.2.3.4 est basé sur la comparaison de la concentration de polluant attribuable aux sources locales avec la concentration correspondant à la limite de solubilité (C_{sL} : cf. section 1.1.1.2), sans prise en compte de la concentration liée au bruit de fond. Si la concentration totale de polluant dans le sol est supérieure à C_{sL}, alors la part de polluant liée aux sources locales de contamination dans les flux de perte par lixiviation, ruissellement et volatilisation peut être surestimée (car le polluant lié au bruit de fond, même s'il est moins mobile, peut contribuer à la concentration dans les phases mobiles du sol, alors que les pertes sont limitées par la solubilité de la substance).

Mais parallèlement, si le temps de séjour de l'eau dans le sol est trop court, la concentration dans l'eau du sol est surestimée, ainsi que les pertes par lixiviation et ruissellement.

Il faut également rappeler que la variabilité des coefficients de partage particules-eau du sol (K_d) est grande et que l'incertitude sur ce paramètre et les concentrations calculées à partir de ce paramètre peuvent être importantes (au moins un ordre de grandeur). Dans le cas d'un polluant adsorbé sur des particules issues de combustion par exemple, le coefficient de partage particules-eau du sol, conditionnant les fractions de polluant dans l'eau et dans l'air (et disponibles pour être transférées par lixiviation, ruissellement et volatilisation) peut être différent, et notamment supérieur, à ceux répertoriés pour des sols. Or, une sous-estimation du K_d entraine une surestimation des quantités de polluant perdues et une sous-estimation de la concentration restante dans le sol.

Les expressions présentées ci-dessus sont aussi basées sur des hypothèses d'uniformité des propriétés du sol et de la concentration de polluant dans la couche considérée. Même si sur de faibles épaisseurs, il y a des différences de concentration, cette hypothèse d'uniformité de la concentration est habituellement admise pour la couche de sol superficiel prise en compte pour l'estimation des expositions par contact direct (ingestion de sol, contact cutané avec le sol). Quant à la couche de sol servant de support aux végétaux cultivés, elle peut être retournée une à trois fois par an. Le reste du temps et dans les autres cas, la concentration dans le sol présente un gradient négatif en fonction de la profondeur, lorsqu'il existe un apport de polluant en surface. Ainsi, à partir des expressions développées ci-dessus, les pertes par érosion et ruissellement peuvent être sous-estimées et les pertes par lixiviation peuvent être surestimées pour la couche de sol considérée s'il y a apport à la surface. Dans le cas d'une source sol et en l'absence d'apport à la surface, les pertes par ruissellement et érosion peuvent être à l'inverse surestimées. Le calcul des pertes devrait en fait s'appuyer sur la concentration de polluant en haut de la couche de sol pour les phénomènes d'érosion et de ruissellement et sur la concentration au bas de cette couche pour la lixiviation. L'impact de ces approximations dépend de chaque cas, des conditions du site, du paramétrage adopté et de la mobilité des polluants dans le sol.

Une sous-estimation de Z_s peut aussi conduire à une surestimation des facteurs de perte par lixiviation (k_l), par ruissellement (k_r) et par érosion (k_{er}).

Par ailleurs, comme indiqué précédemment, le calcul des quantités de polluant perdues par le sol du fait des différents phénomènes intervenant de manière concomitante, à partir d'expressions définies de manière indépendante, conduit à surestimer les pertes. Par exemple, l'expression des pertes par volatilisation pour une source sol, exprimée à partir de la concentration initiale de polluant dans le sol, est définie en supposant que la diffusion est le seul mécanisme de transfert susceptible de réduire la pollution présente dans le sol. Comme indiqué précédemment, il est donc préférable d'estimer l'impact simultané des différents mécanismes d'atténuation, à partir d'un facteur global de perte (k), par exemple. Dans la mesure où un phénomène tend souvent à avoir un impact plus important que les autres, une autre solution, pour éviter cet écueil de surestimation, consiste à rechercher le phénomène qui contribue le plus à l'atténuation du polluant, puis à ne retenir que ce phénomène dans le calcul de la concentration de polluant dans le sol au cours du temps.

In fine, l'érosion, le ruissellement, la photodégradation sont des phénomènes qui affectent les tous premiers centimètres du sol à partir de la surface du sol, alors que la lixiviation et la volatilisation peuvent concerner toute la tranche de sol non saturée. Selon la hauteur de sol considérée, la prise en compte de certains phénomènes d'atténuation peut donc être plus pertinente que celles d'autres phénomènes.

Compte-tenu de ces limites, dans les évaluations de risques visant à vérifier que les mesures de gestion adoptées conduisent à un niveau de risque acceptable, l'INERIS n'utilise ces équations de perte de polluant à partir du sol que dans l'étape d'évaluation des incertitudes pour analyser l'ampleur des variations possibles des concentrations dans le sol (calculées initialement sans prise en compte des phénomènes d'atténuation) et tester l'impact résultant sur les expositions et le risque.

1.1.2.4. CALCUL DE LA CONCENTRATION DANS LA COUCHE DE SOL EN SURFACE AU TEMPS T

Comme indiqué dans la section 1.1.2.1, les expressions développées dans la présente section et dans les suivantes sont données pour le calcul des concentrations de polluants dans le sol attribuables aux différentes sources de contamination locales (sur et autour du site), sans prise en compte des apports au sol et des pertes à partir du sol correspondant aux sources de polluants ubiquitaires d'origine anthropique et au bruit de fond pédogéochimique naturel. Selon cette approche, la concentration totale de polluant dans le sol est obtenue en ajoutant la concentration due au bruit de fond à la concentration calculée à partir des différentes sources de contamination locales (cf. section 4).

1. Lorsque les masses de polluant perdues par le sol du fait des phénomènes d'atténuation sont proportionnelles à la concentration dans le sol (pertes par lixiviation et ruissellement si la limite de solubilité du polluant n'est pas atteinte, et perte par érosion), l'équation 1.1.23 de bilan massique du polluant dans la couche de sol peut être réécrite à partir de la concentration de polluant dans le sol. On a alors :

$$\frac{dC_s}{dt} = D_s - C_s \times \sum_i k_i \qquad \text{Équation 1.1.71}$$

avec D_s : apport de polluant au sol par la source ou les source(s) de contamination étudiée(s) (sources sur et autour du site),

C_s : concentration de polluant dans le sol,

k_i : facteur de perte du polluant dans le sol par le phénomène d'atténuation i.

L'intégration de l'équation 1.1.71, sur des intervalles de temps (Δt) où l'apport au sol et les pertes ne varient pas, donne :

$$\mathrm{C_s(t)} = \frac{D_s}{\sum_i k_i} \times (1 - e^{-\sum_i k_i \times \Delta t}) + C_s(t - \Delta t) \times e^{-\sum_i k_i \times \Delta t} \qquad \text{Équation 1.1.72}$$

Si $\sum_i k_i = 0$, $C_s(t) = D_s \times \Delta t + C_s(t - \Delta t)$ Équation 1.1.73

Si sur toute la période considérée, l'apport au sol par la source de contamination étudiée et les facteurs de perte ne varient pas, on peut écrire :

$$\mathrm{C_s(t)} = \frac{D_s}{\sum_i k_i} \times (1 - e^{-\sum_i k_i \times t}) + C_s(0) \times e^{-\sum_i k_i \times t} \qquad \text{Équation 1.1.74}$$

si $\sum_i k_i = 0$, $C_s(t) = D_s \times t + C_s(0)$ Équation 1.1.75

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_s(t)$	Concentration de polluant dans le sol au temps t	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
D_s	Apport au sol par la ou les source(s) de contamination étudiée(s) (sources sur et autour du site)	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.s^{-1}$	C ou E
k_i	Facteur de perte par le phénomène d'atténuation i	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
$C_s(0)$	Concentration de polluant dans le sol au temps t=0 (hors bruit de fond)	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E

Remarque : Dans le cas d'une source sol et en l'absence d'apport de polluant à cette source, les équations développées dans cette section sont applicables avec D_s=0.

2. Lorsque les masses de polluant perdues par le sol du fait des phénomènes d'atténuation i sont indépendantes de la concentration de polluant dans le sol (cas où la limite de solubilité est atteinte par exemple), l'intégration de l'équation 1.1.23 sur des intervalles de temps (Δt) où l'apport au sol et les pertes ne varient pas, donne :

$$\mathrm{m_s(t)} = \left(D_s \times S_s \times Z_s \times MV_s - \sum_i \left[FM_s \right]_i \right) \times \Delta t + m_s(t - \Delta t) \qquad \text{Équation 1.1.76}$$

et

$$\mathrm{C_s(t)} = \left(D_s - \frac{\sum_i \left[FM_s \right]_i}{S_s \times Z_s \times MV_s} \right) \times \Delta t + C_s(t - \Delta t) \qquad \text{Équation 1.1.77}$$

Si le polluant est en phase pure, tant que les paramètres environnementaux définissant les pertes par lixiviation, ruissellement et érosion et le facteur de perte par dégradation sont constants, $\sum_{i \neq v} \left[FM_s \right]_i$ est constante. En revanche, si le polluant est en mélange, $\sum_{i \neq v} \left[FM_s \right]_i$ varie avec x_j (fraction molaire du polluant j dans le mélange). Cette fraction molaire peut varier au cours du temps. Dans ce cas, un pas de temps suffisamment petit doit être choisi et x_j doit être recalculé à chaque pas de temps.

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$m_s(t)$	Masse de polluant dans le sol au temps t	M	mg	C ou E
$C_s(t)$	Concentration de polluant dans le sol au temps t	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
$\sum_i [FM_s]_i$	Somme des masses de polluant perdues par les phénomènes d'atténuation par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
D_s	Apport au sol par la ou les source(s) de contamination étudiée(s) (sources locales sur ou autour du site)	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.s^{-1}$	C ou E
MV_s	Masse volumique apparente de la couche considérée	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
S_s	Surface de la zone considérée	L^2	m^2	E
Z_s	Hauteur de la couche de sol considérée	L	m	E

1.1.2.5. CALCUL DE LA CONCENTRATION MOYENNE DANS LE SOL SUR LA PERIODE D'EXPOSITION

La concentration moyenne de polluant dans le sol sur la période d'exposition (d_{exp}), allant de T_1 à T_2, peut être calculée à partir la concentration dans le sol sur les différents intervalles de temps (Δt_i) :

$$\bar{C}_S(d_{\exp}) = \frac{1}{T_2 - T_1} \times \sum_{i=1}^{n} [C_s(t_i) \times \Delta t_i] \qquad \text{Équation 1.1.78}$$

avec i : numéro d'itération entre 1 et n,

et $\sum_{i=1}^{n} \Delta t_i = T_2 - T_1$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\bar{C}_S(d_{\exp})$	Concentration moyenne de polluant dans le sol pendant la période d'exposition d_{exp}	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
d_{exp}	Durée de la période d'exposition considérée : $d_{exp}=T_2-T_1$	T	j	C
T_1	Début de la période d'exposition	T	j	E
T_2	Fin de la période d'exposition	T	j	E
$C_s(t_i)$	Concentration dans le sol au temps t_i	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E

Si les apports et les pertes subies par le sol ne varient pas au cours du temps (ce qui n'est pas le cas par exemple pour le flux de transfert du sol vers l'air défini en fonction du temps, par les expressions 1.1.68 et 1.1.69), une expression analytique peut être définie pour calculer la concentration moyenne de polluant dans le sol sur cette période.

Pour évaluer les expositions liées aux dépôts sur le sol d'une installation émettant des polluants, deux cas sont distingués et présentés dans les sections suivantes :

- celui où la période d'exposition s'achève avant la fin de la période d'apport de polluant au sol par la source étudiée (section 1.1.2.5.1),
- celui où la période d'exposition s'achève après la période d'apport de polluant au sol par la source étudiée (section 1.1.2.5.2).

1.1.2.5.1. CAS DE PARAMETRES CONSTANTS ET D'UNE PERIODE D'EXPOSITION SE TERMINANT AVANT LA FIN DES EMISSIONS

1. **Si la limite de solubilité du polluant dans l'eau du sol n'est pas atteinte** et si la période d'exposition débute au même moment ou après le début des apports de polluant au sol par la source étudiée, la concentration moyenne dans le sol pendant la période d'exposition allant de T_1 à T_2 est obtenue par l'intégration de l'équation 1.1.74 :

soit $$\bar{C}_s(d_{\exp}) = \frac{1}{T_2' - T_1'} \int_{T_1'}^{T_2'} \left[\frac{D_s}{\sum_i k_i} \times (1 - e^{-\sum_i k_i \times t}) + C_s(0) \times e^{-\sum_i k_i \times t} \right] dt$$ Équation 1.1.79

d'où

$$\bar{C}_s(d_{\exp}) = \frac{D_s}{\sum_i k_i} + \left(\frac{D_s}{\left(\sum_i k_i\right)^2 \times (T_2' - T_1')} - \frac{C_s(0)}{\left(\sum_i k_i\right) \times (T_2' - T_1')} \right) \times \left(e^{-T_2' \times \sum_i k_i} - e^{-T_1' \times \sum_i k_i} \right)$$

Équation 1.1.80

avec $C_s(0)$: concentration dans le sol attribuable à la pollution quand t=0 (l'instant 0 devant être fixé entre le début des émissions et le début de l'exposition).

Si $\sum_i k_i = 0$ alors, $\bar{C}_s(d_{\exp}) = \frac{1}{T_2' - T_1'} \int_{T_1'}^{T_2'} [D_s \times t + C_s(0)] dt$ Équation 1.1.81

Et $\bar{C}_s(d_{\exp}) = \frac{D_s}{2} \times (T_2' + T_1') + C_s(0)$ Équation 1.1.82

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\bar{C}_S(d_{\exp})$	Concentration moyenne de polluant dans le sol pendant la période d'exposition d_{exp}	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
D_s	Apport au sol par la ou les sources de contamination étudiée(s) (sources locales sur et autour du site)	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.s^{-1}$	C ou E
k_i	Facteur de perte par le phénomène d'atténuation i	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
T_1'	Début de la période d'exposition¥	T	s	E
T_2'	Fin de la période d'exposition¥	T	s	E
$C_s(0)$	Concentration dans le sol au temps t=0 hors bruit de fond (l'instant 0 étant fixé entre le début des émissions et le début de l'exposition),	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E

¥ : Dans les expressions allant de 1.1.79 à 1.1.82, les dates de début et de fin d'exposition doivent être converties en seconde.

2. **Si la concentration de polluant dans le sol est supérieure à la limite de solubilité** et si la période d'exposition débute au même moment ou après le début des apports de polluant au sol par la source étudiée, une expression analytique peut aussi être calculée. Cette expression est du type :

$$\bar{C}_s(d_{\exp}) = \frac{1}{T_2' - T_1'} \times \int_{T_1'}^{T_2'} \left(D_s - \frac{\sum_i \left[FM_s\right]_i}{S_s \times Z_s \times MV_s} \right) \times t \times dt + C_s(0) \qquad \text{Équation 1.1.83}$$

$$\overline{C}_s(d_{\exp}) = \frac{1}{2} \times \left(D_s - \frac{\sum_i \left[FM_s\right]_i}{S_s \times Z_s \times MV_s} \right) \times \left(T_2' + T_1'\right) + C_s(0) \qquad \text{Équation 1.1.84}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\bar{C}_S(d_{exp})$	Concentration moyenne de polluant dans le sol pendant la période d'exposition d_{exp}	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
D_s	Apport au sol par la ou les source(s) de contamination étudiée(s) (sources locales sur et autour du site)	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.s^{-1}$	C ou E
T_1'	Début de la période d'exposition¥	T	s	E
T_2'	Fin de la période d'exposition¥	T	s	E
$\sum_i [FM_s]_i$	Somme des masses de polluant perdues par les phénomènes d'atténuation par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
MV_s	Masse volumique apparente de la couche considérée	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
S_s	Surface de la zone considérée	L^2	m^2	E
Z_s	Hauteur de la couche de sol considérée	L	m	E
$C_s(0)$	Concentration dans le sol à l'instant t=0 (l'instant 0 étant fixé entre le début des émissions et le début de l'exposition) (hors bruit de fond)	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E

¥ : Dans les expressions 1.1.83 et 1.1.84, les dates de début et de fin d'exposition doivent être converties en seconde.

1.1.2.5.2. CAS DE PARAMETRES CONSTANTS ET D'UNE PERIODE D'EXPOSITION SE TERMINANT APRES LA PERIODE D'EMISSION

C_s doit être intégrée de T_1 (début de la période d'exposition) à T_f (fin de la période d'apports de polluant au sol par la source étudiée), puis de T_f à T_2 (fin de la période d'exposition).

1. **Si la concentration de polluant dans le sol est inférieure à la limite de solubilité** et si la période d'exposition débute au même moment ou après le début des apports de polluant au sol par la source étudiée,

   de T_1 à T_f, on a :

$$\int_{T_1}^{T_f} C_s(t)dt = \int_{T_1'}^{T_f'} \left[\frac{D_s}{\sum_i k_i} \times (1 - e^{-\sum_i k_i \times t}) + C_s(0) \times e^{-\sum_i k_i \times t} \right] dt \qquad \text{Équation 1.1.85}$$

$$\text{soit } \int_{T_1}^{T_f} C_s(t)dt = \frac{D_s}{\sum_i k_i} \times (T_f' - T_1') + \left(\frac{D_s}{\left(\sum_i k_i\right)^2} - \frac{C_s(0)}{\left(\sum_i k_i\right)} \right) \times \left(e^{-T_f' \times \sum_i k_i} - e^{-T_1' \times \sum_i k_i} \right)$$

Équation 1.1.86

   et de T_f à T_2, on a :

$$\int_{T_f}^{T_2} C_s(t)dt = \int_{T_f'}^{T_2'} \left[C(T_f') \times e^{-\sum_i k_i \times (t - T_f')} \right] dt \qquad \text{Équation 1.1.87}$$

soit $\int_{T_f}^{T_2} C_s(t)dt = \frac{C_s(T_f^{'})}{\sum_i k_i} \times (1 - e^{-\sum_i k_i \times (T_2^{'} - T_f^{'})})$ Équation 1.1.88

avec $C_s(T_f^{'}) = \frac{D_s}{\sum_i k_i} \times (1 - e^{-\sum_i k_i \times T_f^{'}}) + C_s(0) \times e^{-\sum_i k_i \times T_f^{'}}$ Équation1.1.89

d'où la concentration moyenne de T_1 à T_2 :

$$\bar{C}_S(d_{\exp}) = \frac{1}{T_2^{'} - T_1^{'}} \cdot \left[\frac{D_s}{\sum_i k_i} \cdot (T_f^{'} - T_1^{'}) + \frac{D_s}{\left(\sum_i k_i\right)^2} \cdot (1 - e^{-\sum_i k_i \times (T_2^{'} - T_f^{'})}) + \left(\frac{D_s}{\left(\sum_i k_i\right)^2} - \frac{C_s(0)}{\left(\sum_i k_i\right)} \right) \cdot \left(e^{-T_2^{'} \times \sum_i k_i} - e^{-T_1^{'} \times \sum_i k_i} \right) \right]$$

Équation 1.1.90

Si k=0,

de T_1 à T_f, $C_s(t) = D_s \times t + C_s(0)$ Équation 1.1.91

de T_f à T_2, $C_s(t) = C_s(T_f) = D_s \times T_f^{'} + C_s(0)$ Équation 1.1.92

et $\bar{C}_s(d_{\exp}) = \frac{1}{T_2^{'} - T_1^{'}} \times \left[\frac{D_s}{2} \times \left(T_f^{'2} - T_1^{'2} \right) + D_s \times T_f^{'} \times (T_2^{'} - T_f^{'}) \right] + C_s(0)$ Équation 1.1.93

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\bar{C}_S(d_{\exp})$	Concentration moyenne de polluant dans le sol pendant la période d'exposition d_{exp}	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
D_s	Apport au sol par la ou les sources de contamination étudiée(s) (sources locales sur et autour du site)	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.s^{-1}$	C ou E
k_i	Facteur de perte par le phénomène d'atténuation i	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
T_1'	Début de la période d'exposition¥	T	s	E
T_f'	Fin de la période d'apport de polluant par la ou les source(s) de contamination étudiée(s)¥	T	s	E
T_2'	Fin de la période d'exposition¥	T	s	E
$C_s(0)$	Concentration dans le sol à l'instant t=0 (l'instant 0 étant compris entre le début des émissions et le début de l'exposition) (hors bruit de fond)	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	E

¥ : Dans les expressions allant de 1.1.85 à 1.1.93, les dates de début et de fin d'exposition, et la date de fin d'apport de polluant au sol doivent être converties en seconde.

2. **Si la concentration de polluant dans le sol reste supérieure à la limite de solubilité pendant toute la période d'exposition** et si la période d'exposition débute au même moment ou après le début des apports de polluant au sol par la source étudiée,

de T_1 à T_f,

$$\int_{T_1}^{T_f} C_s(t)dt = \frac{1}{2} \times \left(D_s - \frac{\sum_i [FM_s]_i}{S_s \times Z_s \times MV_s} \right) \times \left(T_f'^2 - T_1'^2 \right) + C_s(0) \times \left(T_f' - T_1' \right)$$

Équation 1.1.94

de T_f à T_2, $$\int_{T_f}^{T_2} C_s(t)dt = \left(C_s(T_f') - \frac{\sum_i [FM_s]_i}{S_s \times Z_s \times MV_s} \right) \times (T_2' - T_f')$$

Équation 1.1.95

$$\bar{C_s}(d_{\exp}) = C_s(0) + \left(D_s - \frac{\sum_i [FM_s]_i}{S_s \times Z_s \times MV_s} \right) \times \frac{\left(T_f'^2 - T_1'^2 \right)}{2 \times \left(T_2' - T_1' \right)} +$$

d'où $$\left(D_s - \frac{\sum_i [FM_s]_i}{S_s \times Z_s \times MV_s} \right) \times \frac{T_f' \times (T_2' - T_f')}{T_2' - T_1'} - \frac{\sum_i [FM_s]_i}{S_s \times Z_s \times MV_s} \times \frac{(T_2' - T_f')}{\left(T_2' - T_1' \right)}$$

Équation 1.1.96

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\bar{C_s}(d_{\exp})$	Concentration moyenne de polluant dans le sol pendant la période d'exposition d_{exp}	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
D_s	Apport au sol par la ou les source(s) de contamination étudiée(s) (sources locales sur et autour du site)	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.s^{-1}$	C ou E
T_1'	Début de la période d'exposition¥	T	s	E
T_f'	Fin de la période d'apport de polluant par la ou les source(s) de contamination étudiée(s)¥	T	s	E
T_2'	Fin de la période d'exposition¥	T	s	E
$\sum_i [FM_s]_i$	Somme des masses de polluant perdues par les phénomènes d'atténuation par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
MV_s	Masse volumique apparente de la couche de sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
S_s	Surface de la zone considérée	L^2	m^2	E
Z_s	Hauteur de la couche de sol	L	m	E
$C_s(0)$	Concentration dans le sol à l'instant t=0 (l'instant 0 étant compris entre le début des émissions et le début de l'exposition) (hors bruit de fond)	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	E

¥ : Dans les expressions allant de 1.1.94 à 1.1.96, les dates de début et de fin d'exposition, et la date de fin d'apport de polluant au sol doivent être converties en seconde.

1.2. MILIEU « AIR EXTERIEUR»

La concentration de polluant dans l'air est égale à la somme des concentrations de polluant présent dans l'air sous forme gazeuse et sous forme particulaire.

Cette section est consacrée :

- à l'estimation du flux d'émission de polluant dans l'air sous forme particulaire à la surface du sol,
- à l'estimation du flux d'émission de polluant dans l'air sous forme gazeuse à la surface du sol,
- au calcul de la concentration de polluant dans l'air à partir de ces flux émissifs.

1.2.1. EMISSION DE POLLUANTS SOUS FORME PARTICULAIRE A LA SURFACE DU SOL

Des particules du sol peuvent être mises en suspension dans l'air par l'action du vent ou par des phénomènes mécaniques comme le trafic routier ou les travaux agricoles. L'émission de ces particules dans l'air à partir du sol peut être à l'origine d'une contamination persistante de l'air, alors que toute émission industrielle a cessé ou être la cause d'une contamination des cultures ou d'une recontamination de sols dépollués à partir d'une source sol située à distance.

De nombreux facteurs peuvent influer sur la mise en suspension de particules contaminées à partir du sol. La valeur du flux de particules mis en suspension dépend :

- des caractéristiques du sol : existence d'un couvert végétal, granulométrie, propriétés chimiques, humidité du sol ;
- des conditions météorologiques : vitesse du vent, précipitations.

Dans le cas d'une pollution à partir d'un dépôt superficiel, on sait également que le flux de particules remis en suspension est corrélé avec le temps (ce flux diminue avec le temps).

La concentration de polluant dans l'air extérieur liée à la mise en suspension de particules à partir du sol sert au calcul de la contamination des végétaux par dépôt de particules du sol (cf. section 1.6.4.2) et au calcul de l'exposition par inhalation de polluant sous forme particulaire (cf. section 2.1).

Cette concentration est estimée à partir de la concentration de particules en suspension dans l'air issue du sol (P_{ss}) :

$$C_{ap,e_sol} = P_{ss} \times C_s$$ Équation 1.2.1

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
C_{ap,e_sol}	Concentration de polluant dans l'air extérieur sous forme particulaire, issue du sol	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C_s	Concentration de polluant dans le sol	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
P_{ss}	Concentration de particules en suspension dans l'air extérieur issues du sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	C ou E

P_{ss} est déterminée à partir de données empiriques. Malgré les nombreuses mesures réalisées, ce paramètre reste très incertain, compte-tenu des nombreux facteurs pouvant affecter sa valeur. Concrètement, il est souvent estimé à partir de la teneur totale de particules en suspension dans l'air, multipliée ou non par un facteur représentant la fraction de sol dans ces particules en suspension.

Dans le cas d'une pollution par dépôt surfacique, la contamination de l'air extérieur par remise en suspension des particules déposées au sol est parfois exprimée à partir du facteur de remise en suspension (K). On a alors :

$$C_{ap,e_sol} = K \times C'_s$$ Équation 1.2.2

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
C_{ap,e_sol}	Concentration de polluant dans l'air extérieur sous forme particulaire, issue du sol	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C'_s	Concentration de polluant au sol, exprimée par unité de surface	$M.L^{-2}$	$mg.m^{-2}$	C ou E
K	Facteur de remise en suspension	L^{-1}	m^{-1}	C ou E

P_{ss} et K sont liés par la relation suivante :

$$K = \frac{P_{ss}}{MV_s \times Z_s}$$ Équation 1.2.3

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
K	Facteur de remise en suspension	L^{-1}	m^{-1}	C ou E
P_{ss}	Concentration de particules en suspension dans l'air extérieur issues du sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	C ou E
MV_s	Masse volumique apparente de la couche de sol considérée	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
Z_s	Hauteur de la couche de sol	L	m	E

Pour estimer le risque lié à l'exposition par inhalation de polluant sous forme particulaire, la concentration de polluant adsorbé sur les particules inhalables est calculée en multipliant la concentration de polluant dans l'air sous forme particulaire par la fraction de particules ayant un diamètre inférieur à 10 µm.

Pour les particules issues du sol, on a

$$C_{ap,e_sol_inh} = C_{ap,e_sol} \times f_{p_inh}$$ Équation 1.2.4

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
C_{ap,e_sol_inh}	Concentration de polluant inhalable (PM10) sous forme particulaire dans l'air extérieur, et issue du sol	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C_{ap,e_sol}	Concentration de polluant dans l'air extérieur sous forme particulaire, issue du sol	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
f_{p_inh}	Fraction de particules en suspension dans l'air, issue du sol et inhalable	-	-	E

C_{ap,e_sol_inh} peut aussi être estimée à l'aide du modèle de Cowherd (1985) qui donne le flux moyen sur l'année de particules inhalables due à l'érosion éolienne (J_{part_10pm}). Un calcul de dispersion atmosphérique doit ensuite être réalisé à partir de ce flux et de la concentration de polluant associée aux particules pour obtenir C_{ap,e_sol_inh} (cf. section 1.2.3).

Ce modèle est basé sur les mesures de terrain de Gillette (1981) et est utilisé par l'US EPA (1991, 1996a). Le sol y est considéré comme un « réservoir illimité » (sol ne présentant pas une grande quantité d'éléments non érodables). L'expression donnée par Cowherd et al. correspond au flux moyen annuel de particules de diamètre inférieur ou égal à 10 µm mis en suspension dans l'air extérieur. **Elle n'est pas adaptée au calcul d'un flux de particules correspondant à un évènement météorologique ponctuel**.

Aux changements d'unités près, l'expression de Cowherd et al. est la suivante :

$$J_{p,e_10pm} = 10^{-8} \times (1 - f_v) \times \left(\frac{u_z}{u_z^*} \right)^3 \times F(x) \qquad \text{Équation 1.2.5}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
J_{p,e_10pm}	Flux moyen annuel de particules inhalables mis en suspension par le vent	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$kg.\ m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
u_z	Vitesse moyenne annuelle du vent à la hauteur z sur le site	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
u_z^*	Vitesse de vent équivalente à la vitesse de friction seuil à la hauteur de mesure de u_z	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
F(x)	Fonction intégrée en x ($x = 0{,}886 \times \frac{u_z^*}{u_z}$)	-	-	E
f_v	Fraction du sol couvert par de la végétation	-	-	E

Les deux documents de l'US EPA, faisant référence à l'équation de Cowherd et al., proposent des valeurs par défaut pour définir les paramètres de cette équation. Mais l'utilisation de cette équation sur un site spécifique nécessite de recourir aux données graphiques du rapport original.

Une représentation graphique de la fonction F(x) est donnée page 36 de ce rapport. En fonction de la valeur de x, Droppo et al. (1996) proposent également des expressions analytiques permettant d'approcher cette représentation graphique.

L'expression 1.2.5 met aussi en jeu la vitesse de friction seuil, qui peut être estimée à partir du diamètre modale des agrégats de sol (cf. figure 3.4 du rapport de Cowherd et al.).

Dans l'équation ci-dessus, la vitesse de friction seuil à utiliser est une vitesse de friction corrigée, tenant compte de la présence d'éléments non érodables (pierres de diamètre supérieure à 1 cm) à la surface du sol. La procédure à suivre pour définir ce facteur de correction est exposée dans le rapport de Cowherd et al. (cf. page 22 et figure 3.5).

Pour obtenir u_z^*, il faut ensuite calculer la vitesse de vent à la hauteur z qui correspond à cette vitesse de friction seuil corrigée, z étant la hauteur de

mesure de la vitesse du vent sur le site (mesure généralement effectuée à 10 mètres). La vitesse de vent à la hauteur z, équivalente à la vitesse de friction seuil peut être calculée à partir de la formule suivante :

$$u_z* = u* \times \frac{1}{0,4} \times \ln\left(\frac{z}{z_r}\right)$$ Équation 1.2.6

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
u_z*	Vitesse de vent équivalente à la vitesse de friction seuil à la hauteur de mesure de u_z	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
u^*	Vitesse de friction seuil corrigée	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
z	Hauteur de mesure de la vitesse du vent	L	m	E
z_r	Rugosité du sol	L	m	E

1.2.2. EMISSION DE POLLUANTS GAZEUX A LA SURFACE DU SOL

L'émission de polluants dans l'air sous forme gazeuse est estimée pour des polluants volatils ou semi-volatils. Les approches décrites ci-dessous se rapportent à une source de polluants présente dans le sol ou dans la nappe au début de la période d'étude. Elles ne sont pas adaptées pour estimer le flux de secondaire de polluants se volatilisant à partir d'un dépôt au sol en cours de formation par une installation en fonctionnement. La concentration dans l'air liée à la volatilisation d'un dépôt atmosphérique produit par une installation en fonctionnement est de fait considérée comme négligeable par rapport à la concentration dans l'air calculée à partir du flux direct émis par cette source. Après arrêt de l'installation, le polluant déposé et présent dans le sol peut être considéré comme une source sol, et il est alors possible de calculer le flux de polluant émis dans l'air à partir de la concentration de polluant dans le sol.

1.2.2.1. CAS D'UN SOL CONTAMINE

Le flux émis à la surface du sol est estimé à partir du flux de diffusion dans l'air et dans l'eau du sol (J_{dif_sol}) d'une part et du flux traversant la couche limite d'air située à la surface du sol (J_a) d'autre part.

Comme précédemment, **l'équilibre multiphasique entre l'air du sol, l'eau du sol et les particules du sol est supposé atteint.**

Le modèle proposé ne prend pas en compte :

- **l'atténuation de la source au cours du temps (transformations chimiques ou biologiques, lixiviation, volatilisation…) : l'état de la source est considérée comme stationnaire, ce qui correspond à une source infinie et implique un régime permanent ;**
- **la dégradation des polluants lors des transferts depuis la source ;**
- **les flux de convection dans le sol.**

1.2.2.1.1. CALCUL DU FLUX DE DIFFUSION A LA SURFACE DU SOL

Flux de diffusion dans la zone insaturée du sol

Localement, le flux de diffusion dans la zone insaturé du sol est donné par la loi de Fick :

$$J_{es} = D_{es} \times \frac{dC_{es}}{dz}$$ Équation 1.2.7

$$J_{as} = D_{as} \times \frac{dC_{as}}{dz}$$ Équation 1.2.8

avec J_{es} : flux de diffusion dans l'eau du sol,

J_{as} : flux de diffusion dans l'air du sol,

C_{es} : concentration de polluant dans l'eau du sol,

C_{as}: concentration de polluant dans l'air du sol,

D_{es} : coefficient de diffusion dans l'eau du sol,

D_{as} : coefficient de diffusion dans l'air du sol.

D'après l'équation 1.1.7, $C_{as} = H' \times C_{es}$ Équation 1.2.9

On peut donc écrire pour la couche de sol i :

$$J_{dif_sol,i} = J_{es,i} + J_{as,i} = DU_{a,i} \times \frac{dC_{as,i}}{dz}$$ Équation 1.2.10

avec $J_{dif_sol,i}$: flux de diffusion dans la couche i de la zone insaturée du sol,

$C_{as,i}$: concentration de polluant dans l'air du sol,

$DU_{a,i}$: coefficient de diffusion multiphasique de la couche i (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol),

$$DU_{a,i} = \frac{D_{es,i}}{H'} + D_{as,i}$$ Équation 1.2.11

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$DU_{a,i}$	Coefficient de diffusion multiphasique de la couche i (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
$D_{es,i}$	Coefficient de diffusion dans l'eau du sol de la couche i	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
$D_{as,i}$	Coefficient de diffusion dans l'air du sol de la couche i	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
H'	Constante de Henry (adimensionnelle : $H' = \frac{H}{R \times T_s}$)	-	-	C ou E

L'hypothèse de régime permanent et le principe de conservation de la masse impliquent que le flux de diffusion soit constant avec la profondeur,

d'où $\frac{dJ_{dif_sol}}{dz} = 0$ Équation 1.2.12

et $C_{as,i}(z) = C \times z + C'$ Équation 1.2.13

avec $C_{as,i}(z)$: concentration dans l'air du sol de la couche i, à la profondeur z par rapport au toit de la couche i,

C et C', deux constantes, déterminées par les conditions aux limites suivantes :

$C'=C_{as,i}(0)$ Équation 1.2.14

et $C = \frac{C_{as,i}(l_i) - C_{as,i}(0)}{l_i}$ Équation 1.2.15

avec l_i : épaisseur de la couche i.

D'après les équations 1.2.10,1.2.13 et 1.2.15, on peut écrire :

$$J_{dif_sol,i} = DU_{a,i} \times \frac{C_{as,i}(l_i) - C_{as,i}(0)}{l_i}$$ Équation 1.2.16

Pour un sol constitué de n couches homogènes successives, la concentration dans l'air au toit de la couche i est égale à la concentration dans l'air au bas de la couche i+1 (cf. Figure 4).

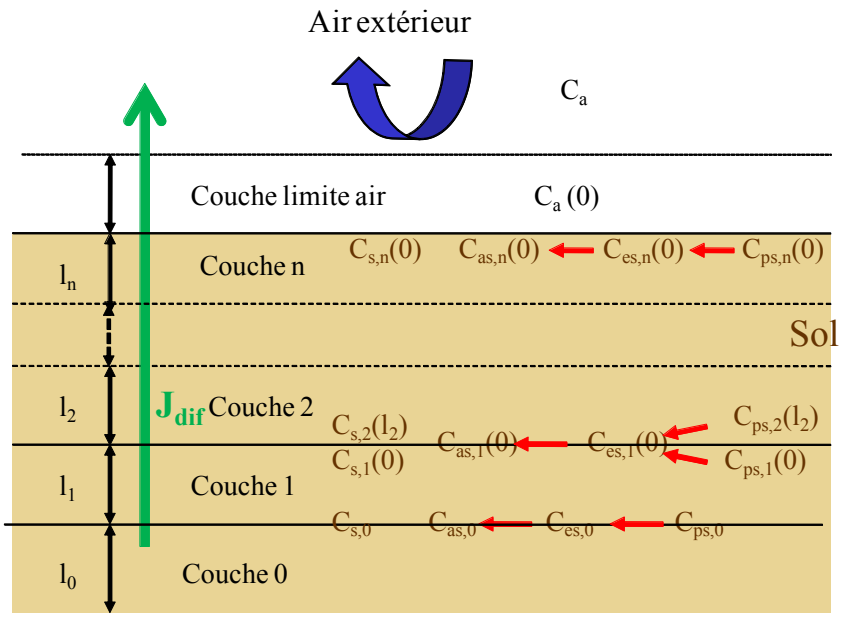


Figure 4 : Schéma de principe du modèle d'émission de vapeur du sol vers l'atmosphère

Le flux de diffusion à travers chaque couche du sol étant le même, on peut écrire :

$$\frac{DU_{a,i+1}}{l_{i+1}} \times (C_{as,i}(0) - C_{as,i+1}(0)) = \frac{DU_{a,i}}{l_i} \times (C_{as,i}(l) - C_{as,i}(0))$$ Équation 1.2.17

d'où $$C_{as,i}(0) = \frac{\frac{DU_{a,i+1}}{l_{i+1}} \times C_{as,i+1}(0) + \frac{DU_{a,i}}{l_i} \times C_{a,i}(l_i)}{\frac{DU_{a,i+1}}{l_{i+1}} + \frac{DU_{a,i}}{l_i}}$$ Équation 1.2.18

et $$J_{dif_sol} = \frac{1}{\frac{l_{i+1}}{DU_{a,i+1}} + \frac{l_i}{DU_{a,i}}} \times \left(C_{as,i}(0) - C_{as,i+1}(0)\right)$$ Équation 1.2.19

De proche en proche, il est possible alors d'exprimer le flux de diffusion en fonction de la profondeur (L) de la source dans la zone insaturée. On obtient :

$$J_{dif_sol} = DU_{a,eq} \times \frac{C_{as,0} - C_{as,n}}{L}$$ Équation 1.2.20

avec $C_{as,0}$: concentration de polluant dans l'air du sol à la profondeur L,

$C_{as,n} = C_{as,n}(0)$: concentration de polluant dans l'air du sol à la surface du sol, c'est-à-dire au toit de la couche n,

$DU_{a,eq}$: coefficient de diffusion multiphasique moyen (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol),

$$\frac{DU_{a,eq}}{L} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} \frac{l_i}{DU_{a,i}}}$$ Équation 1.2.21

$l_i/Du_{a,i}$ représente la résistance à la diffusion de la couche l_i. Dans le cas de n couches superposées, la résistance totale de l'ensemble des couches est égale à la somme des n résistances.

<u>Flux de diffusion dans la couche limite d'air</u>

Parallèlement, le flux de diffusion dans la couche limite d'air s'écrit :

$$J_a = \frac{D_a}{d_a} \times \left(C'_{ag} - C_{ag,e}\right)$$ Équation 1.2.22

avec $C_{ag,e}$: concentration de polluant sous forme gazeuse dans l'air extérieur,

C'_{ag} : concentration de polluant sous forme gazeuse dans la couche limite d'air,

D_a : coefficient de diffusion du polluant dans l'air,

d_a : hauteur de la couche limite d'air.

<u>Flux de diffusion à la surface du sol</u>

L'hypothèse de régime permanent et le principe de conservation de la masse conduit à l'égalité du flux de diffusion dans le sol et du flux de diffusion dans la couche limite d'air.

A l'équilibre, $C'_{ag} = C_{as,n}$

et l'égalité de J_a et de J_{dif_sol} permet d'écrire :

$$C_{as,n} = \frac{\frac{DU_{a,eq}}{L} \times C_{as,0} + \frac{D_a}{d_a} \times C_{ag,e}}{\frac{DU_{a,eq}}{L} + \frac{D_a}{d_a}}$$ Équation 1.2.23

d'où $$J_{dif} = \frac{1}{\frac{d_a}{D_a} + \frac{L}{DU_{a,eq}}} \times \left(C_{as,0} - C_{ag,e}\right)$$ Équation 1.2.24

Remarque : J_{dif} représente le flux de diffusion net entre le sol et l'atmosphère (flux de transfert par diffusion du sol vers l'air et flux de transfert par diffusion de l'atmosphère vers l'air).

Si la concentration de polluant gazeux dans l'air extérieur est faible par rapport à celle de l'air du sol à la profondeur L, on fait l'hypothèse pénalisante que $C_{ag,e} = 0$ et on écrit :

$$J_{dif} = \frac{C_{as,0}}{\frac{d_a}{D_a} + \frac{L}{DU_{a,eq}}}$$ Équation 1.2.25

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
J_{dif}	Flux de polluant gazeux à la surface du sol (source sol)	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
$C_{as,0}$	Concentration de polluant dans l'air du sol à la profondeur L	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{ag,e}$	Concentration de polluant sous forme gazeuse dans l'air extérieur	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$DU_{a,eq}$	Coefficient de diffusion multiphasique moyen sur la zone de transfert de longueur L considérée (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol) : cf. équation 1.2.21	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
D_a	Coefficient de diffusion du polluant dans l'air	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	E
L	Longueur de la zone de diffusion entre le point de concentration $C_{as,0}$ et la surface du sol	L	m	E
d_a	Hauteur de la couche limite d'air	L	m	E

1.2.2.1.2. LIMITES ASSOCIEES A CETTE APPROCHE ET MODELES ALTERNATIFS

1.2.2.1.2.1. PRISE EN COMPTE DE REMONTEES CAPILLAIRES JUSQU'A LA SURFACE

Le flux d'évaporation lié à d'éventuelles remontées capillaires jusqu'à la surface n'est pas pris en compte dans l'approche développée ci-dessus. Ce flux est un flux convectif qui correspond à l'évaporation, à la surface du sol, du polluant transporté par l'eau. Il peut s'écrire :

$$J_{conv_sol} = E_v \times C_{es}$$ Équation 1.2.26

et si l'équilibre multiphasique est atteint :

$$J_{conv_sol} = E_v \times \frac{C_{as}}{H'} \qquad \text{Équation 1.2.27}$$

avec J_{conv_sol} : flux d'évaporation dans le sol,

E_v : flux d'eau d'évaporation,

C_{es} : concentration de polluant dans l'eau du sol,

C_{as} : concentration de polluant dans l'air du sol,

H' : constante de Henry (adimensionnelle).

Le calcul du flux total résultant d'un flux de convection et d'un flux de diffusion est développé dans la section 1.3.1.1, consacrée à l'air intérieur. L'expression du flux total d'émission dans la zone insaturée du sol (J_{tot}) s'écrit de manière identique (cf. section 1.3.1.1.3), en remplaçant le flux porteur d'air (F_{is}) par le flux porteur d'évaporation, traduit en équivalent-flux-d'air (E_v/H').

Le flux de polluant est alors donné par l'équation suivante :

$$J_{tot} = \frac{E_v}{H'} \times \frac{C_{as,0} - e^{-\frac{Ev \quad L}{H' \; DU_{a,eq}}} C_{as,n}}{1 - e^{-\frac{Ev \quad L}{H' \; DU_{a,eq}}}} \qquad \text{Équation 1.2.28}$$

L'hypothèse de régime permanent et le principe de conservation de la masse conduit à l'égalité du flux traversant le sol (J_{tot}) et du flux traversant la couche limite d'air à la surface du sol (J_a). Des équations 1.2.22 et 1.2.28, on déduit l'expression de $C_{as,n}$:

$$C_{as,n} = \frac{\frac{E_v}{H' \times \left(1 - e^{-\frac{Ev \quad L}{H' \; DU_{a,eq}}}\right)} \times C_{as,0} + \frac{D_a}{d_a} \times C_{ag,e}}{\frac{D_a}{d_a} + \frac{E_v}{H'} \times \frac{e^{-\frac{Ev \quad L}{H' \; DU_{a,eq}}}}{1 - e^{-\frac{Ev \quad L}{H' \; DU_{a,eq}}}}} \qquad \text{Équation 1.2.29}$$

et

$$J_{tot} = \frac{E_v}{H'} \times \frac{\frac{D_a}{d_a} \times \left(C_{as,0} - C_{ag,e} \times e^{-\frac{Ev \quad L}{H' \; DU_{a,eq}}}\right)}{\left(1 - e^{-\frac{Ev \quad L}{H' \; DU_{a,eq}}}\right) \times \left(\frac{D_a}{d_a} + \frac{E_v}{H'} \times \frac{e^{-\frac{Ev \quad L}{H' \; DU_{a,eq}}}}{1 - e^{-\frac{Ev \quad L}{H' \; DU_{a,eq}}}}\right)} \qquad \text{Équation 1.2.30}$$

Si la concentration de polluant gazeux dans l'air extérieur est faible par rapport à celle de l'air du sol à la profondeur L, on fait l'hypothèse pénalisante que $C_{ag,e} = 0$ et on écrit :

$$J_{tot} = \frac{\frac{E_v}{H'} \times \frac{D_a}{d_a}}{\left(1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L}{DU_{a,eq}}}\right) \times \left(\frac{D_a}{d_a} + \frac{E_v}{H'} \times \frac{e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L}{DU_{a,eq}}}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L}{DU_{a,eq}}}}\right)} \times C_{as,0}$$

Équation 1.2.31

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
J_{tot}	Flux de polluant gazeux à la surface du sol (source sol)	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
$C_{as,0}$	Concentration de polluant dans l'air du sol à la profondeur L	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{ag,e}$	Concentration de polluant sous forme gazeuse dans l'air extérieur	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$DU_{a,eq}$	Coefficient de diffusion multiphasique moyen sur la zone de transfert de longueur L considérée (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol) : cf. équation 1.2.21	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
D_a	Coefficient de diffusion du polluant dans l'air	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	E
L	Longueur de la zone de diffusion entre le point de concentration $C_{as,0}$ et la surface du sol	L	m	E
d_a	Hauteur de la couche limite d'air	L	m	E
Ev	Flux d'eau d'évaporation	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
H'	Constante de Henry (adimensionnelle : $H' = \frac{H}{R \times T_s}$)	-	-	C ou E

1.2.2.1.2.2. QUANTITE MAXIMALE DE POLLUANT EMIS DANS L'AIR A PARTIR DU SOL

L'hypothèse d'une source de polluant infinie retenue pour le calcul du flux d'émission à partir du sol peut s'avérer très majorante. Le fait de ne pas prendre en compte l'atténuation de la pollution par volatilisation au cours du temps peut conduire à une surestimation du flux moyen émis sur une période d'exposition donnée, d'autant plus grande que la source de pollution est peu profonde.

A minima, il est donc nécessaire de vérifier que la quantité de polluant émise pendant la période considérée est inférieure à la quantité de polluant présente initialement dans le sol, soit :

$$\int_{T_1'}^{T_2'} (J_{dif} \times S_s) dt \leq MV_s \times C_s(T_1') \times V_{source_sol}(T_1')$$

Équation 1.2.32

ou $$\int_{T_1'}^{T_2'} (J_{tot} \times S_s) dt \leq MV_s \times C_s(T_1') \times V_{source_sol}(T_1')$$

Équation 1.2.33

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
J_{dif} ou J_{tot}	Flux de polluant gazeux à la surface du sol (source sol)	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
$V_{source_sol}(T_1')$	Volume de la source au temps T_1'	L^3	m^3	C ou E
MV_s	Masse volumique apparente de la couche de sol considérée	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
S_s	Surface d'émission	L^2	m^2	E
$C_s(T_1')$	Concentration de polluant dans la source au temps T_1'	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
T_1'	Début de la période considérée	T	s	E
T_2'	Fin de la période considérée	T	s	E

1.2.2.1.2.3. APPROCHE POUR UNE SOURCE DE POLLUANTS AFFLEURANT A LA SURFACE DU SOL

Dans le **cas d'une source de polluants affleurant à la surface du** sol et si l'estimation de la concentration dans l'air à partir des approches développées ci-dessus s'avère un élément sensible de l'étude réalisée, il est nécessaire d'utiliser d'autres approches de modélisation. On pourra en particulier se référer aux solutions présentées dans le document de l'US EPA (1996a) et issues des travaux de Jury et al. (1984, 1990).

Si les **phénomènes de convection et de dégradation dans le sol ne sont pas pris en compte**, l'équation de conservation de la masse dans le sol (ou seconde équation de Fick) s'écrit :

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = DU_a \times \frac{\partial^2 C_s}{\partial z^2} \qquad \text{Équation 1.2.34}$$

avec z : distance à partir de la surface du sol,

DU_a : coefficient de diffusion multiphasique dans la couche de sol étudiée (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol),

avec $DU_a = \frac{D_{es}}{H'} + D_{as}$ Équation 1.2.35

Aux conditions initiales suivantes : $C_s=C_s(0)$ pour t>0 et z=+ ∞ (profondeur infinie),

$C_s=0$ pour t>0 et z=0

l'équation 1.2.34 donne (Jury et al., 1984) :

$$J_{dif}(t) = MV_s \times C_s \times \sqrt{\frac{DU_a}{\pi \times \left(\frac{K_d \times MV_s}{H'} + \frac{\theta}{H'} + \alpha \right) \times t}} \qquad \text{Équation 1.2.36}$$

Cette solution repose sur les hypothèses suivantes :

- **une colonne de sol isotrope,**
- **une concentration de polluant uniforme dans le sol à l'instant initial,**

- **une concentration de polluant dans le sol correspondant à une concentration dans l'eau du sol inférieure à la limite de solubilité,**
- **le respect de l'équilibre multiphasique,**
- **l'absence de phénomène de convection et de dégradation,**
- **l'absence de la couche stagnante d'air à la surface du sol,**
- **une concentration de polluant dans l'air nulle.**

Pour une période d allant de T_2' à T_1', le flux d'émission moyen est alors égal à :

$$\bar{J}_{dif_moy}(d) = \frac{1}{T_2' - T_1'} \int_{T_1'}^{T_2'} J_{dif}(t)dt = 2 \times MV_s \times C_s \times \sqrt{\frac{DU_a}{\pi \times \left(\frac{K_d \times MV_s}{H'} + \frac{\theta}{H'} + \alpha \right)}} \times \left(\frac{\sqrt{T_2'} - \sqrt{T_1'}}{T_2' - T_1'} \right)$$

Équation 1.2.37

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
J_{dif} (t)	Flux de polluant gazeux à la surface du sol (source sol) au temps t	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
$\bar{J}_{dif_moy}(d)$	Flux de polluant gazeux moyen à la surface du sol (source sol), sur la période d considérée	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
C_s	Concentration uniforme de polluant dans le sol	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
DU_a	Coefficient de diffusion multiphasique du polluant dans le sol (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
D_{es}	Coefficient de diffusion dans l'eau du sol : cf. section 1.2.2.1.3	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
D_{as}	Coefficient de diffusion dans l'air du sol : cf. section 1.2.2.1.3	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
H'	Constante de Henry sous forme adimensionnelle $(H' = \frac{H}{R \times T_s})$	-	-	C ou E
K_d	Coefficient de partition particules du sol / eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
θ	Fraction volumique occupée par l'eau du sol	-	-	E
α	Fraction volumique occupée par l'air du sol	-	-	E
MV_s	Masse volumique apparente de la couche de sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
T_1'	Début de la période considérée	T	s	E
T_2'	Fin de la période considérée	T	s	E

Compte-tenu de l'hypothèse d'une source infinie, la quantité de polluant émise sur une période donnée calculée à partir de l'équation 1.2.37 doit aussi être confrontée à la quantité totale de polluant présente dans le sol.

Jury et al. (1990) ont également développé une solution à l'équation 1.2.34 pour une source finie. Avec les mêmes hypothèses que ci-dessus, mais avec les conditions aux limites suivantes : $C_s=C_s(0)$ à t=0,

$C_s= 0$ pour t=0 et $z>H_0$,

C_s=0 pour t>0 et z=0

l'équation 1.2.34 donne :

$$J_{dif}(t) = MV_s \times C_s(0) \times \sqrt{\frac{DU_a}{\pi \times \left(\frac{K_d \times MV_s}{H'} + \frac{\theta}{H'} + \alpha\right) \times t}} \times \left(1 - \exp^{-\frac{H_0^2 \times \left(\frac{K_d \times MV_s}{H'} + \frac{\theta}{H'} + \alpha\right)}{4 \times DU_a \times t}}\right)$$

Équation 1.2.38

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$J_{dif}(t)$	Flux de polluant gazeux à la surface du sol au temps t (source sol)	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
$C_s(0)$	Concentration uniforme de polluant dans la couche de sol de hauteur H_0 à t=0	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
DU_a	Coefficient de diffusion multiphasique dans le sol (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
H'	Constante de Henry sous forme adimensionnelle $(H' = \frac{H}{R \times T_s})$	-	-	C ou E
θ	Fraction volumique occupée par l'eau du sol	-	-	E
α	Fraction volumique occupée par l'air du sol	-	-	E
MV_s	Masse volumique apparente de la couche de sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
H_0	Epaisseur (=profondeur du bas) de la couche polluée à t=0	L	m	E

1.2.2.1.3. CALCUL DES COEFFICIENTS DE DIFFUSION DANS L'AIR ET L'EAU DU SOL

Le coefficient de diffusion dans l'air du sol est calculé à partir du coefficient de diffusion du polluant dans l'air, en tenant compte de la tortuosité du milieu (qui rend compte des détours que doit parcourir le polluant pour atteindre la surface), selon l'expression fournie par Millington et Quirk (1961) :

$$D_{as} = D_a \times \frac{\alpha^{\frac{10}{3}}}{n^2}$$

Équation 1.2.39

De même, le coefficient de diffusion dans l'eau du sol est calculé à partir du coefficient de diffusion du polluant dans l'eau, selon l'expression suivante :

$$D_{es} = D_e \times \frac{\theta^{\frac{10}{3}}}{n^2}$$

Équation 1.2.40

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
D_{es}	Coefficient de diffusion dans l'eau du sol	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
D_{as}	Coefficient de diffusion dans l'air du sol	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
D_e	Coefficient de diffusion du polluant dans l'eau	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	E
D_a	Coefficient de diffusion du polluant dans l'air	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	E
n	Porosité du sol (fraction volumique) : $n=\alpha+\theta$	-	-	C ou E
θ	Fraction volumique occupée par l'eau du sol	-	-	E
α	Fraction volumique occupée par l'air du sol	-	-	E

1.2.2.2. CAS D'UNE NAPPE CONTAMINEE

Quand la source de contamination est la nappe, le transfert à travers la frange capillaire peut être pris en compte.

Flux dans la frange capillaire

Le transfert de polluant à travers la frange capillaire met en œuvre :

- un flux de convection lié à l'évaporation,
- un flux de diffusion dans l'air[4] et dans l'eau.

Localement, dans la frange capillaire, le flux d'évaporation s'écrit :

$$J_{conv_cap} = E_v \times C_{es_cap} \qquad \text{Équation 1.2.41}$$

où $$C_{es_cap} = \frac{C_{as_cap}}{H'} \qquad \text{Équation 1.2.42}$$

avec $J_{conv,cap}$: flux d'évaporation dans la frange capillaire,

E_v : flux d'eau d'évaporation,

C_{es_cap} : concentration de polluant dans l'eau interstitielle de la frange capillaire,

C_{as_cap} : concentration de polluant dans l'air de la frange capillaire,

H' : constante de Henry (adimensionnelle).

Le flux diffusif s'écrit comme dans la zone insaturée, en remplaçant le coefficient de diffusion multiphasique du sol par celui de la frange capillaire, et la concentration dans l'air du sol par celle de l'air de la frange capillaire.

$$J_{dif_cap} = DU_{eq_cap} \times \frac{dC_{as_cap}}{dz} \qquad \text{Équation 1.2.43}$$

[4] Compte-tenu de la forte teneur en eau du sol au niveau de la frange capillaire, toutes connexions entre les bulles d'air résiduelles et toute diffusion continue dans l'air peuvent être bloquées. Ici, le choix a été fait malgré tout de présenter ici une expression complète du flux de diffusion. *In fine*, l'équation finale obtenue peut être utilisée et la paramétrisation permet de retenir ou non la diffusion dans l'air au niveau de la frange capillaire. Il convient de noter que, compte-tenu de la diffusivité très faible dans l'eau par rapport à l'air, tenir compte de la diffusion dans l'air au niveau de la frange capillaire accroît fortement le phénomène de diffusion.

Le calcul du flux total résultant d'un flux de convection et d'un flux de diffusion est développé dans la section 1.3.1.1 pour la zone insaturée du sol. L'expression du flux total d'émission à travers la frange capillaire est développée dans la section 1.3.1.2. Son expression est la suivante :

$$J_{tot_cap} = \frac{E_v}{H'} \frac{C_{as_nap} - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}} C_{as,0}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}$$ Équation 1.2.44

avec $C_{as,0}$: concentration de polluant dans l'air du sol en haut de la frange capillaire,

L_{cap} : épaisseur de la frange capillaire,

$C_{as,nap}$: concentration de polluant dans l'air du sol à la surface de la nappe.

et $C_{as_nap} = H' \times C_{e_nap}$ Équation 1.2.45

avec C_{e_nap} : concentration sous forme dissoute dans la nappe

Flux à la surface du sol

L'hypothèse de régime permanent et le principe de conservation de la masse conduit à l'égalité du flux à la surface du sol (J_{tot}) et du flux traversant la frange capillaire (J_{tot_cap}). On a donc :

$$J_{tot} = \frac{E_v}{H'} \times \frac{C_{as_nap} - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}} C_{as,0}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}$$ Équation 1.2.46

1. **Si le polluant considéré est plus volatil que l'eau et en l'absence de remontées capillaires jusqu'à la surface du sol,** $C_{as,0}$ est calculée à partir des équations 1.2.24 et 1.2.44, en considérant L comme l'épaisseur de la couche insaturée,

$$\text{d'où } C_{as,0} = \frac{\frac{E_v}{H'} \times \frac{C_{as_nap}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}} + \frac{C_{ag,e}}{\frac{L}{DU_{a,eq}} + \frac{d_a}{D_a}}}{\frac{E_v}{H'} \times \frac{e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}} + \frac{1}{\frac{L}{DU_{a,eq}} + \frac{d_a}{D_a}}}$$ Équation 1.2.47

Si la concentration de polluant dans l'air extérieur sous forme gazeuse est faible par rapport à la concentration dans l'air en haut de la frange capillaire, on fait l'hypothèse pénalisante que $C_{ag,e} = 0$ et on écrit :

$$C_{as,0} = \frac{\frac{E_v}{H'} \times \frac{C_{as_nap}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}}{\frac{E_v}{H'} \times \frac{e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}} + \frac{1}{\frac{L}{DU_{a,eq}} + \frac{d_a}{D_a}}}$$ Équation 1.2.48

2. **Si la nappe est peu profonde et que la frange capillaire affleure à la surface du sol**, $C_{as,0}$ est calculée à partir des équations 1.2.22 et 1.2.44, en considérant $C_{as,0}$ égale à C'_{ag} à l'équilibre,

d'où $$C_{as,0} = \frac{\frac{E_v}{H'} \times \frac{C_{as_nap}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}} + \frac{D_a}{d_a} \times C_{ag,e}}{\frac{E_v}{H'} \times \frac{e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}} + \frac{D_a}{d_a}}$$ Équation 1.2.49

Si la concentration de polluant gazeux dans l'air extérieur est faible par rapport à la concentration dans l'air en haut de la frange capillaire, on fait l'hypothèse pénalisante que $C_{ag,e} = 0$ et on écrit :

$$C_{as,0} = \frac{\frac{E_v}{H'} \times \frac{C_{as_nap}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}}{\frac{E_v}{H'} \times \frac{e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}} + \frac{D_a}{d_a}}$$ Équation 1.2.50

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
J_{tot}	Flux de polluant gazeux à la surface du sol (source nappe)	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
$C_{as,0}$	Concentration de polluant dans l'air en haut de la frange capillaire	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
E_v	Flux d'eau d'évaporation	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
$C_{ag,e}$	Concentration de polluant gazeux dans l'air extérieur	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C_{as_nap}	Concentration de polluant dans l'air à la surface de la nappe	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C_{e_nap}	Concentration de polluant dans l'eau de la nappe sous forme dissoute	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$DU_{a,eq}$	Coefficient de diffusion multiphasique moyen dans la zone insaturée du sol (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol) : cf. équation 1.2.21	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
DU_{eq_cap}	Coefficient de diffusion multiphasique moyen dans la frange capillaire (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol) : cf. équation 1.2.21	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
D_a	Coefficient de diffusion du polluant dans l'air	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
L	Epaisseur de la zone insaturée	L	m	E
L_{cap}	Epaisseur de la frange capillaire	L	m	E
d_a	Hauteur de la couche limite d'air	L	m	E
H'	Constante de Henry (adimensionnelle : $H' = \frac{H}{R \times T_s}$)	-	-	C ou E

Remarques :

1. L'estimation de la concentration dans l'eau de la frange capillaire et de la nappe respectivement par les équations 1.2.42 et 1.2.45 correspond à une hypothèse éventuellement majorante où l'équilibre multiphasique est supposé atteint.
2. Dans le cas d'une source de polluant immergée (exemple : polluant plus dense que l'eau) et d'un aquifère « mal mélangé », le transfert dans la nappe doit être pris en compte. Dans ce cas, le flux de transfert est estimé en considérant la zone saturée comme une couche supplémentaire (sans air) de la frange capillaire et en intégrant la diffusion dans l'eau de la nappe dans le modèle.

   Pour cela, dans les équations 1.2.43 à 1.2.50,

   - le coefficient de diffusion DU_{eq_cap} est remplacé par un coefficient de diffusion multicouche $DU_{eq_cap_nap}$ intégrant le coefficient de diffusion dans l'eau de la nappe suivant l'équation 1.2.21 (la résistance de l'ensemble des couches est égale à la somme des résistances des différentes couches) ;
   - l'épaisseur de la frange capillaire L_{cap} est remplacée par la somme des épaisseurs de la frange capillaire et de la nappe à traverser L_{cap_nap}.

1.2.3. DISPERSION ATMOSPHERIQUE ET CALCUL DE LA CONCENTRATION DANS L'AIR A PARTIR D'UN FLUX A LA SURFACE DU SOL

Dans le cas d'émissions atmosphériques de polluants à partir d'une cheminée, l'INERIS utilise des logiciels de dispersion atmosphérique pour calculer les concentrations attendues dans l'air.

Pour des situations simples, il est possible d'utiliser des modèles fondés sur une approche gaussienne. Les modèles gaussiens de première génération utilisent une classification de la stabilité atmosphérique (exemple : classification de Pasquill), tandis que les modèles gaussiens de seconde génération reposent sur une représentation paramétrique de la hauteur de la couche limite. Cette seconde approche permet de caractériser de manière continue les conditions de l'atmosphère et de rendre compte des modifications des propriétés de la couche limite avec l'altitude.

La plupart de ces modèles incluent des paramétrisations spécifiques permettant de tenir en compte de l'effet des bâtiments et du relief dans des conditions simples, en calculant les changements du champ de vent dû au relief.

Les données d'entrée nécessaires à l'utilisation de ces modèles concernent :

- la description de la source de pollution : localisation, géométrie, caractéristiques des rejets et des polluants, flux émis,
- les données météorologiques séquentielles,
- les caractéristiques du domaine d'étude susceptibles d'influencer la dispersion : rugosité, relief, bâtiments.

Pour des situations plus complexes à modéliser (ex : vallées encaissées), des modèles eulériens sont utilisés pour représenter le champ de vent et des modèles eulériens, lagrangiens ou à bouffées gaussiennes sont utilisés pour modéliser la dispersion. A titre d'information, le lecteur peut se reporter par exemple au rapport du LCSQA (2002).

Certains modèles gaussiens permettent aussi de prendre en compte des sources surfaciques et/ou volumiques, éventuellement situées au sol. Néanmoins, selon le niveau d'analyse requis, et compte-tenu des incertitudes liées au calcul du flux d'émission surfacique, un simple bilan massique peut parfois être suffisant pour estimer la concentration dans l'air à l'aval immédiat de la source. Cette approche est parfois appelée « modèle boîte » (cf. Figure 5). Le seul paramètre météorologique requis est alors la vitesse du vent et la concentration dans l'air est supposée homogène dans le volume de dispersion considéré.

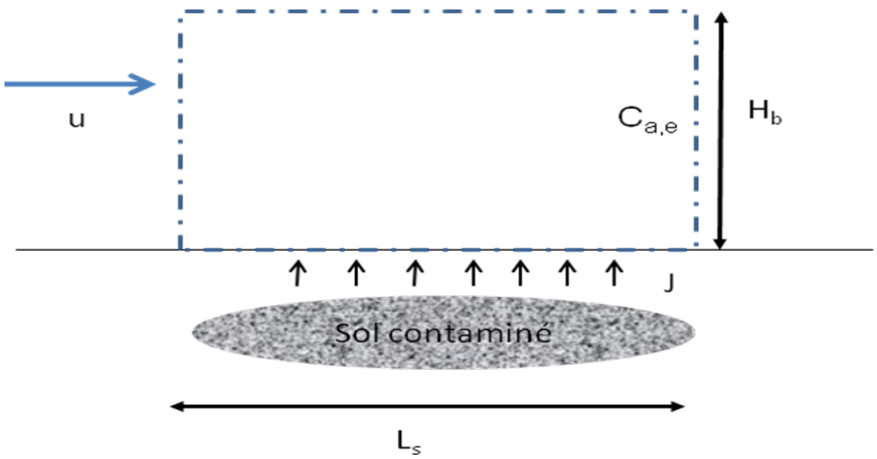


Figure 5 : Schéma de principe du « modèle boîte »

Dans le cas d'une source dans le sol ou dans la nappe localisée au niveau du site étudié, l'équation de bilan de masse permet d'écrire :

$$H_b \times L_s \times l_s \times \frac{dC_{a,e}}{dt} = J \times L_s \times l_s - C_{a,e} \times u \times H_b \times l_s \qquad \text{Équation 1.2.51}$$

L'état stationnaire étant rapidement atteint[5], on peut écrire :

$$C_{a,e} = \frac{J \times L_s}{u \times H_b} \qquad \text{Équation 1.2.52}$$

Symbole	Paramètre	Dimensions	Unités	Statut
$C_{a,e}$	Concentration dans l'air extérieur attribuable à la source sol ou nappe à l'aval immédiat du site	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
J	Flux de polluant par unité de surface et de temps (flux particulaire et/ou gazeux avec une source sol ou nappe localisée au niveau du site)	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
H_b	Hauteur de la « boîte » (généralement prise égale à la hauteur de respiration des individus)	L	m	E
L_s	Dimension de la source parallèle à la direction du vent	L	m	E
u	Vitesse du vent dans la boîte	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E

(l_s : Dimension de la source d'émission perpendiculaire à la direction du vent)

[5] Quand T =3 x L_s / u, $C_{a,e}$ atteint 95% de sa valeur à l'état stationnaire (voir démonstration en section 1.7.1.2.3). Par conséquent, pour un site contaminé de 100 mètres de long, avec un vent de 3 $m.s^{-1}$, la concentration de polluant dans l'air à l'aval est proche du niveau stationnaire après 100 secondes d'émission.

Remarque : La concentration de polluant dans l'air calculée à l'aide du bilan massique est la concentration dans l'air extérieur attribuable à la source étudiée (hors bruit de fond). Elle est calculée à partir des sommes des flux particulaire et gazeux, eux-mêmes calculés à partir des concentrations dans le sol, hors bruit de fond. Même si le flux net de diffusion dépend de la différence entre la concentration totale dans l'air du sol au niveau de la source et de la concentration gazeuse totale à la surface du sol, ce mode de calcul a été retenu, car les concentrations de bruit de fond sont supposées faibles par rapport à la concentration attribuable à la source dans l'air du sol, au niveau de cette source.

La concentration totale de polluant dans l'air extérieur est ensuite obtenue en ajoutant à la concentration dans l'air extérieur attribuable à la source sol ou à la source nappe ($C_{a,e}$), la concentration de bruit de fond dans l'air extérieur (cf. section 4).

1.3. MILIEU « AIR INTERIEUR »

Comme pour l'air extérieur, la concentration de polluant dans l'air intérieur est égale à la somme des concentrations de polluant présent dans l'air sous forme gazeuse et sous forme particulaire.

L'INERIS n'a pas travaillé sur la modélisation du transfert des polluants particulaires de l'air extérieur vers l'air intérieur, ni sur celle des flux de polluants particulaires à partir du sol en milieu intérieur. La seule approche utilisée jusqu'alors est identique à celle présentée dans CSOIL (RIVM, 2007). Elle consiste à calculer la concentration de polluant sous forme particulaire dans l'air intérieur en multipliant la concentration de polluant sous forme particulaire dans l'air extérieur par un facteur représentant la fraction de particules transférée de l'extérieur vers l'intérieur :

$$C_{ap,i} = C_{ap,e} \times f_{ext_int}$$ Équation 1.3.1

Symbole	Paramètre	Dimensions	Unités	Statut
$C_{ap,i}$	Concentration de polluant sous forme particulaire dans l'air intérieur	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{ap,i}$	Concentration de polluant sous forme particulaire dans l'air extérieur	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
f_{ext_int}	fraction de particules transférée de l'extérieur vers l'intérieur	-	-	E

Le reste de cette section sera donc entièrement consacré à l'estimation de la concentration de polluant gazeux dans l'air intérieur.

Dans le cas de pollution des sols par des substances organiques volatiles, le transfert de vapeurs depuis les sols jusqu'à l'air intérieur, et l'inhalation qui s'en suit, peut constituer la voie d'exposition principale.

Trois modèles d'émission de vapeurs depuis les sols vers l'air intérieur sont classiquement utilisés en France :

- le modèle de Johnson et Ettinger (1991), recommandé par l'US EPA (2004a), qui prend en compte la convection et la diffusion des vapeurs dans le sol et au niveau du plancher d'un bâtiment ;
- le modèle VOLASOIL (Waitz et al., 1996), actuellement recommandé par le RIVM (institut néerlandais pour la protection de la santé et de l'environnement). Ce modèle conçu pour représenter le transfert des polluants dans l'air intérieur d'un bâtiment construit sur vide sanitaire à partir d'une source dans le sol ou dans une nappe peu profonde, prend en compte la convection et la diffusion des vapeurs dans le sol et la convection à travers le plancher ;
- le modèle anciennement recommandé par le RIVM, et utilisé dans la version de 1994 de CSOIL (van den Berg, 1994), dans HESP (Veerkamp et ten Berge, 1994, Shell Global Solutions, 1995) ou dans Risc Human (Van Hall Larestein). Ce modèle prend en compte l'évaporation des contaminants et la diffusion des vapeurs du sol vers le vide sanitaire.

Cette section présente une approche basée sur les principes de VOLASOIL, mais modifiée et généralisée, afin de pouvoir considérer plusieurs couches de sol de nature différente ou bien une (ou plusieurs) couche(s) de sol sur la(les)quelle(s) repose le plancher du bâtiment ;

Une seconde approche correspondant au modèle de Johnson et Ettinger sera intégrée à ce document ultérieurement. En attendant, le lecteur peut se reporter au document de l'US EPA de 2004.

L'approche utilisée dans CSOIL n'est pas reprise, car elle constitue un cas particulier de celle de VOLASOIL, celui où l'effet de la convection est négligeable.

1.3.1. APPROCHE DERIVEE DU MODELE VOLASOIL

Cette approche a été détaillée dans deux documents (Hazebrouck et al., 2005, DRC-05-57281-DESP/R01a), sur lesquels la description ci-dessous est basée. Le lecteur pourra s'y reporter pour disposer d'informations complémentaires, notamment en termes de paramétrage.

Cette approche, dérivée de VOLASOIL, permet de traiter les cas où la source de contamination se situe dans la zone insaturée et ceux où la nappe est contaminée.

Elle permet de prendre en compte :

- quatre compartiments successifs : la zone saturée, la frange capillaire, la zone non saturée et l'air intérieur ;
- trois mécanismes de transfert : la diffusion dans l'eau de la zone non saturée et de la frange capillaire, la diffusion dans l'air de la zone non saturée et de la frange capillaire et la convection dans l'air de la zone non saturée et de la zone capillaire[6].

Comme dans les sections précédentes, le modèle suppose l'équilibre multiphasique entre l'air du sol, l'eau du sol et les particules du sol.

[6] La diffusion dans l'eau de la zone insaturée, la diffusion dans l'air de la frange capillaire et la convection, liée à l'évaporation à partir de la frange capillaire ne sont pas prises en compte dans le modèle VOLASOIL original (Waitz et al., 1996)

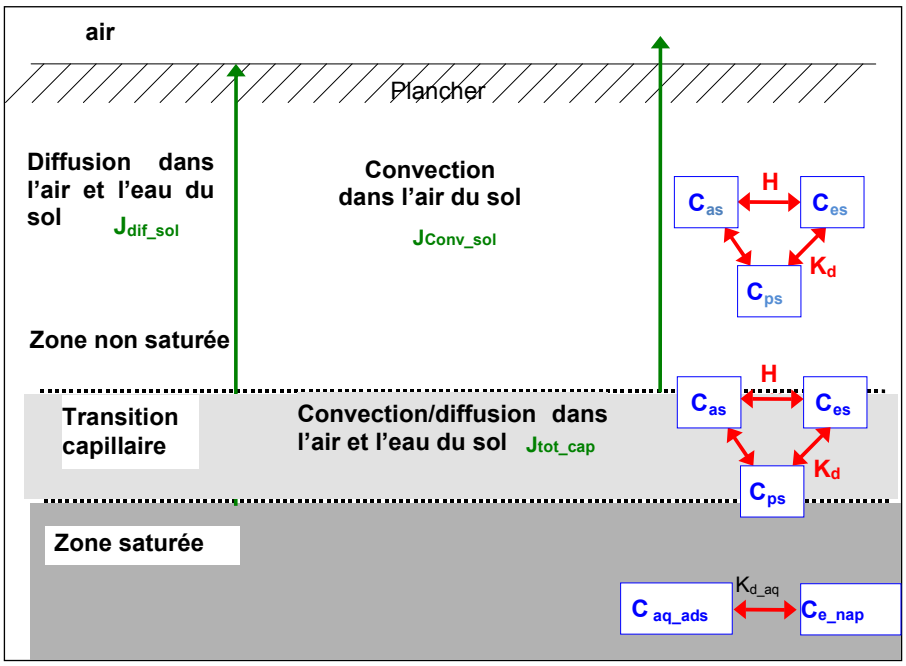


Figure 6: Schéma de principe du modèle d'émission de vapeur du sol vers l'air d'un bâtiment

En revanche, le modèle ne prend pas en compte :

- l'atténuation naturelle de la source au cours du temps : l'état de la source est considérée comme stationnaire, ce qui correspond à une source infinie et implique un régime permanent ;
- la dégradation des polluants lors des transferts entre la source et la surface du sol.

1.3.1.1. FLUX TOTAL D'EMISSION A TRAVERS LA ZONE INSATUREE DU SOL

Selon le type de construction, on considère le flux d'émission, soit à travers la zone insaturée du sol jusqu'au vide sanitaire, soit à travers la zone insaturée du sol et la dalle de béton formant le plancher du lieu de vie.

1.3.1.1.1. EXPRESSION DES DIFFERENTS FLUX

Flux de convection

Un flux de convection entre la zone insaturée et le bâtiment (vide sanitaire ou lieu de vie) est supposé généré par la différence de pression entre ces deux milieux. Cette différence de pression peut être due :

- à la différence de température liée au chauffage,
- à la ventilation mécanique à l'intérieur de l'habitation,
- dans une moindre mesure, à l'action des vents sur les murs du bâtiment.

Localement, le flux de convection s'écrit :

$$J_{conv} = F_{is} \times C_{as} \qquad \text{Équation 1.3.2}$$

avec C_{as} : concentration de polluant dans l'air du sol,

F_{is} : flux d'air du sol vers le bâtiment (zone d'habitation, vide sanitaire ou sous-sol).

Flux de diffusion

Comme pour l'émission vers l'air extérieur (cf. section 1.2.2.1.1), l'expression locale du flux de diffusion dans la zone insaturée est donnée par la loi de Fick :

$$J_{dif_sol} = D_{es} \times \frac{dC_{es}}{dz} + D_{as} \times \frac{dC_{as}}{dz}$$ Équation 1.3.3

ou $$J_{dif_sol} = DU_a \times \frac{dC_{as}}{dz}$$ Équation 1.3.4

avec C_{es} : concentration de polluant dans l'eau du sol,

DU_a : coefficient de diffusion multiphasique dans le sol (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol) :

$$DU_a = \frac{D_{es}}{H'} + D_{as}$$ Équation 1.3.5

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
DU_a	Coefficient de diffusion multiphasique dans le sol (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
D_{es}	Coefficient de diffusion dans l'eau du sol (l'expression de D_{es} est donnée dans la section 1.2.2.1.3)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
D_{as}	Coefficient de diffusion dans l'air du sol (l'expression de D_{as} est donnée dans la section 1.2.2.1.3)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
H'	Constante de Henry (adimensionnelle : $H' = \frac{H}{R \times T_s}$)	-	-	C ou E

Flux total à travers la zone insaturée du sol

Localement, le flux total d'émission dans la zone insaturée (J_{tot}) est donc égal à :

$$J_{tot} = F_{is} \times C_{as} + DU_a \times \frac{dC_{as}}{dz}$$ Équation 1.3.6

Remarque : le flux d'évaporation lié à d'éventuelles remontées capillaires jusqu'à la surface (par exemple, cas d'une cave avec un sol en terre battue), n'est pas considéré ici. Il pourrait être pris en compte, comme pour l'air extérieur, en ajoutant un deuxième flux convectif. Ce flux serait égal à : $J_{conv,sol} = E_v \times \frac{C_{as}}{H'}$ (cf. section 1.2.2.1.2.1).

1.3.1.1.2. CALCUL DU FLUX TOTAL DANS LE CAS D'UNE MONOCOUCHE

On considère le cas d'une couche de sol homogène allant de la source de contamination jusqu'à la surface du sol. Les notations suivantes sont adoptées :

- $C_{as,i}$ (z) : concentration de polluant dans l'air du sol, dans la couche i en fonction de la profondeur z depuis le toit de la couche,
- l_i : épaisseur de la couche i,
- $DU_{a,i}$: coefficient de diffusion multiphasique dans la couche i.

D'après **les hypothèses de régime permanent et de conservation de la masse**, le flux J_{tot} est constant avec la profondeur,

d'où $\frac{dJ_{tot}}{dz} = 0$, Équation 1.3.7

et $F_{is} \times \frac{dC_{as,i}}{dz} + DU_{a,i} \times \frac{d^2 C_{as,i}}{dz^2} = 0$ Équation 1.3.8

La solution de cette équation différentielle est donnée par :

$$C_{as,i}(z) = - F_{is} \times DU_{a,i} \times C_i \times e^{-\frac{F_{is}}{DU_{a_i}} z} + C_i'$$ Équation 1.3.9

avec C_i et C'_i deux constantes, déterminées par les conditions aux limites de la couche i.

En posant : $\chi_i = e^{-\frac{F_{is}}{DU_{a,i}} \times l_i}$, ces conditions aux limites s'écrivent :

$$C_{as,i}(l_i) - C_{as,i}(0) = -F_{is} \times DU_{a,i} \times (\chi_i - 1) \times C_i$$ Équation 1.3.10

et $C_{as,i}(0) = -F_{is} \times DU_{a,i} \times C_i + C_i'$ Équation 1.3.11

d'où $C_i = \frac{C_{as,i}(l_i) - C_{as,i}(0)}{F_{is} \times DU_{a,i} \times (1 - \chi_i)}$ Équation 1.3.12

et $C_i' = \frac{C_{as,i}(l_i) - C_{as,i}(0) \times \chi_i}{(1 - \chi_i)}$ Équation 1.3.13

En remplaçant dans l'équation du flux d'émission local, $C_{as,i}$ par l'équation 1.3.9, ainsi que C_i et C_i' par les expressions 1.3.12 et 1.3.13, on obtient :

$$J_{tot} = F_{is} \times C_i' = \frac{F_{is}}{1 - \chi_i} \times (C_{as,i}(l_i) - C_{as,i}(0) \times \chi_i)$$ Équation 1.3.14

d'où $J_{tot} = \frac{F_{is}}{1 - e^{-\frac{F_{is}}{DU_{a,i}} \times l_i}} \times \left(C_{as,i}(l_i) - C_{as,i}(0) \times e^{-\frac{F_{is}}{DU_{a,i}} \times l_i} \right)$ Équation 1.3.15

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
J_{tot}	Flux de polluant gazeux dans la zone insaturée du sol	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
F_{is}	Flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
$C_{as,i}(0)$	Concentration de polluant dans l'air du sol, au toit de la couche i	$M.M^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{as,i}(l_i)$	Concentration de polluant dans l'air du sol, en bas de la couche i	$M.M^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
l_i	Epaisseur de la couche i	L	m	E
$DU_{a,i}$	Coefficient de diffusion multiphasique dans la couche i du sol (exprimé à partir de la concentration dans l'air du sol)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E

Remarque : cette formule se retrouve dans le document de Waitz et al. (page 68, formule 74 et page 13, formule 16), en remplaçant $C_{as,i}(0)$ par la concentration dans l'air à la surface (C_0), $C_{as,i}(l_i)$ par la concentration dans l'air du sol au niveau de la source (C_{sa}) et l_i par la hauteur de la colonne de sol entre la source et le vide sanitaire (L_s). Elle est ensuite simplifiée, en considérant que la concentration dans l'air à la surface est négligeable devant C_{sa}.

1.3.1.1.3. CALCUL DU FLUX TOTAL DANS LE CAS MULTICOUCHE

Si on considère, cette fois, n couches de sol homogènes successives, indexées en i croissants depuis la profondeur de contamination (i=0) jusqu'à la surface du sol (i=n pour la couche en contact avec l'air), on déduit, de l'équation 1.3.15, pour chaque couche i :

$$C_{as,i}(l_i) = \frac{J_{tot}}{F_{is}} \times (1 - \chi_i) + C_{as,i}(0) \times \chi_i \qquad \text{Équation 1.3.16}$$

avec $\chi_i = e^{-\frac{F_{is}}{DU_{a,i}} \times l_i}$

La concentration dans l'air du sol étant continue, les valeurs de C_{as} au toit de la couche i et au plancher de la couche i+1 sont égales (cf. Figure 7). On note $C_{as,i}$ cette teneur à l'intercouche :

$$C_{as,i} = C_{as,i}(0) = C_{as,i+1}(l_{i+1}) \qquad \text{Équation 1.3.17}$$

Les hypothèses de régime permanent et de conservation de la masse se traduisent par un flux d'émission J_{tot} constant avec la profondeur. On a donc pour tout i :

$$J_{tot} = J_{tot,i} \qquad \text{Équation 1.3.18}$$

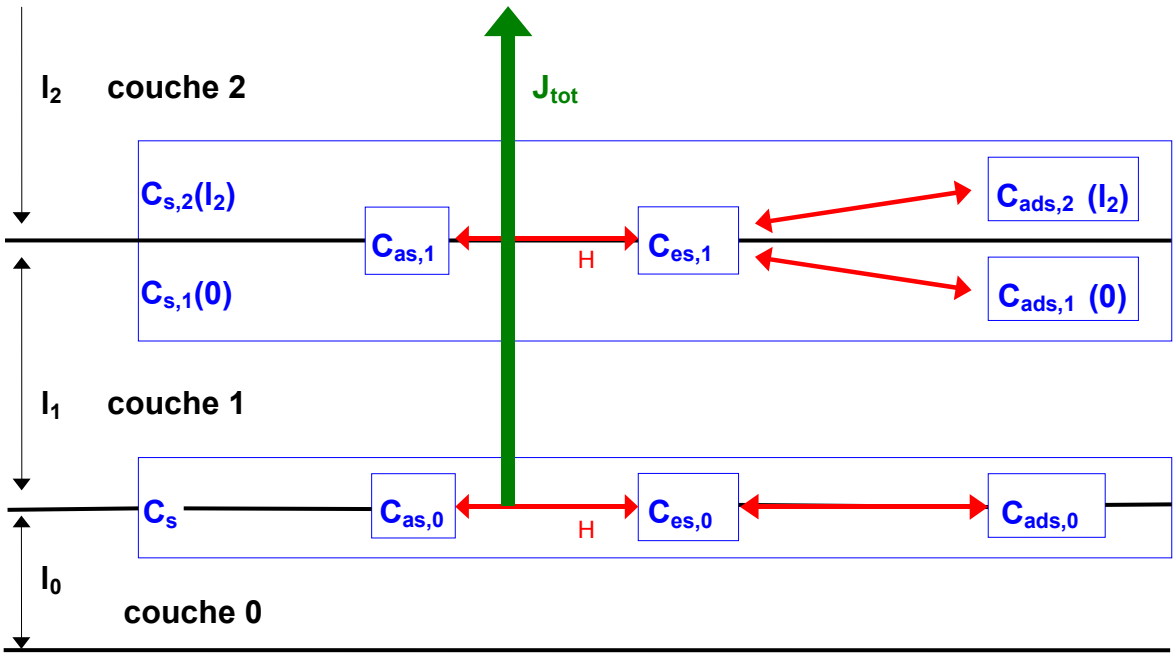


Figure 7 : Modélisation de la diffusion et de la convection dans un sol multicouche

L'équation 1.3.16 s'écrit donc pour tout i entre 1 et n :

$$C_{as,i-1} = \frac{J_{tot}}{F_{is}} \times (1-\chi_i) + C_{as,i} \times \chi_i$$ Équation 1.3.19

d'où, par récurrence sur n couches, de la zone de contamination ($C_{as,0} = C_{as,i=0}$) à la surface ($C_{as,surf} = C_{as,n}$) :

$$C_{as,0} = \frac{J_{tot}}{F_{is}} \times \left[(1-\chi_1) + \chi_1(1-\chi_2) + \chi_1.\chi_2(1-\chi_3) + ... + \prod_{i=1}^{n-1} \chi_i (1-\chi_n) \right] + C_{as,n} \prod_{i=1}^{n} \chi_i$$

Équation 1.3.20

$$C_{as,0} = \frac{J_{tot}}{F_{is}} \times \left(1 - \prod_{i=1}^{n} \chi_i \right) + C_{as,n} \prod_{i=1}^{n} \chi_i$$ Équation 1.3.21

$$C_{as,0} = \frac{J_{tot}}{F_{is}} \times \left(1 - e^{-F_{is} \times \sum_{i=1}^{n} \frac{l_i}{DU_{a,i}}} \right) + C_{as,n} \times e^{-F_{is} \times \sum_{i=1}^{n} \frac{l_i}{DU_{a,i}}}$$ Équation 1.3.22

et $$J_{tot} = F_{is} \times \frac{C_{as,0} - C_{as,n} \times e^{-F_{is} \times \sum_{i=1}^{n} \frac{l_i}{DU_{a,i}}}}{\left(1 - e^{-F_{is} \times \sum_{i=1}^{n} \frac{l_i}{DU_{a,i}}} \right)}$$ Équation 1.3.23

Si $DU_{a,eq}$ est le coefficient de diffusion multiphasique moyen pour les n couches (exprimé par rapport à la concentration dans l'air), on peut écrire :

$$J_{tot} = F_{is} \times \frac{C_{as,0} - C_{as,n} \times e^{-F_{is} \times \frac{L}{DU_{a,eq}}}}{\left(1 - e^{-F_{is} \times \frac{L}{DU_{a,eq}}}\right)}$$ Équation 1.3.24

avec $L = \sum_{i=1}^{n} l_i$, distance entre le point de concentration $C_{as,0}$ et la surface intérieure du bâtiment (vide sanitaire, sous-sol ou lieu de vie),

et $$\frac{L}{DU_{a,eq}} = \sum_{i=1}^{n} \frac{l_i}{DU_{a,i}}$$ Équation 1.3.25

Si la concentration dans l'air du sol à la surface avec l'atmosphère est faible par rapport à la concentration dans l'air du sol au niveau de la source, on considère que $C_{as,n}$=0 et on obtient :

$$J_{tot} = F_{is} \times \frac{C_{as,0}}{\left(1 - e^{-F_{is} \times \frac{L}{DU_{a,eq}}}\right)}$$ Équation 1.3.26

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
J_{tot}	Flux de polluant gazeux à la surface d'un bâtiment (cas d'un sol contaminé)	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
F_{is}	Flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
$C_{as,n}$	Concentration de polluant dans l'air du sol à la surface (vide sanitaire, sous-sol ou intérieur du bâtiment)	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{as,0}$	Concentration de polluant dans l'air du sol, à la profondeur considérée	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
L	Longueur de la zone de transfert dans la zone insaturée, du point de concentration $C_{as,0}$ à l'intérieur du bâtiment (vide sanitaire, sous-sol ou lieu de vie)	L	m	E
$DU_{a,eq}$	Coefficient de diffusion multiphasique moyen sur la zone de transfert de longueur L considérée (exprimée par rapport à la concentration dans l'air)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E

Remarques :

1. Cette expression est équivalente à celle obtenue dans le cas d'une monocouche, le terme de résistance moyenne à la diffusion multicouche ($L/DU_{a,eq}$) remplaçant le terme utilisé pour la monocouche (l_i/DU_a).
2. Lorsque le flux d'air F_{is} tend vers 0,

$$e^{-F_{is} \times \frac{L}{DU_{a,eq}}} \approx 1 - F_{is} \times \frac{L}{DU_{a,eq}}$$ Équation 1.3.27

le flux d'émission J_{tot} est alors égal au flux de diffusion seul :

$J_{dif} = DU_{a,eq} \times (C_{as,0} - C_{as,n}) / L \approx DU_{eq} \times C_{as,0} / L$ Équation 1.3.28

De même, pour des substances peu diffusives (coefficient de diffusion moyen $DU_{a,eq}$ tendant vers 0), on retrouve le flux de l'émission gazeuse par convection seul, sans diffusion, à partir de J_{tot} :

$$J_{conv} = F_{is} \times C_{as,0}$$ Équation 1.3.29

3. Le résultat pour les deux modes de transport conjugués est inférieur à la somme des deux transferts pris indépendamment.

   En effet, si on pose $x = F_{is} \times L/DU_{a,eq}$

$$\frac{J_{tot} - (J_{dif} + J_{conv})}{C_{as,0}} = \frac{x\,e^{-x} - 1 + e^{-x}}{(1 - e^{-x})\,(DU_{a,eq}/L)} = \frac{\frac{x+1}{e^{x}} - 1}{(1 - e^{-x})\,(DU_{a,eq}/L)} < 0$$ Équation 1.3.30

d'où $\underline{J_{tot} < J_{conv} + J_{dif}}$.

4. Contrairement à l'approche développée pour l'émission de polluant vers l'air extérieur, le flux diffusif à travers la couche limite d'air, située à la surface du sol n'a pas été pris en compte ici. Ce flux diffusif ne constitue pas un facteur limitant pour l'émission de polluant dû au flux convectif d'air. Il ne pourrait intervenir qu'en tant que paramètre de contrôle amont, en vérifiant que le sol entre la source et la surface offre une résistance à la diffusion ($L/DU_{a,eq}$) supérieure à celle de la couche limite d'air (d_a/D_a). Or, la diffusivité équivalente dans chaque couche du sol est systématiquement inférieure à la diffusivité dans l'air, sauf éventuellement pour des substances présentant une constante de Henry (H') inférieure à 10^{-4} (mais ce modèle s'applique essentiellement aux substances volatiles) ou/et pour une source en surface ($L<d_a$: situation pouvant correspondre à une présence de produit volatil à la surface d'une habitation de plein pied sur terre battue, ou d'un vide sanitaire ou d'une cave sur terre, suite à une excavation dans une source profonde). Dans ce second cas, il faudrait tenir compte de l'atténuation de la source à partir de la surface et le modèle présenté ici, basé sur l'hypothèse d'une source infinie, ne serait plus adapté.
5. L'équation 1.3.26 suppose une concentration dans l'air du sol à la surface avec l'atmosphère faible par rapport à la concentration au niveau de la source. Si cette hypothèse n'est pas vérifiée, l'équation 1.3.26 surestime J_{tot}. Ce biais de surestimation peut être limité en assimilant $C_{as,n}$ à la concentration de bruit de fond dans l'air sous forme gazeuse à la surface (cf. remarque 3 de la section 1.3.2.2).

1.3.1.1.4. CALCUL DU FLUX D'AIR DE CONVECTION

Le flux d'air à travers la zone insaturée F_{is} est donné par la loi de Darcy :

$$F_{is} = K_a \times \frac{\Delta p_{is}}{L}$$ Équation 1.3.31

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
F_{is}	Flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
K_a	Perméabilité à l'air moyenne de la zone insaturée (sol et/ou plancher)	$L^3.T.M^{-1}$	$m^3.s.kg^{-1}$	E
Δp_{is}	Dépression entre l'intérieur du bâtiment (lieu de vie, sous-sol ou vide sanitaire) et le sol	$M.L^{-1}.T^{-2}$	$kg.m^{-1}.s^{-2}$	E
L	Distance entre le point considéré de concentration $C_{as}(L)$ et l'intérieur du bâtiment (lieu de vie, sous-sol ou vide sanitaire)	L	m	E

1.3.1.1.4.1. PERMEABILITE A L'AIR MOYENNE

En présence de plusieurs couches superposées, la perméabilité moyenne se calcule comme la moyenne harmonique des perméabilités des différentes couches :

$$\frac{L}{K_a} = \sum_i \frac{l_i}{K_{a,i}}$$ Équation 1.3.32

d'où $$K_a = \frac{L}{\sum_i \frac{l_i}{K_{a,i}}}$$ Équation 1.3.33

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
K_a	Perméabilité à l'air moyenne de la zone insaturée (sol et/ou plancher)	$L^3.T.M^{-1}$	$m^3.s.kg^{-1}$	C ou E
L	Distance entre le point considéré de concentration $C_{as}(L)$ et l'intérieur du bâtiment (lieu de vie, sous-sol ou vide sanitaire)	L	m	C ou E
$K_{a,i}$	Perméabilité à l'air de la couche i	$L^3.T.M^{-1}$	$m^3.s.kg^{-1}$	C ou E
l_i	Epaisseur de la couche i	L	m	E

1.3.1.1.4.2. PERMEABILITE A L'AIR D'UN SOL

La perméabilité à l'air d'un sol se calcule à partir de la perméabilité intrinsèque du sol et de la viscosité de l'air :

$$K_{a,i,sol} = \frac{\kappa_{\mathrm{int},i}}{\eta}$$ Équation 1.3.34

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$K_{a,i,sol}$	Perméabilité à l'air du sol i	$L^3.T.M^{-1}$	$m^3.s.kg^{-1}$	C ou E
$\kappa_{int,i}$	Perméabilité intrinsèque du sol i	L^2	m^2	C ou E
η	Viscosité dynamique de l'air	$M.L^{-1}.T^{-2}$	$kg.m^{-1}.s^{-1}$	C ou E

Des valeurs de perméabilités intrinsèques sont données par différents auteurs (cf. documents à venir sur les paramètres environnementaux). La perméabilité intrinsèque d'un sol peut aussi être estimée à partir de la perméabilité à l'eau.

1.3.1.1.4.3. PERMEABILITE DE LA DALLE D'UN PLANCHER

L'approche présentée ci-dessous est celle développée dans le modèle original VOLASOIL (Waitz et al., 1996). Dans ce modèle, les ouvertures dans le béton du plancher ("*gaps, cracks and holes*": espaces, fissures et trous) sont représentées comme des tubes cylindriques. La perméabilité de la dalle est alors estimée en combinant la loi de Poiseuille et celle de Darcy.

Pour un tube cylindrique de longueur l et de rayon r, la loi de Poiseuille donne un flux laminaire :

$$f = \frac{\pi \times r^4}{8 \times \eta} \times \frac{\Delta p}{l} \qquad \text{Équation 1.3.35}$$

avec η : la viscosité dynamique de l'air,

p : pression.

Pour une colonne de longueur L, la loi de Darcy donne un flux :

$$F = K_a \times \frac{\Delta p}{L} \qquad \text{Équation 1.3.36}$$

avec K_a : perméabilité à l'air.

Si n_i est le nombre d'ouvertures de rayon i par unité de surface de colonne, alors

$$K_a \times \frac{\Delta p}{L} = \frac{\pi}{8 \times \eta} \times \frac{\Delta p}{l} \times \sum_i n_i \times r_i^4 \qquad \text{Équation 1.3.37}$$

d'où $$K_a = \frac{\pi}{8 \times \eta} \times \frac{L}{l} \times \sum_i n_i \times r_i^4 \qquad \text{Équation 1.3.38}$$

et $$K_a = \frac{\pi}{8 \times \eta \times \tau} \sum_i n_i \times r_i^4 \qquad \text{Équation 1.3.39}$$

avec τ : tortuosité,

$$\tau = \frac{l}{L} \qquad \text{Équation 1.3.40}$$

L'expression 1.3.39 est ensuite intégrée dans VOLASOIL (Waitz et al., 1996) **en considérant :**

- **des tubes verticaux, de tortuosité égale à 1,**
- **des tubes de rayon r uniforme.**

L'équation 1.3.39 aboutit ainsi à la formulation suivante :

$$K_{a,pl} = \frac{f_{so} \times r^2}{8 \times \eta} \qquad \text{Équation 1.3.41}$$

ou $$K_{a,pl} = \frac{{f_{so}}^2}{8 \times \eta \times \pi \times n_o} \qquad \text{Équation 1.3.42}$$

avec f_{so} : fraction surfacique de la dalle occupée par les ouvertures,

$$f_{so} = n_o \times \pi \times r^2 \qquad \text{Équation 1.3.43}$$

et n_o : nombre d'ouvertures dans la dalle par unité de surface

Symbole	Paramètre	Dimensions	Unités	Statut
$K_{a,pl}$	Perméabilité à l'air de la dalle du plancher	$L^3.T.M^{-1}$	$m^3.s.kg^{-1}$	C ou E
r	Rayon uniforme des ouvertures dans la dalle	L	m	C ou E
f_{so}	Fraction surfacique de la dalle occupée par les ouvertures	-	-	C ou E
η	Viscosité dynamique de l'air	$M.L^{-1}.T^{-2}$	$kg.m^{-1}.s^{-1}$	E
n_o	Nombre d'ouvertures dans la dalle par unité de surface	L^{-2}	m^{-2}	E

Remarques :

1. Le choix effectué dans VOLASOIL de tubes verticaux, en réduisant la distance à parcourir au sein du matériau par le flux d'air, est pénalisant.
2. Il existe une incertitude liée à la prise en compte de tubes de rayon uniforme. Le flux dans un tube s'écrivant en r^4, une hétérogénéité de la taille effective des orifices dans la dalle pourrait induire des variations importantes des flux.

1.3.1.2. CAS D'UNE NAPPE CONTAMINEE

Quand la source de contamination est la nappe, le transfert à travers la frange capillaire peut être pris en compte.

Les équations suivantes présentent une solution générale pour le transfert à travers la frange capillaire. Elles prennent en compte :

- un flux de convection lié à l'évaporation,
- un flux de diffusion dans l'air et dans l'eau[7].

Localement, dans la frange capillaire, le flux d'évaporation s'écrit :

$$J_{conv_cap} = E_v \times C_{es_cap} \qquad \text{Équation 1.3.44}$$

où $$C_{es_cap} = \frac{C_{as_cap}}{H'} \qquad \text{Équation 1.3.45}$$

[7] Le modèle VOLASOIL original ne prend pas en compte la diffusion dans l'air considérant que la forte teneur en eau dans le sol au niveau de la frange capillaire bloque toute connexion entre les bulles d'air résiduelles et donc toute diffusion continue. Ici, le choix a été fait de présenter une expression complète du flux de diffusion. *In fine*, la paramétrisation permet de retenir ou non la diffusion dans l'air au niveau de la frange capillaire. Compte-tenu de la diffusivité très faible dans l'eau par rapport à l'air, tenir compte de la diffusion dans l'air au niveau de la frange capillaire accroît fortement le phénomène de diffusion.

avec J_{conv_cap} : flux d'évaporation dans la frange capillaire,

E_v : flux d'eau d'évaporation,

C_{es_cap} : concentration dans l'eau interstitielle de la frange capillaire,

C_{as_cap} : concentration dans l'air de la frange capillaire,

H' : constante de Henry (adimensionnelle).

Le flux diffusif s'écrivant comme précédemment, l'expression du flux total d'émission à travers la frange capillaire s'écrit de manière identique à celle dérivée pour la zone insaturée (cf. section 1.3.1.1.3) en remplaçant :

- le flux d'air porteur F_{is} par le flux porteur d'évaporation traduit en équivalent-flux-d'air, E_v/H' ;
- la teneur dans l'air du sol au niveau de la source dans la zone insaturée $C_{as,0}$ par la teneur dans l'air du sol à la surface de la nappe C_{as_nap} ;
- la teneur dans l'air du sol à la surface $C_{as,n}$ par la teneur dans l'air du sol au bas de la zone insaturée (limite de la frange capillaire) $C_{as,0}$;
- la profondeur de la source et la diffusivité équivalente multicouche dans la zone non saturée, L et $DU_{a,eq}$, par l'épaisseur et la diffusivité équivalente multicouche de la frange capillaire, L_{cap} et DU_{eq_cap}.

Le flux de contaminant est alors donné par l'équation suivante :

$$J_{tot_cap} = \frac{E_v}{H'} \frac{C_{as_nap} - e^{-\frac{Ev}{H'}\frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}} C_{as,0}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'}\frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}} \qquad \text{Équation 1.3.46}$$

où $C_{as_nap} = H' \times C_{e_nap}$ Équation 1.3.47

avec C_{e_nap} : concentration sous forme dissoute dans la nappe

L'hypothèse de régime permanent et le principe de conservation de la masse conduit à l'égalité du flux traversant le sol (J_{tot}) et du flux traversant la frange capillaire (J_{tot_cap}),

d'où $$J_{tot} = \frac{E_v}{H'} \frac{C_{as_nap} - e^{-\frac{Ev}{H'}\frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}} C_{as,0}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'}\frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}} \qquad \text{Équation 1.3.48}$$

Si le polluant est plus volatil que l'eau et en l'absence de remontées capillaires jusqu'à la surface avec l'atmosphère, $C_{as,0}$ est calculée à partir des équations 1.3.24 et 1.3.46. On a donc :

$$C_{as,0} = \frac{\frac{E_v}{H'} \times \frac{C_{as_nap}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}} + \frac{F_{is} \times C_{as,n} \times e^{-F_{is} \times \frac{L}{DU_{a,eq}}}}{1 - e^{-F_{is} \times \frac{L}{DU_{a,eq}}}}}{\frac{F_{is}}{1 - e^{-F_{is} \times \frac{L}{DU_{a,eq}}}} + \frac{E_v}{H'} \times \frac{e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}}$$

Équation 1.3.49

Si la concentration dans l'air du sol à la surface avec l'atmosphère est faible par rapport à celle en haut de la frange capillaire, on considère que $C_{as,n}$=0 et on écrit :

$$C_{as,0} = \frac{\frac{E_v}{H'} \times \frac{C_{as_nap}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}}{\frac{F_{is}}{1 - e^{-F_{is} \times \frac{L}{DU_{a,eq}}}} + \frac{E_v}{H'} \times \frac{e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}{1 - e^{-\frac{Ev}{H'} \frac{L_{cap}}{DU_{eq_cap}}}}}$$

Équation 1.3.50

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
J_{tot}	Flux de polluant gazeux à la surface d'un bâtiment (cas d'une nappe contaminée)	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
F_{is}	Flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
E_v	Flux d'eau d'évaporation	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
H'	Constante de Henry (adimensionnelle) : H'=H/RT	-	-	C ou E
$C_{as,0}$	Concentration de polluant dans l'air du sol, au bas de la zone insaturée	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{as,n}$	Concentration de polluant dans l'air du sol à la surface (vide sanitaire, sous-sol ou intérieur du bâtiment)	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{as,nap}$	Concentration de polluant dans l'air du sol, à la surface de la nappe	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
L	Hauteur de la zone de transfert dans la zone insaturée, du point de concentration $C_{sa,0}$ à l'intérieur du bâtiment (vide sanitaire ou lieu de vie)	L	m	E
L_{cap}	Epaisseur de la frange capillaire	L	m	E
$DU_{a,eq}$	Coefficient de diffusion multiphasique moyen sur la zone de transfert de hauteur L considérée (exprimée par rapport à la concentration dans l'air)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
DU_{eq_cap}	Coefficient de diffusion multiphasique moyen pour la frange capillaire (exprimée par rapport à la concentration dans l'air)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E

Remarques :

1. Pour tenir compte d'éventuelles remontées capillaires jusqu'à la surface (par exemple, cas d'une cave avec sol en terre battue), il faut remplacer E_v/H' par $F_{is} + E_v/H'$ dans l'équation 1.3.48.
2. L'estimation de la concentration dans l'eau de la frange capillaire et de la nappe respectivement par les équations 1.3.45 et 1.3.47 correspond à une hypothèse éventuellement majorante où l'équilibre multiphasique est supposé atteint.
3. Comme dans la section 1.3.1.1, la couche limite d'air au-dessus du sol n'est pas prise en compte dans les équations 1.3.48 à 1.3.50.
4. L'équation 1.3.50 suppose une concentration faible dans l'air du sol à la surface avec l'atmosphère par rapport à la concentration dans l'air du sol en haut de la frange capillaire. Si cette hypothèse n'est pas vérifiée, l'équation 1.3.50 surestime J_{tot}. Ce biais de surestimation peut être limité en assimilant $C_{as,n}$ à la concentration de bruit de fond dans l'air à la surface (cf. remarque 3 de la section 1.3.2.2).
5. Dans le cas d'une source de polluant immergée (exemple : polluant plus dense que l'eau) et d'un aquifère « mal mélangé », le transfert dans la nappe doit être pris en compte. Dans ce cas, le flux de transfert sera estimé en considérant la zone saturée comme une couche supplémentaire (sans air) de la frange capillaire et en intégrant la diffusion dans l'eau de la nappe dans le modèle.

   Pour cela, dans les équations allant de 1.3.46 à 1.3.50,

   - le coefficient de diffusion DU_{eq_cap} est remplacé par un coefficient de diffusion multicouche $DU_{eq_cap_nap}$ intégrant le coefficient de diffusion dans l'eau de la nappe suivant le principe de l'équation 1.2.21 (la résistance de l'ensemble des couches est égale à la somme des résistances de toutes les couches) ;
   - l'épaisseur de la frange capillaire L_{cap} est remplacée par la somme des épaisseurs de la frange capillaire et de la nappe à traverser L_{cap_nap}.

1.3.1.3. IMPACT DES HYPOTHESES SOUS-TENDANT LE MODELE

Le modèle développé ici ne prend pas en compte la dégradation des polluants lors des transferts depuis la source. Cette hypothèse est pénalisante. Mais, il faut surtout rappeler qu'il ne prend pas en compte l'atténuation du polluant au niveau de la source au cours du temps (transformations chimiques ou biologiques, lixiviation, volatilisation…), ce qui revient à considérer une source infinie. Cette hypothèse peut être très majorante si la source est immédiatement sous la dalle ou à faible profondeur, si le sol est très perméable ou si la substance étudiée est très volatile.

Le modèle suppose, par ailleurs, que le flux de convection traverse toute la zone insaturée à partir de la source de pollution dans le sol, sous l'effet de la dépression entre le sol et l'intérieur du bâtiment. Cela implique que l'air extrait du sol, et qui provient initialement de la surface, traverse la zone insaturée du sol (suivant les flèches de la figure ci-dessous) en passant par la source de pollution, sans court-circuit depuis les sols sus-jacents, notamment depuis la

couche de forme (gravier) sous la dalle. Pour une frange capillaire ou un sol profond, cette hypothèse apparaît irréaliste. Cette limite conceptuelle implique un conservatisme important du modèle pour les sources à grandes profondeurs. Dans ces situations, l'émission de vapeurs peut être limitée par le phénomène de diffusion en-dessous de la zone d'influence de la convection[8]. Pour des sols perméables, la convection peut représenter 99% du flux calculé, d'où une surestimation du flux pouvant aller jusqu'à deux ordres de grandeur.

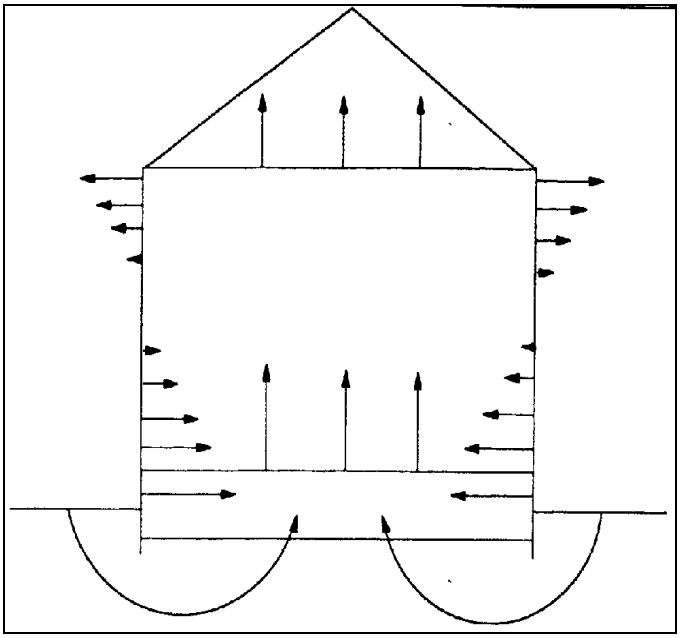


Figure 8: Transport convectif d'air dans une maison (Waitz et al., 1996)

Concernant les flux de diffusion dans le sol, deux remarques peuvent être faites :

- l'estimation des coefficients de diffusion dans le sol considérant toute la porosité du sol comme utile pour la diffusion peut être majorante dans le cas de sol à perméabilité occluse. Dans ce cas, l'utilisation de la porosité efficace pourrait être cohérente. Toutefois, les essais de diffusion en laboratoire avec des gaz inertes (van den Berg, 1994 et Waitz et al., 1996, US EPA, 1994), montrent que ces formules correspondent aux meilleures connaissances disponibles, avec une bonne adéquation à la réalité. D'après Waitz et al. (1996), elles peuvent sous-estimer légèrement les coefficients de diffusion pour des sols à faible teneur en air, ce qui n'est pas le cas des sols considérés ici ;

[8] La convection dans la zone de mélange stimulera cette diffusion sous-jacente, dans la mesure où elle diminuera les teneurs en bordure de cette zone.

- la prise en compte dans le modèle ci-dessus de la diffusion dans l'air de la frange capillaire tend à augmenter fortement le flux de diffusion à partir de la nappe par rapport au modèle original. La prise en compte de ce flux de diffusion dans l'air au niveau de la frange capillaire peut s'avérer être trop pénalisante, car une forte teneur en eau peut empêcher toute diffusion continue au niveau de la frange capillaire et parce que dans ces conditions, la diffusion de polluant au travers de la frange capillaire peut être supérieure à la capacité de réalimentation de la nappe (d'où appauvrissement de la teneur en polluant dans l'air au toit de la nappe). L'influence de la prise en compte de la diffusion dans l'air au niveau de la frange capillaire peut être étudiée en faisant varier la valeur attribuée à la teneur en air dans la frange capillaire.

Enfin, la paramétrisation de la fissuration de la dalle apparaît très incertaine. Dans VOLASOIL, un rayon moyen de fissures de 4 mm est utilisé. Cette paramétrisation est souvent considérée comme excessive. Toutefois, aucune mesure de cette perméabilité ne permet de se prononcer et d'éventuellement proposer une paramétrisation alternative.

Le modèle VOLASOIL, comme les autres modèles de transfert de vapeur, a fait l'objet de peu de travaux de validation expérimentale (Swartjes, 2003a, Waitz et al., 1996, annexe 6). Waitz et al. (1996) rapportent des comparaisons entre simulations et mesures à partir d'une contamination des eaux souterraines. Les teneurs modélisées dans le vide sanitaire y apparaissent systématiquement surestimées, d'un facteur 5 à 300. Une expérience menée par l'INERIS dans le cadre de ses projets de recherche a abouti par ailleurs à la mesure (répétée mais non systématique) d'un flux de polluants à travers une dalle d'un site industriel 50 à 1000 fois supérieures aux valeurs prédites avec le modèle VOLASOIL (avec une paramétrisation conservatoire par rapport aux données du site).

Compte-tenu de ces incertitudes et du peu d'éléments de vérification disponibles, la modélisation du transfert de vapeurs, que ce soit par VOLASOIL ou par un autre modèle, est considéré, pour l'instant, comme particulièrement incertaine. Une incertitude de l'ordre de deux ordres de grandeur est avancée au niveau européen (Swartjes, 2003b). Un tel ordre de grandeur paraît cohérent avec l'ampleur des variations observées entre modèles ou lors des quelques essais de vérification expérimentale réalisés.

1.3.2. CONCENTRATION DE POLLUANT GAZEUX DANS L'AIR INTERIEUR

La partie habitée d'un bâtiment repose :

- soit sur une dalle reposant sur le sol : on parle de terre-plein,
- soit sur un vide sanitaire,
- soit sur un sous-sol.

Dans le premier cas, la dalle du bâtiment peut être assimilée à une couche de sol et le modèle de transfert en multicouche permet de calculer le flux de polluant émis dans le lieu de vie après passage dans le sol et la dalle. La concentration dans l'air intérieur est alors calculée à partir de ce flux.

Dans le cas d'un vide sanitaire ou d'un sous-sol, les vapeurs de polluant après passage dans le sol (et la dalle constituant le plancher du sous-sol) peuvent être diluées dans le vide sanitaire ou le sous-sol avant d'atteindre le lieu de vie.

1.3.2.1. CONCENTRATION DE POLLUANT GAZEUX DANS LA ZONE DU BATIMENT OU A LIEU L'EMISSION

La concentration de polluant gazeux attribuable à la source sol ou nappe dans la zone du bâtiment ($C_{ag_bât}$) où a lieu l'émission, est calculée à partir du flux à la surface du bâtiment et du bilan massique suivant :

$$V_{bât} \times \frac{dC_{ag_bât}}{dt} = J_{tot} \times A_{bât} + t_{ra} \times V_{bât} \times C_{ag,e} - (F_{is} \times A_{bât} + t_{ra} \times V_{bât}) \times C_{ag_bât}$$ Équation 1.3.51

avec $A_{bât}$: surface du bâtiment,

t_{ra} : taux de renouvellement d'air dans le bâtiment,

$V_{bât}$: volume intérieur du bâtiment où a lieu l'émission gazeuse de polluant, à partir du sol ou de la frange capillaire,

$C_{ag,e}$: concentration de polluant sous forme gazeuse dans l'air extérieur, attribuable à la source étudiée.

L'intégration de l'équation 1.3.51 sur les intervalles de temps (ΔT) où J_{tot}, F_{is}, t_{ra} et $C_{ag,e}$ sont constants donne :

$$C_{ag_bât}(t) = \frac{J_{tot} + t_{ra} \times H_{bât} \times C_{ag,e}}{F_{is} + t_{ra} \times H_{bât}} \times \left(1 - e^{-\left(\frac{F_{is}}{H_{bât}} + t_{ra}\right)\Delta T}\right) + C_{ag_bât}(t - \Delta T) \times e^{-\left(\frac{F_{is}}{H_{bât}} + t_{ra}\right)\Delta T}$$

Équation 1.3.52

Remarque : sur de longues périodes, il est possible de prendre en compte des variations du flux d'émission (due par exemple à la variation de la température en fonction des saisons). La fréquence des variations considérées doit néanmoins être suffisamment faible pour être compatible avec l'hypothèse d'égalité des flux entre les différentes couches du sol, utilisée pour définir l'expression de J_{tot}.

Si J_{tot}, F_{is}, t_{ra} et $C_{ag,e}$ sont constants sur toute la période étudiée, on peut écrire :

$$C_{ag_bât}(t) = \frac{J_{tot} + t_{ra} \times H_{bât} \times C_{ag,e}}{F_{is} + t_{ra} \times H_{bât}} \times \left(1 - e^{-\left(\frac{F_{is}}{H_{bât}} + t_{ra}\right)t}\right) + C_{ag_bât}(0) \times e^{-\left(\frac{F_{is}}{H_{bât}} + t_{ra}\right)t}$$ Équation 1.3.53

Quand l'état stationnaire est atteint :

$$C_{ag_bât} = \frac{J_{tot} + t_{ra} \times H_{bât} \times C_{ag,e}}{F_{is} + t_{ra} \times H_{bât}}$$ Équation 1.3.54

Symbole	Paramètre	Dimensions	Unités	Statut
$C_{ag_bât}$	Concentration de polluant gazeux, attribuable à la source sol ou nappe, dans l'air de la zone du bâtiment où a lieu l'émission	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{ag,e}$	Concentration de polluant gazeux dans l'air extérieur, attribuable à la source sol ou nappe	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
F_{is}	Flux d'air du sol vers le bâtiment lié à la convection	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
J_{tot}	Flux de polluant gazeux à la surface du bâtiment	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
t_{ra}	Facteur de ventilation du lieu de vie, du vide sanitaire ou du sous-sol du bâtiment selon le cas (= taux de renouvellement d'air)	T^{-1}	s^{-1}	E
$H_{bât}$	Hauteur de l'espace considéré (lieu de vie, vide sanitaire ou sous-sol du bâtiment selon le cas)	L	m	E

1.3.2.2. CONCENTRATION DE POLLUANT GAZEUX DANS L'AIR DU LIEU DE VIE

Si le plancher du bâtiment repose directement sur le sol, la concentration de polluant gazeux, attribuable à la source sol ou nappe, dans l'air du lieu de vie ($C_{ag,i}$) est donnée par les équations 1.3.52, 1.3.53 ou 1.3.54.

Dans le cas d'un bâtiment sur vide sanitaire ou sur sous-sol, la concentration de polluant gazeux dans le lieu de vie dépend de la concentration de polluant dans le vide sanitaire ou dans le sous-sol, selon le cas, et du transfert de vapeur entre ces deux espaces. Plusieurs approches sont alors possibles pour estimer la concentration gazeuse dans l'air intérieur :

- le transfert de vapeur est modélisé. Ainsi, dans le modèle VOLASOIL original, Waitz et al. (1996) représentent ce transfert par un flux de convection, généré par la différence de pression entre le vide sanitaire et le lieu de vie. Le flux d'air entrant dans le lieu de vie à partir du vide sanitaire est estimé à partir des ouvertures existant dans le plancher de la partie habitée (cf. section 1.3.1.1.4.3) ;
- un facteur de dilution empirique est utilisé, comme dans HESP (Human Exposure to Soil Pollutants : Veerkamp et ten Berge, 1994, Shell Global Solutions, 1995) ou CSOIL (van den Berg R., 1994). La concentration de polluant gazeux dans le sous-sol ou le vide sanitaire est alors multipliée par ce facteur pour obtenir la concentration de polluant gazeux dans l'air du lieu de vie.

L'INERIS, pour le calcul des concentrations de polluant gazeux dans l'air du lieu de vie d'un bâtiment privilégie la seconde approche, en se basant sur des données de mesures pour définir le coefficient de dilution. Même si la valeur de ce paramètre peut être variable et incertaine, ce choix a été fait car :

- le module de calcul de VOLASOIL pour l'estimation du transfert de vapeurs du vide sanitaire vers le sous-sol n'a pas fait l'objet de comparaison par rapport à des mesures,

- la densité et la grande variabilité de la taille des orifices dans la dalle de béton (fissures, conduits,…), qui déterminent la perméabilité au flux convectif, ne sont pas accessibles à la mesure et ne sont pas justifiées dans la documentation de référence de VOLASOIL (INERIS, DRC-05-57281-DESP/R01a).

Ainsi, la concentration de polluant gazeux dans l'air intérieur attribuable à la pollution du sol est donnée par :

$$C_{ag,i} = C_{ag_bât} \times f_{d_sb}$$ Équation 1.3.55

Cette équation suppose que **les échanges entre le lieu de vie et le vide sanitaire ou le sous-sol soient suffisamment rapides pour que les variations de $C_{ag_bât}$ se répercutent sur $C_{ag,i}$.**

Symbole	Paramètre	Dimensions	Unités	Statut
$C_{ag,i}$	Concentration de polluant gazeux, attribuable à la source sol ou nappe, dans l'air du lieu de vie d'un bâtiment sur vide sanitaire ou sur sous-sol	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{ag_bât}$	Concentration de polluant gazeux dans l'air du vide sanitaire ou du sous-sol, attribuable à la source sol ou nappe	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
f_{d_sb}	Contribution de l'air du vide sanitaire ou du sous-sol à l'air intérieur du lieu de vie	-	-	E

Remarques :

1. Dans le cas d'un bâtiment où le plancher du lieu de vie repose sur le sol, l'expression 1.3.55 peut être utilisée avec f_{d_sb} égal à 1.
2. Les expressions données ci-dessus correspondent aux concentrations de polluant gazeux dans l'air attribuables à la source sol ou nappe locale. Elles n'intègrent pas le bruit de fond dans l'air du lieu de vie, du vide sanitaire ou du sous-sol et les autres sources de pollution présentes dans ces lieux.
3. Le calcul de la concentration gazeuse dans l'air du bâtiment à partir du bilan massique 1.3.51 est effectué à partir du flux d'émission J_{tot} attribuable à la source. Ce flux doit donc être estimé à partir de la concentration dans l'air du sol au niveau de la source, sans prise en compte du bruit de fond.

   En réalité, le flux net de diffusion dépend de la différence entre la concentration totale de polluant dans l'air du sol au niveau de la source et de la concentration totale dans l'air du sol au niveau de la surface du sol. De fait, la concentration attribuable et la concentration totale au niveau de la source peuvent être considérée comme peu différentes dans le cas d'une contamination des sols ou de la nappe par des composés volatils ou semi-volatils (cas où ces équations peuvent être utilisées). En revanche, la concentration dans l'air du bâtiment ou du lieu de vie peut, pour certains polluants (comme le benzène, le toluène, formaldéhyde), être relativement élevée. Dans ce cas, compte-tenu des hypothèses de calcul (concentration dans l'air du sol à la surface faible par rapport à la concentration dans l'air du sol au niveau de la source dans le cas d'une source sol ou en haut de la frange capillaire dans le cas d'une source nappe), l'utilisation des équations 1.3.26 et 1.3.50 peut conduire à une surestimation du flux d'émission J_{tot} et

de la concentration dans l'air du bâtiment attribuable à la source sol ou à la source nappe.

Pour limiter ce biais de surestimation, il est alors possible d'assimiler la concentration dans l'air du sol à la surface $C_{as,n}$ à la concentration de bruit de fond sous forme gazeuse dans l'air du lieu de vie, du vide sanitaire ou du sous-sol (selon les cas), dans les équations 1.3.24 et 1.3.49 (le flux de diffusion dans la couche limite d'air à la surface du sol n'étant pas pris en compte et la concentration dans l'air du sol à la surface, attribuable à la source étant encore négligée).

En revanche, si la concentration de bruit de fond sous forme gazeuse dans l'air du lieu de vie, du vide sanitaire ou du sous-sol (selon les cas) est supérieure ou égale à la concentration dans l'air du sol au niveau de la source et si le flux de convection est négligeable, alors la concentration dans l'air attribuable à la source sol ou nappe sera considérée comme nulle.

4. La concentration totale de polluant gazeux dans un lieu de vie dont le plancher repose directement sur le sol, dans un vide sanitaire ou dans un sous-sol est ensuite obtenue en ajoutant aux expressions 1.3.52, 1.3.53 ou 1.3.54 la concentration de bruit de fond sous forme gazeuse mesurée dans ces milieux (cf. section 4).

   La concentration totale de polluant gazeux dans l'air du lieu de vie d'un bâtiment construit sur vide sanitaire ou sur sous-sol est obtenue en ajoutant à l'équation 1.3.55 ($C_{ag_bât}$ utilisée dans cette équation étant la concentration de polluant gazeux dans l'air attribuable à la source étudiée), la concentration de bruit de fond mesurée sous forme gazeuse dans l'habitat.

1.4. MILIEU « EAUX SOUTERRAINES »

1.4.1. DISPERSION DANS LA NAPPE

Les principaux mécanismes associés à la propagation des polluants dans les aquifères (constitués d'une zone saturée – la nappe – et d'une zone non saturée) sont :

- la convection,
- la dispersion cinématique,
- la diffusion moléculaire,
- l'adsorption,
- la biodégradation,
- la volatilisation.

Ces mécanismes dépendent de nombreux éléments liés aux caractéristiques du milieu et aux polluants considérés, comme :

- l'écoulement, lié à la nature du milieu souterrain (poreux, fracturé ou karstique ; considération ou non de la zone non saturée…), ainsi qu'aux conditions aux limites du système (variations climatiques, débit des cours d'eau…) ;
- la présence de matière organique induisant un effet retard, du fait de la sorption d'un polluant sur celle-ci ;
- la présence de bactéries susceptibles de dégrader ces polluants ;
- le comportement des polluants (substance de type traceur – chlorure ou non, miscible ou non miscible dans l'eau, volatile ou non). Certaines substances non miscibles (mais présentant une certaine solubilité) et plus denses que l'eau auront tendance à migrer vers le fond de la nappe (jusqu'au substratum imperméable) comme l'illustre la Figure 9, tandis que d'autres moins denses que l'eau seront « surnageants » (cf. Figure 10).

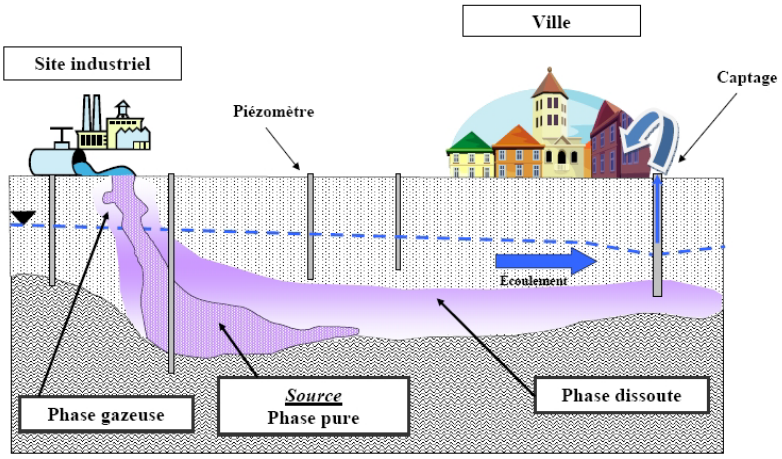


Figure 9 : Comportement d'une substance dont la phase pure est plus dense que l'eau (cas du tétrachloroéthylène)

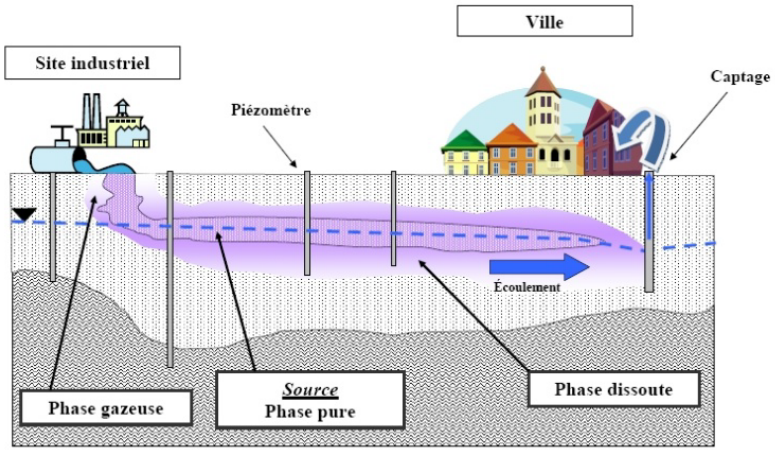


Figure 10 : Comportement d'une substance dont la phase pure est moins dense que l'eau (cas du benzène)

Dans la pratique, le milieu poreux représente la très grande majorité des cas traités dans le cadre d'études de risques liées à des installations en activité ou non. Deux explications peuvent être avancées :

- les installations potentiellement polluantes (installations classées en particulier) sont généralement implantées le long de cours d'eau (aquifères alluviaux qui correspondent à des milieux poreux) ;
- les autres milieux (fracturés et karstiques) sont traités dans le cadre de projets de recherche, et par simplification, on considère un milieu poreux. En effet, la simulation du transfert (écoulement et transport) est plus complexe dans ces milieux (fracturés et karstiques).

Par ailleurs, lors du transfert au sein des eaux souterraines, des échanges avec d'autres milieux sont susceptibles d'avoir lieu. Un dégazage de la zone saturée vers la zone non saturée d'un aquifère peut conduire à la migration de polluants volatils, via les gaz du sol, vers l'atmosphère (cf. section 1.2.2.2) ou une habitation (air intérieur, cf. section 1.3.1.2). Des relations avec le réseau hydrographique (dit « échange nappe/rivière ») peuvent aussi entraîner des migrations entre les eaux souterraines et les eaux superficielles.

Des échanges avec la matrice peuvent également se produire, par exemple, entre des argiles et des métaux. On parle dans ce cas de transport réactif.

Ces transferts entre milieux et avec la matrice sont délicats à simuler, car ils nécessitent l'utilisation d'outils de calcul dont l'utilisation requiert de nombreuses données d'entrée, bien souvent inconnues ou soumises à de fortes incertitudes quant à leur applicabilité au cas traité.

La modélisation de l'ensemble des mécanismes et interactions reste donc très complexe, bien qu'il existe aujourd'hui une grande variété d'outils de calcul, des plus simplifiés (modèles analytiques) aux plus sophistiqués (modèles numériques) pour évaluer le transfert des polluants dans les eaux souterraines.

Ce chapitre sur la modélisation du transport des polluants dans les eaux souterraines présente les équations de base de l'écoulement en milieu saturé, l'équation générale du transport des polluants en phase dissoute et milieu saturé (sans volatilisation), ainsi que la solution analytique simplifiée développée par Domenico pour simuler le transport des polluants. D'autres modèles sont également listés et la démarche générale de modélisation recommandée est rappelée. Cette section ne constitue donc qu'une introduction à la modélisation en milieu saturé. Elle a pour but de fournir aux évaluateurs de risque les éléments de base et leur permettre de s'adresser à des spécialistes disposant d'outils plus pointus pour traiter les situations plus complexes.

1.4.1.1. ECOULEMENT DES EAUX SOUTERRAINES

1.4.1.1.1. EQUATION DE BASE DE L'ECOULEMENT (EQUATION DE DARCY)

La Loi de Darcy, établie expérimentalement (pour un milieu poreux) par Darcy, en 1856, est la base de l'hydrodynamique souterraine. Elle s'exprime comme suit :

$$Q = K_e.A.\frac{\Delta h}{l} \qquad \text{Équation 1.4.1}$$

avec Q : débit hydraulique,

K_e : coefficient de perméabilité ou conductivité hydraulique,

A : surface totale de la section perpendiculaire à l'écoulement,

Δh : variation de charge,

l : longueur.

La variation de charge sur la longueur définit le gradient hydraulique i (sans dimension) :

$$\frac{\Delta h}{l} = i \qquad \text{Équation 1.4.2}$$

et le débit sur la surface de la section correspond à la vitesse de filtration ou vitesse de Darcy .

$$\frac{Q}{A} = K_e \times i = v_d \qquad \text{Équation 1.4.3}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
v_d	Vitesse de filtration ou de Darcy	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
i	Gradient hydraulique	-	-	C ou E
Q	Débit hydraulique	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	C ou E
K_e	Coefficient de perméabilité ou conductivité hydraulique	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
A	Surface totale de la section, perpendiculaire à l'écoulement	L^2	m^2	E
Δh	Variation de charge	L	m	E
l	Longueur	L	m	E

Les conditions de validité de cette loi sont les suivantes : continuité, isotropie, homogénéité du réservoir et écoulement laminaire. Dans la pratique, bien que ces conditions soient très restrictives, les cas où cette loi n'est plus applicable sont limités aux formations très hétérogènes, aux réseaux karstiques, lorsque la vitesse est très élevée, comme à proximité d'un pompage.

En toute rigueur, la conductivité hydraulique (K_e) est liée à la fois aux propriétés du milieu (perméabilité intrinsèque κ_{int}) et à celles du fluide (masse volumique et viscosité dynamique). En ce qui concerne les eaux souterraines de faibles profondeurs (< 1000 m), avec une pression et une température peu élevées, de faibles teneurs en sels dissous, les effets de la viscosité et de la masse volumique peuvent être négligés.

Par la suite, l'équation de Darcy a été généralisée (Magnan). Elle peut s'écrire :

$$\vec{v}_d = -K_e \cdot \overrightarrow{gradh}$$ Équation 1.4.4

1.4.1.1.2. APPROCHE SIMPLIFIEE POUR ESTIMER LA VITESSE ET LE TEMPS DE TRANSFERT

Il est possible d'évaluer, en première approche, le temps de transfert en zone saturée d'une substance (dissoute) en considérant la vitesse de Darcy (v_d). Cette approche est conservatoire, car trois phénomènes ne sont pas considérés :

- le temps de transfert en zone non saturée,
- le retard potentiellement engendré par le phénomène de sorption,
- la transformation potentielle via la dégradation ou biodégradation.

Afin de tenir compte du fait que seule l'eau gravitaire se déplace (à la différence notamment de l'eau liée entre les pores) et que seule une surface efficace participe aux écoulements, la vitesse de filtration est corrigée par la porosité efficace :

$$v_e = \frac{K_e.i}{n_e}$$ Équation 1.4.5

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
v_e	Vitesse effective	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
K_e	Conductivité hydraulique	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
i	Gradient hydraulique	-	-	C ou E
n_e	Porosité efficace (volume d'eau gravitaire/volume total)	-	-	E

Remarque : la vitesse effective (v_e) se rapproche de la vitesse de déplacement mesurée sur le terrain (vitesse réelle approchée par un traçage *in situ*).

La relation qui lie la vitesse au temps permet de calculer un temps de transfert en fonction de la distance :

$$T_{transfert} = \frac{d_{source \rightarrow point}}{v_e}$$ Équation 1.4.6

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$T_{transfert}$	Temps de transfert entre la source et le point aval considéré	T	s	C ou E
v_e	Vitesse effective	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
$d_{source \rightarrow point}$	Distance entre la source et le point aval	L	m	E

1.4.1.2. TRANSPORT DES POLLUANTS EN PHASE DISSOUTE ET MILIEU SATURE

L'équation de transport définissant la variation de la concentration en fonction du temps, dans un aquifère découle du principe de conservation de la masse. Si dans un milieu poreux homogène, **on considère un écoulement unidirectionnel et des mécanismes de dispersion dans les trois dimensions**, on peut écrire pour un volume différentiel (dV=dx.dy.dz) :

$$n_e.\frac{\partial C_{e_nap}}{\partial t} + (n_{aq} - n_e).\frac{\partial C'_{e_nap}}{\partial t} + MV_{aq}.\frac{\partial C_{aq_ads}}{\partial t} =$$
$$n_e.(D_{eff,x}.\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial x^2} + D_{eff,y}.\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial y^2} + D_{eff,z}.\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial z^2})$$
$$+ (n_{aq} - n_e).\left(D_{e,aq}.\frac{\partial^2 C'_{e_nap}}{\partial x^2} + D_{e,aq}.\frac{\partial^2 C'_{e_nap}}{\partial y^2} + D_{e,aq}.\frac{\partial^2 C'_{e_nap}}{\partial z^2} \right)$$
$$- n_e.v_e \times \frac{\delta C_{e_nap}}{\delta x} - \lambda_{aq}.\left[n_e.C_{e_nap} + (n_{aq} - n_e).C'_{e_nap} + MV_{aq}.C_{aq_ads} \right]$$

Équation 1.4.7

avec C_{e_nap} : concentration volumique de polluant dans la phase mobile de l'eau,

C'_{e_nap} : concentration volumique de polluant dans la phase immobile de l'eau,

C_{aq_ads} : concentration massique de polluant sur la phase solide,

MV_{aq} : masse volumique apparente de l'aquifère,

λ_{aq} : facteur de dégradation du polluant dans la zone saturée,

n_{aq} : porosité totale de l'aquifère,

n_e : porosité efficace,

v_e : vitesse effective ou vitesse de pore,

$D_{eff,x}$, $D_{eff,y}$, $D_{eff,z}$: coefficient de dispersion effective dans les directions x, y et z (cf. section 1.4.1.2.1),

$D_{e,aq}$: coefficient de diffusion moléculaire (cf. section 1.4.1.2.3).

1. Si la **concentration de polluant dans la phase immobile de l'eau (C'_{e_nap}) est proche de la concentration dans la phase mobile (C_{e_nap}) (diffusion importante)**, l'équation 1.4.7 s'écrit :

$$n_{aq}.\frac{\partial C_{e_nap}}{\partial t}+MV_{aq}.\frac{\partial C_{aq_ads}}{\partial t}=n_{aq}.(D_{eff,x}.\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial x^2}+D_{eff,y}.\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial y^2}+D_{eff,z}.\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial z^2})$$
$$-n_e.v_e\times\frac{\delta C_{e_nap}}{\delta x}-\lambda_{aq}.\left[n_{aq}.C_{e_nap}+MV_{aq}.C_{aq_ads}\right]$$

Equation 1.4.8

Si le polluant s'adsorbe sur les particules de l'aquifère, si l'équilibre multiphasique est atteint et si le phénomène d'adsorption peut être décrit par le coefficient de partage (K_{d_aq}), l'équation 1.4.8 devient :

$$\frac{\partial C_{e_nap}}{\partial t}=\frac{D_{eff,x}}{R}\times\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial x^2}+\frac{D_{eff,y}}{R}\times\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial y^2}+\frac{D_{eff,z}}{R}\times\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial z^2}$$
$$-\frac{v_d}{n_{aq}.R}\times\frac{\delta C_{e_nap}}{\delta x}-\lambda_{aq}\times C_{e_nap}$$

Equation 1.4.9

avec v_d : vitesse de Darcy,

R : coefficient de retard :

$$R=1+\frac{MV_{aq}\times K_{d_aq}}{n_{aq}}$$

Equation 1.4.10

2. Si la **concentration de polluant dans la phase immobile de l'eau (C'_{e_aq}) est proche de zéro (diffusion négligeable),** l'équation 1.4.7 s'écrit :

$$n_e.\frac{\partial C_{e_nap}}{\partial t}+MV_{aq}.\frac{\partial C_{aq_ads}}{\partial t}=n_e.(D_{eff,x}.\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial x^2}+D_{eff,y}.\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial y^2}$$
$$+D_{eff,z}.\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial z^2})$$
$$-n_e.v_e\times\frac{\delta C_{e_nap}}{\delta x}-\lambda_{aq}.\left[n_e.C_{e_nap}+MV_{aq}.C_{aq_ads}\right]$$

Équation 1.4.11

Si le polluant s'adsorbe sur les particules de l'aquifère, si l'équilibre multiphasique est atteint et si le phénomène d'adsorption peut être décrit par le coefficient de partage (K_{d_aq}), l'équation 1.4.11 devient :

$$\frac{\partial C_{e_nap}}{\partial t}=\frac{D_{eff,x}}{R}\times\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial x^2}+\frac{D_{eff,y}}{R}\times\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial y^2}+\frac{D_{eff,z}}{R}\times\frac{\partial^2 C_{e_nap}}{\partial z^2}$$
$$-\frac{v_e}{R}\times\frac{\delta C_{e_nap}}{\delta x}-\lambda_{aq}\times C_{e_nap}$$

Equation 1.4.12

avec $R=1+\frac{MV_{aq}\times K_{d_aq}}{n_e}$

Equation 1.4.13

Remarque : Si la porosité totale (n_{aq}) est peu différente de la porosité cinématique (n_e), les équations 1.4.8, 1.4.9 et 1.4.10 sont respectivement équivalente aux équations 1.4.11, 1.4.12 et 1.4.13.

Rappel : **La perte de polluant par volatilisation à partir de la nappe n'est pas prise en compte dans cette approche.**

1.4.1.2.1. ESTIMATION DES COEFFICIENTS DE DISPERSION EFFECTIVE

Le coefficient de dispersion effective représente les mécanismes de diffusion moléculaire et de dispersion cinématique du polluant en phase liquide. La diffusion moléculaire est liée au mouvement brownien des molécules en solution. La dispersion cinématique (ou dynamique) dépend de l'hétérogénéité du milieu poreux. Cette hétérogénéité se traduit par une dispersion aléatoire des vitesses réelles des particules d'eau autour de la vitesse moyenne de déplacement de l'eau.

Les coefficients de dispersion effective sont égaux à :

$$D_{eff,x} = D_{isp,x} + D_{e,aq}$$ Équation 1.4.14

$$D_{eff,y} = D_{isp,y} + D_{e,aq}$$ Équation 1.4.15

$$D_{eff,z} = D_{isp,z} + D_{e,aq}$$ Équation 1.4.16

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$D_{eff,x,}$ $D_{eff,y}$ $D_{eff,z}$	Coefficients de dispersion effective dans les directions x,y et z	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
$D_{isp,x}$ $D_{isp,y}$ $D_{isp,z}$	Coefficients de dispersion cinématique dans les directions x,y et z	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
$D_{e,aq}$	Coefficient de diffusion moléculaire du polluant dans l'eau de la zone saturée	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E

1.4.1.2.2. ESTIMATION DES COEFFICIENTS DE DISPERSION CINEMATIQUE

Les coefficients de dispersion cinématique sont donnés par les relations suivantes :

1. $D_{isp,x} = \alpha_L \times v_e$ Équation 1.4.17

avec v_e : vitesse effective,

α_L : dispersivité longitudinale :

$$\alpha_L = 0{,}1 \times L_p$$ Équation 1.4.18

avec L_p : longueur du panache,

2. $D_{isp,y} = \alpha_T \times v_e$ Équation 1.4.19

avec α_T : dispersivité transversale. Elle est supposée représenter 1/10ème de la dispersivité longitudinale.

3. $D_{isp,z} = \alpha_v \times v_e$ Équation 1.4.20

avec α_v : dispersivité verticale. La dispersivité verticale peut généralement être négligée, car elle est très faible. De plus, en première approche, la source est classiquement affectée à toute la zone saturée et ce paramètre n'a plus lieu d'être.

La dispersivité peut être déterminée *in situ* par des traçages.

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$D_{isp,x}$	Coefficient de dispersion cinématique longitudinale	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
$D_{isp,y}$	Coefficient de dispersion cinématique transversale	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
$D_{isp,z}$	Coefficient de dispersion cinématique verticale	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
α_L	Dispersivité longitudinale	L	m	C ou E
α_T	Dispersivité transversale	L	m	C ou E
α_v	Dispersivité verticale	L	m	C ou E
v_e	Vitesse effective	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
L_p	Longueur du panache	L	m	E

1.4.1.2.3. ESTIMATION DU COEFFICIENT DE DIFFUSION MOLECULAIRE DANS LA NAPPE

D'après Millington et Quirk (1961), le coefficient de diffusion moléculaire dans la nappe $D_{e,aq}$ est donné par :

$$D_{e,aq} = D_e \times \tau_{aq}$$ Équation 1.4.21

avec $\tau_{aq} = \frac{\theta_{aq}^{\frac{10}{3}}}{n_{aq}^{2}} = n_{aq}^{\frac{4}{3}}$ Équation 1.4.22

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$D_{e,aq}$	Coefficient de diffusion moléculaire du polluant dans l'eau de la zone saturée	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
D_e	Coefficient de diffusion moléculaire du polluant dans l'eau	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
τ_{aq}	Facteur de tortuosité dans l'aquifère	-	-	C ou E
n_{aq}	Porosité de l'aquifère	-	-	E

Remarque : En milieu poreux, la diffusion moléculaire peut être négligée par rapport à la dispersion. En effet, elle n'intervient que pour de faibles vitesses d'écoulement (<=10 cm/j) ou de très longues périodes de temps (par exemple les études menées sur le stockage de déchets à très forte activité en couche géologique profonde et à très faible perméabilité).

1.4.1.3. SOLUTION DE DOMENICO

Domenico (1985, 1987) a proposé une solution simplifiée de l'équation 1.4.7, représentant le transport de polluants en milieu saturé et en phase dissoute, qui est reprise en l'état ou adaptée dans de nombreux modèles analytiques.

L'expression ci-dessous donne la solution de Domenico modifiée pour une source surfacique de polluant dans la zone saturée, perpendiculaire à l'écoulement, comprise entre ($-Y_{source_aq}$ / 2 ; $+Y_{source_aq}$ / 2) et ($-Z_{source_aq}$ / 2 ; $+Z_{source_aq}$ / 2) et de concentration constante $C_{e_nap,0}$. Cette expression, identique à celle de la publication de West et al. (2007, équation 22), est obtenue avec les conditions initiales suivantes :

$C_{e_nap}(x, y, z, 0) = 0$ (concentration initiale nulle pour x,y,z >0)

et $C_{e_nap}(0, y, z, 0) = C_{e_nap,0}$ (concentration égale à $C_{e_nap,0}$ à l'instant initial au niveau de la source),

$$C_{e_nap}(x, y, z, t) = \frac{C_{e_nap,0}}{8} \times f_x \times f_y \times f_z$$ Équation 1.4.23

avec

$$f_x = \exp\left(\frac{v_d'.x}{2.D_{eff,x}} \cdot \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4.\lambda_{aq}.R.D_{eff,x}}{\left(v_d'\right)^2}}\right)\right).erfc\left(\frac{x - \frac{v_d'}{R}.t.\sqrt{1 + \frac{4.\lambda_{aq}.R.D_{eff,x}}{\left(v_d'\right)^2}}}{2.\sqrt{\frac{D_{eff,x}}{R}.t}}\right)$$

$$+ \exp\left(\frac{v_d'.x}{2.D_{eff,x}} \cdot \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4.\lambda_{aq}.R.D_{eff,x}}{\left(v_d'\right)^2}}\right)\right) \times erfc\left(\frac{x + \frac{v_d'}{R}.t.\sqrt{1 + \frac{4.\lambda_{aq}.R.D_{eff,x}}{\left(v_d'\right)^2}}}{2.\sqrt{\frac{D_{eff,x}}{R}.t}}\right)$$

Équation 1.4.24

$$f_y = erf\left(\frac{y + Y_{source_aq}/2}{2.\sqrt{\frac{D_{eff,y} \cdot x}{v_d'}}}\right) - erf\left(\frac{y - Y_{source_aq}/2}{2.\sqrt{\frac{D_{eff,y} \cdot x}{v_d'}}}\right)$$ Équation 1.4.25

$$f_z = erf\left(\frac{z + Z_{source_aq}/2}{2.\sqrt{\frac{D_{eff,z} \cdot x}{v_d'}}}\right) - erf\left(\frac{z - Z_{source_aq}/2}{2.\sqrt{\frac{D_{eff,z} \cdot x}{v_d'}}}\right)$$ Équation 1.4.26

Selon le cas (cf. section 1.4.1.2),

on a : $v_d' = v_d/n_{aq}$ et $R = 1 + \frac{MV_{aq} \times K_{d_aq}}{n_{aq}}$

ou $v_d' = v_d/n_e$ et $R = 1 + \frac{MV_{aq} \times K_{d_aq}}{n_e}$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
C_{e_nap} (x, y, z, t)	Concentration en polluant en phase dissoute dans l'eau de la nappe au point de coordonnées x, y, z et à l'instant t	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{e_nap,0}$	Concentration en polluant en phase dissoute dans l'eau de la nappe, à l'instant initial, au niveau de la source	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$D_{eff,x,}$	Coefficient de dispersion effective dans la direction x	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
$D_{eff,y}$	Coefficient de dispersion effective dans la direction y	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
$D_{eff,z}$	Coefficient de dispersion effective dans la direction z	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
R	Facteur de retard	-	-	C
x	Distance à partir de la source	L	m	E
y	Distance par rapport au centre de la source	L	m	E
z	Distance par rapport au haut de la zone saturée	L	m	E
Y_{source_aq}	Largeur de la source de polluant dans la zone saturée	L	m	E
Z_{source_aq}	Hauteur de la source de polluant dans la zone saturée	L	m	E
λ_{aq}	Facteur de dégradation du polluant dans l'aquifère	T^{-1}	s^{-1}	E
V_d'	Vitesse de l'eau	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C

Cette solution suppose un aquifère et un champ de flux homogène et isotrope. Elle n'est pas adaptée pour représenter des situations où le champ de flux peut être perturbé par des systèmes de pompage, lorsque des flux verticaux peuvent perturber le transport et de manière générale lorsque les conditions hydrologiques peuvent changer sur le domaine modélisé.

Les limites potentielles de la solution de Domenico ont été présentées par Guyonnet et al. (2004), Srinivasan et al. (2007), West et al. (2007). Il est reconnu que cette solution peut, sous certaines conditions, entraîner des erreurs, en particulier en cas de valeurs élevées de la dispersivité longitudinale. Mais, cette erreur reste négligeable pour des valeurs de dispersivité longitudinale raisonnablement basses. Guyonnet et al. (2004) ont montré que la solution de Domenico était valable lorsque le nombre de Peclet[9] était supérieur ou égal à 6. En se basant sur la comparaison faite par West et al. (2007) entre la solution exacte et celle de Domenico, l'US EPA (http://epa.gov/ada/csmos/domenico.html) recommande d'utiliser cette dernière pour un nombre de Peclet supérieur ou égal à 10 (pour lequel l'advection est prépondérante vis-à-vis de la dispersion).

[9] Le nombre de Peclet étant alors défini comme le produit de la vitesse moyenne de l'eau ($m.s^{-1}$), multipliée par la distance longitudinale (m) de la source à un point d'observation arbitraire, divisée par le coefficient de dispersion longitudinal ($m^2.s^{-1}$).

1.4.1.4. AUTRES MODELES DISPONIBLES ET DEMARCHE RECOMMANDEE POUR ESTIMER LE TRANSPORT DES POLLUANTS EN MILIEU SATURE

De nombreux modèles existent pour traiter le transport des polluants dans les eaux souterraines : modèles analytiques, modèles semi-analytiques, modèles numériques.

Les modèles analytiques, outils de simulation simplifiés, utilisent une solution mathématique des équations d'écoulement et/ou de transport en tous points de l'espace et du temps (cf. Domenico, 1987). Le domaine étudié n'est pas discrétisé par un maillage, l'écoulement est généralement unidirectionnel et permanent, et le milieu est considéré comme homogène et isotrope. A contrario, pour un modèle numérique, le domaine étudié est discrétisé dans l'espace et dans le temps et un schéma numérique est utilisé pour résoudre l'équation d'écoulement et de transport (différences finies, éléments finis, volumes finis…).

Les modèles analytiques ne tiennent pas compte non plus des interactions avec d'autres milieux ou avec la matrice. La grande majorité d'entre eux considère ainsi une injection de polluant directement dans la zone saturée.

De nombreux outils ont été développés par l'US EPA et sont accessibles en ligne (sur le site http://www.epa.gov/ada/csmos/models.html). Le lecteur peut également se reporter au document d'Alberta Environment sur l'évaluation comparative des modèles disponibles pour représenter le devenir des polluants dans le sol et les eaux souterraines (Alberta Environnement, 2005).

A titre d'exemple, les outils suivants peuvent être cités :

- ANALGWST-PATCHF (Wexley, 1992 a et b)
- ART3D (Clement, 2001; Quezada et al., 2003; Jones et al., 2006)
- AT123D (Yeh, 1993)
- BIO 1D (Srinivasan et al., 1988; Maraqa et al., 2007)
- BIOCHLOR (US EPA, 2002)
- BIOSCREEN (US EPA, 1996b)
- MISP (BRGM, 2001, 2008)
- NAS (Chapelle et al., 2003 ; Mendez et al., 2004 ; Passerini et al., 2004)

Ainsi, BIOCHLOR (Aziz et al., 2000) est un modèle analytique qui permet de simuler l'évolution d'une pollution et notamment l'atténuation naturelle des polluants dissous (chloroéthènes ou chloroéthanes exclusivement[10]). Le logiciel, programmé sous Excel, est basé sur la solution analytique de Domenico (1987) modifiée par Martin-Hayden et al. (1997). Il simule l'advection, la dispersion, la sorption et la biodégradation par déchloration réductrice (condition anaérobie avec dégradation séquentielle du 1er ordre). Cet outil est employé dans le cadre de simulations portant sur des aquifères poreux, relativement homogènes de lithologie sablo-graveleuse et simule exclusivement les phénomènes en zone saturée.

[10] Familles des Composés Organo-Halogénés Volatils (COHV).

Dans le cadre de travaux portant sur le choix entre outils analytiques et numériques, les modèles BIOCHLOR et NAS ont été testés, puis les résultats de BIOCHLOR ont été comparés à ceux d'outils numériques (cf. http://transpol.ineris.fr/). Pour le cas traité, avec les données d'entrée disponibles, il est apparu que des outils plus simples étaient capables de simuler la situation de manière aussi précise que les outils numériques. Cette similarité des résultats peut cependant être expliquée par le fait que l'exercice d'intercomparaison conduit avec les outils numériques a été fortement simplifié (en termes d'écoulement, de représentation de la source…).

Comme pour la représentation des autres modes de transfert, il convient de rappeler que le choix de modélisation doit finalement être dicté par :

- les phénomènes considérés,
- les objectifs du modèle,
- les outils disponibles et l'adaptation de l'outil envisagé au cas traité.

De manière plus précise, le rapport de l'INERIS (2008a), référencé DRC-08-86031-00620A, décrit les éléments à prendre en compte pour choisir entre un modèle analytique et un modèle numérique dans le cadre de l'étude du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines. En résumé, une approche pragmatique et itérative est recommandée, en mettant en avant et en justifiant les réserves relatives aux résultats présentés. La démarche à privilégier consiste, si possible, à choisir d'abord un modèle simple (analytique ou numérique, mais avec de nombreuses hypothèses simplificatrices, « conservatoires »), puis à compliquer le modèle, si nécessaire, en fonction des informations/données d'entrée disponibles. Mais, en cas de trop fortes incertitudes, de nouvelles investigations doivent être effectuées.

1.4.2. APPORT DE POLLUANT A LA NAPPE A PARTIR D'UNE SOURCE « SOL »

En première approche, au droit d'une zone polluée, on peut estimer la concentration dans la nappe attribuable à la source étudiée, à partir du bilan massique suivant :

$$L_s \times l_s \times h_{aq} \times \frac{dC_{e_nap,site}}{\partial t} = L_s \times l_s \times C_{es,0} \times R_{ech} - \left[R_{ech} \times L_s \times l_s + \left(l_s \times h_{aq} \times K_e \times i\right)\right] \times C_{e_nap,site}$$

Équation 1.4.27

L'intégration de cette équation sur des intervalles de temps (Δt) où les paramètres sont constants donne :

$$C_{e_nap,site}(t) = \frac{C_{es,0} \times R_{ech}}{R_{ech} + h_{aq} \times \frac{K_e \times i}{L_s}} \times \left(1 - e^{-\left(\frac{R_{ech}}{h_{aq}} + \frac{K_e \times i}{L_s}\right) \times \Delta t}\right) + C_{e_nap,site}(t - \Delta t) \times e^{-\left(\frac{R_{ech}}{h_{aq}} + \frac{K_e \times i}{L_s}\right) \times \Delta t}$$

Équation 1.4.28

et **à l'état stationnaire**, on a :

$$C_{e_nap,site} = \frac{C_{es,0} \times R_{ech}}{R_{ech} + h_{aq} \times \frac{K_e \times i}{L_s}}$$ Équation 1.4.29

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{e_nap,site}$	Concentration de polluant en phase dissoute dans l'eau de la nappe, au droit de la source sol	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{es,0}$	Concentration de polluant dans l'eau du sol attribuable à la source au bas de la zone insaturée	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
L_s	Longueur de la zone polluée	L	m	E
h_{aq}	Hauteur de l'aquifère	L	m	E
i	Gradient hydraulique (cf. section 1.4.1.1.1)	-	-	C ou E
K_e	Conductivité hydraulique	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
R_{ech}	Flux de lixiviation (cf. équation 1.1.48)	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E

(l_s : largeur de la zone polluée)

Remarque : La concentration de polluant en phase dissoute dans l'eau de la nappe, au droit du site, calculée à partir du bilan massique 1.4.27 ne tient pas compte des apports éventuels de polluant ubiquitaire d'origine anthropique et du bruit de fond géochimique. Cette concentration correspond à la concentration attribuable à la source sol étudiée, hors bruit de fond. Selon l'approche retenue, la concentration totale en phase dissoute dans les eaux souterraines est estimée en ajoutant à cette concentration, la concentration de bruit de fond (cf. section 4), si la somme de ces deux concentrations reste inférieure à la solubilité du polluant dans l'eau.

Pour représenter l'apport de polluant à la nappe sous forme dissoute, des modèles plus sophistiqués existent (CHEMFLO, US EPA, 2003 ; VLEACH, US EPA, 2007 ; SESOIL, Bonazountas et al., 1984). Certains modèles utilisent l'équation de Richards (Delage et al.) pour représenter l'écoulement dans le sol en zone insaturée. Dans cette équation, adaptée de l'équation de Darcy, la conductivité hydraulique n'est plus considérée comme constante, mais comme une fonction de la teneur en eau θ.

Ainsi, selon l'équation de Richards, on écrit :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = div[-K_e(\theta) \times \frac{\delta h}{\delta x} \times \vec{grad}(\theta)] + \frac{\delta K_e(\theta)}{\delta z}$$ Équation 1.4.30

avec θ : fraction volumique occupée par l'eau du sol,

h_e : charge hydraulique dans le sol.

La relation $K_e(\theta)$ doit alors être déterminée expérimentalement, ce qui représente l'une des principales difficultés de la modélisation du transfert en zone non saturée.

1.5. MILIEU « EAUX SUPERFICIELLES »

Les phénomènes mis en jeu dans la contamination des eaux superficielles et le devenir des polluants au sein de ce milieu sont potentiellement très nombreux.

Ainsi, une rivière ou un lac peut être contaminé par différents types de source :

- des sources ponctuelles comme un rejet industriel ou un affluent situé en amont,
- des sources diffuses liées à l'érosion et au ruissellement des sols du bassin versant, aux dépôts atmosphériques ou bien dues à l'alimentation par une nappe.

Les polluants rejetés sont transportés par convection, diffusion et dispersion.

Des échanges peuvent avoir lieu avec l'atmosphère (volatilisation) et avec la couche de sédiments (dépôts et remise en suspension de particules, diffusion). Des réactions chimiques entre différentes substances présentes peuvent provoquer des phénomènes de précipitation ou de dilution en fonction de l'évolution des conditions chimiques. Des phénomènes de dégradation peuvent avoir lieu au sein de la colonne d'eau et au sein de la couche sédimentaire.

Par ailleurs, le régime hydraulique peut varier dans le temps (du débit d'étiage au débit de pointe) et dans l'espace (variation de la section et du débit).

La modélisation de tous ces phénomènes est complexe. Dans ce chapitre, seules des approches très simples seront présentées pour estimer la concentration des polluants dans les eaux superficielles. Ces approches nécessitent peu de données et correspondent à un milieu « eaux superficielles » à l'état stationnaire. Elles ne tiennent pas compte des variations de débit et de section du cours d'eau, de la présence éventuelle de zones stagnantes, du temps et de la distance nécessaires pour que les polluants soient dilués de manière homogène dans le milieu aqueux.

Pour des approches plus réalistes et plus fines, il existe d'autres modèles (à titre d'exemples : EXAMS, US EPA, 2004b ; TOXRIV, Trapp et al., 1997, CORMIX, Doneker et al., 2007). Mais l'INERIS n'a pas de retour d'expérience sur ces outils.

Comme pour le sol, l'air et les eaux souterraines, les expressions développées ci-dessous sont données pour le calcul de la concentration des polluants dans les eaux attribuables aux sources de contamination locales, sans prise en compte des apports correspondant aux sources de polluants ubiquitaires d'origine anthropique et du bruit de fond géochimique. Pour la distinction entre concentrations attribuables et concentrations totales et l'estimation des concentrations totales, le lecteur se reportera à la section 4.

1.5.1. CAS D'UNE CONTAMINATION PAR UN REJET CANALISE

Les équations présentées ci-dessous permettent de calculer la concentration de polluant à l'état stationnaire, dans un cours d'eau, à l'aval d'un rejet canalisé, en tenant compte éventuellement de la diminution de la concentration dans l'eau, due aux phénomènes de dégradation, de volatilisation et de sédimentation. La diffusion entre les eaux superficielles et les sédiments n'est pas prise en compte (cf. limite de l'approche en section 1.5.1.4).

1.5.1.1. CALCUL DE LA CONCENTRATION DANS L'EAU AU POINT DE REJET

Au point de rejet, la concentration du polluant est calculée en supposant le **mélange instantané du polluant dans l'eau,** d'où :

$$C_{e_\sup}(x=0) = \frac{C_{rej} \times Q_{rej}}{Q^{e}_{e_\sup} + Q_{rej}}$$

Équation 1.5.1

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{e_sup}(x=0)$	Concentration de polluant dans l'eau superficielle au point de rejet	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C_{rej}	Concentration de polluant dans le rejet	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	E
Q_{rej}	Flux volumique rejeté	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	E
$Q^{e}_{e_\sup}$	Débit hydraulique du cours d'eau à l'amont du rejet	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	E

Remarques :

1. Au point de rejet (x=0), il n'y a généralement pas homogénéisation du polluant sur l'ensemble de la section du cours d'eau. La distance nécessaire pour qu'il y ait dilution complète du rejet (distance dite « de bon mélange » peut en fait être de plusieurs kilomètres. A l'aval proche du point de rejet, la concentration de polluant peut donc être localement (dans le flux du rejet imparfaitement mélangé) supérieure à celle calculée avec l'équation 1.5.1.
2. Dans le cas d'une autre source de pollution locale à l'amont de ce rejet, un terme supplémentaire, correspondant à la concentration de contaminant à l'amont de ce point (hors concentration liée au bruit de fond géochimique et à la pollution anthropique ubiquitaire) peut être ajouté à l'équation 1.5.1.

1.5.1.2. CALCUL DE LA CONCENTRATION DANS L'EAU A L'AVAL DU REJET

L'équation du bilan massique du polluant sur un segment Δx d'un cours d'eau s'écrit :

$$\frac{\Delta m_{e_\sup}}{\Delta t} = Q_{e_\sup}(x_{i-1}) \times C_{e_\sup}(x_{i-1}) - Q_{e_\sup}(x_i) \times C_{e_\sup}(x_i) - Vol_{e_\sup} \times \lambda_{e_\sup} \times C_{e_\sup}(x_i)$$

Équation 1.5.2

avec m_{e_sup} : masse de polluant dans le volume d'eau Vol_{e_sup},

C_{e_sup} : concentration de polluant dans le volume d'eau Vol_{e_sup},

Q_{e_sup} : débit volumique du cours d'eau,

λ_{e_sup} : facteur global d'élimination du polluant (somme des facteurs d'élimination liés à la dégradation, à la volatilisation et à la sédimentation).

Si le **débit** et la **section du cours d'eau sont constants** sur le segment Δx,

$$\frac{\Delta C_{e_sup}}{\Delta t} = -v_{e_sup} \times \frac{C_{e_sup}(x_i) - C_{e_sup}(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} - \lambda_{e_sup} \times C_{e_sup}(x_i) \qquad \text{Équation 1.5.3}$$

avec ν_{e_sup} : vitesse moyenne de l'eau,

$$v_{e_sup} = \frac{Q_{e_sup}}{S_{e_sup}} \qquad \text{Équation 1.5.4}$$

et S_{e_sup} : section transversale du cours d'eau.

Sous forme différentielle, l'équation 1.5.3 s'écrit :

$$\frac{dC_{e_sup}}{dt} = -v_{e_sup} \times \frac{\partial C_{e_sup}}{\partial x} - \lambda_{e_sup} \times C_{e_sup} \qquad \text{Équation 1.5.5}$$

A l'état stationnaire,

$$\frac{\partial C_{e_sup}(x)}{\partial x} = -\frac{\lambda_{e_sup}(x)}{v_{e_sup}} \times C_{e_sup}(x) \qquad \text{Équation 1.5.6}$$

Si λ_e et v_{e_sup} sont constants dans la direction de l'écoulement, l'intégration de l'équation 1.5.6 donne :

$$C_{e_sup}(x) = C_{e_sup}(x=0) \times e^{(-\lambda_{e_sup} \times \frac{x}{v_{e_sup}})} \qquad \text{Équation 1.5.7}$$

soit $$C_{e_sup}(x) = \frac{C_{rej} \times Q_{rej}}{Q^e_{e_sup} + Q_{rej}} \times e^{(-\lambda_{e_sup} \times \frac{x}{v_{e_sup}})} \qquad \text{Équation 1.5.8}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{e_sup}(x)$	Concentration de polluant dans l'eau superficielle au point x	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C_{rej}	Concentration de polluant dans le rejet	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	E
Q_{rej}	Flux volumique rejeté	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	E
$Q^e_{e_sup}$	Débit hydraulique du cours d'eau à l'amont du rejet	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	E
λ_{e_sup}	Facteur global d'élimination du polluant (somme des facteurs d'élimination liés à la dégradation, à la volatilisation et à la sédimentation)	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
ν_{e_sup}	Vitesse moyenne de l'eau	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E

Remarques :

1. Dans le cas d'une pollution à l'amont du rejet (hors concentration liée au bruit de fond géochimique et à la pollution anthropique ubiquitaire), on peut écrire :

$$C_{e_\sup}(x) = \left(\frac{C_{rej} \times Q_{rej} + C^{e}_{e_\sup} \times Q^{e}_{e_\sup}}{Q^{e}_{e_\sup} + Q_{rej}} \right) \times e^{(-\lambda_{e_\sup} \times \frac{x}{v_{e_\sup}})} \qquad \text{Équation 1.5.9}$$

avec $C^{e}_{e_\sup}$: concentration de polluant dans l'eau à l'amont du rejet.

2. Compte-tenu de la première remarque formulée dans la section précédente, les équations 1.5.8 et 1.5.9 sont valables si le rejet peut être considéré comme parfaitement mélangé, c'est-à-dire à partir de la distance dite « de bon mélange ».

1.5.1.3. ESTIMATION DU FACTEUR D'ELIMINATION

Les phénomènes d'élimination peuvent être pris en compte ou non pour l'estimation des concentrations de polluant dans les eaux superficielles. L'absence de prise en compte conduit à surestimer les concentrations de polluant. Dans le cas d'un rejet canalisé et du modèle développé ci-dessus, l'absence de prise en compte des phénomènes d'élimination induit une concentration constante du polluant en aval du rejet tout au long du cours d'eau. La prise en compte des phénomènes d'élimination peut conduire au contraire à sous-estimer les concentrations dans les eaux.

Le facteur d'élimination cité ci-dessus peut intégrer les phénomènes de dégradation, sédimentation et volatilisation :

$$\lambda_{e_\sup} = \lambda_d + \lambda_s + \lambda_v \qquad \text{Équation 1.5.10}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
λ_{e_sup}	Facteur global d'élimination du polluant (somme des facteurs d'élimination liés à la dégradation, à la volatilisation et à la sédimentation) dans les eaux superficielles	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
λ_d	Facteur de dégradation	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
λ_s	Facteur de sédimentation	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
λ_v	Facteur de volatilisation	T^{-1}	s^{-1}	C ou E

Les mécanismes de dégradation dans l'eau sont l'hydrolyse (le mécanisme d'hydrolyse dépendant du pH, la constante d'hydrolyse peut varier de plusieurs ordres de grandeur en fonction de la valeur du pH), la photolyse et la biodégradation. Ces mécanismes sont représentés selon une réaction d'ordre 1 ou de pseudo-ordre 1, à l'aide d'un facteur global λ_d.

1.5.1.3.1. CALCUL DU FACTEUR DE SEDIMENTATION

En l'absence de polluant en phase liquide non aqueuse et plus dense que l'eau, la masse de polluant sédimentant par unité de temps $\left\lfloor FM_{e_\sup} \right\rfloor_{sed}$ peut s'exprimer en fonction de la vitesse d'accroissement de la hauteur de la couche de sédiments.

$$\left\lfloor FM_{e_\sup} \right\rfloor_{sed} = Vol_{e_\sup} \times \lambda_s \times C_{e_\sup} \qquad \text{Équation 1.5.11}$$

et $$\left\lfloor FM_{e_\sup} \right\rfloor_{sed} = A_{e_\sup} \times v_{sed} \times (1-\theta_{sed}) \times MV_{p_sed} \times C_{p_e_\sup} \qquad \text{Équation 1.5.12}$$

d'où $$\lambda_s = \frac{v_{sed}}{h_{e_\sup}} \times (1-\theta_{sed}) \times MV_{p_sed} \times \frac{C_{p_e_\sup}}{C_{e_\sup}} \qquad \text{Équation 1.5.13}$$

avec λ_s : facteur de sédimentation (correspondant au dépôt net de particules au fond du cours d'eau),

Vol_{e_sup} : volume d'eau considéré,

A_{e_sup} : surface de la masse d'eau considérée,

v_{sed} : vitesse d'accroissement de la hauteur de la couche de sédiments,

h_{e_sup} : profondeur du cours d'eau,

θ_{sed} : porosité de la couche de sédiments,

MV_{p_sed} : masse volumique des particules sédimentaires,

$C_{p_e_sup}$: concentration de polluant sur les particules en suspension dans l'eau,

C_{e_sup} : concentration de polluant dans l'eau superficielle sous forme dissoute et particulaire.

Or, en l'absence de polluant en phase pure ou non miscible avec l'eau,

$$C_{e_\sup} = C_{p_e_\sup} \times MES + C_{d_e_\sup} \qquad \text{Équation 1.5.14}$$

Si le polluant est à l'équilibre entre les phases particulaire et dissoute et si la relation entre la concentration de polluant adsorbée sur les particules en suspension et la concentration dissoute dans l'eau est donnée par **:**

$$K_{d_MES} = \frac{C_{p_e_\sup}}{C_{d_e_\sup}} \qquad \text{Équation 1.5.15}$$

avec $C_{d_e_sup}$: concentration de polluant sous forme dissoute dans l'eau superficielle,

K_{d_MES} : coefficient de partition du polluant entre les matières en suspension et l'eau,

MES : concentration de particules en suspension dans l'eau,

alors $$\lambda_s = \frac{v_{sed}}{h_{e_\sup}} \times (1-\theta_{sed}) \times MV_{p_sed} \times \frac{K_{d_MES}}{1 + K_{d_MES} \times MES} \qquad \text{Équation 1.5.16}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
λ_s	Facteur de sédimentation (correspondant au dépôt net de particules au fond du cours d'eau)	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
v_{sed}	Vitesse d'accroissement de la hauteur de la couche de sédiments	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
h_{e_sup}	Profondeur du cours d'eau	L	m	E
θ_{sed}	Porosité de la couche de sédiments	-	-	E
K_{d_MES}	Coefficient de partition du polluant entre les matières en suspension et l'eau	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
MV_{p_sed}	Masse volumique des particules sédimentaires	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
MES	Concentration de particules en suspension dans l'eau	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E

λ_s peut aussi s'exprimer en fonction de la vitesse de dépôt net (résultant du flux de particules qui se déposent et de celles qui sont remises en suspension) des particules en suspension. En effet, l'accroissement de la masse de particules dans la couche sédimentaire est égal à la masse de particules qui se déposent. On peut donc écrire :

$$v_{sed} \times (1 - \theta_{sed}) \times MV_{p_sed} = v_{MES} \times MES \qquad \text{Équation 1.5.17}$$

avec v_{MES} : vitesse de dépôt net des particules,

d'où $$\lambda_s = \frac{v_{MES}}{h_{e_\sup}} \times MES \times \frac{K_{d_MES}}{1 + K_{d_MES} \times MES} \qquad \text{Équation 1.5.18}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
λ_s	Facteur de sédimentation (correspondant au dépôt net de particules au fond du cours d'eau)	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
v_{MES}	Vitesse de dépôt des particules (correspondant au dépôt net de particules au fond du cours d'eau)	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
h_{e_sup}	Profondeur du cours d'eau	L	m	E
K_{d_MES}	Coefficient de partition du polluant entre les matières en suspension et l'eau	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
MES	Concentration de particules en suspension dans l'eau	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E

1.5.1.3.2. CALCUL DU FACTEUR DE VOLATILISATION

Le flux de transfert de masse des eaux superficielles vers l'air $\left\lfloor FM_{e_\sup} \right\rfloor_{vol}$ est calculé à partir du coefficient de transfert de masse (K_v) :

$$\left\lfloor FM_{e_\sup} \right\rfloor_{vol} = A_{e_\sup} \times K_v \times C_{d_e_\sup} \qquad \text{Équation 1.5.19}$$

et $$\left\lfloor FM_{e_\sup} \right\rfloor_{vol} = Vol_{e_\sup} \times \lambda_v \times C_{e_\sup} \qquad \text{Équation 1.5.20}$$

d'où $$\lambda_v = \frac{K_v}{h_{e_\sup}} \times \frac{C_{d_e_\sup}}{C_{e_\sup}} \qquad \text{Équation 1.5.21}$$

avec Vol_{e_sup} : volume d'eau considéré,

A_{e_sup} : surface de la masse d'eau considérée,

h_{e_sup} : profondeur du cours d'eau,

$C_{d_e_sup}$: concentration de polluant en phase dissoute dans l'eau,

C_{e_sup} : concentration de polluant dans l'eau superficielle sous forme dissoute et particulaire.

D'après les équations 1.5.14 et 1.5.15, en l'absence de polluant en phase pure ou non miscible avec l'eau, on peut écrire :

$$\lambda_v = \frac{K_v}{h_{e_sup} \times (1 + K_{d_MES} \times MES)}$$ Équation 1.5.22

Symbole	Paramètre	Dimensions	Unités	Statut
λ_v	Facteur de volatilisation	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
K_v	Coefficient de transfert de masse entre les milieux eaux superficielles et air	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
h_{e_sup}	Profondeur du cours d'eau	L	m	E
K_{d_MES}	Coefficient de partition du polluant entre les matières en suspension et l'eau	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
MES	Concentration de particules en suspension dans l'eau	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E

Le coefficient K_v est défini en supposant que le transfert de polluant entre les compartiments eau et air est contrôlé par **diffusion au travers de deux couches limites séparant ces deux compartiments, eux-mêmes supposés parfaitement mélangé**s (cf. figure ci-dessous). Chacune de ces couches présente alors un gradient de concentration et à l'interface, il y a discontinuité des concentrations. K_v, qui est égal à l'inverse de la somme des résistances de ces deux couches (en série), est équivalent à une conductance.

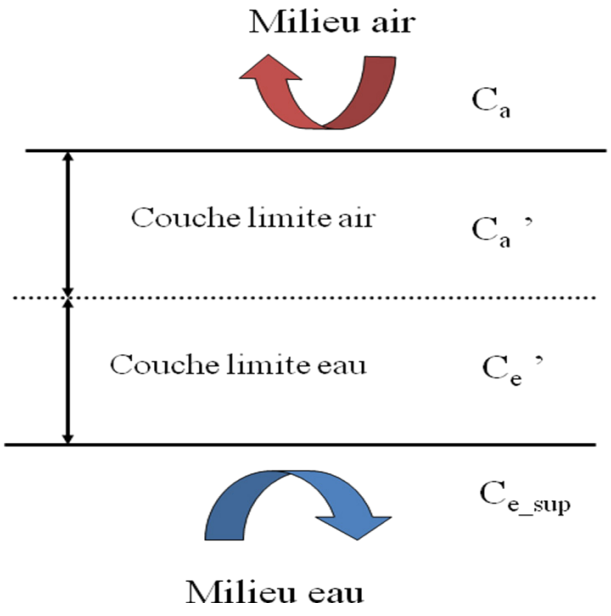


Figure 11 : Modèle de transfert entre les compartiments air et eau

Le flux de diffusion dans la couche limite du compartiment eau est donné par :

$$J_e = g_e \times (C_{d_e_\sup} - C'_e) \qquad \text{Équation 1.5.23}$$

avec g_e : conductance dans la couche limite du compartiment eau ou coefficient de transfert dans la phase liquide,

C'_e : concentration de polluant dans la couche limite bordant le milieu eau.

Le flux de diffusion dans la couche limite du compartiment air est donné par :

$$J_a = g_a \times (C'_{ag} - C_{ag,e}) \qquad \text{Équation 1.5.24}$$

avec g_a : conductance dans la couche limite du compartiment air ou coefficient de transfert dans la phase gazeuse,

$C_{ag,e}$: concentration de polluant sous forme gazeuse dans le compartiment air,

C'_{ag} : concentration de polluant sous forme gazeuse dans la couche limite bordant le milieu air.

Les concentrations C'_{ag} et C'_e étant à l'équilibre, on peut écrire : $\frac{C'_{ag}}{C'_e} = H'$

avec H' : constante de Henry (adimensionnelle).

D'après le principe de conservation de la masse, $J_a = J_e$

On peut donc écrire :

$$C'_e = \frac{g_e \times C_{d_e_\sup} + g_a \times C_{ag,e}}{g_a \times H' + g_e} \qquad \text{Équation 1.5.25}$$

et $$J_e = J_a = g_e \times \left(C_{d_e_\sup} - \frac{g_e \times C_{d_e_\sup} + g_a \times C_{ag,e}}{g_a \times H' + g_e} \right) \qquad \text{Équation 1.5.26}$$

d'où $$J_e = J_a = \frac{g_e \times g_a \times H'}{g_a \times H' + g_e} \times \left(C_{d_e_\sup} - \frac{C_{ag,e}}{H'} \right) \qquad \text{Équation 1.5.27}$$

Le flux de transfert de masse des eaux superficielles vers l'air[11] est égal à :

$$\left[FM_{e_\sup} \right]_{vol} = A_{e_\sup} \times \frac{g_e \times g_a \times H'}{g_a \times H' + g_e} \times C_{d_e_\sup} \qquad \text{Équation 1.5.28}$$

D'après les équations 1.5.19 et 1.5.28, on peut donc écrire :

$$K_v = \frac{g_e \times g_a \times H^{'}}{g_a \times H^{'} + g_e} = \left[\frac{1}{g_e} + \frac{1}{g_a \times H^{'}} \right]^{-1} \qquad \text{Équation 1.5.29}$$

[11] Le flux de transfert de masse du compartiment air au compartiment eaux superficielles est égal à : $A_{e_\sup} \times \frac{g_e \times g_a}{g_a \times H' + g_e} \times C_{ag,e}$. En l'absence d'apport diffus par l'atmosphère pris en compte dans cette section, ce terme est nul.

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
K_v	Coefficient de transfert de masse entre les milieux eaux superficielles et air	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
g_e	Coefficient de transfert dans la phase liquide	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
g_a	Coefficient de transfert dans la phase gazeuse	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
H'	Constante de Henry du polluant (adimensionnelle H'=H/(RxT))	-	-	C ou E

Remarques :

1. Différentes relations existent pour définir g_e et g_a. Il s'agit souvent de relations empiriques. Ces relations dépendent des conditions environnementales (profondeur du cours d'eau, débit, vitesse du vent,…) et des propriétés physico-chimiques de la substance polluante (cf. Lyman, 1990 ; Southworth, 1979 et documents à venir sur les paramètres physico-chimiques des substances).
2. Concernant l'importance du phénomène de volatilisation à partir des eaux superficielles, Lyman et al. (1990) donnent en fonction de la valeur de la constante de Henry (H), les repères suivants :
   - si $H' < 4.10^{-6}$, la substance peut être considérée comme non volatile, l'eau s'évaporant alors plus rapidement ;
   - si $4.10^{-6} < H' < 4.10^{-4}$, la substance se volatilise lentement et la volatilisation est limitée par la diffusion dans l'air. Dans les eaux peu profondes, la volatilisation peut néanmoins être importante quand H' est supérieure à 4.10^{-5};
   - si $4.10^{-4} < H' < 4.10^{-2}$, la volatilisation devient importante et la résistance dans la phase gazeuse et dans la phase liquide sont à peu près équivalentes ;
   - quand $H' > 4.10^{-2}$, la volatilisation est rapide et est limitée par le phénomène de diffusion dans l'eau.

1.5.1.4. LIMITES DE L'APPROCHE DEVELOPPEE POUR UN REJET PONCTUEL

Le modèle présenté ci-dessus permet de calculer la concentration de polluant à l'état stationnaire à l'aval d'un rejet, dans une rivière ou tout autre cours d'eau où l'hypothèse monodimensionnelle peut être faite. Ce modèle n'est pas adapté pour représenter le transport de polluant dans les estuaires et dans des étendues d'eau avec peu de courant, comme les lacs.

Le modèle repose sur les hypothèses suivantes :

- flux de polluant rejeté, facteur d'élimination du polluant (λ_e) et vitesse moyenne de l'eau (v_{e_sup}) constants sur des périodes suffisamment longues pour que la concentration de polluant dans l'eau atteigne un niveau stationnaire. Les évènements ponctuels comme les crues ne peuvent pas être pris en compte ;
- vitesse moyenne de l'eau et facteur d'élimination du polluant constants dans la direction de l'écoulement ;

- mélange instantané du polluant avec le cours d'eau : la dispersion du panache de polluant dans l'eau n'est pas considérée ;
- équilibre du polluant entre la phase adsorbée et la phase dissoute atteint ;
- diffusion entre la couche de sédiments et l'eau non prise en compte. Dans ce modèle, la concentration dans les eaux superficielles étant supposée, on peut considérer que le haut de la couche de sédiments (couche de sédiments superficiels) est à l'équilibre avec le milieu eaux superficielles, car les particules sédimentaires en suspension et celles en haut de la couche sédimentée, où a lieu la diffusion, présentent la même concentration.

  Si la diffusion met en jeu une épaisseur de sédiments supérieure à celle déposée pendant la période de rejet, il est néanmoins possible qu'il y ait diffusion entre les eaux superficielles et la couche de sédiments superficiels (la diffusion ayant lieu tant que la concentration dans les sédiments sur l'épaisseur de couche mise en jeu sera différente de celle des particules en suspension) ;
- flux de sédimentation net positif ou nul : la sédimentation est supérieure ou égale à la remise en suspension des particules à partir de la couche sédimentaire. En effet, si v_{sed} ou v_{MES} est négative (mise en suspension des particules de sédiments supérieure au dépôt de particules, ce qui correspond à une situation d'érosion du fond du cours d'eau) et s'il y a apport de polluant dans les eaux par une source diffuse ou ponctuelle, il ne peut pas y avoir un état d'équilibre entre les sédiments et les eaux superficielles. Il y aura nécessairement diffusion des eaux vers les sédiments.

1.5.2. CAS D'UNE CONTAMINATION DIFFUSE PAR L'ATMOSPHERE ET LE SOL

Les équations présentées ci-dessous permettent de calculer la concentration de polluant dans une étendue d'eau ou une section d'un cours d'eau, dans le cas d'un apport de polluant diffus à partir de l'air et/ou du sol, en tenant compte de la quantité de polluant sortant, et éventuellement de la diminution de la concentration dans l'eau du fait des phénomènes de dégradation, de volatilisation et de sédimentation.

Comme précédemment, ces équations ne prennent pas en compte de phénomène de diffusion entre la colonne d'eau et la couche de sédiments sous-jacente. Compte-tenu des limites de l'approche (cf. section 1.5.2.3), la concentration de polluant dans les eaux superficielles n'est estimée qu'à l'état stationnaire**.**

Contrairement au modèle présenté dans la section 1.5.1, la concentration de polluant est considérée comme homogène dans le volume considéré. Ce volume peut correspondre à un segment d'un cours d'eau présentant des caractéristiques homogènes en termes de régime hydraulique et de bassin versant. L'ensemble du cours d'eau peut alors être représenté par un enchaînement de segments en série et pour chacun de ces segments, un bilan massique du polluant peut être écrit, tel que ci-dessous :

$$\frac{dm_{e_\sup}}{dt} = A_p + Q^e_{e_\sup} \times C^e_{e_\sup} - Q^s_{e_\sup} \times C_{e_\sup} - Vol_{e_\sup} \times \lambda_{e_\sup} \times C_{e_\sup}$$ Équation 1.5.30

avec m_{e_sup} : masse de polluant dans l'eau,

Vol_{e_sup} : volume de l'étendue d'eau ou de la section étudiée,

A_p : apport de polluant au volume Vol_{e_sup},

C_{e_sup} : concentration de polluant dans l'eau du volume Vol_{e_sup},

$C^e_{e_sup}$: concentration de polluant à l'amont du volume Vol_{e_sup} (liée à une source de pollution locale, hors concentration liée au bruit de fond géochimique ou à la pollution anthropique ubiquitaire),

λ_{e_sup} : constante d'élimination du polluant (somme des facteurs d'élimination liés à la dégradation, à la volatilisation et à la sédimentation),

$Q^s_{e_sup}$: flux d'eau sortant,

$Q^e_{e_sup}$: flux d'eau entrant.

d'où $$\frac{dC_{e_\sup}}{dt} = \frac{A_p + Q^e_{e_\sup} \times C^e_{e_\sup}}{Vol_{e_\sup}} - \left(\frac{Q^s_{e_\sup}}{Vol_{e_\sup}} + \lambda_{e_\sup} \right) \times C_{e_\sup}$$ Équation 1.5.31

Le flux d'eau sortant $Q^s_{e_sup}$ est égale à la somme des flux entrant dans le volume Vol_{e_sup} étudié moins le flux d'eau évaporé. **Si on considère que l'évaporation d'eau est compensée par les précipitations à la surface de la masse d'eau**, on a :

$$Q^s_{e_\sup} \approx Q^e_{e_\sup} + RO \times A_{bv}$$ Équation 1.5.32

avec RO : ruissellement,

A_{bv} : surface du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau étudiée.

L'intégration de cette équation sur des pas de temps où A_p, $Q^e_{e_sup}$, Vol_{e_sup}, $C^e_{e_sup}$, RO et λ_{e_sup} sont constants donne :

$$C_{e_\sup}(t) = \frac{A_p + Q^e_{e_\sup} \times C^e_{e_\sup}}{Q^s_{e_\sup} + Vol_{e_\sup} \times \lambda_{e_\sup}} \times \left(1 - \exp^{\left(-\frac{Q^s_{e_\sup}}{Vol_{e_\sup}} - \lambda_{e_\sup} \right) \times \Delta t} \right)$$ Équation 1.5.33
$$+ C_{e_\sup}(t - \Delta t) \times \exp^{\left(-\frac{Q^s_{e_\sup}}{Vol_{e_\sup}} - \lambda_{e_\sup} \right) \times \Delta t}$$

Quand l'état stationnaire est atteint,

$$C_{e_\sup} = \frac{A_p + Q^e_{e_\sup} \times C^e_{e_\sup}}{Q^s_{e_\sup} + Vol_{e_\sup} \times \lambda_{e_\sup}}$$ Équation 1.5.34

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
C_{e_sup}	Concentration de polluant dans l'eau superficielle	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
A_p	Apport de polluant à l'étendue d'eau ou à la section du cours d'eau étudiée	$M.T^{-1}$	$mg.\ s^{-1}$	C ou E
Vol_{e_sup}	Volume de la masse d'eau étudiée	L^3	m^3	E
$Q^e_{e_\sup}$	Débit volumique entrant	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	E
$Q^s_{e_\sup}$	Débit volumique sortant	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	C ou E
$C^e_{e_\sup}$	Concentration de polluant à l'amont (liée à une source locale, hors concentration liée au bruit de fond géochimique ou à la pollution anthropique ubiquitaire)	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	E
λ_{e_sup}	Facteur d'élimination du polluant (somme des facteurs d'élimination liés à la dégradation, à la volatilisation et à la sédimentation) dans les eaux superficielles	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
RO	Ruissellement	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
A_{bv}	Surface du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau étudiée	L^2	m^2	E

1.5.2.1. APPORTS A PARTIR DE L'ATMOSPHERE ET DU SOL

1.5.2.1.1. APPORTS A PARTIR DE L'ATMOSPHERE

Il s'agit des dépôts directs de polluant sous formes particulaire et gazeuse à la surface du volume d'eau considéré.

$$A_a = (D_{pe} + D_{ge}) \times A_{e_\sup}$$ Équation 1.5.35

avec A_a : apport de polluant à l'étendue d'eau ou à la section du cours d'eau étudiée à partir de l'atmosphère,

A_{e_sup} : surface du volume d'eau considéré,

D_{pe} : dépôt particulaire sur le volume d'eau considéré,

D_{ge} : dépôt gazeux sur le volume d'eau considéré.

Comme indiqué à la section 1.1.2.2.1, le dépôt particulaire peut être composé d'un flux sec et d'un flux humide (particules lessivées par les précipitations).

$$D_{pe} = D_{pse} + D_{phe}$$ Équation 1.5.36

De même, le dépôt gazeux au sol peut être composé d'un flux sec (flux de diffusion) et d'un flux humide (lessivage et dissolution des gaz dans l'eau).

$$D_{ge} = D_{gse} + D_{ghe}$$ Équation 1.5.37

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
A_a	Apport de polluant à l'étendue d'eau ou à la section du cours d'eau étudiée par l'atmosphère	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
A_{e_sup}	Surface du volume d'eau considéré	L^2	m^2	E
D_{pe}	Flux de polluant sous forme particulaire sur le volume d'eau considéré	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
D_{pse}	Flux de polluant particulaire sec sur le volume d'eau considéré	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
D_{phe}	Flux de polluant particulaire humide sur le volume d'eau considéré	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
D_{ge}	Flux de polluant sous forme gazeuse sur le volume d'eau considéré	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
D_{gse}	Flux de polluant gazeux sec sur le volume d'eau considéré	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
D_{ghe}	Flux de polluant gazeux humide sur le volume d'eau considéré	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E

Comme indiqué dans la section 1.1.2.2.1 pour les dépôts au sol, les modèles de dispersion permettent généralement d'estimer les différents dépôts présentés ci-dessus. Mais, il existe aussi des méthodes simplifiées pour estimer ces dépôts.

Remarques :

1. L'expression utilisée pour modéliser les dépôts secs (contrairement à celle des dépôts humides) dépend de la surface où a lieu le dépôt. En effet, les dépôts secs s'expriment à partir de la concentration de polluant dans l'air et d'une vitesse de dépôt, qui est fonction de la rugosité de la zone d'étude et de la nature de la surface de dépôt (dans le cas du dépôt gazeux sec). Par conséquent, pour une même concentration dans l'air, les dépôts secs particulaire et gazeux sur un sol (D_{pss} et D_{gss}) sont différents des dépôts secs particulaire et gazeux sur une étendue d'eau (D_{pse} et D_{gse}).
2. Le dépôt gazeux sec peut aussi être interprété comme le flux de transfert par diffusion du milieu air vers le milieu eau. Ce flux peut alors être estimé par le modèle des couches limites entre deux milieux développé dans la section 1.5.1.3.2. D'après ce modèle, on peut écrire :

$$D_{gse} = K_v \times \frac{F_g \times C_a}{H'}$$ Équation 1.5.38

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
D_{gse}	Flux de polluant gazeux sec sur le volume d'eau considéré	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
K_v	Coefficient de transfert de masse	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
H'	Constante de Henry (adimensionnelle) : H'=H/RT	-	-	C ou E
C_a	Concentration de polluant dans l'air	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
F_g	Fraction de polluant sous forme gazeuse	-	-	C ou E

1.5.2.1.2. APPORTS A PARTIR DU SOL

Les apports à partir du sol peuvent être dus à l'érosion et au ruissellement.

1.5.2.1.2.1. APPORT PAR EROSION

L'apport par érosion est égal à :

$$A_e = X_{e_bv_sc_ni} \times SD_{sc} \times ER \times (A_{bv_sc} - A_{bvi_sc}) \times C_s \qquad \text{Équation 1.5.39}$$

avec C_s : concentration de polluant dans le sol,

$X_{e_bv_sc_ni}$: masse de sol détachée et transportée par érosion, par unité de surface et par unité de temps, à partir de la zone contaminée et non imperméabilisée du bassin versant,

SD_{sc} : ratio entre la masse de matériau transportée en aval et la masse érodée à partir de la zone contaminée et non imperméabilisée du bassin versant,

A_{bv_sc} : surface du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée, dont le sol est contaminé par la source étudiée,

A_{bvi_sc} : surface imperméabilisée du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée, dont le sol est contaminé par la source étudiée,

ER : ratio d'enrichissement.

Comme indiquée dans la section 1.1.2.3.3.2, un ratio d'enrichissement peut être introduit pour tenir compte du fait que les particules érodées présentent souvent des concentrations plus élevées que le sol *in situ*.

$X_{e_bv_sc_ni}$ peut être estimée à partir de l'Equation Universelle de Perte de Sol (cf. section 1.1.2.3.3.1).

SD_{sc} peut être estimé à partir de la relation empirique définie par Vanoni (1975) et reprise dans les documents de l'US EPA (1998, 2005) :

$$SD_{sc} = a * (A_{bv_sc})^{-b} \qquad \text{Équation 1.5.40}$$

avec a défini à partir de la surface de la zone considérée, comme indiqué ci-dessous :

surface de la zone d'étude (m²)	a
$A_{bv_sc} \leq 2{,}59.10^5$	2,1
$2{,}59.10^5 < A_{bv_sc} \leq 2{,}59.10^6$	1,9
$2{,}59.10^6 < A_{bv_sc} \leq 2{,}59.10^7$	1,4
$2{,}59.10^7 < A_{bv_sc} \leq 2{,}59.10^8$	1,2
$2{,}59.10^8 < A_{bv_sc}$	0,6

et b=0,125.

Les estimations de $X_{e_bv_sc_ni}$ et SD_{sc} doivent être basées sur les caractéristiques de la zone du bassin versant, dont les sols sont contaminés par la source, le bassin versant à définir étant celui de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau étudiée.

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
A_e	Apport de polluant à l'étendue d'eau ou à la section du cours d'eau considérée par unité de temps du fait de l'érosion hydrique	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
$X_{e_bv_sc_ni}$	Masse de sol détachée et transportée par érosion par unité de surface et de temps, à partir de la zone contaminée et non imperméabilisée du bassin versant	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$kg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
SD_{sc}	Ratio entre la masse de matériau transportée en aval et la masse érodée à partir de la zone contaminée et non imperméabilisée du bassin versant	-	-	C ou E
ER	Ratio d'enrichissement (cf. section 1.1.2.3.3.2)	-	-	E
A_{bv_sc}	Surface du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée, dont le sol est contaminé par la source étudiée	L^2	m²	E
A_{bvi_sc}	Surface imperméabilisée du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée, dont le sol est contaminé par la source étudiée	L^2	m²	E
C_s	Concentration de polluant dans le sol dans la zone considérée	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E

Remarque : l'US EPA (1998, 2005) utilise la concentration de polluant adsorbé sur les particules du sol au lieu de la concentration C_s dans l'équation 1.5.39 (voir discussion relative à ce point dans la section 1.1.2.3.3.2).

1.5.2.1.2.2. APPORT PAR RUISSELLEMENT

Pour les apports par ruissellement, on distinguera les zones du bassin versant qui sont imperméabilisées de celles qui ne le sont pas.

1. Les polluants déposés sur les zones imperméabilisées par l'atmosphère peuvent être entraînés vers les étendues d'eau ou les rivières lors d'épisodes pluvieux.

   Si on suppose que l'ensemble des dépôts atmosphériques présents sur les zones imperméabilisées de la partie du bassin versant situé à l'amont de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée rejoint ce volume d'eau (hypothèse majorante utilisée par l'US EPA (1998, 2005)), on peut écrire :

$$A_{ri} = \left(D_{ps} + D_{gs}\right) \times A_{bvi_sc} \qquad \text{Équation 1.5.41}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
A_{ri}	Apport de polluant à l'étendue d'eau ou à la section du cours d'eau considérée par ruissellement sur les zones imperméabilisées du bassin versant	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
D_{ps}	Flux de polluant particulaire sur la zone imperméabilisée du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
D_{gs}	Flux de polluant gazeux sur la zone imperméabilisée du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
A_{bvi_sc}	Surface imperméabilisée du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée dont le sol est contaminé par dépôt direct à partir de l'atmosphère	L^2	m^2	E

2. Pour les zones non imperméabilisées, contaminées et situées à l'amont de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée, l'US EPA estime l'apport par ruissellement de la façon suivante :

$$A_r = RO \times (A_{bv_sc} - A_{bvi_sc}) \times C_{es}$$ Équation 1.5.42

D'après l'équation 1.1.11, **si la concentration de polluant dans l'eau du sol est inférieure à la solubilité** et **si l'équilibre multiphasique dans le sol est atteint** :

$$A_r \approx RO \times (A_{bv_sc} - A_{bvi_sc}) \times \frac{MV_s}{MV_s \times K_d + \theta} \times C_s$$ Équation 1.5.43

(cf. section 1.1.2.3.2)

Mais **les équations 1.5.42 et 1.5.43 supposent que** :

- **la concentration de polluant dans la couche de sol soit uniforme,**
- **toute l'eau qui ruisselle sur le sol soit à l'équilibre avec la contamination du sol**. Pour des raisons cinétiques, cette hypothèse tend à surestimer fortement l'apport par ruissellement. Cet apport par ruissellement sur des surfaces non imperméabilisées n'est pris en compte par l'INERIS que dans une approche qui vise à estimer de manière volontairement majorante la contamination des eaux superficielles.

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
A_r	Apport de polluant à l'étendue d'eau ou à la section du cours d'eau considérée par ruissellement sur les zones non imperméabilisées du bassin versant	$M.T^{-1}$	$mg.s^{-1}$	C ou E
A_{bv_sc}	Surface du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée, dont le sol est contaminé par la source étudiée	L^2	m^2	E
A_{bvi_sc}	Surface imperméabilisée du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée dont le sol est contaminé par la source étudiée	L^2	m^2	E
RO	Ruissellement	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
C_s	Concentration de polluant dans le sol	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
θ	Fraction volumique occupée par l'eau du sol	-	-	E
K_d	Coefficient de partage particules du sol/eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
MV_s	Masse volumique apparente du sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E

1.5.2.2. ESTIMATION DU FACTEUR D'ELIMINATION

Comme indiqué dans la section 1.5.1.3, les phénomènes d'élimination peuvent être pris en compte ou non pour l'estimation des concentrations de polluant dans les eaux superficielles. L'absence de prise en compte conduit à surestimer les concentrations de polluant. A l'inverse, leur prise en compte peut conduire à sous-estimer les concentrations.

Le facteur d'élimination (λ_{e_sup}) a été défini à la section 1.5.1.3. Il intègre les phénomènes de dégradation, sédimentation et volatilisation.

$$\lambda_{e_\sup} = \lambda_d + \lambda_s + \lambda_v$$ Équation 1.5.44

L'expression du facteur de volatilisation (λ_v) a été donnée dans la section 1.5.1.3.2.

Quant au facteur de sédimentation (λ_s), il a été défini dans à la section 1.5.1.3.1. Deux expressions ont été proposées pour ce paramètre. L'une d'elle dépend de la vitesse de dépôt net des particules en suspension :

$$\lambda_s = \frac{v_{MES}}{h_{e_\sup}} \times MES \times \frac{K_{d_MES}}{1 + K_{d_MES} \times MES}$$ Équation 1.5.45

Or, **si la teneur en matières en suspension dans l'eau est constante dans le temps et dans l'espace et si les quantités de particules apportées par voie atmosphérique et par ruissellement sur les zones imperméabilisées sont négligeables par rapport à celles apportées par érosion**, on peut écrire :

$$v_{MES} = \frac{X_{e_bv_ni} \times \left(A_{bv} - A_{bvi}\right) \times SD + \left(Q^e_{e-\sup} - Q^s_{e_\sup}\right) \times MES}{A_{e-\sup} \times MES}$$ Équation 1.5.46

d'où $\lambda_s = \frac{X_{e_bv_ni} \times \left(A_{bv} - A_{bvi}\right) \times SD + \left(Q^e_{e-\sup} - Q^s_{e_\sup}\right) \times MES}{A_{e-\sup} \times h_{e_\sup}} \times \frac{K_{d_MES}}{1 + K_{d_MES} \times MES}$

Équation 1.5.47

Le produit $X_{e_bv_ni} \times \left(A_{bv} - A_{bvi}\right) \times SD$ représente la quantité de particules du sol apportée à l'étendue d'eau ou à la section de cours d'eau considérée par érosion hydrique, que ces particules soient contaminées ou non. $\left(A_{bv} - A_{bvi}\right)$ représente la surface non imperméabilisée de la zone du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée (que cette zone soit contaminée ou non).

$X_{e_bv_ni}$ peut être estimée par l'équation Universelle de Perte de Sol (cf. section 1.1.2.3.3.1). SD peut être estimé selon l'approche présentée dans la section 1.5.2.1.2.1, en remplaçant la surface du bassin versant contaminé (A_{bv_sc}) par la surface du bassin versant $\left(A_{bv}\right)$ de l'étendue ou de la section du cours d'eau considérée.

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
λ_s	Facteur de sédimentation (correspondant au dépôt net de particules au fond du cours d'eau)	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
v_{MES}	Vitesse de dépôt des particules (correspondant au dépôt net de particules au fond du cours d'eau)	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
A_{bv}	Surface du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée	L^2	m^2	E
A_{bvi}	Surface imperméabilisée du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée	L^2	m^2	E
$X_{e_bv_ni}$	Masse de sol détachée et transportée par érosion à partir de la zone non imperméabilisée du bassin versant, par unité de surface et de temps	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$kg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
SD	Ratio entre la masse de matériau transportée en aval et la masse érodée	-	-	C ou E
$Q^e_{e_\sup}$	Débit volumique entrant	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	E
$Q^s_{e_\sup}$	Débit volumique sortant	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	C ou E
h_{e_sup}	Profondeur de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau considérée	L	m	E
K_{d_MES}	Coefficient de partition du polluant entre les particules en suspension et l'eau	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
MES	Concentration de particules en suspension dans l'eau	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E

1.5.2.3. LIMITES ASSOCIEES AU MODELE

Le modèle présenté ci-dessus permet de calculer la concentration de polluant à l'état stationnaire, dans un volume d'eau supposé homogène ou à l'aval immédiat de ce volume d'eau.

Ce modèle est adimensionnel et trop simplifié pour représenter le transport de polluant dans les estuaires.

Il repose sur les hypothèses suivantes :

- concentration de polluant uniforme dans le volume d'eau, ce qui suppose un apport de polluant et une élimination du polluant uniformes sur l'ensemble du volume considéré ;
- équilibre du polluant entre la phase adsorbée et la phase dissoute atteint ;
- diffusion entre la couche de sédiments et l'eau non prise en compte. Si la concentration dans les eaux superficielles reste constante sur des périodes suffisamment longues, on peut considérer que la couche de sédiments superficiels est à l'équilibre avec le milieu eaux superficielles, car les particules sédimentaires en suspension et celles en haut de la couche sédimentée, où a lieu la diffusion, présentent la même concentration.

  C'est pourquoi, avec ce modèle, l'estimation de la concentration dans les eaux superficielles (C_{e_sup}) est faite uniquement à l'état stationnaire à l'aide de l'équation 1.5.34. Les paramètres A_p, $Q^e_{e_sup}$, Vol_{e_sup}, $C^e_{e_sup}$, RO et λ_{e_sup} doivent être constants sur des périodes suffisamment longues pour que la concentration dans l'eau atteigne un niveau stationnaire. Pour cela, on peut vérifier que l'équation 1.5.33 (donnant C_{e_sup} en fonction du temps) donne un résultat peu différent de l'équation 1.5.34.

  Si les apports de polluant dans l'eau varient au cours du temps et si la diffusion met en jeu une épaisseur de sédiments supérieure à celle déposée pendant la période d'apport constant considérée, il est néanmoins possible qu'il y ait diffusion entre les eaux superficielles et la couche de sédiments superficiels (la diffusion ayant lieu tant que la concentration dans les sédiments sur l'épaisseur de couche mis en jeu sera différente de celle des particules en suspension). Si l'apport de polluant augmente au cours du temps, il peut y avoir diffusion des eaux superficielles vers la couche de sédiments superficiels. L'absence de prise en compte de la diffusion dans le modèle tendra alors à surestimer la concentration dans les eaux superficielles. Si l'apport de polluant diminue au cours du temps, il y peut avoir, à l'inverse, diffusion des sédiments vers les eaux superficielles et sous-estimation de la concentration dans les eaux superficielles ;
- flux de sédimentation net positif ou nul : la sédimentation est supérieure ou égale à la remise en suspension des particules à partir de la couche sédimentaire. En effet, si v_{sed} ou v_{MES} est négative (mise en suspension des particules de sédiments supérieure au dépôt de particules, ce qui correspond à une situation d'érosion du fond du cours d'eau) et s'il y a apport de polluant dans les eaux par une source diffuse ou ponctuelle, il ne peut pas y avoir un état d'équilibre entre les sédiments et les eaux superficielles. Il y aura nécessairement diffusion des eaux vers les sédiments.

Par conséquent, ce modèle permet d'évaluer la concentration moyenne de polluant dans l'eau sur le long terme. Il n'est pas adapté pour représenter les cas de contamination de l'eau par relargage des polluants (remise en suspension des particules ou solubilisation des polluants adsorbés) à partir de

sédiments accumulés lors d'épisodes de pollution des eaux plus importante, par exemple.

1.5.3. APPROCHES A UTILISER DANS LE CAS D'UN REJET PONCTUEL ET D'UNE CONTAMINATION DIFFUSE CONCOMITANTE

Si le volume d'eau considéré est à la fois le siège d'un rejet ponctuel et d'une contamination diffuse, la concentration de polluant résultante dans l'eau peut être calculée selon l'une ou l'autre des approches développées ci-dessus (section 1.5.1 ou section 1.5.2), en fonction des conditions du site étudié et des objectifs recherchés.

Selon l'approche développée dans la section 1.5.1 (et en tenant compte des mêmes hypothèses : cf. section 1.5.1.4), la prise en compte d'un rejet diffus le long du cours d'eau, en plus d'un rejet ponctuel, conduit à écrire :

$$\frac{dC_{e_\sup}}{dt} = -\frac{\partial(v_{e_\sup} \times C_{e_\sup})}{\partial x} - \lambda_{e_\sup} \times C_{e_\sup} + \frac{A'_p}{h_{e_\sup}} \qquad \text{Équation 1.5.48}$$

avec A'_p : apport de polluant au cours d'eau par unité de surface,

h_{e_sup} : profondeur du cours d'eau.

A l'état stationnaire,

$$\frac{\partial\left(v_{e_\sup}(x) \times C_{e_\sup}(x)\right)}{\partial x} = -\lambda_{e_\sup}(x) \times C_{e_\sup}(x) + \frac{A'_p}{h_{e_\sup}(x)} \qquad \text{Équation 1.5.49}$$

Si λ_{e_sup}, v_{e_sup}, A'_p, et h_{e_sup} sont constants dans le sens de l'écoulement (l'apport de polluant sur la portion du cours d'eau étudiée ne fait pas varier la vitesse d'écoulement ou la profondeur du cours d'eau (variations négligeables), alors l'intégration de l'équation 1.5.49 donne :

$$C_{e_\sup}(x) = C_{e_\sup}(x=0) \times e^{\left(-\lambda_{e_\sup} \times \frac{x}{v_{e_\sup}}\right)} + \frac{A'_p}{h_{e_\sup} \times \lambda_{e_\sup}} \times \left(1 - e^{\left(-\lambda_{e_\sup} \times \frac{x}{v_{e_\sup}}\right)}\right) \qquad \text{Équation 1.5.50}$$

avec $C_{e_\sup}(x=0) = \dfrac{C_{rej} \times Q_{rej}}{Q_{e_\sup} + Q_{rej}}$ dans le cas d'un rejet ponctuel de concentration C_{rej} et de débit Q_{rej} au point x=0

et $C_{e_\sup}(x=0) = \dfrac{C_{rej} \times Q_{rej} + C^e_{e_\sup} \times Q^e_{e_\sup}}{Q^e_{e_\sup} + Q_{rej}}$, si le cours d'eau présente par ailleurs une concentration en polluant égale à $C^e_{e_\sup}$ à l'amont du rejet.

Symbole	Paramètre	Dimensions	Unités	Statut
C_{e_sup}	Concentration de polluant dans l'eau superficielle	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
A'_p	Apport de polluant par le sol et l'atmosphère au cours d'eau par unité de surface	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
v_{e_sup}	Vitesse moyenne de l'eau	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
$Q^e_{e_sup}$	Débit hydraulique du cours d'eau à l'amont du rejet	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	E
Q_{rej}	Flux volumique rejeté	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	E
λ_{e_sup}	Facteur d'élimination du polluant (somme des facteurs d'élimination liés à la dégradation, à la volatilisation et à la sédimentation)	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
C_{rej}	Concentration de polluant dans le rejet	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	E
$C^e_{e_sup}$	Concentration de polluant dans l'eau à l'amont du rejet (liée à une source locale, hors concentration liée au bruit de fond géochimique ou à la pollution anthropique ubiquitaire)	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	E
h_{e_sup}	Profondeur du cours d'eau	L	m	E

Si on utilise le modèle adimensionnel développé dans la section 1.5.2, le rejet ponctuel doit être considéré comme homogénéisé dans la masse d'eau étudiée. Le bilan massique du polluant dans la masse d'eau conduit à écrire :

$$\frac{dm_{e_sup}}{dt} = A_p + Q^e_{e_sup} \times C^e_{e_sup} + Q_{rej} \times C_{rej} - (Q^e_{e_sup} + Q_{rej} + RO \times A_{bv}) \times C_{e_sup} - Vol_{e_sup} \times \lambda_{e_sup} \times C_{e_sup}$$

Équation 1.5.51

$$\frac{dC_{e_sup}}{dt} = \frac{A_p + Q^e_{e_sup} \times C^e_{e_sup} + Q_{rej} \times C_{rej}}{Vol_{e_sup}} - \frac{(Q^e_{e_sup} + Q_{rej} + RO \times A_{bv}) \times C_{e_sup}}{Vol_{e_sup}} - \lambda_{e_sup} \times C_{e_sup}$$

Équation 1.5.52

Dans le cas d'une intégration par pas de temps où A_p, $Q^e_{e_sup}$, Vol_{e_sup}, $C^e_{e_sup}$, RO, Q_{rej}, C_{rej} et λ_{e_sup} sont constants, on a :

$$C_{e_sup}(t) = \frac{A_p + Q^e_{e_sup} \times C^e_{e_sup} + Q_{rej} \times C_{rej}}{Q^e_{e_sup} + Q_{rej} + RO \times A_{bv} + Vol_{e_sup} \times \lambda_e} \times \left(1 - e^{-\left(\frac{Q^e_{e_sup} + Q_{rej} + RO \times A_{bv}}{Vol_{e_sup}} + \lambda_e\right) \times \Delta t}\right) + C_{e_sup}(t - \Delta t) \times e^{-\left(\frac{Q^e_{e_sup} + Q_{rej} + RO \times A_{bv}}{Vol_{e_sup}} + \lambda_e\right) \times \Delta t}$$

Équation 1.5.53

A l'état stationnaire, on a :

$$C_{e_\sup} = \frac{A_p + Q^e_{e_\sup} \times C^e_{e_\sup} + Q_{rej} \times C_{rej}}{Q^e_{e_\sup} + Q_{rej} + RO \times A_{bv} + Vol_{e_\sup} \times \lambda_e}$$

Équation 1.5.54

Les limites décrites dans la section 1.5.2.3 s'appliquent à cette équation (le flux de polluant rejeté devra aussi être constant sur des périodes suffisamment longues pour que la concentration de polluant dans l'eau atteigne un niveau stationnaire). On estimera la concentration C_{e_sup} uniquement à l'état stationnaire et on pourra vérifier que l'équation 1.5.53 donne un résultat peu différent de l'équation 1.5.54.

Symbole	Paramètre	Dimensions	Unités	Statut
C_{e_sup}	Concentration de polluant dans l'eau superficielle	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
A_p	Apport de polluant par le sol et l'atmosphère à la masse d'eau	M	mg	C ou E
Vol_{e_sup}	Volume de la masse d'eau étudiée	L^3	m^3	E
λ_{e_sup}	Facteur d'élimination du polluant (somme des facteurs d'élimination liés à la dégradation, à la volatilisation et à la sédimentation) dans les eaux superficielles	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
C_{rej}	Concentration de polluant dans le rejet	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	E
Q_{rej}	Flux volumique rejeté	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	E
$Q^e_{e_\sup}$	Débit hydraulique entrant	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	E
$Q^s_{e_\sup}$	Débit hydraulique sortant	$L^3.T^{-1}$	$m^3.s^{-1}$	C ou E
$C^e_{e_\sup}$	Concentration de polluant dans l'eau à l'amont du rejet (liée à une source locale, hors concentration liée au bruit de fond géochimique ou à la pollution anthropique ubiquitaire)	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	E
RO	Ruissellement	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E
A_{bv}	Surface du bassin versant de l'étendue d'eau ou de la section du cours d'eau étudiée	L^2	m^2	E

Remarque : Comme indiqué précédemment, les expressions développées dans les sections 1.5.1, 1.5.2 et 1.5.3 sont données pour le calcul de la concentration de polluant dans les eaux attribuable aux sources de contamination étudiées, sans prise des sources de polluant ubiquitaires d'origine anthropique et du bruit de fond géochimique. La concentration totale dans les eaux superficielles est alors estimée en ajoutant à cette concentration, la concentration de bruit de fond dans les eaux (cf. section 4).

1.5.4. CONCENTRATION DE POLLUANT SOUS FORME DISSOUTE DANS L'EAU

La concentration de polluant sous forme dissoute dans l'eau peut être nécessaire pour calculer l'exposition par ingestion d'eau et la concentration de polluant dans les organismes aquatiques.

D'après les équations 1.5.14 et 1.5.15,

$$C_{d_e_\sup} = \frac{C_{e_\sup}}{1 + K_{d_mes} \times MES}$$ Équation 1.5.55

Symbole	Paramètre	Dimensions	Unités	Statut
$C_{d_e_sup}$	Concentration de polluant dans l'eau superficielle sous forme dissoute	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C_{e_sup}	Concentration de polluant dans l'eau superficielle	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
K_{d_MES}	Coefficient de partition du polluant entre les matières en suspension et l'eau	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
MES	Concentration de particules en suspension dans l'eau	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E

1.5.5. CONCENTRATIONS DANS LA COUCHE SEDIMENTAIRE SUPERFICIELLE

La concentration de certaines substances dans les organismes aquatiques peut aussi être calculée à partir de la concentration de polluant sur les particules de la couche sédimentaire (comme dans US EPA, 2005).

Le polluant est présent dans la couche sédimentaire sous formes dissoute et adsorbée sur les particules :

$$m_{sed} = m_{p_sed} + m_{d_sed}$$ Équation 1.5.56

avec m_{sed} : masse totale de polluant dans la couche sédimentaire,

m_{p_sed} : masse de polluant adsorbée sur les particules sédimentaires.

D'après l'expression des masses de polluant dans chaque phase de la couche sédimentaire, l'équation 1.5.56 peut s'écrire :

$$(1-\theta_{sed}) \times MV_{p_sed} \times V_s \times C_{sed} = (1-\theta_{sed}) \times MV_{p_sed} \times V_s \times C_{p_sed} + C_{d_sed} \times \theta_{sed} \times V_s$$

Équation 1.5.57

avec C_{sed} : concentration de polluant dans les sédiments sous formes dissoute et particulaire (exprimée par rapport au poids sec),

C_{d_sed} : concentration de polluant dissous dans l'eau de la couche sédimentaire,

C_{p_sed} : concentration de polluant sur les particules sédimentaires,

MV_{p_sed} : masse volumique des particules sédimentaires,

θ_{sed} : porosité de la couche de sédiments,

V_s : volume de la couche sédimentaire considérée.

Si le polluant est à l'équilibre entre la couche de sédiments superficiels et le milieu eaux superficielles et s'il y a équilibre entre les phases dissoute et particulaire de la couche de sédiments superficiels, on peut écrire :

$$C_{d_sed} = C_{d_e_\sup}$$ Équation 1.5.58

$$K_{d_MES} = \frac{C_{p_sed}}{C_{d_sed}},$$ Équation 1.5.59

$$C_{sed} = C_{d_e_\sup} \times \left(K_{d_MES} + \frac{\theta_{sed}}{(1-\theta_{sed}) \times MV_{p_sed}} \right)$$ Équation 1.5.60

et $$C_{p_sed} = \frac{(1-\theta_{sed}) \times MV_{p_sed} \times K_{d_MES}}{(1-\theta_{sed}) \times MV_{p_sed} \times K_{d_MES} + \theta_{sed}} \times C_{sed}$$ Équation 1.5.61

Symbole	Paramètre	Dimensions	Unités	Statut
C_{sed}	Concentration de polluant (forme dissoute et adsorbée) dans la couche superficielle de sédiments	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
C_{p_sed}	Concentration de polluant adsorbé sur les particules sédimentaires superficielles	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
θ_{sed}	Porosité de la couche superficielle de sédiments	-	-	E
K_{d_MES}	Coefficient de partition du polluant dans la couche sédimentaire superficielle et entre les particules en suspension et l'eau	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
MV_{p_sed}	Masse volumique des particules sédimentaires	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
$C_{d_e_sup}$	Concentration de polluant dans les eaux superficielles sous forme dissoute	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C_{d_sed}	Concentration de polluant dissous dans l'eau de la couche sédimentaire	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E

1.6. PRODUITS VEGETAUX

Certains polluants s'accumulant dans la chaîne alimentaire, l'évaluation de l'exposition humaine requiert l'estimation des concentrations dans les produits végétaux et animaux. Cette estimation passe par la mesure ou la modélisation.

Dans le cas d'une évaluation des risques liés à un site, on s'intéresse au :

- risque attribuable lié à ce site. A ce niveau, ce sont les expositions liées aux produits d'origine locale qui sont pris en compte. Compte-tenu de l'industrialisation des produits alimentaires et du caractère national (voire international) des réseaux de distribution, ce sont en fait, les aliments autoproduits par les consommateurs qui sont, généralement, pris en compte pour estimer le risque attribuable au site via l'alimentation. Toutefois, si les données propres à un site indiquent que des productions marchandes sont exposées et distribuées localement, il peut être nécessaire d'estimer leur consommation pour les intégrer à l'exposition des populations locales ;
- risque total, incluant en plus du risque attribuable aux sources de pollution locales étudiées, le risque lié au bruit de fond. Il est alors nécessaire de tenir compte de l'exposition liée à la concentration de polluant dans les produits locaux due au bruit de fond et de l'exposition liée aux aliments produits en dehors de la zone d'impact du site. Les concentrations dans ces aliments peuvent être renseignées à partir des enquêtes nationales sur la contamination des produits (enquêtes de la Direction Générale de l'Alimentation, Direction Générale de la Concurrence, de la Consommation et de la Répression des Fraudes, Rapport INERIS DRC-08-94882-15772A).

Les végétaux constituent le maillon d'entrée de la chaîne alimentaire. Les espèces de végétaux présentes sur un site et pouvant être consommées par les personnes ou les animaux, ou pouvant servir à la surveillance environnementale sont nombreuses. Fautes de données, toutes ne peuvent être étudiées. Elles doivent donc être regroupées en différentes catégories en fonction de leurs modes de contamination et des données de consommation.

Ainsi, on peut être amené à distinguer :

- les légumes-racines,
- les légumes-tubercules,
- les légumes-feuilles,
- les légumes-fruits et les fruits,
- les graines (céréales, fruits et légumes-secs),
- le fourrage,
- l'ensilage (type : maïs ensilage).

Le nombre de catégories de végétaux finalement considérées dans une étude dépend du degré de spécificité et de précision recherché.

La contamination des végétaux peut résulter de différents phénomènes :

- le prélèvement direct à partir du sol, suite auquel le polluant est distribué dans la plante par convection (liée à l'évapotranspiration) et diffusion,
- le dépôt de polluant sous forme particulaire à partir de l'atmosphère,
- le dépôt de particules du sol après mise en suspension par le vent, la pluie…,
- l'absorption de polluant sous forme gazeuse (pour les polluants organiques), à partir de l'atmosphère,
- le transfert à partir de l'eau d'irrigation.

L'approche générale consiste à sommer les contributions liées à ces différents phénomènes, comme s'ils étaient indépendants :

$$C_p = C_{rp} + C_{dap} + C_{dsp} + C_{gp} + C_{ip}$$ Équation 1.6.1

Symbole	Paramètre	Dimensions	Unités	Statut
C_p	Concentration dans la plante	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
C_{rp}	Concentration dans la plante due au prélèvement direct à partir du sol	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
C_{dap}	Concentration dans la plante due au dépôt de particules à partir de l'atmosphère	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
C_{dsp}	Concentration dans la plante due au dépôt de particules à partir du sol	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
C_{gp}	Concentration dans la plante due à l'absorption de polluant sous forme gazeuse	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
C_{ip}	Concentration dans la plante due à l'irrigation par aspersion	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E

Cette sommation des contributions est classique dans la plupart des modèles multimédia d'exposition (HHRAP, US EPA, 2005 ; ERWYN ; CLEA, The Environment Agency, 2002 ; HESP, Shell Global solutions, 1995 ; module d'exposition de CalTOX, University of California, 1993, 1997). La contamination par diffusion à partir du sol ou de l'air dépend toutefois de la concentration de polluant dans la plante, et l'estimation de manière indépendante de l'impact de différents processus de contamination peut surestimer les concentrations dans la plante.

Il existe des modèles compartimentaux où la concentration dans la plante est calculée à partir d'un bilan massique prenant en compte les différents apports à la plante (flux de polluant à partir du sol, flux de polluant à partir de l'air), les phénomènes de pertes subis par la plante (flux des feuilles vers l'air, métabolisation, dilution par croissance de la plante, photodégradation,…), ainsi que les mécanismes de répartition au sein de cette plante (flux des feuilles vers les autres parties de la plante,…). Mais ces modèles (modules de transfert de CalTOX, University of California, 1993, 1997, Mckone et al., 2002 ; PlantX,

Trapp et al., 1994 ; Paterson et al., 1994) requièrent de nombreux paramètres difficiles à définir pour différentes catégories de végétaux (exemples : surface et volume des feuilles, conductance de la cuticule, taux de métabolisation, flux de xylème, flux de phloème,…). Ils ne sont pas présentés ici. Certains d'entre eux ont fait l'objet d'une présentation détaillée (INERIS, 2002d).

1.6.1. CONCENTRATION DANS LA PLANTE LIEE AU PRELEVEMENT DIRECT A PARTIR DU SOL

Les polluants sont transportés dans la solution du sol jusqu'au voisinage des racines par convection et diffusion. Le prélèvement par la plante a lieu ensuite de façon passive et/ou active par les racines. La contamination des autres organes des plantes à partir des racines se fait par le flux de sève ascendante (xylème).

Il convient toutefois de noter que dans le cas des légumes-souterrains, il peut également y avoir prélèvement direct de polluant à partir du sol par diffusion à travers les tissus de l'organe consommé, sans passage par les racines (exemple : pommes de terre) (Trapp et al., 2007).

La concentration de polluant dans la plante liée au prélèvement direct à partir du sol est estimée à partir d'un facteur de bioconcentration (B_r) qui représente le ratio entre la concentration de polluant dans la plante et la concentration de polluant dans le sol.

$$C_{rp}(T_{récolte}) = B_r \times \overline{C}_{s,t_{pl} \to t_{réc}} \qquad \text{Équation 1.6.2}$$

Symbole	Paramètre	Dimensions	Unités	Statut
C_{rp} ($T_{récolte}$)	Concentration de polluant dans la plante liée au prélèvement direct à partir du sol, au moment de la récolte	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
$\overline{C}_{s,t_{pl} \to t_{réc}}$	Concentration moyenne de polluant dans le sol pendant la période de culture	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
B_r	Facteur de bioconcentration sol-plante	M de sol.M^{-1} sec de plante	kg de sol.kg^{-1} sec de plante	C ou E

La concentration de polluant dans le sol doit correspondre à la zone d'emprise des racines des plantes considérées. La concentration moyenne de polluant sur la hauteur de sol Z_s correspondante pourra être estimée à partir des équations développées dans la section 1.1.2.

La difficulté de l'approche présentée dans cette section est liée à la définition du facteur de bioconcentration (B_r). Des valeurs très différentes peuvent être trouvées dans la littérature pour B_r. La valeur de B_r dépend en particulier :

- de la substance, de sa spéciation, de sa concentration dans le sol,
- des caractéristiques physico-chimiques du sol (pH, teneur en carbone organique, capacité d'échange cationique, …),
- des autres substances présentes dans le sol,
- du type de végétal, de l'espèce et de l'organe considéré.

Des règles de bonnes pratiques pour définir les valeurs de B_r les mieux adaptées seront rappelées dans de futurs documents portant sur la définition des paramètres physico-chimiques et des coefficients de transfert des substances. Malgré ces règles, il convient de rappeler que ce type de paramètre reste entacher d'une variabilité et une incertitude généralement importantes.

De plus, si les données relatives à certains métaux sont nombreuses, pour certaines substances organiques les données disponibles sont très rares, voire inexistantes, d'où le recours fréquent à des relations empiriques (Quantitative Structure-Activity Relationship : QSAR) qui permettent de définir le facteur B_r à partir d'un paramètre connu de la substance. Pour les substances organiques, il s'agit souvent du coefficient de partage octanol-eau (K_{ow}).

En fonction des données disponibles, la concentration dans la plante liée au prélèvement direct à partir du sol peut aussi être exprimée par rapport à la concentration de polluant dans l'eau du sol, ou à la fraction de polluant dans le sol dite « échangeable ». Aussi, il faut veiller à ce qu'il y ait cohérence entre le facteur de bioconcentration utilisé et l'expression de la concentration de polluant dans le sol.

Si le facteur de bioconcentration ($B_{r'}$) correspond au ratio de la concentration dans la plante sur la teneur en polluant dans l'eau du sol, on a alors :

$$C_{rp}(T_{récolte}) = \frac{B_{r'}}{t_{sp}} \times \overline{C}_{es,t_{pl} \to t_{réc}} \qquad \text{Équation 1.6.3}$$

Or, d'après l'équation 1.1.11 (conditions : concentration de polluant dans le sol inférieure à la limite de solubilité, équilibre multiphasique atteint entre les différentes phases du sol),

$$C_{es} = \frac{C_s \times MV_s}{MV_s \times K_d + \theta + \alpha \times \frac{H}{R \times T_s}} \qquad \text{Équation 1.6.4}$$

avec K_d : coefficient de partage particules du sol/eau du sol,

θ : fraction volumique occupée par l'eau du sol,

α : fraction volumique occupée par l'air du sol,

H : constante de Henry,

R : constante des gaz parfaits,

T_s : température du sol,

MV_s : masse volumique apparente du sol.

Si $\alpha \times \frac{H}{R \times T_s} << \theta + MV_s \times K_d$

alors $C_{rp}(T_{récolte}) = \frac{B_{r'}}{t_{sp}} \times \frac{MV_s}{MV_s \times K_d + \overline{\theta}_{t_{pl} \to t_{réc}}} \times \overline{C}_{s,t_{pl} \to t_{réc}}$ Équation 1.6.5

et $B_r = \frac{B_{r'}}{t_{sp}} \times \frac{MV_s}{MV_s \times K_d + \overline{\theta}_{t_{pl} \to t_{réc}}}$ Équation 1.6.6

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
C_{rp} ($T_{récolte}$)	Concentration de polluant dans la plante liée au prélèvement direct à partir du sol au moment de la récolte	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
$B_{r'}$	Facteur de bioconcentration eau du sol-plante exprimé par rapport au poids de matière fraîche de la plante	L^3 d'eau.M^{-1} frais de plante	m^3 d'eau.kg^{-1} frais de plante	C ou E
B_r	Facteur de bioconcentration sol-plante, exprimé par rapport au poids de matière sèche de la plante	M de sol.M^{-1} sec de plante	kg de sol.kg^{-1} sec de plante	C ou E
t_{sp}	Teneur en matière sèche de la plante	-	-	E
$\overline{C}_{s,t_{pl}\to t_{réc}}$	Concentration moyenne de polluant dans le sol pendant la période de culture	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
$\overline{C}_{es,t_{pl}\to t_{réc}}$	Concentration moyenne de polluant dans l'eau du sol pendant la période de culture	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
MV_s	Masse volumique apparente du sol	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
K_d	Coefficient de partition particules du sol / eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
$\overline{\theta}_{t_{pl}\to t_{réc}}$	Fraction volumique occupée par l'eau du sol pendant la période de culture	-	-	E

1.6.2. CONCENTRATION DANS LA PLANTE LIEE AU DEPOT PARTICULAIRE A PARTIR DE L'ATMOSPHERE

Cette section est consacrée au dépôt de particules lié à une source atmosphérique (il peut s'agir d'émissions issues d'une source locale ou au contraire de sources diffuses situées à de grandes distances s'apparentant au bruit de fond). Elle ne concerne pas le dépôt de particules issues du sol mis ou remis en suspension à partir du sol (traité en section 1.6.4).

La concentration dans la plante est modélisée en prenant en compte d'une part le dépôt continu de particules sur la plante et d'autre part les pertes liées à l'action du vent et de la pluie.

Deux approches coexistent pour estimer la concentration résultante dans la plante :

- la première consiste à estimer le dépôt direct sur les parties consommables de la plante. Selon cette approche, seuls les organes des plantes au contact de l'atmosphère peuvent être impactés par les retombées atmosphériques. Ce mode de transfert concerne donc les fourrages, les légumes-feuilles, les fruits et les légumes-fruits non protégés, comme les fraises ou les tomates. A l'inverse, selon cette approche, les légumes-souterrains, les graines, les fruits et les légumes-fruits protégés par une coque (comme les noix ou les haricots en grains) ne sont pas concernés. Il s'agit de l'approche la plus souvent utilisée dans les modèles dédiés aux polluants chimiques (cf. HHRAP, US EPA, 2005 ; MPE, US EPA, 1998 ; HARP, CalEPA, 2003).

- la seconde considère le dépôt des particules sur les feuilles de la plante puis le transfert de la substance vers les parties consommables. Autrement dit, la substance initialement déposée à la surface des feuilles est absorbée et transportée vers d'autres parties de la plante. Selon cette approche, toutes les parties de la plante sont potentiellement concernées par une contamination à partir du dépôt atmosphérique. Toutefois, le taux de transfert peut être très faible, voire nul, selon la substance ou l'organe végétal considéré. Cette approche est celle utilisée en radioécologie (cf. ECOSYS-87, Müller et al., 1993 ; RESRAD, US DOe, 2001 ; ERWYN, US DOe, 2003 ; GRNC, 2002).

1.6.2.1. ESTIMATION A PARTIR DU DEPOT SUR LES PARTIES CONSOMMABLES

1.6.2.1.1. CALCUL DU DEPOT PARTICULAIRE

Le calcul de la concentration à partir du dépôt particulaire prend en compte le dépôt particulaire sec (D_{psp}) et le dépôt particulaire humide (D_{php}).

Le dépôt sec est supposé avoir une meilleure adhérence sur les plantes que le dépôt humide, dont une partie est immédiatement éliminée.

$$D_{pp} = D_{psp} + F_h \times D_{php}$$ Équation 1.6.7

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
D_{pp}	Dépôt particulaire sur les plantes	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
D_{psp}	Dépôt particulaire sec	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	E
D_{php}	Dépôt particulaire humide	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	E
F_h	Fraction du dépôt particulaire humide qui adhère sur les plantes	-	-	E

F_h peut prendre des valeurs différentes en fonction de la forme chimique du polluant (cf. INERIS, 2008b ; US EPA, 2005 et documents à venir sur les valeurs des paramètres physico-chimiques des substances).

Le dépôt particulaire sec (D_{psp}) et le dépôt particulaire humide (D_{php}) peuvent être calculés à partir des modèles de dispersion atmosphériques (cf. section 1.1.2.2.1).

1.6.2.1.2. CALCUL DE LA CONCENTRATION DANS LES PARTIES CONSOMMABLES DE LA PLANTE

La concentration de polluant attribuable au dépôt particulaire est basée sur les équations suivantes :

$$\frac{dm_{dap}}{dt} = S \times D_{pp} \times I - \lambda_w \times m_{dap}$$ Équation 1.6.8

avec D_{pp} : dépôt particulaire sur les plantes,

m_{dap} : masse de polluant sous forme particulaire déposée sur les parties consommables des plantes par dépôt atmosphérique,

S : surface de la zone cultivée considérée,

I : facteur d'interception par les parties consommables de la plante. Ce facteur tient compte du fait que toutes les particules atmosphériques ne se déposent pas sur le végétal. Il représente la fraction du dépôt intercepté par les parties consommables des plantes sur le dépôt total,

λ_w : facteur de perte par action de la pluie et du vent (ce paramètre peut aussi tenir compte de la photodégradation à la surface de la plante).

d'où $$M_v \times \frac{dC_{dap}}{dt} + C_{dap} \times \frac{dM_v}{dt} = S \times D_{pp} \times I - \lambda_w \times M_v \times C_{dap}$$ Équation 1.6.9

et $$\frac{dC_{dap}}{dt} = \frac{D_{pp} \times I}{P_r} - \lambda_w \times C_{dap} - \frac{dM_v}{M_v dt} \times C_{dap}$$ Équation 1.6.10

avec C_{dap} : concentration dans les parties consommables de la plante,

M_v : masse de produits végétaux consommables,

P_r : productivité végétale (masse de produits végétaux consommables par unité de surface cultivée).

Si la croissance des plantes peut être approximée par une fonction exponentielle (c'est les cas des feuilles en phase de croissance végétative (Trapp et al., 1997)) alors,

$$\frac{dM_v}{M_v \cdot dt} = \lambda_c$$ Équation 1.6.11

et $$\frac{dC_{dap}}{dt} = \frac{D_{pp} \times I}{P_r} - (\lambda_c + \lambda_w) \times C_{dap}$$ Équation 1.6.12

avec λ_c : taux de croissance des produits végétaux,

La somme (λ_w+λ_c) est généralement remplacée par un facteur de perte Λ.

Dans le cas d'un dépôt continu de polluant sur les parties consommées du végétal, ces équations doivent être intégrées du début jusqu'à la fin de la période d'exposition de la plante, la fin de la période d'exposition correspondant généralement au moment de la récolte.

1. Cas où les paramètres de l'équation ne sont pas constants,

La concentration dans la plante due au dépôt particulaire peut être estimée en intégrant l'équation sur des intervalles de temps (Δt) successifs du début de la période d'exposition aux dépôts atmosphériques (moment de la germination pour le fourrage ou les légumes-feuilles, moment de la fructification pour les fruits, grains) jusqu'au moment de la récolte. Dans ce cas, le plus simple consiste à utiliser l'équation 1.6.8.

On déduit de cette équation :

$$\frac{dC_{dap_s}}{dt} = D_{pp} \times I - \lambda_w \times C_{dap_s} \qquad \text{Équation 1.6.13}$$

avec C_{dap_s} : masse de polluant dans les parties consommables de la plante par unité de surface de la zone cultivée ($M.L^{-2}$).

d'où $$C_{dap_s}(t) = C_{dap_s}(t-\Delta t) \times e^{-\lambda_w \times \Delta t} + \frac{D_{pp} \times I}{\lambda_w} \times \left(1 - e^{-\lambda_w \times \Delta t}\right) \qquad \text{Équation 1.6.14}$$

et $$C_{dap}(T_{récolte}) = \frac{C_{dap_s}(T_{récolte})}{P_r(T_{récolte})} \qquad \text{Équation 1.6.15}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{dap}(T_{récolte})$	Concentration de polluant dans les parties consommables de la plante au moment de la récolte	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
C_{dap_s}	Masse de polluant dans les parties consommables de la plante par unité de surface cultivée	$M.L^{-2}$ de sol	$mg.m^{-2}$ de sol	C ou E
D_{pp}	Dépôt particulaire sur les plantes	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
I	Facteur d'interception par les parties consommables de la plante	-	-	E
λ_w	Facteur de perte du polluant par action de la pluie et du vent (voire par photodégradation)	T^{-1}	s^{-1}	E
$P_r(T_{récolte})$	Productivité végétale à la récolte, encore appelée rendement cultural	M sec.L^{-2}	kg sec.m^{-2}	E

2. Cas où le dépôt et la constante de perte sont supposés constants,

Dans le cadre des évaluations de risques chroniques liées à des ICPE, les émissions sont supposées constantes et l'impact des installations est estimé à partir d'un dépôt D_{pp} moyen et constant au cours du temps, même si ce dépôt varie en fonction des conditions météorologiques. De même, le facteur λ_w qui vise à prendre en compte la diminution de la quantité de particules déposées sur les feuilles par l'action du vent et de la pluie varie en fonction des conditions météorologiques, mais compte-tenu des données disponibles, il est habituellement estimé par une valeur constante sur l'ensemble de la période d'exposition de la plante.

Dans la plupart des modèles dédiés à l'évaluation des risques où le dépôt atmosphérique de particules sur les végétaux est ainsi pris en compte, la concentration de polluant due à ce transfert est estimée par intégration de l'équation 1.6.12 sur l'ensemble de la période d'exposition aux dépôts

atmosphériques, bien que le facteur d'interception (I) et la productivité végétale (P_r), tendent à croître au cours du temps. Une expression de la forme suivante est alors fournie :

$$C_{dap}(T_{récolte}) = \frac{D_{pp} \times I}{P_r(T_{récolte}) \times \Lambda} \times \left(1 - e^{-\Lambda(T_{récolte})}\right) \qquad \text{Équation 1.6.16}$$

Cette expression repose sur deux approximations :

- **une croissance de la plante de type exponentielle.** Si cette approximation est acceptable pour certains légumes-feuilles comme les salades, pour des fruits ou des légumes-fruits dont la phase de maturation est relativement longue, cette approximation paraît plus discutable ;
- **un rapport I / P_r constant au cours du temps.**

  Dans le cas d'une herbe de pâturage broutée en continu par des animaux, ce rapport peut être supposé constant. Pour les végétaux récoltés à la fin de la croissance végétative ou à maturité, cette hypothèse paraît en revanche peu appropriée.

Les incertitudes liées à l'expression 1.6.16 sont pour l'instant mal connues. Hormis le cas de l'herbe de pâturage, il est donc préférable d'estimer la concentration dans les parties consommables des plantes à partir des équations 1.6.14 et 1.6.15.

En l'absence d'informations pour définir le facteur d'interception (I) en fonction du temps, ou pour éviter une approche par pas de temps, l'équation 1.6.13 peut éventuellement être intégrée en attribuant à I une valeur constante égale à sa valeur maximale (soit généralement sa valeur au moment de la récolte).

$$C_{dap}(T_{récolte}) = \frac{D_{pp} \times I(T_{récolte})}{P_r(T_{récolte}) \times \lambda_w} \times \left(1 - e^{-\lambda_w \times T_{récolte}}\right) \qquad \text{Équation 1.6.17}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{dap}(T_{récolte})$	Concentration de polluant dans les parties consommables de la plante au moment de la récolte	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
D_{pp}	Dépôt particulaire sur les plantes	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
$I(T_{récolte})$	Facteur d'interception par les parties consommables de la plante au moment de la récolte	-	-	E
λ_w	Facteur de perte du polluant par action de la pluie et du vent (voire par photodégradation)	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
$P_r(T_{récolte})$	Productivité végétale à la récolte, encore appelée rendement cultural	M sec.L^{-2}	kg sec.m^{-2}	E

Remarque : L'approche simplifiée ci-dessus, basée sur l'utilisation de la valeur d'interception au moment de la récolte surestime $C_{dap}(T_{récolte})$. L'utilisation, comme dans certains modèles, d'une valeur représentative de la moyenne de I sur l'ensemble de la période d'exposition aux dépôts atmosphériques conduit, en revanche, à une approximation dont on ne sait pas si elle tend à sous-estimer ou bien à surestimer $C_{dap}(T_{récolte})$, situation qui peut être plus gênante en terme de conclusion.

1.6.2.2. ESTIMATION A PARTIR DU DEPOT SUR LA PARTIE FOLIAIRE ET DU TRANSFERT VERS LES PARTIES CONSOMMEES

Cette seconde approche a été développée pour les radionucléides et peut s'appliquer à un certain nombre de métaux pour lesquels des données relatives à la translocation sont disponibles.

Dans cette approche, le dépôt sec et le dépôt humide sont également pris en compte. Le paramètre « facteur d'interception » est remplacé par un paramètre appelé « rapport de captation ». Un rapport de captation est alors défini pour le dépôt sec et un autre pour le dépôt humide.

1.6.2.2.1. CALCUL DE LA CONCENTRATION DANS LA PARTIE FOLIAIRE

Des expressions semblables aux équations 1.6.10 et 1.6.13 peuvent être utilisées pour estimer la concentration dans les feuilles des végétaux.

$$\frac{dC_{dap}}{dt} = \frac{D_{psp} \times R_{c,s} + D_{php} \times R_{c,h}}{B_v} - \lambda_w \times C_{dap} - \frac{dM_v}{M_v} \times C_{dap} \qquad \text{Équation 1.6.18}$$

ou $$\frac{dC_{dap_s}}{dt} = D_{psp} \times R_{c,s} + D_{php} \times R_{c,h} - \lambda_w \times C_{dap_s} \qquad \text{Équation 1.6.19}$$

avec $R_{c,s}$: rapport de captation sèche,

$R_{c,h}$: rapport de captation humide,

B_v : biomasse végétale à la surface du sol.

1. Si les paramètres de l'équation 1.6.19 ne sont pas constants, une intégration sur des intervalles de temps (Δt) successifs (allant de la germination jusqu'au moment de la récolte) donne pour les feuilles :

$$C_{dap_s}(t) = C_{dap_s}(t - \Delta t) \times e^{-\lambda_w \times \Delta t} + \frac{D_{psp} \times R_{c,s} + D_{php} \times R_{c,h}}{\lambda_w} \times \left(1 - e^{-\lambda_w \times \Delta t}\right) \qquad \text{Équation 1.6.20}$$

et $$C_{dap}(T_{récolte}) = \frac{C_{dap_s}(T_{récolte})}{B_v(T_{récolte})} \qquad \text{Équation 1.6.21}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{dap}(T_{récolte})$	Concentration de polluant dans la partie foliaire des plantes au moment de la récolte	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
C_{dap_s}	Concentration de polluant dans la partie foliaire des plantes par unité de surface cultivée	$M.L^{-2}$ de sol	$mg.m^{-2}$ de sol	C ou E
D_{psp}	Dépôt particulaire sec sur les plantes	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
D_{php}	Dépôt particulaire humide sur les plantes	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
$R_{c,s}$	Rapport de captation sèche	-	-	E
$R_{c,h}$	Rapport de captation humide	-	-	E
λ_w	Facteur de perte du polluant par action de la pluie et du vent (voire photodégradation)	T^{-1}	s^{-1}	E
$B_v(T_{récolte})$	Biomasse végétale au-dessus du sol au moment de la récolte	$M\ sec.L^{-2}$	$kg\ sec.m^{-2}$	E

2. **Avec les mêmes approximations que dans l'approche par dépôt direct sur les parties consommables des plantes**, en supposant $\frac{D_{psp} \times R_{c,s} + D_{php} \times R_{c,h}}{B_v}$, λ_w constants et une croissance exponentielle de la biomasse végétale, l'équation 1.6.18 est souvent intégrée sur toute la période d'exposition aux dépôts atmosphériques afin d'obtenir, pour les feuilles, la relation suivante :

$$C_{dap}(T_{récolte}) = \frac{D_{psp} \times R_{c,s} + D_{php} \times R_{c,h}}{\Lambda \times B_v(T_{récolte})} \times \left(1 - e^{-\Lambda \times T_{récolte}}\right) \qquad \text{Équation 1.6.22}$$

avec Λ : facteur de perte ($\Lambda = \lambda_w + \lambda_c$),

λ_c : taux de croissance des produits végétaux.

Là encore, l'hypothèse d'un rapport $\frac{D_{psp} \times R_{c,s} + D_{php} \times R_{c,h}}{\Lambda \times B_v(T_{récolte})}$ constant au cours du temps paraît peu appropriée, en dehors du cas d'une herbe de pâturage. Les équations 1.6.20 et 1.6.21 sont plus adaptées.

Dans le cadre d'une approche simplifiée, si l'on ne dispose pas de données pour définir $R_{c,s}$ et $R_{c,h}$ en fonction du temps ou pour éviter un calcul par pas de temps, l'équation 1.6.18 peut éventuellement être intégrée, en attribuant à $R_{c,s}$ et $R_{c,h}$, des valeurs constantes, égales à leur valeurs maximales (soit $R_{c,s}(T_{récolte})$ et $R_{c,h}(T_{récolte})$). Cette approche tend à surestimer $C_{dap}(T_{récolte})$.

$$C_{dap}(T_{récolte}) = \frac{D_{psp} \times R_{c,s}(T_{récolte}) + D_{php} \times R_{c,h}(T_{récolte})}{\lambda_w \times B_v(T_{récolte})} \left(1 - e^{-\lambda_w \times T_{récolte}}\right) \qquad \text{Équation 1.6.23}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{dap}(T_{récolte})$	Concentration de polluant dans la partie foliaire des plantes	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
D_{psp}	Dépôt particulaire sec sur les plantes	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
D_{php}	Dépôt particulaire humide sur les plantes	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
$R_{c,s}$	Rapport de captation sèche	-	-	E
$R_{c,h}$	Rapport de captation humide	-	-	E
λ_w	Facteur de perte du polluant par action de la pluie et du vent (voire photodégradation)	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
$B_v(T_{récolte})$	Biomasse végétale au-dessus du sol au moment de la récolte	$M\ sec.L^{-2}$	$kg\ sec.m^{-2}$	E

1.6.2.2.2. CALCUL DES CONCENTRATIONS DANS LES AUTRES ORGANES DE LA PLANTE

Après dépôt sur les feuilles et absorption par la plante, les contaminants peuvent être transférés vers les autres organes de la plantes. Le terme « translocation » désigne ici le transfert des contaminants des feuilles aux organes consommés.

Le facteur de translocation correspond au rapport de la concentration dans un tissu, ici la partie comestible, sur la quantité de polluant retenu sur le feuillage par mètre carré au moment du dépôt, soit :

$$\frac{dC_{dap_s}}{dt} = \left(D_{psp} \times R_{c,s} + D_{php} \times R_{c,h}\right) \times T_r \qquad \text{Équation 1.6.24}$$

avec T_r : facteur de translocation du polluant de la feuille vers les parties consommées.

L'intégration par pas de temps donne :

$$C_{dap}(T_{récolte}) = \frac{1}{P_r(T_{récolte})} \sum_{i=1}^{n} \left(D_{psp}(t_i) \times R_{c,s}(t_i) + D_{php}(t_i) \times R_{c,h}(t_i)\right) \times T_r(t_i) \times \Delta t_i$$

Équation 1.6.25

avec i : numéro d'itération entre 1 et n,

et $\sum_{i=1}^{n} \Delta t_i = T_{récolte} - T_{\exp,veg}$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{dap}(T_{récolte})$	Concentration de polluant dans les parties consommables de la plante au moment de la récolte	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
D_{psp}	Dépôt particulaire sec sur les plantes	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
D_{php}	Dépôt particulaire humide sur les plantes	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
$R_{c,s}$	Rapport de captation sèche	-	-	E
$R_{c,h}$	Rapport de captation humide	-	-	E
T_r	Facteur de translocation	-	-	E
$P_r(T_{récolte})$	Productivité végétale à la récolte, encore appelé rendement cultural (masse de produits végétaux consommables par unité de surface cultivée)	M sec.L^{-2}	kg sec.m^{-2}	E
$T_{exp,vég}$	Date de début d'exposition des végétaux aux dépôts (germination)	T^{-1}	s^{-1}	E
$T_{récolte}$	Date de récolte	T^{-1}	s^{-1}	E

Dans les faits, l'utilisation de cette équation est rendue difficile par le manque de données pour définir le facteur de translocation. Concrètement, des valeurs empiriques ont été définies pour quelques radionucléides. T_r dépend notamment de l'élément considéré, de sa spéciation, de l'espèce de la plante, de son stade de développement (le processus de translocation est plus important de la période de formation du fruit à celle de maturation).

Dans les modèles existants (GCNC, 2002 ; RESRAD, US DOe, 2001 ; ERMYN, US DOe, 2003), l'équation le plus souvent utilisée pour estimer la concentration dans les parties consommées, après dépôt sur les feuilles et translocation est du type :

$$C_{dap}(T_{récolte}) = \frac{\left(D_{psp} \times R_{c,s} + D_{php} \times R_{c,h}\right) \times T_r}{P_r(T_{récolte})} \times \left(1 - e^{-\Lambda \times T_{récolte}}\right) \qquad \text{Équation 1.6.26}$$

Dans ce cas, la concentration dans les parties comestibles est estimée à partir de la concentration restante sur les feuilles au moment de la récolte. La définition de T_r est donc différente de celle donnée ci-dessus.

Les études où un facteur de translocation est mesuré peuvent aussi utiliser des protocoles variables et la signification attribuée à ce paramètre peut donc être différentes selon les cas. Il faut donc être vigilant sur l'adéquation entre le mode de définition de la valeur attribuée à T_r et l'équation utilisée pour calculer les concentrations de polluant dans les parties consommables des plantes.

1.6.2.3. COMPARAISON DES DEUX APPROCHES D'ESTIMATION

Dans le cas des légumes-feuilles et du fourrage, la partie consommée étant la partie directement exposée, les deux approches (dépôts directs sur les parties consommables et dépôts sur les feuilles, puis transfert vers les parties consommables) sont peu différentes. Seule la définition de la fraction de dépôt humide qui est initialement interceptée par la plante diffère.

Les deux approches donnent les mêmes résultats si :

$R_{c,s} = I$ Équation 1.6.27

et $R_{c,h} = F_w \times I$ Équation 1.6.28

Pour les fruits, les céréales et les légumes-racines, l'IRSN (GCNC, 2002) rapporte des valeurs de l'ordre de 0,1 pour les radionucléides considérés comme mobiles (comme ceux du cadmium, du nickel, du zinc, du sélénium ou de l'antimoine) et des valeurs comprises entre 0 et 0,02 sont données pour les radionucléides dits peu mobiles (comme ceux du manganèse ou du plomb). Dans ces conditions, les deux approches (dépôts directs sur les parties consommées et dépôts sur les parties foliaires puis translocation) donnent, pour les légumes-racines et les éléments correspondant à ces radionucléides peu mobiles, une concentration liée aux dépôts particulaires qui est nulle. Dans les autres cas (fruits, grains, légumes-racines pour les éléments correspondant aux radionucléides considérés comme mobiles), les résultats peuvent différer entre les deux approches.

Si le concept du dépôt sur les feuilles paraît plus adapté lorsque les fruits sont couverts par le feuillage de la plante, et si l'absence de prise en compte d'un transfert des feuilles vers les organes de stockage dans la première approche peut paraître gênante, la définition du facteur de translocation, nécessaire à la seconde approche, est, elle, délicate, compte tenu du peu de données disponibles.

A notre connaissance, il n'existe pas d'étude où les deux méthodes de calcul (dépôts directs sur les parties consommées et dépôts sur la partie foliaire suivis de la translocation vers les organes consommés) ont été comparées. Des études expérimentales montrent que selon la mobilité du polluant et le stade végétatif de la plante au moment de la contamination, l'un ou l'autre des processus (dépôt direct sur le fruit d'une part ou dépôt sur les feuilles et translocation d'autre part) peuvent être prépondérants. Dans ces conditions, il est difficile de recommander une approche de modélisation par rapport à l'autre.

1.6.3. CONCENTRATION DANS LA PLANTE LIEE A L'ABSORPTION DE POLLUANT SOUS FORME GAZEUSE

Deux approchent existent pour estimer ce transfert :

- l'une basée sur l'utilisation d'un facteur de bioconcentration empirique,
- l'autre basée sur le calcul du dépôt gazeux.

1.6.3.1. CALCUL BASE SUR LE FACTEUR DE BIOCONCENTRATION AIR-PLANTE

$$C_{gp}(T_{récolte}) = \frac{B_f}{t_{ps}} \times \overline{C}_{ag,t_{\exp,veg} \to t_{réc}}$$ Équation 1.6.29

avec $C_{gp}(T_{récolte})$: concentration dans la plante au moment de la récolte due à l'absorption de polluant sous forme gazeuse,

B_f : facteur de bioconcentration air-plante. Le facteur de bioconcentration air-plante est le rapport de la concentration dans la partie de la plante considérée sur la concentration dans l'air,

t_{ps} : teneur en matière sèche de la plante,

$\overline{C}_{ag,t_{\exp,veg}\to t_{réc}}$: concentration moyenne de polluant dans l'air sous forme gazeuse pendant la période d'exposition de l'organe de la plante considéré.

Si la fraction gazeuse dans l'air est constante au cours du temps, alors :

$$C_{gp}(T_{récolte}) = \frac{B_f}{t_{ps}} \times \overline{C}_{a,t_{\exp,veg}\to t_{réc}} \times F_v \qquad \text{Équation 1.6.30}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{gp}(T_{récolte})$	Concentration dans la plante au moment de la récolte liée à l'absorption de polluant sous forme gazeuse	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
F_v	Fraction de polluant sous forme gazeuse	-	-	C ou E
$\overline{C}_{ag,t_{\exp,veg}\to t_{réc}}$	Concentration moyenne de polluant dans l'air sous forme gazeuse du début de la période d'exposition des végétaux aux polluants atmosphériques (date de germination pour le fourrage ou les légumes-feuilles, date de fructification pour les fruits, les grains) au moment de la récolte	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$\overline{C}_{a,t_{\exp,veg}\to t_{réc}}$	Concentration moyenne de polluant dans l'air sous formes gazeuse et particulaire du début de la période d'exposition des végétaux aux polluants atmosphériques (date de germination pour le fourrage ou les légumes-feuilles, date de fructification pour les fruits, les grains) au moment de la récolte	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
B_f	Facteur de bioconcentration air-plante	L^3 d'air.M^{-1} frais de plante	m^3 d'air .kg^{-1} frais de plante	C ou E
t_{sp}	Teneur en matière sèche de la plante	-	-	E

1.6.3.2. CALCUL A PARTIR DU DEPOT GAZEUX

Comme pour le calcul de la concentration de polluant dans la plante liée au dépôt particulaire, la concentration liée au dépôt gazeux résulte d'un gain : le dépôt et d'une perte pouvant être liée à la dégradation de la substance ou à sa volatilisation.

Si les termes de l'équation sont considérés constants au cours du temps, on peut écrire :

$$C_{gp}(T_{récolte}) = \frac{D_{gp} \times (1 - e^{-\lambda_f \times T_{récolte}})}{\lambda_f \times P_r(T_{récolte})} \qquad \text{Équation 1.6.31}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{gp}(T_{récolte})$	Concentration dans la plante au moment de la récolte liée à l'absorption de polluant sous forme gazeuse	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
$P_r(T_{récolte})$	Productivité végétale au moment de la récolte (ou rendement cultural)	$M\ sec.L^{-2}$	$kg\ sec.m^{-2}$	C ou E
λ_f	Facteur de perte par volatilisation et/ou dégradation	T^{-1}	s^{-1}	E
D_{gp}	Dépôt gazeux sur la plante	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E

Smith et al. (1995) et Trapp et al. (1997) proposent deux méthodes différentes pour estimer le dépôt gazeux sur les feuilles d'une plante (D_{gp}).

Selon Trapp et al., on peut écrire :

$$D_{gp} = A_f \times g_f \times C_{ag} \qquad \text{Équation 1.6.32}$$

avec g_f : conductance des feuilles des plantes,

A_f : index foliaire (surface foliaire par surface occupée au sol),

C_{ag} : concentration de polluant sous forme gazeuse dans l'air.

Smith et al. donnent l'expression suivante :

$$D_{gp} = v_{dgp} \times C_{ag} \times I_g \qquad \text{Équation 1.6.33}$$

avec I_g : fraction du dépôt gazeux interceptée par les feuilles,

v_{dgp} : vitesse de dépôt gazeux sur les feuilles de la plante,

$$v_{dgp} = \frac{1}{r_a + r_b + r_c} \qquad \text{Équation 1.6.34}$$

avec r_a : résistance aérodynamique de la couche atmosphérique,

r_b : résistance de la sous-couche, c'est-à-dire de la très fine couche d'air stagnant au-dessus de la feuille,

r_c : résistance des feuilles. r_c est fonction de la densité du couvert végétal, de la capacité d'absorption via les stomates, du type de surface des feuilles (lisse ou non), de l'humidité,…

1.6.3.3. COMPARAISON DES DEUX APPROCHES

Les deux approches ci-dessus présentent des inconvénients liés à la difficulté de leur paramétrage. Peu de données existent pour définir :

- le facteur de bioconcentration (B_f) pour la première approche,
- la vitesse de dépôt gazeux sur les plantes (v_{dgp}), la conductance des feuilles (g_f) et le taux de perte (λ_f) pour la seconde.

Toutefois, pour les polychlorodibenzodioxines et polychlorodibenzofurannes (PCDD/PCDF), des valeurs de facteurs de transfert ont été définies à partir de données de mesures issues de la littérature scientifique (INERIS, 2004b).

Pour ces substances, l'US EPA (1998, 2004c) a également comparé les deux approches présentées ci-dessus à des données de terrain. Il s'agit de données issues d'une étude, menée entre 1992 et 1993 au Royaume-Uni, et regroupant

des mesures de dépôts et de concentration dans l'air et dans l'herbe. Deux jeux de données ont été utilisés, l'un correspondant à un environnement rural et l'autre à un environnement industriel. Le profil des différentes concentrations mesurées en environnement rural a été correctement reproduit avec l'approche utilisant les facteurs de bioconcentration, les concentrations étant toutefois sous-estimées environ d'un facteur 2. Les performances du modèle se sont révélées moins bonnes dans le cas des données recueillies en environnement industriel (avec une sous-estimation d'un facteur 3). La non prise en compte, dans cet exercice de la contamination de l'herbe à partir des particules de sol remises en suspension peut expliquer ces résultats. Pour le modèle basé sur le dépôt gazeux sur les plantes, les deux modes d'estimation de $D_{gp,}$ présentés ci-dessus, ont été testés, mais ce modèle a donné des résultats encore plus faibles, avec des concentrations estimées 2 à 4 fois inférieures à celles obtenues avec les facteurs de bioconcentration.

Pour les PCDD et PCDF, il est donc recommandé d'utiliser l'approche basée sur les facteurs de bioconcentration. Pour les autres polluants, le choix est moins évident, compte tenu du peu de données disponibles pour définir des facteurs de bioconcentration air-plante. Une relation empirique donnant le facteur de bioconcentration air-plante en fonction du coefficient de partage octanol-eau (B_f) et de la constante de Henry (H) des polluants existe, mais elle paraît surestimer les facteurs de bioconcentration (cf. US EPA, 2005 et document à venir sur les paramètres physico-chimiques et de transfert des substances).

Enfin, pour définir une valeur adaptée pour ce paramètre à partir de la littérature scientifique, il faut, comme pour les autres facteurs de bioconcentration ou de biotransfert, être très attentif aux conditions d'obtention des données. Pour le facteur de bioconcentration air-plante, les données disponibles se rapportent généralement à des feuilles. Or, il apparaît que ces données ne sont pas appropriées pour des produits végétaux ayant une surface spécifique plus faible comme des légumes-fruits ou des fruits. Des substances organiques semi-volatiles et bioaccumulables, comme les dioxines ou les polychlorobiphényls, sont généralement peu aptes à migrer de la surface à l'intérieur du végétal. Aussi, il est recommandé de multiplier le facteur de bioconcentration mesuré pour une feuille par un facteur de correction (pouvant être estimé comme le ratio de la surface par unité de masse du légume ou du fruit considéré sur la surface par unité de masse de la feuille) avant utilisation dans les équations 1.6.29 ou 1.6.31.

1.6.4. CONCENTRATION DANS LA PLANTE LIEE AU DEPOT DE PARTICULES ISSUES DU SOL

Les polluants adsorbés sur les particules du sol peuvent être remis en suspension par action du vent ou par des actions mécaniques. Les éclaboussures dues à la pluie (phénomène nommé « rainsplash » dans la littérature scientifique anglo-saxonne) participent aussi à la contamination des plantes par les particules du sol.

Lorsque le transfert racinaire des polluants est faible, le dépôt de particules du sol sur la surface des végétaux peut être le mode prépondérant de contamination des organes des plantes situés au-dessus du sol (c'est le cas par

exemple pour les dioxines pour lesquelles la contamination des feuilles, des fruits et des graines par transfert racinaire est le plus souvent considérée comme nulle). Les travaux de Kryshev (1992), cités dans le document du PNNL (2006) montrent ainsi qu'autour de Tchernobyl, les éclaboussures de particules du sol dues à la pluie représentent 60 à 70% de la contamination des parties basses des céréales et des herbes périannuelles.

Deux approches existent pour prendre en compte le dépôt des particules du sol sur les végétaux :

- la première consiste à définir un pourcentage pondéral de particules du sol attachées à la plante, ne pouvant être éliminées par un lavage classique des végétaux, tel que pratiqué avant consommation ;
- la seconde consiste à modéliser la concentration de particules remises en suspension dans l'air, puis à modéliser le dépôt des particules sur les végétaux, selon la même approche que celle utilisée pour estimer le dépôt direct des particules atmosphériques sur les végétaux (cf. section 1.6.2).

1.6.4.1. UTILISATION DE LA FRACTION DE PARTICULES ATTACHEES A LA PLANTE

Cette approche est la plus simple : l'impact de l'ensemble des facteurs impliqués est agrégé à travers un paramètre unique (hauteur de la plante, type de feuillage, intensité du vent et de la pluie, type de sol). C'est l'approche utilisée dans les modèles CLEA (The Environment Agency, 2002), CSOIL (RIVM, 2007), BIOMASS (IAEA, 2000) et EPRI (Smith et al., 1996) par exemple.

Selon cette approche :

$$C_{dsp}(T_{récolte}) = R_{sp} \times \overline{C}_{s,t_{\exp,veg} \to t_{réc}} \qquad \text{Équation 1.6.35}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{dsp}(T_{récolte})$	Concentration dans la plante due au dépôt de particules issues du sol, au moment de la récolte	$M.M^{-1}$ sec	$mg.kg^{-1}$ sec	C ou E
$\overline{C}_{s,t_{\exp,veg} \to t_{réc}}$	Concentration moyenne de polluant dans le sol du début de la période d'exposition des végétaux aux dépôts (date de germination pour le fourrage ou les légumes-feuilles, date de fructification pour les fruits, les grains) jusqu'au moment de la récolte	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
R_{sp}	Fraction massique de particules attachées à la plante (=« rainsplash »)	-	-	E

La concentration de polluant dans le sol $\overline{C}_{s,t_{\exp,veg} \to t_{réc}}$ à utiliser est la concentration dans le sol de surface. Si la couche de sol n'a pas été retournée, on prendra la concentration estimée dans les premiers centimètres de sol. Dans le cas d'un sol bêché ou labouré, on considérera la concentration moyenne de polluant dans le sol sur la hauteur de sol travaillé. La concentration de polluant dans le sol pourra être estimée à partir des équations développées dans la section 1.1.2, avec une hauteur de sol Z_s, différente selon le cas.

Les limites liées à l'utilisation de cette équation sont dues :

- à l'incertitude attachée au facteur R_{sp}.

  Les sources d'information pour définir ce paramètre semblent en effet très peu nombreuses. Les valeurs utilisées pour définir le « rainsplash » sont de l'ordre de quelques pourcents du poids sec des végétaux. Certains auteurs modulent cette valeur en fonction de la hauteur de la plante ;

- à l'estimation de la concentration de polluant sur les particules de sol. Le polluant est supposé avoir une concentration homogène dans la zone de mélange considérée. Or, comme indiqué dans la section 1.1.2.3.6, cette hypothèse n'est pas complètement valide. Dans le cas d'une contamination atmosphérique, cette hypothèse peut conduire à une sous-estimation de la concentration des particules remises en suspension, les particules les plus fines, remises en suspension, étant souvent les plus contaminées.

1.6.4.2. UTILISATION DE LA VITESSE DE DEPOT DES PARTICULES

Cette approche est utilisée par plusieurs modèles du domaine radioécologique (par exemple ERMYN, US DOe, 2003 ; RESRAD, US DOe, 2001 ; GENII-S, PNNL, 1988 ; ECOSYS, Müller et al., 1993).

Selon cette approche, le dépôt sur la plante ($D_{p_sol_p}$) est estimé à partir de la concentration de polluant adsorbé sur les particules présentes dans l'air et issues du sol, et de la vitesse de dépôt des particules du sol.

$$D_{p_sol_p} = C_{ap_sol} \times v_{d_psol}$$ Équation 1.6.36

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$D_{p_sol_p}$	Dépôt de polluant du sol sur les végétaux (après remise en suspension des particules à partir du sol)	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$mg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
C_{ap_sol}	Concentration de polluant dans l'air sous forme particulaire et issue du sol (cf. équations 1.2.1 et 1.2.2)	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
v_{d_psol}	Vitesse de dépôt des particules du sol remises en suspension	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	E

La concentration de polluant dans les végétaux due au dépôt des particules du sol remises en suspension peut ensuite être estimée selon les mêmes approches et les mêmes équations que celles présentées dans la section 1.6.2.

Pour le calcul du dépôt sur les végétaux, la concentration de polluant dans l'air C_{ap_sol} à prendre en compte est celle présente au niveau des végétaux. C_{ap_sol} sera calculée à partir de la concentration de polluant dans le sol en surface. Comme dans la section précédente, la concentration de polluant dans le sol pourra être estimée à partir des équations développées dans la section 1.1.2, avec une hauteur de sol Z_s, différente si le sol a été retourné ou non.

Quant à la vitesse de dépôt des particules du sol, elle dépend de nombreux facteurs, comme la taille des particules, la rugosité du sol et le les conditions météorologiques. En fonction de ces conditions, des données très variables sont fournies dans la littérature.

Ces deux paramètres, pour lesquels des mesures spécifiques sont rarement disponibles, sont sources d'incertitudes.

1.6.4.3. COMPARAISON DES DEUX APPROCHES ET REMARQUES COMPLEMENTAIRES SUR LEUR UTILISATION

L'US DOE (2003) a comparé les résultats numériques fournis par les modèles ERMYN (utilisant l'approche basée sur la vitesse de dépôt de particules issues du sol) et BIOMASS (utilisant l'approche basée sur la fraction massique de particules attachées à la plante) pour la contamination des plantes par dépôt de particules issues du sol. Pour les légumes autres que les légumes-feuilles, les deux modèles donnent des résultats proches. Pour les légumes-feuilles, en revanche, ERMYN donne une concentration supérieure d'un ordre de grandeur à celle calculée avec BIOMASS. Mais, il n'est pas possible de tirer de conclusions générales sur le comportement plus ou moins majorant d'une approche par rapport à l'autre, car les résultats cités ci-dessus dépendent autant des hypothèses arrêtées pour les équations (dans BIOMASS s'ajoute une hypothèse de réduction de la concentration de polluant dans les légumes-feuilles lors de la préparation, hypothèse non reprise dans ERMYN) que de celles définies pour les paramètres. Des travaux complémentaires sont nécessaires pour comparer ces approches dans des conditions identiques et avec un jeu de données mieux étayé.

Les résultats obtenus avec les équations des sections 1.6.4.1 et 1.6.4.2 présentent généralement des incertitudes importantes, compte-tenu des incertitudes attachées aux valeurs des paramètres utilisées. Dans le cadre d'une évaluation des risques sanitaires, si la contamination des végétaux par les particules issues du sol semble contribuer de manière sensible à l'exposition des individus (cas où le prélèvement direct à partir du sol par les racines est faible ou très faible), il est nécessaire de comparer les résultats obtenus par les deux approches et de discuter des incertitudes liées à l'estimation de l'impact de ce phénomène de transfert.

Toutefois, la prise en compte explicite de ce mode de transfert du sol superficiel vers les végétaux par l'une des deux approches ci-dessus suppose que le coefficient de bioconcentration sol-plante B_r utilisé dans l'équation 1.6.2 ne tienne pas déjà compte d'une possible contamination de la plante par remise en suspension des particules du sol (sinon l'impact de ce phénomène serait pris en compte deux fois). Il convient donc d'être attentif au protocole d'estimation du coefficient B_r. Les valeurs de B_r estimées à partir de culture en plein champ, en l'absence de serre et de paillage intègrent, a priori, l'impact d'une remise en suspension due à l'action du vent et de la pluie.

Certains modèles s'abstiennent également de décrire ce mode de transfert par des équations spécifiques, en intégrant son impact par le biais de la quantité de sol ingéré. L'INERIS ne recommande pas cette dernière approche compte tenu de la pauvreté des données disponibles pour renseigner le paramètre « quantité de sol ingéré ». A notre connaissance, il n'existe en effet pas d'étude permettant de définir une quantité de sol ingéré en fonction de la quantité de végétaux consommés et des conditions de culture de ces végétaux (conditions favorisant ou non la remise en suspension des particules du sol).

1.6.5. CONCENTRATION DANS LA PLANTE LIEE A L'EAU D'IRRIGATION

L'eau d'irrigation, quelle que soit sa nature (superficielle ou souterraine) peut contribuer à contaminer les végétaux par apport de polluant au sol. Le calcul du dépôt au sol par irrigation a été traité dans la section 1.1.2.2.2 et l'estimation de la concentration attendue dans le sol à partir d'un apport au sol, dans les sections 1.1.2.4 et 1.1.2.5. La contribution de l'eau d'irrigation à la contamination de la plante est alors intégrée au calcul de la concentration due au prélèvement direct à partir du sol (C_{rp}) et au calcul de la concentration due au dépôt des particules issues du sol (C_{dsp}).

Mais, l'irrigation peut aussi être pratiquée par aspersion et dans ce cas, en plus du dépôt d'eau au sol, il peut y avoir dépôt de polluant sur le feuillage et les fruits. La concentration de polluant due au dépôt sur les parties aériennes des végétaux par irrigation peut être estimée selon les mêmes approches que celles développées pour le dépôt particulaire à partir de l'atmosphère (cf. section 1.6.2).

Le dépôt par irrigation doit être traité comme un dépôt humide. Il est donc nécessaire d'estimer la fraction du dépôt humide qui adhère sur les plantes (méthode de calcul à partir du dépôt direct sur les parties consommables : voir équation 1.6.7) ou le rapport de captation humide (méthode de calcul à partir du dépôt sur la partie foliaire, puis prise en compte du transfert vers les parties consommables). Il convient toutefois de noter que le polluant peut être présent sous forme dissoute ou sous forme particulaire dans l'eau déposée. Selon la forme sous laquelle le polluant est présent dans l'eau, il existe différentes données ou méthodes pour estimer ces paramètres.

1.6.6. REMARQUES SUR L'ABSENCE DE PRISE EN COMPTE DES PHENOMENES DE TRANSFERT SECONDAIRES

Comme indiqué dans la section 5 de la partie A du document, les approches de calcul développées dans ce document ne respectent pas le principe de conservation de la masse, car les transferts secondaires ne sont pas systématiquement pris en compte.

Ainsi, la quantité de polluant prélevée par la plante à partir du sol n'est pas déduite de la quantité de polluant présente dans le sol. Si l'on souhaitait en tenir compte, il faudrait aussi tenir compte du retour au sol d'une partie des végétaux (résidus laissés sur place, chute des feuilles,…).

Les quantités de polluant déposées sur les plantes ne sont pas non plus déduites des quantités de polluant déposées au sol. Leur prise en compte supposerait d'ajouter à la contamination du sol, la fraction initiale non interceptée par les végétaux, plus les quantités perdues par les végétaux, au cours du temps par l'action du vent et de la pluie.

La prise en compte de ces éléments rendrait le modèle plus complexe et vraisemblablement plus sensible aux incertitudes des paramètres décrivant les végétaux. Le choix d'une approche simplifiée et conservatoire a été fait. Cette approche est conforme à celles utilisées dans les modèles d'estimation des expositions (comme HHRAP, US EPA, 2005 ; HARP, CalEPA, 2003 ; CLEA, The Environment Agency, 2002 ; CSOIL, RIVM, 2007 ; ERMYN, US DOe, 2003 ; IAEA,…).

1.7. PRODUITS ANIMAUX

Pour évaluer l'exposition humaine, il peut être nécessaire d'estimer la contamination :

- des produits agricoles (œufs, produits laitiers, viandes),
- des produits issus de la pêche (poissons, crustacés),
- des produits issus de la chasse (viandes de gibiers).

Comme pour les produits d'origine végétale, le nombre de produits animaux dont la concentration doit être modélisée dépend du contexte de l'étude (modes d'exposition des populations, degrés de spécificité et de précision recherchés pour l'étude). Dans le cadre d'un scénario de type agricole, le lait, les œufs et la viande sont souvent pris en compte. Les conditions d'exposition des animaux étant différentes, une distinction est parfois faite entre la concentration de polluant dans la viande de bovins, de porcins, d'ovins et de volaille.

Dans le cadre d'une évaluation des risques environnementaux ou de la surveillance environnementale, il peut être nécessaire d'estimer les concentrations de polluant dans d'autres organismes animaux (poissons carnassiers, oiseaux, vers de terre,…).

La concentration de polluant dans un tissu animal peut être estimée à partir de la concentration dans le (ou les) milieu(x) d'exposition de l'animal ou à partir de la dose d'exposition de l'animal. Lorsque l'exposition de l'animal est due à plusieurs milieux (par exemple l'eau et les aliments ingérés), l'utilisation de la dose d'exposition de l'animal est plus adaptée. Mais, lorsque les données d'exposition sur les animaux sont pauvres, l'estimation à partir de la concentration dans le milieu d'exposition est plus aisée, notamment pour les animaux dont le régime alimentaire est constitué d'un seul type d'aliment ou qui sont issus d'un biotope déterminé.

Pour les produits animaux issus de l'élevage et consommés par l'homme, l'approche basée sur la dose est plus fréquente, car elle permet de tenir compte, explicitement, des différentes voies d'exposition des animaux. Pour les animaux sauvages, l'approche reposant sur la concentration dans le milieu d'exposition est plus utilisée.

Dans les sections suivantes, le mode de calcul de la concentration de polluant pour les animaux domestiques et les animaux sauvages sera traité séparément. Cette distinction formelle se base sur le niveau d'informations généralement disponibles pour ces deux catégories d'animaux. Toutefois, rien n'empêche d'utiliser pour les animaux sauvages l'approche présentée ici pour les animaux domestiques, si les données nécessaires sont disponibles.

Selon les animaux et les substances, on distingue parfois bioconcentration et bioaccumulation, qui sont deux notions très proches.

La bioconcentration est le processus par lequel les organismes vivants, en particulier ceux qui vivent dans l'eau, peuvent extraire et concentrer les substances chimiques de l'environnement qui les entoure. La bioaccumulation tient également compte des apports liés aux aliments.

En revanche, il n'y a pas, à l'heure actuelle, de consensus sur les expressions mathématiques correspondant aux termes « facteur de bioconcentration » et « facteur de bioaccumulation ».

Dans la suite de ce document, on appellera :

- facteur de bioconcentration : le rapport de la concentration dans le tissu animal sur la concentration dans le milieu d'exposition de l'animal (eau dans le cas d'organismes aquatiques, aliments dans le cas d'autres animaux) ;
- facteur de biotransfert : le rapport de la concentration dans le tissu animal sur la dose journalière d'exposition externe (ou dose journalière d'exposition administrée à l'animal).

Le potentiel de bioconcentration et de bioaccumulation d'un polluant par un animal dépend de l'absorption, de la distribution et de l'élimination du polluant par l'organisme. Pour les substances organiques, ce potentiel augmente généralement avec le caractère hydrophobe des substances.

L'absorption de contaminant par les animaux provoque une augmentation de la quantité de contaminant dans les tissus de ces animaux jusqu'à l'atteinte d'un état stationnaire, où la quantité de polluant absorbée est égale à la quantité de polluant dégradée ou éliminée. Plus les taux de dégradation et d'élimination sont faibles, plus le temps nécessaire pour atteindre l'état stationnaire est long et plus la concentration correspondante dans l'organisme est élevée.

Dans la plupart des évaluations de risques, les concentrations de polluant dans les tissus animaux sont calculées à l'état stationnaire, car les apports de polluant aux animaux sont supposés constants sur des périodes suffisamment longues pour que l'état stationnaire soit atteint, et l'objectif est d'estimer l'exposition et le risque chronique. Dans ce cas, la concentration dans les produits d'origine animale est calculée en multipliant la concentration dans le milieu d'exposition ou la dose d'exposition de l'animal, respectivement par le facteur de bioconcentration ou par le facteur de biotransfert.

Des calculs peuvent toutefois être effectués avec une approche dynamique. Une telle approche est utile 1) pour évaluer les concentrations dans les tissus avant atteinte de l'état stationnaire, 2) pour estimer le temps nécessaire pour que la concentration revienne au niveau antérieur, après une période de forte exposition ou 3) si l'apport de polluant à l'animal varie en fonction du temps.

1.7.1. ANIMAUX DOMESTIQUES

1.7.1.1. DOSES D'EXPOSITION DES ANIMAUX

L'exposition des animaux prend principalement en compte les apports liés à l'alimentation, à l'eau et au sol ingéré. Dans le cadre d'une évaluation des risques pour l'homme, la prise en compte de l'exposition par la chaîne alimentaire est pertinente essentiellement pour des substances non volatiles ou semi-volatiles. Pour ces types de substances, l'exposition des animaux par inhalation est faible et généralement négligeable par rapport à l'exposition par ingestion.

Les types d'aliments à prendre en compte dépendent du cas d'étude et des conditions de vie des animaux. Dans le cadre d'une évaluation des risques

chroniques (plusieurs années d'exposition), même si le mode d'alimentation des animaux varie en fonction de la saison, les quantités d'aliments pourront être moyennées sur l'année. Si au contraire, on souhaite connaître l'évolution des concentrations dans les tissus animaux en fonction du régime alimentaire des animaux, il sera nécessaire de définir l'apport de polluant, donc d'aliments, en fonction des saisons.

Concernant l'exposition par ingestion de sol, elle sera basée sur la concentration de polluant dans le sol superficiel. La biodisponibilité d'un polluant à partir du sol peut être différente de celle observée à partir d'un aliment. Les facteurs de bioconcentration ou de biotransfert étant souvent établis à partir de polluant ingéré avec des aliments, un facteur de biodisponibilité relative pour le sol peut être utilisé pour tenir compte de cette différence (voir définition du glossaire).

On a donc :

$$D_a = \sum_j \left[Q_{j,a} \times C_j + Q_{s,a} \times C_s \times B_s + Q_{eau,a} \times C_{eau} \right] \qquad \text{Équation 1.7.1}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
D_a	Quantité de polluant à laquelle l'animal est exposé par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.j^{-1}$	C ou E
$Q_{j,a}$	Quantité de matrice j ingérée par l'animal par unité de temps	$M.T^{-1}$ ou $L^3.T^{-1}$	$kg.j^{-1}$ ou $l.j^{-1}$	E
C_j	Concentration de polluant dans la matrice j	$M.M^{-1}$ ou $M.L^{-3}$	$mg.kg^{-1}$ ou $mg.l^{-1}$	C ou E
C_s	Concentration de polluant dans le sol	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
$Q_{s,a}$	Masse de sol ingérée par l'animal par unité de temps	$M.T^{-1}$	$kg.j^{-1}$	E
B_s	Facteur de biodisponibilité relative du polluant à partir du sol	-	-	E
C_{eau}	Concentration de polluant dans l'eau	$M.L^{-3}$	$mg.l^{-1}$	C ou E
$Q_{eau,a}$	Quantité d'eau ingérée par l'animal par unité de temps	$L^3.T^{-1}$	$l.j^{-1}$	E

Remarque : les différentes matrices ingérées par un animal ou les matrices ingérées par différents animaux peuvent provenir de zones d'exposition variées. Dans ce cas, pour chaque matrice, il est nécessaire d'utiliser la concentration mesurée ou estimée au lieu dont cette matrice est issue. Si seul l'impact sanitaire attribuable au site est à prendre en compte, les quantités de matrices ingérées par l'animal qui ne sont pas issues du site doivent être retranchées des quantités totales de matrices ingérées par l'animal.

1.7.1.2. CONCENTRATIONS DANS LES TISSUS ANIMAUX

1.7.1.2.1. APPROCHE STATIONNAIRE

La quantité de polluant à laquelle l'animal est exposé est multipliée par le facteur de biotransfert :

$$C_{a,i} = D_a \times B_{T\,\mathrm{a,i}} \qquad \text{Équation 1.7.2}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{a,i}$	Concentration en polluant dans le tissu i de l'animal (i = 1 pour la viande et i = 2 pour les œufs et le lait)	$M.M^{-1}$ ou $M.L^{-3}$	$mg.kg^{-1}$ ou $mg.l^{-1}$	C ou E
D_a	Quantité de polluant à laquelle l'animal est exposé par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.j^{-1}$	C ou E
$B_{T\,a,i}$	Facteur de biotransfert du polluant vers le tissu i de l'animal	$T.M^{-1}$ de tissu ou $T.L^{-3}$ de tissu	$j.kg^{-1}$ de tissu ou $j.l^{-1}$ de tissu	C ou E

En l'absence des données nécessaires pour renseigner l'équation ci-dessus, l'approche basée sur la concentration présente dans le (ou les) milieux d'exposition et le facteur de bioconcentration est parfois utilisée.

On écrit alors :

$$C_{a,i} = \frac{\sum_j C_j \times Q_{j,a}}{\sum_j Q_{j,a}} \times BCF_{a,i}$$ Équation 1.7.3

et les facteurs de biotransfert et de bioconcentration sont liés par la relation suivante :

$$B_{Ta,i} = \frac{BCF_{a,i}}{\sum_j Q_{j,a}}$$ Équation 1.7.4

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{a,i}$	Concentration en polluant dans le tissu i de l'animal	$M.M^{-1}$ ou $M.L^{-3}$	$mg.kg^{-1}$ ou $mg.l^{-1}$	C ou E
C_j	Concentration de polluant dans le milieu d'exposition j	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
$B_{T\,a,i}$	Facteur de biotransfert du polluant vers le tissu i de l'animal	$T.M^{-1}$ de tissu ou $T.L^{-3}$ de tissu	$j.kg^{-1}$ de tissu ou $j.l^{-1}$ de tissu	C ou E
$BCF_{a,i}$	Facteur de bioconcentration du polluant dans le tissu i de l'animal	M de milieu.M^{-1} de tissu ou M de milieu.L^{-3} de tissu	kg de milieu.kg^{-1} de tissu ou kg de milieu.l^{-1} de tissu	C ou E
$Q_{j,a}$	Quantité de milieu j ingérée par unité de temps par l'animal	$M.T^{-1}$	$kg.j^{-1}$	E

La principale difficulté liée à l'utilisation de ces relations vient de la définition des facteurs de biotransfert ($B_{Ta,i}$) ou bioconcentration ($BCF_{a,i}$).

Ainsi, il faut être attentif aux dimensions des valeurs utilisées pour renseigner $B_{Ta,i}$ et $BCF_{a,i}$. Selon les cas, ces valeurs peuvent être calculées à partir de la concentration de polluant mesurée dans la matière grasse animale, ou bien de la concentration de polluant exprimée par rapport à la masse sèche ou par rapport à la masse fraiche du tissu animal.

Il faut aussi veiller à ce que les conditions dans lesquelles ces paramètres ont été définis soient représentatives des conditions auxquelles l'utilisateur s'intéresse (même niveau d'exposition, même type d'animal, même matrice d'exposition et biodisponibilité du polluant comparable). Des documents à venir

portant sur les paramètres physico-chimiques et les paramètres de transfert des substances chimiques indiqueront les critères importants pour la sélection de valeurs adaptées pour ces paramètres.

Par ailleurs, si l'état stationnaire n'est pas atteint, les rapports « concentration dans le tissu animal sur dose d'exposition de l'animal » et « concentration dans le tissu animal sur concentration moyenne dans les média prélevés » ne sont pas constants. Par conséquent, si un animal jusqu'alors non exposé est soumis à une dose d'exposition (D_1), l'utilisation des équations 1.7.2 ou 1.7.3 avec un facteur de biotransfert ou de bioconcentration (estimé à l'état stationnaire) conduira à une surestimation des concentrations dans les matrices animales, tant que l'état stationnaire ne sera pas atteint. A l'inverse, si la dose d'exposition passe d'une valeur D_1 à une valeur D_2 plus faible, les concentrations dans les matrices animales estimées, selon cette approche, seront sous-estimées, tant qu'un nouvel état stationnaire ne sera pas atteint.

1.7.1.2.2. APPROCHE DYNAMIQUE

1.7.1.2.2.1. CONCENTRATION DANS L'ORGANISME ANIMAL

Selon le métabolisme de l'animal, la substance absorbée peut être distribuée dans différents tissus et un modèle avec un nombre plus ou moins grand de compartiments est nécessaire pour représenter le devenir de la substance dans l'organisme animal.

Seul le cas le plus simple, basé sur l'utilisation d'un modèle à un seul compartiment est développé ici. Ce compartiment représente alors l'ensemble des tissus de l'animal dans lesquels le polluant est stocké et la concentration de polluant dans ces tissus est supposée uniforme. Les phénomènes de dégradation et d'élimination sont représentés par une cinétique d'ordre 1.

Selon les hypothèses décrites ci-dessus pour le modèle à un compartiment, on peut écrire :

$$\frac{dm_{a,1}}{dt} = t_{abs\,a} \times D_a - k_a \times m_{a,1} - \lambda_a \times m_{a,1} \qquad \text{Équation 1.7.5}$$

avec $m_{a,1}$: masse de polluant dans l'organisme animal,

$t_{abs,a}$: taux d'absorption du polluant par l'animal,

D_a : quantité de polluant à laquelle l'animal est exposé par unité de temps,

k_a : facteur d'élimination du polluant vers le lait ou les œufs par l'animal (cas des vaches, brebis, poules,…),

λ_a : facteur de dégradation et d'élimination du polluant par l'animal par d'autres voies que le lait ou les œufs.

1. **Si $t_{abs,a}$, D_a, k_a et λ_a sont constants,** on peut écrire :

$$m_{a,1}(t) = \frac{t_{abs,a} \times D_a}{k_a + \lambda_a} \times \left(1 - e^{-(k_a+\lambda_a)\times t}\right) + m_{a,1}(0) \times e^{-(k_a+\lambda_a)\times t} \qquad \text{Équation 1.7.6}$$

et $C_{a,1}(t) = \frac{t_{abs,a} \times D_a}{(k_a + \lambda_a) \times M_{a,1}(t)} \times \left(1 - e^{-(k_a+\lambda_a)\times t}\right) + \frac{m_{a,1}(0)}{M_{a,1}(t)} \times e^{-(k_a+\lambda_a)\times t}$ Équation 1.7.7

Si la masse de polluant dans l'organisme animal ($m_{a,1}$) est nulle à l'instant 0, on a :

$$C_{a,1}(t) = \frac{t_{abs,a} \times D_a}{(k_a + \lambda_a) \times M_{a,1}(t)} \times \left(1 - e^{-(k_a+\lambda_a)\times t}\right)$$ Équation 1.7.8

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{a,1}$ (t)	Concentration de polluant au temps t dans l'organisme animal	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
$M_{a,1}$ (t)	Masse des tissus animaux où est stocké le polluant, au temps t ($M_{a,1}$ n'intègre pas la masse de produit excrété comme le lait ou les œufs)	M	kg	E
$m_{a,1}(0)$	Masse de polluant dans l'organisme animal à l'instant 0	M	mg	E
λ_a	Facteur de dégradation et d'élimination du polluant par l'animal par d'autres voies que le lait ou les œufs	T^{-1}	j^{-1}	E
k_a	Facteur d'élimination du polluant vers le lait ou les œufs par l'animal (cas des vaches, brebis, poules,…)	T^{-1}	j^{-1}	E
$t_{abs,a}$	Taux d'absorption du polluant par l'animal	-	-	E
D_a	Quantité de polluant à laquelle l'animal est exposé par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.j^{-1}$	C ou E

2. Si $t_{abs,a}$, D_a, k_a ou λ_a varient au cours du temps, $m_{a,1}$ doit être intégrée sur des intervalles de temps (Δt) où ces paramètres peuvent être considérés comme constants, d'où

$$m_{a,1}(t) = \frac{t_{abs,a} \times D_a}{(k_a + \lambda_a)} \times \left(1 - e^{-(k_a+\lambda_a)\times \Delta T}\right) + m_{a,1}(t - \Delta T) \times e^{-(k_a+\lambda_a)\times \Delta T}$$ Équation 1.7.9.

et $C_{a,1}(t) = \frac{m_{a,1}(t)}{M_{a,1}(t)}$ Équation 1.7.10

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$m_{a,1}$ (t)	Masse de polluant au temps t dans l'organisme animal	M	mg	C ou E
$C_{a,1}$ (t)	Concentration de polluant au temps t dans l'organisme animal	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
$M_{a,1}$ (t)	Masse des tissus animaux où est stocké le polluant, au temps t ($M_{a,1}$ n'intègre pas la masse de produit excrété comme le lait ou les œufs)	M	kg	E
λ_a	Facteur de dégradation et d'élimination du polluant par l'animal par d'autres voies que le lait ou les œufs	T^{-1}	j^{-1}	E
k_a	Facteur d'élimination du polluant vers le lait ou les œufs par l'animal (cas des vaches, brebis, poules,…)	T^{-1}	j^{-1}	E
$t_{abs,a}$	Taux d'absorption du polluant par l'animal	-	-	E
D_a	Quantité de polluant à laquelle l'animal est exposé par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.j^{-1}$	C ou E

3. **S'il n'y a ni dégradation, ni élimination de la substance par l'organisme animal,** on peut écrire :

$$C_{a,1}(T) = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left[D_a(t_i) \times t_{abs,a}(t_i) \times \Delta t_i\right]}{M_{a,1}(T)} \qquad \text{Équation 1.7.11}$$

avec i : numéro d'itération entre 1 et n,

et $\sum_{i=1}^{n} \Delta t_i = T$.

et **si D_a et $t_{abs,a}$ sont constants**, on peut écrire :

$$C_{a,1}(T) = \frac{D_a \times T \times t_{abs,a}}{M_{a,1}(T)} \qquad \text{Équation 1.7.12}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unité	Statut
$C_{a,1}(T)$	Concentration de polluant au temps T dans l'organisme animal	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
$M_{a,1}(T)$	Masse des tissus animaux où est stocké le polluant, au temps T ($M_{a,1}$ n'intègre pas la masse de produit excrété comme le lait ou les œufs)	M	kg	E
$t_{abs,a}$	Taux d'absorption du polluant par l'animal	-	-	E
D_a	Quantité de polluant à laquelle l'animal est exposé par unité de temps	$M.T^{-1}$	$mg.j^{-1}$	C ou E
T	Durée d'exposition de l'animal	T	j	E

Remarque : Dans le cas de substances très lipophiles (exemples : PCDD, PCDF, PCB), qui sont presque exclusivement stockées dans les graisses animales, l'approche développée ci-dessus peut être réservée au compartiment lipidique. Dans ce cas, $C_{a,1}$ est la concentration de polluant dans les graisses animales et $M_{a,1}$ est la masse de lipides de l'animal. La concentration dans la viande peut alors être estimée à partir de la concentration de polluant dans les lipides et du taux de matières grasses dans la viande.

1.7.1.2.2.2. CONCENTRATION DANS LES PRODUITS EXCRETES (LAIT ET ŒUFS)

La concentration de polluant dans les produits excrétés (lait et œufs) peut être estimée à partir de l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dm_{a,2}}{dt} = k_a \times m_{a,1} \qquad \text{Équation 1.7.13}$$

avec $m_{a,2}$: masse de polluant excrétée par l'animal,

$C_{a,2}$: concentration dans la matrice excrétée (lait ou œuf) par l'animal au temps t

k_a : facteur d'élimination de la substance vers le lait ou les œufs par l'animal (cas des vaches, brebis, poules,…),

$m_{a,1}$: masse de polluant dans l'organisme animal,

soit $$C_{a,2} \times \frac{dM_{a,2}}{dt} + M_{a,2} \times \frac{dC_{a,2}}{dt} = k_a \times m_{a,1}$$ Équation 1.7.14

avec $M_{a,2}$: masse (ou volume) de matrice produite depuis l'instant 0 par l'animal,

et $C_{a,2}$: concentration dans la matrice excrétée (lait ou œuf) par l'animal au temps t.

Si sur la période ΔT considérée, les variations de concentration dans la matrice excrétée sont négligeables, on peut écrire :

$$C_{a,2}(\Delta T) = \frac{k_a \times m_{a,1} \times \Delta T}{\Delta M_{a,2}}$$ Équation 1.7.15

avec $\Delta M_{a,2}$: variation de la masse (ou du volume) de matrice produite par l'animal pendant la période ΔT.

Si ΔT est égal à un jour, si $t_{abs,a}$, D_a, k_a, λ_a sont constants et si la masse (ou le volume) de matrice produit(e) par jour par l'animal est constant(e) et égal(e) à $M^j_{a,2}$, alors la concentration moyenne au jour j dans la matrice excrétée est donnée par :

$$C_{a,2,moy_j} = \frac{k_a \times m_{a,1}(t)}{M^j_{a,2}}$$ Équation 1.7.16

Si $t_{abs,a}$, D_a, k_a et λ_a sont constants, on peut écrire :

$$C_{a,2,moy_j} = \frac{k_a}{k_a + \lambda_a} \cdot \frac{t_{abs,a} \times D_a}{M^j_{a,2}} + \frac{k_a}{M^j_{a,2}} \cdot \left[m_{a,1}(0) - \frac{t_{abs,a} \times D_a}{(k_a + \lambda_a)} \right] \times e^{-(k_a + \lambda_a) \times t}$$

Équation 1.7.17

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{a,2,moy_j}$	Concentration moyenne de polluant dans la matrice excrétée (lait ou œuf) par l'animal au jour j considéré	$M.M^{-1}$ ou $M.L^{-3}$	$mg.kg^{-1}$ ou $mg.l^{-1}$	C ou E
$m_{a,1}(t)$	Masse de polluant dans l'organisme animal au jour j considéré	M	mg	E
λ_a	Facteur de dégradation et d'élimination du polluant par l'animal par d'autres voies que le lait ou les œufs	T^{-1}	j^{-1}	E
k_a	Facteur d'élimination du polluant vers le lait ou les œufs par l'animal (cas des vaches, brebis, poules,…)	T^{-1}	j^{-1}	E
$t_{abs,a}$	Taux d'absorption du polluant par l'animal	-	-	E
D_a	Quantité de polluant à laquelle l'animal est exposé par jour	$M.T^{-1}$	$mg.j^{-1}$	C ou E
$m_{a,1}(0)$	Masse de polluant dans l'organisme animal à l'instant 0	M	mg	E
$M^j_{a,2}$	Masse ou volume de matrice produit(e) par jour par l'animal	$M.T^{-1}$	$kg.j^{-1}$ ou $l.j^{-1}$	E

1.7.1.2.3. TEMPS NECESSAIRE POUR ATTEINDRE L'ETAT STATIONNAIRE ET ESTIMATION DES COEFFICIENTS DE TRANSFERT

Quand $M_{a,1}$ est constant, on peut considérer que $C_{a,1}$ est proche de l'état stationnaire si :

$$C_{a,1} \approx \frac{t_{abs,a} \times D_a}{(k_a + \lambda_a) \times M_{a,1}}$$ Équation 1.7.18

ou si $e^{-(k_a+\lambda_a)t} \to 0$ Équation 1.7.19

(cf. équation 1.7.8)

Or, quand $t \geq \frac{3}{k_a + \lambda_a}$,

$$e^{-(k_a+\lambda_a)t} < 0{,}05$$ Équation 1.7.20

Par conséquent, si des animaux sont exposés à une quantité de polluant constante (D_a) au cours du temps, au-delà d'une durée égale à $\frac{3}{k_a + \lambda_a}$, l'approche basée sur les coefficients de transfert et l'état stationnaire donne des résultats proches de l'approche dynamique.

D'après les équations 1.7.2 et 1.7.18, on peut donc écrire :

$$B_{Ta,1} = \frac{t_{abs,a}}{(k_a + \lambda_a) \times M_{a,1}}$$ Équation 1.7.21

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$B_{T\,a,\,1}$	Facteur de biotransfert dans l'organisme animal	$T.M^{-1}$ de tissu	$j.kg^{-1}$ de tissu	C ou E
$M_{a,1}$	Masse des tissus animaux où est stocké le polluant ($M_{a,1}$ n'intègre pas la masse de produit excrétée comme le lait ou les œufs)	M	kg	E
λ_a	Facteur de dégradation et d'élimination du polluant par l'animal par d'autres voies que le lait ou les œufs	T^{-1}	j^{-1}	E
k_a	Facteur d'élimination du polluant vers le lait ou les œufs par l'animal (cas des vaches, brebis, poules,…)	T^{-1}	j^{-1}	E
$t_{abs,\,a}$	Taux d'absorption du polluant par l'animal	-	-	E

Remarque : si le polluant est principalement stocké dans les tissus lipidiques et $B_{Ta,1}$ est le coefficient de transfert dans les graisses animales, le coefficient de transfert dans la viande est calculé en multipliant l'équation 1.7.21 par le taux de matière grasse dans la viande.

L'expression du facteur de biotransfert dans les tissus excrétés (lait et œufs) peut être déduite de l'équation 1.7.14. D'après cette équation, on peut écrire :

$$\frac{dC_{a,2}}{dt} = \frac{k_a \times M_{a,1} \times C_{a,1}}{M_{a,2}} - C_{a,2} \times \frac{1}{M_{a,2}} \times \frac{dM_{a,2}}{dt}$$ Équation 1.7.22

Si $M_{a,1}$ est constant et $M_{a,2}(t) = M_{a,2}^{j} \times t$,

alors $$\frac{dC_{a,2}}{dt} = \frac{k_a \times M_{a,1} \times C_{a,1}}{M_{a,2}^{j} \times t} - \frac{C_{a,2}}{t}$$ Équation 1.7.23

A l'état stationnaire, on a donc :

$$C_{a,2} = \frac{k_a \times M_{a,1} \times C_{a,1}}{M_{a,2}^{j}}$$ Équation 1.7.24

et d'après les équations 1.7.2 et 1.7.18, on peut écrire :

$$B_{Ta,2} = \frac{k_a}{k_a + \lambda_a} \times \frac{t_{abs,a}}{M_{a,2}^{j}}$$ Équation 1.7.25

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$B_{T\,a,\,2}$	Facteur de biotransfert dans les tissus excrétés (lait ou œuf) par l'animal	$T.M^{-1}$ de tissu ou $T.L^{-3}$ de tissu	$j.kg^{-1}$ de tissu ou $j.l^{-1}$ de tissu	C ou E
$Mi_{a,2}$	Masse ou volume de matrice produit(e) par jour par l'animal	$M.T^{-1}$ ou $L^3.j^{-1}$	$kg.j^{-1}$ ou $l.j^{-1}$	E
λ_a	Facteur de dégradation et d'élimination du polluant par l'animal par d'autres voies que le lait ou les œufs	T^{-1}	j^{-1}	E
k_a	Facteur d'élimination du polluant vers le lait ou les œufs par l'animal (cas des vaches, brebis, poules,…)	T^{-1}	j^{-1}	E
$t_{abs,\,a}$	Taux d'absorption du polluant par l'animal	-	-	E

Remarques :

1. Si le taux d'absorption n'est pas connu, il peut être pris égal à 1, en première approche, ce qui correspond à une hypothèse d'absorption totale du polluant à partir des aliments et de l'eau ingérée et donc à une approche conservatoire.
2. Si λ_a est égal à 0, les équations de calcul des concentrations dans les tissus animaux se trouvent simplifiées.

   Ainsi,

   $$B_{Ta,1} = \frac{t_{abs,a}}{k_a \times M_{a,1}}$$ Équation 1.7.26

   et $$B_{Ta,2} = \frac{t_{abs,a}}{M_{a,2}^{j}}$$ Équation 1.7.27

3. Les équations déclinées dans la section 1.7.1.2.2 pour estimer les concentrations dans l'organisme animal et les produits excrétés à partir d'une approche dynamique sont basées sur la dose d'exposition de l'animal. Des équations du même type peuvent être écrites à partir de la concentration dans le (ou les) milieu(x) d'exposition (cf. section 1.7.2.2).

En effet, l'équation 1.7.5 peut être remplacée par :

$$\frac{dm_{a,1}}{dt} = t_{abs,a} \times Q_a \times \overline{C}_{j,a} - k_a m_{a,1} - \lambda_a m_{a,1}$$ Équation 1.7.28

avec $m_{a,1}$: masse de polluant dans l'organisme animal,

$t_{abs,\,a}$: taux d'absorption du polluant par l'animal,

k_a : facteur d'élimination du polluant vers le lait ou les œufs par l'animal (cas des vaches, brebis, poules,…),

λ_a : facteur de dégradation et d'élimination du polluant par l'animal par d'autres voies que le lait ou les œufs,

Q_a : quantité totale de matrice(s) ingérée(s) par l'animal par jour (= $\sum_j Q_{j,a}$),

$\overline{C}_{j,a}$: moyenne pondérée des concentrations de polluant dans la (ou les) matrices ingérée(s) par l'animal ($\overline{C}_{j,a} = \frac{\sum_j C_j \times Q_{j,a}}{\sum_j Q_{j,a}}$),

d'où $\frac{dm_{a,1}}{dt} = K_{abs,a} \times \overline{C}_{j,a} - k_a m_{a,1} - \lambda_a m_{a,1}$ Équation 1.7.29

avec $K_{abs,a} = t_{abs,a} \times Q_a$ Équation 1.7.30

Les expressions de $C_{a,1}$ et $C_{a,2}$ qui en découlent sont identiques à celles développées ci-dessus, avec $K_{abs,a} \times \overline{C}_{j,a}$ remplaçant $t_{abs\,a} \times D_a$.

1.7.2. ANIMAUX SAUVAGES

La concentration de polluant dans l'organisme animal est calculée à partir de la concentration dans le milieu (ou de la concentration moyenne dans les milieux) d'exposition de l'animal.

Comme précédemment, elle peut être estimée selon une approche stationnaire ou dynamique.

1.7.2.1. APPROCHE STATIONNAIRE

$$C_a = C_{me} \times BCF_a$$ Équation 1.7.31

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
C_a	Concentration de polluant dans l'organisme animal	M. M^{-1}	mg. kg^{-1}	C ou E
BCF_a	Facteur de bioconcentration dans l'organisme animal	M de milieu.M^{-1} de tissu ou L^3 de milieu.M^{-1} de tissu	kg de milieu.kg^{-1} de tissu ou m^3 de milieu.kg^{-1} de tissu	C ou E
C_{me}	Concentration dans le ou les milieux d'exposition de l'animal	M. M^{-1} ou M. L^{-3}	mg. kg^{-1} ou mg. m^{-3}	C ou E

Remarques :

1. Pour les poissons, le milieu d'exposition est l'eau. Toutefois, selon les sources de données, le facteur de bioconcentration est défini par rapport à la concentration de polluant sous forme dissoute ou par rapport à la concentration de polluant dans l'eau sous formes particulaire et dissoute. Il faut donc veiller à ce que la concentration utilisée soit en accord avec la définition du facteur de bioconcentration. Dans certains cas, un facteur de bioconcentration peut aussi avoir été défini par rapport à la concentration dans les sédiments (on parle plutôt de facteur de bioaccumulation) et la concentration à utiliser est alors celle des sédiments.
2. Pour certaines substances, les concentrations de polluant dans les organismes prédateurs sont plus élevées que dans les organismes que ces prédateurs consomment (rapportées à la teneur en lipides). On parle alors de bioamplification et on peut être amené à estimer les concentrations de polluant le long de la chaîne trophique.

   A l'état stationnaire, on peut écrire :

$$C_{pred} = C_{proie} \times BCF_{pred} \qquad \text{Équation 1.7.32}$$

avec C_{pred} : concentration de polluant chez l'animal prédateur,

BCF_{pred} : facteur de bioconcentration relatif au prédateur,

C_{proie} : concentration de polluant chez la proie,

$$C_{proie} = C_{me} \times BCF_{proie}$$

d'où $$C_{pred} = C_{me} \times BCF_{proie} \times BCF_{pred} \qquad \text{Équation 1.7.33}$$

BCF_{pred} est parfois appelé facteur de biomagnification (anglicisme pour bioamplification).

1.7.2.2. APPROCHE DYNAMIQUE

Comme précédemment, l'approche consiste à représenter l'animal par un compartiment unique et l'équation différentielle traduit les échanges entre le milieu d'exposition et l'animal en fonction du temps.

$$\frac{dm_a}{dt} = k_{1,a} \times V_{me} \times C_{me} - k_{2,a} m_a - \lambda'_a m_a \qquad \text{Équation 1.7.34}$$

avec m_a : masse de polluant dans l'organisme animal,

$k_{1,a}$: taux d'absorption du polluant par l'organisme animal,

V_{me} : volume du milieu d'exposition,

C_{me} : concentration dans le milieu d'exposition,

$k_{2,a}$: facteur d'élimination du polluant par l'organisme animal,

λ'_a : facteur de dégradation du polluant par l'organisme animal.

Remarque : Dans le cas du poisson, le milieu d'exposition est l'eau superficielle et $k_{2,a} \times m_a$ est la quantité de polluant rejeté dans l'eau par unité de temps, par le poisson. Si la quantité de polluant dans l'eau est bien supérieure à la quantité de polluant dans le poisson, on peut considérer que C_{me} n'est pas modifiée par $k_{2,a} \times m_a$.

1. **Si C_{me}, $k_{1,a}$, $k_{2,a}$ et λ'_a sont constants,** on peut écrire :

$$m_a(t) = \frac{k_{1,a} \times V_{me} \times C_{me}}{k_{2,a} + \lambda'_a} \times \left(1 - e^{-(k_{2,a}+\lambda'_a)\times t}\right) + m_a(0) \times e^{-(k_{2,a}+\lambda'_a)\times t} \qquad \text{Équation 1.7.35}$$

et $$C_a(t) = \frac{K_{1,a} \times C_{me}}{(k_{2,a} + \lambda'_a) \times M_a(t)} \times \left(1 - e^{-(k_a+\lambda'_a)\times t}\right) + \frac{m_a(0) \times e^{-(k_{2,a}+\lambda'_a)\times t}}{M_a(t)}$$

Équation 1.7.36

avec $K_{1,a} = k_{1,a} \times V_{me}$ Équation 1.7.37

La masse de l'organisme animal (M_a) est souvent considérée comme constante au cours du temps. Si par ailleurs, la masse de polluant dans l'organisme animal (m_a) est nulle à l'instant 0, alors il est possible d'écrire :

$$C_a(t) = \frac{K_{1,a} \times C_{me}}{(k_{2,a} + \lambda'_a) \times M_a} \times \left(1 - e^{-(k_{2,a}+\lambda'_a)\times t}\right) \qquad \text{Équation 1.7.38}$$

soit $$C_a(t) = \frac{K_{1,a}}{K_{2,a}} \times C_{me} \times \left(1 - e^{-(k_{2,a}+\lambda'_a)\times t}\right) \qquad \text{Équation 1.7.39}$$

avec $K_{2,a} = (k_{2,a} + \lambda'_a) \times M_a$ Équation 1.7.40

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_a(t)$	Concentration de polluant dans l'organisme animal au temps t	M. M^{-1}	mg. kg^{-1}	C ou E
C_{me}	Concentration de polluant dans le milieu d'exposition	M. L^{-3}	mg. m^{-3}	C ou E
$K_{1,a}$	Coefficient de transfert de masse du milieu d'exposition vers l'organisme animal	L^3 de milieu. T^{-1}	m^3 de milieu. j^{-1}	E
$K_{2,a}$	Coefficient de transfert de masse de l'organisme animal vers le milieu d'exposition	M de tissu. T^{-1}	kg de tissu. j^{-1}	E

Remarque : à l'état stationnaire, la concentration dans l'organisme animal (C_a) est constante et on peut écrire :

$$C_a = \frac{K_{1,a}}{K_{2,a}} \times C_{me}$$ Équation 1.7.41

On en déduit,

$$BCF_a = \frac{K_{1,a}}{K_{2,a}}$$ Équation 1.7.42

2. Si C_{me}, $k_{1,a}$, $k_{2,a}$ ou λ'_a varient au cours du temps, l'équation 1.7.34 doit être intégrée sur des intervalles de temps (ΔT) où ces paramètres peuvent être considérés comme constants :

d'où $m_a(t) = \frac{K_{1,a} \times C_{me}}{(k_{2,a} + \lambda'_a)} \times \left(1 - e^{-(k_{2,a}+\lambda'_a)\times\Delta T}\right) + m_a(t-\Delta T) \times e^{-(k_{2,a}+\lambda'_a)\times\Delta T}$ Équation 1.7.43.

et $C_a(t) = \frac{K_{1,a}}{K_{2,a}} \times C_{me} \times \left(1 - e^{-(k_{2,a}+\lambda'_a)\times\Delta T}\right) + \frac{m_a(t-\Delta T)}{M_a(t)} \times e^{-(k_{2,a}+\lambda'_a)\times\Delta T}$ Équation 1.7.44

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_a(t)$	Concentration de polluant dans l'organisme animal au temps t	M. M^{-1}	mg. kg^{-1}	C ou E
$m_a(t)$	Masse de polluant dans l'organisme animal au temps t	M	mg	C ou E
$M_a(t)$	Masse de l'organisme animal au temps t	M	kg	E
C_{me}	Concentration de polluant dans le milieu d'exposition	M. L^{-3}	mg. m^{-3}	C ou E
$K_{1,a}$	Coefficient de transfert de masse du milieu d'exposition vers l'organisme animal	L^3 de milieu. T^{-1}	m^3 de milieu. j^{-1}	E
$K_{2,a}$	Coefficient de transfert de masse de l'organisme animal vers le milieu d'exposition	M de tissu. T^{-1}	kg de tissu. j^{-1}	E

2. ESTIMATION DES NIVEAUX D'EXPOSITION

Les calculs des niveaux d'exposition par :

- la voie respiratoire,
- la voie orale,
- la voie cutanée,

sont présentés successivement.

Pour le calcul des risques subchroniques et chroniques, il est nécessaire de calculer les niveaux d'exposition moyens sur des durées allant de quelques jours à plusieurs années. Ces niveaux d'exposition moyens doivent être calculés comme la moyenne des niveaux d'exposition sur la période d'exposition. Comme indiqué dans la section 1.1.2, une dose moyenne d'exposition externe pour une durée donnée peut aussi parfois être estimée à partir des concentrations moyennes dans les milieux d'exposition, si ces concentrations peuvent être facilement calculées par une expression analytique et si les paramètres d'exposition de la cible peuvent être considérés comme constants sur cette période (cf. sections 2.2 et 2.3.2).

2.1. EXPOSITION PAR INHALATION

La concentration inhalée (C_{inh}) est calculée comme la somme de la concentration de polluant sous forme gazeuse (C_{ag}) et de la concentration de polluant sous forme particulaire inhalable (C_{ap_inh}) :

$$C_{inh} = C_{ag} + C_{ap_inh}$$ Equation 2.1.1

C_{ap_inh} est généralement assimilée à la concentration de polluant absorbé sur les particules de diamètre inférieur ou égal à 10 µm (cf. section 1.2.1).

La concentration moyenne de polluant inhalée est calculée comme la somme des concentrations des différents lieux (milieux extérieurs et/ou milieux intérieurs ») fréquentés pendant la période d'exposition, pondérées par la fraction de temps passé dans chaque lieu.

La concentration moyenne inhalée sur la période d'exposition (d_{exp}) allant de T_1 à T_2 est donc donnée par :

$$\overline{C_{inh}}(d_{\exp}) = \frac{\sum_{i=1}^{n} C_{inh}(t_i) \times \Delta t_i}{T_2 - T_1}$$ Equation 2.1.2

avec Δt_i : période pendant laquelle la concentration inhalée est égale à $C_{inh}(t_i)$,

$$\sum_{i=1}^{n} \Delta t_i = T_2 - T_1$$

n : nombre de pas de temps,

i : numéro d'itération entre 1 et n.

.

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\overline{C_{inh}}(d_{\exp})$	Concentration moyenne inhalée sur la période d'exposition d_{exp}	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
$C_{inh}(t_i)$	Concentration inhalée au temps t_i	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
Δt_i	Durée pendant laquelle la concentration inhalée est égale à $C_{inh}(t_i)$	T	j	E
C_{ap_inh}	Concentration de polluant dans l'air sous forme particulaire inhalable	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
C_{ag}	Concentration de polluant dans l'air sous forme gazeuse	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
d_{exp}	Durée de la période d'exposition considérée ($d_{exp}=T_2-T_1$)	T	j	C ou E
T_1	Début de la période d'exposition	T	j	E
T_2	Fin de la période d'exposition	T	j	E

2.2. EXPOSITION PAR INGESTION DE SOL

La dose d'exposition par ingestion de sol (E_s) est donnée par :

$$E_s = \frac{Q_{s_p} \times C_{s,ing} \times B_s}{B_w} \qquad \text{Equation 2.2.1}$$

avec $C_{s,ing}$: Concentration de polluant dans le sol ingéré ou dans la fraction de sol des poussières ingérées,

B_s : Facteur de biodisponibilité relative du polluant dans le sol (par rapport à la biodisponibilité du polluant dans la matrice ayant servi à élaborer la valeur toxicologique de référence),

B_w : Masse corporelle de la cible,

Q_{s_p} : Quantité de sol ou de poussières (pondérée par la fraction de sol dans les poussières) ingérée :

$$Q_{s_p} = Q_s + Q_{pous} \times f_{s_pous} \qquad \text{Équation 2.2.2}$$

avec Qs : quantité de sol ingérée,

Qpous : quantité de poussières ingérée,

et f_{s_pous} : fraction de sol dans les poussières.

Remarques :

1. Compte-tenu de la qualité des données disponibles pour estimer les quantités de sol et de poussières ingérées, il est difficile de distinguer les quantités de sol ingérées via le sol extérieur et via les poussières.
2. $C_{s,ing}$ est généralement définie comme la concentration de polluant dans le sol superficiel. Les particules de sol adhérant aux doigts étant les particules les plus fines, cette fraction peut présenter une concentration différente, souvent plus forte que le sol *in situ*. L'évaluateur peut donc définir la concentration dans le sol ingéré comme la concentration mesurée dans cette fraction (l'US EPA (1994) dans le guide d'utilisateur du modèle IEUBK recommande d'utiliser la concentration mesurée dans la fraction inférieure à 250 µm) ou pondérer la concentration modélisée dans la couche superficielle par un facteur d'enrichissement. Mais, la définition de la valeur de ce paramètre peut également être source d'incertitudes.
3. Q_{s_p} étant généralement définie sur la base d'une masse de sol ingérée par jour, $C_{s,ing}$ peut alors être estimée à partir de la moyenne des concentrations dans les sols des lieux fréquentés par la cible pendant une journée, en tenant compte de la fraction de temps passé dans chacun de ces lieux et du type d'activités pratiquées dans ces lieux (activités favorisant un contact avec le sol ou non).

4. La biodisponibilité du polluant à partir du sol peut être différente (elle est souvent inférieure) de celle observée lorsque le polluant est dilué dans l'eau ou ingéré avec des aliments. Pour tenir compte de la différence de biodisponibilité entre le polluant ingéré avec le sol et de celle du polluant sur la matrice ayant servi à établir la valeur toxicologique de référence, un facteur de biodisponibilité relative peut être utilisé. Mais peu de données sont encore disponibles pour définir ce paramètre. Des travaux (Caboche, 2009) ont montré la possibilité d'estimer la biodisponibilité relative de certains polluants dans un sol à partir de la bioaccessibilité de ces polluants mesurée par des méthodes in vitro (INERIS, 2010). Mais en l'absence de données, une valeur par défaut et majorante, égale à 1 est généralement attribuée au facteur B_s.

Sur la période d'exposition (d_{exp}) allant de T_1 à T_2, la dose d'exposition moyenne par ingestion de sol est calculée comme la moyenne des doses de polluant ingérées à partir du sol de T_1 à T_2. Si d_{exp} est discrétisée en n sous-périodes de durée Δt_i pour lesquelles la dose d'exposition $E_s(t_i)$ peut être considérée comme constante, on peut écrire :

$$\overline{E_s}(d_{\exp}) = \frac{\sum_{i=1}^{n} E_s(t_i) \times \Delta t_i}{T_2 - T_1} \qquad \text{Equation 2.2.3}$$

avec i : numéro d'itération (numéro de la sous-période considérée) entre 1 et n,

et $\sum_{i=1}^{n} \Delta t_i = T_2 - T_1$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\overline{E_s}(d_{\exp})$	Dose d'exposition moyenne par ingestion de sol sur la période d'exposition d_{exp}	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
$E_s(t_i)$	Dose d'exposition par ingestion de sol au temps t_i	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
Δt_i	Durée pendant laquelle la dose d'exposition est égale à $E_s(t_i)$	T	j	E
$C_{s,ing}$	Concentration de polluant dans le sol ingéré	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
Q_{s_pous}	Masse de sol et de poussières (masse de poussières exprimée par rapport à la concentration dans le sol) ingérée par unité de temps	$M.T^{-1}$	$kg.j^{-1}$	C ou E
Q_s	Masse de sol ingérée par unité de temps	$M.T^{-1}$	$kg.j^{-1}$	E
Q_{pous}	Masse de poussières intérieures ingérée par unité de temps	$M.T^{-1}$	$kg.j^{-1}$	E
f_{s_pous}	Fraction de sol dans les poussières	-	-	E
d_{exp}	Durée de la période d'exposition considérée ($d_{exp}=T_2-T_1$)	T	j	C ou E
T_1	Début de la période d'exposition	T	j	E
T_2	Fin de la période d'exposition	T	j	E
B_w	Masse corporelle de la cible	M	kg	E
B_s	Facteur de biodisponibilité relative du polluant dans le sol (par rapport à la biodisponibilité du polluant dans la matrice ayant servi à élaborer la valeur toxicologique de référence)	-	-	E

Remarque : si Q_{s_p}, B_s et B_w peuvent être considérés comme constants au cours de la période d'exposition d_{exp}, la dose d'exposition moyenne par ingestion de sol sur cette période peut aussi s'écrire :

$$\overline{E_s}(d_{\exp}) = \frac{\overline{C_{s,ing}}(d_{\exp}) \times Q_{s_p} \times B_s}{B_w} \qquad \text{Équation 2.2.4}$$

avec $\overline{C_{s,ing}}(d_{\exp})$: concentration moyenne de polluant dans le sol ingéré (cf. section 1.1.2.5) et dans la fraction de sol des poussières ingérées pendant la période d_{exp}.

2.3. EXPOSITION PAR INGESTION D'ALIMENTS

2.3.1. CALCUL DES CONCENTRATIONS DANS LES PRODUITS D'ORIGINE VEGETALE ET ANIMALE CONSOMMES PAR L'HOMME

1. Au sein d'une exploitation agricole, les produits d'origine animale consommés proviennent des différents individus composant un troupeau. Ces différents individus peuvent avoir été exposés sur des périodes différentes à partir de concentrations dans les milieux différentes. En fonction des besoins de l'étude, l'évaluateur peut être amené à estimer à un instant donné, la concentration moyenne ou maximale dans les matrices animales au sein du troupeau.

2. Les méthodes de calcul présentées dans les sections 1.6 et 1.7 correspondent aux concentrations dans les produits avant préparation. La préparation des aliments à partir de produits bruts peut, selon les cas, réduire ou augmenter la concentration en polluant du produit consommé par rapport au produit brut.

   Ainsi, le lavage et le pelage tendent à réduire la concentration de polluant dans les produits. Dans ce cas, un « facteur de décontamination » ($f_{déc}$) peut être utilisé pour tenir compte de cette réduction de concentration dans le produit effectivement consommé (C_{prod_cons}) par rapport à la concentration dans le produit brut (C_{brut}).

   $$C_{prod_cons} = C_{brut} \times f_{déc}$$ Équation 2.3.1

   $f_{déc}$ est compris entre 0 et 1. Très souvent, une approche conservatoire est retenue et $f_{déc}$ est supposé égal à 1.

   A l'inverse, certains produits alimentaires peuvent être élaborés par concentration d'un produit de base.

   Par exemple, le fromage ou beurre élaboré à partir du lait présente une concentration en lipides beaucoup plus importante que ce dernier. Dans le cas de polluants très lipophiles, la concentration de polluant dans le fromage ou le beurre sera beaucoup plus élevée que celle du lait. Pour ces polluants, la dose d'exposition liée aux produits lactés devrait être estimée :

   - soit à partir de la concentration de polluant dans la matière grasse et de la somme des quantités de lipides consommés par le biais des différents produits lactés,
   - soit à partir de la teneur en polluant des différents produits lactés par les quantités consommées exprimées en poids frais pour chaque de ces produits. Dans ce cas, la concentration de polluant dans le produit lacté considéré peut être estimée à partir de celle du lait et du rapport de matières grasses entre les deux produits.

   $$C_{prod_lacté} = C_{lait} \times \frac{t_{lip_prod_lacté}}{t_{lip_lait}}$$ Équation 2.3.2

avec $C_{prod_lacté}$: concentration du polluant lipophile dans le produit lacté, exprimée en poids frais,

C_{lait} : concentration du polluant lipophile dans le lait, exprimée en poids frais,

$t_{lip_prod_lacté}$: teneur en lipides dans le produit lacté,

t_{lip_lait} : teneur en lipides dans le lait.

2.3.2. CALCUL DE LA DOSE D'EXPOSITION LIEE A L'INGESTION D'ALIMENTS

Pour évaluer les risques dus à la contamination du site, seule la fraction des aliments issue de la zone impactée par le site étudié doit être prise en compte.

La dose d'exposition par ingestion d'aliments (y compris l'eau si la ressource en eau utilisée pour la consommation humaine est impactée par la contamination du site étudiée) est donnée par :

$$E_{prod_cons} = \frac{\sum_j Q_{prod_cons,j} \times C_{prod_cons,j} \times f_{prod_cons_exp,j}}{B_w}$$ Equation 2.3.3

avec $Q_{prod_cons,j}$: quantité de produit alimentaire j consommée par la cible,

$C_{prod_cons,j}$: concentration de polluant dans l'aliment j,

$f_{prod_cons_exp,j}$: fraction de la quantité d'aliment j consommée et exposée à la contamination du site,

B_w : masse corporelle de la cible.

Remarque :

La dose d'exposition liée à l'ingestion des produits alimentaires impactés par le site est exprimée en fonction des quantités d'aliments ingérées. Il convient de souligner qu'en fonction des études, les protocoles utilisés pour estimer les quantités d'aliments consommées par les individus varient. Dans certains cas, il peut s'agir d'estimations basées sur les achats. Les quantités réellement ingérées étant inférieures, un facteur de perte supplémentaire peut dans ce cas être introduit.

Sur la période d'exposition d_{exp} allant de T_1 à T_2, la dose d'exposition moyenne par ingestion d'aliments est calculée comme la moyenne des doses de polluant ingérées à partir des aliments de T_1 à T_2. Si d_{exp} est discrétisée en n sous-périodes de durée Δt_i pour lesquelles la dose d'exposition $E_{prod_cons}(t_i)$ peut être considérée comme constante, on peut écrire :

$$\overline{E_{prod_cons}}(d_{\exp}) = \frac{\sum_{i=1}^{n} E_{prod_cons}(t_i) \times \Delta t_i}{T_2 - T_1}$$ Equation 2.3.4

avec i : numéro d'itération (numéro de la sous-période considérée) entre 1 et n,

et $\sum_{i=1}^{n} \Delta t_i = T_2 - T_1$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\overline{E_{prod_cons}}(d_{\exp})$	Dose d'exposition moyenne par ingestion d'aliments sur la période d'exposition d_{exp}	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
$E_{prod_cons}(t_i)$	Dose d'exposition par ingestion d'aliments au temps t_i	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
Δt_i	Durée pendant laquelle la dose d'exposition est égale à $E_{prod_cons}(t_i)$	T	j	E
$Q_{prod_cons,j}$	Quantité de produit alimentaire j consommée par la cible	$M.T^{-1}$	$kg.j^{-1}$	E
$C_{prod_cons,j}$	Concentration de polluant dans l'aliment j	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
$f_{prod_cons_exp,j}$	Fraction de la quantité d'aliment j consommée et exposée à la contamination du site	-	-	E
d_{exp}	Durée de la période d'exposition considérée ($d_{exp}=T_2-T_1$)	T	j	C ou E
T_1	Début de la période d'exposition	T	j	E
T_2	Fin de la période d'exposition	T	j	E
B_w	Masse corporelle de la cible	M	kg	E

Remarque : Si $Q_{prod_cons,j}$, $f_{prod_cons_exp,j}$ et B_w peuvent être considérés comme constants au cours de la période d'exposition d_{exp}, la dose d'exposition moyenne par ingestion d'aliments d'origine végétale et animale sur cette période peut aussi s'écrire :

$$\overline{E_{prod_cons}}(d_{\exp}) = \frac{\sum_{j} Q_{prod_cons,j} \times \overline{C_{prod_cons,j}}(d_{\exp}) \times f_{prod_cons_\exp,j}}{B_w}$$ Équation 2.3.5

avec $Q_{prod_cons,j}$: quantité de produit alimentaire j consommée,

$\overline{C_{prod_cons,j}}(d_{\exp})$: concentration moyenne de polluant dans l'aliment j pendant la période d_{exp} (dans le cas des végétaux, les concentrations à prendre en compte restent bien sûr les concentration après récolte).

2.4. EXPOSITION DU NOURRISSON PAR INGESTION DE LAIT MATERNEL

L'exposition du nourrisson est estimée à partir du niveau de contamination du lait maternel.

2.4.1. CONCENTRATION DANS LE LAIT MATERNEL

De nombreux polluants ont été retrouvés dans le lait maternel (US EPA, 1998) :

- des polluants très lipophiles (comme les polychlorodibenzodioxines et les polychlorodibenzofurannes,…) qui sont presque exclusivement dans la phase lipidique du lait,
- des substances ayant des coefficients octanol-eau plus faibles (comme les phénols, certains aldéhydes,…), présentes à la fois dans la phase lipidique et la phase aqueuse du lait,
- des composés inorganiques et des substances organo-métalliques. Les composés métalliques sont généralement présents dans la phase aqueuse et liés à des protéines, à des peptides ou à des acides animés. Certaines substances organo-métalliques et certains métalloïdes peuvent être présents à la fois dans la phase lipidique et dans la phase aqueuse.

Comme pour les produits d'origine animale, la modélisation de la concentration des polluants dans le lait maternel sera présentée à partir d'approches simples. Les modèles multicompartimentaux tenant compte de la distribution et des transferts de polluants entre les différents tissus (modèles pharmacocinétiques) dépassent le cadre de ce document. Ces modèles permettent d'estimer la concentration de polluants dans les différents tissus de la mère et dans le lait au cours du temps. Mais, les compartiments à prendre en compte dépendent de la substance étudiée et de nombreux paramètres spécifiques à chaque substance sont nécessaires. Pour plus d'informations sur ces modèles, le lecteur pourra, par exemple, se reporter à la publication de Verner et al. (2009) ayant produit et testé un modèle pharmacocinétique pour les polluants organiques persistants.

2.4.1.1. ESTIMATION BASEE SUR LE COEFFICIENT DE TRANSFERT

Comme pour les produits d'origine animale, la concentration de polluant dans le lait est parfois estimée à partir de l'exposition de la mère et d'un facteur de biotransfert :

$$C_{lait_mat} = D_m \times B_{T_\text{lait_mat}}$$ Équation 2.4.1

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
C_{lait_mat}	Concentration de polluant dans le lait maternel	M. M^{-1}	$mg.kg^{-1}$	C ou E
D_m	Quantité de polluant à laquelle la mère est exposée par jour (dose d'exposition journalière externe multipliée par la masse corporelle de la mère)	M. T^{-1}	mg. j^{-1}	C ou E
$B_{T\ lait_mat}$	Facteur de biotransfert du polluant vers le lait maternel	T. M^{-1} de lait	j. kg^{-1} de lait	C ou E

Remarque : dans le cas de substances très lipophiles, le facteur de biotransfert peut se rapporter à la fraction lipidique du lait et la concentration dans le lait peut être calculée en multipliant la concentration de polluant dans la phase lipidique par le taux de matière grasse du lait maternel.

2.4.1.2. ESTIMATION BASEE SUR LE TAUX DE PERTE DU POLLUANT

Selon les données disponibles, deux approches peuvent être utilisées pour estimer les concentrations dans le lait maternel en fonction du temps.

La première est identique à celle utilisée pour le lait et les œufs produits par les animaux. Elle suppose de connaître le taux d'élimination du polluant ou de transfert vers le lait maternel. La seconde, issue l'US EPA (1998), consiste à calculer la concentration dans la phase lipidique du lait d'une part et la concentration dans la phase aqueuse d'autre part. Cette approche suppose que la concentration de polluant dans la fraction lipidique du lait soit égale à la concentration de polluant dans les graisses maternelles.

2.4.1.2.1. CAS OU LA CONSTANTE D'ELIMINATION DANS LE LAIT MATERNEL EST CONNUE

Le bilan massique du polluant chez la mère est décrit par l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dm_m}{dt} = t_{abs,m} \times D_m - k_p \times m_m \qquad \text{Équation 2.4.2}$$

avec m_m : masse de polluant dans l'organisme maternel,

D_m : quantité de polluant à laquelle la mère est exposée par jour (dose d'exposition journalière externe multipliée par la masse corporelle de la mère),

k_p : facteur de perte à partir de l'organisme maternel (dégradation ou/et évacuation),

$t_{abs,m}$: taux d'absorption du polluant par la mère.

1. **Si $t_{abs,m}$, D_m et k_p sont constants,** l'intégration de cette équation conduit à écrire :

$$m_m(t) = \frac{t_{abs,m} \times D_m}{k_p} \times \left(1 - e^{-k_p \times t}\right) + m_m(0) \times e^{-k_p \times t} \qquad \text{Équation 2.4.3}$$

avec $m_m(0)$: masse de polluant dans l'organisme maternel à t=0.

2. Si $t_{abs,m}$, D_m ou k_p varient au cours du temps, m_m doit être intégrée sur des intervalles de temps (Δt) où ces paramètres peuvent être considérés comme constants :

d'où $$m_m = \frac{t_{abs,m} \times D_m}{k_p} \times \left(1 - e^{-k_p \times \Delta t}\right) + m_m(t - \Delta t) \times e^{-k_p \times \Delta t} \qquad \text{Équation 2.4.4}$$

Au cours de la vie de la femme, le facteur de perte (k_p) varie.

- **Avant la période d'allaitement ($t < t_{pré_all}$),**

$$k_p = k_{pré_all}$$

Par conséquent, **si $t_{abs,m}$, D_m et k_p sont constants avant l'allaitement,** la masse de polluant dans l'organisme maternel, au moment où commence la période d'allaitement, est égale à :

$$m_m(t_{pré_all}) = \frac{t_{abs,m} \times D_m}{k_{pré_all}} \times \left(1 - e^{-k_{pré_all} \times t_{pré_all}}\right) + m_m(0) \times e^{-k_{pré_all} \times t_{pre_all}} \qquad \text{Équation 2.4.5}$$

avec $t_{pré_all}$: date du début de l'allaitement,

et en prenant une valeur suffisamment grande pour $t_{pré_all}$, on peut écrire :

$$m_m(t_{pré_all}) \approx \frac{t_{abs,m} \times D_m}{k_{pré_all}} \times \left(1 - e^{-k_{pré_all} \times t_{pre_all}}\right) \qquad \text{Équation 2.4.6}$$

- **Au cours de la période d'allaitement,** l'excrétion de lait se traduit par une perte de polluant complémentaire.

Le facteur de perte (k_p) est alors égal à :

$$k_p = k_{pré_all} + k_{all} \qquad \text{Équation 2.4.7}$$

avec k_{all} : facteur d'élimination du polluant vers le lait maternel.

Pour $t > t_{pré_all}$, **si $t_{abs,m}$, D_m, $k_{pré_all}$ et k_{all} sont constants** on a :

$$m_m(t) = m_m(t_{pré_all}) \times e^{-(k_{pré_all} + k_{all}) \times (t - t_{pré_all})} + \frac{t_{abs,m} \times D_m}{k_{pré_all} + k_{all}} \times \left(1 - e^{-(k_{pré_all} + k_{all}) \times (t - t_{pré_all})}\right)$$

Équation 2.4.8

et **si la quantité de polluant à laquelle la mère est exposée par jour est la même avant et après le début de l'allaitement,** on peut écrire :

$$m_m(t) = \frac{t_{abs,m} \times D_m}{k_{pré_all}} \times \left(1 - e^{-k_{pré_all} \times t_{pré_all}}\right) \times e^{-(k_{pré_all} + k_{all}) \times (t - t_{pré_all})} + \frac{t_{abs,m} \times D_m}{k_{pré_all} + k_{all}} \times \left(1 - e^{-(k_{pré_all} + k_{all}) \times (t - t_{pré_all})}\right) \qquad \text{Équation 2.4.9}$$

La concentration dans le lait maternel au temps t ($> t_{pré_all}$), peut être calculée à partir de l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dm_{lait_mat}}{dt} = k_{all} \times m_m \qquad \text{Équation 2.4.10}$$

avec m_{lait_mat} : masse de polluant éliminée par le lait maternel,

soit $C_{lait_mat} \times \frac{dM_{lait_mat}}{dt} + M_{lait_mat} \times \frac{dC_{lait_mat}}{dt} = k_{all} \times m_m$ Équation 2.4.11

avec M_{lait_mat}: masse de lait produit par la mère à partir l'instant $t_{pré_all}$.

Si sur la période ΔT considérée, les variations de concentration dans le lait sont négligeables, on peut écrire :

et $C_{lait_mat}(\Delta T) = \frac{k_{all} \times m_m \times \Delta T}{M_{lait_mat}(t) - M_{lait_mat}(t - \Delta T)}$ Équation 2.4.12

Si ΔT est égal à un jour et si la quantité de lait produite par jour par la mère est égale à I_{nour_lait}, la concentration moyenne au jour j dans le lait maternel est donnée par :

$$C_{lait_mat,moy_j} = \frac{k_{all} \times m_m(t)}{I_{nour_lait}}$$ Équation 2.4.13

Si $t_{abs,m}$, D_m, $k_{pré_all}$ et k_{all} sont constants, on peut écrire :

$$C_{lait_mat,moy_j} = \frac{k_{all} \times t_{abs,m} \times D_m}{I_{nour_lait} \times k_{pré_all}} \times \left(1 - e^{-k_{pré_all} \times t_{pré_all}}\right) \times e^{-(k_{pré_all} + k_{all}) \times (t - t_{pré_all})} + \frac{k_{all} \times t_{abs,m} \times D_m}{I_{nour_lait} \times (k_{pré_all} + k_{all})} \times \left(1 - e^{-(k_{pré_all} + k_{all}) \times (t - t_{pré_all})}\right)$$

Équation 2.4.14

La concentration moyenne de polluant dans le lait maternel durant la période d'allaitement (T_{all}) est obtenue en intégrant l'équation 2.4.14 sur toute la période d'allaitement :

$$\overline{C}_{lait_mat} = \frac{k_{all} \times t_{abs,m} \times D_m}{I_{nour_lait} \times (k_{pré_all} + k_{all})} \times \left[\frac{1}{T_{all}} \times \left(\frac{1 - e^{-k_{pré_all} \times t_{pré_all}}}{k_{pré_all}} - \frac{1}{k_{pré_all} + k_{all}} \right) \times \left(1 - e^{-(k_{pré_all} + k_{all}) \times T_{all}}\right) + 1 \right]$$

Équation 2.4.15

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{lait_mat_moy_j}$	Concentration moyenne de polluant dans le lait maternel au jour j considéré	M. M^{-1}	mg. kg^{-1}	C ou E
m_m (t)	Masse de polluant dans l'organisme maternel au jour j considéré	M	mg	C
$\overline{C}_{lait_mat}$	Concentration moyenne de polluant dans le lait maternel pendant la durée de l'allaitement (T_{all})	M. M^{-1}	mg. kg^{-1}	C ou E
I_{nour_lait}	Quantité de lait maternel ingérée par le nourrisson	M. T^{-1}	kg. j^{-1}	C ou E
$\overline{I_{nour_lait}}$	Quantité moyenne de lait maternel ingérée par le nourrisson pendant la durée de l'allaitement (T_{all})	M. T^{-1}	kg. j^{-1}	C ou E
D_m	Quantité de polluant à laquelle la mère est exposée par jour (dose d'exposition journalière externe multipliée par la masse corporelle de la mère)	$M.T^{-1}$	$mg.j^{-1}$	C ou E
$t_{abs,m}$	Taux d'absorption du polluant par la mère	-	-	E
$k_{pré_all}$	Facteur de perte du polluant à partir de l'organisme maternel hors allaitement	T^{-1}	j^{-1}	E
k_{all}	Facteur d'élimination du polluant vers le lait maternel	T^{-1}	j^{-1}	E
T_{all}	Durée de l'allaitement	T	j	E

Remarques :

1. Cette approche nécessite de disposer de données préalables sur le facteur d'élimination du polluant étudié vers le lait maternel.

2. La concentration de polluant dans le lait maternel au jour j (C_{lait_mat,moy_j}) peut être calculée selon la même approche que ci-dessus, avec des paramètres (D_m, k_{all}) variant au cours du temps. La concentration moyenne durant la période d'allaitement est alors obtenue en intégrant C_{lait_mat,moy_j} sur des périodes de temps où ces paramètres peuvent être considérés comme constants.

2.4.1.2.2. ESTIMATION SELON L'APPROCHE DE L'US EPA

Cette approche, utilisée par Smith et al. (1987) et Sullivan et al. (1991) pour les dioxines et les furannes, substances presque exclusivement présentes dans les graisses, repose sur **l'hypothèse d'égalité entre la concentration de polluant dans la phase lipidique du lait maternel et celle des graisses maternelles.** Le taux de transfert du polluant vers le lait maternel est, ici, défini en fonction de la quantité de lait excrétée.

A partir de quelques modifications, l'US EPA (1998) a étendu cette approche aux autres substances.

La concentration dans le lait maternel (C_{lait_mat}) est alors calculée, comme suit :

$$C_{lait_mat} = f_{lip_lait_mat} \times C_{lip_lait_mat} + (1 - f_{lip_lait_mat}) \times C_{aq_lait_mat}$$ Équation 2.4.16

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
C_{lait_mat}	Concentration de polluant dans le lait maternel	M. M^{-1}	mg. kg^{-1}	C ou E
$C_{aq_lait_mat}$	Concentration de polluant dans la phase aqueuse du lait maternel	M. M^{-1}	mg. kg^{-1}	C ou E
$C_{lip_lait_mat}$	Concentration de polluant dans la phase lipidique du lait maternel	M. M^{-1}	mg. kg^{-1}	C ou E
$f_{lip_lait_mat}$	Fraction massique des lipides dans le lait maternel	-	-	E

Dans le cas de substances très lipophiles, la concentration de polluant dans la fraction aqueuse du lait est négligeable et à l'inverse, pour les sels et les métaux, la concentration de polluant dans la phase lipidique du lait peut être ignorée.

2.4.1.2.2.1. CONCENTRATION DANS LA FRACTION LIPIDIQUE DU LAIT MATERNEL

On peut écrire :

$$C_{m_lip} = \frac{f_{lip} \times C_m}{f_{m_lip}} \qquad \text{Équation 2.4.17}$$

avec C_{m_lip} : concentration de polluant dans la phase lipidique de l'organisme maternel,

C_m : concentration de polluant dans l'organisme maternel,

f_{m_lip} : fraction massique des lipides dans le corps maternel,

f_{lip} : fraction massique du polluant dans les lipides de l'organisme maternel.

f_{lip} est généralement définie de manière empirique par des études d'absorption et de distribution. Pour les substances lipophiles, f_{m_lip} peut être supérieure à 90%.

D'après l'équation 2.4.9 (qui suppose que **$t_{abs,m}$, D_m, $k_{pré_all}$ et k_{all} sont constants durant la période d'exposition de la mère),** la concentration de polluant dans l'organisme maternel (C_m), après le début de l'allaitement est donnée par :

$$C_m(t) = \frac{t_{abs,m} \times D_m}{k_{pre_all} \times B_{w,m}} \left(1 - e^{-k_{pré_all} \times t_{pré_all}}\right) \times e^{-(k_{pré_all} + k_{all}) \times (t - t_{pré_all})} + \frac{t_{abs,m} \times D_m}{(k_{pré_all} + k_{all}) \times B_{w,m}} \left(1 - e^{-(k_{pré_all} + k_{all}) \times (t - t_{pré_all})}\right) \qquad \text{Équation 2.4.18}$$

avec D_m : quantité de polluant à laquelle la mère est exposée par jour,

k_{all} : facteur d'élimination du polluant vers le lait maternel,

$k_{pré_all}$: facteur de perte du polluant, hors allaitement,

$t_{abs,m}$: taux d'absorption du polluant par la mère,

$t_{pré_all}$: date du début de l'allaitement,

$B_{w,m}$: masse corporelle de la mère.

La concentration dans les lipides du lait maternel ($C_{lip_lait_mat}$) étant supposée égale à la concentration dans les lipides de l'organisme maternel (C_{m_lip}), l'équation ci-dessus permet d'estimer $C_{lip_lait_mat}$. On a :

$$C_{lip_lait_mat}(t) = \frac{f_{lip}}{f_{m_lip}} \times \frac{t_{abs,m} \times D_m}{B_{w,m}} \times \left[\begin{array}{l} \dfrac{1 - e^{-k_{pré_all} \times t_{pré_all}}}{k_{pre_all}} \times e^{-(k_{pré_all} + k_{all}) \times (t - t_{pré_all})} \\ + \dfrac{1 - e^{-(k_{pré_all} + k_{all}) \times (t - t_{pré_all})}}{k_{pré_all} + k_{all}} \end{array} \right]$$ Équation 2.4.19

Remarque : **si $t_{abs,m}$, D_m, $k_{pré_all}$ ou k_{all} varient,** la concentration dans la matière grasse du lait peut être calculée en fonction du temps en intégrant l'équation 2.4.2 sur des pas de temps où ces variables peuvent être considérées comme constantes. Dans ce cas, l'hypothèse complémentaire d'un équilibre rapide entre la concentration de polluant dans les graisses du lait et les lipides de la mère doit être faite.

Pour avoir la concentration moyenne dans les lipides du lait pendant la période d'allaitement, il faut intégrer l'équation 2.4.19 sur cette période, soit :

$$\overline{C}_{lip_lait_mat} = \frac{1}{T_{all}} \times \int_{t_{pré_all}}^{T_{all} + t_{pré_all}} C_{lip_lait_mat}(t) dt$$ Équation 2.4.20

avec T_{all} : durée de la période d'allaitement

L'US EPA (1998) donne l'expression suivante :

$$\overline{C}_{lip_lait_mat} = \frac{t_{abs,m} \times D_m \times f_{lip}}{k_{pre_all} \times B_{w,m} \times f_{m_lip}} \times \left[\begin{array}{l} \dfrac{1 - e^{-(k_{pré_all} + k_{all}) \times T_{all}}}{T_{all} \times (k_{pré_all} + k_{all})} \times \left(1 - \dfrac{k_{pré_all}}{k_{pré_all} + k_{all}} - e^{-k_{pré_all} \times t_{pré_all}} \right) \\ + \dfrac{k_{pré_all}}{k_{pré_all} + k_{all}} \end{array} \right]$$ Équation 2.4.21

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{lip_lait_max}(t)$	Concentration de polluant dans les lipides du lait maternel au temps t ($t > t_{pré_all}$)	M. M^{-1}	mg. kg^{-1}	C ou E
$\overline{C}_{lip_lait_mat}$	Concentration moyenne de polluant dans les lipides du lait maternel pendant la durée de l'allaitement (T_{all})	M. M^{-1}	mg. kg^{-1}	C ou E
f_{lip}	Fraction massique du polluant dans les lipides de l'organisme maternel	-	-	E
f_{m_lip}	Fraction massique des lipides dans le corps maternel	-	-	E
D_m	Quantité de polluant à laquelle la mère est exposée par jour (dose d'exposition journalière externe multipliée par la masse corporelle de la mère)	$M.T^{-1}$	$mg.j^{-1}$	C ou E
$B_{w,m}$	Masse corporelle de la mère	M	kg	E
$t_{abs,m}$	Taux d'absorption du polluant par la mère	-	-	E
$k_{pré_all}$	Facteur de perte du polluant à partir de l'organisme maternel, hors allaitement	T^{-1}	j^{-1}	E
k_{all}	Facteur de d'élimination du polluant vers le lait maternel	T^{-1}	j^{-1}	E
T_{all}	Durée de l'allaitement	T	j	E
$t_{pré_all}$	Durée d'exposition considérée avant l'allaitement	T	j	E

L'expression 2.4.21 est en fait une approximation de l'équation 2.4.20. Cette équation suppose en effet que la masse corporelle de la mère ($B_{w,m}$), la fraction de polluant stockée dans les lipides de la mère (f_{lip}) et la fraction massique des lipides dans le corps maternel (f_{m_lip}) soient constants (en plus des paramètres $t_{abs,m}$, D_m, $k_{pré_all}$ et k_{all}) durant la période d'exposition de la mère. Or, ces trois paramètres sont susceptibles d'évoluer durant cette période. Si les aliments ingérés par la mère constituent le principal vecteur de son exposition et si sa dose d'exposition reste constante, f_{m_lip} doit, selon toute vraisemblance, diminuer durant la période d'allaitement entraînant une augmentation de la concentration de polluant dans la phase lipidique de l'organisme maternel.

Une approche simplifiée présentée également par l'US EPA (et reprise de Smith, 1987) consiste à estimer C_m et C_{m_lip} **à l'état stationnaire**, sans prise en compte des pertes de polluant liées à l'allaitement.

D'après l'équation 2.4.2, on peut alors écrire :

$$m_m = \frac{t_{abs,m} \times D_m}{k_{pré_all}} \qquad \text{Équation 2.4.22}$$

et $$C_{lip_lait_mat} = \frac{t_{abs,m} \times D_m}{k_{pré_all} \times B_{w,m}} \times \frac{f_{lip}}{f_{m_lip}} \qquad \text{Équation 2.4.23}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{lip_lait_mat}$	Concentration de polluant dans les lipides du lait maternel	M. M^{-1}	mg. kg^{-1}	C ou E
f_{lip}	Fraction massique du polluant dans les lipides de l'organisme maternel	-	-	E
f_{m_lip}	Fraction massique des lipides dans le corps maternel	-	-	E
D_m	Quantité de polluant à laquelle la mère est exposée par jour (dose d'exposition journalière externe multipliée par la masse corporelle de la mère)	$M.T^{-1}$	$mg.j^{-1}$	C ou E
$B_{w,m}$	Masse corporelle de la mère	M	kg	E
$t_{abs,m}$	Taux d'absorption du polluant par la mère	-	-	E
$k_{pré_all}$	Facteur de perte du polluant à partir de l'organisme maternel, hors allaitement	T^{-1}	j^{-1}	E

Remarque : le fait de ne pas prendre en compte la constante d'élimination par l'excrétion de lait (k_{all}) et surtout de considérer l'état stationnaire atteint tend à surestimer les concentrations dans le lait maternel. Cette surestimation est d'autant plus forte que la demie vie du polluant dans l'organisme est longue et que la période d'exposition avant allaitement est courte. L'US EPA montre que si l'exposition de la mère commence au moment de l'allaitement et que l'allaitement dure 6 mois, l'expression 2.4.23 donne, pour les dioxines, une concentration dans la fraction lipidique du lait 18 fois supérieure à celle obtenue avec l'expression 2.4.21. En revanche, la surestimation obtenue avec l'expression 2.4.23 n'est plus que d'un facteur 3 par rapport à la relation 2.4.21, quand la durée d'exposition de la mère est de 5 ans.

2.4.1.2.2.2. ESTIMATION DU FACTEUR D'ELIMINATION

k_{all} peut être défini à partir des équations suivantes :

$$\frac{dm_m}{dt} = t_{abs,m} \times D_m - k_{pré_all} \times m_m - k_{all} \times m_m \qquad \text{Équation 2.4.24}$$

avec m_m : masse de polluant dans l'organisme maternel,

et $$\frac{dm_m}{dt} = t_{abs,m} \times D_m - k_{pré_all} \times m_m - I_{nour_lait} \times C_{lait_mat} \qquad \text{Équation 2.4.25}$$

avec I_{nour_lait} : quantité de lait ingérée par jour par le nourrisson,

d'où $$k_{all} = \frac{I_{nour_lait} \times C_{lait_mat}}{m_m} \qquad \text{Équation 2.4.26}$$

Par hypothèse,

$$\frac{C_{lait_mat}}{C_m} = \frac{f_{lip} \times f_{lip_lait_mat}}{f_{m_lip}} \qquad \text{Équation 2.4.27}$$

avec $f_{lip_lait_mat}$: fraction massique des lipides dans le lait maternel,

d'où $$k_{all} = \frac{I_{nour_lait}}{B_{w,m}} \times \frac{f_{lip} \times f_{lip_lait_mat}}{f_{m_lip}}$$ Équation 2.4.28

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
k_{all}	Facteur d'élimination du polluant vers le lait maternel	T^{-1}	j^{-1}	E
$B_{w,m}$	Masse corporelle de la mère	M	kg	E
f_{lip}	Fraction massique du polluant dans les lipides de l'organisme maternel	-	-	E
f_{m_lip}	Fraction massique des lipides dans le corps maternel	-	-	E
$f_{lip_lait_mat}$	Fraction massique des lipides dans le lait maternel	-	-	E
I_{nour_lait}	Quantité de lait ingérée par jour par le nourrisson	$M.T^{-1}$	$kg.j^{-1}$	E

2.4.1.2.2.3. CONCENTRATION DANS LA FRACTION AQUEUSE DU LAIT

L'approche développée par l'US EPA (1998) suppose que la concentration dans la phase aqueuse du lait maternel soit proportionnelle à la concentration dans le plasma maternel. Les polluants présents dans les globules rouges sont considérés comme non disponibles pour le transfert vers le lait maternel. La concentration dans la phase aqueuse du lait est donc donnée par :

$$C_{aq_lait_mat} = P_{lm_pl} \times C_{m_pl}$$ Équation 2.4.29

avec $C_{aq_lait_mat}$: concentration dans la phase aqueuse du lait,

P_{lm_pl} : coefficient de partition du polluant entre le plasma maternel et la phase aqueuse du lait,

C_{m_pl} : concentration de polluant dans le plasma maternel,

et $$C_{m_pl} = f_{pl} \times \frac{C_m}{f_{m_pl}}$$ Équation 2.4.30

avec C_m : concentration de polluant dans l'organisme maternel,

f_{pl} : fraction massique de polluant dans le plasma,

f_{m_pl} : fraction massique du plasma dans le corps maternel.

Comme f_{lip}, f_{pl} peut varier au cours du temps. Compte-tenu de la difficulté à définir f_{pl} en fonction du temps, l'US EPA estime la concentration dans la phase aqueuse du lait ($C_{aq_lait_mat}$) **à l'état stationnaire**, à partir de la concentration de polluant dans l'organisme maternel (C_m) à l'état stationnaire et sans prise en compte de pertes liées à l'allaitement, d'où :

$$C_{aq_lait_mat} = \frac{t_{abs,m} \times D_m \times P_{lm_pl}}{k_{pré_all} \times B_{w,m}} \times \frac{f_{pl}}{f_{m_pl}}$$ Équation 2.4.31

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$C_{aq_lait_mat}$	Concentration de polluant dans la phase aqueuse du lait	M. M^{-1}	mg. kg^{-1}	C ou E
D_m	Quantité de polluant à laquelle la mère est exposée par jour (dose d'exposition journalière externe multipliée par la masse corporelle de la mère)	$M.T^{-1}$	$mg.j^{-1}$	C ou E
$t_{abs,m}$	Taux d'absorption du polluant par la mère	-	-	E
P_{lm_pl}	Coefficient de partition du polluant entre le plasma maternel et la phase aqueuse du lait	-	-	E
$k_{pré_all}$	Taux de perte du polluant à partir de l'organisme maternel hors allaitement	T^{-1}	j^{-1}	E
$B_{w,m}$	Masse corporelle de la mère	M	kg	E
f_{pl}	Fraction massique de polluant dans le plasma	-	-	E
f_{m_pl}	Fraction massique du plasma dans le corps maternel	-	-	E

La fraction massique de polluant dans le plasma (f_{pl}) en condition stationnaire, peut être estimée à partir de la fraction massique du polluant dans le sang (données pouvant être obtenues lors d'études d'absorption et de distribution des polluants dans l'organisme).

En effet, on peut écrire :

$$f_{pl} = f_{sang} - f_{gl}$$ Équation 2.4.32

avec f_{sang} : fraction massique de polluant présent dans le sang,

f_{gl} : fraction massique de polluant présent dans les globules rouges.

Si P_{gl_pl} est le coefficient de partage du polluant entre les globules rouges et le plasma (ratio des concentrations massiques du polluant entre les globules rouges et le plasma),

alors $$f_{pl} = f_{sang} - \frac{P_{gl_pl} \times f_{pl} \times (1 - f_{sang_pl})}{f_{sang_pl}}$$ Équation 2.4.33

et $$f_{pl} = \frac{f_{sang} \times f_{sang_pl}}{f_{sang_pl} + P_{gl_pl} \times (1 - f_{sang_pl})}$$ Équation 2.4.34

avec f_{sang_pl} : fraction de plasma dans le sang.

Remarque : une valeur spécifique au polluant étudié doit être attribuée à P_{lm_pl}. et P_{gl_pl}. D'après l'US EPA, une valeur par défaut de 1 peut être utilisée pour ces deux paramètres pour la plupart des polluants.

2.4.1.3. COMMENTAIRES SUR LE CALCUL DE LA CONCENTRATION DANS LE LAIT MATERNEL

L'incertitude sur les modèles développés ci-dessus peut être importante. Parmi les sources d'incertitudes, il faut citer :

- celle liée à l'hypothèse de proportionnalité de la concentration dans le lait par rapport à la dose d'exposition de la mère. Si à de faibles doses (doses pouvant être rencontrées en conditions environnementales), la TCDD et d'autres congénères des dioxines ont montré chez l'animal un comportement pharmacocinétique linéaire, en laboratoire, à de plus fortes doses (doses toxiques), ces composés ont montré un comportement dose dépendant (Roth et al., 1984, cités par US EPA, 1998). L'erreur liée à l'utilisation de modèles mathématiques linéaires n'est pas connue. L'US EPA recommande de ne pas utiliser ce type de modèles (et de recourir à des modèles pharmacocinétiques) dans le cas de polluant comme le plomb, qui s'accumule dans les os et dont la distribution dans l'organisme est trop complexe pour être représentée par ce type d'approche ;
- l'hypothèse de paramètres constants pour établir bon nombre des équations ci-dessus. Ainsi, la quantité de polluant à laquelle la mère est exposée (D_m) varie avec les différences de régime alimentaire et d'activités, généralement observées, entre les périodes situées avant et après la grossesse et pendant la période d'allaitement ;
- l'hypothèse d'égalité entre la concentration de polluant dans la phase lipidique du lait maternel et celle des graisses maternelles dans l'approche donnée par l'US EPA. L'US EPA indique que les graisses du lait maternel, synthétisées par les glandes mammaires, peuvent présenter des concentrations en polluant plus faibles que celles des graisses stockées dans l'organisme maternel. Toutefois, il considère cette hypothèse raisonnable pour les substances très lipophiles en s'appuyant sur les résultats de Beck et al. (1994), qui ont montré des concentrations de polluants similaires dans les graisses du lait maternel et les tissus adipeux pour les polychlorodibenzodioxines et les polychlorodibenzofurannes ;
- l'hypothèse d'un établissement rapide de l'équilibre entre la concentration de polluant dans les lipides de la mère et les lipides du lait maternel, si certains des paramètres dont dépend la concentration de polluant dans l'organisme maternel sont considérés comme variables au cours du temps ;
- l'incertitude liée aux valeurs attribuées aux paramètres de ces équations, qui peut être importante.

A notre connaissance, les performances des équations décrites ci-dessus ont rarement été testées. Faute de données précises se rapportant à des sources de contamination particulières, les concentrations de fond en dioxines mesurées dans le lait maternel ont été comparées à celles prédites par ces modèles. En 1999, l'InVS (2000) a mesuré les concentrations de 17 congénères dans le lait maternel de femmes primipares, âgées de 20 à 35 ans. Les prélèvements effectués entre 4 et 8 semaines d'allaitement, montraient des concentrations comprises entre 6,5 et 34,5 pg TEQ (équivalent toxique)/g de matière grasse. Pour une exposition de fond de 1,31 pg TEQ/kg/j, telle qu'estimée en 2000 par l'AFSSA, l'équation 2.4.20 donne des concentrations en accord, comprises entre 14 et 21 pg/g. L'équation simplifiée sans prise en compte des pertes par allaitement (expression 2.4.6 divisée par la masse de lipides chez la mère) donne des résultats quasi-identiques. En revanche, l'estimation obtenue à partir d'un facteur de biotransfert (estimé à l'aide d'une relation de régression (relation de Travis et al, 1988, rapportée par l'US EPA) et du coefficient de partage octanol-eau) donne une concentration dans le lait 15 fois plus élevée. L'US EPA (1998), à partir de données américaines, a fait le même type de comparaison et a obtenu des résultats du même ordre. L'US EPA recommande de n'utiliser le modèle avec facteur de biotransfert qu'en l'absence des paramètres nécessaires pour utiliser les modèles cinétiques et pour des expositions maternelles de longues durées (la surestimation due à l'hypothèse de l'état stationnaire étant trop importante pour des expositions de courte durée).

2.4.2. DOSE D'EXPOSITION DU NOURRISSON PAR INGESTION DE LAIT MATERNEL

La dose d'exposition du nourrisson par ingestion de lait maternel est donnée par :

$$E_{lait_mat} = \frac{I_{nour_lait} \times C_{lait_mat}}{B_{w,nour}}$$ Équation 2.4.35

La dose d'exposition moyenne du nourrisson sur la période d'exposition d_{exp_nour} est donnée par :

$$\overline{E_{lait_mat}}(d_{\exp_nour}) = \frac{\sum_{i=1}^{n} E_{lait_mat}(t_i) \times \Delta t_i}{d_{\exp_nour}}$$ Équation 2.4.36

avec Δt_i : période pendant laquelle la dose d'exposition est égale à $E_{lait_mat}(t_i)$,

$$\sum_{i=1}^{n} \Delta t_i = T_2 - T_1$$

n : nombre de pas de temps,

i : numéro d'itération entre 1 et n.

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\overline{E_{lait_mat}}(d_{\exp_nour})$	Dose d'exposition moyenne ingérée par le nourrisson via le lait maternel sur la période d'exposition d_{exp_nour}	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
$E_{lait_mat}(t_i)$	Dose d'exposition ingérée par le nourrisson via le lait maternel au temps t_i	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
Δt_i	Durée pendant laquelle la dose d'exposition est égale à $E_{lait_mat}(t_i)$	T	j	E
d_{exp_nour}	Durée de la période d'exposition du nourrisson	T	j	C ou E
T_1	Début de la période d'exposition	T	j	E
T_2	Fin de la période d'exposition	T	j	E
$B_{w,nour}$	Masse corporelle du nourrisson	M	kg	E
I_{nour_lait}	Quantité de lait maternel ingérée par le nourrisson	$M.T^{-1}$	$kg.j^{-1}$	E
C_{lait_mat}	Concentration de polluant dans le lait maternel	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E

2.5. EXPOSITION PAR CONTACT CUTANE

Les expositions cutanées peuvent produire des effets systémiques après absorption ou des effets locaux, au niveau de la peau (réactions allergiques, cancer de la peau,…). La problématique des effets locaux suppose le calcul d'une dose d'exposition externe (*intake* en anglais). Ce point est traité dans la section 2.5.4.1. La prise en compte des effets systématiques suppose en revanche le calcul de la dose interne (*uptake* en anglais) et est l'objet essentiel des développements ci-dessous.

2.5.1. MODELISATION DE L'ABSORPTION CUTANEE : GENERALITES ET PRINCIPES

Une exposition par voie cutanée peut avoir lieu par contact avec le polluant :

- sous forme de phase pure,
- sous forme dissoute dans l'eau,
- adsorbée sur les particules du sol,
- sous forme gazeuse.

Dans le cas d'une contamination de type environnemental, l'absorption cutanée à partir de polluant sous forme gazeuse n'est pas prise en compte, car seuls les polluants présentant une pression de vapeur suffisamment élevée peuvent pénétrer dans la peau, et dans ce cas, l'exposition par voie respiratoire est toujours prépondérante (cela peut être différent en milieu de travail, lorsque les personnes exposées portent un masque respiratoire).

L'exposition d'individus à un polluant sous forme de phase pure ne correspond pas aux situations d'exposition chronique classiquement étudiées dans les évaluations de risques liés à la contamination d'un site ou aux émissions d'une installation classée pour la protection de l'environnement. Elle peut correspondre à une exposition aiguë, lors par exemple de travaux de dépollution. La dose absorbée peut dans ce cas être estimée à partir d'un taux d'absorption spécifique, comme pour l'exposition lors d'un contact avec un sol pollué (cf. section 2.5.3.1), mais avec un taux d'absorption se rapportant à la phase pure.

Les approches développées ci-dessous correspondent donc à des expositions par contact avec une eau contaminée (bain, baignade,…) ou un sol contaminé (dépôt de particules de sol sur les parties exposées du corps).

Les polluants peuvent être absorbés par la voie transépidermique (transcellulaire et intercellulaire) et par la voie pilosébacée. La seconde est souvent considérée comme négligeable par rapport à la première (Scheuplein et Blank, 1971, cités dans US EPA, 1992).

La peau est composée de deux couches :

- l'épiderme, couche non vascularisée d'environ 100 µm d'épaisseur,
- le derme, couche hautement vascularisée de 500 à 3000 µm d'épaisseur, où prennent naissance les pores et les poils.

La surface externe de l'épiderme est composée de cellules mortes, kératinisées et partiellement desséchées. Cette couche de 10 à 40 µm d'épaisseur s'appelle la couche cornée. Elle est constituée de protéines, de lipides, ainsi que d'eau, et est supposée représenter la principale barrière à l'absorption cutanée des polluants.

Une substance appliquée sur la peau pénètre dans la couche cornée par diffusion, mais une partie de la quantité appliquée peut s'évaporer, se lier de manière irréversible à la couche cornée ou être métabolisée.

Au-delà, des éléments définissant l'intensité du contact avec la peau (caractéristiques de la matrice d'apport, concentration de polluant dans la matrice, quantité de sol sur la peau, temps de contact), les facteurs influençant l'absorption cutanée sont ceux liés :

- aux propriétés physico-chimiques de la substance, en particulier :
    - le caractère lipophile : les substances lipophiles pénètrent mieux à travers la peau que les substances hydrophiles (pénétration maximum pour les substances ayant un log K_{ow} compris entre +1 et +2),
    - la structure ionique : les composés fortement ionisés diffusent très mal à travers la couche cornée,
    - la polarité : les substances apolaires pénètrent plus facilement que les substances polaires,
    - le poids moléculaire : les substances de faible poids moléculaire pénètrent mieux à travers la peau,
    - la volatilité du fait de la compétition entre l'absorption et l'évaporation de la substance à la surface de la peau ;
- aux caractéristiques de la peau, comme :
    - la température de la peau,
    - le degré d'hydratation de la peau (augmentation de l'absorption cutanée),
    - la région du corps (zones plus ou moins hydratées, plus ou moins perméables,…),
    - l'état et l'âge de la peau.

L'approche générale consiste à estimer la dose de polluant absorbée, soit à partir d'une vitesse d'absorption (encore appelée coefficient de perméabilité), soit à partir d'un taux d'absorption.

2.5.2. ABSORPTION DE POLLUANT A PARTIR D'UNE EAU CONTAMINEE

Si la peau n'est pas endommagée, si ses caractéristiques ne sont pas modifiées au cours du temps et s'il n'y a pas transport actif du polluant, la première loi de Fick peut être utilisée pour représenter le flux de polluant traversant la peau à l'état stationnaire.

Si la concentration de polluant dans l'eau est constante et si la concentration de polluant dans l'organisme est négligeable pendant la durée du contact avec

l'eau, le flux de polluant traversant la peau par unité de temps et de surface (J_{cut}) peut s'écrire :

$$J_{cut} = K_p \times C_{eau}$$ Équation 2.5.1

avec C_{eau} : concentration de polluant dans l'eau,

K_p : coefficient de perméabilité cutanée du polluant dans l'eau.

Le coefficient de perméabilité cutanée est alors égal à la somme des résistances de la couche cornée et de l'épiderme viable au passage du polluant, soit :

$$\frac{1}{K_p} = \frac{1}{K_{p,cc}} + \frac{1}{K_{p,ev}}$$ Équation 2.5.2

avec $K_{p,cc}$: coefficient de perméabilité du polluant dans l'eau à travers la couche cornée,

et $K_{p,ev}$: coefficient de perméabilité du polluant dans l'eau à travers l'épiderme viable.

S'il y a équilibre instantané entre l'eau et la face externe de la couche cornée, ou si l'épaisseur de la couche limite entre le milieu eau et la peau tend vers 0 (conditions turbulentes), on peut écrire

$$K_{p,cc} = \frac{K_{cc_eau} \times D_{cc}}{L_{cc}}$$ Équation 2.5.3

avec K_{cc_eau} : coefficient de partage du polluant entre la couche cornée et l'eau,

D_{cc} : coefficient de diffusion du polluant dans la couche cornée,

L_{cc} : épaisseur de la couche cornée.

De même,

$$K_{p,ev} = \frac{K_{ev_eau} \times D_{ev}}{L_{ev}}$$ Équation 2.5.4

avec K_{ev_eau} : coefficient de partage du polluant entre l'épiderme viable et l'eau,

D_{ev} : coefficient de diffusion du polluant dans l'épiderme viable,

L_{ev} : épaisseur de l'épiderme viable.

Mais cette approche, applicable à l'état stationnaire, peut sous-estimer la quantité de polluant absorbée suite à un contact avec une eau contaminée, car l'état stationnaire n'est pas immédiatement atteint. Pendant un certain temps, la quantité de polluant entrant dans la couche cornée est en effet supérieure à celle qui en sort. Pour les substances très lipophiles, la couche d'épiderme viable représentant une résistance importante, cette période peut durer plusieurs heures. Quant à l'absorption du polluant par l'épiderme viable, elle peut continuer après la fin du contact avec l'eau contaminée. L'estimation de la dose interne d'exposition doit donc être basée sur la quantité totale de polluant absorbée, y compris celle qui est entrée dans la couche cornée, mais qui ne l'a pas encore quitté à la fin de la période de contact avec l'eau.

Un modèle à deux compartiments peut être utilisé pour représenter l'absorption de polluant par la peau à partir d'une eau contaminée. Mais la solution de ce modèle est complexe. Cleek et Bunge (1993, 1995) ont donc proposé deux expressions algébriques permettant d'approcher cette solution, le choix de l'une ou de l'autre dépendant de la durée du contact avec l'eau contaminée. Ces équations, présentées ci-dessous, ont été reprises par l'US EPA (1992, 2004d) pour les substances organiques.

2.5.2.1. CAS DES SUBSTANCES ORGANIQUES

Lorsque la durée de contact avec l'eau contaminée est courte, le polluant ne pénètre que sur une faible distance à l'intérieur de la couche cornée. Dans ce cas, la résistance liée à la barrière entre la couche cornée et la partie vivante de l'épiderme ne se fait pas encore sentir et le flux de polluant est sensiblement supérieur à ce qu'il serait à l'état stationnaire.

Le flux de polluant entrant peut alors être modélisé comme si la couche cornée avait une épaisseur semi-infinie. La quantité de polluant absorbée par unité de surface exposée (DA_{eau}) s'écrit alors :

$$DA_{eau} = 2 \times K_{cc_eau} \times C_{eau} \times \sqrt{\frac{D_{cc} \times \mathrm{T_{cc}}}{\pi}} \qquad \text{Équation 2.5.5}$$

avec T_{cc} : durée de contact avec l'eau contaminée.

Pour des durées de contact avec l'eau contaminée plus longues et lorsque l'état stationnaire est atteint, la solution du modèle à deux compartiments représentant la couche cornée et l'épiderme viable se simplifie. Cleek et Bunge (1993) donnent l'expression suivante :

$$DA_{eau} = \frac{C_{eau} \times L_{cc} \times K_{cc_eau}}{1+B} \times \left(\frac{\mathrm{D_{cc}} \times \mathrm{T_{cc}}}{L_{cc}^2} + \frac{(1+3\times B+3\times B^2)}{3\times(1+B)} \right) \qquad \text{Équation 2.5.6}$$

avec $B = \dfrac{K_{p,cc}}{K_{p,ev}}$ Équation 2.5.7

Cleek et Bunge proposent donc d'utiliser l'expression 2.5.5 pour estimer la dose d'exposition liée à un contact avec une eau d'une durée inférieure au temps nécessaire pour avoir un flux stationnaire et l'expression 2.5.6 lorsque la durée de contact est supérieure. Le moment de transition (t*) pour l'utilisation de l'une ou l'autre de ces expressions est déterminé en minimisant la différence entre la solution mathématique exacte du modèle à deux compartiments et les deux expressions simplifiées proposées par Cleek et Burge.

Quand B > 0,6, les équations 2.5.5 et 2.5.6 donnent la même quantité de polluant absorbée pour :

$$t^* = \left(b - \sqrt{b^2 - c^2} \right) \times \frac{L_{cc}^2}{D_{cc}} \qquad \text{Équation 2.5.8}$$

avec $b = \dfrac{2 \times \left(1 + B^2\right)}{\pi} - c$ Équation 2.5.9

et $$c = \frac{1 + 3 \times B + 3 \times B^2}{3 \times (1 + B)}$$ Équation 2.5.10

Quand B ≤ 0,6, l'erreur minimale est obtenue avec :

$$t^* = \frac{0{,}4 \times L_{cc}^2}{D_{cc}}$$ Équation 2.5.11

Bunge et Cleek (1995) fournissent plusieurs estimations pour B. Celle qu'ils recommandent est obtenue en posant :

$$B = \frac{K_{p,cc}}{K_{p,ev}} = K_{p,cc} \times \frac{L_{ev}}{D_{ev} \times K_{ev_eau}}$$ Équation 2.5.12

avec L_{ev} =10^{-4} m

et K_{ev_eau} = 1 (car l'épiderme est supposé se comporter essentiellement comme l'eau).

Pour des molécules de solvant et de soluté de taille comparable, Bunge et Cleek (1995) rapportent que le coefficient de diffusion est inversement proportionnel à la masse molaire du soluté et Tinsley et al. (1979) et Schwarzenbach et al. (1993) donnent la relation suivante : $D_{ev,i} = D_{ev,j} \times \sqrt{\frac{M_j}{M_i}}$ où D_i, D_j, M_i et M_j sont respectivement les coefficients de diffusion des substances i et j, la masse molaire de la substance i et celle de la substance j.

Bunge et Cleek (1995) supposent alors un coefficient de diffusion dans l'épiderme viable (D_{ev}) de 10^{-10} $m^2.s^{-1}$ (soit une valeur 10 fois inférieure à celle de l'eau) pour une substance ayant une masse molaire (M) de 50 $g.mol^{-1}$ (en cohérence avec la valeur moyenne de 10^{-11} $m^2.s^{-1}$ rapportée par Tojo et al. (1991) pour des masses molaires comprises entre 170 et 490 $g.mol^{-1}$), d'où :

$$D_{ev} = 7{,}1.10^{-10} / \sqrt{M}$$ Équation 2.5.13

et $$B = K_{p,cc} \times \frac{\sqrt{M}}{7{,}1.10^{-6}}$$ Équation 2.5.14

L'US EPA (1992, 2004d) pose la variable suivante :

$$\tau_{lag} = \frac{L_{cc}^2}{6 \times D_{cc}}$$ Équation 2.5.15

Quand B ≤ 0,6, la durée pour atteindre l'état stationnaire est donc estimée par l'expression 2.5.11 ou :

$$t^* = 2{,}4 \times \tau_{lag}$$ Équation 2.5.16

et quand B > 0,6, elle est estimée par l'expression 2.5.8 ou :

$$t^* = 6 \times \tau_{lag} \times \left(b - \sqrt{b^2 - c^2}\right)$$

Par conséquent, quand la durée du contact cutané avec l'eau contaminée est inférieure à t*, la dose de polluant absorbée est estimée par l'expression 2.5.5 ou :

$$DA_{eau} = 2 \times K_{p,cc} \times C_{eau} \times \sqrt{\frac{6 \times \tau_{lag} \times \mathrm{T_{cc}}}{\pi}}$$ Équation 2.5.17

Quand la durée du contact cutané avec l'eau contaminée est supérieure à t*, la dose de polluant absorbée est estimée par l'expression 2.5.6 ou :

$$DA_{eau} = K_{p,cc} \times C_{eau} \times \left(\frac{\mathrm{T_{cc}}}{1+B} + \frac{2 \times \tau_{lag} \times (1+3 \times B + 3 \times B^2)}{(1+B)^2} \right)$$ Équation 2.5.18

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
DA_{eau}	Masse de polluant absorbée par contact cutané avec une eau contaminée par unité de surface	$M.L^{-2}$	$mg.m^{-2}$	C ou E
$K_{p,cc}$	Coefficient de perméabilité cutanée du polluant dans l'eau à travers la couche cornée	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C
C_{eau}	Concentration de polluant dans l'eau pendant la période de contact cutané	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
T_{cc}	Durée du contact cutané avec l'eau contaminée	T	s	E
τ_{lag}	« Lag time »	T	s	C
D_{cc}	Coefficient de diffusion du polluant dans la couche cornée	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C
L_{cc}	Longueur de diffusion dans la couche cornée	L	m	E
B	Coefficient de perméabilité du polluant à travers la couche cornée sur coefficient de perméabilité du polluant à travers l'épiderme viable	-	-	C

Remarques :

1. Dans cette approche, la dose absorbée est supérieure à celle qui a traversé la peau et atteint la circulation sanguine pendant la période de contact avec l'eau contaminée. L'absorption est en effet supposée pouvoir continuer alors que le contact avec l'eau contaminée est terminé. Cette approche est mieux adaptée qu'une simple approche stationnaire pour représenter la dose d'exposition interne liée à un contact cutané relativement court, comme celui ayant lieu dans le cas d'un bain ou d'une baignade.
2. Toutefois, dans le cas des substances présentant un temps de latence très long, l'US EPA considère qu'une partie du polluant présent dans la peau peut être perdue à cause du phénomène de desquamation de la peau. C'est pourquoi dans le document de 2004, l'US EPA a intégré, dans les équations 2.5.17 et 2.5.18, un facteur supplémentaire FA compris entre 0 et 1, représentant la fraction de polluant pouvant être effectivement absorbée par rapport à la quantité présente dans la peau. L'US EPA (2004d) donne les valeurs de FA pour 209 polluants différents. D'après l'US EPA, le phénomène de desquamation peut avoir un impact

sur les quantités de polluant absorbée quand une substance présente un log K_{ow} supérieur à 3,5 ou lorsque la durée de contact avec l'eau contaminée est supérieure à 10 heures.

3. Faute de mesures pour définir le coefficient de diffusion dans la couche cornée (D_{cc}), utilisé dans les équations 2.5.5, 2.5.6, 2.5.8, 2.5.11 et 2.5.15, la valeur attribuée à ce paramètre est généralement estimée à partir d'une relation empirique donnant le coefficient de perméabilité cutanée ($K_{p,cc}$) en fonction du coefficient de partage octanol-eau (K_{ow}) et de la masse molaire du polluant (relation de Potts et Guys ou relation de Potts et Guys modifiée : voir US EPA 1992 et 2004, ainsi que les documents à venir sur les paramètres physico-chimiques des substances). Dans un souci de cohérence, l'US EPA recommande d'utiliser également cette relation pour estimer le coefficient de perméabilité cutanée des substances organiques à la place de données issues de mesures (Vecchia (1997) ayant montré par ailleurs que les données expérimentales variaient souvent de 1 à 2 ordres de grandeur).

2.5.2.2. CAS DES SUBSTANCES INORGANIQUES

L'approche non stationnaire développée pour les substances organiques ne s'applique pas aux substances inorganiques. L'US EPA recommande d'utiliser l'approche basée sur la première loi de Fick, qui suppose l'état stationnaire atteint, soit :

$$DA_{eau} = K_{p,cc} \times C_{eau} \times \mathrm{T_{cc}} \qquad \text{Équation 2.5.19}$$

En effet, la couche cornée, ayant une faible affinité pour les substances inorganiques, stocke peu ces substances. Quant à l'épiderme viable, il ne constitue pas une barrière significative pour les substances inorganiques. L'état stationnaire est donc rapidement atteint.

Sur le plan mathématique, on remarquera que si τ_{lag} et B ($= \frac{K_{p,cc}}{K_{p,ev}}$) tendent vers zéro, l'équation 2.5.18 tend alors vers l'expression 2.5.19.

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
DA_{eau}	Masse de polluant absorbée par contact cutané avec une eau contaminée par unité de surface	$M.L^{-2}$	$mg.m^{-2}$	C ou E
$K_{p,cc}$	Coefficient de perméabilité cutanée du polluant dans l'eau à travers la couche cornée	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C
C_{eau}	Concentration de polluant dans l'eau pendant la période de contact cutané	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C ou E
T_{cc}	Durée du contact cutané avec l'eau contaminée	T	s	E

2.5.2.3. CONDITIONS D'APPLICATION ET INCERTITUDES LIEES AU MODELE

Les équations développées ci-dessus supposent notamment que le transport du polluant à travers la peau soit passif, que les propriétés des membranes (couche cornée et épiderme viable) ne soient pas modifiées par l'eau ou le polluant et que la concentration dans l'eau soit constante pendant la période de contact.

Il n'est donc pas approprié d'utiliser les équations 2.5.5, 2.5.6, 2.5.17 et 2.5.18, 2.5.19 avec une estimation de la concentration dans l'eau (C_{eau}) variable pendant l'évènement d'exposition analysé. En conséquence, si le polluant présent dans l'eau peut se volatiliser (comme cela peut être le cas lors de la prise d'une douche) ou s'adsorber sur des particules ou un autre support pendant la période de contact, les équations ci-dessus, avec la concentration dans l'eau au début du contact, tendront à surestimer l'exposition.

Si le polluant est présent dans l'eau sous phase dissoute et sous phase particulaire, l'utilisation de la concentration de polluant dans l'eau sous formes particulaire et dissoute, telle que présentée dans les équations ci-dessus, peut être très majorante, puisque l'absorption cutanée des polluants adsorbés sur les particules en suspension dans l'eau est beaucoup plus faible que celle des polluants sous forme dissoute. Cette approche est néanmoins celle recommandée par l'US EPA (2004d). Si la dose de polluant ainsi estimée apparaît comme un élément sensible de l'exposition, cet aspect doit être revu dans l'étape d'évaluation des incertitudes.

Par ailleurs, dans le cas des substances organiques partiellement ionisées, l'US EPA (2004d) indique que la quantité de polluant absorbée par voie cutanée doit être calculée comme la somme des quantités de polluant absorbé sous forme non ionisée d'une part et sous forme ionisée d'autre part. Les équations 2.5.17 ou 2.5.18 (pour les espèces non ionisées) et l'équation 2.5.19 (pour les espèces ionisées) doivent alors être utilisées avec le coefficient de perméabilité et la concentration de polluant dans l'eau relatifs à chaque espèce considérée.

Si φ désigne la fraction non ionisée, les concentrations dans l'eau à prendre en compte dans les équations sont donc :

- $C_{eau} \times \varphi$ pour la fraction non ionisée,
- $C_{eau} \times (1 - \varphi)$ pour la fraction ionisée.

L'expression de φ est donnée par exemple dans Trapp et al., 1997. Elle sera rappelée dans les documents à venir sur les paramètres physico-chimiques des substances.

La modélisation de cette voie d'exposition est reconnue pour être particulièrement incertaine. Les incertitudes sont liées aux hypothèses de modélisation, à la formulation mathématique et aux valeurs des paramètres utilisées dans le modèle.

Il convient d'abord de rappeler que les équations données ci-dessus pour les substances organiques correspondent à des solutions simplifiées d'un modèle représentant la diffusion de substances à travers deux membranes d'épaisseur finie. Mais d'après Cleek et Bunge (1993), la différence maximale entre la solution exacte et les solutions simplifiées est de 13%.

Une part importante de l'incertitude liée aux équations développées ci-dessus pour estimer la quantité de polluant adsorbée par contact avec une eau contaminée est vraisemblablement liée à l'estimation du coefficient de perméabilité de la substance à travers la couche cornée ($K_{p,cc}$).

Lors de la mesure expérimentale de $K_{p,cc}$, la couche formée par l'eau stagnante sur la peau induit une résistance au transfert du polluant. En conditions environnementales, cette résistance est limitée du fait de la turbulence de la couche d'eau. Cette différence de conditions peut donc conduire à sous-estimer $K_{p,cc}$ pour des expositions de type bain ou douche (cf. McKone et al., 1992 et la section 2.5.3.2.2.2 où, dans le cas d'un exposition à partir d'un sol pollué, la résistance de la couche limite entre la matrice polluée et la peau est prise en compte).

Dans les relations présentées dans la section 2.5.2.1, $K_{p,cc}$ est estimé à partir d'une relation empirique établie à partir de données mesurées en conditions in-vitro (relation de Potts et Guys modifiée, voir US EPA, 2004d et document à venir sur les paramètres physico-chimiques des substances). Mais certaines des substances classiquement étudiées dans les évaluations de risque sanitaire (benzo(a)pyrène, tétrachlorodibenzodioxine,…) ne sont pas incluses dans le domaine de validité de cette relation. L'US EPA souligne aussi que par son mode de construction, cette relation sous-estime les coefficients de perméabilité des substances halogénées. Pour les substances appartenant au domaine de validité, le coefficient de perméabilité est estimé, d'après l'US EPA, avec un intervalle de confiance à 95% de 1 à 3 ordres de grandeur.

Des simulations réalisées, par l'US EPA (1998), avec le modèle non stationnaire développé ci-dessus ont conduit, pour des durées de contact de 10 minutes, à l'obtention de doses d'exposition supérieures à celles estimées pour une ingestion d'eau de 2 litres par jour. Ce constat conduit à penser que ce modèle est surconservatoire. Toutefois, les hypothèses sur lesquelles reposent ces résultats ne sont pas claires (en particulier l'impact de la volatilité des substances étudiées, qui n'est pas intégrée dans le modèle et qui peut conduire à une surestimation de la dose absorbée par contact cutané, n'est pas connu). Dans le doute, la recommandation faite par l'US EPA de comparer, dans le cas d'un volume d'eau fini, la quantité absorbée à celle présente dans ce volume d'eau est bien sûr pertinente.

En revanche, le seul exercice de comparaison des prédictions du modèle avec des données de mesure, réalisé par McKone (1993) et rapporté par l'US EPA (2004d), ne témoigne pas du caractère majorant du modèle. Cet exercice mené sur le cas du chloroforme a montré un coefficient de perméabilité mesuré pour cette substance 7 fois supérieur à celui modélisé et une quantité de polluant absorbée suite à un contact cutané 5 fois supérieure à celle modélisée.

2.5.3. ABSORPTION DE POLLUANT A PARTIR D'UN SOL CONTAMINE

Les connaissances et les données disponibles pour estimer la dose de polluant absorbée suite à un contact cutané avec un sol contaminé sont encore plus limitées qu'avec une eau contaminée.

Il existe deux approches pour estimer ce transfert :

- l'une basée sur l'utilisation d'un taux d'absorption,
- l'autre sur le flux absorbé, calculé à partir du coefficient de transfert de masse du polluant.

La première approche est celle recommandée par l'US EPA (1992, 2004d). Compte-tenu du peu de données disponibles pour définir les taux d'absorption et de l'incertitude liée à leur utilisation (cf. section suivante), les approches basées sur le coefficient de transfert de masse sont également présentées dans ce document. Elles ne sont pas recommandées pour une utilisation en première approche, mais proposées pour fournir des éléments quantitatifs de discussion dans le cadre de l'évaluation des incertitudes.

2.5.3.1. ESTIMATION A PARTIR DU TAUX D'ABSORPTION

La dose d'exposition est calculée à partir d'un taux d'absorption spécifique à la substance :

$$DA_{sol} = C_{s_p}(t_{\exp_cut,0}) \times Q_{sol-peau} \times t_{abs_cut}$$ Équation 2.5.20

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
DA_{sol}	Masse de polluant absorbée par contact cutané avec le sol par unité de surface	$M.L^{-2}$	$mg.m^{-2}$	C ou E
C_{s_p} ($t_{exp_cut,0}$)	Concentration de polluant dans le sol au moment du dépôt sur la peau	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
Q_{sol_peau}	Masse de sol déposée sur la peau par unité de surface (exprimée en masse sèche, en cohérence avec C_{s_p} ($t_{exp_cut,0}$))	$M.L^{-2}$	$kg.m^{-2}$	E
t_{abs_cut}	Taux d'absorption cutanée à partir du sol	-	-	E

Les limites de cette approche sont liées aux faits que :

- des taux d'absorption ont été définis pour peu de substances. Le document de l'US EPA de 2004 donne des valeurs pour 11 substances ou groupes de substances ;
- le taux d'absorption dépend des conditions de l'exposition (durée de contact, quantité de sol déposée sur la peau par unité de surface), des caractéristiques du sol (teneur en carbone organique, capacité d'échanges cationiques, pH, taille des particules), de la contamination (spéciation du polluant, âge de la contamination, concentration de polluant dans le sol,…). Or, les conditions expérimentales à partir desquelles des valeurs de taux d'absorption ont pu être définies sont généralement assez différentes de celles rencontrées en conditions environnementales. En particulier, les

quantités de sol sur la peau par unité de surface utilisées lors d'expérimentation sont supérieures à celles attendues en conditions environnementales. Comme il a pu être observé que le taux d'absorption diminuait quand la quantité de sol sur la peau augmentait au-delà de la quantité nécessaire pour former une fine couche continue sur la peau, le taux d'absorption en conditions environnementales peut être supérieur à la valeur mesurée en conditions expérimentales. A l'inverse, les valeurs recommandées par l'US EPA correspondent généralement à des durées d'exposition de 24 heures et peuvent s'avérer majorantes pour des durées d'exposition plus courtes.

Malgré les limites liées à ces données, l'US EPA dans son document de 2004, pour évaluer l'impact de la voie cutanée dans le cadre des sites contaminés, recommande d'utiliser ces taux d'absorption sans ajustement.

Dans le document de référence initial sur l'évaluation des risques par voie cutanée (1992), l'US EPA avait pourtant proposé des méthodes d'ajustement du taux d'absorption en fonction de la quantité de sol par unité de surface déposée sur la peau et des méthodes d'estimation (parfois par excès) de ce taux d'absorption en l'absence de données de mesures spécifiques. Compte-tenu du manque de données et des incertitudes liées aux données existantes, dans un but de caractérisation et de discussion des incertitudes, ces approches seront exposées dans les documents à venir sur les paramètres physico-chimiques des substances, pour aider à cerner les incertitudes.

2.5.3.2. ESTIMATION PAR LE CALCUL DU FLUX DE TRANSFERT

L'US EPA (1992) et McKone et al. (1992) ont développé deux modèles proches pour estimer la dose de polluant absorbée par contact cutané avec un sol contaminé.

L'approche de l'US EPA repose sur l'utilisation du coefficient de perméabilité de la substance dans l'eau à travers la couche cornée, celle de McKone et al. définit le coefficient de perméabilité à partir des propriétés physico-chimiques de la substance et tient compte, par ailleurs, de la couche limite existant entre la peau et la couche de sol.

Par ailleurs, la durée de contact entre le sol contaminé et la peau pouvant être relativement longue, ces deux modèles prennent en compte les pertes de polluant au cours du temps à partir de la quantité de polluant déposée initialement sur la peau. Grâce au bilan de masse établi pour le polluant déposé sur la peau, ces modèles évitent des surestimations trop importantes des quantités de polluant absorbées, qui pourraient conduire au calcul de doses absorbées supérieures à celles déposées.

2.5.3.2.1. METHODE DE L'US EPA (1992)

Selon cette approche, si la concentration dans l'organisme est négligeable pendant la durée d'exposition, la dose absorbée peut être calculée à partir de l'expression suivante :

$$J_c = C_{s_p} \times MV_{s_p} \times K_p^{sol} \qquad \text{Équation 2.5.21}$$

avec J_c : flux de polluant absorbé par unité de temps et de surface,

C_{s_p} : concentration de polluant dans le sol présent sur la peau,

K_p^{sol} : coefficient de perméabilité cutanée du polluant dans le sol,

MV_{s_p} : masse volumique du sol déposé sur la peau.

L'US EPA (1992) considère que le polluant disponible pour l'absorption cutanée est le polluant en solution dans l'eau interstitielle du sol et estime le coefficient de perméabilité cutané du polluant dans le sol (K_p^{sol}) à partir du coefficient de perméabilité cutanée du polluant dans l'eau ($K_{p,cc}$).

En effet, si :

$$J_c = C_{es_p} \times K_{p,cc} \qquad \text{Équation 2.5.22}$$

avec C_{es_p} : concentration de polluant dans l'eau du sol,

d'après les équations 2.5.21, 2.5.22 et 1.1.11 **(conditions : concentration de polluant dans le sol inférieure à la limite de solubilité, équilibre multiphasique atteint entre les différentes phases du sol),** on peut écrire, la relation suivante :

$$K_p^{sol} = \frac{K_{p,cc}}{MV_{s_p} \times K_d} \qquad \text{Équation 2.5.23}$$

avec K_d : coefficient de partage du polluant entre les particules du sol et l'eau

et $\theta_{s_p} + \alpha_{s_p} \times \frac{H}{R \times T_{peau}} \prec\prec K_d \times MV_{s_p}$.

avec α_{s_p} : teneur en air du sol sur la peau,

θ_{s_p} : teneur en eau du sol sur la peau,

T_{peau} : température à la surface de la peau,

H : constante de Henry,

R : constante des gaz parfaits.

La concentration de polluant dans le sol présent sur la peau (C_{s_p}) est déterminée en tenant compte de la réduction de la concentration de polluant dans la couche de sol déposé sur la peau du fait de l'absorption et de la volatilisation. La concentration de polluant dans le sol au cours du temps est ainsi calculée à l'aide de l'équation différentielle suivante :

$$A \times Q_{sol_peau} \times \frac{dC_{s_p}}{dt} = -(k_{vol} + k_{abs}) \times C_{s_p} \times Q_{sol_peau} \times A$$ Équation 2.5.24

avec Q_{sol_peau} : masse de sol déposée sur la peau par unité de surface,

C_{s_p} : concentration de polluant dans le sol présent sur la peau,

A : surface de peau exposée,

k_{vol} : facteur de transfert de masse par volatilisation,

k_{abs} : facteur de transfert de masse par absorption.

d'où $C_{s_p}(t) = C_{s_p}(t_{\exp_cut,0}) \times e^{-(k_{vol}+k_{abs})\times t}$ Équation 2.5.25

avec $C_{s_p}(t_{exp_cut,0})$: concentration de polluant dans le sol au moment du dépôt sur la peau.

La réduction de la concentration de polluant dans le sol du fait de l'absorption conduit à écrire l'équation suivante :

$$k_{abs} \times C_{s_p} \times Q_{sol_peau} \times A = MV_{s_p} \times K_p^{sol} \times C_{s_p} \times A$$ Équation 2.5.26

d'où $k_{abs} = \frac{MV_{s_p} \times K_p^{sol}}{Q_{sol_peau}}$ Équation 2.5.27

La quantité de polluant perdue par volatilisation conduit à écrire la relation suivante :

$$k_{vol} \times C_{s_p} \times Q_{sol_peau} \times A = \frac{D_a}{d_a} \times C_{as_p} \times A$$ Équation 2.5.28

avec D_a : coefficient de diffusion du polluant dans l'air,

d_a : épaisseur de la couche limite à l'interface air-sol,

C_{as_p} : concentration de polluant dans l'air du sol présent sur la peau,

et $k_{vol} = \frac{D_a}{d_a} \times \frac{1}{Q_{sol_peau}} \times \frac{C_{as_p}}{C_{s_p}}$ Équation 2.5.29

Or, d'après l'équation 1.1.12 **(conditions : concentration de polluant dans le sol inférieure à la limite de solubilité, équilibre multiphasique atteint entre les différentes phases du sol),** on a :

$$k_{vol} \approx \frac{D_a}{d_a} \times \frac{1}{Q_{sol_peau}} \times \frac{H}{K_d \times R \times T_{peau}}$$ Équation 2.5.30

avec T_{peau} : température à la surface de la peau.

La quantité de polluant absorbée est obtenue en intégrant l'équation 2.5.21, sur la période de contact cutané, soit :

$$DA_{sol} = \frac{MV_{s_p} \times K_p^{sol}}{k_{vol} + k_{abs}} \times C_{s_p}(t_{\exp_cut,0}) \times \left(1 - e^{-(k_{vol}+k_{abs})\times T_{cc}}\right)$$ Équation 2.5.31

Le taux d'absorption peut être calculé en divisant la dose absorbée par la quantité de polluant déposée sur la peau, soit :

$$t_{abs_cut} = \frac{MV_{s_p} \times K_p^{sol}}{Q_{sol_peau} \times (k_{vol} + k_{abs})} \times \left(1 - e^{-(k_{vol}+k_{abs}) \times T_{cc}}\right)$$ Équation 2.5.32

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
DA_{sol}	Masse de polluant absorbée par contact cutané avec le sol par unité de surface corporelle exposée	$M.L^{-2}$	$mg.m^{-2}$	C ou E
t_{abs_cut}	Taux d'absorption cutanée	-	-	C ou E
$C_{s_p}(t_{exp_cut,0})$	Concentration dans le sol au moment du dépôt sur la peau	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
Q_{sol_peau}	Masse de sol déposée sur la peau par unité de surface (exprimée en masse sèche, en cohérence avec C_{s_p} ($t_{exp_cut,0}$))	$M.L^{-2}$	$kg.m^{-2}$	E
k_{vol}	Facteur de transfert de masse par volatilisation	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
k_{abs}	Facteur de transfert de masse par absorption	T^{-1}	s^{-1}	C ou E
K_p^{sol}	Coefficient de perméabilité cutanée du polluant dans le sol	$L.T^{-1}$	$m.s^{-1}$	C ou E
MV_{s_p}	Masse volumique du sol déposé sur la peau	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
D_a	Coefficient de diffusion du polluant dans l'air	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	E
d_a	Epaisseur de la couche limite à l'interface air-sol	L	m	E
T_{cc}	Durée de la période de contact avec le sol contaminé	T	s	E
K_d	Coefficient de partage particules du sol-eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
H	Constante de Henry	$L^2.M.T^{-2}.Mol^{-1}$	$Pa.m^3.mol^{-1}$	C ou E
R	Constante des gaz parfaits	$L^2.M.T^{-2}.K^{-1}.Mol^{-1}$	$8,31\ J.K^{-1}.mol^{-1}$	I
T_{peau}	Température à la surface de la peau	K	K	E

Remarques :

1. Ce modèle ne tient pas compte de la diffusion du polluant dans le sol. Cela revient à considérer la diffusion dans la couche limite d'air et le transfert dans la couche cornée comme respectivement les phénomènes limitant du transfert de masse par volatilisation et du transfert de masse par absorption. Dans une majorité de cas, cette hypothèse paraît acceptable.

2. Le document de 1992 de l'US EPA indique que la relation 2.5.23 suppose que le transfert du polluant du sol vers la peau met principalement en jeu le polluant dans l'eau interstitielle, mais qu'en réalité, il peut aussi y avoir transfert du polluant par la phase gazeuse et les phases lipidiques présentes dans l'ensemble sol-peau.

En fait, cette hypothèse n'est pas nécessaire car la relation 2.5.23 peut aussi être déduite de l'expression de la première loi de Fick. Si la concentration de polluant dans l'organisme peut être considérée comme négligeable, la première loi de Fick permet d'écrire :

$$J_c = \frac{D_{cc}}{L_{cc}} \times C'_{cc}$$ Équation 2.5.33

avec D_{cc} : coefficient de diffusion du polluant dans la couche cornée,

L_{cc} : épaisseur de la couche cornée,

C'_{cc} : concentration de polluant dans la couche cornée, à la surface externe.

Si on considère la concentration de polluant dans la couche de sol uniforme et la résistance de la couche limite située entre le sol et la peau négligeable, alors :

$$\frac{C'_{cc}}{MV_{s_p} \times C_{s_p}} = K_{cc_sol}$$ Équation 2.5.34

avec K_{cc_sol} : coefficient de partage du polluant entre la couche cornée et le sol,

C_{s_p} : concentration de polluant dans la couche de sol présente sur la peau.

D'après les équations 2.5.21, 2.5.33 et 2.5.34, on peut écrire :

$$K_p^{sol} = \frac{D_{cc}}{L_{cc}} \times K_{cc_sol}$$ Équation 2.5.35

En combinant les expressions 2.5.3 et 2.5.35, on a :

$$\frac{K_p^{sol}}{K_{p,cc}} = \frac{K_{cc_sol}}{K_{cc_eau}} = \frac{C'_{cc}}{MV_{s_p} \times C_{s_p}} \times \frac{C_{es_p}}{C'_{cc}} = \frac{C_{es_p}}{MV_{s_p} \times C_{s_p}}$$ Équation 2.5.36

Si la concentration de polluant dans le sol est inférieure à la limite de solubilité, d'après l'hypothèse d'équilibre du polluant entre les différentes phases du sol et l'équation 1.1.11, on a :

$$\frac{K_p^{sol}}{K_{p,cc}} \approx \frac{1}{MV_{s_p} \times K_d}$$ Équation 2.5.37

avec $\theta_{s_p} + \alpha_{s_p} \times \frac{H}{R \times T_s} \prec\prec K_d \times MV_{s_p}$

2.5.3.2.2. METHODE DE MCKONE ET AL.

Dans cette approche, McKone et al. (1992) définissent la vitesse d'absorption à partir des propriétés chimiques du polluant, de celles du sol et de celles de la peau. Les équations développées par les auteurs font intervenir les notions de fugacité et de capacité de fugacité. Ces notions n'ayant pas été utilisées dans le reste du document, ces équations ont été reformulées, afin d'éliminer le recours à ce types de variables. A la place des constantes de partage ont été introduites dans les équations.

Comme dans la section précédente, la concentration de polluant dans le sol présent sur la peau est calculée à partir d'une équation différentielle :

$$A \times Q_{sol_peau} \times \frac{dC_{s_p}}{dt} = -\left(K_{sp} + K_{sa}\right) \times C_{s_p} \times A$$ Équation 2.5.38

avec Q_{sol_peau} : masse de sol déposée sur la peau par unité de surface,

C_{s_p} : concentration de polluant dans le sol présent sur la peau,

A : surface de peau exposée,

K_{sp} : coefficient de transfert de masse du sol vers la peau,

K_{sa} : coefficient de transfert de masse du sol vers l'air.

Par rapport au modèle de la section précédente, les facteurs de transfert de masse (exprimés en T^{-1}) sont ici remplacés par des coefficients de transfert de masse (exprimés en $M.L^{-2}.T^{-1}$).

Il découle de l'équation 2.5.38 :

$$\frac{dC_{s_p}}{dt} = -\frac{K_{sp} + K_{sa}}{Q_{sol_peau}} \times C_{s_p} \qquad \text{Équation 2.5.39}$$

et $$C_{s_p}(t) = C_{s_p}(t_{\exp_cut,0}) \times e^{-\left(\frac{K_{sp}+K_{sa}}{Q_{sol_peau}}\right)\times t} \qquad \text{Équation 2.5.40}$$

avec $C_{s_p}(t_{exp_cut,0})$: concentration de polluant dans le sol au moment du dépôt sur la peau.

La quantité de polluant absorbée est donnée par :

$$DA_{sol} = \int_0^{T_{cc}} K_{sp} \times C_{s_p}\, dt \qquad \text{Équation 2.5.41}$$

avec T_{cc} : durée de la période de contact,

d'où $$DA_{sol} = \frac{Q_{sol_peau}}{K_{sp} + K_{sa}} \times K_{sp} \times C_{s_p}(t_{\exp_cut,0}) \times \left(1 - e^{-\left(\frac{K_{sp}+K_{sa}}{Q_{sol_peau}}\right)\times T_{cc}}\right) \qquad \text{Équation 2.5.42}$$

et le taux d'absorption cutanée est donné par :

$$t_{abs_cut} = \frac{DA_{sol}}{C_{s_p}(t_{\exp_cut,0}) \times Q_{sol_peau}} \qquad \text{Équation 2.5.43}$$

d'où $$t_{abs_cut} = \frac{K_{sp}}{(K_{sa} + K_{sp})} \times \left(1 - e^{-\left(\frac{K_{sp}+K_{sa}}{Q_{sol_peau}}\right)\times T_{cc}}\right) \qquad \text{Équation 2.5.44}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
DA_{sol}	Masse de polluant absorbée par contact cutané avec le sol par unité de surface corporelle exposée	$M.L^{-2}$	$mg.m^{-2}$	C ou E
t_{abs_cut}	Taux d'absorption cutanée	-	-	C ou E
$C_{s_p}(t_{\exp_cut,0})$	Concentration de polluant dans le sol au moment du dépôt sur la peau	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
Q_{sol_peau}	Masse de sol sec déposée sur la peau par unité de surface (exprimée en masse sèche, en cohérence avec C_{s_p} ($t_{exp_cut,0}$))	$M.L^{-2}$	$kg.m^{-2}$	E
K_{sa}	Coefficient de transfert de masse du sol vers l'air (cf. section 2.5.3.2.2.1)	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$kg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
K_{sp}	Coefficient de transfert de masse du sol vers la peau (cf. section2.5.3.2.2.2)	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$kg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
T_{cc}	Durée de la période de contact avec le sol contaminé	T	s	E

2.5.3.2.2.1. ESTIMATION DU COEFFICIENT DE TRANSFERT DE MASSE A TRAVERS LA COUCHE DE SOL ET LA COUCHE LIMITE D'AIR

K_{sa} est défini grâce au principe de conservation de la masse et à l'égalité du flux de diffusion au travers de la couche de sol (J_s) et du flux de diffusion à travers la couche limite d'air (J_a), située au-dessus de la couche de sol déposée sur la peau.

$$J_s = \frac{DU_{s_p}}{d_{s_p}} \times \left(C_{s_p} - C'_{s_p}\right) \qquad \text{Équation 2.5.45}$$

et $$J_a = \frac{D_a}{d_a} \times \left(C'_a - C_a\right) \qquad \text{Équation 2.5.46}$$

avec C'_{s_p} : concentration de polluant dans le sol à l'interface entre la couche de sol et la couche limite d'air,

C'_a : concentration de polluant dans l'air à l'interface air-sol,

D_a : coefficient de diffusion du polluant dans l'air,

d_a : épaisseur de la couche limite à l'interface air-sol,

DU_{s_p} : coefficient de diffusion multiphasique dans la couche de sol (comme dans les expressions développées par McKone et al., ce coefficient est exprimé par rapport à la concentration de polluant dans le sol),

d_{s_p} : longueur de la zone de diffusion dans la couche de sol.

Les concentrations C'_{s_p} et C'_a étant à l'équilibre, d'après l'équation 1.1.12 **(conditions : concentration de polluant dans le sol inférieure à la limite de solubilité, équilibre multiphasique atteint entre les différentes phases du sol)**, on peut écrire :

$$\frac{C'_a}{C'_{s_p}} = \frac{1}{\frac{K_d \times R \times T_{peau}}{H} + \frac{\theta_{s_p} \times R \times T_{peau}}{H \times MV_{s_p}} + \frac{\alpha_{s_p}}{MV_{s_p}}}$$ Équation 2.5.47

avec θ_{s_p} : teneur en eau de la couche de sol déposée sur la peau,

α_{s_p} : teneur en air de la couche de sol déposée sur la peau,

K_d : coefficient de partage particules du sol-eau du sol,

R : constante des gaz parfaits,

H : constante de Henry,

MV_{s_p} : masse volumique du sol déposé sur la peau,

T_{peau} : température à la surface de la peau.

En posant $R_g = \frac{K_d \times R \times T_{peau}}{H} + \frac{\theta_{s_p} \times R \times T_{peau}}{H \times MV_{s_p}} + \frac{\alpha_{s_p}}{MV_{s_p}}$, Équation 2.5.48

l'égalité de J_a et J_s permet d'écrire :

$$C'_{s_p} = \frac{\frac{D_a}{d_a} \times C_a + \frac{DU_{s_p}}{d_{s_p}} \times C_{s_p}}{\frac{D_a}{d_a \times R_g} \times \frac{DU_{s_p}}{d_{s_p}}}$$ Équation 2.5.49

et $$J_s = \frac{\frac{D_a}{d_a} \times \frac{DU_{s_p}}{d_{s_p}}}{\frac{D_a}{d_a \times R_g} + \frac{DU_{s_p}}{d_{s_p}}} \times \left(\frac{C_{s_p}}{R_g} - C_a \right)$$ Équation 2.5.50

Si la concentration dans l'air (C_a) est négligeable, on peut écrire :

$$J_s = K_{sa} \times C_{s_p} = \frac{1}{\frac{d_a}{D_a} + \frac{d_{s_p}}{DU_{s_p} \times R_g}} \times \frac{C_{s_p}}{R_g}$$ Équation 2.5.51

et $$K_{sa} = \frac{1}{\frac{d_a}{D_a} \times \left(\frac{K_d \times R \times T_{peau}}{H} + \frac{\theta_{s_p} \times R \times T_{peau}}{H \times MV_{s_p}} + \frac{\alpha_{s_p}}{MV_{s_p}} \right) + \frac{d_{s_p}}{DU_{s_p}}}$$ Équation 2.5.52

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
K_{sa}	Coefficient de transfert de masse du sol vers l'air	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$kg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
DU_{s_p}	Coefficient de diffusion multiphasique dans la couche de sol (exprimé par rapport à la concentration de polluant dans le sol) (cf. section 2.5.3.2.2.3)	$M.L^{-1}.T^{-1}$	$kg.m^{-1}.s^{-1}$	C ou E
d_{s_p}	Longueur de la zone de diffusion dans la couche de sol (cf. section 2.5.3.2.2.5)	L	m	E
MV_{s_p}	Masse volumique du sol déposé sur la peau	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
D_a	Coefficient de diffusion du polluant dans l'air	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	E
d_a	Epaisseur de la couche limite à l'interface air-sol	L	m	E
K_d	Coefficient de partage particules du sol - eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
θ_{s_p}	Teneur en eau de la couche de sol déposée sur la peau	-	-	E
α_{s_p}	Teneur en air de la couche de sol déposée sur la peau	-	-	E
H	Constante de Henry	$L^2.M.T^{-2}.Mol^{-1}$	$Pa.m^3.mol^{-1}$	C ou E
R	Constante des gaz parfaits	$L^2.M.T^{-2}.K^{-1}.Mol^{-1}$	$8,31\ J.K^{-1}.mol^{-1}$	I
T_{peau}	Température à la surface de la peau	K	K	E

2.5.3.2.2.2. ESTIMATION DU COEFFICIENT DE TRANSFERT DE MASSE A TRAVERS LA COUCHE DE SOL ET LA PEAU

K_{sp} est défini à partir du flux de diffusion au travers de la couche de sol (J_s : cf. équation 2.5.45) et du flux de diffusion à travers la couche cornée (J_c : cf. équation 2.5.33).

Par ailleurs,

$$\frac{C'_{cc}}{C'_{s_p}} = MV_{s_p} \times K_{cc_sol} \qquad \text{Équation 2.5.53}$$

avec C'_{cc} : concentration de polluant dans la couche cornée à l'interface entre la couche de sol et la peau,

C'_{s_p} : concentration de polluant dans le sol à l'interface entre la couche de sol et la peau,

K_{cc_sol} : coefficient de partage du polluant entre la couche cornée et le sol.

En développant le même raisonnement que dans la section 2.5.3.2.2.1, l'égalité des flux J_s et J_c conduit à écrire :

$$J_c = K_{sp} \times C_{s_p} = \frac{MV_{s_p} \times K_{cc_sol}}{\frac{L_{cc}}{D_{cc}} + \frac{d_{s_p}}{DU_{s_p}} \times MV_{s_p} \times K_{cc_sol}} \times C_{s_p} \qquad \text{Équation 2.5.54}$$

d'où $$K_{sp} = \frac{1}{\frac{L_{cc}}{D_{cc} \times MV_{s_p} \times K_{cc_sol}} + \frac{d_{s_p}}{DU_{s_p}}} \qquad \text{Équation 2.5.55}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
K_{sp}	Coefficient de transfert de masse du sol vers la peau	$M.L^{-2}.T^{-1}$	$kg.m^{-2}.s^{-1}$	C ou E
DU_{s_p}	Coefficient de diffusion multiphasique dans la couche de sol (exprimé par rapport à la concentration de polluant dans le sol)	$M.L^{-1}.T^{-1}$	$kg.m^{-1}.s^{-1}$	C ou E
d_{s_p}	Longueur de la zone de diffusion dans la couche de sol (cf. section 2.5.3.2.2.5)	L	m	E
L_{cc}	Epaisseur de la couche cornée	L	m	E
D_{cc}	Coefficient de diffusion dans la couche cornée (exprimé par rapport à la concentration volumique de polluant dans la peau) : cf. section 2.5.3.2.2.4	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
K_{cc_sol}	Coefficient de partage du polluant entre la couche cornée et le sol : cf. section 2.5.3.2.2.4	-	-	C ou E
MV_{s_p}	Masse volumique du sol déposé sur la peau	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E

2.5.3.2.2.3. ESTIMATION DU COEFFICIENT DE DIFFUSION MULTIPHASIQUE DANS LA COUCHE DE SOL

Le coefficient de diffusion multiphasique dans la couche de sol est exprimé par rapport à la concentration de polluant dans le sol (C_{s_p}), tel que :

$$DU_{s_p} = D_{es_p} \times \frac{C_{es_p}}{C_{s_p}} + D_{as_p} \times \frac{C_{as_p}}{C_{s_p}}$$ Équation 2.5.56

avec D_{es_p} : coefficient de diffusion dans l'eau du sol déposé sur la peau,

D_{as_p} : coefficient de diffusion dans l'air du sol déposé sur la peau,

C_{es_p} : concentration de polluant dans l'eau du sol déposé sur la peau,

C_{as_p} : concentration de polluant dans l'air du sol déposé sur la peau.

D_{es_p} et D_{as_p} sont définis en fonction des coefficients de diffusion du polluant dans l'eau (D_e) et dans l'air (D_a) et selon les relations données par Millington et Quirk (1961) :

$$D_{es_p} = D_e \times \frac{\theta_{s_p}^{\frac{10}{3}}}{n_{s_p}^2}$$ Équation 2.5.57

et $$D_{as_p} = D_a \times \frac{\alpha_{s_p}^{\frac{10}{3}}}{n_{s_p}^2}$$ Équation 2.5.58

avec θ_{s_p} : teneur en eau de la couche de sol déposée sur la peau,

α_{s_p} : teneur en air de la couche de sol déposée sur la peau,

n_{s_p} : porosité de la couche de sol déposée sur la peau.

Par ailleurs, d'après les équations 1.1.11 et 1.1.12 **(conditions : concentration de polluant dans le sol inférieure à la limite de solubilité, équilibre multiphasique atteint entre les différentes phases du sol)**,

$$\frac{C_{es_p}}{C_{s_p}} = \frac{1}{K_d + \frac{\theta_{s_p}}{MV_{s_p}} + \frac{\alpha_{s_p} \times H}{MV_{s_p} \times R \times T_{peau}}}$$

Équation 2.5.59

et

$$\frac{C_{as_p}}{C_{s_p}} = \frac{1}{\frac{K_d \times R \times T_{peau}}{H} + \frac{\theta_{s_p} \times R \times T_{peau}}{H \times MV_{s_p}} + \frac{\alpha_{s_p}}{MV_{s_p}}}$$

Équation 2.5.60

On peut donc écrire :

$$DU_{s_p} = \frac{1}{K_d + \frac{\theta_{s_p}}{MV_{s_p}} + \frac{\alpha_{s_p} \times H}{MV_{s_p} \times R \times T_{peau}}} \times \left(D_e \times \frac{\theta_{s_p}^{\frac{10}{3}}}{n_{s_p}^2} + D_a \times \frac{\alpha_{s_p}^{\frac{10}{3}}}{n_{s_p}^2} \times \frac{H}{R \times T_{peau}} \right)$$

Équation 2.5.61

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
DU_{s_p}	Coefficient de diffusion multiphasique dans la couche de sol déposée sur la peau (exprimé par rapport à la concentration de polluant dans le sol)	$M.L^{-1}.T^{-1}$	$kg.m^{-1}.s^{-1}$	C ou E
MV_{s_p}	Masse volumique du sol déposé sur la peau	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
D_a	Coefficient de diffusion du polluant dans l'air	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	E
D_e	Coefficient de diffusion du polluant dans l'eau	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	E
K_d	Coefficient de partage particules du sol - eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
θ_{s_p}	Teneur en eau de la couche de sol déposée sur la peau	-	-	E
α_{s_p}	Teneur en air de la couche de sol déposée sur la peau	-	-	E
n_{s_p}	Porosité de la couche de sol déposée sur la peau	-	-	C ou E
H	Constante de Henry	$L^2.M.T^{-2}.Mol^{-1}$	$Pa.m^3.mol^{-1}$	C ou E
R	Constante des gaz parfaits	$L^2.M.T^{-2}.K^{-1}.Mol^{-1}$	$8,31\ J.K^{-1}.mol^{-1}$	I
T_{peau}	Température à la surface de la peau	K	K	E

2.5.3.2.2.4. ESTIMATION DU COEFFICIENT DE DIFFUSION DANS LA COUCHE CORNEE (D_{CC}) ET DU COEFFICIENT DE PARTAGE COUCHE-CORNEE-SOL (K_{CC_SOL})

Estimation du coefficient de diffusion dans la peau

Dans la publication de 1990[12], McKone définit D_{cc} en assimilant la couche cornée à une couche composée de deux phases : une phase liquide et une phase solide correspondant aux cellules mortes. Il suppose également que la diffusion du polluant dans la phase solide est négligeable par rapport à la diffusion dans la phase liquide, ce qui le conduit à écrire le coefficient de diffusion dans la couche cornée (D_{cc}) selon l'expression suivante :

$$D_{cc} = D_{liq_cc} \times \frac{C_{liq_cc}}{C_{cc}} = D_{liq_cc} \times K_{liqc_cc}$$ Équation 2.5.62

avec C_{liq_cc} : concentration de polluant dans la phase liquide de la couche cornée,

C_{cc} : concentration volumique de polluant dans la couche cornée,

D_{liq_cc} : coefficient de diffusion du polluant dans la phase liquide de la couche cornée.

La phase liquide est supposée être constituée uniquement d'eau,

d'où $K_{liqc_cc} = \frac{C_{liq_cc}}{C_{cc}} = \frac{1}{MV_{cc} \times t_{lip_cc} \times K_{ow} \times 10^{-3} + \theta_{cc}}$ Équation 2.5.63

avec MV_{cc} : masse volumique de la couche cutanée,

t_{lip_cc} : teneur en lipides de la couche cutanée,

K_{ow} : coefficient de partage octanol-eau du polluant,

θ_{cc} : teneur en eau de la couche cornée.

Le coefficient de diffusion dans la phase liquide est estimé à partir de la relation de Millington et Quirk (1961) :

$$D_{liq_cc} = \frac{\theta_{cc}^{10/3}}{n_{cc}^2} \times D_e$$ Équation 2.5.64

avec D_e : coefficient de diffusion du polluant dans l'eau,

n_{cc} : porosité de la couche cornée.

---

[12] Dans cet article, l'équation fournie pour le coefficient de transfert du sol vers la peau (K_{sp}) n'est pas celle définie dans l'article de 1992 et retranscrite ici (cf. équation 2.5.55). L'expression fournie est équivalente à $K_{sp} = \frac{1}{\frac{L_{cc}}{D_{cc} \times MV_{s_p}} + \frac{d_{s_p}}{DU_{s_p}}}$, ce qui suppose que $\frac{C'_{cc}}{C'_{s_p}} = MV_{s_p}$ et ce qui, à notre sens, n'est pas correct.

La phase gazeuse dans la couche cornée étant supposée négligeable : n_{cc} = $\theta_{cc,}$

d'où $D_{liq_cc} = \theta_{cc}^{4/3} \times D_e$ Équation 2.5.65

L'expression donnée, par McKone dans l'article de 1990, pour le coefficient de diffusion dans la peau est donc la suivante :

$$D_{cc} = \frac{\theta_{cc}^{4/3} \times D_e}{MV_{cc} \times t_{lip_cc} \times K_{ow} \times 10^{-3} + \theta_{cc}}$$ Équation 2.5.66

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
D_{cc}	Coefficient de diffusion dans la couche cornée (exprimé par rapport à la concentration volumique de polluant dans la peau)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
θ_{cc}	Teneur en eau de la couche cornée	-	-	E
D_e	Coefficient de diffusion du polluant dans l'eau	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	E
t_{lip_cc}	Teneur en lipides de la couche cutanée	-	-	E
MV_{cc}	Masse volumique de la couche cutanée	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
K_{ow}	Coefficient de partage octanol-eau du polluant	$L^3.M^{-1}$	$cm^3.g^{-1}$	E

Remarque : le fait de ne pas prendre en compte la diffusion du polluant par les lipides tend vraisemblablement à minorer le transfert par diffusion dans la couche cornée.

Estimation du coefficient de partage couche cornée_sol ($K_{cc\ sol}$)

On peut écrire :

$$K_{cc_sol} = \frac{C'_{cc}}{MV_{s_p} \times C'_{s_p}} = \frac{C'_{cc}}{C'_{es_p}} \times \frac{C'_{es_p}}{MV_{s_p} \times C'_{s_p}}$$ Équation 2.5.67

Soit, d'après l'équation 1.1.11,

$$K_{cc_sol} = K_{cc_eau} \times \frac{1}{MV_{s_p} \times K_d + \theta_{s_p} + \frac{\alpha_{s_p} \times H}{R \times T_{peau}}}$$ Équation 2.5.68

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
K_{cc_sol}	Coefficient de partage du polluant entre la couche cornée et le sol	-	-	C ou E
K_{cc_eau}	Coefficient de partage du polluant entre la couche cornée et l'eau (cf. US EPA, 1992 et documents à venir sur les paramètres physico-chimiques des substances)	-	-	C ou E
MV_{s_p}	Masse volumique du sol déposé sur la peau	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
K_d	Coefficient de partage particules du sol - eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
θ_{s_p}	Teneur en eau de la couche de sol déposée sur la peau	-	-	E
α_{s_p}	Teneur en air de la couche de sol déposée sur la peau	-	-	E
H	Constante de Henry	$L^2.M.T^{-2}.Mol^{-1}$	$Pa.m^3.mol^{-1}$	C ou E
R	Constante des gaz parfaits	$L^2.M.T^{-2}.K^{-1}.Mol^{-1}$	$8,31\ J.K^{-1}.mol^{-1}$	I
T_{peau}	Température à la surface de la peau	K	K	E

Estimation du produit du coefficient de diffusion (D_{cc}) dans la peau et du coefficient de partage couche cornée_sol (K_{cc_sol})

Le produit de D_{cc} et de K_{cc_sol} est utilisé dans l'expression donnée pour le coefficient de transfert de masse du sol vers la peau (équation 2.5.55).

Dans leur publication de 1992, McKone et al. (1992) définissent le produit de D_{cc} et de K_{cc_sol} à partir du coefficient de perméabilité cutanée dans l'eau ($K_{p,cc}$) et du coefficient de partage du polluant entre les particules du sol et l'eau (K_d).

Les auteurs considèrent que lors des essais expérimentaux réalisés pour mesurer le coefficient de perméabilité cutanée d'un polluant dans l'eau, il existe une couche limite entre la solution contaminée par le polluant testé et l'échantillon de peau, compte-tenu des conditions stagnantes propres à ce type d'essai. Le coefficient de perméabilité cutanée mesuré ($K_{p,cc}^{mes}$) correspond alors à l'inverse de deux résistances, celle de la couche limite à la surface de la peau et celle de la peau :

$$K_{p,cc}^{mes} = \frac{1}{\frac{d_e}{D_e} + \frac{L_{cc}}{K_{cc_eau} \times D_{cc}}}$$ Équation 2.5.69

McKone et al. (1992) établissent aussi une relation empirique pour $K_{p,cc}^{mes}$ à partir de la mesure expérimentale du coefficient de perméabilité de 51 substances organiques, ayant une masse molaire comprise entre 18 et 230 $g.mol^{-1}$. Ils obtiennent alors la relation suivante :

$$K_{p,cc}^{mes\,*} = \frac{1}{M^{0,6} \times \left(0,33 + \frac{L_{cc}}{2,4.10^{-6} + 3.10^{-5} \times K_{ow}^{0,8}} \right)}$$ Équation 2.5.70

avec $K_{p,cc}^{mes\,*}$: coefficient de perméabilité cutané exprimé en $cm^2.h^{-1}$.

Par identification entre les équations 2.5.69 et 2.5.70, ils obtiennent :

$$D_{cc}^{*} = \frac{2{,}4.10^{-6} + 3.10^{-5} \times K_{ow}^{0,8}}{M^{0,6} \times K_{cc_eau}} \qquad \text{Équation 2.5.71}$$

avec D_{cc}^{*} : coefficient de diffusion dans la couche cornée exprimé en $cm^2.h^{-1}$,

soit $$D_{cc} = \frac{2{,}4.10^{-6} + 3.10^{-5} \times K_{ow}^{0,8}}{M^{0,6} \times K_{cc_eau}} \times \frac{10^{-4}}{3600} \qquad \text{Équation 2.5.72}$$

avec D_{cc} : coefficient de diffusion dans la couche cornée exprimé en $m^2.s^{-1}$.

D'après les équations 2.5.68 et 2.5.72, on peut alors écrire :

$$D_{cc} \times MV_{s_p} \times K_{cc_sol} = \frac{(2{,}4.10^{-6} + 3.10^{-5} \times K_{ow}^{0,8}) \times 2{,}78.10^{-8}}{M^{0,6} \times \left(K_d + \frac{\theta_{s_p}}{MV_{s_p}} + \frac{\alpha_{s_p} \times H}{MV_{s_p} \times R \times T_{peau}} \right)} \qquad \text{Équation 2.5.73}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
D_{cc}	Coefficient de diffusion dans la couche cornée (exprimé par rapport à la concentration volumique totale de polluant dans la peau)	$L^2.T^{-1}$	$m^2.s^{-1}$	C ou E
K_{cc_sol}	Coefficient de partage du polluant entre la couche cornée et le sol	-	-	C ou E
M	Masse molaire du polluant	$M.Mol^{-1}$	$g.mol^{-1}$	E
MV_{s_p}	Masse volumique du sol déposé sur la peau	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E
K_d	Coefficient de partage particules du sol - eau du sol	$L^3.M^{-1}$	$m^3.kg^{-1}$	C ou E
θ_{s_p}	Teneur en eau de la couche de sol déposée sur la peau	-	-	E
α_{s_p}	Teneur en air de la couche de sol déposée sur la peau	-	-	E
H	Constante de Henry	$L^2.M.T^{-2}.Mol^{-1}$	$Pa.m^3.mol^{-1}$	C ou E
R	Constante des gaz parfaits	$L^2.M.T^{-2}.K^{-1}.Mol^{-1}$	$8{,}31\ J.K^{-1}.mol^{-1}$	I
T_{peau}	Température à la surface de la peau	K	K	E
K_{ow}	Coefficient de partage octanol-eau du polluant	$L^3.M^{-1}$	$cm^3.g^{-1}$	E

Remarque : la relation 2.5.73, issue de la publication de McKone et al. (1992), n'est a priori pas valide pour les substances de masse molaire supérieure à 230 $g.mol^{-1}$. Au-delà, des mesures expérimentales de $K_{p,cc}$ peuvent être utilisées pour estimer le produit D_{cc} x K_{cc_sol}. Mais comme le montrent les équations 2.5.55 et 2.5.69, si $K_{p,cc}$ est considéré comme égal à D_{cc} x K_{cc_eau}/ L_{cc}, alors le coefficient de transfert de masse du sol vers la peau (K_{ps}) pourra être sous-estimé.

2.5.3.2.2.5. LONGUEUR DE LA ZONE DE DIFFUSION DANS LA COUCHE DE SOL

McKone et al. (1992) définissent dans leur modèle la longueur de diffusion du polluant dans la couche de sol vers la peau d'une part, et la longueur de diffusion du polluant dans la couche de sol vers la couche limite d'air d'autre part, comme égale à la moitié de l'épaisseur de la couche de sol.

L'épaisseur de la couche de sol pouvant être définie en fonction de la quantité de sol déposée sur la peau (Q_{sol_peau}) et de la masse volumique du sol, on a :

$$d_{s_p} = \frac{Q_{sol_peau}}{2 \times MV_{s_p}}$$ Équation 2.5.74

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
d_{s_p}	Longueur de la zone de diffusion dans la couche de sol	L	m	C ou E
Q_{sol_peau}	Masse de sol déposée sur la peau par unité de surface (exprimée en masse sèche)	$M.L^{-2}$	$kg.m^{-2}$	E
MV_{s_p}	Masse volumique du sol déposé sur la peau	$M.L^{-3}$	$kg.m^{-3}$	E

Remarque : les équations de la section 2.5.3.2.2 et des sous-sections correspondantes sont développées en fonction de la concentration massique de polluant dans le sol, tandis que celles de McKone (1990) et McKone et al. (1992) sont données en fonction de la concentration volumique du polluant dans le sol. C'est pourquoi, les expressions développées ici pour le coefficient de transfert de masse du sol vers la peau (K_{sp}), pour le coefficient de transfert de masse du sol vers l'air (K_{sa}) et pour le coefficient de diffusion multiphasique dans le sol (DU_{s_p}) sont identiques aux expressions de McKone (1990) et McKone et al. (1992) à un facteur MV_{s_p} près (les expressions données ci-dessus sont égales à celles des publications multipliées par la masse volumique du sol, MV_{s_p}).

2.5.3.2.3. AVANTAGES ET LIMITES DES APPROCHES BASEES SUR LE FLUX DE TRANSFERT

L'approche développée dans la section 2.5.3.2.2 et celle présentée dans le document provisoire de l'US EPA de 1992 ne sont pas recommandées par cet organisme et ne sont pas reprises dans le document du programme Superfund pour l'évaluation et la gestion des sites pollués de 2004, car les estimations de « partition des substances à partir des sols » sont considérées comme insuffisamment développées.

Pourtant ces deux approches, l'une utilisant le coefficient de perméabilité cutanée du polluant dans le sol (K_p^{sol}) et l'autre, le transfert de masse du polluant du sol vers la peau (K_{ps}), présentent un avantage important par rapport à la méthode de calcul basée sur le taux d'absorption : K_p^{sol} et K_{ps} restent constants quand la quantité de sol déposée sur la peau ou la concentration dans le sol varie, ce qui n'est pas le cas pour le taux d'absorption.

Bien que basée sur la représentation mathématique du transfert par diffusion du polluant à travers la peau, ces modèles ne tiennent compte en revanche que du transfert de polluant dans la couche cornée. Contrairement au modèle développé pour l'exposition à partir d'une eau contaminée, la résistance au transfert liée à l'épiderme viable n'est pas prise en compte. Ceci tend à majorer la dose de polluant effectivement absorbée pour les substances lipophiles.

La phase pendant laquelle la quantité de polluant entrant dans la couche cornée est supérieure à la quantité en sortant n'est pas non plus considérée. McKone et al. justifient ce parti-pris par :

- le fait que la couche cutanée est moins hydratée et donc moins épaisse lorsqu'elle est en contact avec un sol que lorsqu'elle est en contact avec de l'eau. McKone et al. estiment que τ_{lag} ($=\frac{L_{cc}^2}{6 \times D_{cc}}$) est dans ce cas environ inférieur de 1/3 aux valeurs obtenues dans le cas d'un contact avec de l'eau ;
- le fait que les temps de contact avec un sol contaminé sont généralement beaucoup plus longs que ceux où il y a contact avec une eau contaminée, les particules de sol étant supposées rester sur la peau jusqu'au prochain lavage ;
- des essais de calcul ayant montré que la prise en compte de cette période ou non avait peu d'effet sur la dose de polluant absorbée, estimée pour des durées de contact supérieures à une heure.

McKone reconnaît qu'il existe peu de données sur l'absorption cutanée à partir d'une matrice sol pour tester ces modèles. Les simulations réalisées par Bursmater et Maxwell (1991) à l'aide du modèle de McKone (1990) donnent des estimations cohérentes par rapport aux mesures effectuées par Yang et al. (1989). Ainsi Bursmater et Maxwell ont déterminé, pour le benzo(a)pyrène, un taux d'absorption de 2% pour un dépôt de 10 mg/cm^2 de sol contaminé et une durée de contact de 12 heures, alors que Yang et al. avaient mesuré un taux d'absorption de 1,1% en conditions in vivo chez le rat, au bout de 24 heures d'exposition, pour un dépôt de 10 mg/cm^2 et un taux de 1,3% in vitro sur peau humaine, pour un dépôt de sol de 56 mg/cm^2 et 96 heures de contact. En revanche, les mesures effectuées par Wester et al. (1990) en conditions in vivo chez le singe rhésus témoignent de taux d'absorption beaucoup plus élevés (13,2% en moyenne pour un dépôt de 40 mg/cm^2 et 24 heures de contact). Compte-tenu du peu de données disponibles et de la variabilité de celles répertoriées, il est difficile en l'état de statuer sur les performances de ces modèles.

2.5.4. DOSES D'EXPOSITION LIEES AU CONTACT CUTANE

2.5.4.1. CALCUL DE LA DOSE D'EXPOSITION EXTERNE AU CONTACT DE LA PEAU

La dose d'exposition externe par contact cutané est donnée par :

$$E_{cc_ext} = \frac{Q_{pol_peau} \times A_{\exp}}{B_w} \qquad \text{Équation 2.5.75}$$

avec Q_{pol_peau} : quantité de polluant au contact de la peau par unité de surface,

A_{exp} : surface corporelle exposée,

B_w : masse corporelle de la cible.

Si le contact avec le polluant a lieu par le vecteur sol, la quantité de polluant au contact de la peau est donnée par :

$$Q_{pol_peau} = Q_{sol_peau} \times C_{s_p} \qquad \text{Équation 2.5.76}$$

avec Q_{sol_peau} : quantité de sol sur la peau par unité de surface,

C_s : concentration de polluant dans le sol déposé sur la peau.

Remarque : dans le cas d'un scénario de baignade dans une eau contaminée, il n'y a pas pour l'instant de méthode arrêtée pour définir la quantité de polluant au contact de la peau.

Sur la période d'exposition d_{exp} allant de T_1 à T_2, la dose d'exposition externe moyenne liée au contact cutané avec un polluant est calculée comme la moyenne des doses de polluant absorbée de T_1 à T_2. Si d_{exp} est discrétisée en n sous-périodes de durée Δt_i pour lesquelles la dose d'exposition $E_{cc_ext}(t_i)$ peut être considérée comme constante, on peut écrire :

$$\overline{E_{cc_ext}}(d_{\exp}) = \frac{\sum_{i=T_1}^{T_2} E_{cc_ext}(t_i) \times \Delta t_i}{T_2 - T_1} \qquad \text{Équation 2.5.77}$$

avec i : numéro d'itération (numéro de la sous-période considérée) entre 1 et n,

et $\sum_{i=1}^{n} \Delta t_i = T_2 - T_1$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\overline{E_{cc_ext}}(d_{\exp})$	Dose d'exposition externe moyenne sur la période d'exposition d_{exp}	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
$E_{cc_ext}(t_i)$	Dose d'exposition externe par contact cutané au temps t_i	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
Δt_i	Durée pendant laquelle la dose d'exposition est égale à $E_{cc_ext}(t_i)$	T	j	E
Q_{pol_peau}	Masse de polluant au contact de la peau par unité de surface	$M.L^{-2}$	$mg.m^{-2}$	E
Q_{sol_peau}	Masse de sol déposée sur la peau par unité de surface (exprimée en masse sèche, en cohérence avec C_{s_p})	$M.L^{-2}$	$kg.m^{-2}$	E
C_{s_p}	Concentration de polluant dans le sol déposé sur la peau	$M.M^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	C ou E
d_{exp}	Durée de la période d'exposition considérée	T	j	C ou E
T_1	Début de la période d'exposition	T	j	E
T_2	Fin de la période d'exposition	T	j	E
B_w	Masse corporelle de la cible	M	kg	E
A_{exp}	Surface corporelle exposée	L^2	m^2	E

2.5.4.2. CALCUL DE LA DOSE ABSORBEE PAR CONTACT CUTANE

La dose absorbée par contact cutané à l'occasion d'un évènement d'exposition de durée T_{cc}, lors duquel la surface corporelle A_{exp} est exposée, est donnée par :

$$E_{cc_abs}(T_{cc}) = \frac{DA_{\exp}(T_{cc}) \times A_{\exp}(T_{cc})}{B_w(T_{cc})}$$ Équation 2.5.78

Remarque : les équations 2.5.17, 2.5.18, 2.5.19, 2.5.20, 2.5.31 et 2.5.42 correspondent aux quantités de polluant absorbées lors de ou suite à chaque épisode où il y a contact avec une eau ou un sol contaminé. Plusieurs zones corporelles peuvent être exposées au même moment dans des conditions différentes. Dans ce cas, les produits des quantités de polluant absorbées au niveau de chaque zone par la surface de chacune de ces zones peuvent être additionnés. Par ailleurs, si plusieurs épisodes d'exposition (entrecoupés par des périodes sans exposition) ont lieu au cours d'une même journée, les quantités de polluant absorbées à l'occasion de chaque épisode doivent être estimées et additionnées pour obtenir la quantité totale absorbée pour cette journée d'exposition.

Sur la période d'exposition d_{exp} allant de T_1 à T_2, la dose d'exposition moyenne par contact cutané est calculée comme la moyenne des doses de polluant absorbée de T_1 à T_2. Si d_{exp} est discrétisée en n sous-périodes de durée Δt_i pour lesquelles la dose absorbée E_{cc} ($T_{cc,i}$) peut être considérée comme constante, on peut écrire :

$$\overline{E_{cc_abs}}(d_{\exp}) = \frac{\sum_{i=1}^{n} E_{cc_abs}(T_{cc,i}) \times \Delta t_i}{T_2 - T_1}$$ Équation 2.5.79

avec i : numéro d'itération (numéro de la sous-période considérée) entre 1 et n,

et $\sum_{i=1}^{n} \Delta t_i = T_2 - T_1$.

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
$\overline{E_{cc_abs}}(d_{\exp})$	Dose d'exposition moyenne absorbée sur la période d'exposition d_{exp}	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
$E_{cc_abs}(T_{cc,i})$	Dose d'exposition absorbée pour un évènement d'exposition par contact cutané de durée T_{cc} ayant lieu au temps t_i	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
Δt_i	Durée pendant laquelle la dose d'exposition est égale à $E_{cc_abs}(T_{cc,i})$	T	j	E
$DA_{exp}(T_{cc})$	Masse de polluant absorbée par contact cutané à partir de l'eau ou/et du sol pour une durée de contact T_{cc}	$M.L^{-2}$	$mg.m^{-2}$	C ou E
d_{exp}	Durée de la période d'exposition considérée	T	j	C ou E
T_1	Début de la période d'exposition	T	j	E
T_2	Fin de la période d'exposition	T	j	E
$B_w(T_{cc})$	Masse corporelle de la cible au moment de l'évènement d'exposition par contact cutané	M	kg	E
$A_{exp}(T_{cc})$	Surface corporelle exposée lors de l'évènement d'exposition cutanée	L^2	m^2	E

3. ESTIMATION DES NIVEAUX DE RISQUE

Les niveaux de risque sont calculés à partir des niveaux d'exposition et des valeurs toxicologiques de référence (VTR) correspondantes en termes de substance, de voie et de durée d'exposition.

Le choix des valeurs toxicologiques de référence dépasse le cadre de ce document. Pour cette problématique, le lecteur se reportera aux guides, rapports, circulaires et bases de données existantes[13].

Dans certains cas, des ajustements peuvent être réalisés sur le niveau d'exposition estimé, avant calcul du niveau de risque, pour une meilleure adéquation entre le niveau d'exposition et la valeur toxicologique de référence utilisée. Cela peut être pertinent pour estimer, par exemple, le niveau de risque lié à l'ingestion de lait maternel par un nourrisson. Si la valeur toxicologique disponible a été définie à partir de données chez l'adulte (sans prise en compte d'un facteur de sécurité correspondant aux différences de sensibilité individuelle) et si le taux d'absorption du polluant par le nourrisson est différent de celui de l'adulte, il peut être nécessaire d'ajuster la dose d'exposition du nourrisson[14] comme suit :

$$\overline{E_{lait_mat_eq}}(d_{\exp_nour}) = \frac{\overline{E_{lait_mat}}(d_{\exp_nour}) \times t_{abs_nour}}{t_{abs_adulte}} \qquad \text{Équation 3.1}$$

avec $\overline{E_{lait_mat_eq}}(d_{\exp_nour})$: dose d'exposition ajustée du nourrisson,

$\overline{E_{lait_mat}}(d_{\exp_nour})$: dose d'exposition moyenne ingérée par le nourrisson via le lait maternel sur la période d'exposition d_{exp_nour},

t_{abs_nour} : taux d'absorption du polluant chez le nourrisson,

t_{abs_adulte} : taux d'absorption du polluant chez l'adulte.

Ces pratiques, qui ne sont pas systématiques doivent, dans tous les cas, s'appuyer sur une expertise des données toxicologiques disponibles.

Le calcul du niveau de risque est présenté ci-dessous. Il est légèrement différent selon le type d'effet considéré (effet à seuil ou effet sans seuil).

---

[13] Il convient de noter qu'il n'existe pour l'heure que peu de valeurs toxicologiques relatives à la voie cutanée. En l'absence de valeurs, l'US EPA (1989) préconise, pour estimer le risque lié à la dose de polluant absorbée suite à un contact cutané avec un sol ou une eau contaminée d'utiliser les valeurs toxicologiques définies pour la voie orale après ajustement de celles-ci par le taux d'absorption orale. En réalité, la toxicité d'une substance dépend des mécanismes biologiques mis en jeu après son administration, et ceux-ci peuvent être différents selon la voie d'administration. A l'inverse de l'US EPA, la Direction Générale de la Santé, dans la circulaire n°2006-234 du 30/05/06, demande aux services déconcentrés chargés de donner leur avis sur les effets sanitaires des projets relevant d'une étude d'impact de veiller à ce que les pétitionnaires ne réalisent aucune transposition à la voie cutanée de VTR disponibles pour la voie orale ou respiratoire.

[14] Cette approche est utilisée par l'US EPA (1998) pour estimer l'exposition du nourrisson aux dioxines via l'ingestion de lait maternel

3.1. CALCUL DU NIVEAU DE RISQUE POUR LES EFFETS A SEUIL

Pour les effets à seuil, un quotient de danger est d'abord calculé pour chaque voie et chaque substance.

Pour la voie d'inhalation ou respiratoire, le quotient de danger (QD) est donné par :

$$QD = \frac{\overline{C_{inh}}(d_{\exp})}{VTR}$$ Équation 3.1.1

avec la valeur toxicologique de référence (VTR) exprimée en terme de concentration.

Pour la voie d'ingestion (ou orale) et la voie cutanée, le quotient de danger (QD) est donné par :

$$QD = \frac{\overline{E}(d_{\exp})}{VTR}$$ Équation 3.1.2

avec la valeur toxicologique de référence (VTR) exprimée en terme de dose

et $$\overline{E}(d_{\exp}) = \sum_j \overline{E_j}(d_{\exp})$$ Équation 3.1.3

avec $\overline{E_j}(d_{\exp})$: dose d'exposition orale liée au vecteur j, moyennée sur la période d'exposition d_{exp}

Dans les équations 3.1.1 à 3.1.3, la durée d'exposition d_{exp} à prendre en compte dépend du type d'effet considéré. Il peut s'agir d'effet aigu lié à des expositions de courte durée (de quelques secondes à quelques jours), d'effets subchroniques (pour des durées d'exposition de quelques jours à une année), d'effets chroniques (pour des expositions allant d'une année à la vie entière). Ainsi, d_{exp} doit correspondre à la plus faible durée pour laquelle l'effet étudié peut s'exprimer. Si le niveau d'exposition varie en fonction du temps, le niveau de risque doit alors être évalué sur la période d'exposition de durée d_{exp} où la concentration inhalée ou la dose d'exposition est la plus forte.

Dans le cas d'un site pollué qui n'est plus en activité (absence d'apport mais perte de polluant au cours du temps), l'exposition la plus élevée se situe au début de la période d'exposition considérée. A l'inverse dans le cas d'une installation en fonctionnement (et en l'absence d'autres sources), si les émissions de polluants et les conditions d'exposition sont constantes au cours du temps, l'exposition la plus élevée est obtenue à la fin de la période d'émission. De manière simplifiée, compte-tenu des incertitudes (sur la durée réelle de fonctionnement de l'installation, le caractère continu et constant des émissions, etc…), le niveau d'exposition pour l'estimation du risque chronique non cancérigène est parfois calculé au temps t où l'exposition est la plus élevée, et non sur une année entière.

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
QD	Quotient de danger	-	-	C
$\overline{C_{inh}}(d_{\exp})$	Concentration moyenne inhalée sur la période d'exposition d_{exp}	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C
$\overline{E}(d_{\exp})$	Dose d'exposition orale ou cutanée liée aux différents vecteurs, moyennée sur la période d'exposition d_{exp}	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
$\overline{E_j}(d_{\exp})$	Dose d'exposition orale liée au vecteur j, moyennée sur la période d'exposition d_{exp}	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
VTR	Valeur toxicologique de référence (exprimée en terme de concentration pour la voie d'inhalation et en terme de dose pour les voies orale et cutanée).	$M.L^{-3}$ ou $M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.m^{-3}$ ou $mg.kg^{-1}.j^{-1}$	E

En matière d'additivité, la règle générale consiste à additionner les quotients de danger des substances provoquant le même effet sur le même organe, par le même mécanisme biologique. Pour de plus amples informations sur ces règles et les pratiques en la matière, le lecteur pourra également se reporter aux guides, rapports et circulaires existantes.

3.2. CALCUL DU NIVEAU DE RISQUE POUR LES EFFETS SANS SEUIL

Pour les effets sans seuil, le niveau de risque calculé correspond à la probabilité pour un individu de développer l'effet associé à la substance. Pour les substances cancérigènes dont l'effet est considéré sans seuil, cette probabilité est calculée sur la vie entière. Les niveaux d'exposition sont ainsi rapportés à la vie entière.

Pour la voie d'inhalation ou respiratoire, la probabilité de risque individuel (RI) de cancer est donnée par :

$$RI = \frac{\overline{C_{inh}}(d_{\exp}) \times d_{\exp}}{T_m} \times VTR \qquad \text{Équation 3.2.1}$$

Pour la voie d'ingestion (ou orale) et la voie cutanée, la probabilité de risque individuel de cancer est donnée par :

$$RI = \frac{\overline{E}(d_{\exp}) \times d_{\exp}}{T_m} \times VTR \qquad \text{Équation 3.2.2}$$

Symbole	Paramètres	Dimensions	Unités	Statut
RI	Probabilité de risque individuel	-	-	C
$\overline{C_{inh}}(d_{\exp})$	Concentration moyenne inhalée sur la durée de l'exposition d_{exp}	$M.L^{-3}$	$mg.m^{-3}$	C
$\overline{E}(d_{\exp})$	Dose d'exposition orale ou cutanée liée aux différents vecteurs, moyennée sur la période d'exposition d_{exp} (cf. équation 3.1.3)	$M.M^{-1}.T^{-1}$	$mg.kg^{-1}.j^{-1}$	C
d_{exp}	Durée totale de l'exposition	C	j	E
T_m	Période de temps sur laquelle l'exposition est rapportée. Pour les substances cancérigènes, une durée de 70 ans est conventionnellement prise en compte	C	j	I
VTR	Valeur toxicologique de référence, appelée excès de risque unitaire (correspondant à l'inverse d'une concentration dans le cas de la voie d'inhalation et à l'inverse d'une dose dans le cas des voies orale et cutanée)	$(M.L^{-3})^{-1}$ ou $(M.M^{-1}.T^{-1})^{-1}$	$(mg.m^{-3})^{-1}$ ou $(mg.kg^{-1}.j^{-1})^{-1}$	E

Une probabilité de risque global est ensuite calculée en sommant les probabilités de risques individuels liés aux différentes substances cancérigènes sans seuil d'effet, aux différentes voies d'exposition et aux différentes durées d'exposition.

Ce calcul correspond à une approximation, car il ne prend pas en compte la probabilité conjointe pour un individu de développer un cancer du fait de l'exposition à plusieurs polluants. Cette approximation reste valable pour des probabilités de risque individuel faibles (<0,01).

Remarque : Dans le cas d'une étude portant sur une source de contamination donnée, on parle d'excès de risque individuel (à partir du niveau d'exposition attribuable à cette source), représenté par le sigle ERI, qui correspond à la probabilité supplémentaire pour un individu de développer un effet cancérigène à cause de cette source par rapport à l'exposition de fond.

4. DISTINCTION ENTRE CONCENTRATIONS, DOSES, RISQUES ATTRIBUABLES A UNE OU PLUSIEURS SOURCES DE CONTAMINATION ET CONCENTRATIONS, DOSES ET RISQUES TOTAUX

Selon les objectifs de l'étude, l'évaluateur de risque peut chercher à estimer les concentrations dans les milieux, les niveaux d'exposition et les niveaux de risques attribuables à une source précise ou les concentrations, les niveaux d'exposition et les niveaux de risques totaux auxquels sont soumis des individus.

Ainsi, pour une évaluation de risques sanitaires menée dans le cadre d'une étude d'impact, on cherche à définir les concentrations, les niveaux d'exposition et les niveaux de risques attribuables aux émissions de l'installation étudiée. Mais, on peut aussi être amené à calculer les concentrations, les niveaux d'exposition et les niveaux de risques totaux, pour estimer la part de ces indicateurs qui est attribuable à cette installation. Le calcul des concentrations et des niveaux d'exposition totaux peut aussi être effectué pour les comparer aux données mesurées.

L'ensemble des équations présentées ci-dessus est applicable pour le calcul des concentrations, des niveaux d'exposition et des risques attribuables à une ou plusieurs sources de contamination. Ces équations peuvent aussi servir pour le calcul des concentrations, des niveaux d'exposition et des risques totaux. Toutefois, les concentrations totales dans les milieux environnementaux, tel que le sol, l'air, les eaux souterraines et les eaux superficielles ne sont pas calculées directement à partir des équations de la section 1. Elles sont en effet calculées comme la somme des concentrations attribuables aux sources locales (estimées à partir des équations de la section 1) et des concentrations de bruit de fond.

A titre d'exemple, dans le cas d'une étude portant sur les émissions atmosphériques d'une cheminée :

- la concentration dans le sol attribuable à l'installation sera calculée à l'aide des dépôts atmosphériques de polluant dus aux émissions de la cheminée ;
- la concentration de polluant dans les végétaux attribuable à l'installation sera calculée à partir de la concentration de polluant dans le sol (estimée comme indiquée ci-dessus, sans prise en compte du bruit de fond), des dépôts de particules et de la concentration de polluant dans l'air attribuables à l'installation ;
- les niveaux d'exposition et les niveaux de risques attribuables à l'installation seront calculés à partir des concentrations attribuables à l'installation dans les différents milieux d'exposition.
- les concentrations totales de polluant dans les produits d'origine végétale seront calculées à l'aide des équations de transfert présentées dans la section 1.6 et des concentrations totales de polluant dans l'air, le sol et éventuellement les eaux ;

- les niveaux d'exposition et les risques totaux seront calculés à partir des concentrations totales dans les différents milieux d'exposition des individus (sol, air, eaux, produits d'origine végétale et animale).

  Les indicateurs ainsi obtenus correspondront aux niveaux d'exposition et de risque totaux liés au site ou à la zone d'impact de la source de contamination étudiée. En ajoutant à ces derniers les niveaux d'exposition et de risque liés aux vecteurs d'exposition situés en dehors du site ou de la zone d'impact de la source étudiée (comme les aliments consommés mais produits en dehors de cette zone), on obtiendra respectivement les niveaux d'exposition et de risque totaux auxquels les individus sont soumis.

En revanche, les concentrations de polluant dans le sol, l'air extérieur, l'air intérieur, les eaux souterraines et superficielles attribuables à l'installation devront être calculées à partir des équations décrites dans les sections 1.1 à 1.5 et des concentrations attribuables à cette installation dans les milieux d'apport. Puis, on ajoutera aux concentrations de polluant attribuables, ainsi obtenues dans le sol, l'air extérieur…, les concentrations de polluant dans ces milieux liées au bruit de fond.

Dans l'exemple précédent correspondant aux émissions atmosphériques d'une cheminée, le calcul de la concentration totale de polluant dans le sol nécessite d'estimer la concentration dans le sol due aux retombées atmosphériques de la cheminée, et d'y ajouter la concentration de bruit de fond dans le sol. En effet, la prise en compte des dépôts atmosphériques totaux sur le sol, incluant ceux liées aux sources ubiquitaires, ne permettrait pas de connaître la concentration totale de polluant dans le sol et l'ajout de la concentration de bruit de fond dans le sol, à la concentration calculée à partir des dépôts totaux sur le sol, conduirait à faire un double compte de la concentration de bruit de fond dans le sol attribuable au bruit de fond dans l'air.

Même si pour estimer la quantité de polluant allant d'un milieu amont vers un milieu aval par transport convectif ou diffusif, la concentration totale de polluant dans ces deux milieux devrait être considérée, l'approche décrite ici a été retenue, car la mobilité d'un composé chimique peut varier en fonction de son origine (origine géochimique, anthropique) ou de l'âge de la contamination. Or, il est difficile sur un site d'avoir des informations différenciées sur la mobilité des différentes sources de contamination et d'en tenir compte pour faire des bilans de masse totale des substances chimiques. Avec l'approche retenue, on notera que la part de polluant attribuable à la source étudiée perdue par un milieu peut être surestimée, car la part de polluant liée au bruit de fond peut participer aux transferts, alors que la mobilité d'une substance est globalement limitée par la pression de vapeur et la solubilité de cette substance. Toutefois, cet élément de surestimation doit être relativisé par rapport aux incertitudes liées à l'hypothèse d'équilibre instantané entre les différentes phases d'un milieu ou à la définition des coefficients de partage de la substance entre phase solide et liquide. Par ailleurs, les phénomènes de perte dans les ERS classiques ne sont généralement pris en compte que pour analyser les incertitudes et l'ampleur des variations possibles sur les résultats.

5. BIBLIOGRAPHIE

ADEME (Agence pour l'Environnement et la Maîtrise de l'Energie), BRGM (Bureau de Recherches Géologiques et Minières, Guide pour le dimensionnement et la mise en œuvre des couvertures de sites de stockage de déchets ménagers et assimilés, Référence ADEME : 4082, ISBN : 2-86817-622-4, 2001

AFSSA (Agence Française de Sécurité Sanitaire des Aliments), 2000, Dioxines : données de contamination et d'exposition de la population française.

Alberta Environment, Evaluation of computer models for predicting the fate and transport of hydrocarbons in soil and groundwater, MDH,Engineered Solutions Corporation, 2005

Aziz C.E., Newell C.J., Gonzales J.R., Haas P.E., Clement T.P., Sun Y., BIOCHLO.R Natural Attenuation Decision Support System, User's Manual Version 1.0, U.S. EPA, Office of Research and Development, EPA/600/R-00/008, 2000, Washington D.C.

Berk K, Dross A., Mathar W., PCDD and PCDF exposure levels in humans in Germany, Environmental Health Perspectives, 102(Suppl.1) : 211-217, 1994

Bidleman T., Atmospheric processes, Environmental science and technology, Vol. 22, n°4, pp. 361-367, 1988

Bonazountas M., Wagner J.M. , SESOIL : A Seasonal Soil compartment model, Draft report, Office of Toxic Substances, US EPA, PB86112406, 1984

Bonnard R., Facteurs de variation en évaluation des risques pour la santé liés aux sites et sols pollués, Déchets –Sciences et Techniques, n°8 : 23-30, 1997

Bunge A., Cleek R., A new method for estimating dermal absorption from chemical exposure. 1. Effect of molecular weight and octanol-water partitioning, Pharmaceutical Research, Vol. 12, n°1, 1995

Bursmaster D., Maxwell N, Time and loading – dependence in the McKone model for dermal uptake of organic chemicals from a soil matrix, Risk analysis, 11: 491-497, 1991

BRGM (Bureau de Recherches Géologiques et Minières), Guyonnet D., Un modèle analytique pour estimer l'impact de sources de pollution sur les eaux souterraines, Guide d'utilisation, RP-51039-FR, MISP_v1., 2001

BRGM (Bureau de Recherches Géologiques et Minières), Guyonnet D., An analytical model for estimating impact of pollutant sources on groundwater, User's guide. Final report, RP-56153-FR - MISP_v1, 2008

Caboche J., Validation d'un test de mesure de bioaccessibilité. Application à 4 éléments traces métalliques dans les sols : As, Cd, Pb et Sb. Thèse de doctorat de l'INPL, 2009

CalEPA (California, Environmental Protection Agency), Air Resources Board, HARP, User's guide, Software for emission inventory database management, air dispersion modeling analyses, and health risk assessment, 2003

Chapelle F., Widdowson M., Brauner J., Mendez E., Casey C., Methodology for estimating times of remediation associated with monitored natural attenuation: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 03-4057, 2003

Chow V.T., handbook of applied hydrology, Mac Graw Hill Book Company, New York, 1964

Cleek R., Bunge A., A new method for estimating dermal absorption from chemical exposure. 1. General approach, Pharmaceutical Research, Vol. 10, n°4, 1993

Clement T., Generalized solution to multispecies transport equations coupled with a first-order reaction network, Water Resour. Res., 37(1), 157-164, 2001

Côme J.M., Quintard M.,, Schäfer G., Mosé R., Delaplace P. ; Haeseler F., Modélisation du devenir des composés organo-chlorés aliphatiques dans les aquifères, Guide méthodologique ADEME, Programme R&D MACAOH (Modélisation, Atténuation, caractérisation dans les aquifères des Organo-Halogénés), 2007

Cowherd C., Muleski P., Engelhart P., Gillette D., Rapid assessment of exposure to particulate emissions from surface contamination, Office of Health and Environmental Assessment, US EPA, EPA/600/8-85-002, 1985

Delage P., Cui YJ, L'eau dans les sols non saturés, Techniques de l'ingénieur, C301

De Marsily, Cours d'hydrogéologie en ligne, 2007,
www.e-sige.ensmp.fr/cms/libre/hydro_sols_pollues/hydroGeneral/_lfrFR/

Direction Générale de la Santé, Circulaire DGS/SD.7B n°2006-234 du 30/05/06 relative aux modalités de sélection des substances chimiques et de choix des valeurs toxicologiques de référence pour mener les évaluations des risques sanitaires dans le cadre des études d'impact

Domenico P.A., Robbins G. A., A new method of contaminant plume analysis. Ground Water, 23 (4), 476-485, 1985

Domenico P.A., An analytical model for multidimensional transport of a decaying contaminant species. Journal of Hydrology, 91, 49-58, 1987

Doneker R.L. and Jirka G.H., "CORMIX User Manual: A Hydrodynamic Mixing Zone Model and Decision Support System for Pollutant Discharges into Surface Waters", EPA-823-K-07-001, 2007

Droppo J.G., Buck J.W., The Multimedia Environmental Pollutant Assessment System (MEPAS): Atmospheric Pathway Formulations. PNNL-11080/UC-602, 630, Pacific Northwest National Laboratory, Richland, Washington, 1996.

FAO (Food and Agricultural organization), Crop evapotranspiration – Guidelines for computing crop water requirements, Series titles : FAO irrigation and drainage papers – 56, 1998

Gillette D.A., Production of dust that may be carried great distances. In desert dust: Origin, characteristics, and effect on man, edited by Troy Pewe. Geological Survey of American Special Paper 186, 11-26, 1981

GCNC (Groupe Chimique Nord-Cotentin), Impact des rejets chimiques, Vol. 2, annexe 3 : Adaptation du modèle du programme de calcul du groupe radioécologique Nord-Cotentin-volet radiologique au volet chimique, 2002

GCNC (Groupe Chimique Nord-Cotentin), Impact des rejets chimiques, Vol. 2, annexe 4 : Bilan des informations disponibles sur les paramètres agronomiques pour le groupe radioécologique Nord-Cotentin, 2002

GCNC (Groupe Chimique Nord-Cotentin), Impact des rejets chimiques, Vol. 2, annexe 5 : Adaptation du modèle de transfert GT3-GRNC dans un écosystème agricole aux polluants inorganiques non radioactifs, Paramètres de transfert, 2002

GRNC (Groupe Radioécologique Nord-Cotentin), Analyse de sensibilité et d'incertitude sur le risque de leucémie attribuable aux installations nucléaires du Nord-Cotentin, annexe 1 : Distributions de probabilité des paramètres, 2002

Groundwater Services Inc., Connor J., Bowers R., Nevin J.P., Fisher R.T., Guidance manual for RBCA Tool Kit for chemical releases, 1998

Guyonnet D., Neville C., Dimensionless analysis of two analytical solutions for 3-D solute transport in groundwater. Journal of Contaminant Hydrology, 75, 141-153, 2004

Hazebrouck H., Gay G., Hulot C., Vapor emissions from contaminated soils into buildings : developments of the VOLAVOIL model for a multilayer soil, Consoil 2005, Theme C : Site characterization & Risk assessment

Harner, Bidleman, Octanol-air coefficient for describing particle/gas partitioning of aromatic compounds in urban air, Environmental science and technology, 32: 1494-1502, 1998

IAEA (International Atomic Energy Agency). Division of Radiation and Waste Safety. BIOMASS (Biosphere Modelling and Assessment. Example reference biosphere 2A : Agricultural well, constant biosphere. Draft TECDOC. BIOMASS/T1/WD08. TIC: 249456, 2000

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Bonnard, R., Les modèles multimédia pour l'évaluation des expositions liées aux émissions atmosphériques des installations classées, DRC-01-255584-ERSA-RBn-n°445, 2001

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Heuzé G., Evaluation Détaillée des Risques, Fiches techniques de présentation des modèles d'exposition aux sols pollués, HESP (Human Exposure to Soil Pollutants, DRC-02-41200/DESP-R-30a, 2002a

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Lévèque S., Evaluation Détaillée des Risques, Fiches techniques de présentation des modèles d'exposition aux sols pollués, Soil Screening Guidance, DRC-02-41200/DESP-R-31a, 2002b

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Bonnard R., Evaluation Détaillée des Risques, Fiches techniques de présentation des modèles d'exposition aux sols pollués, RCBC Tool Kit, DRC-02-41200/DESP-R-32a, 2002c

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Denys S., Modèles de transfert sol-plante des polluants organiques, Tome 1, DRC-02-41200/DESP-R21a, 2002d

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Evaluation des risques sanitaires dans les études d'impact des Installations Classées pour la Protection de l'Environnement, Substances chimiques, 2003

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Bonnard, R., Le logiciel de calcul CalTOX, DRC-04-45959-ERSA-RBn-n°97, 2004a

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Bonnard, R., Paramètres physico-chimiques et coefficients de transfert des dioxines pour l'évaluation des risques, DRC-03-45959/ERSA-n°272-RBn, 2004b

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Bonnard R., Impact des incertitudes liées aux coefficients de transfert dans les évaluations de risque sanitaire, DRC/ERSA/RBn-67645/204, 2005a

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Hazebrouck B., Modélisation du transfert de vapeurs du sous-sol ou du vide sanitaire vers l'air intérieur, DRC-05-57278-DESP/R03a, 2005b

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Hazebrouck B., Présentation, discussion et modélisation de l'équilibre multiphasique dans le sol, Version 1, DRC-05-57278-DESP/R01a, à paraître

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Hazebrouck B., Présentation, discussion et développement des modélisations HESP, CSOIL 94 et VOLASOIL, d'émissions de vapeurs dans des bâtiments, DRC-05-57281-DESP/R01a, à paraître

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Bonnard R., Etude d'intercomparaison de modèles multimédia, DRC/ERSA/RBn-45959/25, 2006

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Bonnard, R., Le logiciel de calcul CalTOX 4.0, DRC-07-86835-16788A, 2007a

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Quiot F., Recommandations relatives au choix entre modèle analytique et numérique dans le cadre de l'étude du transfert de polluants dans les sols et les eaux souterraines, DRC-08-86031-00620A, 2008a

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Bonnard R., Améliorer les méthodes d'estimation prospective de l'exposition aux polluants des populations autour d'une Installation Classée Pour l'Environnement, DRC-08-57041-14967A, 2008b

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Déléry L., Inventaire des données de bruit de fond dans l'air ambiant, l'air intérieur, les eaux de surface et les produits destinées à l'alimentation humaine en France, DRC-08-94882-15772A

INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques), Denys S., Hypothèses et recommandation pour l'intégration de la bioaccessibilité de l'arsenic et du cadmium dans le calcul de la dose d'exposition par ingestion de terre contaminée, DRC-10-111435-02893A, 2010.

InVS (Institut de Veille Sanitaire), Etude sur les dioxines et les furanes dans le lait maternel en France, 2000

IPSN (Institut de Protection et de Sûreté Nucléaire), Etude bibliographique et choix des données par défaut pour les logiciels de calcul d'impact dosimétriques, Note technique IPSN/DPHD/SEGR/SAER 97-25 version 3, 1999

Johnson P., Ettingher R., Heuristic model for predicting the intrusion rate of contamant vapors into buildings, Environmental Science and technology, Volume 25, pp1445-1452, 1991

Jones N., Clement T., Hansen C., A three-dimensional analytical tool for modeling reactive transport. Ground Water. Volume 44, 4, 613-617, 2006

Junge C., Fate of pollutants in the air and water environments, Part 1 ; Suffet I., Wiley, pp. 7-26, 1977

Jury W., Spencer W., Farmer W., Use of model for assessing relative volatility, mobility, and persistence of pesticides and other trace organics in soil systems, Hazard assessment of chemicals, Current development, Vol.2, Academic Press, pp1-43, 1983

Jury W., Russo D., Streile G., El Abd H., Behavior assessment model for trace organics in soils: II. Chemical classifications and parameter sensitivity, Journal of environmental quality, Vol. 13, n°4:567-572, 1984

Jury W., Russo D., Streile G., El Abd H., Evaluation of volatilization by organic chemicals residing below the soil surface, Water resources res., Vol. 26, n°1:13-20, 1990

Kryshev II, Radioecological consequences of the Chernobyl accident. Nuclear society international series: radioecological aspects of nuclear power, Nuclear Society International, 1992

LCSQA (Laboratoire de contrôle de la qualité de l'air), Rouïl L., Wroblewski A., Guide méthodologique pour la modélisation déterministe. Rapport LCSQA, http://www.lcsqa.org/thematique/traitements-numeriques/modelisation/guide-methodologique-pour-la-modelisation-determinist, 2002

Lyman W., Reehl W., Rosenblatt D., Handbook of chemical property estimation methods, 1990

Magnan JP, L'eau dans le sol, Techniques de l'ingénieur, C212

Maraqa M., Munjed A., Retardation of nonlinearly sorbed solutes in porous media. J ENVIRON ENG-ASCE 133, 12, 1080-1087, 2007

Martin-Hayden J., Robbins G.A., Plume distortion and apparent attenuation due to concentration averaging in monitoring wells. Ground Water, 35 (2), 339-346, 1997

Marshall J., Drag Measurements in Roughness Arrays of Varying Density and Distribution." Agric. Meteorol. 8:269-292, 1971

MATE (Ministère de l'aménagement du Territoire et de l'Environnement), INERIS (Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques) et al., Gestion des sites pollués, Partie V : L'évaluation détaillée des risques pour la santé, 2000

McKone T.E., Dermal uptake of organic chemicals from a soil matrix, Risk analysis, 10(3): 407-419, 1990

McKone T.E., Howd R., Estimating dermal uptake of nonionic chemicals from water and soil: I. Unified fugacity-based models for risk assessments,, Risk analysis, Vol. 12, 4 : 543-557, 1992

McKone T.E., Linking a PBPK model for chloroform with measured breath concentrations in showers : implications for dermal exposure models, Journal of exposure analysis and environmental epidemiology, Vol., 3, n°3, 339-365, 1993

McKone T.E., Enoch K.G. CalTOX, A multimedia total exposure model spreadsheet user's guide version 4.0. Lawrence Berkeley National Laboratory report LBNL-47399, August 2002. http://eetd.lbl.gov/ied/ERA/

MEDAD (Ministère de l'Ecologie et du Développement Durable), Circulaire du 8 Février 2007 sur les installations classées - Prévention de la pollution des sols - Gestion des sols pollués

MEDAD (Ministère de l'Ecologie et du Développement Durable), Direction de la Prévention des Pollutions er des Risques, Circulaire du 15 Mai 2007, Installations classées – Substances toxiques : Retour d'expérience sur la méthodologie d'évaluation des risques sanitaires - BPSPR/2007 – 128/VD

MEDAD (Ministère de l'Ecologie et du Développement Durable), Schéma conceptuel et modèle de fonctionnement, version 0, 2007c, www.sites-pollues.developpement-durable.gouv.fr /OutilsMethodologiquesOutils.asp

MEDAD (Ministère de l'Ecologie et du Développement Durable), La démarche d'Analyses des Risques Résiduels, version 0, 2007d, www.sites-pollues.developpement-durable.gouv.fr /OutilsMethodologiquesOutils.asp

Mendez E., Widdowson M., Brauner J., Chapelle F., Casey C., Natural Attenuation Software (NAS): A computer program for estimating remediation times of contaminated groundwater, In: G. Latini, G., 2004

Millington R. J., Quirk J. M., Permeability of porous solids. Trans. Faraday Soc. 57, 1200-1207, 1961.

Müller H, Prohl G., ECOSYS-87, A dynamic model for assessing radiological consequences of nuclear accidents, Health physics 64(3): 232-252, 1993

Passerini, Brebbia C. (Eds.), Development and Application of Computer Techniques to Environmental Studies X, ISBN: 1-85312-718-3, 185-194, ENVIROSOFT 2004

PNNL (Pacific Northwest Laboratory), Napier B., Strenge D., Ramsdell J., GENII – The Hanford Environmental radiation dosimetry software system, Richland, 1988

PNNL (Pacific Northwest Laboratory), Napier B., Alternative conceptual models for assessing food chain pathways, 2006

Pankow J.F., Review and Comparative Analysis of the Theories on Partitioning Between the Gas and Aerosol Particulate Phases in the Atmosphere, Atmospheric Environment, 21, 2275-2283, 1987

Paterson Mackay D., A model of organic chemicals uptake by plants from soils and the atmosphere, Environmental Science and Technology, 28, pp 2259-2266, 1994

Penman, H.L. (1948). "Natural evaporation from open water, bare soil, and grass". *Proc. Roy. Soc.* (London, U.K.) A193: 120–145.

Pihan J, L'érosivité des pluies en France, Atelier universitaire de recherche : aménagement urbain et rural. Presses universitaires de Rennes, 1986

Quezada C., Hansen C. Clement T., Jones N., Lee K., ART3D- An analytical model for predicting 3-dimensional reactive transport, Accepted, Proceeding of the MODFLOW and more 2003 : Understanding through modeling, Sept 17-19th 2003, Golden, Colorado. 2003

RIVM (National Institute of Public Health and the Environment), Brandes L., den Hollender H., van de Meet, D., SimpleBox 2.0: a nested multimedia fate model for evaluating the environmental fate of chemicals, report n°719101029, 1996

RIVM (National Institute of Public Health and the Environment), Brand E., Otte PF., Lijzen JPA, CSOIL 2000 : an exposure model for human risk assessment of soil contamination, a model description, report n°711701054, 2007

Schwarzenbach R, Gschwend P., Imboden D., Environmental organic chemistry, John Wiley and Sons, New York, 1993

Scheuplein R., Blank I., Permeability of the skin, Physiol. Revue, 51(4) : 702-747, 1971

Seinfeld J. H., Pandis S.N. , Atmospheric Chemistry and Physics, Wiley, New York, 1998

Shell Global solutions, The concepts of HESP. Reference manual, Human Exposure to Soil Pollutants, version 2.10b, 1995

Smith A., Infant exposure assessment for breast milk dioxins and furans derived from waste incineration emissions, Risk analysis, 7, pp 347-353, 1987

Smith D. Chaudhuri I., Heinold D., Ruffle B., An alternative approach for estimating plant uptake of dioxin vapors, Presented at the 15th International Symposium on chlorinated dioxins and related compounds, August 21-25, 1995

Smith G., Watkins B., Little R., Jones H., Mortimer A., Biosphere modeling and dose assessment for Yucca Mountain, EPRI TR-107190, Electric Power research Institute. TIC:231592, 1996

Southworth G., The role of volatilization in removing polycyclic aromatic hydrocarbons from aquatic environments. Bull. Environ. Contam. Toxicol., 21, 507-514, 1979

Spence Environmental Engineering, Risc version 4.0, Risk-Integrated Software for Clean-ups, 2004

Sportisse B., A review of parameterization for modelling dry deposition and scavenging of radionuclides, Atmospheric Environment, 41, 2683-2696, 2007

Srinivasan P, Mercer J., Simulation of biodegradation and sorption processes in groundwater, Ground Water, 26(4):475-487, 1988

Srinivasan V, Clement T.P, Lee K.K., Domenico solution--is it valid?. Ground Water,45(2), 136-146, 2007

Streile G., Shields K., Stroh J., Bagaasen L., Whelan G., McDonald J.P., Droppo J. G., Buck J., The multimedia environmental pollutant assessment system (MEPAS) : Source-term Release formulation. PNNL-11248/UC-602, Washington, 1996

Sullivan M., Custance S ., Miller C., Infant exposure to dioxin in mother's milk resulting from maternal ingestion of contaminated fish, Chemosphere, 23 : 1387-1396, 1991

Swartjes, Rencontre RIVM-INERIS. Octobre 2003. 2003a.

Swartjes, Présentation (orale) de la review of the "NICOLE / ISG Risk Assessment Comparison Study" (Arcadis GMI). Consoil 2003., 2003b.

The Environment Agency, Department for Environment, Food and Rural Affairs, The Contaminated Land Exposure Assessment (CLEA) model : Technical basis and algorithms, R&D Publication CLR 10, ISBN 1 857 05749 X, 2002

Thornthwaite, C.W. (1948). "An approach toward a rational classification of climate". *Geographical Review* **38**: 55–94.

Tinsley I., Chemical concepts in pollutant behavior, John Wiley and Sons, New York, 1979

Tojo K., Lee A, Penetration and bioconversion of drugs in the skin, Journal of chemical engineer, 24: 297-301, 1991

Trapp S., McFarlane C., Matthies M. : Model for Uptake of Xenobiotics into Plants: Validation with Bromacil Experiments, Environmental Toxicology and Chemistry, 13, 3, pp. 413-422, 1994

Trapp S., Matthies M., Chemodynamics and environmental modeling : an introduction, Springer, 1997

Trapp S., Cammarano A., Capri E., Reichenberg F., Mayer P., Diffusion of PAH in Potato and Carrot Slices and Application for a Potato Model, Environ. Science Technology, 41, 3103-3108, 2007

Travis C., Hattemer-Frey, Arms A., Relationship between dietary intake of organic chemicals and their concentrations in human adipose tissue and breast milk, Archives of Environmental Contamination and Toxicology, 17 : 473- 478, 1988

US DOe (US Department of Energy), Argonne National Laboratory, User's manual for RESRAD Version 6, ANL/EAD-4, 2001

US DOe (US Department of Energy), Office of civilian radioactive waste management, Wesley W., Biosphere model report, MDL-MGR-MD-000001 Rev00, 2003

University of California, CALTOX, a multimedia total exposure model for hazardous-waste sites : The Department of Toxic Substances control (DTSC), 1993

University of California, CALTOX version 2.3, Description of modifications and revisions. Berkeley : The Department of Toxic Substances control (DTSC), 1997

US EPA (US Environmental Protection Agency), A screening procedure for toxic and conventional pollutants in surface and groundwater, Environmental research Laboratory, EPA/600/6-85/002a, 1985

US EPA (US Environmental Protection Agency), Risk Assessment Guidance for Superfund: Volume I – Human Health Evaluation Manual (Part A, Interim final), Development of risk-based preliminary remediation goals), Office of Emergency and Remedial Response, EPA/540/1-89/002, 1989

US EPA (US Environmental Protection Agency), Risk Assessment Guidance for Superfund: Volume I – Human Health Evaluation Manual (Part B, Development of risk-based preliminary remediation goals), Office of Solid Waste and Emergency Response (OSWER), EPA/540/R-92/003, 1991

US EPA (US Environmental Protection Agency), Dermal exposure assessment : Principles and applications. Office of Health and Environmental Assessment, EPA/600/6-88/005Cc, 1992

US EPA (US Environmental Protection Agency), Office of Solid Waste and Emergency Response, Guidance manual for the IEUBK model for lead in children, report PB93-963510, 1994

US EPA (US Environmental Protection Agency), Soil screening guidance: Technical background document, Office of Solid Waste and Emergency Response (OSWER), EPA/540/R-95/128, 1996a

US EPA (US Environmental Protection Agency), BIOSCREEN Natural Attenuation decision support system, User's manual, version 1.3, Office of Research and Development, EPA/600/R-96/087, 1996b

US EPA, NCEA, MPE : The methodology for assessing Health Risks associated with Multiple Pathways of Exposure to combustor, EPA/600/R-98/137, 1998

US EPA (US Environmental Protection Agency), BIOCLOR, Natural Attenuation decision support system, User's manual, version 1.0, Office of Research and Development, EPA/600/R-00-008, 2000

US EPA (US Environmental Protection Agency), BIOCLOR, Natural Attenuation decision support system, User's manual addendum, version 2.2, Office of Research and Development, 2002

US EPA (US Environmental Protection Agency), Nofzinger D.I., Wu Jinquan, CHEMFLO-2000, Interactive software for simulating waste and chemical movement in unsaturated soils, Center for subsurface modelling support, EPA/600/R-03/008, 2003, www.epa.gov/ada/csmos/models/chemflo2000.html

US EPA (US Environmental Protection Agency), User's Guide for Evaluating Subsurface Vapor Intrusion Into Buildings, OERR, 2004a

US EPA (US Environmental Protection Agency), Exposure analysis modeling system (EXAMS): User manual and system documentation, Office of Research and development, EPA/600/R-00/081, 2004b

US EPA (US Environmental Protection Agency), Exposure and Human Health Reassessment of 2,3,7,8-Tetrachlorodibenzo-p-Dioxin (TCDD) and Related Compounds, National Academy Sciences (NAS), Review draft, 2004c

US EPA (US Environmental Protection Agency), Risk assessment guidance for Superfund, Volume I: Human health evaluation manual (Part E, Supplemental guidance for dermal risk assessment), Final, EPA/540/R/99/005, 2004d

US EPA (US Environmental Protection Agency), HHRAP: Human Health Risk Assessment Protocol for hazardous waste combustion facilities, Final, Office of Solid Waste and Emergency Response (OSWER), EPA530-R-05-006/0-98/001A, 2005

US EPA (US Environmental Protection Agency), VLEACH, version 2.2a, Center for subsurface modelling support, 2007

van den Berg R., Human exposure to soil contamination: a qualitative and quantitative analysis towards proposals for human toxicological intervention values (partly revised edition). National Institute of Public Health and Environmental Protection (Rijkinstituut Voor Volksgezonheid en milieu), Bilthoven, The Netherlands. Report 755201011. April 1991/January 1994

Van Hall Larestein, Risc-human 3.2, www.risc-site.nl/index.html?riscmainFrame=sw_risc_uk.htm

Vanoni V.A., Sedimentation engineering, American Society of Civil Engineers, New York, 460-463, 1975

Vecchia B.E., Estimating the dermally absorbed dose from chemical exposure: Data analysis, Parameter estimation, and sensitivity to parameter uncertainties, M.S. Thesis, Colorado school of Mines, Golden, Colorado, 1997

Venkatram A., Pleim J., Research note. The electrical analogy does not apply to modelling dry deposition of particles. Atmospheric Enironment, 33, 3075-3076, 1999

Verner M.A., Ayotte P., Muckle G., Charbonneau M., Haddad S., A physiologically based pharmacokinetic model for the assessment of infant exposure to persistent organic pollutants in epidemiologic studies, Environmental Health Perspectives, Vol. 117, n°3, 2009

Waitz et al., The VOLASOIL risk assessment model based on CSOIL for soils contaminated with volatile compounds. M.F.W. Waitz; J.I. Freijer ; F.A. Swartjes. May 1996. RIVM. Report n° 75810014, 1996, http://www.rivm.nl/bibliotheek/rapporten/715810014.pdf

West M.R., Kueper B.H., Ungs M.J., On the use and error of approximation in the Domenico (1987) solution. Ground Water, 45(2), 126-135., 2007

Wester R., Maibach H., Bucks D., Sedik L., Melendres J., Liao C., DiZio S., Percutaneous absorption of [^{14}C]DDT and [^{14}C]benzo(a)pyrene from soil. Fundamental Applied toxicology, 15:510-516, 1990

Wester R., Maibach H., Bucks D., Sedik L., Melendres J., Liao C., DiZio S., Percutaneous absorption of [^{14}C]DDT and [^{14}C]benzo(a)pyrene from soil. Fundamental Applied toxicology, 15:510-516, 1990

Wexler E, Analytical solutions for one-, two-, and three-dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow: U.S. Geological Survey Techniques of Water-Resources Investigations, book 3, chap. B7, 1992a

Wexler E., Analytical solutions for one-, two-, and three-dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow -- Supplemental Report: Source codes for computer programs and sample data sets: U.S. Geological Survey Open-File Report 92-78, 1992b

Whelpdale D., Wet and dry deposition, Chemistry of the unpolluted and polluted troposphere, D. Reidel Publication, 1982

Wischmeier W.H., Smith D.D., Prediction rainfall erosion losses – A guide to conservative planning. Agricultural handbook n°537, U.S. Department of Agriculture, 1978

Yang J., Roy T., Krueger A., Neil W; Mackerer C., In vitro and in vivo percutaneous absorption of benzo(a)pyrene from petroleum crude-fortified soil in the rat. Bulletin of Environmental Contaminant Toxicology, 43: 207-214, 1989

Yeh G.T., AT123D, version 1.22. Oak Ridge National Laboratory, Ridge National Tennessee, 1993, distribué par Pensylvania State University

ANNEXE : MATRICE D'INTERACTIONS ENTRE LES DIFFERENTS MILIEUX (ENSEMBLE DES MECANISMES DE TRANSFERT ET VOIES D'EXPOSITION JUSQU'A L'HOMME

Sol Dégradation Sorption	Diffusion Evaporation Remise en suspension de particules	Convection Diffusion	Lixiviation	Ruissellement Erosion		Prélèvement direct à partir du sol Eclaboussures	Ingestion	Ingestion Absorption cutanée
Dépôts particulaires et gazeux	**Air extérieur** Dispersion Dégradation	Convection Diffusion		Dépôts particulaires et gazeux		Dépôts particulaires Absorption foliaire de polluant gazeux		Inhalation de gaz et particules
	Convection Diffusion	**Air intérieur** Dégradation						Inhalation de gaz et particules
Irrigation Battement de la nappe	Evaporation Diffusion	Evaporation Convection Diffusion	**Eaux souterraines** Dispersion Dégradation Sorption	Drainage de la nappe		Irrigation	Ingestion	Ingestion Absorption cutanée
Irrigation	Volatilisation		Recharge de la nappe	**Eaux superficielles** Dispersion Dégradation Sorption	Sédimentation Diffusion	Irrigation	Ingestion Bioconcentration Bioaccumulation	Ingestion Absorption cutanée
				Remise en suspension Diffusion	**Sédiments** Dégradation Sorption		Bioaccumulation	Absorption cutanée
Décomposition						**Végétaux** Dégradation	Ingestion	Ingestion
Décomposition							**Animaux**	Ingestion
								Humains Ingestion de lait maternel

INERIS

maîtriser le risque
pour un développement durable

Institut national de l'environnement industriel et des risques

Parc Technologique Alata
BP 2 - 60550 Verneuil-en-Halatte

Tél. : +33 (0)3 44 55 66 77 - Fax : +33 (0)3 44 55 66 99

E-mail : ineris@ineris.fr - **Internet** : http://www.ineris.fr