

Journées techniques
28 et 29 mai 2013

Gestion des sites et sols
pollués



Les substances volatiles : caractérisation, modélisation des transferts, surveillance

Retour d'expérience des projets CITYCHLOR, FLUXOBAT et ATTENA

Modélisations analytique et numérique (découplée et intégrale) à l'échelle du bassin expérimental SCERES

S. Cotel, S. Marzougui, O. Razakarisoa, G.Schäfer



GRANDLYON

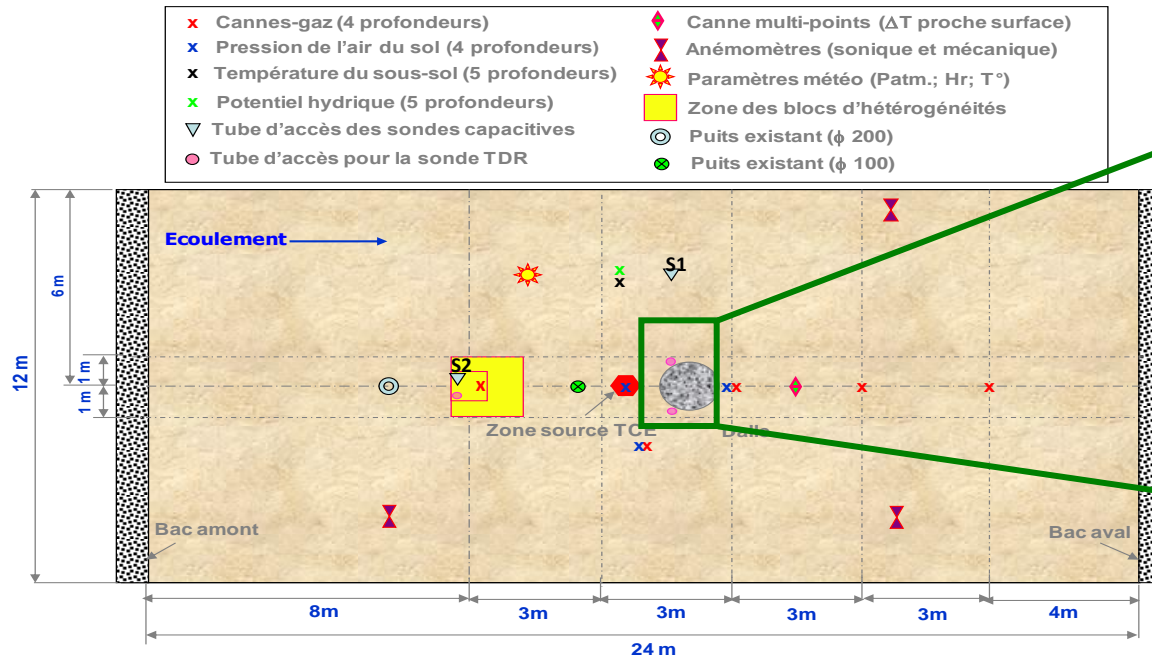


Plan de la présentation



- Configuration de l'expérience modélisée
- Simulation numérique du panache de vapeur de TCE
- Flux à l'interface dalle de béton/air intérieur: approche semi-analytique
- Transfert de vapeur de TCE vers un bâtiment modèle
 - Approche intégrale de modélisation numérique
 - Approche de modélisation couplée, numérique/analytique
 - Comparaison de concentration
- Conclusions

Vue de dessus du bassin SCERES



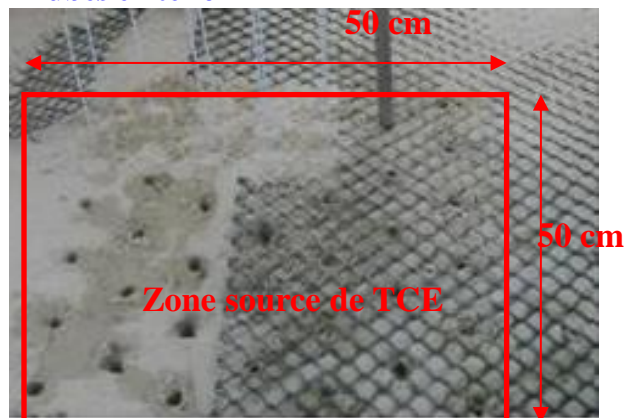
$\varnothing = 1.6 \text{ m}$

$e = 0.1 \text{ m}$

Deux milieux : matrice poreuse et fissures

Création de la zone source de TCE

Tubes en téflon

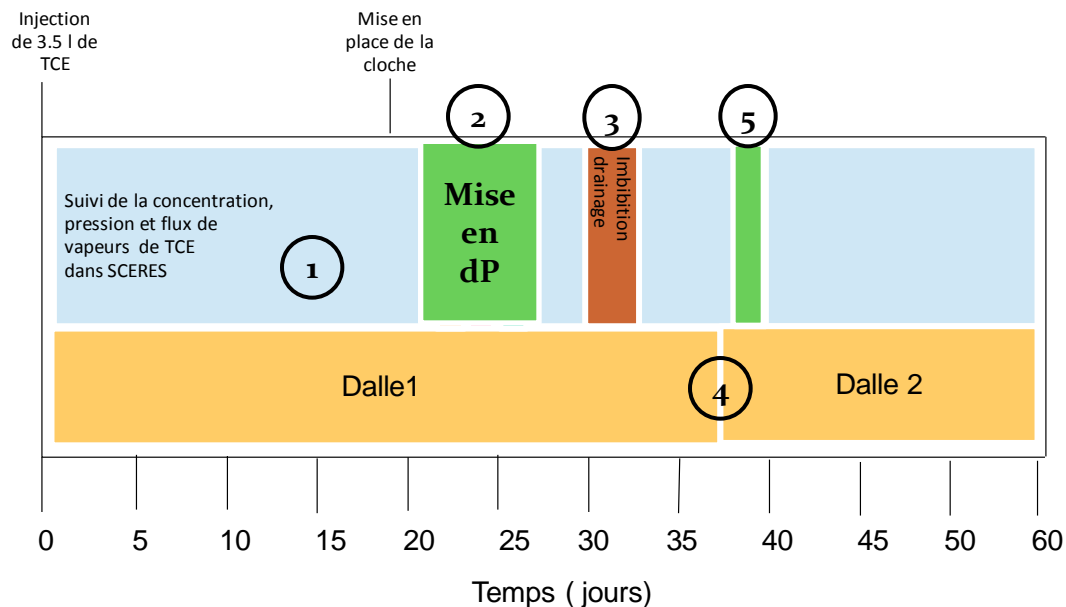


SCERES1 3.5 l

SCERES2 3.89 l

Déroulement des expériences: SCERES1 (Septembre-Octobre 2010) et SCERES2 (Avril-Mai 2011)

1. Suivi des concentrations de vapeurs, pression de l'air du sol , flux de vapeurs...
2. Mise en dépression dans l'air intérieur du bâtiment modèle (dP, Q)
3. Battement de la nappe
4. Changement de dalle de béton
5. Mise en dépression dans l'air intérieur du bâtiment modèle (dP, Q)



Simulation numérique du panache de vapeur de TCE



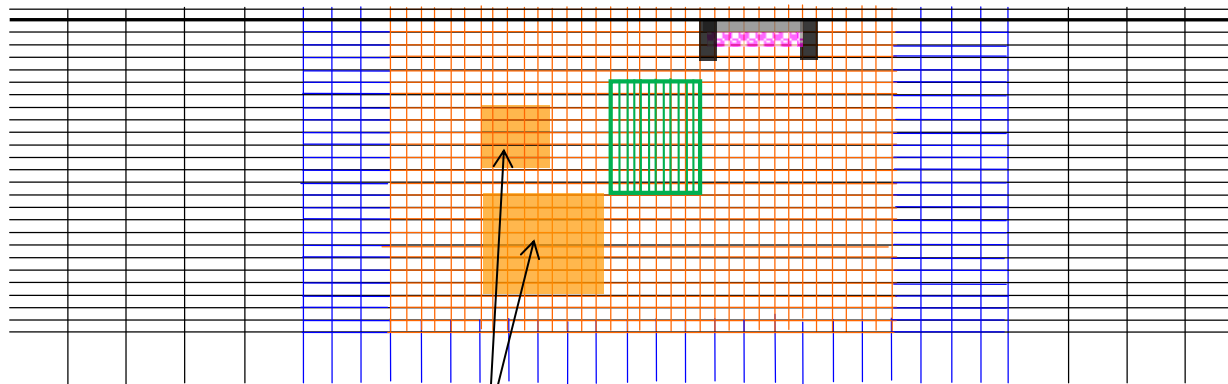
SIMUSCOPP = SIMULATION des Sites Contaminés par des Produits Pétroliers)



Simulation du transport multi-composant en système multiphasique (avec transfert de masse entre phases, isotherme à l'équilibre thermodynamique)

Discrétisation spatiale suivant le plan vertical (x, z)

4 sous maillages
($dx \times dy \times dz$)



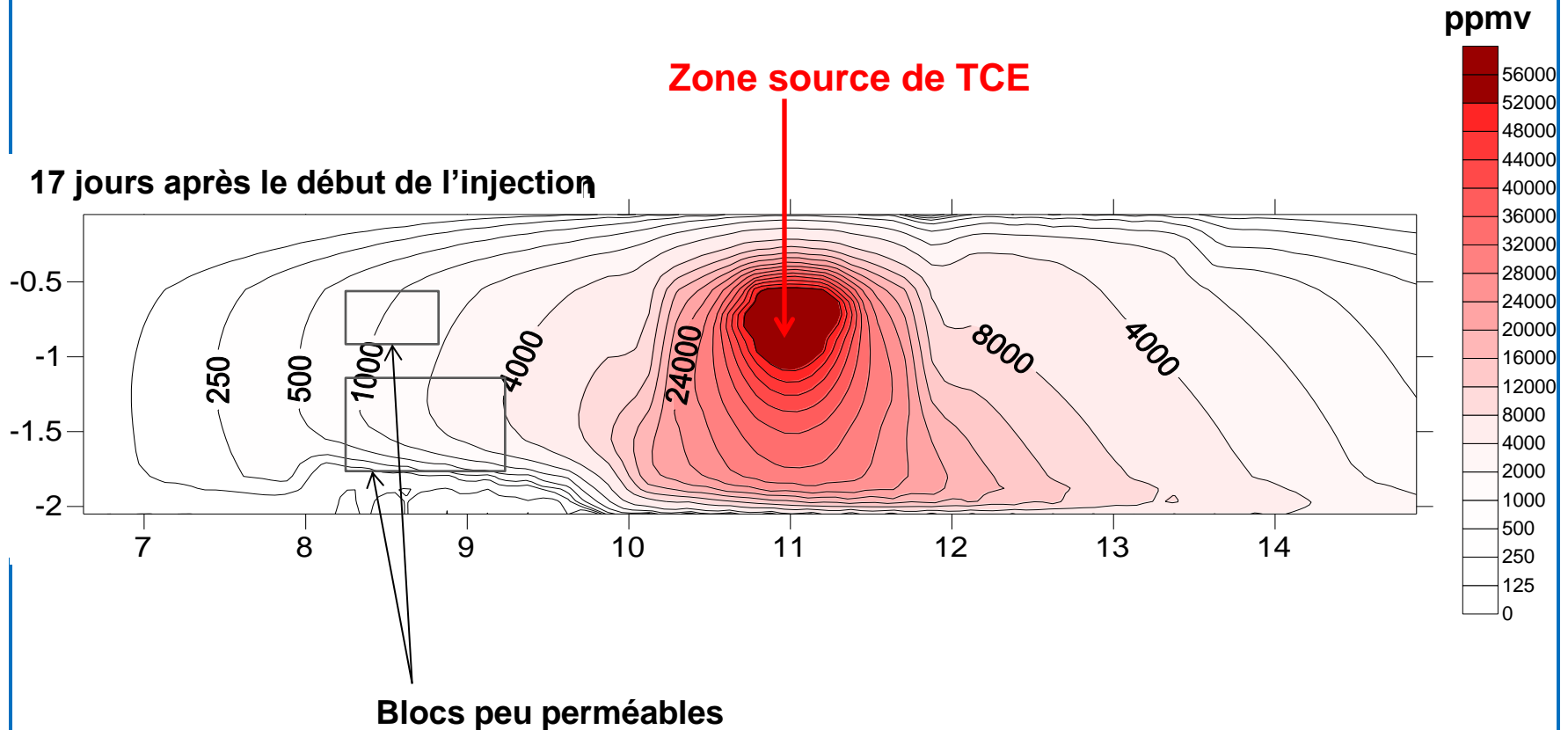
$1 \times 1 \times 0.1\text{m}$
 $0.5 \times 0.5 \times 0.1\text{m}$
 $0.25 \times 0.25 \times 0.1\text{m}$
 $0.125 \times 0.125 \times 0.1\text{m}$
("zone source")

Blocs peu perméables

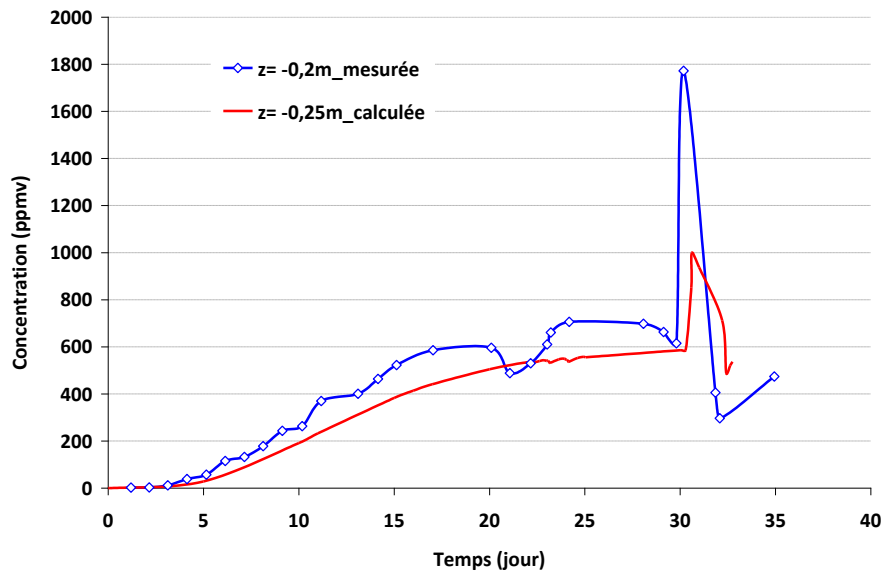
Simulation numérique du panache de vapeur de TCE



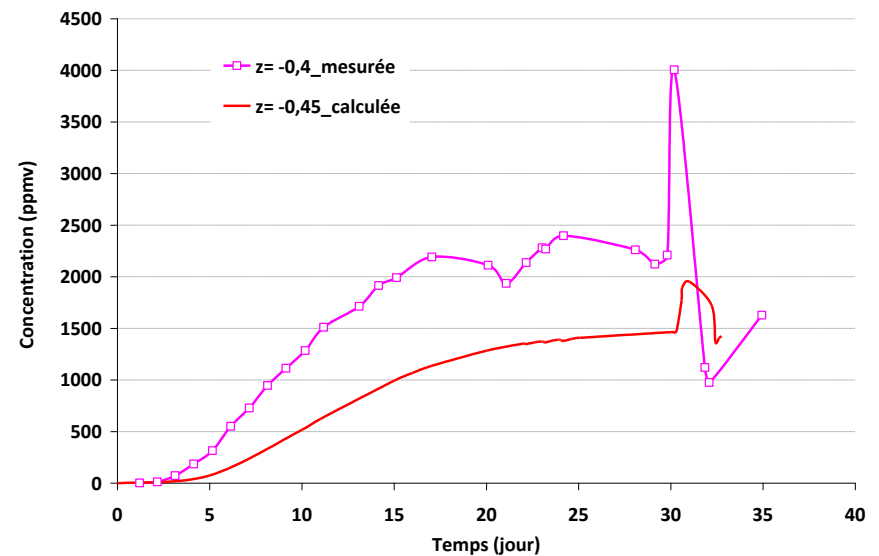
SCERES1- Distribution simulée des concentrations de vapeurs de TCE (ppmv) lors de SCERES1: coupe longitudinale



SCERES 1 - Concentrations de vapeurs de TCE mesurées et simulées au point GA1: profondeurs 0.25 m et 0.45 m



$z = -0.2$ m



$z = -0.4$ m

Flux à l'interface dalle de béton/air intérieur: approche semi-analytique



$$F_{tot,z} = \underbrace{-\tilde{D}_{eg} \frac{\Delta C_a}{\Delta z}}_{\text{Flux diffusif}} - \underbrace{\frac{\tilde{k}_{ra} \tilde{k}^* \rho_{air} g}{\mu_a} \left[\frac{\Delta h}{\Delta z} + \frac{\tilde{\rho}_a - \rho_{air}}{\rho_{air}} \right] \tilde{C}_a}_{\text{Flux convectif}}$$

gradient de pression de l'air
effet de densité de vapeurs

- Flux entre deux points de mesure (placés sur la verticale)
- Moyenne arithmétique des paramètres
- Détermination expérimentale des paramètres
- Flux dispersifs négligés

Pression motrice Pression de l'air

$$D_{eg} = \theta_g \tau D_0$$

$$k_{ra} = (1 - \overline{S_w})^{1/2} (1 - \overline{S_w}^{1/m})^{2m}$$

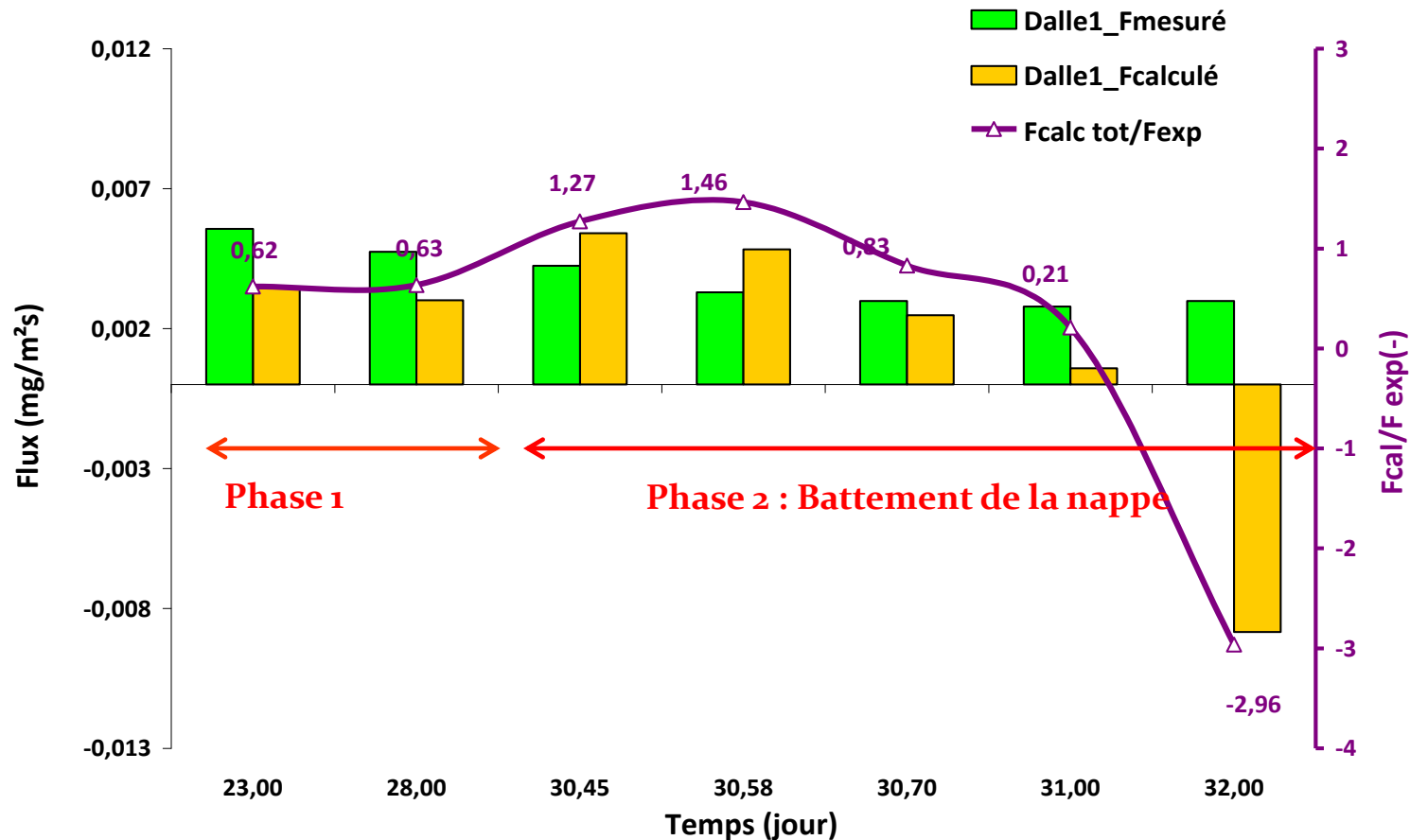
$$h = \frac{P_g}{\rho_{air} g} = \frac{P_a + \rho_{air} g z}{\rho_{air} g}$$

$$\rho_a = C_a \left(1 - \frac{M_{air}}{M_{TCE}}\right) + \rho_{air}$$

Flux à l'interface dalle de béton/air intérieur: approche semi- analytique

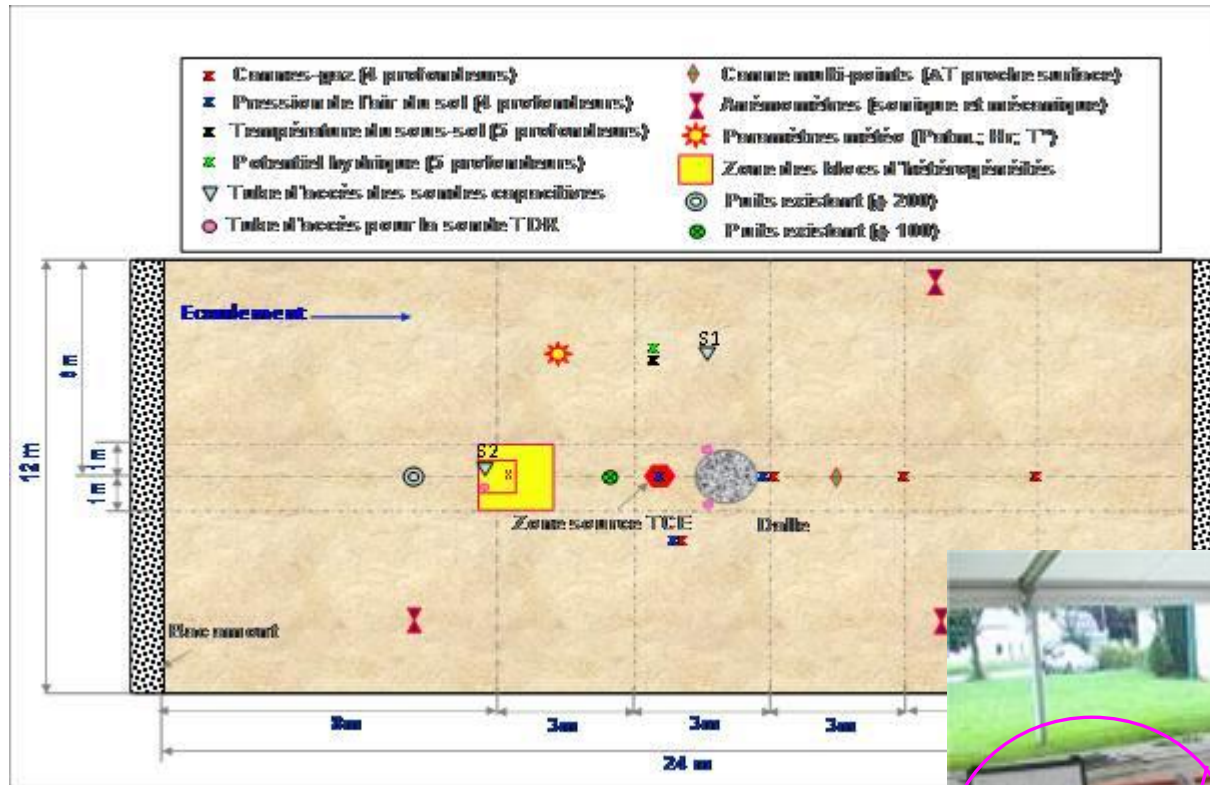


Comparaison des flux calculés (entre les profondeurs 0 et 0,1m) et flux mesurés avec la chambre à flux



NB: $D_{eg-dalle1} = 1.5 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s} \sim 1/100 \times D_{eg-sable \text{ moyen}}$

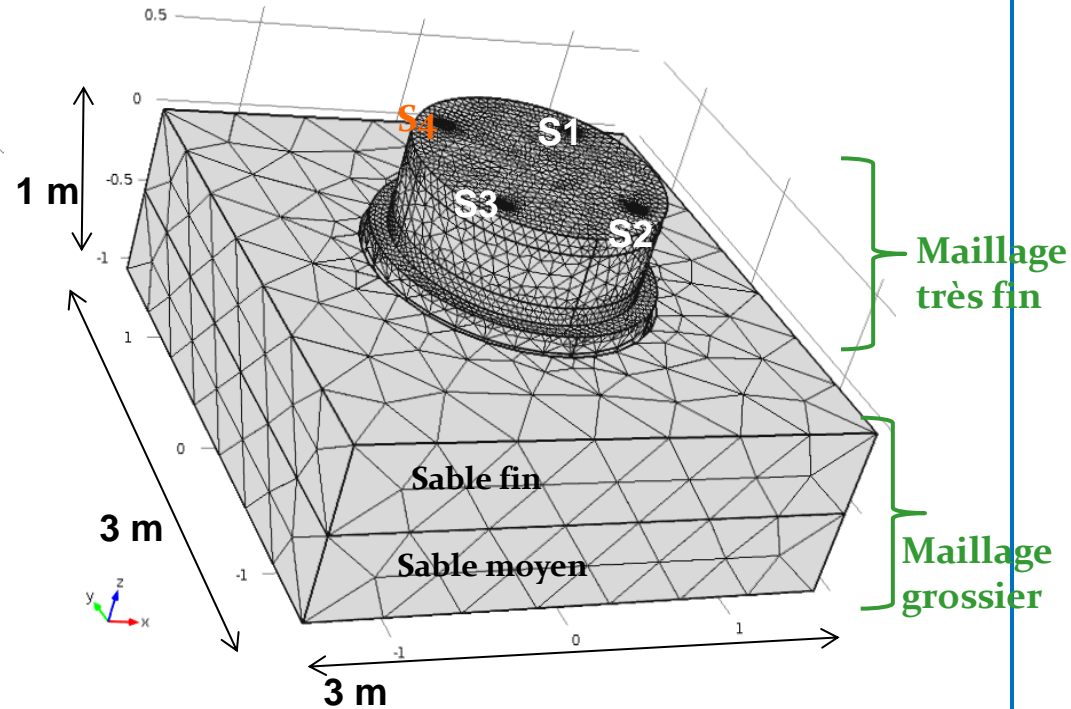
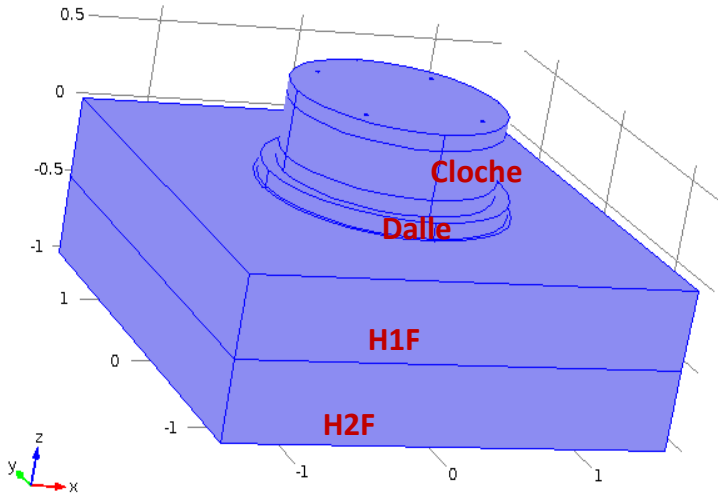
Transfert de vapeur de TCE vers un bâtiment modèle



Mise en dépression de la cloche:
 $dp = -10\text{Pa}$, $Q_{\text{extraction}} = 1\text{m}^3/\text{h}$



Transfert de vapeur de TCE vers un bâtiment modèle: Approche de modélisation numérique intégrale



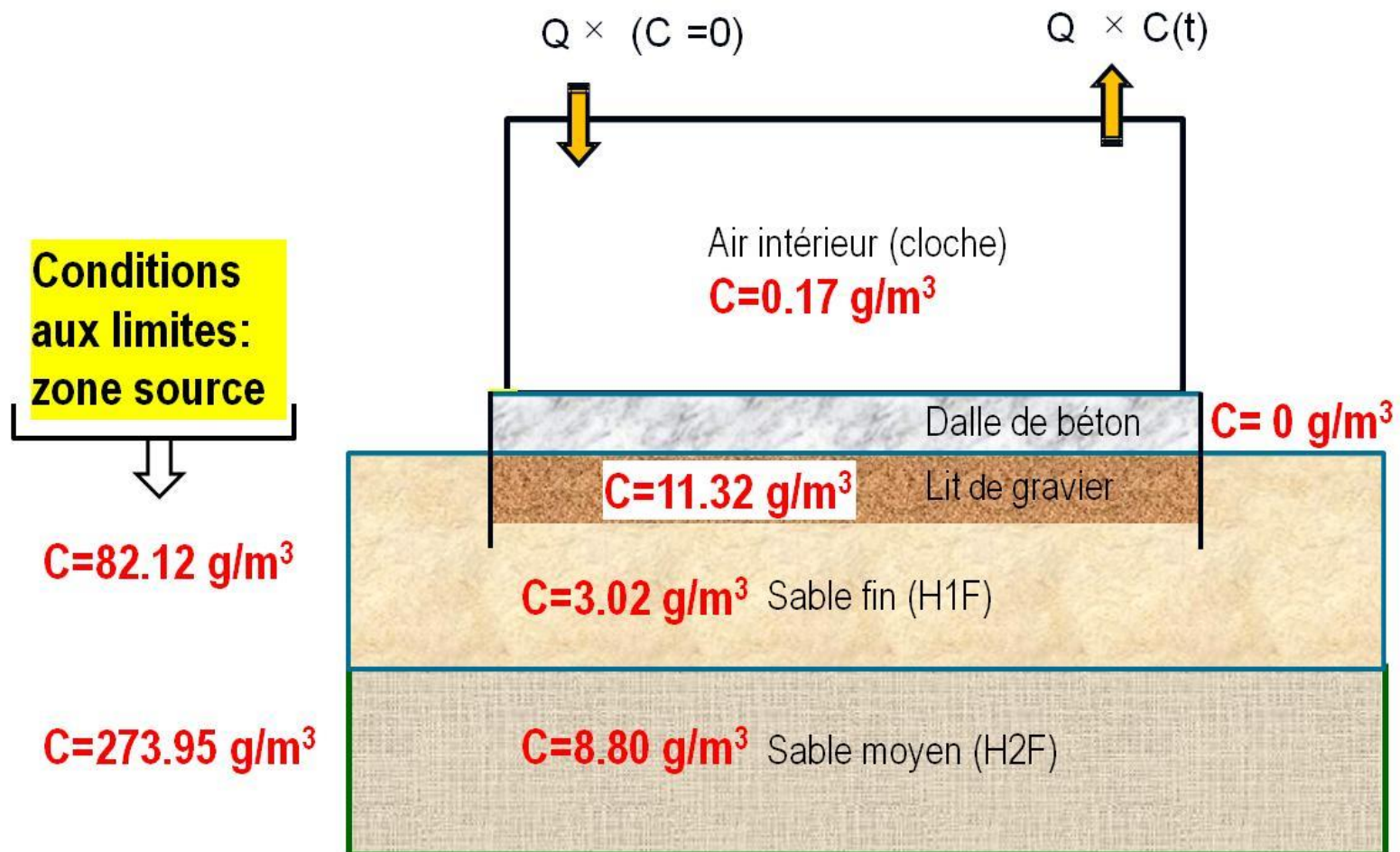
Modèle numérique COMSOL multiphysics

- Ecoulement de l'air : équations de Navier Stokes (cloche), de Darcy-Brinkman (milieu poreux), et de continuité
- Transport de vapeur: équation de convection-diffusion

Transfert de vapeur de TCE vers un bâtiment modèle: Approche de modélisation numérique intégrale



Conditions aux limites et conditions initiales du modèle de transport

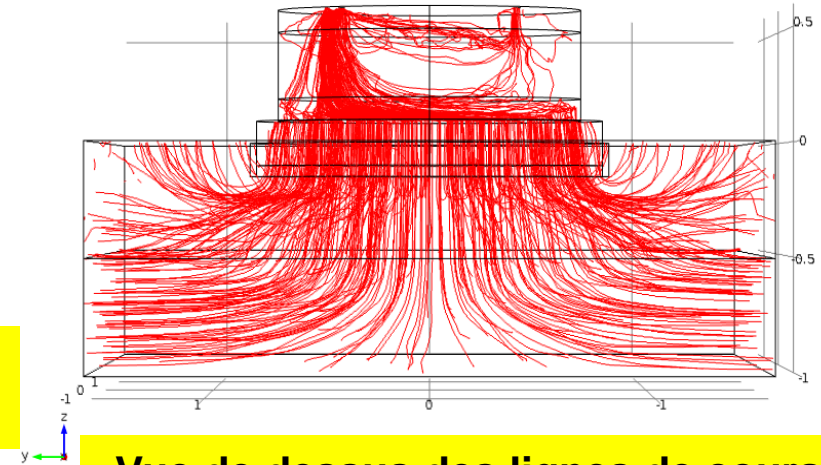


Transfert de vapeur de TCE vers un bâtiment modèle: Approche de modélisation numérique intégrale

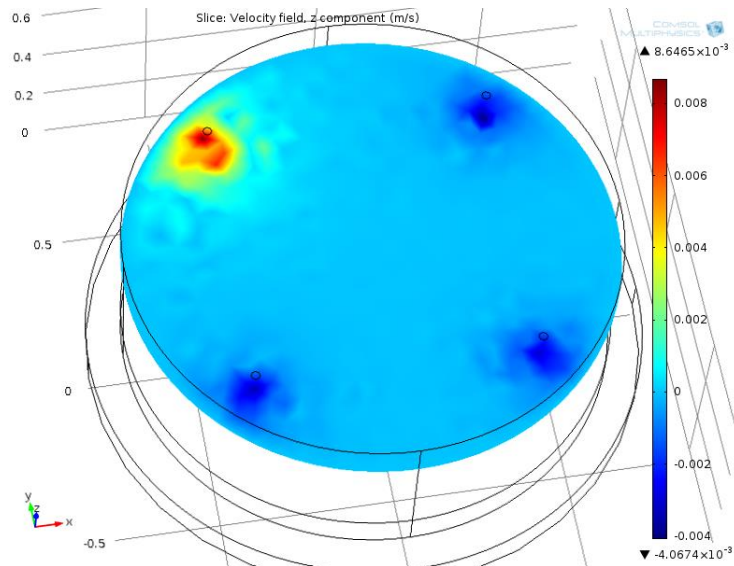


Lignes de courant en plan vertical xz

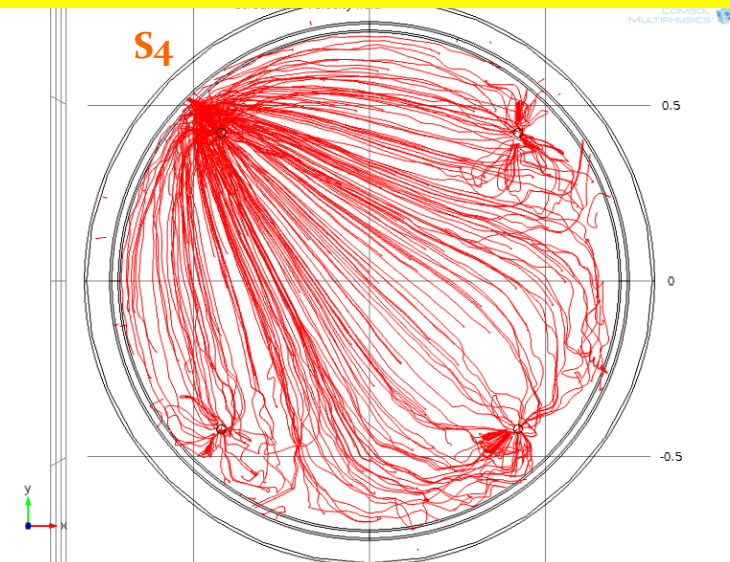
Résultats de l'écoulement de l'air dans le sol et dans le bâtiment modèle (« cloche »)



Vitesses verticales de l'air dans la cloche (10 cm en-dessous du couvercle)



Vue de dessus des lignes de courant dans la cloche



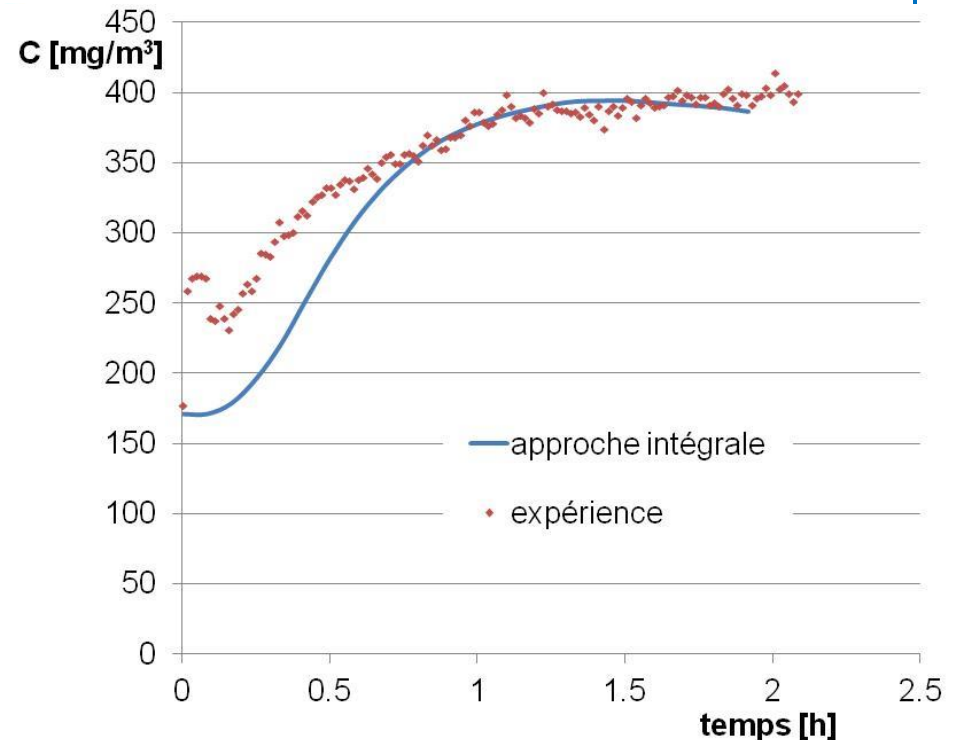
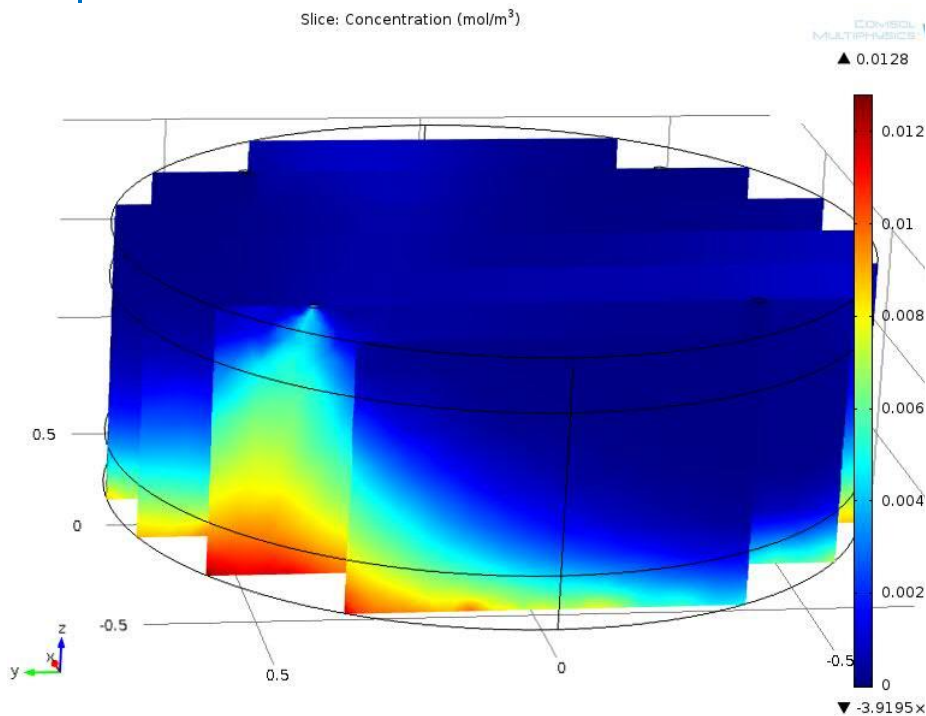
Transfert de vapeur de TCE vers un bâtiment modèle: Approche de modélisation numérique intégrale



Résultats du transport de vapeur de TCE dans le bâtiment modèle (« cloche »)

Concentrations en TCE après 1 heure

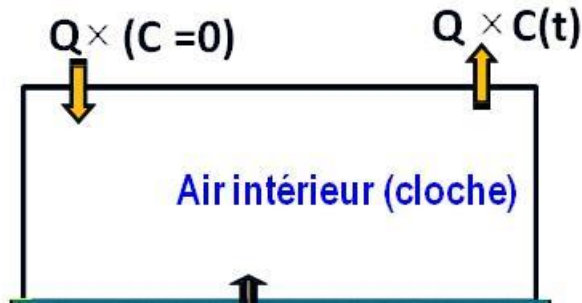
Concentrations extraites simulées ↔ observées



Transfert de vapeur de TCE vers un bâtiment modèle: Approche de modélisation couplée

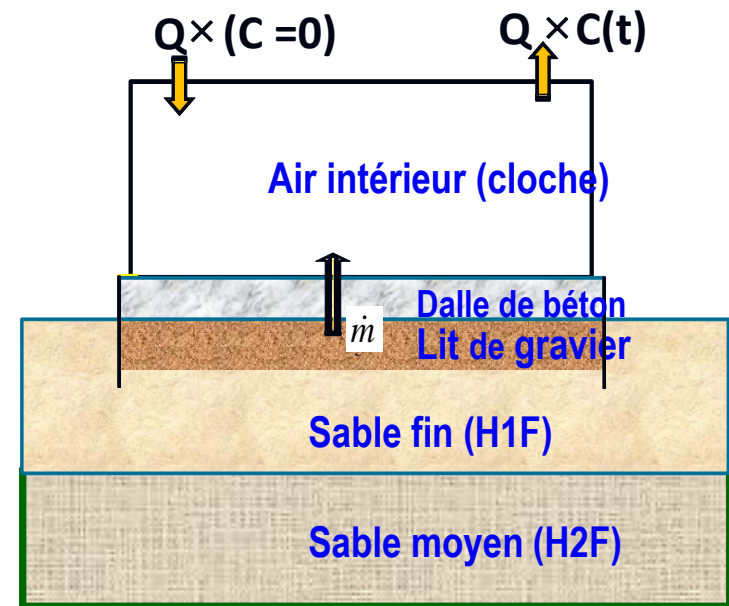
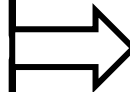


Etape 2: Modélisation analytique



+

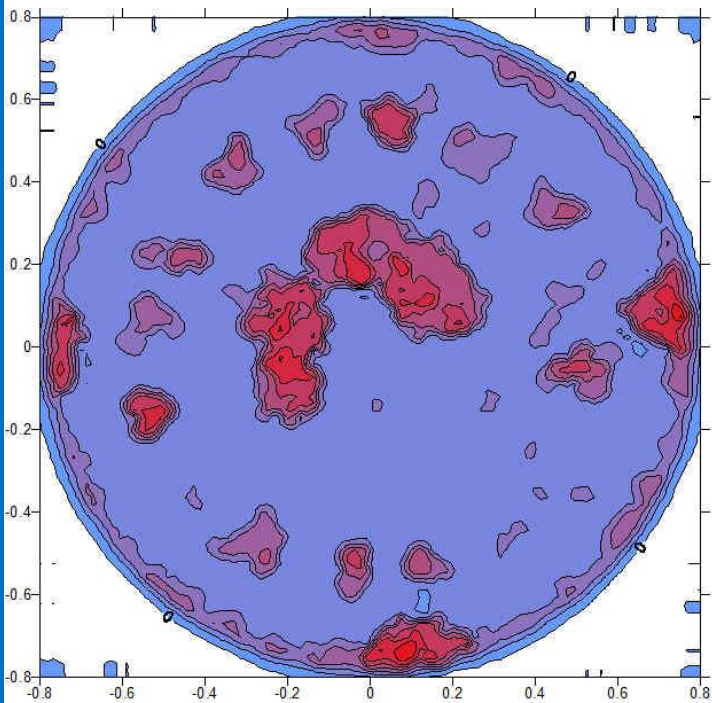
Etape 1: Modélisation numérique



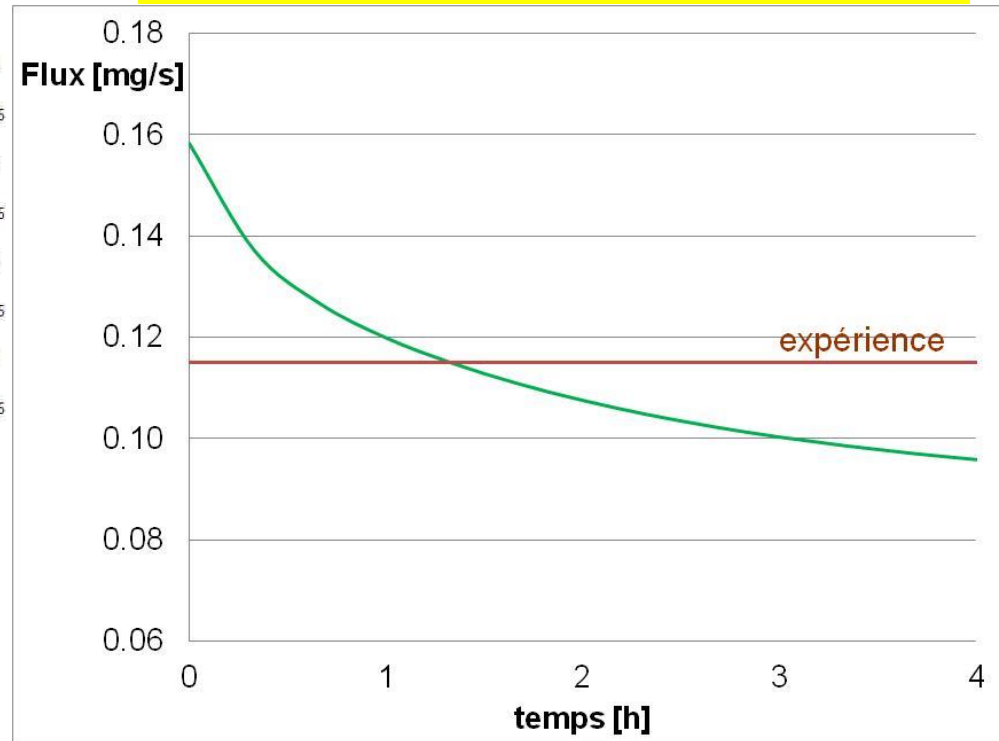
Transfert de vapeur de TCE vers un bâtiment modèle: Approche de modélisation couplée: étape numérique



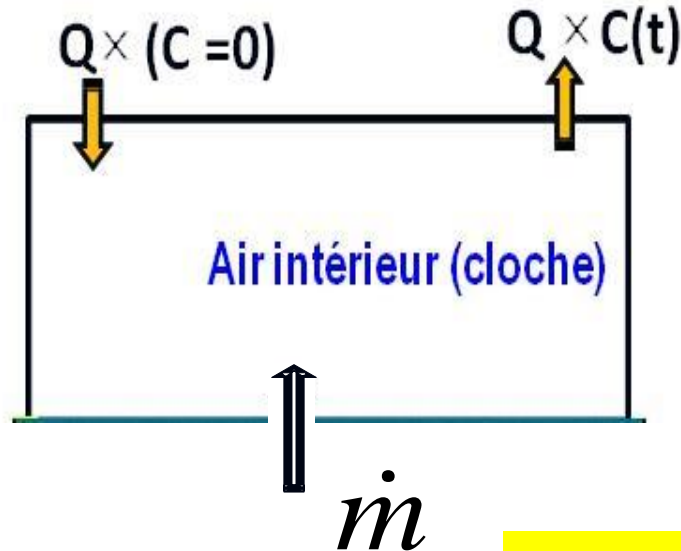
Distribution de flux de vapeurs de TCE [mg/(m²s)] dans la dalle de béton calculées à 3 heures



Flux convectif de vapeurs de TCE calculées à travers la dalle de béton [mg/s]



Transfert de vapeur de TCE vers un bâtiment modèle: Approche de modélisation couplée: étape analytique



Concentrations de vapeur de TCE à l'extraction \Rightarrow
Solution analytique pour $C(t)$
de type mélangeur

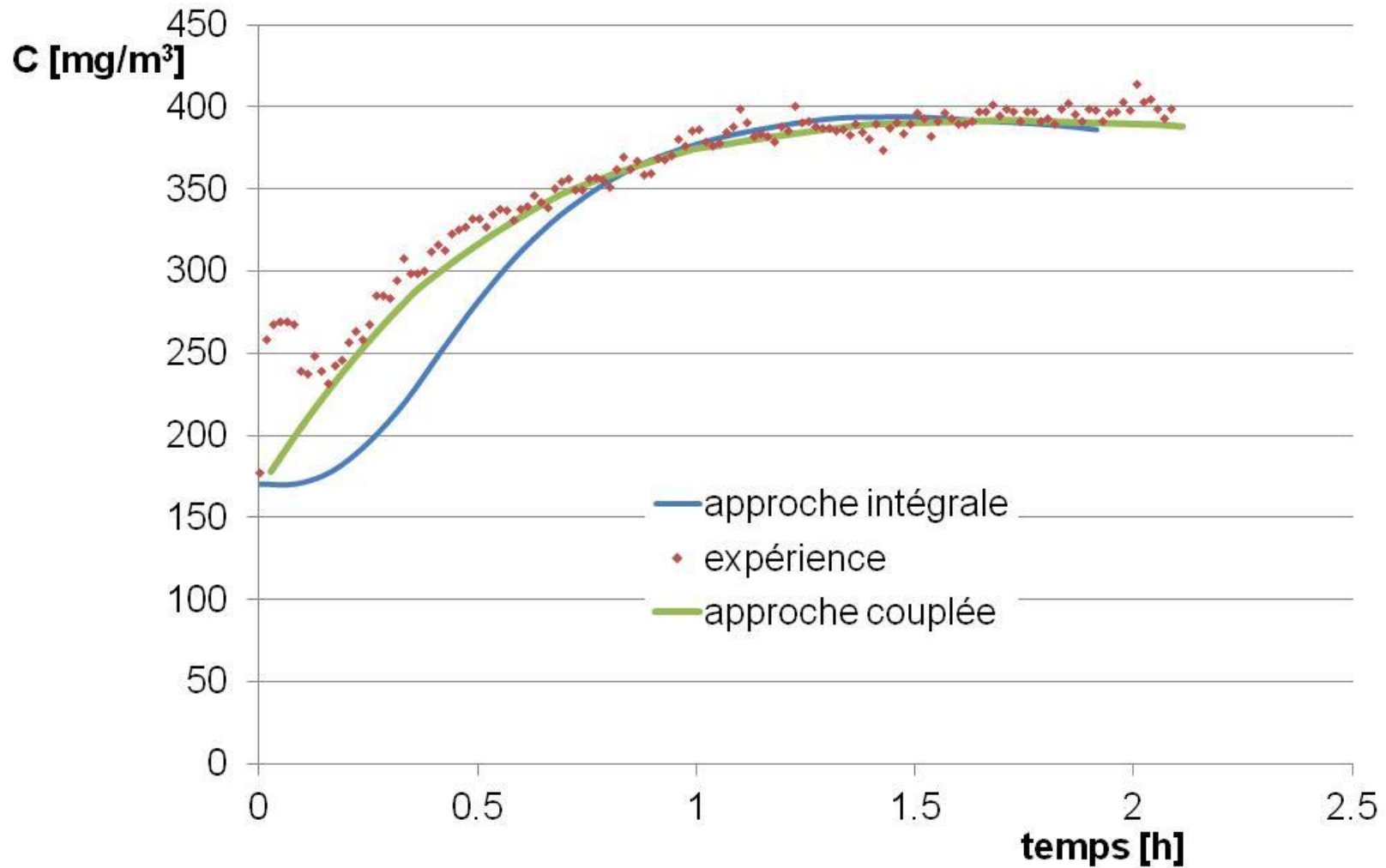
$$C(t) = \frac{\dot{m}}{Q} \left(1 - e^{-\frac{Q}{V}t}\right) + C_0 e^{-\frac{Q}{V}t}$$

Flux = f(t) \Rightarrow Calcul par intégration séquentielle

$$\frac{dC}{dt} + \frac{Q}{V}C - \frac{\dot{m}}{V} = 0$$

\dot{m} (mg.s⁻¹) : flux de masse traversant la dalle
 Q (m³.s⁻¹) : débit d'extraction de l'air du bâtiment modèle
 V (m³) : volume du bâtiment modèle (0.76 m³)
 $C(t)$ (mg.m⁻³) : concentration de vapeurs de TCE.
 C_0 (mg.m⁻³) : concentration initiale de vapeurs de TCE

Transfert de vapeur de TCE vers un bâtiment modèle: Comparaison de concentrations calculées et observées



Conclusions



- Approche semi-analytique : évaluation de flux dalle /AI
 - flux diffusif négligeable devant flux convectif
 - effet de densité de vapeur négligeable (nombre de Rayleigh faible)
 - évaluation de paramètres (θ_{air} , D_{eg} , $k_{\text{équi}}$) difficile
 - métrologie appropriée nécessaire: Δp
- Simulation numérique du panache de vapeur de TCE
 - effort de calcul élevé: discrétisation fine, équations fortement non linéaires,...
 - prédiction de concentrations (en aval de la zone source): information indispensable pour évaluer le flux (en ZNS, vers AE, AI)
- Transfert de vapeur de TCE vers un bâtiment modèle
 - **approche intégrale de modélisation** (« niveau R&D », modèle 7 du GM): niveau d'expertise de modélisation élevé, description de l'écoulement de l'air (AI), effort de calcul élevé, effet de turbulence ? (à ajouter!)
 - **approche couplée de modélisation** (« niveau 2 », modèle 5 du GM): facile à mettre en œuvre par un BE, variation temporelle du flux massique (dalle/AI) \Rightarrow évaluation de la concentration (AI) : bon accord avec les mesures!
 - question ouverte: description appropriée de la dalle de béton fissurée - milieu poreux équivalent ou milieu poreux à double porosité ?