

# MODELISATION DES TRANSFERTS DE MICROPOLLUANTS METALLIQUES A TRAVERS DES TOITURES VEGETALISEES : QUEL INTERET POUR LEUR CONCEPTION ?

Julie SCHWAGER<sup>(1,2)</sup>, Alexandre TISSERAND<sup>(2)</sup>, Véronique RUBAN<sup>(3)</sup>, Jean-Louis MOREL<sup>(4)</sup>,  
Julien LAURENT<sup>(5)</sup>, Adrien WANKO<sup>(5)</sup>

<sup>(1)</sup> CETE de l'Est – LRPC de Nancy - e-mail: [julie.schwager@developpement-durable.gouv.fr](mailto:julie.schwager@developpement-durable.gouv.fr)

<sup>(2)</sup> GEMCEA.

<sup>(3)</sup> IFSTTAR – e-mail : [veronique.ruban@ifsttar.fr](mailto:veronique.ruban@ifsttar.fr)

<sup>(4)</sup> Université de Lorraine – INRA – e-mail : [jean-louis.Morel@univ-lorraine.fr](mailto:jean-louis.Morel@univ-lorraine.fr)

<sup>(5)</sup> ENGEES – ICUBE – e-mail : [awanko@engees.u-strasbg.fr](mailto:awanko@engees.u-strasbg.fr) - [julien.laurent@engees.unistra.fr](mailto:julien.laurent@engees.unistra.fr)

## Résumé

*Les toitures végétalisées extensives présentent une capacité de gestion quantitative des eaux pluviales. Constituées d'un « sol » et de végétaux, on peut s'interroger sur les capacités épuratoires de ces ouvrages. Afin de mieux caractériser ces performances, il est proposé de construire un modèle mécaniste basé sur le comportement hydrodynamique des toitures végétalisées proposant une alternative aux longues périodes d'observation in situ. Un modèle unidimensionnel a ainsi été mis en place à partir du logiciel libre HYDRUS-1D pour étudier les transferts du cuivre et du zinc. Le modèle hydrodynamique de van Genuchten-Mualem a été calé par modélisation inverse à partir de données expérimentales mesurées sur une toiture végétalisée de 75 m<sup>2</sup> installée sur le toit du Laboratoire Régional des Ponts et Chaussées de Nancy. La validation hydraulique a montré que le modèle parvient à reproduire les variations générales de l'écoulement, mais que sa performance reste très dépendante des caractéristiques des données retenues pour le calage. La modélisation des transferts de cuivre et de zinc confirment les tendances globales de capacité de rétention intéressante de la structure, même si celles-ci semblent fortement surestimées par rapport à la réalité. Les résultats mitigés obtenus par ce modèle peuvent notamment s'expliquer par la nature des données fournies ou encore les hypothèses simplificatrices et paramètres pris en compte ou non par le logiciel HYDRUS-1D.*

**Mots clefs** : Toiture végétalisée, modélisation, hydrodynamique, métaux.

## Introduction

Malgré la présence de végétaux et de supports parfois utilisés pour la dépollution des eaux, les capacités épuratoires des toitures végétalisées restent mitigées et limitées à ce jour. Ceci s'explique essentiellement par le fait qu'elles ne sont pas initialement conçues pour un objectif de traitement de la pollution [Czemiel Berndtsson, 2010]. Ainsi des résultats expérimentaux récents, mettant en œuvre une comparaison de différentes structures sur un même site expérimental associée à des essais en laboratoire, ont permis d'identifier des substrats et matériaux drainants permettant une rétention plus ou moins importante de certains éléments traces métalliques, indiquant qu'il est possible d'améliorer ces performances épuratoires en sélectionnant des matériaux adéquats [Seidl et al., 2013 ; Schwager et al., 2013].

La durée de vie d'une toiture végétalisée est de l'ordre de 25 ans et les capacités épuratoires du système peuvent potentiellement évoluer du fait de la mobilisation progressive de substances initialement présentes dans les matériaux sous l'action des végétaux, d'une saturation des sites de captages des éléments ou encore d'une désorption de substances provenant des dépôts atmosphériques préalablement retenus par les différentes couches de la structure et notamment les végétaux, les substrats et les matériaux drainants. En outre, la gamme de matériaux utilisée est très large et continue à se développer. Les substrats et matériaux drainants peuvent être naturels ou synthétiques, éventuellement issus du recyclage, minéraux (matériaux de déconstructions, pouzzolane, argile expansée, ardoise, perlite...) ou organiques (compost, tourbe, écorces, fibre de coco...) [Dunnet et Kingsbury, 2008]. Le développement rapide de la technique et les attentes grandissantes des maîtres d'ouvrage par rapport aux fonctions de ces structures ne permettent pas cependant de tester la capacité à retenir les polluants atmosphériques de chacune de ces combinaisons sur le long terme dans le cadre d'expérimentations *in situ*.

Souvent utilisée pour mettre en œuvre des scénarios de longues durées en testant différents paramètres, la modélisation est de plus en plus fréquemment utilisée pour comprendre le comportement des toitures végétalisées à long terme et des outils de conception basés sur des critères de gestion quantitative des eaux pluviales se développent [Berthier et al., 2013 ; Stovin et al., 2013]. Il pourrait donc être envisagé de

construire le même type d'outil en vue de la conception de toitures végétalisées aux capacités épuratoires optimisées. Cela nécessite donc le développement d'un modèle permettant la simulation des transferts hydriques au sein des structures de toitures végétalisées mais également le transport des différents polluants et les réactions qui ont lieu entre ces éléments et les matériaux de la structure. A terme, ce type d'outil pourrait être utilisé par un large panel de professionnels spécialisés dans ce domaine, comme des producteurs de matériaux et de structures de végétalisations de toiture.

HYDRUS-1D a été utilisé dans le cadre de ce projet car il permet notamment de simuler les flux de polluants dans une structure grâce à l'un de ses modules de transfert physico-chimique, en plus de ces fonctions de modélisation du comportement hydrodynamique déjà testées sur des toitures végétalisées [Hiltner et al., 2008]. Les données d'entrées et sorties utilisées pour le calage et la validation du modèle sont issues du suivi d'une toiture végétalisée expérimentale construite en 2010 au LRPC de Nancy, dont les volumes d'eaux et flux d'éléments traces métalliques en entrée et sortie ont été suivis pendant plusieurs mois. Des essais en laboratoire ont également été réalisés afin de caractériser les différents matériaux constitutifs de la toiture d'un point de vue hydrique et physico-chimique. Le cuivre et le zinc étant présents en plus forte concentration dans les eaux de pluie [Sabin et al., 2005 ; Percot, 2012], cette étude s'intéresse spécifiquement à la modélisation des transferts de ces métaux au sein de cette toiture végétalisée extensive. La première étape du projet a eu pour objectif de caler puis valider le modèle hydraulique. Ensuite, des simulations de transfert de métaux ont été réalisées. Les résultats obtenus ont permis d'identifier certaines limites liées aux caractéristiques du modèle et aux données disponibles.

## 1 Présentation de la toiture végétalisée expérimentale et des données utilisées

### 1.1 Une toiture végétalisée grandeur nature

La structure étudiée est une toiture végétalisée de 75m<sup>2</sup> environ. Elle est composée de haut en bas :

- d'une couche végétale composée d'un assortiment de *sedums* initialement introduits sous forme de micro-mottes,
- de 10 cm de substrat contenant de la pouzzolane, de l'écorce de pin et de la tourbe blonde,
- d'un filtre géosynthétique non tissé de 1,7mm d'épaisseur,
- de 5 cm de couche drainante constitué d'argile expansée.

### 1.2 Instrumentation de la toiture végétalisée et mesures réalisées

Elle est équipée de capteurs de teneurs en eau et de mesure de la température (modèle 5TM, *Decagon Devices*) ainsi que de capteurs diélectriques permettant de mesurer le potentiel matriciel dans le milieu poreux (modèle MPS1, *Decagon Devices*). Disposés à environ 6cm de profondeur, un capteur de chaque type est disposé en deux zones distinctes sur la toiture. Les données utilisées sont celles de l'année 2012 avec un pas de temps de 15 minutes.

Les débits d'eau en sortie des toitures sont mesurés à l'aide d'un débitmètre à augets de 3 L fournissant des données à la seconde près lorsqu'il y a bascule et qui permet également de récupérer 1% du volume écoulé pour réaliser des prélèvements. Ces eaux sont prélevées tous les mois pour analyses des éléments traces métalliques (notamment Cu et Zn). Une mesure de pH est également réalisée. Le protocole expérimental est le suivant. Les eaux sont filtrées à 0,45 µm sur filtre Millipore en acétate de cellulose. Les filtres sont ensuite séchés à l'air libre avant minéralisation par HNO<sub>3</sub> pour analyse de métaux trace. Les eaux filtrées sont acidifiées à 0,5% avec HNO<sub>3</sub>. Les analyses d'éléments traces métalliques (ETM) sont ensuite réalisées par ICP MS sur les phases dissoutes et particulaires. Un système de récupération des dépôts atmosphériques a également été installé sur une toiture voisine et les eaux récoltées sont soumises aux mêmes protocoles de préparation et d'analyses.

Des données météorologiques sont acquises auprès de Météo France qui dispose d'une station de mesures à quelques centaines de mètres du site expérimental : degré d'hygrométrie (%), température extérieure (°C), pluviométrie (mm/h), vitesse moyenne du vent à une altitude de 10m au dessus du sol (m/s) et rayonnement global solaire incident (J/cm<sup>2</sup>.h).

## 2 Modèles hydrodynamique et de transport en milieu poreux

### 2.1 Modèle hydrodynamique

#### 2.1.1 Modèle d'écoulement de Richards

Basé sur le principe de conservation de la masse d'un volume élémentaire représentatif du milieu poreux et de l'équation de Darcy, l'équation de Richards (1931) modélise l'écoulement en milieu poreux variablement saturé. HYDRUS-1D propose plusieurs fonctions de teneur en eau, de conductivité hydraulique en eau et de pression en eau pour l'implémentation complète du modèle ; celles de van Genuchten [1980]-Mualem [1976] ont été utilisées dans le cadre de ce projet.

Ces équations font intervenir six paramètres : la teneur en eau résiduelle  $\theta_r$  (-), la teneur en eau à saturation  $\theta_s$  (-), des facteurs de formes  $\alpha$  et  $n$  ( $L^{-1}$  ; -), la conductivité hydraulique à saturation  $K_s$  ( $L.T^{-1}$ ), le coefficient de connectivité des pores  $l$  (-).

#### 2.1.2 Estimation des paramètres

La connaissance complète de l'hydrodynamique de la structure poreuse de la toiture nécessite la détermination de 12 paramètres associés aux couches du substrat et du drainage (cf. Tableau 1). Pour les deux matériaux,  $l$  a été fixé à 0,5 comme préconisé par les travaux de Mualem [1976]. Concernant le substrat, les paramètres hydrodynamiques cités plus haut ont été déterminés de façon expérimentale dans le cadre de travaux visant à caractériser les transferts hydro-thermiques dans cette même structure [Bouzouidja et al., 2013]. La conductivité hydraulique à saturation  $K_s$  de la couche de drainage a également été déterminée dans les mêmes conditions [Bouzouidja et al., 2013] et les autres paramètres ont tous été calés par le modèle HYDRUS-1D à partir des chroniques de teneurs en eau dans le substrat grâce au module de résolution inverse disponible dans le code.

**Tableau 1** : Paramètres utilisés pour la modélisation des phénomènes hydrodynamiques.

Matériau	$\theta_r$	$\theta_s$	$K_s$ ( $cm.h^{-1}$ )	$\alpha$ ( $cm^{-1}$ )	$n$	$l$
Substrat	0,0515	0,459	777	0,0802	1,58	0,5
Argile expansée	A caler	A caler	1195	A caler	A caler	0,5

### 2.2 Modèle de transport réactif du cuivre et du zinc

#### 2.2.1 Le transport conservatif

L'advection, la dispersion et la diffusion moléculaire, les trois principaux processus physiques de transport conservatif régissant la migration des éléments chimiques en phase liquide lors d'un écoulement en milieu poreux sont pris en compte par le logiciel Hydrus via trois paramètres pour chaque couche :

- $\rho$  : la densité apparente sèche ( $M.L^{-3}$ ), soit la masse d'une unité de volume de matériau sec et non tassé,
- $d$  : la dispersivité (L),
- $D_k^*$  : le coefficient de diffusion moléculaire de chaque espèce chimique étudiée en phase aqueuse.

Les deux premiers paramètres ont été définis expérimentalement (cf. Tableau 2) : la densité apparente sèche dans le cadre de l'étude citée précédemment pour les paramètres hydrodynamiques et la dispersivité via des essais de traçage d'un élément conservatif en colonne. L'essai a été répété avec différents débits permanents afin de vérifier que l'on restait bien dans le même ordre de grandeur et que ce paramètre était donc une caractéristique du milieu poreux indépendante des conditions d'écoulement, hypothèse prise dans le logiciel pour décrire le phénomène de dispersion. Aucune donnée expérimentale relative au coefficient de diffusion moléculaire n'était disponible et peu d'informations sont fournies dans la littérature. Cependant, une analyse de sensibilité effectuée sur ce paramètre indique que dans toutes les gammes de débit la diffusion moléculaire est un processus marginal. En effet, la dispersion cinématique est un processus dominant dans le cas d'épisodes pluvieux intenses (de l'ordre de 0.5mm/h) et l'advection dans le cas des épisodes de faibles gammes d'intensité observés (de l'ordre de 0,2mm/h). Ainsi, le phénomène de diffusion moléculaire sera négligé par la suite.

**Tableau 2** : Paramètres utilisés pour la modélisation des phénomènes de transport.

Matériau	$\rho$ ( $mg.cm^{-3}$ )	$d$ (cm)	$D_k^*$ ( $cm^2.h^{-1}$ )
Substrat	800	2,2	0
Argile expansée	274	6,2	0

## 2.2.2 Réactions physico-chimiques

### 2.2.2.1 Modélisation du processus de sorption

La représentation de la physico-chimie repose sur une formule générale utilisée par HYDRUS-1D pour décrire le transport en non-équilibre d'espèces chimiques présentes *a priori* dans toutes les phases (liquide, solide et gazeuse). Les interactions entre les phases liquide et solide peuvent être décrites par des équations non-linéaires de non-équilibre basées sur les modèles d'isotherme de sorption de Langmuir et Freundlich et de cinétique d'ordre 1. Trois paramètres obtenus empiriquement à partir de l'isotherme de sorption ( $k_s$ ,  $\beta$ ,  $\eta$ ) et un pour la cinétique ( $\omega$ ) sont à fournir au logiciel afin de modéliser ces processus (cf. Tableau 3).

**Tableau 3** : Paramètres utilisés pour la modélisation des phénomènes physico-chimiques.

Métal	Matériau	$k_s$	$\eta$	$\beta$	$\omega$
Cu	Substrat	0,150	54,54	0,252	1,05
	Argile expansée	0,853	39,61	0,289	1,15
Zn	Substrat	0,00556	0,277	0,735	1,82
	Argile expansée	0,366	16,14	0,329	0,57

Il est pris pour hypothèse par la suite que le cuivre et le zinc, les deux espèces chimiques étudiées, ne sont pas réactives entre elles et ont par conséquent des comportements physico-chimiques différents. En outre, il sera considéré que l'eau de pluie qui apporte ces deux éléments ne contient pas d'autres espèces susceptibles de réagir avec ceux-ci et avec les matériaux constitutifs de la toiture.

### 2.2.2.2 Réalisation de cinétique et d'isotherme de sorption en batch

Les isothermes et cinétiques de sorption du cuivre et du zinc sur le substrat et le drainage ont été obtenues grâce à des essais en batch réalisés en laboratoire, dont le protocole est décrit ci-dessous.

Les matériaux ont préalablement été prélevés par quartage, séchés à l'air libre et concassés avec un broyeur en porcelaine. Les essais ont été réalisés séparément pour le cuivre et le zinc. Les solutions réalisées étaient basées sur une eau de pluie simulée composée d'eau déminéralisée et de Volvic afin de se rapprocher de la minéralité des eaux de pluie [Van de Voorde, 2012]. Des sels métalliques étaient utilisés pour l'apport en cuivre ( $CuSO_4$ ) et en zinc ( $ZnCl_2$ ).

Pour les isothermes, 5 g de matériau ont été mis en contact et agités à 16 tour/min avec 50ml de solutions avec différentes concentrations (eau de pluie simulée, 0,05  $mg.L^{-1}$ , 0,5  $mg.L^{-1}$ , 2  $mg.L^{-1}$ , 5  $mg.L^{-1}$ , 20  $mg.L^{-1}$ , 50  $mg.L^{-1}$ , 200  $mg.L^{-1}$ , 500  $mg.L^{-1}$ , 1000  $mg.L^{-1}$ , 2000  $mg.L^{-1}$ , 5000  $mg.L^{-1}$ , et 10 000  $mg.L^{-1}$ ) pendant plus d'une semaine. Environ 10 ml de solution était ensuite prélevé dans chaque récipient.

Dans le cadre des cinétiques, 100 g de matériau ont été mis en équilibre par agitation avec 1L d'eau de pluie simulée pendant plus de 48h avant l'introduction d'une masse de sel métalliques permettant d'atteindre une concentration de 1  $g.L^{-1}$ . Un échantillon de 10 ml était ensuite prélevé à des temps définis : 1, 3, 5, 10, 30, 50, 100, 300 minutes, 1, 2, 3 jours puis une semaine.

Les différents échantillons prélevés étaient ensuite filtrés à l'aide de filtre à seringue à 0,45  $\mu m$ . La solution était acidifiée à 0,5% avec  $HNO_3$  ultrapure pour analyse de métaux traces puis diluée par 100 si la concentration attendue était supérieure à 50  $mg.L^{-1}$ . Les teneurs en cuivre et zinc étaient déterminées par ICP OES.

Les paramètres évoqués précédemment ont été définis en calant ces modèles sur les isothermes obtenues. Cependant, la modélisation de ces réactions de sorption par des cinétiques d'ordre 1 et des isothermes de Langmuir ou Freundlich était peu satisfaisante. Les calages ont donc été effectués sur les gammes de concentrations les plus basses et les temps les plus faibles afin de se rapprocher des conditions réelles de teneurs en Cu et Zn dans les eaux de pluie et de temps de contact entre ces eaux et les matériaux de la toiture.

## **2.3 Données nécessaires au modèle**

### **2.3.1 Simulation du comportement hydrodynamique**

Les flux en surface correspondent aux flux entrants correspondant à la pluviométrie sur la toiture végétalisée et aux flux sortants induits par l'évapotranspiration. Celle-ci a été calculée à partir de la formule de Penman-Monteith dont le protocole standardisé est proposé par l'American Society of Civil Engineers (2005). Les données fournies pour caractériser le milieu en lui-même sont la teneur en eau et le potentiel matriciel, qui sont obtenus à partir des capteurs présents dans le substrat évoqués au paragraphe 1.2. Enfin, concernant les données de sortie du système, il est considéré que les débits en sortie de la couche de drainage correspondent à ceux fournis par le débitmètre à auget en sortie de gouttière. L'ensemble de ces données est fournie au modèle au pas de temps horaire.

### **2.3.2 Evaluation de la qualité du modèle hydrodynamique**

Afin de déterminer la pertinence du modèle élaboré, le coefficient de corrélation et le critère de Nash ont été calculés entre données expérimentales et données simulées à un pas de temps horaire. Le premier, donné comme le rapport de la covariance des deux jeux de données sur le produit des deux écart-types de ces séries de données, permet de vérifier globalement que les données simulées suivent bien les tendances obtenues par les valeurs mesurées. Le critère de Nash quant à lui est un critère couramment utilisé en hydrologie pour comparer la forme de deux séries de données décrivant des hydrogrammes. Il exprime l'erreur relative entre le modèle et un modèle de référence défini par la moyenne des débits.

### **2.3.3 Simulation des flux de cuivre et de zinc**

Les données apportées en entrée du modèle sont les concentrations de cuivre et zinc en phase dissoute dans les dépôts atmosphériques recueillis, les interactions physico-chimiques entre la phase particulaire et le substrat étant très limitées. Un seul prélèvement étant réalisé par mois, il a été considéré que les apports d'ions métalliques étaient faits par les pluies à concentration constante tout au long du mois, égale à la moyenne obtenue dans les prélèvements mensuels.

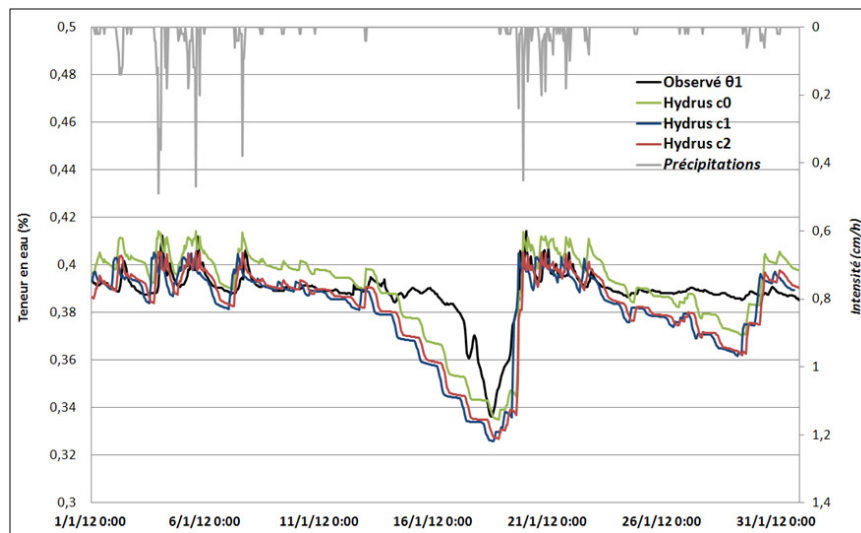
## **3 Résultats**

### **3.1 Modèle hydrodynamique**

#### **3.1.1 Calage sur le mois de janvier**

Dans un premier temps, le modèle d'écoulement a été calé sur l'ensemble des données du mois de janvier 2012 à partir du module d'inversion d'Hydrus 1D. Le jeu de paramètre obtenu pour ce modèle C0 est indiqué dans le Tableau 4. Le critère de Nash obtenu est peu satisfaisant car inférieur à 0 (-0,12). Ce modèle présente cependant un coefficient de corrélation élevé (0,82) indiquant que le modèle reproduit bien les variations de teneurs en eau dans le substrat, comme on peut également le voir sur la Figure 1. La bonne reproduction des transferts d'eau dans la toiture est également confirmée par l'allure des courbes de débit cumulé qui ont des allures très proches (cf. Figure 2).

Les périodes sur lesquelles le modèle semble le moins performant sont celles présentant des précipitations très faibles, notamment du 9 au 20 janvier ainsi que du 23 janvier jusqu'à la fin du mois. Une forte diminution de la teneur en eau est alors indiquée par le modèle alors qu'elle n'est pas forcément aussi visible dans la réalité, notamment sur la seconde période.



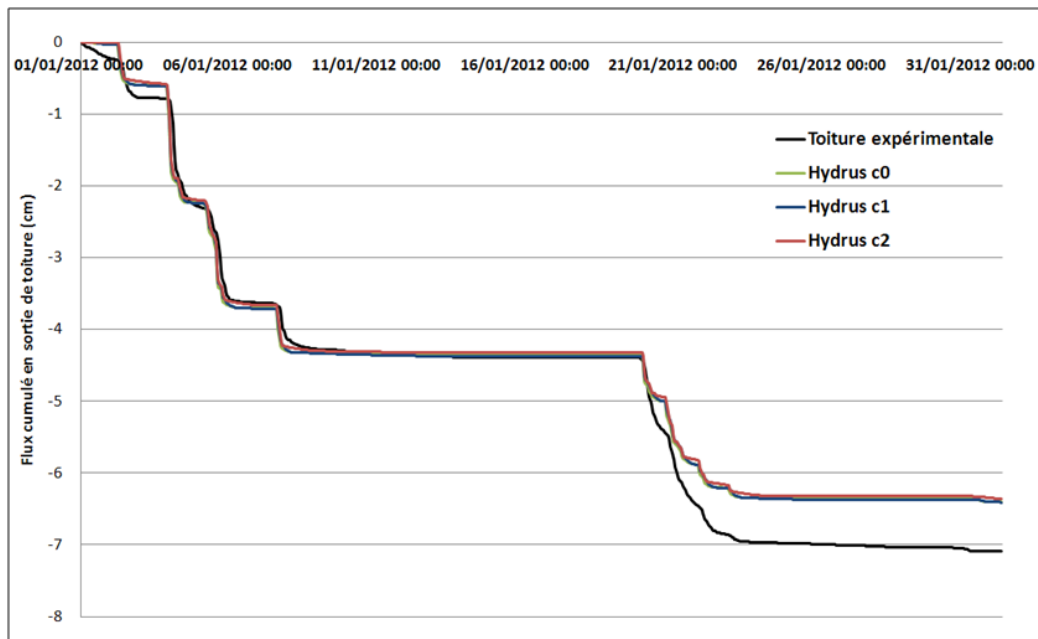
**Figure 1** : Comparaisons des teneurs en eau observées et simulées via différents modèles avec le logiciel HYDRUS-1D sur janvier 2012.

### 3.1.2 Calage sur les périodes pluvieuses de janvier

Afin d'améliorer les performances du modèle et notamment d'obtenir un critère de Nash positif, des calages ont été réalisés sur deux séries de données du mois de janvier reprenant des périodes pluvieuses, le calage C1 a été obtenu sur la période du 1 au 10 janvier et le calage C2 du 21 au 25 janvier 2012 (cf. Tableau 4), en concentrant les objectifs de cette modélisation sur les périodes pluvieuses et non pas sur une simulation en continu.. Il a également été décidé de caler les paramètres  $l$  des deux matériaux ainsi que les paramètres du substrat non obtenus expérimentalement pour améliorer la pertinence de ces modèles. Ces nouveaux calages permettent d'obtenir des critères de Nash positifs et des coefficients de corrélation satisfaisants (cf. Tableau 5). L'évaluation du modèle se poursuivra donc uniquement sur ces deux jeux de données.

**Tableau 4** : Jeux de paramètres hydrodynamiques obtenus par calage sur différentes périodes.

Modèle	Matériau	$\theta_r$	$\theta_s$	$K_s (cm.h^{-1})$	$\alpha (cm^{-1})$	$n$	$l$
C0	Substrat	0,0515	0,459	777	0,0802	1,58	0,5
	Argile expansée	0,084	0,4	1195	0,52	6,8	0,5
C1	Substrat	0,0515	0,459	777	0,1047	1,4	0,5193
	Argile expansée	0,0132	0,9676	1195	0,5119	6,6	0,5398
C2	Substrat	0,0515	0,459	777	0,1205	1,4	0,5275
	Argile expansée	0,0181	1	1195	0,5703	7	0,4614



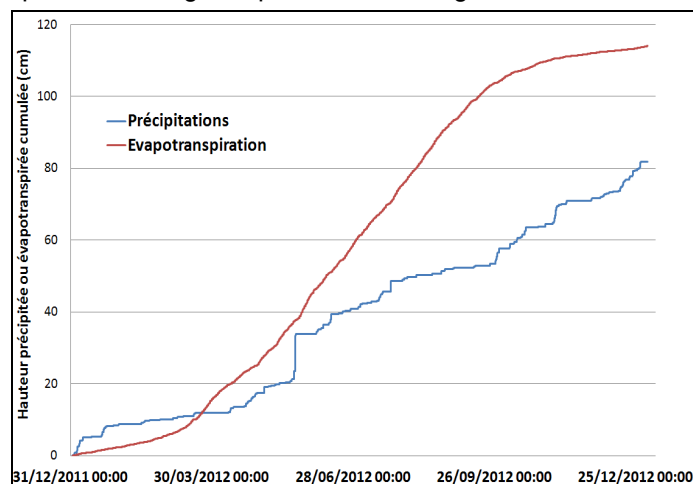
**Figure 2** : Comparaisons des flux cumulés à l'exutoire pour différents modèles en janvier 2012.

### 3.1.3 Sélection des chroniques de validation

HYDRUS-1D ne prenant pas en compte le changement de phase du fait de la température, les mois présentant une période de gel dans le substrat ne peuvent être utilisés pour la validation, à savoir février et mars 2012.

Par ailleurs, l'évapotranspiration calculée a été mise en parallèle des précipitations obtenues pour les différents mois restants. Il a alors été observé que durant les mois de printemps et d'été, l'évapotranspiration cumulée sur un mois calculée par la formule de Penman-Monteith était très forte et beaucoup plus importante que les quantités d'eaux précipitées sur ce mois (cf. Figure 3). Or, contrairement à des sols par exemple, les structures végétalisées contiennent une quantité d'eau limitée puisqu'elles ne présentent qu'une faible épaisseur de matériaux au dessus d'une couche étanche et ne peuvent donc évapotranspirer plus d'eau que ce qui est rentré pendant de longues périodes. Seuls les mois de novembre et décembre ont donc été conservés pour la validation de ces deux modèles, ces deux mois présentant en outre un bilan hydrique (précipitation - (ETP + volume à l'exutoire) = stockage) cohérent comme pour le mois de janvier.

Les modèles C1 et C2 ayant été calés sur une partie seulement du mois de janvier, les données du mois de janvier 2012 non utilisées pour leur calage respectif ont donc également été utilisées pour validation.



**Figure 3** : Comparaison de l'évapotranspiration calculée et des précipitations réelles sur l'année 2012.



### 3.1.4 Validation des modèles

Les coefficients de corrélations et critères de Nash estimés sur les périodes de validation indiquées ci-dessus sont présentés dans le Tableau 5. Le modèle C2 est plus performant que le modèle C1 pour l'ensemble de ces paramètres et de ces plages de données. On remarque une bonne corrélation au niveau de l'évolution des tendances de teneur en eau dans le substrat par temps de pluie même si un léger décalage est présent en permanence (cf. Figure 1). Une difficulté à représenter les évolutions de la teneur en eau dans le substrat par temps sec est également visible. Cela peut expliquer en partie les critères de Nash faibles voire négatifs obtenus notamment pour le modèle C1. Concernant les volumes en sortie de toitures, les volumes simulés sont cohérents avec les valeurs observées sur la toiture expérimentale, avec peu de différences par rapport au calage C0 (cf. Figure 2).

**Tableau 5** : Performances des modèles C1 et C2 sur les différentes périodes de calage et de validation.

	Sur période de janvier utilisée pour le calage		Sur tout le mois de janvier 2012		Sur la période de janvier non utilisée pour le calage		Sur novembre - décembre 2012	
	Coeff. Corr.	Nash	Coeff. Corr.	Nash	Coeff. Corr.	Nash	Coeff. Corr.	Nash
<b>C1</b>	0,62	0,10	0,83	-0,69	0,51	-0,09	0,44	-0,02
<b>C2</b>	0,61	0,25	0,83	-0,58	0,61	0,09	0,45	0,04

## 3.2 Modélisation des phénomènes physico-chimiques

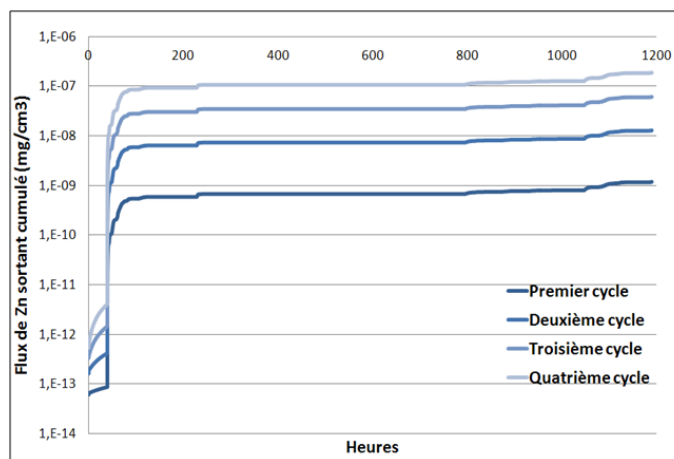
### 3.2.1 Simulation des flux en sortie de toitures et teneurs en cuivre et zinc dans les matériaux

Lorsque les transferts de cuivre et zinc sont simulés simultanément, le modèle ne converge pas. Les transferts de ces deux ions ont donc été modélisés séparément. Les données fournies et les équations utilisées par HYDRUS-1D prenant pour hypothèse le fait que ces molécules ne sont pas réactives entre elles, les résultats obtenus pour chaque métal sont semblables, qu'ils soient modélisés ensemble ou séparément. On observe notamment un flux mensuel de polluants fortement sous-estimé. En effet, les résultats issus de la toiture végétalisée expérimentale montre un flux de zinc inférieur au flux sortant (de l'ordre de  $9,9 \cdot 10^{-5}$  mg.cm<sup>-2</sup> contre  $1,8 \cdot 10^{-4}$  mg.cm<sup>-2</sup> en entrée), cependant les teneurs restent significatives contrairement au flux simulé par le modèle en sortie de cette même toiture avec les mêmes conditions d'apports atmosphériques en entrée qui est très faible ( $2 \cdot 10^{-18}$  mg.cm<sup>-2</sup>). Concernant le cuivre, contrairement au flux fortement diminué fourni par le modèle en sortie de toiture ( $3 \cdot 10^{-16}$  mg.cm<sup>-2</sup>), l'abattement du flux par la toiture expérimentale n'est pas sensible pour le mois de janvier 2012 ( $2,4 \cdot 10^{-5}$  mg.cm<sup>-2</sup> en sortie contre  $1,2 \cdot 10^{-5}$  mg.cm<sup>-2</sup> en entrée). Une tendance à l'abattement des flux de cuivre dissout sur cette toiture expérimentale est cependant observée sur de plus longues périodes, cette augmentation sur le mois de janvier n'est donc pas représentative des performances globales de la structure étudiée. Ainsi, le modèle semble tout de même reproduire les tendances générales de rétention du cuivre et du zinc observées sur la toiture réelle avec cependant une forte surestimation.

### 3.2.2 Evolution des capacités de rétention au cours du temps

Les quantités de cuivre et zinc adsorbés au préalable sur la structure expérimentale n'étant pas connues, il a été considéré dans la modélisation précédente que les quantités adsorbées au début du mois de janvier étaient nulles. Afin d'évaluer l'impact de la teneur initiale des matériaux sur la rétention de Cu et Zn, la simulation a été effectuée sur plusieurs cycles correspondant à deux mois (novembre et décembre). A chaque fois, l'état final des teneurs en Cu et Zn était utilisé comme état initial du cycle suivant. Afin de diminuer les nombres de cycle à simuler et réduire le temps de réalisation de l'essai, des concentrations « dopées » (donc très élevées par rapport à celles retrouvées dans les eaux de pluie) ont été utilisées pour ces simulations ( $10$  mg.l<sup>-1</sup> contre  $0,5$  mg.l<sup>-1</sup>). On peut alors observer une augmentation sensible des flux en sortie de toitures au fur et à mesure des cycles et de l'augmentation des teneurs en ions sorbés sur les matériaux associée (cf. Figure 4). Les flux en sortie restent cependant faibles devant ceux rencontrés en sortie de toiture expérimentale, malgré les concentrations beaucoup plus élevées apportées en entrée du modèle.

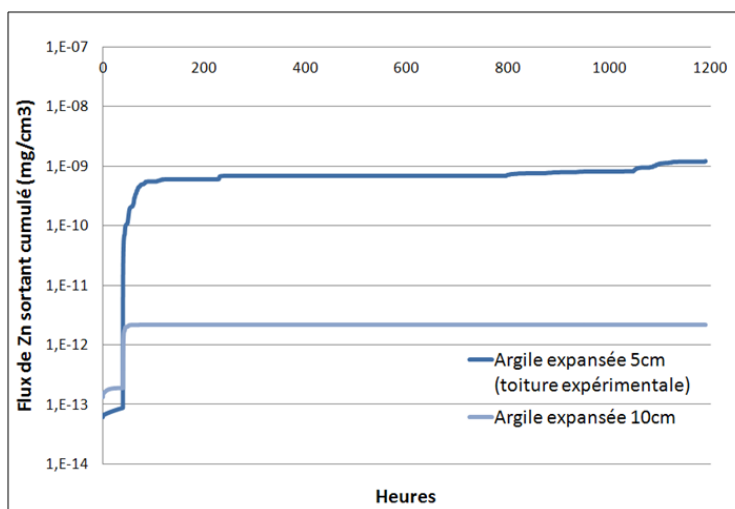




**Figure 4** : Evolution des flux de zinc en sortie de toitures au fur et à mesure des cycles de simulation.

### 3.2.3 Evaluation des effets d'un changement d'épaisseur de l'argile expansée

L'argile expansée étant un matériau léger aux capacités de rétention du zinc intéressantes, il pourrait être opportun d'en augmenter l'épaisseur afin d'améliorer les capacités de rétention de la structure. Toujours avec une concentration de Zn en entrée de  $10 \text{ mg.l}^{-1}$  (les flux étant déjà quasiment nuls, selon le modèle, avec 5 cm d'épaisseur et les concentrations observées dans la réalité), l'épaisseur de la couche de drainage a été portée à 10cm. Les flux en sortie ont alors été considérablement réduits (cf. Figure 5). Une augmentation de la capacité de rétention d'un système plus importante proportionnellement que l'augmentation de la hauteur de matériau traversé est fréquemment observé dans les essais en colonne réalisés sur différents sorbents [Taty-Costodes et al., 2005], dans des ordres de grandeurs qui ne sont toutefois pas comparables avec les résultats obtenus à partir du modèle.



**Figure 5** : Impact de la hauteur de drainage sur les flux de zinc cumulé en sortie de toiture.

## 4 Discussion

### 4.1 Limites liées au modèle hydraulique

Une première limite associée au calage du modèle hydraulique est indépendante d'HYDRUS-1D et provient de l'évaluation de l'évapotranspiration. La formule de Penman-Monteith est la plus fréquemment utilisée notamment par Météo France. Cependant elle ne semble pas convenir à la modélisation de l'évapotranspiration par les *sedums* présents sur les toitures végétalisées. Concernant la végétation, cette formule prend uniquement en compte leur hauteur (un paramètre à choisir pour les végétaux supérieurs à 12 cm et ceux inférieurs à 12 cm). Or certains *sedums*, en particulier lorsqu'ils sont soumis à un stress hydrique, peuvent adopter un métabolisme CAM (*Crassulacean Acid Metabolism*) [Schuber et Kluge, 1981 ; Pilon-Smits et al., 1991]. Celui-ci a notamment pour caractéristique une ouverture des stomates uniquement durant la nuit afin de limiter les pertes d'eau par transpiration lors des heures les plus chaudes de la journée [Patel et al., 2010]. Contrairement à des végétaux à métabolisme C3 ou C4, la majeure partie

de la transpiration se fait donc la nuit plutôt que le jour dans ces conditions spécifiques de stress hydrique et reste relativement limitée. C'est d'ailleurs grâce à cette spécificité que ce type de végétaux est utilisé en végétalisation de toitures puisqu'elle leur permet d'avoir des besoins en eau moins importants et ne nécessitent pas d'arrosage ou d'irrigation dans des conditions météorologiques normales. La transpiration des *sedums* étant difficile à calculer à partir de formules existantes du fait de leurs spécificités, un projet en cours vise justement à la mesurer au cours du temps sur des toitures végétalisées expérimentales [Claverie et al., 2013].

Par ailleurs, le changement de phase de l'eau du fait de la température n'est pas prise en compte par HYDRUS-1D or ce phénomène influence fortement les écoulements d'eau lorsque les températures sont négatives. Ces deux aspects expliquent que le modèle obtenu est performant essentiellement sur les périodes humides à des températures tempérées.

Enfin, le calage sur les différentes périodes du mois de janvier démontre l'impact des caractéristiques des données retenues sur le jeu de paramètre proposé par HYDRUS-D, comme observé précédemment par Fournel et al. (2013).

## 4.2 Limites liées aux transferts physico-chimiques

Les résultats obtenus par les différentes simulations de transferts de polluants montrent une forte surestimation de la capacité de la structure à retenir le cuivre et le zinc par rapport à ce qui a été observées sur la toiture expérimentale réelle, même lorsque la teneur initiale dans le matériau est prise comme non nulle.

Cela peut provenir notamment des paramètres de caractérisation des cinétiques et isotherme d'adsorption des matériaux proposés. En effet, le choix des modèles cinétiques est très restreint et ne correspond pas forcément aux résultats obtenus avec ce substrat et cette couche de drainage. C'est notamment le cas pour la cinétique d'ordre 1 qui ne correspond pas du tout à celles observées et a nécessité de réduire les gammes de temps considérées pour améliorer cette estimation.

En outre le pH des eaux en entrée et dans les matériaux n'est pas pris en compte. Pourtant celui-ci a un impact important sur les mécanismes de sorptions des ions métalliques sur les sols [Bradl, 2004]. De plus, l'argile expansée présente un pH élevé, de l'ordre de 10, qui diffère sensiblement de ce qui peut être rencontrés dans des sols classiques.

Enfin, le modèle utilisé ne permet pas de prendre en compte les éventuels rejets de cuivre ou de zinc, qui peuvent être soit initialement présents dans les matériaux [Schwager et al., 2013] et lixiviables soit issues des dépôts atmosphériques et temporairement adsorbés dans la structure.

Le fait d'entrer un apport de polluant constant dans la structure lors des événements pluvieux est également une hypothèse simplificatrice qui ne prend pas en compte les variations de teneurs en éléments traces métalliques potentiellement importantes entre deux événements pluvieux et au cours d'un même événement et pourrait avoir un impact sur la façon dont est modélisé la rétention de ces éléments par HYDRUS-1D.

## Conclusion

Utiliser les toitures végétalisées en vue de dépolluer les eaux de pluie nécessite une conception spécifique avec une sélection de matériaux permettant d'optimiser cette fonction. En complément d'essais grandeur nature menés à long terme permettant de caractériser les capacités de rétentions d'une structure, la modélisation pourrait aider à tester en un temps limité des modalités variées en terme de nature de matériaux mais également d'épaisseurs de chaque couche. L'objectif de ce travail était donc de vérifier si un outil de modélisation communément utilisé dans la littérature comme HYDRUS-1D et son module physico-chimique permettait de simuler de façon fiable les transferts de cuivre et de zinc en se basant sur les données d'une toiture végétalisée expérimentale suivie pendant plusieurs mois au LRPC de Nancy. Les résultats obtenus montrent que cette première mise en œuvre du modèle n'est pas très satisfaisante : des limites sont apparues dans la modélisation hydraulique de la structure, aussi bien en terme de qualité de données fournies au logiciel (surestimation de l'ETP notamment) que de paramètres non pris en compte par celui-ci comme la température. La modélisation des transferts de cuivre et de zinc reproduit les tendances de rétention observées sur les toitures réelles tout en les surestimant largement. Les nombreuses hypothèses simplificatrices pour la caractérisation des réactions entre matériaux et métaux, imposées par ce module spécifique de transfert physico-chimique disponible dans HYDRUS-1D, peuvent notamment être mises en cause tout comme la fréquence des données qualité fournies, disponibles uniquement à un pas de temps mensuel. Des études complémentaires seront réalisées afin d'évaluer la sensibilité du modèle à la nature des données qualité fournies en vue de campagne de mesure à venir mieux adaptées.

## Remerciements

Le CETE de l'Est remercie le Groupement d'Intérêt Public GEMCEA pour le financement du stage ayant contribué à la réalisation de cette étude ainsi que les partenaires industriels qui ont participé à la construction de la toiture végétalisée expérimentale (BATEC Lorraine, Falienor, Saint Gobain Weber, Végétoit). Merci également à la Direction de la Recherche et de l'Innovation du MEDDTL pour le financement de cette thèse.

## Références

- American Society of Civil Engineers (2005) – The ASCE standardized reference evapotranspiration equation. Final report, January 2005, 70p.
- Berthier E., Ramier D., Versini P.A., de Gouvello B., Pinta P., Safitri L. (2013) FAVEUR : un modèle fonctionnel d'évaluation des performances hydrologiques des toitures végétalisées. World Green Infrastructure Congress 2013, 9-13 septembre 2013, Nantes (France).
- Bouzouidja R., Séré G., Claverie R., Lacroix D. (2013). - HYDRUS-1D : un outil de simulation de la performance de la rétention de l'eau d'un toit végétalisé. Poster, *World Green Infrastructure Congress 2013*, 9-13 septembre 2013, Nantes (France).
- Bradl H. (2004) – Adsorption of heavy metal ions on soils and soils constituents. *Journal of Colloid and Interface Science*, Volume 277, Issue 1, pp.1-18.
- Claverie R., Ramier D., Sabre M., Mucig C., Schwager J., de Gouvello B., Versini P.A. (2013). Le projet « TERRACES ». Poster, World Green Infrastructure Congress 2013, 9-13 septembre 2013, Nantes (France).
- Czemiel-Berndtsson J. (2010) - Green roof performance towards management of runoff water quantity and quality: a review. *Ecological Engineering* 36 (2010), 351-360.
- Dunnet N., Kingsbury N. (2008) - *Planting Green Roofs and Living Walls*. Revised and updated edition, Timber Press, 327p.
- Fournel J., Forquet N., Molle P., Grasmick A. (2013) – Modeling constructed wetlands with variably saturated subsurface-flow for urban stormwater treatment. *Ecological Engineering* 55, pp. 1-8.
- Hiltner R., Lawrence T., Tollner E. (2008) – Modeling stormwater runoff from green roofs with Hydrus-1D. *Journal of Hydrology* 358 (3-4), pp. 288 – 293.
- Mualem Y. (1976) – A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resources Research*, 12(3), pp. 513-522, 1976.
- Patel S., Tomar R., Gajera H., Golakiya B.A., Parakhia M.V. (2010) – *Handbook of Life Sciences*. New India Publishing Agency, 792p.
- Percot S. (2012) Contributions des retombées atmosphériques aux flux de polluants issus d'un petit bassin versant urbain – Cas du Pin Sec à Nantes. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Nantes, 252p.
- Pilon-Smits E., Hart H., Meesterburrie J., Naber P., Kreuler R., Van Brederode J. (1991) Variation in crassulacean acid metabolism within the genus *Sedum* : carbon isotope composition and water status dependant phosphoenolpyruvate carboxylase activity. *Journal of Plant Physiology*, 137, pp.342-346.
- Sabin L., Lim J.H., Stolzenbach K., Schiff K. (2005) – Contribution of trace metals from atmospheric deposition to stormwater runoff in a small impervious urban catchment. *Water Research*, Volume 39, Issue 16, pp. 3929-3937.
- Seidl M., Gromaire M.C., Saad M., de Gouvello G. (2013) – Effect of substrate depth and rain-event history on the pollutant abatement of green roofs. *Environmental Pollution*, 183, pp.195-203.
- Schuber M., Kluge M. (1981) - In situ studies on Crassulacean Acid Metabolism in *Sedum acre* L. and *Sedum mite* Gil. *Oecologia* 50, pp.82-87.
- Schwager J., Ruban V., Morel J.L., Claverie R., Irlès A., Thiriart J. (2013) – Identification des phénomènes prépondérant de transferts des métaux entre eaux de pluie et toitures végétalisées. Présentation orale et article, NOVATECH 2013, 23-29 juin 2013, 10p.
- Stovin V., Poë S., Berretta C. (2013) - A modeling study of long term green roof retention performance. *Journal of Environmental Management*, 131, pp. 206-215.
- Taty-Costodes V., Fauduet H., Porte C., Ho Y.S. (2005). Removal of lead (II) ions from synthetic and real effluents using immobilized *Pinus sylvestris* sawdust : Adsorption on a fixed-bed column. *Journal of Hazardous Material B123* (2005), pp. 135-144.
- Van de Voorde A. (2012) Incidence des pratiques d'entretien des toitures sur la qualité des eaux de ruissellement - Cas des traitements par produits biocides. Thèse de doctorat, Université Paris Est, 277p.
- Van Genuchten M. Th. (1980) – A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soils Science Society of America Journal* 44, pp. 892-898.