

SYNTHESE / EXTENDED ABSTRACT
FRANÇAIS / ENGLISH

**CARACTERISATION DU POTENTIEL DE MOBILITE
DES POLLUANTS ORGANIQUES ET INORGANIQUES
DANS LES SOLS ET SEDIMENTS**

***CHARACTERISATION OF THE MOBILITY POTENTIAL
OF ORGANIC AND INORGANIC POLLUTANTS IN SOILS
AND SEDIMENTS***

novembre 2018

J.-M. CÔME, D. ESRAEL - BURGEAP
L. GONZALEZ, S. BISONNE, J. MÉHU, E. VERNUS - PROVADEMSE



Créée en 1989 à l'initiative du Ministère en charge de l'Environnement, l'association RECORD – REseau COopératif de Recherche sur les Déchets et l'Environnement – est le fruit d'une triple coopération entre industriels, pouvoirs publics et chercheurs. L'objectif principal de RECORD est le financement et la réalisation d'études et de recherches dans le domaine des déchets et des pollutions industrielles.

Les membres de ce réseau (groupes industriels et organismes publics) définissent collégalement des programmes d'études et de recherche adaptés à leurs besoins. Ces programmes sont ensuite confiés à des laboratoires publics ou privés.

Avertissement :

Les rapports ont été établis au vu des données scientifiques et techniques et d'un cadre réglementaire et normatif en vigueur à la date de l'édition des documents.

Ces documents comprennent des propositions ou des recommandations qui n'engagent que leurs auteurs. Sauf mention contraire, ils n'ont pas vocation à représenter l'avis des membres de RECORD.

Remerciements :

Le consortium en charge de l'étude remercie les experts suivants pour les échanges ayant nourri ce rapport : Claire Alary (IMT Lille-Douai), Denise Blanc (INSA Lyon / DEEP) et Jean-Louis Morel (GISFI).

- ✓ Pour toute reprise d'informations contenues dans ce document, l'utilisateur aura l'obligation de citer le rapport sous la référence :

RECORD, Caractérisation du potentiel de mobilité des polluants organiques et inorganiques dans les sols et sédiments, 2018, 208 p, n°16-0158/1A

© RECORD, 2018

Résumé

L'objectif général de l'étude est la réalisation d'une mise à jour de l'état de l'art sur les différentes méthodologies d'évaluation de la mobilité des polluants organiques et inorganiques dans les sols et sédiments et les outils de modélisation associés. L'inventaire critique des méthodologies et outils disponibles a vocation à nourrir la constitution d'une « boîte à outils », laquelle s'appuie également sur des essais de mise en œuvre. **L'étude s'articule autour de 4 tâches :**

- Tâche 1 - Etat de l'art des procédures d'évaluation de la mobilité des polluants organiques et inorganiques dans les sols et sédiments pollués

La Tâche 1 consiste en une analyse critique de la littérature disponible relative aux procédures d'évaluation de la mobilité des polluants organiques et inorganiques dans les sols et sédiments. Le rapport présente dans un premier temps un état des lieux des contextes d'évaluation de la mobilité des polluants, en France pour l'essentiel, complété par la situation dans d'autres européens. Dans un second temps, il est présenté une approche conceptuelle de la mobilité des polluants dans les sols et sédiments, comprenant d'une part une typologie des matrices et des polluants, et d'autre part une description des mécanismes en jeu dans la mobilité entre la matrice sols/sédiments et l'eau. Enfin, le rapport décrit les procédures d'évaluation de la mobilité des polluants.

- Tâche 2 - Identification des outils de modélisation pour interpréter des données de lixiviation

La Tâche 2 consiste à identifier dans la littérature des logiciels utiles à l'interprétation des essais de mobilité et à fournir des éléments d'aide à la décision concernant le choix et la mise en œuvre des logiciels. Le rapport est structuré autour de trois types de logiciels : pour interpréter des résultats d'essais sans usage de modélisation mathématique, pour modéliser des essais statiques, pour modéliser des essais dynamiques. Le rapport présente par ailleurs des considérations pratiques sur la mise en œuvre des logiciels, en particulier une enquête auprès de donneurs d'ordre, de prestataires et de laboratoires de recherche sur l'utilisation des logiciels.

- Tâche 3 - Développement d'une procédure d'évaluation, essais de mise en œuvre

La Tâche 3 présente dans un premier temps la sélection d'outils retenus pour la « boîte à outils » : 6 essais de mobilité (lixiviation réglementaire, test de capacité de neutralisation acide, extraction séquentielle, contact eau/NAPL, percolations) et 4 outils de modélisation (PhreeqC, Loi de Raoult, OREOS, MODFLOW-SURFACT). Dans un second temps, 5 des 6 essais de mobilité (tous sauf le contact eau/NAPL) ont été mis en œuvre à titre illustratif sur deux sols, l'un pollué par des métaux et l'autre par des HAP. Enfin, 4 cas d'application des essais et outils de modélisation correspondants ou proches de ceux retenus pour la « boîte à outils » sont présentés.

- Tâche 4 - Propositions méthodologiques

La Tâche 4 présente la sélection d'outils retenus pour la « boîte à outils », laquelle comprend 6 essais de mobilité et 4 outils de modélisation :

- Essais de mobilité : 4 essais statiques (lixiviation réglementaire, test de capacité de neutralisation acide, extraction séquentielle, contact eau/NAPL) et 2 essais dynamiques (percolations)
- Outils de modélisation : PhreeqC, Loi de Raoult, OREOS ou un logiciel équivalent pour les essais statiques, MODFLOW-SURFACT ou un logiciel équivalent pour les essais dynamiques.

Mots clés : procédures d'évaluation, essai de mobilité, polluants organiques, polluants inorganiques, sols, sédiments, essai statique, essai dynamique, essai de conformité, essai de caractérisation, essai de simulation, sols pollués, sédiments pollués, lixiviation, percolation, lysimètre, outils de modélisation, solution analytique, code numérique, mobilité de polluants, capacité de neutralisation acide, extraction séquentielle, contact eau/NAPL.

Summary

The main objective of this study is to conduct an updated review of the different methodologies commonly used to assess the organic and inorganic pollutants mobility in soils and sediments. Moreover, the predictive modeling tools used to simulate the experimental data are also described. The critical inventory of available methodologies and modeling tools aims to define a "toolbox", which also included application tests.

The study is based on four tasks:

- Task 1 - Review of methodologies to assess the mobility of organic and inorganic Pollutants in Polluted Soils and Sediments

The task 1 report presents a critical analysis of the available methodologies for assessing the mobility of organic and inorganic pollutants in soils and sediments. In the first part, an overview of the French and European framework of pollutants mobility assessment is presented. The second part describes a conceptual approach of pollutants mobility. This approach comprises the matrices and pollutants typologies, as well as the description of the mechanisms involved in mobility between the soil / sediment and water. Finally, the report describes the procedures for assessing the pollutants mobility.

- Task 2 - Modeling tools identification to understand the pollutants leaching behavior data

The task 2 consists of identifying softwares useful for interpreting mobility tests and providing decision support for the choice and implementation of softwares. The report is structured around three types of software: i) to interpret test results without the use of mathematical modeling, ii) to model static tests, iii) to model dynamic tests. The report also presents practical considerations on the implementation of software, in particular a survey of principals, service providers and research laboratories on the use of software.

- Task 3 - Development of an assessment approach and tests application

The Task 3 report presents in the first part the chosen tools for the "toolbox": six mobility tests (regulatory leaching tests, acid neutralization capacity test, sequential extraction, water/NAPL contact, percolation tests) and four modeling tools (PhreeqC, Raoult's Law, OREOS, MODFLOW-SURFACT). The second part presents the experimental results of five mobility tests (the water / NAPL contact was excluded) conducted on two soils, one polluted by polluted applications and the other by PAHs. Finally, four case study which presents similar tests and modeling tools applications to those selected for the "toolbox" are presented.

- Task 4 - Methodological proposals

The Task 4 report presents the "toolbox", which includes six mobility tests and four modeling tools:

- Mobility tests: four static tests (regulatory leaching, acid neutralization capacity test, sequential extraction, water / NAPL contact) and two dynamic tests (percolation tests)
- Modeling tools: PhreeqC, Raoult's Law, OREOS or equivalent software for static tests, MODFLOW-SURFACT or equivalent software for dynamic tests.

The methodological approach of the "toolbox" application is also described.

Keywords: assessment methodologies, mobility test, organic pollutants, inorganic pollutants, soils, sediments, static test, dynamic test, compliance test, characterization test, simulation test, pollutants mobility, leaching, percolation, acid neutralization capability, sequential extraction, water / NAPL contact, modeling tools.

Contexte et objectifs de l'étude

L'évaluation de la mobilité (à l'eau) des polluants organiques et inorganiques dans les sols et les sédiments est un enjeu majeur, à la fois pour la surveillance de sites (risques pour l'homme et les ressources en eau), l'estimation de filières de traitement et l'étude du potentiel de valorisation de ces matériaux.

Sur un plan réglementaire, les problématiques nécessitant une évaluation de la mobilité des polluants dans les sols et sédiments concernent la réglementation sites et sols pollués d'une part, et la réglementation déchets d'autre part. La typologie de problématiques peut être définie comme suit :

- les sols pollués. La méthodologie nationale de gestion des sites et sols pollués est définie par la Note Ministerielle du 19/04/2017 et son annexe « Méthodologie nationale de gestion des sites pollués » (DGPR, 2017) ;
- les sédiments, quand la question de leur gestion se pose, font en général l'objet d'une extraction et d'une gestion à terre et deviennent donc de facto des déchets (recensés dans le Catalogue Européen des Déchets sous les rubriques 17 05 05* ou 17 05 06 selon leur dangerosité) ;
- les terres excavées (polluées ou non polluées), lorsqu'elles sortent du site dont elles sont extraites, relèvent également de la législation sur les déchets (note nomenclature sur les déchets du 25 avril 2017) recensées dans le Catalogue Européen des Déchets sous les rubriques 17 05 03* ou 17 05 04 selon leur dangerosité). Le guide DGPR « Guide de valorisation hors site des terres excavées issues de sites et sols potentiellement pollués dans des projets d'aménagement » (DGPR, 2017) décrit, sous forme de démarche volontaire, les modalités avec lesquelles les terres excavées issues de sites et sols potentiellement pollués peuvent être valorisées hors site dans une optique de développement durable, de protection des populations et de l'environnement.

Sur un plan technique, différentes situations nécessitent l'évaluation de la mobilité des polluants dans les sols et sédiments :

- les sols en place dans le milieu souterrain, considérés comme des « sources sols » : en conditions naturelles ou dans le cadre d'une technique de traitement ;
- les terres excavées : diagnostic initial préalable à l'excavation, évaluation de la compatibilité avec telle ou telle filière (admission en installation de stockage de déchets, admission en installation de traitement de déchets, réutilisation hors site dans des projets d'aménagement) ;
- les sédiments lacustres et des cours d'eau dragués et gérés à terre : diagnostic approfondi comprenant une analyse du comportement des polluants et des risques de transfert dans le cadre des filières de stockage ou de valorisation (en génie civil ou en agriculture).

De nombreux essais de mobilité sols/eau ou sédiments/eau ont été développés en laboratoire ou le plus souvent adaptés à partir d'essais développés pour les déchets. Les essais les plus courants sont des essais de lixiviation, mis en œuvre sur les matrices soumises à différentes conditions physico-chimiques (pH, potentiel redox, présence d'agents complexants, ...). Toutefois, la grande diversité des essais et des conditions physico-chimiques proposée dans les procédures (normalisées ou non) nécessite de sélectionner les essais les plus adaptés aux caractéristiques des matériaux et conditions du site d'étude, ainsi que ceux pour lesquels on dispose du plus de retour d'expérience quant à l'interprétation.

Context and objectives of the study

Assessing the mobility (in water) of organic and inorganic pollutants in soils and sediments is a major issue, with regard to site surveillance (risks for people and water resources), assessing the processing channels and studying the recycling potential of these materials.

In terms of regulations, the problems requiring assessment of the mobility of pollutants in soils and sediments concern, on the one hand, regulations for polluted sites and soils and, on the other, waste regulations. The problem typology can be defined according to the following categories:

- *polluted soils*: The national methodology for the management of polluted sites and soils is defined by the Ministerial Note of 19/04/2017 and its annex: "National methodology for the management of polluted soils" (DGPR, 2017)).
- *sediments*: when the question of managing sediments arises, these are generally the subject of extraction and management on the surface, and therefore become de facto waste (listed in the European Waste Catalogue in sections 17 05 05* or 17 05 06) according to the degree of hazard.
- *excavated earth (polluted or unpolluted)*: when this exits the site from which it is extracted it comes under waste legislation (note on the nomenclature of waste of 25 April 2017), listed in the European Waste Catalogue in sections 17 05 03* or 17 05 04) according to the degree of hazard. The DGPR guide "Guide for off-site reuse of excavated earth from sites and soils that are potentially polluted in development projects" (DGPR, 2017) describes, in the form of a voluntary approach, the methods whereby the excavated earth from potentially polluted sites and soils may be reused off-site with a view to sustainable development and the protection of the population and the environment

Technically, different situations require the assessment of pollutant mobility in soils and sediments:

- *the soils in place in the subterranean environment*, considered as "source soils": under natural conditions or in the context of a processing technology;
- *excavated soils*: initial diagnostic prior to excavation, assessment of compatibility with a given industrial channel (permission for installing waste storage, permission for installing waste treatment, reuse off-site for development projects);
- *riparian sediments and sediments from dredged waterways for management on land*: in-depth diagnostic including analysis of the behaviour of pollutants and transfer risks in the context of storage options and recycling (in civil engineering or agriculture).

Many soil/water or sediment/water mobility tests have been developed in the laboratory or more commonly, adapted from tests developed for waste. The most common tests are leaching tests, implemented on matrices subjected to different physical-chemical conditions (pH, redox potential, presence of complexing agents, etc.). However, the wide diversity of tests and physical-chemical conditions proposed in the procedures (standardised or not) requires selecting the tests most suited to the characteristics of the materials and the conditions of the study site, as well as those for which there is the most feedback available in terms of interpretation.

Par ailleurs, la diversité des mécanismes susceptibles d'être mis en jeu durant les essais de mobilité conduit dans certains cas à une grande complexité d'interprétation des résultats des essais, nécessitant l'usage d'outils de modélisation pour préciser les hypothèses sur les principaux mécanismes réactionnels impliqués dans la mobilité des polluants. Là aussi, se pose la question du choix des outils de calcul pertinents pour un essai de mobilité donné.

Ces difficultés, tout particulièrement pour les maîtres d'ouvrage gestionnaires de sites, de choix des essais de mobilité et si besoin d'outils de calcul associés pour un problème d'étude donnée, sont à l'origine de la présente étude.

L'objectif de l'étude est la réalisation d'un état de l'art des essais de mobilité et des outils de calcul associés, puis la constitution d'une « boîte à outils » s'appuyant sur la mise en œuvre d'essais en laboratoire et d'outils de modélisation associés. Le livrable principal de l'étude est un rapport de propositions méthodologiques pour le choix, la mise en œuvre et l'interprétation d'essais de mobilité.

Positionnement de l'étude

Matrices considérées

Les matrices considérées sont les sols et les sédiments continentaux (lacs, cours d'eau, canaux, ...). Mentionnons que le choix entre sols et sédiments n'est pas un critère clivant pour le choix des essais de mobilité.

Polluants considérés

Les polluants pris en compte sont les suivants :

- composés inorganiques : deux groupes de composés métalliques présentant un comportement de mobilisation différent : les cations (Ni, Cu, Zn, Cd, Pb, ...) et les oxyanions (MoO₄²⁻, CrO₄²⁻, AsO₄³⁻, Sb(OH)₆...);
- composés organiques : les Hydrocarbures Aliphatiques (HC-ali) et les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP). Dans les situations où ces composés sont associés à d'autres composés dans la matrice, ces derniers sont pris en compte (par exemple, des goudrons de houille ou une coupe pétrolière de type gazole).

Essais de mobilité

Pour les essais en laboratoire concernant la mobilité des polluants dans les sols et matériaux du sol, la norme ISO/FDIS 18772:2007E est considérée comme une norme « chapeau » structurante.

Pour les sédiments gérés à terre (comme des déchets), la norme EN12920 encadre tous les essais destinés à évaluer le comportement à la lixiviation en conditions spécifiés (scénarios de stockage ou de valorisation), et dans le cas d'une orientation directe en stockage ou en filière de valorisation en techniques routières encadrés par la réglementation, les normes EN12457-2 et EN14405 s'appliquent.

Dans tous les cas, on définit trois types d'essais en laboratoire :

- des essais de conformité aux valeurs réglementaires, s'appuyant typiquement sur des essais simples en batch décrits dans les normes ISO/TS 21268-1 et ISO/TS 21268-2 selon le rapport Liquide/Solide ou essais équivalents EN 12457-1 et EN 12457-2 pour les déchets ;
- des essais de caractérisation, fournissant des éléments de compréhension des échanges matériau/eau, en distinguant :
 - des tests paramétriques, visant à mesurer l'impact d'un paramètre sur la qualité de l'éluat (pH, potentiel redox, ...) et pour un scénario donné (incluant une valorisation ou un traitement du sol/sédiment) ;

Furthermore, the diversity of the mechanisms liable to be at work during the mobility tests leads, in certain cases, to great complexity in interpreting test results, necessitating the use of modelling tools to specify the hypotheses for the main reaction mechanisms involved in the mobility of pollutants. Here, too, the question of selecting the relevant calculation tools for a given mobility test arises.

These difficulties, in particular for developers in charge of sites, in choosing the mobility tests and, if necessary, the associated calculation tools for a given study problem, are the source of the present study.

The objective of the study is to determine the state of the art with regard to mobility tests and the associated calculation tools, and the creation of a "toolbox" drawing on the implementation of laboratory tests and the associated modelling tools. The main deliverable of the study is a methodological proposals report for the selection, implementation and interpretation of mobility tests.

Positioning of the study

Matrices considered

The matrices considered are continental soils and sediments (lakes, waterways, canals, etc.). It should be noted that the choice between soils and sediments is not a criterion for the choice of mobility tests.

Pollutants considered

The pollutants taken into account are as follows:

- *inorganic compounds: two groups of metallic compounds presenting different mobilisation behaviour: cations (Ni, Cu, Zn, Cd, Pb, etc.) and oxyanions (MoO₄²⁻, CrO₄²⁻, AsO₄³⁻, Sb(OH)₆, etc.);*
- *organic compounds: aliphatic hydrocarbons (HC-ali) and polycyclic aromatic hydrocarbons (PAH). In situations where these compounds are associated with other compounds in the matrix, the latter are also taken into account (e.g., coal tar or a petroleum fraction such as diesel).*

Mobility tests

For mobility tests conducted in the laboratory concerning the mobility of pollutants in soils and soil materials, standard ISO/FDIS 18772:2007E is considered a structural, lead standard. For sediments managed on the surface (such as waste), standard EN12920 covers all tests designed to assess leaching behaviour in specified conditions (storage or recycling scenarios), and in the case of direct routing to storage of recycling using road transport covered by regulations, standards EN12457-2 and EN14405 apply.

In all cases, three types of lab test are defined:

- *tests of conformity with regulatory values, typically based on simple batch tests as described in standards ISO/TS 21268-1 and ISO/TS 21268-2, according to the Liquid/Solid ratio or equivalent tests to EN 12457-1 and EN 12457-2 for waste;*
- *characterisation tests, providing data for understanding material/water exchanges, while distinguishing:*
 - *parametric tests, aimed at measuring the impact of a parameter on the quality of the eluate (pH, redox potential, etc.) and for a given scenario (including the use or processing of the soil/sediment);*
 - *multi-parametric tests, aimed at measuring the combined effect of several parameters on the quality of the effluent for a given scenario (percolation is considered to be a multi-parametric test as the*

- des tests multiparamétriques visant à mesurer l'effet combiné de plusieurs paramètres sur la qualité de l'effluent pour un scénario donné. La percolation est considérée comme un essai multiparamétrique car l'écoulement continu crée des conditions dynamiques de changement de contexte chimique (par épuisement des composés alcalins par exemple) ;
- des essais de simulation, visant à reproduire aussi bien que possible les conditions du site réel et/ou le devenir à long terme de la pollution. Sont recommandés ici en priorité des essais en lysimètre ou en colonne de grande taille.

Mentionnons que tous les essais décrits sont des essais en conditions saturées en eau, en dépit de conditions de site souvent non saturées (terres excavées, sédiments gérés à terre). Ce choix est fondé sur la quasi-absence d'essais de mobilité en conditions non saturées et par la grande complexité de leur mise en œuvre. Concernant les polluants organiques, leur présence éventuelle sous forme de phase organique (NAPL) est prise en compte et pourra conduire aux choix d'essais spécifiques (mentionnons ici l'absence de procédures normalisées). En cas de matrice comprenant des polluants organiques ou inorganiques, les éventuels effets de synergie ne sont pas considérés.

L'état de l'art réalisé dans le cadre de l'étude a trait aux trois types d'essais. Les essais proposés pour la « boîte à outils » sont des essais de conformité et de caractérisation paramétriques et multiparamétriques.

Outils de modélisation

L'état de l'art relatif aux outils de modélisation distingue trois niveaux :

- Niveau 0 : interprétation de résultats d'essais sans usage de modélisation mathématique. Les logiciels associés à ce niveau servent à la communication des résultats, la gestion des données ou l'évaluation des impacts environnementaux pour les scénarii étudiés par les essais ;
- Niveau 1 : modélisation d'essais statiques, pour évaluer, sans transport de masse, les mécanismes réactifs des polluants (dissolution, désorption, ...) en fonction des paramètres testés (pH, Redox, ...). On distingue ici les composés organiques des composés inorganiques ;
- Niveau 2 : modélisation d'essais dynamiques, pour évaluer le transfert des polluants dans l'eau en tenant compte à la fois du transport de masse et des mécanismes réactifs. On distingue également ici les composés organiques des composés inorganiques.

Pour la « boîte à outils » de l'étude, seuls des outils de niveau 1 et un outil de niveau 2 dédié aux composés organiques sont retenus.

Contenu de l'étude

L'étude s'articule autour de 4 tâches, chacune d'entre elles faisant l'objet d'un rapport :

- **Tâche 1 - Etat de l'art des procédures d'évaluation de la mobilité des polluants organiques et inorganiques dans les sols et sédiments.** Cette tâche consiste en une analyse critique de la littérature disponible relative aux procédures d'évaluation de la mobilité. Cette littérature comprend des normes, des guides techniques, des travaux de recherche en France et à l'international ainsi que des études menées dans un cadre commercial. Le consortium en charge de l'étude a sollicité plusieurs experts ayant mené des travaux de recherche sur la thématique de l'étude. Le rapport est organisé comme suit :

continuous flow creates dynamic conditions for a change of chemical context, e.g., through the exhausting of alkaline compounds);

- *simulation tests, aimed at reproducing as closely as possible the conditions of the actual site and/or becoming such over the pollution long term (recommended here, as a priority, are lysimeter or long-column tests).*

It should be noted that all the described tests are tests in water-saturated conditions, despite site conditions that are often unsaturated (excavated earth, sediments managed on the surface). This choice is based on the practical non-existence of mobility tests in unsaturated conditions and by the extreme complexity of their implementation. Concerning organic pollutants, their possible presence in organic phase form (NAPL) is taken into account and may lead to specific test choices (note here the absence of any standardised procedures). In the case of a matrix containing organic or inorganic pollutants, the possible effects of synergy are not taken into consideration.

The state of the art in the context of this study refers to three types of test. The tests proposed for the "toolbox" are conformity tests, and parametric and multi-parametric characterisation tests.

Modelling tools

The state of the art relating to modelling tools distinguishes 3 levels:

- *Level 0: interpretation of test results without the use of mathematical modelling. The software associated with this level is used for communicating results, managing data or assessing the environmental impacts for the scenarios studied via the tests.*
- *Level 1: modelling of static tests to assess, without mass transport, the reactive mechanisms of pollutants (dissolution, desorption, etc.) according to the tested parameters (pH, redox, etc.). Here we distinguish between organic and inorganic compounds.*
- *Level 2: modelling of dynamic tests to assess the transfer of pollutants in water, taking account of mass transport and reactive mechanisms. Here we also distinguish between organic and inorganic compounds.*

For the study "toolbox", only level 1 tools and one level 2 tool dedicated to organic compounds are employed.

Content of the study

The study is built around four tasks, each the subject of a report:

- **Task 1 - State-of-the-art of procedures to assess the mobility of organic and inorganic pollutants in soils and sediments.** *This task consists in a critical analysis of the available literature relating to mobility assessment procedures. This literature includes standards, technical guides, research work in France and abroad, and studies conducted in a commercial framework. The consortium responsible for the study called on several experts who have carried out research work on the study topic. The report is organised as follows:*

- *a survey of the assessment contexts for pollutant mobility, essentially in France, supplemented by the situation in other European countries;*
- *a conceptual approach to the mobility of pollutants in soils and sediments, including, one, a typology of the matrices and pollutants and, two, a description of the mechanisms at work in the mobility between the soils/sediments matrix and water;*

- un état des lieux des contextes d'évaluation de la mobilité des polluants, en France pour l'essentiel, complété par la situation dans d'autres européens ;
 - une approche conceptuelle de la mobilité des polluants dans les sols et sédiments, comprenant d'une part une typologie des matrices et des polluants, et d'autre part une description des mécanismes en jeu dans la mobilité entre la matrice sols/sédiments et l'eau) ;
 - une typologie des procédures d'évaluation de la mobilité des polluants.
- **Tâche 2 - Identification des outils de modélisation pour l'interprétation des données de lixiviation et description de leur intégration dans les procédures d'évaluation de la mobilité des polluants organiques et inorganiques.** Cette tâche consiste à identifier dans la littérature des logiciels d'aide à l'interprétation des essais de mobilité et à fournir des éléments d'aide à la décision concernant le choix et la mise en œuvre des logiciels. La littérature consultée comprend des guides de modélisation, des travaux de recherche en France et à l'international, des descriptifs de logiciels ainsi que études menées dans un cadre commercial. Le consortium en charge de l'étude a sollicité plusieurs experts. Le rapport est organisé comme suit :
- L'interprétation de résultats d'essais sans usage de modélisation mathématique
 - La modélisation d'essais statiques
 - La modélisation d'essais dynamiques
 - Des considérations pratiques sur la mise en œuvre des logiciels, comprenant en particulier des éléments bibliographiques et une enquête sur l'occurrence d'utilisation de logiciels.
- **Tâche 3 - Développement d'une procédure d'évaluation (« boîte à outils »), essais de mise en œuvre.** Fondée sur les résultats des tâches 1 et 2, cette tâche comprend (i) la démarche suivie pour sélectionner les outils et leurs conditions de mise en œuvre, (ii) l'application de la « boîte à outils » sur deux sols pollués (l'un par des ETM, l'autre par des hydrocarbures et des HAP), (iii) la présentation de cas d'application des outils et méthodologies correspondants ou proches de ceux retenus pour la « boîte à outils ».
- **Tâche 4 - Propositions méthodologiques** pour le choix, la mise en œuvre et l'interprétation de procédures d'évaluation de la mobilité des polluants organiques et inorganiques.
- a typology of the assessment procedures for the mobility of pollutants.
- **Task 2 - Identification of the modelling tools for interpreting leaching data and describing their integration in the assessment procedures for the mobility of organic and inorganic pollutants.** This task consists in identifying in the literature, software for helping interpret mobility tests and providing information to help with decision-making concerning the choice and implementation of the software. The literature consulted includes modelling guides, research work in France and abroad, software descriptions, and studies conducted in a commercial framework. The consortium responsible for the study called on several experts. The report is organised as follows:
- Interpretation of test results without the use of mathematical modelling
 - Modelling of static tests
 - Modelling of dynamic tests
 - Practical considerations on the implementation of software, including in particular bibliographical information and a survey of the occurrence of the use of software.
- **Task 3 - Development of an assessment procedure ("toolbox") and implementation tests.** Based on the results of tasks 1 and 2, this task comprises (i) the procedure for selecting the tools and their implementation conditions; (ii) the application of the "toolbox" to two polluted soils (one by heavy metals, the other by hydrocarbons and PAH); (iii) the presentation of cases of application of the corresponding tools and methodologies, or which are similar to those chosen for the "toolbox".
- **Task 4 - Methodological proposals** for choosing, implementing and interpreting assessment procedures for the mobility of organic and inorganic pollutants.

Main methodological recommendations

Mobility tests

The tests proposed for the "toolbox" are conformity tests or parametric characterisation tests. Static tests, which are generally simpler, more reproducible and quicker to implement, are preferred, as are tests that are the subject of a standard, or at least a standardised and generally widespread procedure (case of sequential extraction). Nevertheless, one dynamic, standard test, which has had good feedback for both soils and waste was chosen: upward percolation.

Hence, for organic compounds, four tests are proposed (Table 1). For inorganic compounds, five tests are proposed (Table 2), three of which are common to organic and inorganic compounds. Note that there do not seem to be any specific procedures for mixed organic/inorganic pollution. Of the five tests, two are non-standardised (water/NAPL contact, sequential extraction). They are presented in summary form in the following tables. The tables also state the duration of the tests, the total service duration (from supplying the service provider with the soil/sediment sample to the provision of the test report), along with the type of service provider conducting the various tests. It should be noted that, in general, only specialised service providers (including engineering services) offer test interpretation. The tests are applicable indiscriminately for soils and

Principales recommandations méthodologiques

Essais de mobilité

Les essais proposés pour la « boîte à outils » sont des essais de conformité ou de caractérisation de type paramétrique. Les essais statiques, généralement plus simples, plus reproductibles et plus rapides à mettre en œuvre sont privilégiés, tout comme les essais faisant l'objet d'une norme ou a minima d'une procédure standardisée et largement répandue (cas de l'extraction séquentielle). Néanmoins, il est retenu un essai dynamique normalisé et disposant d'un bon retour d'expérience aussi bien pour les sols que les déchets, la percolation ascendante.

Ainsi, pour les composés organiques, 4 essais sont proposés (Tableau 1). Pour les composés inorganiques, 5 essais sont proposés (Tableau 2) dont 3 sont communs aux composés organiques et inorganiques. Précisons qu'il ne semble pas exister de procédures spécifiques pour les pollutions mixtes organiques/inorganiques. Parmi les 5 essais, 2 sont non

normalisés (contact eau/NAPL, extraction séquentielle). Ils sont présentés de façon synthétique dans les tableaux suivants. Le tableau mentionne également les durées des essais, la durée de la prestation globale (de la fourniture de l'échantillon de sol/sédiment au prestataire jusqu'à la fourniture du rapport d'essai), ainsi que le type de prestataire réalisant les différents essais. Mentionnons que généralement, seuls des prestataires spécialisés (incluant des prestations d'ingénierie) proposent une interprétation des essais. Ces essais sont applicables indifféremment pour les sols et les sédiments hormis la percolation où deux normes distinctes (très légèrement différentes) sont disponibles et retenues ici.

sediments, except for percolation, where two distinct standards (differing very slightly) are available and chosen here.

Tableau 1 – Caractéristiques des essais retenus pour les composés organiques

	Essais statiques			Essais dynamiques
Nom de l'essai	Lixiviation réglementaire NF EN 12457-2	Test de capacité de neutralisation acide (ANC) - EN 14429	Contact NAPL/eau (Guide CIDSIR, 2005)	Percolation en colonne – NF CEN/TS 14405 et ISO/TS 21268-3
Objectifs principaux	Fournir des valeurs opposables à des seuils, conçue pour l'admission en centre de stockage	Evaluer le comportement acido-basique de la matrice et l'effet éventuel du pH sur la mobilité des polluants (même si cet essai a été strictement développé pour les polluants inorganiques)	Estimer les concentrations d'équilibre dans l'eau pour une pollution multi-composés, en cas de présence de NAPL	Evaluer l'évolution dans le temps du transfert matrice/eau Evaluer les cinétiques de dissolution en cas de présence de NAPL
Durée de l'essai	24 h	48 h	# 7 j	# 25 j (L/S=10, 7 fractions) dont durée dépendante de la masse de matrice dans la colonne
Durée totale (essai et rapport d'essai)	# 7 j	# 15 j	# 15 j	# 35 j
Prestataire	Laboratoire commercial	Prestataire spécialisé	Certains laboratoires commerciaux	Théoriquement laboratoire commercial, mais la plupart soustraite aux Pays-Bas qui utilise une petite colonne de 5 cm de diamètre que nous déconseillons. Prestataire spécialisé de préférence
Interprétation des essais	Non fournie (si ce n'est la confrontation aux seuils)	Doit être fournie	Généralement non fournie	Non fournie par les labos commerciaux mais doit être fournie par les prestataires spécialisés

Table 1 – Specifications of tests chosen for organic compounds

	Static tests			Dynamic tests
Test name	Regulatory leaching NF EN 12457-2	Acid neutralising capacity (ANC) test - EN 14429	NAPL/water contact (CIDSIR Guide, 2005)	Column percolation – NF CEN/TS 14405 and ISO/TS 21268-3
Main objectives	Provide binding values for these thresholds, for admission into storage centres	Assess the acid-alkali behaviour of the matrix and the possible effects of pH on the mobility of pollutants (even if this test was, strictly speaking, developed for inorganic pollutants)	Estimate the equilibrium concentrations in water for multi-compound pollution, in the presence of NAPL	Assess the evolution over time of the matrix/water transfer Assess the dissolution kinetics in the presence of NAPL
Test duration	24 hours	48 hours	# 7 d	# 25 d (L/S=10, 7 fractions), with the duration depending on the mass of matrix in the column
Total duration (test and test report)	# 7 d	# 15 d	# 15 d	# 35 d

Service provider	Commercial laboratory	Specialised service provider	Certain commercial laboratories	Theoretically a commercial laboratory, but most of these subcontract to the Netherlands, where a small 5 cm-diameter column is used, which we do not recommend. Preferably, a specialised service provider
Test interpretation	Not provided (other than matching the thresholds)	Must be provided	Generally not provided	Not provided by commercial laboratories but must be provided by specialised service providers

Les résultats des essais menés dans le cadre de la Tâche 3 ont montré d'une part l'intérêt de chacun des essais ainsi que leur complémentarité. Cette complémentarité s'illustre d'une part en termes de fractions mobilisées selon les caractéristiques des essais (rapports L/S, conditions chimiques représentatives de contraintes d'exposition ou de principes de traitement, ...) et d'autre part en termes de contrôle des concentrations par le pH. On note en particulier l'importance de se reporter à la courbe d'ANC pour vérifier si le relargage est contrôlé par la solubilité des espèces ou si on est vraiment en conditions dynamiques (ce qui peut conditionner l'exploitation des résultats de percolation par exemple).

Les résultats montrent en particulier que la lixiviation réglementaire conduit dans la plupart des cas à des valeurs qui correspondent à la courbe ANC à pH naturel, c'est-à-dire à la zone de plus faible relargage. La lixiviation réglementaire ne constitue donc nullement une maximalisation du relargage. Une vision plus large du relargage nous semble donc tout à fait justifiée.

The results of the tests conducted under Task 3 demonstrated both the utility of each of the tests and their complementarity. This complementarity is illustrated firstly in terms of fractions mobilised according to the test specifications (L/S ratios, chemical conditions representative of exposure constraints or processing principles, etc.) and, secondly, in terms of the pH examination of the concentrations. To be noted in particular is the importance of referring to the ANC curve to check if the salting-out is controlled by the solubility of the species or if these really are dynamic conditions (which can determine how, for example, the percolation results are exploited).

The results show in particular that regulatory leaching leads in most cases to values corresponding to the ANC curve with natural pH, i.e.: the zone with the lowest salting-out. Regulatory leaching does not in any way, therefore, involve maximum salting-out. We therefore consider that a broader vision of salting-out is thoroughly justified.

Tableau 2 - Caractéristiques des essais retenus pour les composés inorganiques

Nom de l'essai	Essais statiques			Essais dynamiques
	Lixiviation réglementaire NF EN 12457-2	Test de capacité de neutralisation acide (ANC) - EN 14429	Extraction séquentielle (Tessier et al., 1979)	Percolation en colonne - NF CEN/TS 14405 et ISO/TS 21268-3
Objectifs principaux	Fournir des valeurs opposables à des seuils, conçue pour l'admission en centre de stockage	Evaluer le comportement acido-basique de la matrice et les effets du pH sur la mobilité des polluants Formuler des hypothèses quant à la présence des phases minérales auxquelles sont liés les polluants Base pour l'identification de l'assemblage minéral utilisé pour la modélisation	Comprendre la mobilité des polluants (i) selon les phases associées et (ii) selon leur comportement aux conditions physico-chimiques	Évaluer les concentrations à l'équilibre (eau interstitielle) Évaluer une fraction extractible en fonction d'un L/S donné (associé à une échelle de temps) Estimer la dynamique du flux de polluant émis en fonction du L/S
Durée de l'essai	24 h	48 h	# 7 j	# 25 j (L/S=10, 7 fractions) dont durée dépendante de la masse de matrice dans la colonne
Durée totale (essai et rapport d'essai)	# 7 j	# 15 j	# 15 j	# 35 j
Prestataire	Laboratoire commercial	Prestataire spécialisé	Certains laboratoires commerciaux	Théoriquement laboratoire commercial, mais la plupart sous-traite aux Pays-Bas qui utilise une petite colonne de 5 cm de diamètre que nous déconseillons. Prestataire spécialisé de préférence
Interprétation des essais	Non fournie (si ce n'est la confrontation aux seuils)	Doit être fournie	Généralement non fournie	Non fournie par les labos commerciaux mais doit être fournie par les prestataires spécialisés

Table 2 - Specifications of tests chosen for inorganic compounds

	Static tests			Dynamic tests
Test name	Regulatory leaching NF EN 12457-2	Acid neutralising capacity (ANC) test - EN 14429	Sequential extraction (Tessier et al., 1979)	Column percolation – NF CEN/TS 14405 and ISO/TS 21268-3
Main objectives	Provide binding values for these thresholds, for admission into storage centres	Assess the acid-alkali behaviour of the matrix and the possible effects of pH on the mobility of pollutants Formulate hypotheses on the presence of mineral phases to which the pollutants are linked Basis for the identification of the mineral assembly used for modelling	Understand the mobility of pollutants (i) according to the associated phases and (ii) according to their behaviour under the physical / chemical conditions	Assess the equilibrium concentrations (interstitial water) Assess an extractable fraction according to a given L/S ratio (associated with a time scale) Estimate the emitted pollutant flow dynamic according to the L/S
Test duration	24 hours	48 hours	# 7 d	# 25 d (L/S=10, 7 fractions), with the duration depending on the mass of matrix in the column
Total duration (test and test report)	# 7 d	# 15 d	# 15 d	# 35 d
Service provider	Commercial laboratory	Specialised service provider	Certain commercial laboratories	Theoretically a commercial laboratory, but most of these subcontract to the Netherlands, where a small 5 cm-diameter column is used, which we do not recommend. Preferably, a specialised service provider
Test interpretation	Not provided (other than matching the thresholds)	Must be provided	Generally not provided	Not provided by commercial laboratories but must be provided by specialised service providers

Outils de modélisation

Les outils de modélisation proposés pour la « boîte à outils » sont conçus comme des outils d'aide à l'interprétation des essais en laboratoire. Par interprétation, on entend la compréhension des processus physiques et/ou chimiques en jeu, avec une confrontation des données mesurées avec les résultats de simulation.

La présentation des outils de calcul est structurée comme suit :

- **La modélisation d'essais statiques**, pour évaluer, sans transport de masse, les mécanismes réactifs des polluants (dissolution, désorption, ...) en fonction des paramètres testés (température, pH, Redox, ...). Ces outils de calcul, utiles pour comprendre les mécanismes réactifs, peuvent également être utilisés pour construire des bases de données de paramètres thermodynamiques valorisés pour les outils de calcul dédiés aux essais dynamiques. On distingue ici :

- composés organiques : les approches calculatoires proposées ont trait d'une part aux essais de lixiviation statiques mais également à l'interprétation d'essais d'équilibre NAPL/eau et de concentrations dans les sols. Les outils de calcul proposés sont d'une part la Loi de Raoult et d'autre part le logiciel OREOS¹ (Chastanet et al., 2012). OREOS est un logiciel qui permet de calculer à l'aide de relations d'équilibre thermodynamique la répartition des polluants dans les différentes matrices de l'échantillon à partir des mesures de concentrations en polluants organiques dans un échantillon de sols ou de sédiments : sol (sorbé), eau (dissous), éventuellement NAPL en considérant un échantillon dans la zone saturée (avec en plus la phase gazeuse en considérant un échantillon dans la zone non saturée). Les calculs

¹ <http://www.oreos-software.com/>

Modelling tools

The modelling tools for the "toolbox" are designed as tools for helping with the interpretation of the laboratory tests. By interpretation, we mean the understanding of the physical and/or chemical processes at work, with a comparison of the measured data against the simulation results.

The presentation of the calculation tools is structured as follows:

- **Static test modelling:** *to assess, without mass transport, the reactive mechanisms of pollutants (dissolution, desorption, etc.) according to the tested parameters (temperature, pH, redox, etc.). These calculation tools, which are useful for understanding the reactive mechanisms, can also be used for constructing thermodynamic parameter databases that feed into the calculation tools dedicated to the dynamic tests. Here we distinguish between the following:*

- *Organic compounds: the calculation approaches proposed relate on the one hand, to the static leaching tests and, on the other, to the interpretation of tests on NAPL/water equilibrium and concentrations in soils. The calculation tools proposed are Raoult's law and OREOS software¹ (Chastanet et al., 2012). OREOS software can be used for calculating, with the aid of thermodynamic equilibrium relations, the distribution of the pollutants in the different matrices of the sample based on measurements of the concentrations of organic pollutants in a sample of soils or sediments: soil (sorption), water (dissolution), and any NAPL, taking into consideration a sample in the saturated zone (with,*

fournissent ainsi une concentration en polluant dissous dans l'eau et adsorbé dans les sols/sédiments ainsi que la présence/absence de NAPL et la saturation/composition de NAPL ;

- composés inorganiques : les réactions entre espèces chimiques sont abordées par les lois de spéciation chimique. Les processus chimiques pris en compte sont la spéciation, l'adsorption/désorption, les échanges d'ions, l'oxydation/réduction, la précipitation/dissolution. L'outil de calcul proposé est le logiciel PhreeqC² (Parkhurst et Appelo, 1999). PhreeqC est un logiciel dédié aux calculs géochimiques en systèmes triphasiques (liquide, solide, gaz). Ces calculs chimiques (spéciations chimiques des différents éléments) peuvent être couplés avec un module de transfert de matière (convection, dispersion, diffusion) pour simuler un transport réactif 1D en milieu poreux, saturé ou non, soumis à un régime hydrique constant.
- **La modélisation d'essais dynamiques**, pour évaluer le transfert des polluants dans l'eau en tenant compte à la fois du transport de masse et des mécanismes réactifs. Cette approche permet généralement de simuler des conditions de mobilité plus proches des conditions réelles de transfert. C'est également à ce niveau que peuvent être réalisées des simulations prospectives, permettant à partir d'une calibration du modèle, d'extrapoler les résultats des essais à différents termes temporels à une autre échelle spatiale (typiquement celle du site d'étude) et/ou dans différentes conditions aux limites ou imposées. Les essais de mobilité concernés ici sont les essais de percolation avec des composés organiques.
- composés organiques : un logigramme comprenant 10 modèles physiques correspondant chacun à un ensemble de fonctionnalités ainsi que des logiciels associés est proposé. Compte tenu des composés organiques considérés ici, la présence de NAPL, et donc du mécanisme de dissolution, peut être suspectée dans bon nombre de matériaux utilisés pour les essais. En conséquence, le choix d'un logiciel est limité à 2 modèles physiques. Parmi les logiciels identifiés dans la littérature, le choix s'est porté sur MODFLOW-SURFACT³ (HydroGeoLogic Inc, s.d.), basé sur le code populaire MODFLOW de l'USGS pour l'écoulement. Le logiciel non interfacé est gratuit, mais sa version interfacée est payante. MODFLOW-SURFACT est un code de calcul numérique 3D qui comprend les fonctionnalités suivantes : écoulements d'eau et prise en compte des phases NAPL et gaz immobiles, diminution de la saturation en NAPL en fonction du temps, double milieu (eau mobile / eau immobile) et fractures, source NAPL multi-constituant, transferts entre les phases sols / eau / NAPL / gaz, à l'équilibre et avec des cinétiques, réactions chimiques (cinétiques simples, décroissance radioactive et réactions séquentielles), biodégradation avec réaction séquentielle du premier ordre ;
 - composés inorganiques : la mobilité des polluants inorganiques sol ou sédiment /eau est la résultante d'un grand nombre de mécanismes (dissolution des phases minérales porteuses, mécanismes de transport évolutif en fonction du contexte physico-chimique, etc.). Cette grande complexité explique pourquoi très peu de travaux mettent en œuvre une modélisation complète de cette problématique qui reste très largement du domaine de la recherche sur des cas d'études particuliers par des équipes très spécialisées et non pas du domaine d'études « clés en main » comme le sont les objectifs de cette étude. Mentionnons cependant que le logiciel préconisé pour la

in addition, the gaseous phase, taking account of a sample in the unsaturated zone). The calculations thus provide a concentration of pollutants dissolved in the water and adsorbed in the soils/sediments, along with the presence/absence of NAPL and the saturation/composition of NAPL.

- *Inorganic compounds: the reactions between chemical species are addressed by the chemical speciation laws. The chemical processes taken into account are speciation, adsorption/desorption, ion exchange, oxidation/reduction and precipitation/dissolution. The calculation tool proposed is PhreeqC software² (Parkhurst and Appelo, 1999). PhreeqC is software dedicated to geochemical calculations in tri-phase systems (liquid, solid, gas). These chemical calculations (chemical speciations of different elements) can be coupled with a material transfer module (convection, dispersion, diffusion) to simulate 1D reactive transport in a porous (saturated/unsaturated) environment, subjected to a constant water regime.*
- **Dynamic test modelling:** to assess the transfer of pollutants in water, taking account both of mass transport and reactive mechanisms. This approach generally makes it possible to simulate mobility conditions that are as close as possible to the actual transfer conditions. It is also at this level that forecast simulations can be conducted whereby, based on a model calibration, it is possible to extrapolate the results of tests with different time limits onto another spatial scale (typically, the scale of the study site) and/or different conditions than the limits, or the imposed conditions. The mobility tests concerned here are the percolation tests with organic compounds.
- *Organic compounds: a flowchart is proposed, containing 10 physical models, each corresponding to a set of features, and the associated software. Given the organic compounds considered here, the presence of NAPL, and therefore of the dissolution mechanism, may be suspected in many of the materials used for the tests. Consequently, the software choice is limited to two physical models. Out of the software solutions identified in the literature, the one chosen was MODFLOW-SURFACT³ (HydroGeoLogic Inc, no date), based on the popular MODFLOW code of USGS for the flow. The non-interfaced software is free, but its interfaced version is paid. MODFLOW-SURFACT is a 3D numerical calculation code that contains the following features: water flows and integration of NAPL and immobile gas phases; reduction in NAPL saturation over time; dual environment (mobile water / immobile water) and fractures; multi-constituent NAPL source; transfer between soil / water / NAPL / gas phases, at equilibrium and with kinetics; chemical reactions (simple kinetics, radioactive decay and sequential reactions); biodegradation with first-order sequential reaction.*
 - *Inorganic compounds: the mobility of inorganic soil or sediment / water pollutants results from a large number of mechanisms (dissolution of mineral carrier phases, evolving transport mechanism according to the physical-chemical context, etc.). This high level of complexity explains why very little work has been done on implementing comprehensive modelling of this problem, which remains largely in the field of research*

² https://www.brr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/

³ http://www.waterloohydrogeologic.com/software/modflow_surfact/modflow_surfact_ov.htm

modélisation des essais statiques, PhreeqC, dispose d'un module de transport rudimentaire 1D, ce qui peut être suffisant si l'on se limite au transport dans une colonne de percolation. La principale limite de PhreeqC pour ce couplage chimie/transport réside dans le fait que dès que le système est en mouvement, les cinétiques de dissolution de chacune des phases vont intervenir. Or même dans le cas où l'on a correctement identifié ces phases (ce qui est loin d'être toujours le cas), on ne connaît pas ces cinétiques.

Mise en œuvre et perspectives

Les auteurs de l'étude recommandent une mise en application du guide par les maîtres d'ouvrage volontaires membres de RECORD, avec un retour d'expérience après 12/18 mois et une éventuelle mise à jour du guide pour RECORD. Cette mise en application serait notamment l'occasion d'approfondir les essais ANC sur les composés organiques et de confronter les outils proposés à une palette plus large de typologies de matrices et de scénarios.

for particular case studies by very specialised teams, and not in the field of "turnkey" research, as are the objectives of this study. Let us point out, however, that the software recommended for modelling static tests, PhreeqC, has a rudimentary 1D transport module, which may suffice if we are only considering transport in a percolation column. The main limit of PhreeqC for this chemistry/transport coupling resides in the fact that, once the system is in movement, the dissolution kinetics of each of the phases will come into play. Yet even in the event of correctly identifying these phases (which is far from being the case) we do not know what these kinetics are.

Implementation and prospects

The study authors recommend implementation of the guide by the volunteer project managers who are members of RECORD, with feedback after 12 to 18 months and a potential update of the guide by RECORD. Implementing the guide in this way would provide an opportunity to refine the ANC tests on organic compounds and compare the tools proposed with a wider range of types of matrices and scenarios.