

213089 (BIB H2)

05 21 TP
427
H3
5669
1992

Le modèle CHIMIOTOX

1. Les fondements théoriques

Environnement Canada / Environment Canada
Bibliothèque Montréal Library
105, rue McGill
Montréal (Québec) H2Y 2E7
Tél. / Tel. (514) 283-9503

... pour des industries à technologies propres.

Mars 1992

**SNC ♦ LAVALIN Environnement Inc.
Environnement CANADA**



SNC • LAVALIN

Les fondements théoriques du modèle CHIMIOTOX

Pour la protection de la qualité naturelle des cours d'eau et pour la récupération de ceux-ci pour les multiples usages de la population, il se révèle nécessaire de s'attaquer au problème de la réduction des contaminants chimiques et toxiques apportés par les rejets liquides, d'origine urbaine ou industrielle.

L'énoncé peut paraître simple de prime abord. Mais la question devient rapidement complexe devant la multitude de contaminants possibles et face à la difficulté de définir objectivement le caractère «toxique» d'une substance dans un effluent ou dans un milieu récepteur.

Le présent document pose les bases théoriques du modèle CHIMIOTOX qui se définit comme une méthodologie de raisonnement et de calculs pour les objectifs suivants:

- gestion d'une liste de contaminants chimiques prioritaires à analyser dans les effluents;
- établissement d'une échelle numérique et empirique de pondération relative des caractères «de nuisance et de toxicité» de ces contaminants;
- établissement des règles de calcul de sommation des quantités de contaminants chimiques analysés dans un effluent.

Dans un premier temps, le contexte dans lequel le modèle CHIMIOTOX a été développé sera résumé. Les démarches méthodologiques de la «pondération toxique» suivront. Une liste préliminaire de coefficients de pondération toxique, *F_{tox}*, sera proposée. Les limitations d'interprétation des données de cette liste seront exposées. On détaillera alors la première application résultant de la disponibilité d'une telle liste: la sommation des charges de contaminants industriels en «Unités CHIMIOTOX». Des exemples numériques extraits de cas réels serviront d'illustration pour cette application. D'autres possibilités d'usage du modèle seront traités à savoir les mécanismes de calculs de prospective selon les documents disponibles suivants:

- les réglementations sectorielles pour les industries;
- les programmes d'assainissement des eaux (P.A.E.);
- les documents techniques de USEPA sur les limites de traitabilité de certains contaminants chimiques;
- les documents d'ingénierie de «technologies propres» et de «décharge zéro».

1. INTRODUCTION

1.1 Contexte de l'approche «TRIAD»

Selon certains documents de USEPA, les études expérimentales qui permettent d'aboutir à des mesures de protection d'un milieu aquatique peuvent se regrouper autour de trois pôles. A la figure suivante, nous pouvons schématiser ainsi cette approche.

Pour protéger un milieu, il est nécessaire d'étudier *a priori* les études d'impact des effets des contaminants chimiques. Les bio-essais à partir d'échantillons du milieu, la modélisation des apports toxiques des tributaires, les paramètres de transport ... conduisent éventuellement à l'énoncé d'objectifs environnementaux de rejet. Ce pôle d'études est axé essentiellement sur les effets dans le milieu.

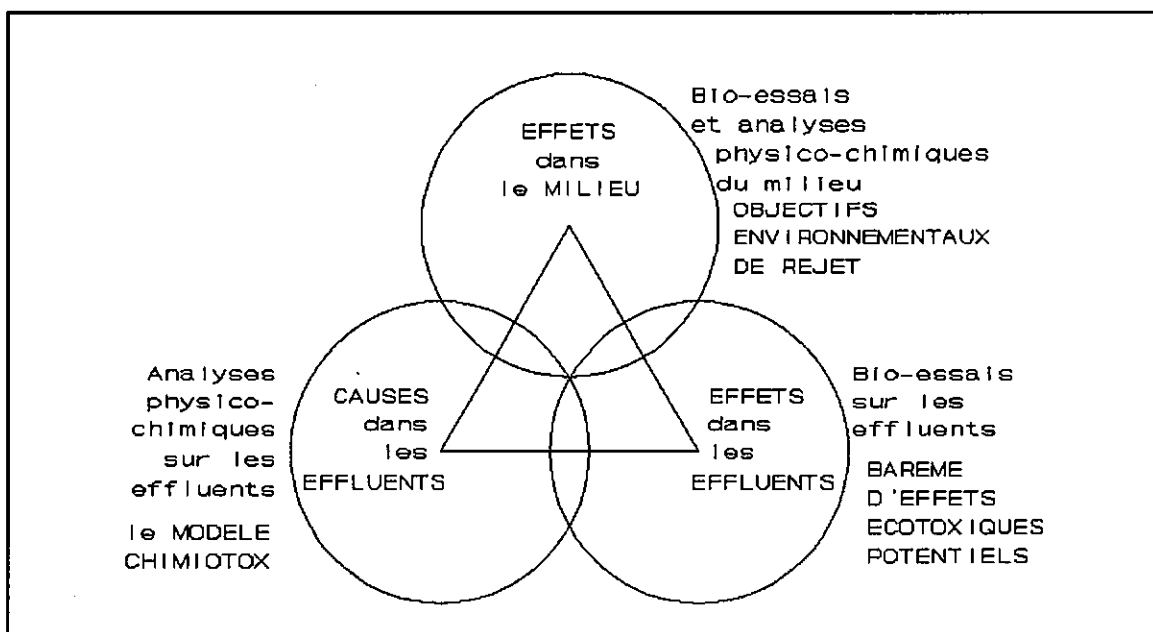


Figure 1 Schématisation de l'approche «TRIAD»

En amont, on peut chercher à évaluer le potentiel des impacts environnementaux sur un milieu aquatique en examinant les effets toxiques dans les effluents industriels ou urbains qui s'y déversent. La modélisation des résultats des bio-essais sur les échantillons d'effluents permettra d'inventer un «barème d'évaluation des effets écotoxiques potentiels» (le modèle B.E.E.P.).

Également en amont, il est aussi indispensable de procéder à l'analyse des causes chimiques de nuisance et de toxicité. Les analyses physico-chimiques des échantillons



d'effluents constituent un outil incontournable.

Le modèle CHIMIOTOX a été créé en vue de modéliser la gestion des résultats de ces analyses. À cette étape-ci, il est nécessaire de souligner que les résultats de l'application de ce modèle ne prétendent nullement remplacer les objectifs environnementaux de rejet énoncés pour un milieu ni la modélisation des résultats des bio-essais sur des échantillons d'effluents.

1.2 Définition générale et objectifs du modèle CHIMIOTOX

Dans le contexte décrit précédemment, le modèle CHIMIOTOX peut se définir comme une démarche méthodologique de calculs aux fins de gestion des résultats des analyses physico-chimiques des effluents.

Ses objectifs sont:

- répondre aux préoccupations environnementales dues à la présence de contaminants chimiques toxiques dans les effluents;

- constituer un outil de gestion environnementale des résultats des analyses physico-chimiques des effluents, présentant le plus de cohérence possible avec les deux autres pôles d'études (objectifs environnementaux de rejet et évaluation d'effets écotoxiques potentiels).

Pour atteindre ces objectifs, deux concepts ont été développés:

- la «pondération toxique»: à chaque contaminant chimique, jugé prioritaire, est affecté un coefficient relatif de pondération toxique, appelé communément F_{tox} , calculé sur la base des critères de qualité de l'eau (eux-mêmes déterminés à partir des résultats des bio-essais et de considérations toxiques et écotoxiques);

- la «sommation de la contamination chimique» d'un effluent avec la définition d'une nouvelle unité empirique, l'UNITÉ CHIMIOTOX (U.C.).

Il faut absolument prendre soin de distinguer entre la sommation de la contamination chimique (teneurs de contaminants chimiques dans un effluent) et la «toxicité chimique» (un indicateur quelconque des effets toxiques actuels dans un effluent).

1.3 Auteurs du modèle CHIMIOTOX

Initialement, le modèle CHIMIOTOX est développé conjointement par des personnes-ressources du groupe SNC • LAVALIN Environnement Inc. et de Environnement Canada.

Par la suite, des examens critiques par des pairs de différents milieux (universités, associations industrielles, intervenants gouvernementaux) seront menés. Des démarches pour consolider et pour étendre le modèle à d'autres applications seront entreprises avec d'autres ressources humaines, scientifiques et techniques.



SNC • LAVALIN

Il est convenu au départ que ce sera un outil collectif sans brevet commercial, conçu de la façon la plus objective et la plus réaliste que possible, mis à la disposition de tous les intervenants en environnement.

2. LA PONDÉRATION TOXIQUE

2.1 Une liste de contaminants prioritaires

Toutes les substances ne se trouvant pas initialement dans un affluent d'une industrie, par exemple, mais qui se retrouvent dans un effluent du même établissement peuvent être classées comme «contaminants chimiques» rejetés par les activités industrielles.

La question qui se pose alors est: faut-il «surprotéger l'environnement» au point d'imposer des changements si radicaux aux industries ou autres activités que la société actuelle ne puisse supporter, ou prioriser une liste de départ comme le suggère le CCCE («le Comité consultatif canadien de l'environnement») dans son rapport «Listing Toxics Under CEPA - Is the Chemistry Right?»(May 1988, Minister of Supply and Services Canada 1988, Cat. No. En 92-8/1988E)?

La deuxième solution est adoptée ainsi que l'esprit de ses principales recommandations, à savoir:

a) - Une liste initiale de 130 paramètres prioritaires provenant de la liste des 129 substances prioritaires de USEPA, modifiée par différents intervenants du MENVIQ et de Environnement Canada. Les modifications sont: la suppression des pesticides et apparentés qui ne sont pas actuellement fabriqués par les industries locales, l'ajout de substances spécifiques aux industries des pâtes et papier comme les organo-chlorés, et les HAP jugés de plus en plus comme prioritaires; on veille à former une liste limitée et «gérable» (paramètres mesurables, car on ne peut surveiller ce que l'on ne peut pas mesurer!).

b) - Les contaminants retenus ont tous des critères de qualité du milieu aquatique, plus ou moins documentés.

c) - Un mécanisme est prévu à l'étude pour rendre la liste «dynamique»: référence obligatoire aux nouveautés de source sûre sur les formes de toxicité; mécanisme d'exclusion et d'inclusion de contaminants; révision périodique par des pairs pour atteindre un haut degré de rigueur scientifique.

d) - Les paramètres conventionnels comme les MES et la DBO₅ ne sont pas retenus dans la démarche méthodologique car ils sont jugés trop «généraux» et non spécifiques pour cette étape-ci.

La liste des contaminants prioritaires retenue initialement est donnée en annexe 1. du présent document.

2.2 Le besoin de la «pondération toxique»

Au cours de la deuxième étape de la démarche, il se révèle nécessaire de procéder à l'affectation d'un coefficient de pondération toxique à chacun des contaminants retenus sur la liste prioritaire. Cette nécessité découle des faits suivants:

- les contaminants n'ont pas tous les mêmes degrés d'acuité toxique; les critères de qualité de l'eau appartiennent à un spectre très large de valeurs;
- il se révélera très utile de cibler les interventions locales (les sources exactes d'émission de contaminants très toxiques), solutions moins coûteuses et plus gérables que de s'éterniser devant des filières d'interventions généralistes et irréalistes;
- le besoin de sommation des contaminants chimiques à un moment donné, pour les fins de gestion et de communication à différents niveaux d'intervenants et de publics.

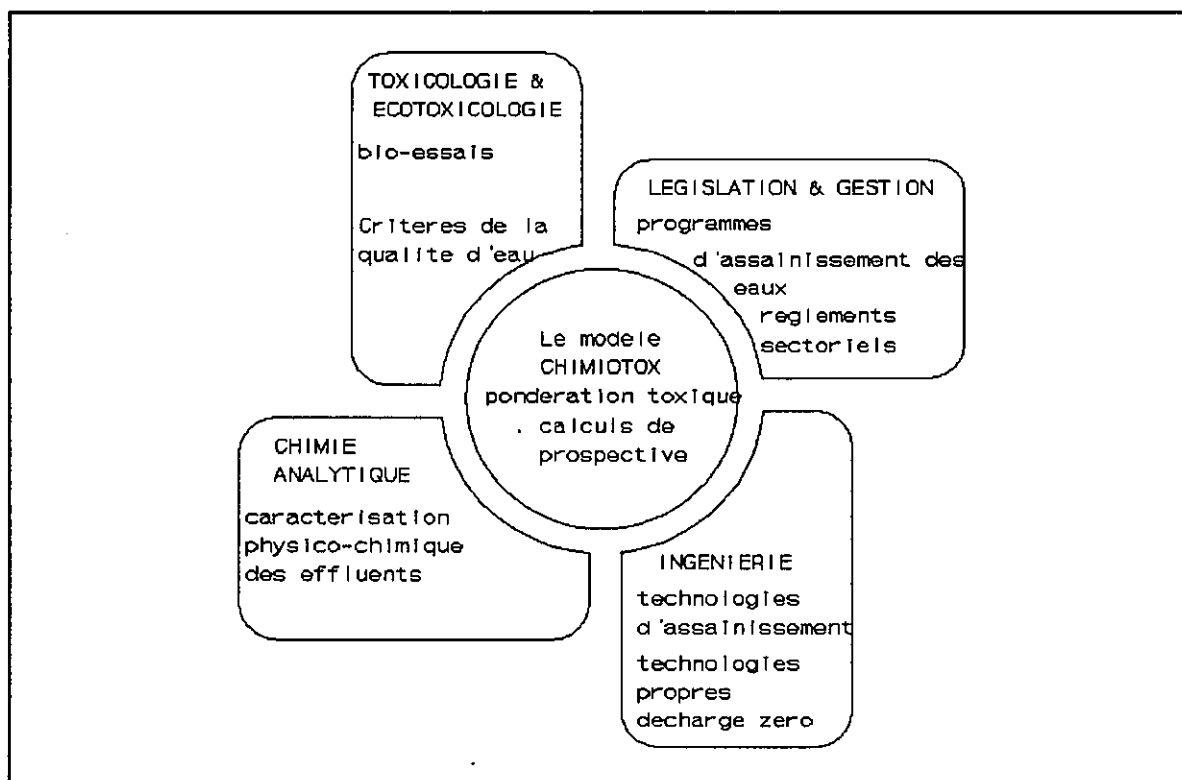


Figure 2 Le modèle CHIMIOTOX: une approche synthétique et agrégante

2.3 La méthodologie générale de la démarche

La pondération toxique est une première étape de la méthodologie générale du



SNC • LAVALIN

modèle. Pour bien comprendre le pourquoi à ce moment-ci et certains points importants par la suite, on peut schématiser l'approche méthodologique adoptée sur la figure ci-dessus.

C'est une approche qui se veut essentiellement synthétique et agrégante.

Ainsi, l'interprétation et le traitement des résultats des analyses physico-chimiques d'un programme de caractérisation d'un effluent doit se faire à la lumière des données reconnues de la toxicité et de l'écotoxicité. Le modèle CHIMIOTOX doit être un milieu de convergence des données des deux disciplines initiales.

Puis, il doit posséder des moyens pour permettre l'incorporation des données de la législation et de l'ingénierie (assainissement des eaux usées, «technologies propres» et «décharge zéro»).

Concernant cette étape-ci de la pondération toxique, on se base essentiellement sur les critères de la qualité de l'eau du Saint-Laurent établis par le MENVIQ.

2.4 Résumé sur l'établissement des critères de la qualité de l'eau

Pour répondre aux préoccupations environnementales des écotoxicologistes et des biologistes, il a été jugé nécessaire de résumer la démarche qui a conduit à l'établissement des critères de la qualité de l'eau. Cette démarche est détaillée dans le document «Méthodologie de calcul des critères de la qualité de l'eau pour les substances toxiques», Ministère de l'environnement du Québec, Québec novembre 1990, 147 p.

L'ensemble des procédures d'analyse et de calcul peuvent se regrouper en trois activités principales:

- a) la collecte et l'analyse des données de la littérature spécialisée;
- b) le traitement des données sélectionnées;
- c) l'élaboration des critères de la qualité de l'eau.

Le lecteur intéressé par les points saillants de cette méthodologie trouvera en annexe 2. un résumé détaillé sur ces procédures et les bases bibliographiques de toxicologie et d'écotoxicologie.

Pour chaque contaminant prioritaire, on dispose actuellement de quatre critères. Pour la protection du milieu aquatique, deux critères spécifiques sont retenus:

- critère de toxicité aquatique aigüe, CTAA;
- critère de toxicité aquatique chronique, CTAC.

Pour la récupération du milieu aux fins de multiples usages par la population (pour la santé humaine), deux autres critères sont disponibles:

- critère de contamination d'organismes aquatiques, CCOA;



SNC • LAVALIN

- critère de qualité d'eau brute (approvisionnement en eau potable), CQEB.

Un exemple de fiche de critères pour un contaminant chimique est donné en annexe 3. Pour de plus amples informations, on se référera au document «Critères de qualité de l'eau», Ministère de l'environnement du Québec, Québec octobre 1990, 423 p.

2.5 Définition du «critère de plein-usage de l'eau (C.P.U.)»

Dans la démarche similaire pour l'établissement de «Facteurs internationaux d'équivalence de la toxicité (FET) pour les dioxines et furannes», document modifié de NATO/CCMS 1988, un critère unique de toxicité (un type précis de toxicité) sert de base de comparaison. De plus, on procède à l'établissement de FET d'un regroupement de substances chimiques présentant des structures moléculaires similaires.

Dans le cas présent, la liste de contaminants prioritaires est relativement longue et variée. Les données sur un même critère de toxicité ne sont pas souvent disponibles aux fins de comparaison.

Dans ce contexte et dans la méthodologie de la démarche (une liste initiale de départ pour les fins de gestion), il a été choisi de façon délibérée de proposer une démarche initiale suivante. À savoir, la définition d'un critère synthétique de plein-usage de l'eau (CPU) ainsi mis en équation numérique:

$$CPU = \text{Min} (CTAA, CTAC, CCOA, CQEB)$$

le CPU ayant la valeur numérique du plus contraignant des critères.

On vise un objectif de plein-usage de l'eau. Le CPU répond de façon sécuritaire à cet objectif. C'est sur cette base que se définira le coefficient de pondération toxique *Ftox*.

En annexe 4., est proposée la liste des CPU pour tous les contaminants prioritaires.

2.6 Définition du coefficient de pondération toxique *Ftox*

Suite à la définition du CPU et sur la base de celle-ci, nous poursuivons une démarche similaire pour les FET mentionnés ci-dessus en mettant en équation numérique un coefficient de pondération toxique *Ftox* pour une substance *i* de la façon suivante:



SNC • LAVALIN

$$F_{tox_i} = \frac{\text{CPU de référence}}{\text{CPU de } i}$$

Ce coefficient n'a pas de dimension et on peut par la suite décider de fixer le choix du CPU de référence selon les applications particulières. Il faut évidemment que les CPU soient exprimés dans les mêmes unités.

En annexe 5., on trouvera la liste des *F_{tox}* ainsi définis.

2.7 Quelques limitations conjoncturelles sur les *F_{tox}*

Cette liste de valeurs nécessite quelques réserves conjoncturelles suivantes:

- les critères spécifiques pour chaque molécule de HAP sont malheureusement extraits de critères dits génériques, sauf dans quelques cas particuliers; en l'absence d'information, c'est la méthode la plus sécuritaire qui puisse exister;

- il en est de même pour la majorité des acides résineux et gras, les phénols et les phénols chlorés;

- dans ce contexte, certaines valeurs de *F_{tox}* trouvées nécessitent une consolidation d'urgence soit par des bio-essais spécifiques soit par des justifications théoriques de corrélation entre les structures moléculaires et les effets de toxicité spécifique (approche QSAR par exemple).

3. LA SOMMATION DES CHARGES EN UNITÉS CHIMIOTOX

3.1 Le besoin de synthèse des résultats

Aux fins de gestion environnementale et aussi de communications, il est indispensable de pouvoir la synthèse des résultats d'analyses physico-chimiques d'une campagne de caractérisation, par exemple. Pour les intervenants directs, les résultats détaillés sont nécessaires. Pour les gestionnaires d'un autre niveau, la synthèse aide beaucoup plus aux prises de décision. On peut imaginer des listes agrégées par famille de contaminants (les HAP, les acides résineux et gras, les phénols, les BPC et les dioxines et furannes, les phtalates chez les organiques et les métaux lourds toxiques, les métaux lourds nuisibles et les anions chez les inorganiques), par industrie, par secteur industriel, par secteur géographique, ...

Enfin, pour l'opinion publique et les grands médias, il est nécessaire de disposer d'un indicateur global des progrès (ou non) dans les efforts de réduction des rejets industriels toxiques. Cet indicateur global devra s'exprimer en pourcentage, c'est ce qui entraîne le plus



SNC • LAVALIN

grand impact cognitif.

Les travaux de synthèse impliquent forcément une sommation numérique des résultats détaillés. Cette opération nécessite le recours à une argumentation scientifique acceptable pour être valide et rigoureux.

3.2 Méthodologie générale de sommation

On applique ici les principes de base pour pouvoir disposer des règles d'additivité. Ainsi, pour caractériser la dureté totale d'une eau contenant certaines quantités d'ions de calcium et de magnésium, on cherche à convertir les teneurs (mg/L de Ca et mg/L de Mg) de ces substances en unité CaCO₃ équivalent, soit mg/L CaCO₃. La dureté totale sera alors égale à la sommation de la dureté calcique et de la dureté magnésienne exprimées en CaCO₃.

On connaît également la conversion des masses de combustibles différents en B.T.U., des masses alimentaires en calories ou en vitamine C, ...

Plus proche de nos préoccupations, la teneur globale d'un mélange de dioxines et de furannes peut s'exprimer en équivalents de 2,3,7,8-TCDD grâce aux FET (facteurs d'équivalence de toxicité), sur la base de comparaison d'une toxicité commune.

Dans la présente démarche méthodologie, à défaut de données complètes sur une telle base, on peut établir consciemment par consensus une convention commune de comparaison sur un critère nouvellement défini aux fins de gestion environnementale, le CPU tel que proposé que ci-dessus.

C'est une première étape, qui devra s'ajuster le jour où toutes les informations sont disponibles pour les contaminants prioritaires. Néanmoins, c'est toujours mieux que de stagner et de voir l'environnement se dégrader à force d'hésitations administratives et de divergences ultra-spécialistes.

3.3 Définition de l'UNITÉ CHIMIOTOX (U.C.)

Par conséquent, après considération de tout le contexte actuel tel que décrit ci-dessus, il est proposé de convertir toutes les charges (kg) de contaminants chimiques d'un effluent dans une même unité équivalente de nuisance et de toxicité, l'UNITÉ CHIMIOTOX ainsi définie:

$$U.C. = Kg \times F_{tox}$$

F_{tox} étant le coefficient de pondération toxique de chaque contaminant, similaire en quelque sorte au facteur d'équivalence de toxicité (FET) pour le regroupement des dioxines



SNC • LAVALIN

et des furannes.

Pour un ensemble de n contaminants prioritaires i détectés dans un effluent e , on peut alors faire la sommation de ceux-ci:

$$U.C._e = \sum U.C._i$$

Remarques sur les unités

Lorsque les critères de qualité de l'eau sont exprimés en mg/L, les CPU le sont dans la même unité et le coefficient de pondération toxique est calculé en conséquence. L'UNITÉ CHIMIOTOX est égale alors à la charge massique multipliée par le F_{tox} déterminé dans cette convention. C'est en quelque sorte ce dernier qui assure la conversion en unité équivalente pour l'applicabilité de la règle d'additivité.

On peut aussi, par ce même raisonnement, exprimer les critères de qualité de l'eau en équivalents de $CaCO_3$, dans les cas des métaux lourds en particulier, en équivalents de «Solides totaux» pour l'ensemble des inorganiques (car ce paramètre de laboratoire englobe la quasi-totalité de ces inorganiques) et en DCO ou en COT pour les organiques (même remarque que précédemment). Alors, les CPU seront calculés dans les unités équivalentes en conséquence et d'autres listes de valeurs spécifiques de F_{tox} seront disponibles. Cependant, il faut prendre soin alors de ne pas faire ensemble la sommation des inorganiques et des organiques. Car, il s'en suivra des types différents d'UNITÉS CHIMIOTOX; on aurait par exemple:

$$U.C. = Kg \text{ de } S.T. \times F_{tox_{ST}}$$

$$U.C. = Kg \text{ de } DCO \times F_{tox_{DCO}}$$

$$U.C. = Kg \text{ de } COT \times F_{tox_{COT}}$$

A l'usage, les avantages de l'une ou l'autre méthode décideront du choix définitif et pratique.

4. EXEMPLE D'INTERPRÉTATION D'UNE CARACTÉRISATION D'EFFLUENT

(à suivre)

