

## Proposition de thèse

### **Modélisation (hydro)géochimique du devenir des micropolluants métalliques dans les ouvrages d'infiltration des eaux pluviales**

#### **Reactive transfer modelling of metallic trace elements in stormwater infiltration basins**

**Mots clés** : gestion eaux pluviales - métaux trace – sédiments – ouvrages d'infiltration – modèles de transfert réactif

**Keywords** : stormwater management - trace metals - sediments - SUDS - reactive transfer model

**Début these/Start date** : 01/10/2024

**Date limite de candidature/Deadline for application** : vendredi 12 avril 2024 23:59/friday April 12th 23 :59

#### **Structure(s) et/ou laboratoire(s) d'accueil**

Université Gustave Eiffel – Campus de Nantes – Département GERS – Laboratoire Eau et Environnement - Allée des Ponts et Chaussées - Route de Bouaye - CS5004 - 44341 Bouguenais cedex

#### **Encadrement**

Directrice de thèse/Supervisor : Béatrice BECHET, Directrice de recherche, Université Gustave Eiffel, Campus de Nantes, LEE [-beatrice.bechet@univ-eiffel.fr](mailto:beatrice.bechet@univ-eiffel.fr) -Tel: 02 40 84 56 87

Co directeur de thèse/Co-supervisor : Mathieu Gautier, Maître de Conférences HDR, INSA Lyon, laboratoire DEEP, [mathieu.gautier@insa.fr](mailto:mathieu.gautier@insa.fr) – Tél : 04 72 43 83 48

\*\*\*\*\*

#### **Résumé du projet de thèse/Research project**

##### **Contexte et objectifs**

En 2050, 75% de la population vivra en milieu urbain sous, entre autres, la pression des impacts du changement climatique (Nations Unies, 2012). Les objectifs de développement durable (ODD 11 Villes et communautés et ODD 6 Dés-imperméabilisation et inondations par exemple) posent clairement les contraintes et des propositions de solutions pour y faire face. La gestion optimisée des eaux urbaines en fait partie, avec des enjeux forts pour les collectivités, notamment lors d'événements pluvieux intenses. Elles doivent pouvoir disposer de solutions, afin de limiter les risques d'inondation, mais aussi gérer les flux de polluants émis par les

activités anthropiques (transport, chauffage, industries...) et déposés sur les surfaces imperméabilisées. Les ouvrages dédiés à la rétention et à l'infiltration des eaux de ruissellement urbaines visent ainsi à protéger la qualité des eaux de surface et des eaux souterraines (Eckart et al. 2017). Des systèmes tels que les noues, arbres de pluie, jardins de pluie permettent de gérer les flux d'eau à petite échelle, parallèlement aux bassins destinés à la gestion de volumes d'eau plus importants. Depuis une vingtaine d'années, différents types d'ouvrages alternatifs au « tout tuyau », multifonctionnels sont intégrés progressivement dans les paysages urbains : fonction hydraulique par la régulation des flux d'eau, fonction paysagère par la végétalisation fréquente créée ou spontanée, fonction écologique par la création de milieux humides et fonction de dépollution par décantation et infiltration dans les sols des ouvrages (Keyvanfar et al. 2021). Les politiques et réglementations publiques (GEPU, GEMAPI, zonage pluvial...) soutiennent le développement d'une gestion de la ressource « eau pluviale » renouvelée.

L'évaluation des performances hydrauliques et épuratoires des ouvrages fait l'objet d'une attention particulière car elles sont fondamentales pour assurer la durabilité et l'efficacité sur le long terme du management des eaux pluviales (Yang et al. 2021). Toutefois, comme souligné par Webber et al (2022), les innovations techniques (smart systems) visent essentiellement le volet quantitatif de la gestion des eaux, et non l'enjeu de la qualité, qui est contrôlée par le transfert des polluants entre les eaux, les sédiments accumulés dans les ouvrages, et le sol sous-jacent (Banc, 2021, Dang, 2023). Les processus physiques, les processus chimiques et physico-chimiques et les processus biologiques sont les trois grandes catégories de processus qui peuvent affecter la rétention et la mobilisation des polluants. Ces processus sont complémentaires des processus hydrologiques réagissant les écoulements surfaciques de l'eau et hydrodynamiques dans les sédiments et les sols. On comprend alors que la complexité des systèmes ait freiné le développement des outils intégrés adaptés à l'évaluation des risques en gestion des eaux pluviales. Toutefois, la problématique de la performance épuratoire pourrait bénéficier de la recherche en modélisation couplée entre flux hydriques et géochimie (Simunek et al. 2006), avec comme objectif de développement d'un outil pour mieux appréhender le comportement des micropolluants.

### **Verrous scientifiques**

En gestion des eaux pluviales, de nombreuses données expérimentales ont été collectées dans la littérature afin d'évaluer la capacité épuratoire de différents ouvrages : bassins, noues, fossés filtrants... (El Mufleh et al. 2012). La modélisation du fonctionnement hydrologique de ces ouvrages a fait l'objet de nombreux travaux au niveau international. En France, une plateforme a été développée au sein de l'observatoire en hydrologie urbaine de Lyon (OTHU) pour proposer des outils de simulation hydrologique à destination des opérationnels (CANOE-HYDROTOP) (Asry et al. 2023). Les flux de matières en suspension apportées par les eaux de ruissellement sont décrits à l'aide de modèles du domaine de la mécanique des fluides. Toutefois, peu de travaux de modélisation ont été menés dans le domaine de l'hydrologie qualitative. En effet, si la littérature est très riche en données sur la qualité des eaux et des sédiments qui s'accumulent en fond d'ouvrage, la compréhension des processus de transfert et la description de la spéciation chimique, à l'aide de modèles hydrogéochimiques reste peu développée (Vezzaro et al. 2012). Ces dernières années, des expérimentations en laboratoire associées à une modélisation géochimique ont permis de simuler l'influence du pH sur le relargage d'éléments traces et majeurs (Drapeau et al. 2017, Banc et al. 2021), mais une approche de transfert réactif à l'échelle de l'ouvrage est à développer, pour compléter le volet

de modélisation quantitative (Cannavo et al. 2018), sur la base de travaux existants dans les équipes (Hanna et al., 2012).

Les verrous scientifiques sont de trois ordres : 1) la description de systèmes géochimiques complexes/est-il possible de représenter de façon simplifiée mais suffisamment générique les eaux de ruissellement et les systèmes infiltrants ?, 2) la détermination des mécanismes prépondérants d'interaction en statique et en dynamique et 3) l'adaptation des outils de modélisation disponibles en hydrologie/transfert de contaminants. Drapeau (2017) et Banc (2021) posent des bases solides de construction d'un modèle géochimique de sédiment, qu'il conviendra de consolider et d'y adjoindre un modèle de description des eaux de ruissellement et des eaux présentes dans les ouvrages. Du fait de la présence de fractions particulières porteuses de polluants pouvant compter jusqu'à 80/90% des concentrations totales, la méthodologie de détermination classique de mécanismes prépondérants d'interaction devra être questionnée. Il faudra s'appuyer à des fins de validation sur un ensemble de données relativement restreint à documenter précisément. Enfin la question de l'outil adapté à la fois à la description d'un système multicomposantes et à l'étude de l'interopérabilité avec des outils ou plateformes hydrologiques se pose si l'on souhaite que le projet vienne enrichir les outils proposés actuellement aux services opérationnels.

### **Déroulement de la thèse**

Afin de contribuer à la prise en compte des mécanismes de transfert de micropolluants métalliques dans les modèles de fonctionnement hydrodynamique et épuratoire, la démarche proposée repose sur l'utilisation de la modélisation géochimique et/ou hydrogéochimique pour la représentation des composantes de systèmes d'infiltration des eaux pluviales et la réactivité intra- et inter-composantes, associée à l'utilisation de données expérimentales issues de la littérature pour la calibration et la validation des mécanismes prépondérants.

Le travail s'organisera en 5 phases :

- 1) Mois 1 à 6 : état de l'art des outils et démarches de modélisation, collecte de données expérimentales (collaboration avec les équipes du réseau Urbis en hydrologie urbaine Paris/Lyon/Nantes)
- 2) Mois 7 à 12 : construction des modèles géochimiques et des systèmes mécanistiques (eaux de ruissellement, sédiment, sol) après choix de deux/trois cas d'étude
- 3) Mois 13 à 24 : calibration et validation des systèmes réactionnels à partir des données expérimentales
- 4) Mois 25 à 28 : test à l'échelle d'un ouvrage de la faisabilité d'un couplage avec un modèle descriptif du fonctionnement hydraulique/hydrologique
- 5) Mois 29 à 36 : rédaction du manuscrit et soutenance

Ressources nécessaires (données, logiciels, matériels d'expérimentation,..) ; Les données qui seront utilisées sont disponibles dans la littérature (par ex. articles d'état de l'art) ou auprès des partenaires. Plusieurs logiciels de modélisation géochimique, comme Phreeqc2 sont libres et téléchargeables en ligne. Il n'y a pas d'expérimentation prévue. Le risque principal réside dans les lots de données trop partiels, mais l'état des lieux initial devrait permettre de fournir des gammes de concentration pour les différents paramètres nécessaires.

Organisation mise en place : les taux d'encadrement seront respectivement de 60/40% entre B. Béchet et M. Gautier. B. Béchet interviendra sur la caractérisation globale des systèmes étudiés et la description des réactions aux interfaces eau/solide, en faisant bénéficier le.a doctorant.e de son expérience en modélisation hydrogéochimique 1D. M. Gautier apportera

son expérience sur la réactivité des matériaux (expérimentation labo) et la modélisation géochimique des matrices sédimentaires. Le.a doctorant.e sera basé.e à Nantes, avec de courts séjours sur Lyon répartis entre mois 6 et mois 24 (estimation de 3 séjours d'une semaine). Des réunions visio seront mises en place 1 fois/semaine sur les 6 premiers mois puis la fréquence sera revue si le déroulé est bon.

### **Caractère innovant**

L'état des lieux réalisé à ce jour et les discussions en cours au niveau national dans le réseau Urbis montrent que, si les outils pour décrire le fonctionnement hydraulique des ouvrages de biofiltration sont bien développés, les connaissances sur les processus réactifs sont limitées (quelques articles). Pour développer la composante mécanistique épuratoire, une approche géochimique des systèmes apparaît comme complémentaire et très novatrice.

Ce projet de thèse sera aussi l'occasion d'exploiter les données inter-observatoires du réseau Urbis. Le bilan des travaux de ces dernières années en géochimie mettra en avant les similitudes, les différences, les perspectives, avec une possibilité de valorisation. Cette action s'inscrira dans le groupe de travail « hydrologie et géochimie » du SNO Observil, pour bénéficier et contribuer à l'animation scientifique.

Il s'agira aussi de tirer bénéfice des états de l'art existants dans la littérature pour dégager des tendances générales (méta-analyse et analyses statistiques). Enfin, l'innovation réside aussi dans l'intention d'étudier la faisabilité d'un couplage avec un outil de modélisation hydrodynamique.

### **Partenariat(s) :**

La thèse s'inscrit dans la dynamique nationale en hydrologie urbaine, portée par les 3 observatoires du réseau URBIS (ONEVU Nantes, OPUR Paris, OTHU Lyon), ces 3 structures étant, depuis fin 2020, intégrées dans le Service National d'Observation des Environnements Urbains (SNO Observil labellisé CNRS-INSU). Le projet de thèse mettra à profit certaines données bancarisées dans Observil sur la qualité des eaux de ruissellement, les sédiments et le fonctionnement épuratoire des ouvrages de gestion des eaux pluviales. Ces données sont majoritairement produites dans le cadre de projets de recherche collaboratifs financés par l'ANR (ex. INOGEV) et l'Office Français de la Biodiversité (ex. Matriochkas-Micromega-Roulepur). Aussi les partenariats seront établis au sein du réseau Urbis, pour sélectionner et simuler les cas d'étude : LEESU/ENPC Marne la Vallée (Marie-Christine Gromaire – cas d'étude noue filtrante), DEEP/INSA Lyon (D. Blanc – données expérimentation en état statique/personne ressource modélisation géochimique), LEHNA Lyon (L. Lassabatere – cas d'étude bassin d'infiltration sur matériau fluvioglaciale/personne ressource modélisation hydrodynamique).

---

### ***English version***

### **Context and objectives**

By 2050, 75% of the world's population will be living in urban areas, under the pressure of climate change (United Nations, 2012). Supported by regulations, optimised urban water management is one of the major challenges facing local authorities, particularly during intense rainfall events. They need solutions to limit the risk of flooding, but also to manage the flow

of pollutants emitted by human activities (transport, heating, industry, etc.). Structures dedicated to the retention and infiltration of urban runoff are designed to protect the quality of surface water and groundwater (Eckart et al. 2017). Systems such as valleys and rain gardens make it possible to manage water flows on a small scale, alongside ponds designed to manage larger volumes of water. Over the last twenty years or so, various types of multi-functional alternatives to the 'all-pipe' system have been gradually incorporated into urban landscapes: a hydraulic function through the regulation of water flows, a landscape function through the frequent planting of created or spontaneous vegetation, an ecological function through the creation of wetlands, and a depollution function through decantation and infiltration into the soils of the structures (Keyvanfar et al. 2021).

Particular attention is paid to assessing the hydraulic and purification performance of structures, as they are fundamental to ensuring the sustainability and long-term effectiveness of stormwater management (Yang et al. 2021). However, as pointed out by Webber et al (2022), technical innovations (smart systems) essentially target the quantitative aspect of water management, and not the quality issue, which is controlled by the transfer of pollutants between the water, the sediments accumulated in the structures, and the underlying soil (Banc, 2021, Dang, 2023). Physical processes, chemical and physico-chemical processes and biological processes are the three main categories of processes that can affect the retention and mobilisation of pollutants. These processes are complementary to hydrological processes that react to surface water flows and hydrodynamic flows in sediments and soils. It is therefore understandable that the complexity of these systems has slowed down the development of integrated tools for assessing the risks associated with stormwater management. However, the issue of purification performance could benefit from research into coupled modelling between water flows and geochemistry (Simunek et al. 2006), with the aim of developing a tool to better understand the behaviour of micropollutants.

### **Scientific challenges**

In the field of stormwater management, a large amount of experimental data has been collected in the literature to assess the purification capacity of various structures: ponds, ditches, filtering ditches, etc. (El Mufleh et al. 2012). Modelling the hydrological functioning of these structures has been the subject of a great deal of work at international level. In France, a platform has been developed within the Lyon urban hydrology observatory (OTHU) to provide hydrological simulation tools for operational staff (CANOE-HYDROTOP) (Asry et al. 2023). The flow of suspended solids in run-off water is described using fluid mechanics models. However, little modelling work has been carried out in the field of qualitative hydrology. While the literature is very rich in data on the quality of the water and sediments that accumulate at the bottom of structures, the understanding of transfer processes and the description of chemical speciation using hydrogeochemical models remains underdeveloped (Vezzano et al. 2012). In recent years, laboratory experiments combined with geochemical modelling have made it possible to simulate the influence of pH on the release of trace and major elements (Drapeau et al. 2017, Banc et al. 2021), but a reactive transfer approach on the scale of the structure needs to be developed to complement the quantitative modelling component (Cannavo et al. 2018), based on existing work in the teams (Hanna et al., 2012).

The scientific challenges are threefold: 1) describing complex geochemical systems/is it possible to represent runoff and infiltrating systems in a simplified but sufficiently generic way? 2) determining the predominant static and dynamic interaction mechanisms and 3)

adapting the available hydrology/contaminant transfer modelling tools.

### **Progress of the thesis**

In order to contribute to the consideration of metal micropollutant transfer mechanisms in hydrodynamic and purification operating models, the proposed approach is based on the use of geochemical and/or hydrogeochemical modelling for the representation of stormwater infiltration system components and intra- and inter-component reactivity, combined with the use of experimental data from the literature for the calibration and validation of the predominant mechanisms.

The work will be organized into 5 phases:

- 1) Months 1 to 6: state of the art of modelling tools and approaches, collection of experimental data (in collaboration with the Urbis network teams in urban hydrology Paris/Lyon/Nantes)
- 2) Months 7 to 12: construction of geochemical models and mechanistic systems (run-off water, sediment, soil) after selection of two/three case studies
- 3) Months 13 to 24: calibration and validation of reaction systems based on experimental data
- 4) Months 25 to 28: testing the feasibility of coupling with a model describing the hydraulic/hydrological functioning of a structure.
- 5) Months 29 to 36: drafting of the manuscript and defence.

The data to be used is available in the literature or from partners. Several geochemical modelling software packages, such as Phreeqc2, are free and can be downloaded online. The main risk lies in data batches that are too partial, but the initial inventory should make it possible to provide concentration ranges for the various parameters required. The PhD student will be based in Nantes, with short stays in Lyon to strengthen the geochemical modelling aspect.

### **Innovative character**

The state of play to date and the discussions underway at national level in the Urbis network show that, while the tools for describing the hydraulic functioning of biofiltration structures are well developed, knowledge of the reactive processes is limited (a few articles, including one review). In order to develop the purification mechanics component, a geochemical approach to the systems appears to be complementary and highly innovative.

This thesis project will also provide an opportunity to exploit the inter-observatory data from the Urbis network. A review of the geochemical work carried out in recent years will highlight similarities, differences and future prospects. This project will be part of the SNO Observil 'hydrology and geochemistry' working group, so as to benefit from and contribute to the scientific activities.

It will also take advantage of existing literature to identify general trends (meta-analysis and statistical analysis). Finally, the innovation also lies in the intention to study the feasibility of coupling with a hydrodynamic modelling tool.

## **Candidature/Application**

**Compétences scientifiques et techniques requises/Skills :** sciences de l'environnement, géochimie environnementale, chimie de l'environnement, géosciences. Une première expérience en modélisation des transferts d'eau et/ou de polluants serait un plus (dans le cadre de la formation ou stage)

Environmental sciences, environmental geochemistry, environmental chemistry, soil sciences. A previous experience in modelling of water and pollutant transfer would be an advantage.

### **Modalités de candidature**

Après interaction préalable avec le laboratoire, la candidature s'effectue via un questionnaire en ligne, dont le lien figure en bas de la fiche résumé de la thèse sous le lien suivant

[https://www.ifsttar.fr/offres-theses/sujet.php?num=3898&num\\_session=1](https://www.ifsttar.fr/offres-theses/sujet.php?num=3898&num_session=1)

Renseignement à fournir : état-civil, cursus complet avec mentions éventuelles. Des éléments en rapport avec la thèse envisagée (direction, école doctorale...) sont remplis avec l'encadrant référent de la thèse.

Les pièces complémentaires suivantes sont à fournir obligatoirement :

- une annexe scientifique de 4 pages maximum, format libre, établie en liaison avec le laboratoire et précisant le contenu de la thèse, son déroulement, la méthodologie utilisée...
- un avis motivé du directeur du Master sur la candidature
- un relevé de notes de la dernière année de formation, même dans une version provisoire
- la copie du dernier diplôme (maîtrise, diplôme d'ingénieur, master recherche si celui-ci est déjà soutenu)
- la copie de la carte d'identité ou du passeport

After a preliminary interaction with the laboratory, apply via an online form (link at the bottom of the FICHE RESUME of the chosen PhD).

[https://www.ifsttar.fr/offres-theses/sujet.php?num=3898&num\\_session=1](https://www.ifsttar.fr/offres-theses/sujet.php?num=3898&num_session=1)

You will indicate your civil status and the whole of your cursus with mention of the grades. The elements linked with the PhD (supervision, doctoral school...) are determined with the PhD supervisor.

The complementary following documents are mandatory:

- a scientific annex (not more than 4 pages, free format), written in connexion with the laboratory, indicating the PhD contents, its progress, the used methodology...
- a motivated opinion on your PhD application from the supervisor of your Master
- an account (even temporary) of the grades obtained during your last student year
- a copy of your most recent diploma (master degree, engineer degree, research master degree if already defended)
- a copy of your ID card or of your passport

## Inscription en thèse/Doctoral school

- . Etablissement : Université Gustave Eiffel
- . Ecole Doctorale 3MG (Matière, molécules, matériaux et géosciences) – Pays de Loire

## Références bibliographiques/References

- Asry, A., Lipeme Kouyi, G., Fletcher, T.D., Bonneau, J., Tedoldi, D., Lassabatere, L., 2023, Sets of infiltration models for water infiltration in sustainable urban drainage systems, *Journal of Hydrology*, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2023.129477>
- Banc, C., Gautier, M., Blanc, D., Lupsea-Toader, M., Marsac, R., Gourdon, R., 2021. Influence of pH on the release of colloidal and dissolved organic matter from vertical flow constructed wetland surface sludge deposits. *Chemical Engineering Journal* 418, 129353.
- Banc C., Interactions matière organique-contaminants inorganiques dans des dépôts de solutions de traitement des eaux fondées sur la nature. Approche combinée ultrafiltration-modélisation. Thèse de l'INSA Lyon. Octobre 2021. <https://www.theses.fr/2021LYSEI066>
- Cannavo P., Coulon A., Charpentier S., Béchet B., Vidal-Beaudet L., 2018, Water balance prediction in stormwater infiltration basins using 2-D modeling: An application to evaluate the clogging process, *International Journal of Sediment Research*, doi.10.1016/j.ijsrc.2018.04.005
- Dang Du Phunc Tho, 2023, Dynamique des contaminants métalliques en gestion des eaux pluviales : apports de la spéciation physique et chimique. Thèse de Nantes Univ. Mai 2023.
- Drapeau, C., Delolme, C., Chatain, V., Gautier, M., Blanc, D., Benzaazoua, M., Lassabatère, L., 2017. Spatial and temporal stability of major and trace element leaching in urban stormwater sediments. *Open Journal of Soil Science*, 2017, 7, 347-365.
- Eckart K., McPhee Z., Bolisetti T., Performance and implementation of low impact development – A review, *Science of The Total Environment*, Volumes 607–608, 2017, Pages 413-432, ISSN 0048-9697, <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.06.254>.
- El-Mufleh A., Bechet B., Ruban V., Legret M., Clozel B., Barraud S., Gonzalez-Merchan C., Bedell J.P., and Delolme C., 2014. Review on Physical and Chemical Characterizations of Contaminated Sediments from Urban Stormwater Infiltration Basins within the Framework of the French Observatory for Urban Hydrology (Soere Urbis), *Environmental Science and Pollution Research*, 21 (8): 5329-5346
- Hanna K., Lassabatere L., Béchet B., 2012. Transport of two naphthoic acids and salicylic acid in soil: experimental study and empirical modeling, *Water Research*, 46, 4457-4467.
- Keyvanfar A., Shafaghat A., Nurhaizah I., Sapura M., Hamidah A., 2021, Multifunctional retention pond for stormwater management: A decision-support model using Analytical Network Process (ANP) and Global Sensitivity Analysis (GSA), *Ecological Indicators*, <https://doi.org/10.1016/j.ecolind.2020.107317>.
- Simunek, J., Diederik J., van Genuchten M, and Mallants D., 2006. Multicomponent Geochemical Transport Modeling Using HYDRUS-1D and HP1. *Journal of the American Water Resources Association (JAWRA)* 42(6):1537-1547.
- Webber J., Fletcher T., Farmani R., Butler D., Melville-Shreeve P., 2022, Moving to a future of smart stormwater management: A review and framework for terminology, research, and future perspectives, *Water research*, <https://doi.org/10.1016/j.watres.2022.118409>
- Yang F., Fu D., Zevenbergen C., Eldon R, 2021, A comprehensive review on the long-term performance of stormwater biofiltration systems (SBS): Operational challenges and future directions, *Journal of Environmental Management*, <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2021.113956>.
- Vezzaro L, E. Eriksson, A. Ledin, P.S. Mikkelsen, 2012, Quantification of uncertainty in modelled partitioning and removal of heavy metals (Cu, Zn) in a stormwater retention pond and a biofilter, *Water Res.*, 46 (20) , pp. 6891-6903, 10.1016/j.watres.2011.08.047