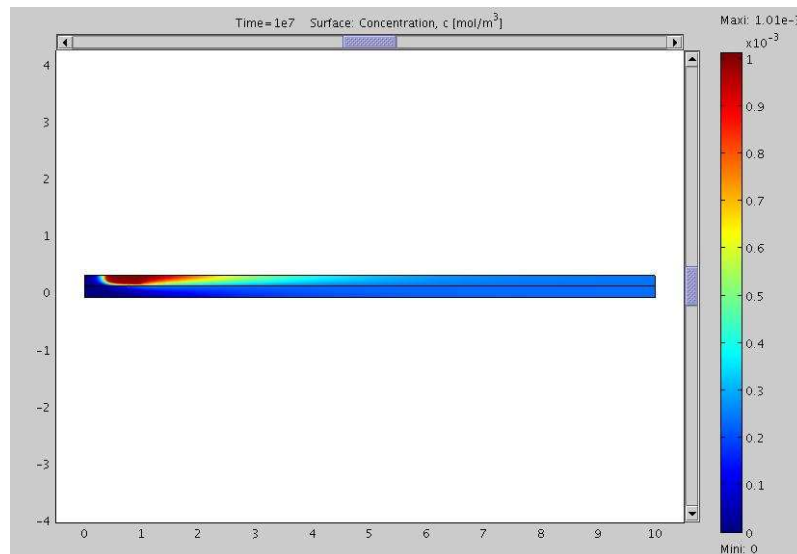


HYDROLOGIE DES TRANSFERTS

*Dissipation d'un polluant
hydrocarboné dans un milieu
stratifié*



Idris ABDOU

Renaud CHAMPREDONDE

Encadrants : M. QUINTARD

S. VERAN

Y. DAVIT

Année 2007 – 2008

SOMMAIRE

1. TABLE DES ILLUSTRATIONS.....	3
2. INTRODUCTION.....	4
3. DEVELOPPEMENT THEORIQUE	5
4. SIMULATIONS 1D NON-TEMPORELLE	6
4.1. Mise en forme des équations	6
4.2. Résultats des simulations.....	7
4.2.1. Géométrie du problème	7
4.2.2. Maillage.....	8
4.2.3. Résultats	9
5. SIMULATIONS 1D TEMPORELLE	10
5.1. Mise en forme des équations	10
5.2. Résultats des simulations.....	11
5.2.1. Géométrie du problème	11
5.2.2. Maillage.....	11
5.2.3. Résultats	12
6. SIMULATIONS 2D TEMPORELLE	13
6.1. Mise en forme des équations	13
6.2. Résultats des simulations.....	15
6.2.1. Géométrie du problème	15
6.2.2. Maillage.....	15
6.2.3. Résultats	16
6.2.4. Modification de la perméabilité.....	19
6.2.4.1. Perméabilité fixée à 1e-9	19
6.2.4.2. Perméabilité fixée à 1e-20	22
7. CONCLUSIONS.....	25
8. ANNEXE.....	26

1. TABLE DES ILLUSTRATIONS

Figure 1 : Géométrie du problème 1D non temporel	8
Figure 2 : Maillage du problème 1D non temporel.....	8
Figure 3 : Résultats des simulations 1D non temporelle.....	9
Figure 4 : Géométrie des simulations 1D temporelle.....	11
Figure 5 : Maillage du problème 1D temporel.....	12
Figure 6 : Résultats des simulations 1D temporelle.....	12
Figure 7 : Géométrie des simulations 2D	15
Figure 8 : Maillage des simulations 2D.....	16
Figure 9 : Résultats des simulations 2D	17

2. INTRODUCTION

L'objectif de cette étude consiste à résoudre les équations décrivant la dissolution d'un polluant hydrocarboné dans un milieu poreux stratifié. L'observation temporelle de la saturation dans la zone considérée comme source ainsi que la concentration à la sortie de la zone source constituera le but de ce travail.

Pour mener à bien ce travail, les équations de bilan de masse et de quantité de mouvement seront mises en évidence, puis insérés dans un logiciel de simulation numérique COMSOL. La résolution puissante et détaillée de ce logiciel mettra en évidence le transport d'un polluant dans un milieu stratifié.

La première partie s'intéresse à la résolution à une dimension la plus simple qui soit. Ensuite la composante temporelle sera ajoutée au modèle 1D. Enfin, après la validation de deux premiers cas, les simulations s'orienteront vers une modélisation à deux dimensions avec la composante temporelle.

3. DEVELOPPEMENT THEORIQUE

L'objectif de cette section réside dans la description théorique des équations gouvernant la dissipation d'un polluant.

Le bilan de masse global pour la phase eau d'un polluant partiellement miscible (NAPL) s'écrit :

$$\nabla \cdot (\varepsilon(1-S)U) = 0$$

Dans ce problème la variation de masse volumique avec la concentration est négligée.

Le bilan de masse pour la phase eau du constituant venant du polluant NAPL s'écrit :

$$\frac{\partial(\varepsilon(1-S)C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon(1-S)UC) = \nabla \cdot (\varepsilon(1-S)D^* \cdot \nabla C) - \alpha(C - C_{eq})$$

Avec C fraction massique dans la phase eau.

Le bilan de masse pour la phase NAPL s'écrit ainsi :

$$\varepsilon \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\rho t}{\rho_0} \alpha (C - C_{eq})$$

La propagation de l'eau dans le NAPL est régie par la loi de Darcy généralisée :

$$V = \varepsilon(1-S)U = -\frac{1}{\mu} K_w \cdot (\nabla P - \rho g)$$

Dans cette équation K_w est la perméabilité multiphasique de l'eau. Celle-ci s'exprime également par :

$$K_w(S) = K \cdot K_{rw}(S)$$

4. SIMULATIONS 1D NON-TEMPORELLE

Dans cette partie, l'intérêt est porté sur la prise en main du logiciel de simulation choisi, COMSOL, puis la réalisation d'un premier cas de dissolution à une dimension sans composante temporelle.

4.1. Mise en forme des équations

La base de la justification s'appuie sur la loi de Darcy :

$$\frac{Q}{A} = \frac{1}{\mu_\beta} K \cdot \left(\frac{P_1 - P_2 - \rho_\beta g H}{H} \right)$$

La forme de type diffusion est donnée ci après :

$$\nabla \cdot (D \nabla \phi) = 0$$

Avec l'équation de Darcy, il vient :

$$V = -\frac{K}{\mu} \left(\frac{\partial P}{\partial x} - \rho g \right)$$

Le gradient n'est uniquement que sur la composante x puisque le cas étudié ne possède qu'une dimension.

L'équation de continuité (équation macroscopique à porosité constante) s'exprime par :

$$\nabla \cdot \langle v_\beta \rangle = 0$$

Ce qui conduit à :

$$\nabla \cdot (K \cdot (\nabla \langle P_\beta \rangle - \rho_\beta g)) = 0$$

Si la masse volumique est constante nous obtenons alors :

$$\nabla \cdot (K \cdot \nabla P_\beta) = 0$$

Avec une perméabilité intrinsèque constante, il vient :

$$K \nabla \cdot (\nabla P_\beta) = 0$$

Ce qui implique : $\Delta P_\beta = 0$

Les paramètres liés à la résolution des équations sur la pression et la concentration insérés dans le logiciel COMSOL sont recensés ci-après :

Ligne : concentration, P

1D entrée P=10 sorti P=5

Frontière 1 :

Concentration : $P=P_0=10 \text{ mol/m}^3$

$$\text{Flux} : \left. \begin{array}{l} -n^* N = N_0 + K_c^* (c_b - P) \\ N = -D\nabla P \end{array} \right\} \text{ avec : } \begin{cases} N_0 = 0 = \text{Flux entrant} \\ k_c = 0 = \text{coefficient de transfert de masse,} \\ c_b = 0 = \text{concentration dans le volume} \end{cases}$$

$$\text{Isolation Symétrie : } \begin{cases} n^* N = 0 \\ N = -D\nabla P \end{cases}$$

Frontière 2 :

Concentration : $P=P_0=5 \text{ mol/m}^3$

$$\text{Flux} : \left. \begin{array}{l} -n^* N = N_0 + K_c^* (c_b - P) \\ N = -D\nabla P \end{array} \right\} \text{ avec : } \begin{cases} N_0 = 0 = \text{Flux entrant} \\ k_c = 0 = \text{coefficient de transfert de masse,} \\ c_b = 0 = \text{concentration dans le volume} \end{cases}$$

$$\text{Isolation Symétrie : } \begin{cases} n^* N = 0 \\ N = -D\nabla P \end{cases}$$

4.2. Résultats des simulations

4.2.1. Géométrie du problème

La géométrie du problème est constituée d'une ligne de longueur 4 mètres sur laquelle entre une vitesse $V_0 = 1 \text{ m/j}$.

La représentation fournit la figure 1 :

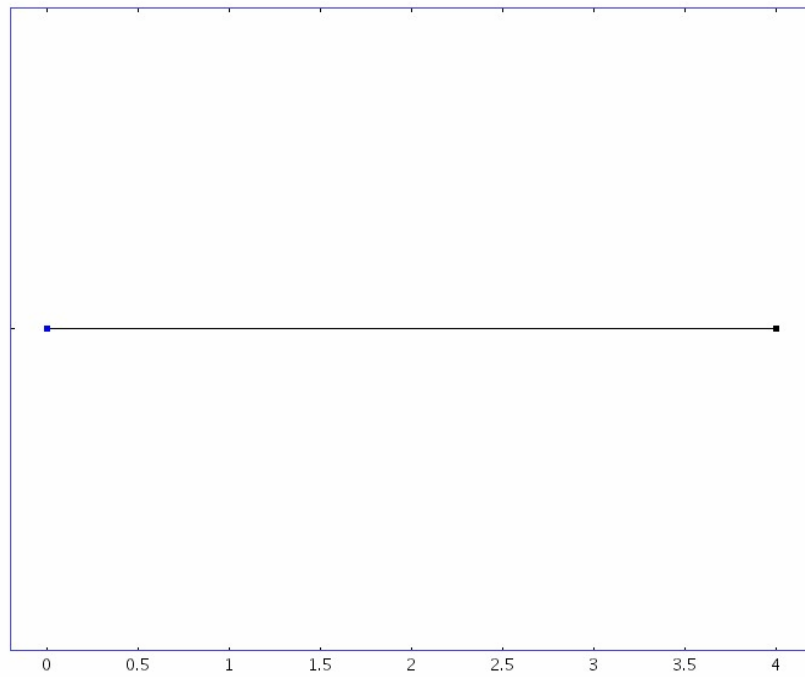


Figure 1 : Géométrie du problème 1D non temporel

4.2.2. Maillage

Le maillage de la géométrie 1D non temporelle est représenté par la figure 2 :

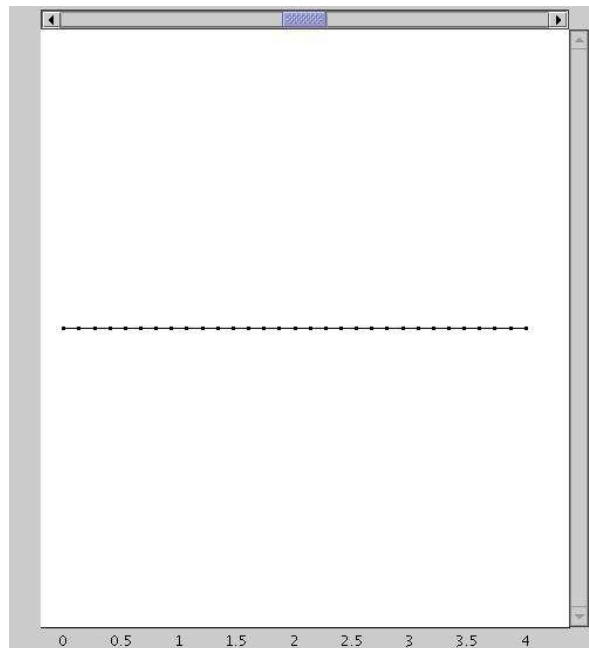


Figure 2 : Maillage du problème 1D non temporel

4.2.3. Résultats

La résolution du système d'équations insérées dans COMSOL produit le résultat de la figure 3 :

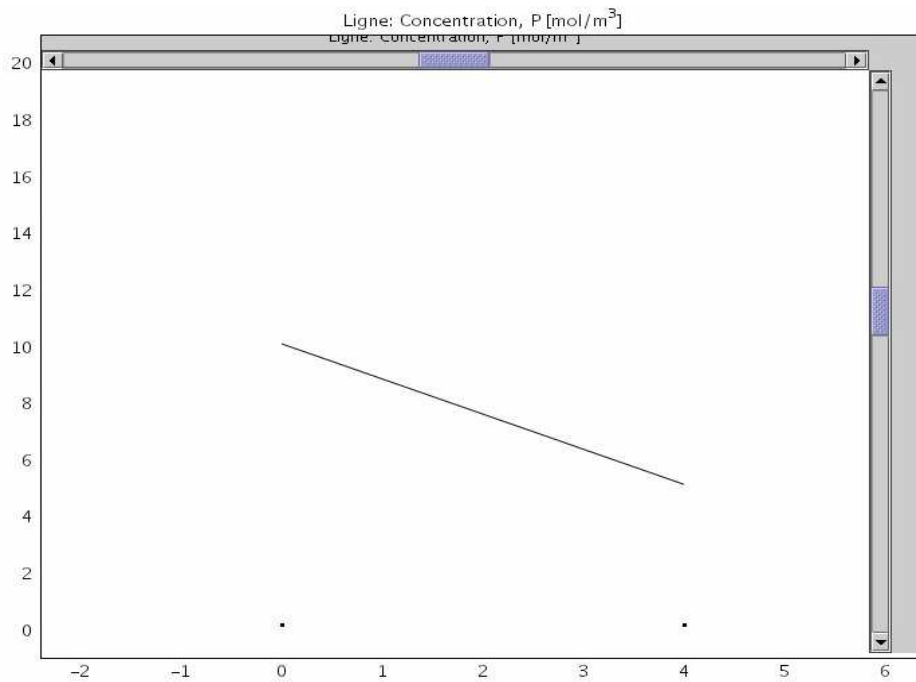


Figure 3 : Résultats des simulations 1D non temporelle

Sur cette figure est représentée la variation de la concentration entre l'entrée du domaine $x = 0$ et la sortie $x = 4$ mètres. La progression est linéaire du fait des approximations sur la perméabilité ainsi que sur l'instationnarité du phénomène.

5. SIMULATIONS 1D TEMPORELLE

Dans ce chapitre, l'intérêt est porté sur le même type de problème que celui précédemment résolu au chapitre précédent, en ajoutant cependant la composante temporelle aux équations.

5.1. Mise en forme des équations

Pour passer du cas précédent au cas d'une simulation 1D temporelle, nous ajoutons l'expression :

$$\Delta P_\beta = \frac{\partial P_\beta}{\partial t}$$

Les différents paramètres des équations gouvernant l'écoulement sont recensés ci-dessous :

Frontière 1 : Equation

Concentration : $S=S_0$ $S_0 = 1 \text{ mol} / \text{m}^3$

Flux : $-n * N = N_0; N = -D\nabla S + S * u$
 $\left\{ \begin{array}{l} N_0 = 0 \text{ mol} / \text{m}^2 . \text{s} = \text{Flux entrant} \\ S_0 = 1 \text{ mol} / \text{m}^3 = \text{concentration initiale} \end{array} \right.$

Isolation Symétrie : $\left. \begin{array}{l} n * N = 0 \\ N = -D\nabla S + S * u \end{array} \right\}$ Pas d'isolation/Symétrie

Flux convectif : $\left. \begin{array}{l} n * N = 0 \\ N = -D\nabla S \end{array} \right\}$ Pas de flux convectif

Frontière 2 : Equation

Concentration : $S=S_0$ $S_0 = 0 \text{ mol} / \text{m}^3$

Flux : $-n * N = N_0; N = -D\nabla S + S * u$
 $\left\{ \begin{array}{l} N_0 = 0 \text{ mol} / \text{m}^2 . \text{s} = \text{Flux entrant} \\ S_0 = 1 \text{ mol} / \text{m}^3 = \text{concentration initiale} \end{array} \right.$

Isolation Symétrie : $\left. \begin{array}{l} n * N = 0 \\ N = -D\nabla S + S * u \end{array} \right\}$ Pas d'isolation/Symétrie

$$\text{Flux convectif : } \left. \begin{array}{l} n^* N = 0 \\ N = -D\nabla S \end{array} \right\} \text{ Pas de flux convectif}$$

5.2. Résultats des simulations

La modification des équations de sorte qu'elles dépendent maintenant d'une composante temporelle conduit aux résultats suivant.

5.2.1. Géométrie du problème

La géométrie du problème est constituée d'une ligne de longueur 4 mètres sur laquelle entre une vitesse $V_0 = 1 \text{ m/j}$.

La représentation fournit la figure 4 :

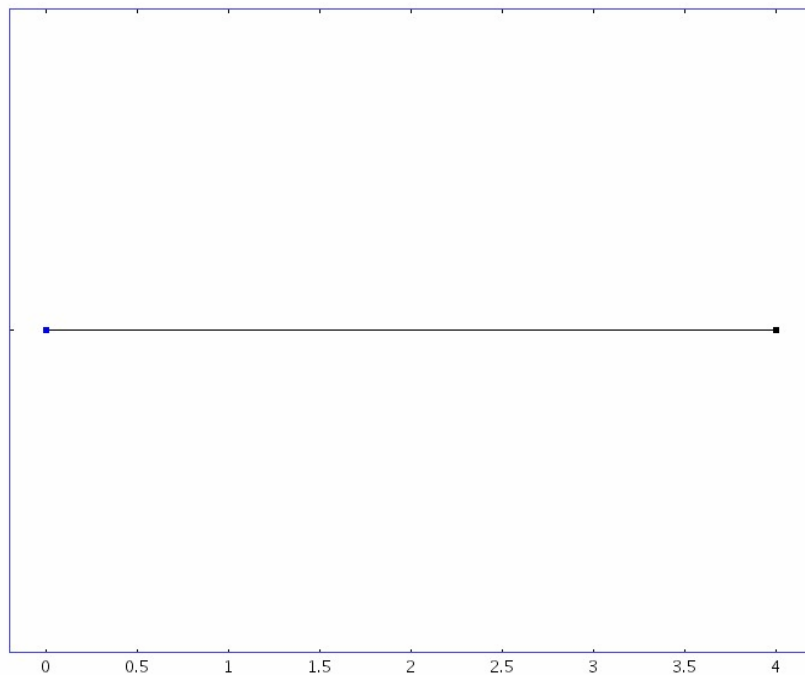


Figure 4 : Géométrie des simulations 1D temporelle

La géométrie est identique à celle présenté pour le cas non temporel.

5.2.2. Maillage

La géométrie du problème étant similaire à celle présenté dans le cas non temporel, le maillage des simulations temporelles est également identique.

Il a pour représentation la figure 5figure 4 :

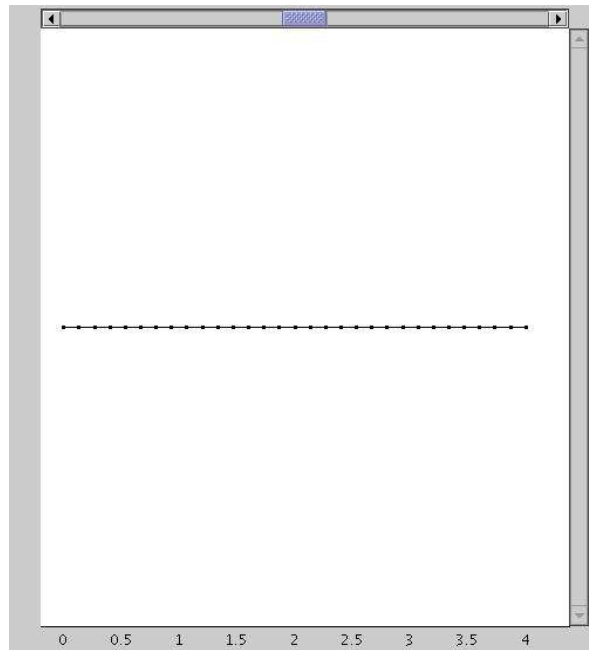


Figure 5 : Maillage du problème 1D temporel

5.2.3. Résultats

La résolution du système d'équations insérées dans COMSOL pour le cas temporel produit le résultat pour la concentration visible sur la figure 6 :

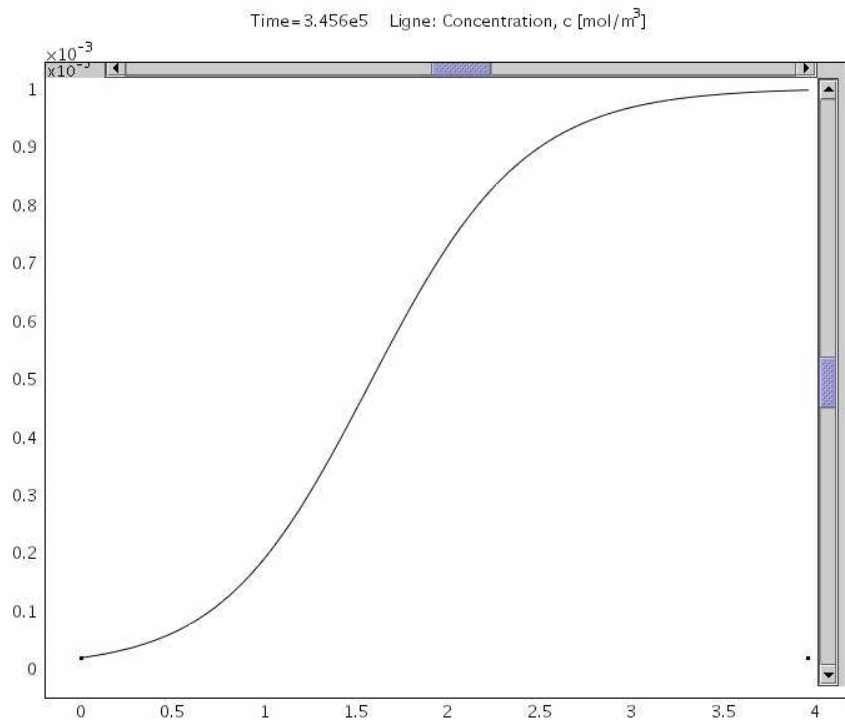


Figure 6 : Résultats des simulations 1D temporelle

6. SIMULATIONS 2D TEMPORELLE

La résolution d'un problème 2D est à présent envisagée dans ce chapitre. On considère un milieu poreux stratifié pollué par du NAPL. Les parois supérieures et inférieures sont supposées imperméables. La pression à l'amont et à l'aval est imposée. La concentration du polluant dans l'eau est nulle à l'entrée, et la condition de sortie est indiquée comme condition de sortie convective libre.

6.1. Mise en forme des équations

Conditions limites :

Frontière entrée : Equation

$$\text{Concentration : } C=C_0 \quad C_0=0 \text{ mol} / \text{m}^3$$

Frontière sortie : Equation

$$\text{Flux convectif : } \left. \begin{array}{l} n^* N = 0 \\ N = -D\nabla C \end{array} \right\} \text{Sortie libre}$$

Frontière parois : Equation

$$\text{Isolation Symétrie : } \left. \begin{array}{l} n^* N = 0 \\ N = -D\nabla C + C^*u \end{array} \right\} \text{Isolation/Symétrie}$$

Frontière interface : Gérée par COMSOL

Equations des sous domaines :

Frontière 1

$$\delta_{ts} = \varepsilon_{01} \times (1 - S)$$

$$V_1 = \varepsilon_{01} \times (1 - S) \times U \times C$$

$$D = \varepsilon_{01} \times (1 - S) \times D^* \times \nabla C$$

$$R = -\alpha_{01} (C - C_{eq}) \left(1 - C \frac{\rho_L}{\rho_0} \right)$$

Avec le tenseur anisotropique :

$$D^* = \begin{vmatrix} \frac{D_0}{\tau} + \alpha_T \|\vec{U}\| & 0 \\ 0 & \frac{D_0}{\tau} + \alpha \|\vec{U}\| \end{vmatrix} + (\alpha_L - \alpha_T) \cdot \begin{vmatrix} u^2 & uv \\ uv & v^2 \end{vmatrix}$$

Frontière 2

$$\delta_{is} = \varepsilon_{02} \times (1 - S)$$

$$V_2 = \varepsilon_{02} \times (1 - S) \times U \times C$$

$$D = \varepsilon_{02} \times (1 - S) \times D^* \times \nabla C$$

$$R = -\alpha_{02} (C - C_{eq}) \left(1 - C \frac{\rho_L}{\rho_0} \right)$$

Avec le tenseur anisotropique :

$$D^* = \begin{vmatrix} \frac{D_0}{\tau} + \alpha_T \|\vec{U}\| & 0 \\ 0 & \frac{D_0}{\tau} + \alpha \|\vec{U}\| \end{vmatrix} + (\alpha_L - \alpha_T) \cdot \begin{vmatrix} u^2 & uv \\ uv & v^2 \end{vmatrix}$$

Par ailleurs nous avons trois équations en P, S et C.

V est la vitesse de filtration de l'eau :

$$\vec{V} = \varepsilon (1 - S) \times \vec{U}$$

Donc, on a :

$$\vec{V} = -\frac{1}{\mu} K_w \cdot (\nabla P - \rho g)$$

$$\text{Par ailleurs : } \nabla V = -\frac{1}{\mu} \nabla (K_w \cdot \nabla P) + \frac{1}{\mu} \nabla (K_w \cdot \rho g)$$

Avec la conservation de la masse, on a :

$$\begin{cases} \nabla V = 0 \\ \nabla (K_w \cdot \rho g) \text{ négligeable} \end{cases}$$

Ce qui conduit à :

$$\begin{cases} \nabla (K_w \cdot \nabla P) = 0 \\ K_w = K (1 - S)^n \text{ avec } n = 1 \text{ ou } 2 \end{cases}$$

En effet la perméabilité K est non constante et dépend de la saturation S.

Pour la résolution de P, on utilise l'équation de type diffusion obtenue par la résolution de V. On résout séparément cette équation en premier lieu pour exprimer les valeurs de P.

Le modèle est ensuite simulé avec les deux autres systèmes d'équations (en S et C) dont on prend la dernière valeur de P démarrer le calcul avec les trois systèmes d'équations.

6.2. Résultats des simulations

6.2.1. Géométrie du problème

Ce problème va être appliqué à une géométrie rectangulaire de sorte que les deux couches soient également matérialisées en rectangles. La longueur du domaine est de 10 mètres avec une zone où règnent les conditions initiales comprise entre l'entrée $x = 0$ et l'abscisse 1 mètre.

La pression initiale est fixée à $1 \cdot 10^5$ Pascal à l'entrée et à $0.1 \cdot 10^5$ Pascal à la sortie.

La visualisation de la géométrie du problème est exposée ci-dessous :

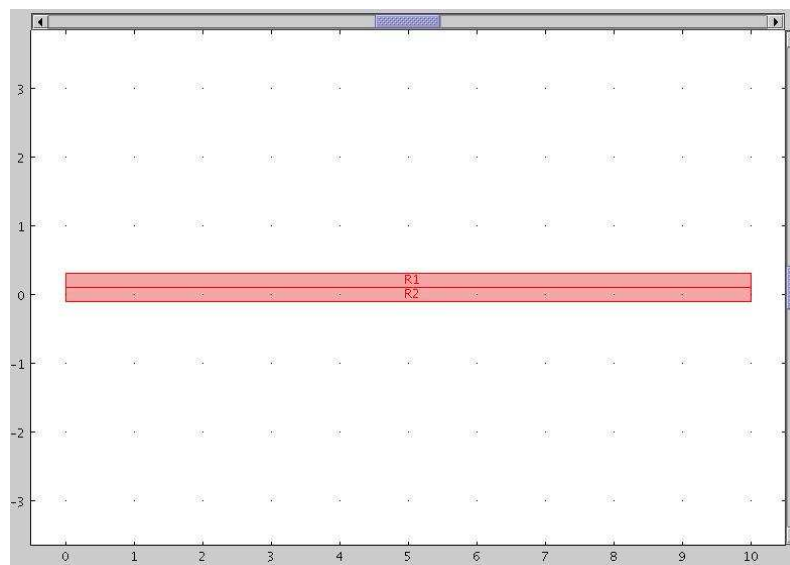


Figure 7 : Géométrie des simulations 2D

6.2.2. Maillage

Un juste milieu entre précision du maillage et temps de calcul a été adopté pour obtenir le maillage du domaine simulé.

Dans ces conditions, le maillage retenu a pour visualisation :

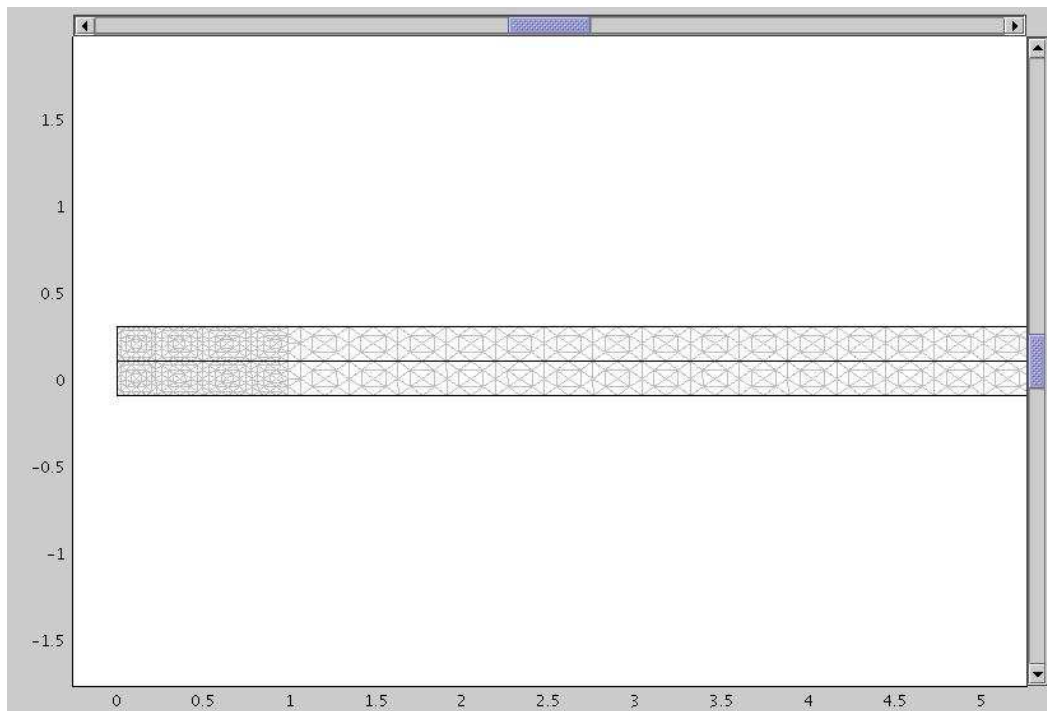


Figure 8 : Maillage des simulations 2D

Le maillage est plus raffiné dans la zone d'injection entre 0 et 1 mètre en abscisse.

6.2.3. Résultats

La simulation en deux temps a été adoptée pour résoudre le système de trois équations du problème. Une première résolution est effectuée sur la seule variable de la pression. Le dernier résultat de cette simulation est pris comme entrée de la résolution du système à trois équations résolues après la première simulation.

Les simulations sont effectuées sous les conditions suivantes :

- Parois supérieures et inférieures imperméables
- Pression à l'amont et à l'aval imposée
- Concentration du polluant dans l'eau nulle à l'entrée
- Condition de sortie : convective libre

Les résultats de ces simulations sont représentés par la figure ci-dessous :

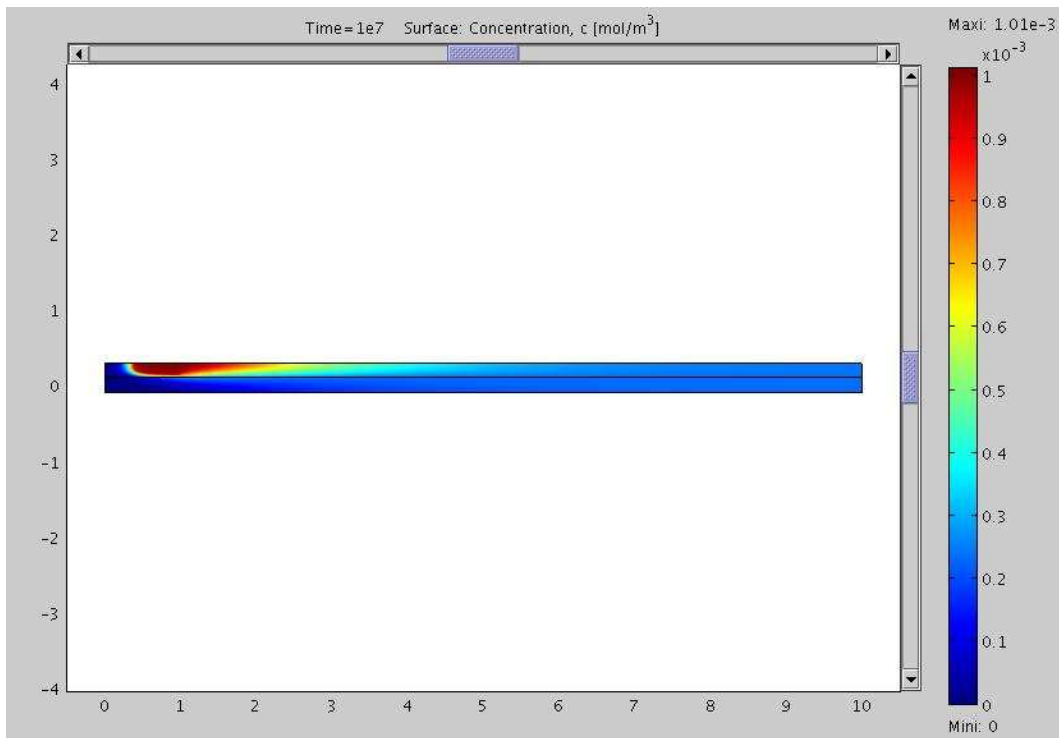


Figure 9 : Résultats des simulations 2D

Sur ce graphique, la diffusion du polluant est bien visible. Le front se propage vers la sortie du domaine. Ce résultat correspond à un temps de 115 jours de simulations.

Les résultats des simulations permettent également de représenter les profils de pression, concentration et saturation. L'ensemble des profils sont tracés sur une ligne horizontale pour $y = 0,05$ et x compris entre 0 et 10. Ces profils correspondent à la strate inférieure.

La figure ci-dessous représente le profil de pression :

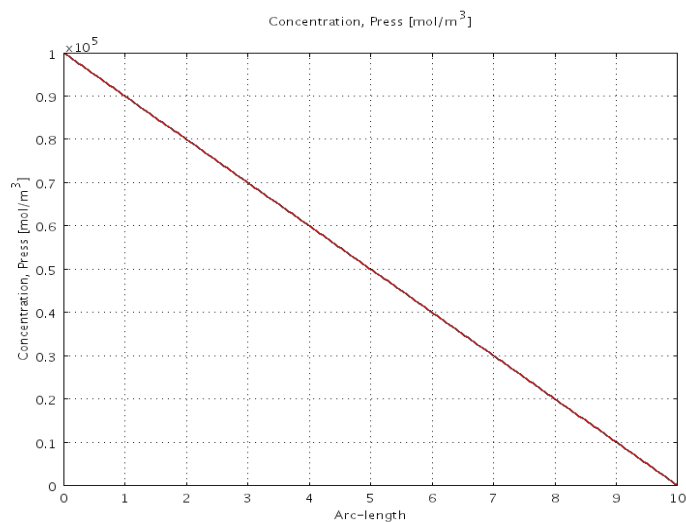


Figure 10 : Profil longitudinal de pression

A l'entrée et à la sortie du domaine modélisé, la pression est fixée. On observe alors un profil linéaire entre entrée et sortie.

La figure ci-dessous représente le profil de concentration pour l'ensemble des pas de temps.

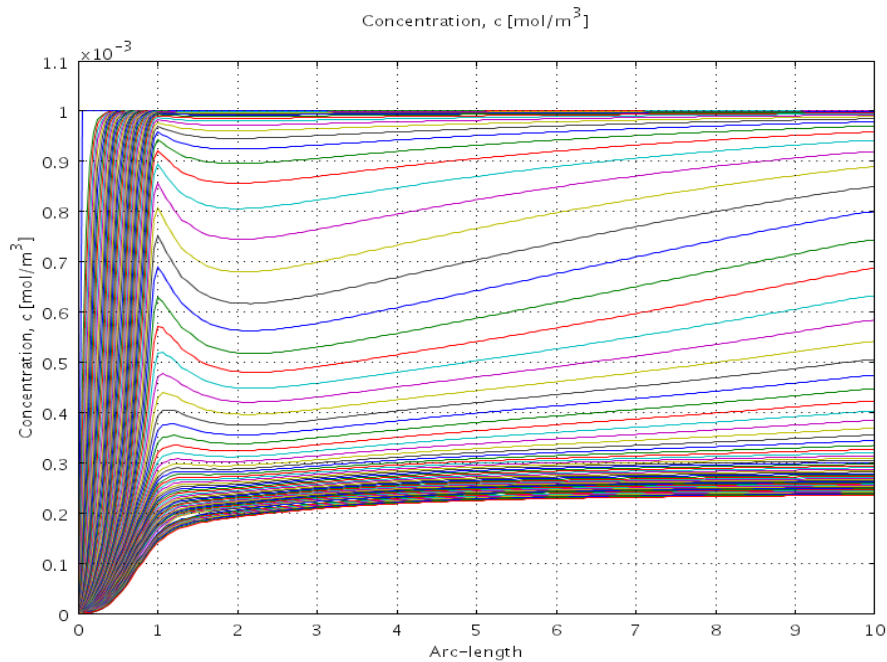


Figure 11 : Profil longitudinal de concentration

Le premier pas de temps correspond au profil le plus haut sur la figure. Au fur et à mesure que le calcul se développe, la concentration dans l'enceinte d'entrée (entre $x = 0$ et $x = 1$) diminue. A partir de $x = 1$, la concentration diminue pour atteindre un minimum pour la plupart des pas de temps. Ensuite elle augmente vers la sortie. Pour les derniers pas de temps, on observe une asymptote qui tend vers 0,2. On observe la diffusion de la concentration sous l'effet de la pression.

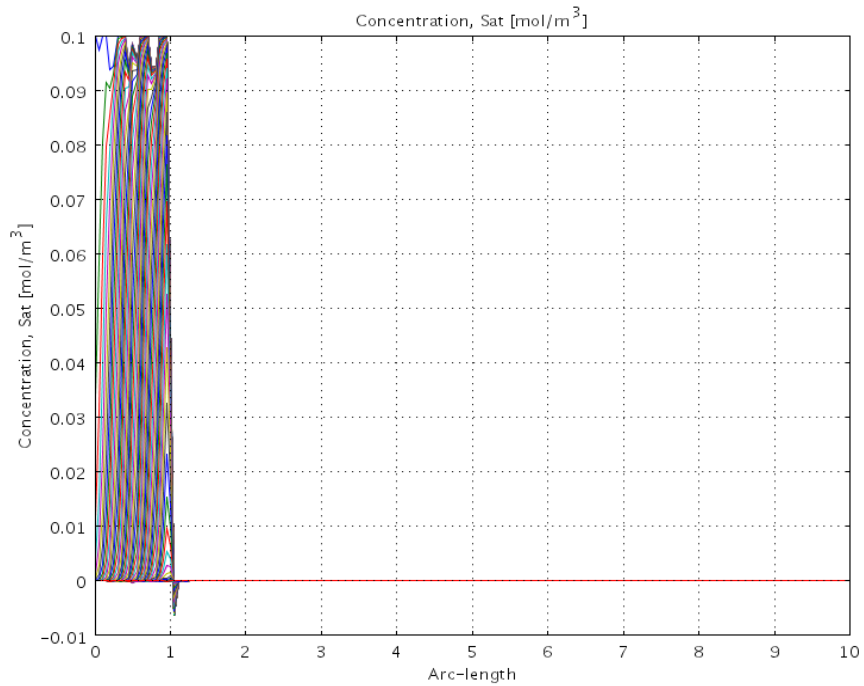


Figure 12 : Profil longitudinal de saturation

La diminution de la saturation s'explique par la diffusion de la concentration sous l'effet de la pression. A l'application de la pression à l'entrée la concentration reste, pendant un laps de temps, maximale suite à la pollution due aux gouttelettes de pollution. Ces dernières perdent également leurs saturations en polluant sous l'effet de la pression appliquée.

6.2.4. Modification de la perméabilité

Dans ce paragraphe, la perméabilité a été modifiée pour tester les cas d'une couche perméable ($K = 1e-9$), et une couche très peu perméable (couche d'argile $K = 1e-20$).

6.2.4.1. Perméabilité fixée à $1e-9$

Concentration pour une couche très perméable :

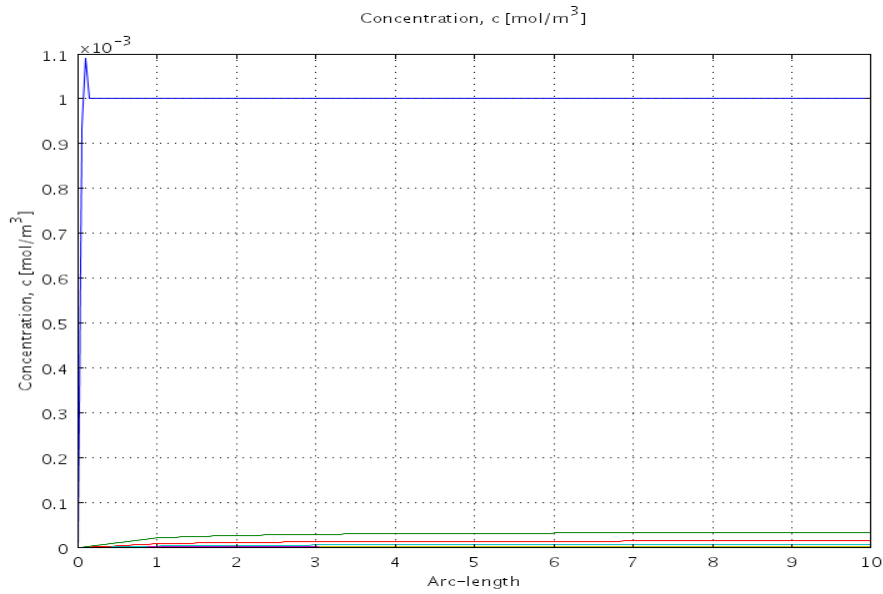


Figure 13 : Concentration pour $K = 1e-9$

On observe que la concentration se diffuse très rapidement.

La saturation pour une perméabilité de $1e-9$ est présentée ci-dessous :

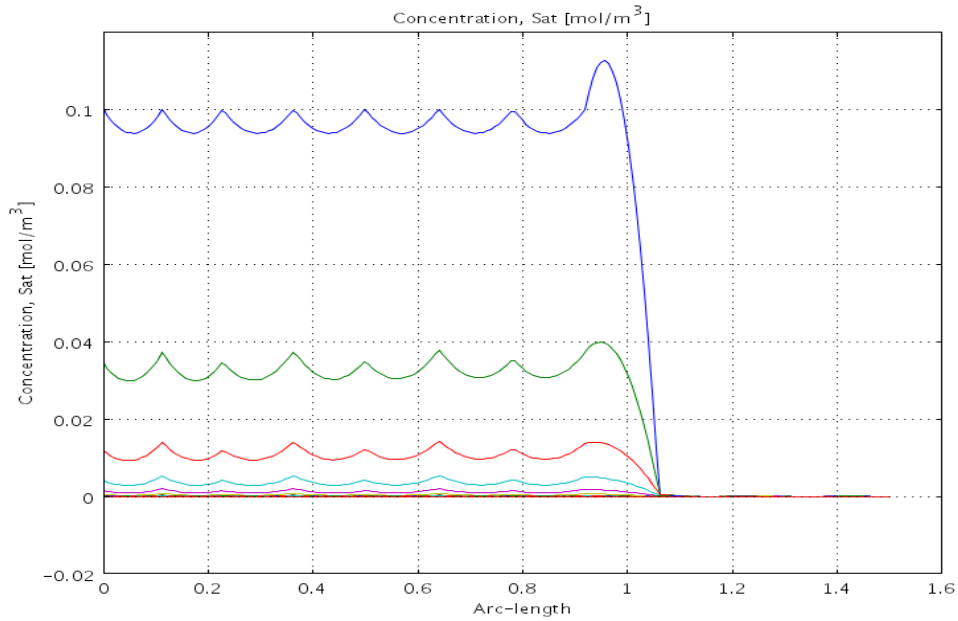


Figure 14 : Saturation pour $K = 1e-9$ entre $x = 0$ et $x = 1$

Sur cette figure, nous observons que la saturation diminue dans cette strate. Profil selon l'axe x de la concentration pour x variant entre 0 et 10.

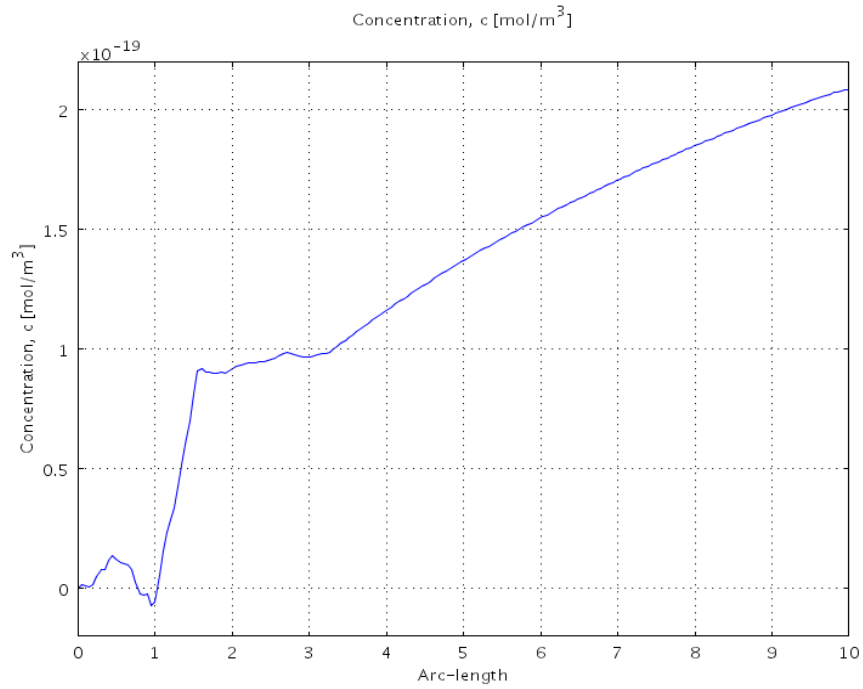


Figure 15 : Saturation pour $K = 1e-9$ entre $x = 0$ et $x = 10$

La diffusion de la concentration est visible sur cette figure. Le front se déplace rapidement vers les x croissants.

Les trois figures suivantes représentent les profils de concentration en y pour $x = 1$, $x = 3$ et $x = 7$, tracée à partir de la couche du bas.

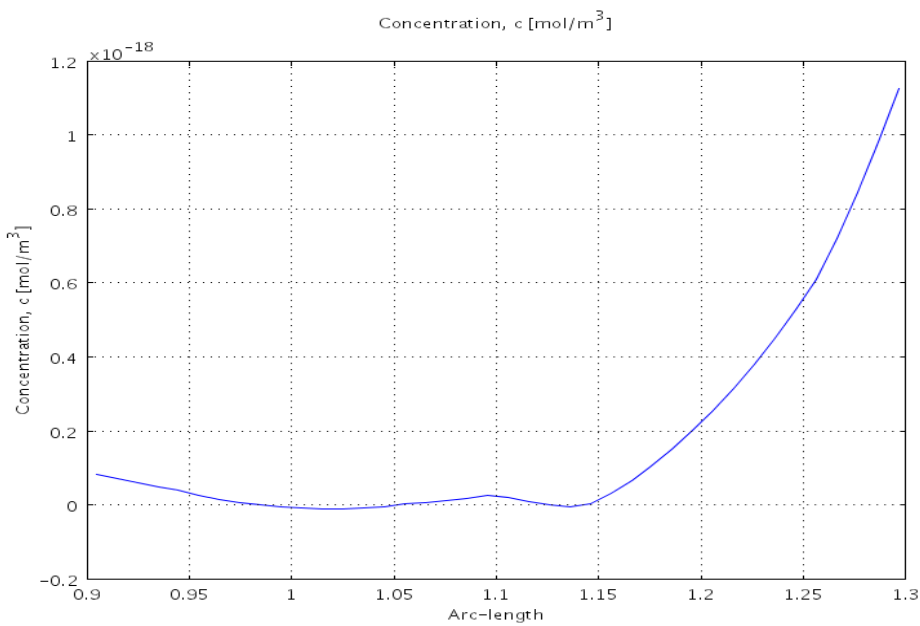


Figure 16 : Profil de concentration pour $K = 1e-9$ sur $x = 1$

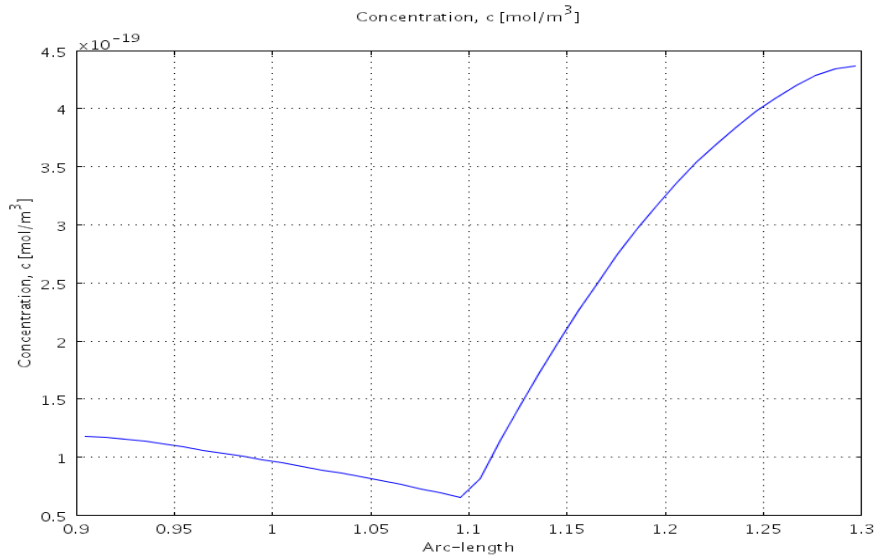


Figure 17 : Profil de concentration pour $K = 1e-9$ sur $x = 3$

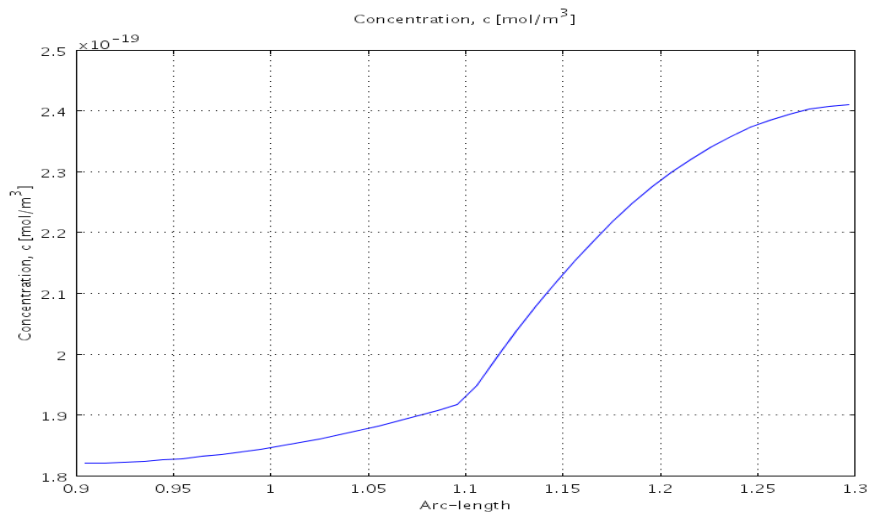


Figure 18 : Profil de concentration pour $K = 1e-9$ sur $x = 7$

On observe bien la diffusion de la concentration du polluant vers la strate supérieur selon l'axe des x croissants.

6.2.4.2. Perméabilité fixée à $1e-20$

Pour une couche très peu perméable ($K = 1e-20$), le profil de concentration est représenté ci-dessous :

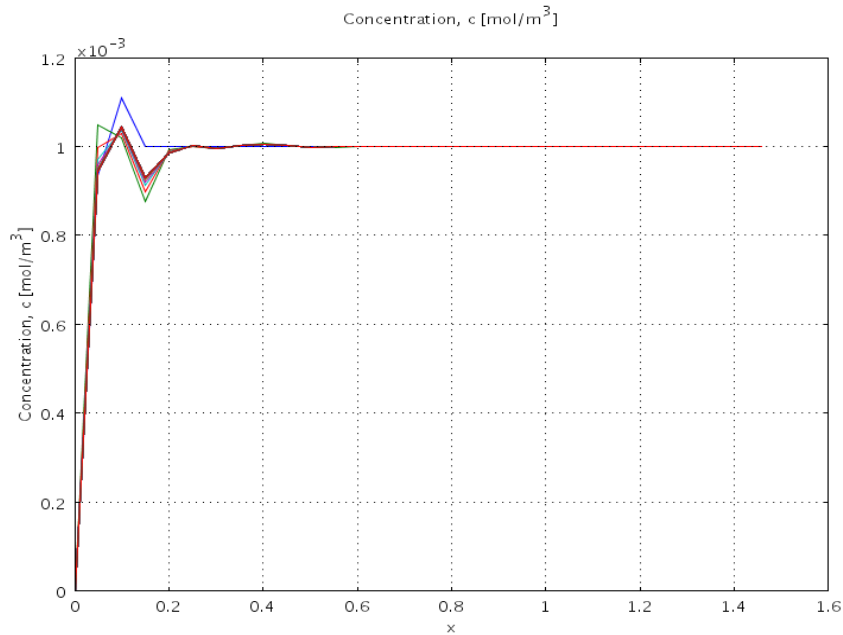


Figure 19 : Concentration pour K = 1e-20

Cette figure représente la diffusion très lente de la concentration du fait de la perméabilité importante de la couche qui retient le polluant de façon plus efficace. Les deux figures suivantes représentent la saturation pour une couche très peu perméable.

La figure ci-dessous est tracée pour x compris entre 0 et 1 pour représenter le domaine d'entrée :

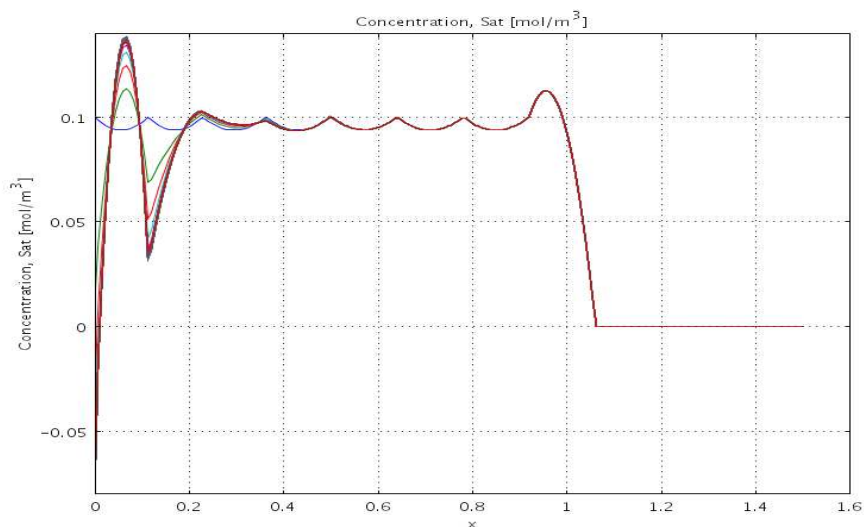


Figure 20 : Saturation pour K = 1e-20 entre x = 0 et x = 1

Nous observons que la saturation est maximale à l'entrée, conformément aux conditions initiales insérés en entrée.

La figure ci-dessous représente le front de saturation

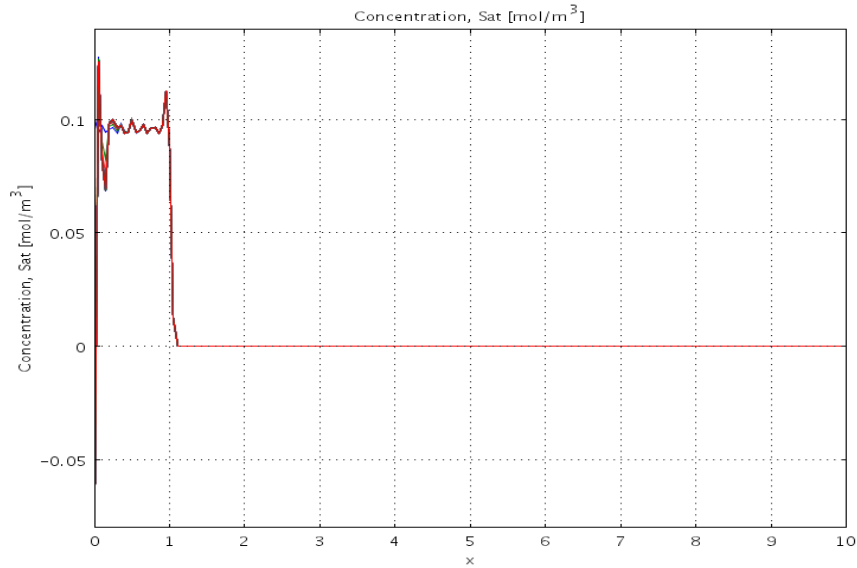


Figure 21 : Saturation pour $K = 1e-20$ entre $x = 0$ et $x = 10$

Le front de saturation avance lentement au cours du temps. Il se déplace vers les x croissants.

Suite à la baisse de la concentration, le front de saturation subit la même variation.

7. CONCLUSIONS

Cette étude a permis de mettre en évidence la diffusion d'un polluant dans un sol très ou peu perméable. Sous l'effet de la pression, nous avons constaté que le front de diffusion de la concentration était inégal selon la nature du sol. Par ailleurs la saturation du polluant maximale à l'entrée par suite d'un taux de concentration également maximal ($C = C_{eq} = 0,001$) se diffuse rapidement pour un sol perméable. Le coefficient de diffusion initialement fixé à $D_0 = 1e-9$ participe activement à la vitesse caractéristique de déplacement (vitesse de désaturation). Pour un sol très peu perméable, la diffusion de la concentration est très lente le long de l'axe des x . En conséquence la saturation se déplace très peu rapidement.

La vitesse de filtration dans le milieu poreux, proportionnel à la perméabilité K mais aussi au gradient de la pression, possède un front d'onde qui suit la capacité du sol à la rétention.

La dissolution du polluant aurait pu être étudiée pour définir l'influence de ce paramètre sur la propagation du front de saturation dans un NAPL. La concentration serait moins élevée pour une abscisse donnée, ceci étant due à l'interaction avec la nature du sol.

8. ANNEXE

Fichier des variables utilisées :

Soi1	.1	saturation initiale strate 1
Soi2	.2	saturation initiale strate 2
k1	1000e-12	permeabilite strate 1
k2	0.002*k1	permeabilite strate 2
D0	1e-9	coeff diffusion mol.
e01	.38	porosite strate 1
e02	.3	porosite strate 1
Ceq	.001	fraction mass equilibre
alp01	.0005	constante coeff echange strate 1
dtmax	.5/alp01	
pe	1e5	pression entree
ro	1200	masse vol. NAPL
rw	1000	masse vol. eau
tau1	2	tortuosite strate 1
tau2	2	tortuosite strate 2
alp02	.0005	constante coeff echange strate 2
al1	.1	dispersivite long. strate 1
at1	al1/10	dispersivite transv. strate 1
al2	.1	dispersivite long. strate 2
at2	al2/10	dispersivite transv. strate 2
mu	10 ⁽⁻³⁾	