

# HTRA Partie 2 : Modélisation de la dilution d'un polluant

22 janvier 2025

## 1 Présentation de l'expérience

Une expérience de dilution et de transport de polluant réalisée en laboratoire est présentée en Figure 1. Le domaine est constitué d'un ou deux milieux poreux (appelée expérience simple ou double couche) de largeur 50 cm et de longueur de 20 m. On introduit à l'instant  $t_0$  un volume de polluant dans sa forme concentrée non mobile (appelée NAPL dans le document) sur une zone de 1m en amont de l'écoulement. On impose ensuite un écoulement d'eau initialement non polluée à travers le milieu poreux. En traversant la zone polluée, le NAPL va se diluer dans l'eau induisant une concentration en polluant  $C$  que l'on mesure en sortie en fonction du temps sur une période de 300 heures (voir Figure 2). On dispose également pour le milieu à deux couches d'un profil en travers de concentration à la sortie du domaine pour  $t = 50$  h.

L'objectif du TD est de reproduire ces deux expériences numériquement sous COMSOL. Les deux milieux poreux  $\eta$  et  $\gamma$  ont été préalablement caractérisés lors de la partie 1 du TD HTRA (changement d'échelle). **On négligera dans cette partie la composante immobile pour le milieu  $\gamma$  et on considèrera la porosité comme étant entièrement mobile ( $\varepsilon_M = \varepsilon$ ).** À l'aide de ces propriétés et d'un modèle numérique d'expérience pré-construit, on renseignera les différentes propriétés et on pourra alors simuler l'expérience.

## 2 Modèle mathématiques du transport d'un polluant en milieux poreux

### 2.1 Définition des variables

On note  $S_{NAPL}$  la saturation en polluant, c'est à dire la fraction du volume de vide du milieu poreux occupé par le polluant dans sa forme concentrée. Ainsi on peut écrire que le volume de NAPL est égal à :

$$V_{NAPL} = \varepsilon S_{NAPL} V \quad (1)$$

avec  $V$  le volume considéré et  $\varepsilon$  la porosité. On peut également écrire :

$$S_{EAU} + S_{NAPL} = 1 \quad (2)$$

En traversant la zone polluée, l'eau est mise en contact avec la forme concentrée du polluant qui se dilue. La quantité de polluant dilué dans l'eau est donnée par la concentration  $C$  (rigoureusement,

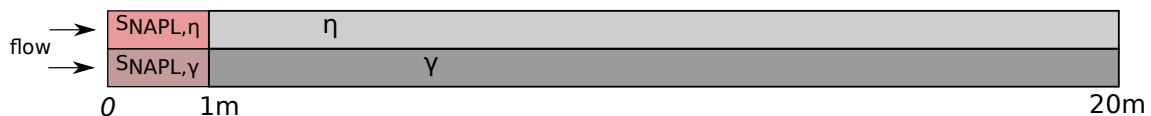


FIGURE 1 – Schéma de principe de l'expérience

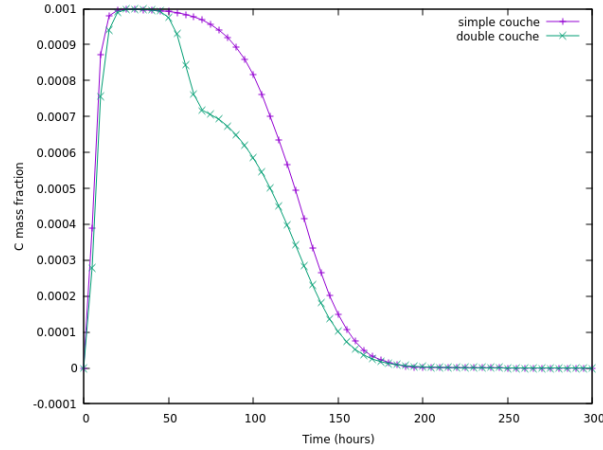


FIGURE 2 – Concentration en fonction du temps

c'est une fraction massique) :

$$C = \frac{\rho_{NAPL, dilu\acute{e}}}{\rho_w} \quad (3)$$

On cherche donc à résoudre un problème à 3 inconnues/équations :

1. la pression  $P$ ,
2. la saturation en polluant concentré  $S_{NAPL}$ ,
3. la concentration en polluant dilué dans l'eau  $C$ .

## 2.2 Modèle mathématique

La dissolution d'un polluant (nommé NAPL) partiellement miscible, peut être décrite par le système de trois équations suivant :

1. L'équation de conservation de la phase liquide en milieu poreux (loi de Darcy) :

$$\nabla \cdot \mathbf{U}_w = 0 \quad (4)$$

où  $\mathbf{U}_w$  est la vitesse de Darcy (équation de conservation de la quantité de mouvement) :

$$\mathbf{U}_w = -\frac{\mathbf{K}_w}{\mu_w} (\nabla P - \rho_w \mathbf{g}) \quad (5)$$

avec  $\mathbf{K}_w$  la perméabilité,  $\mu_w$  la viscosité dynamique et  $\rho_w$  la masse volumique. On négligera dans l'ensemble des exercices l'influence de la gravité. L'équation résolue est donc :

$$\nabla \cdot \left( -\frac{\mathbf{K}_w}{\mu_w} \nabla P \right) = 0 \quad (6)$$

2. Le bilan de masse du polluant sous forme diluée, dont la fraction massique dans la phase eau notée  $C$  est donnée par :

$$\varepsilon (1 - S_{NAPL}) \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}_w C) = \nabla \cdot (\varepsilon (1 - S_{NAPL}) D^* \nabla C) + h (C_{eq} - C) \quad (7)$$

avec  $\varepsilon$  est la porosité,  $S_{NAPL}$  la saturation en NAPL,  $C_{eq}$  la solubilité dans l'eau du constituant polluant (la fraction massique maximale pouvant être atteinte),  $D^*$  le coefficient de dispersion

et  $h$  la vitesse de dilution. La vitesse de dilution  $h[s^{-1}]$  est prédéfinie pour l'ensemble du TD et dépend de la saturation en NAPL :

$$h = h_{NAPL} \times \frac{S_{NAPL}}{S_{init}} \quad (8)$$

avec  $h_{NAPL}$  la vitesse maximale de dilution et  $S_{init}$  la saturation initiale en polluant. Cette équation propose un modèle de dilution dont la vitesse décroît linéairement avec la saturation en polluant (physiquement, au cours de la dilution, la zone de contact entre l'eau et le polluant se réduit). On imposera une condition de Dirichlet en entrée de domaine ( $C_{inlet} = 0$ ) avec une condition de convection libre en sortie.

3. Le bilan de masse pour la phase NAPL sous forme concentrée donc la saturation  $S_{NAPL}$  est donnée par :

$$\frac{\partial \varepsilon \rho_{NAPL} S_{NAPL}}{\partial t} = -\rho_w h (C_{eq} - C) \quad (9)$$

où  $\rho_w$  et  $\rho_{NAPL}$  sont les masses volumiques de l'eau et de la phase NAPL. On pourra laisser les conditions limites par défaut pour cette équation car il n'y a pas d'advection ou de diffusion de  $S_{NAPL}$ .

## 2.3 Paramètres

### 2.3.1 Paramètres fournis

- longueur de la zone source :  $L = 1$  m , Largeur :  $l = 0.5$  m (par couche)
- longueur totale :  $L_T = 20$  m
- Gradient hydraulique de la nappe modélisée 0.1% (ou 0.1  $cm/m$ )
- masse volumique du polluant :  $\rho_{NAPL} = 1200$  kg/m<sup>3</sup>
- solubilité du polluant dans l'eau :  $C_{eq} = 0.001$  kg/kg d'eau (en négligeant l'influence du polluant sur la densité de l'eau)
- la diffusion moléculaire :  $D_0 = 2.10^{-9}$  m<sup>2</sup>.s<sup>-1</sup>
- coefficient maximal de dilution :  $h_{NAPL} = 0.005$  s<sup>-1</sup>

### 2.3.2 Paramètres à calculer

- Saturations initiales en polluant concentrée :  $S_{NAPL,init,\eta}$  et  $S_{NAPL,init,\gamma}$
- Porosités :  $\varepsilon_\eta$  et  $\varepsilon_\gamma$
- Perméabilité :  $K_\eta$  et  $K_\gamma$
- Coefficients de dispersion pour les deux milieux.

### 3 Modélisation de l’expérience “simple couche”

On modélise dans un premier temps l’expérience à une couche (constituée du milieu  $\eta$ ) en utilisant le fichier `experience_simple.mph`. Ce fichier comprend le modèle numérique complet pré-construit sans les valeurs de paramètres qu’il est nécessaire de renseigner. Les résultats expérimentaux sont fournis au format texte.

#### 3.1 Paramétrisation du fichier COMSOL et modélisation de l’écoulement

A partir du gradient hydraulique fourni, calculer la pression à imposer en entrée de notre expérience. Renseigner dans le fichier COMSOL l’ensemble des paramètres fournis dans ce document.

#### 3.2 Estimation manuelle de la saturation initiale de NAPL

A l’aide des informations extraites ou reconstruites précédemment, effectuer une modélisation simple de l’expérience (en utilisant un coefficient de dispersion estimé via la courbe de dispersion de la partie 1 “Changement d’échelle” du TD et de la vitesse de la nappe). Dans un premier temps, on pourra essayer d’estimer par tâtonnement la saturation initiale en NAPL présente dans le domaine.

#### 3.3 Calcul de la saturation initiale de NAPL

Dans un second temps, en utilisant les courbes de mesures de concentration en sortie et la vitesse d’écoulement, il est possible de calculer la quantité totale de NAPL diluée au cours de l’expérience. A l’aide des autres informations du milieu poreux calculées dans la partie précédente, on peut remonter à la saturation initiale  $S_{NAPL,\eta}$ .

#### 3.4 Simulation de l’expérience

Le profil de concentration au cours du temps sera confronté aux résultats de référence en utilisant la saturation initiale  $S_{NAPL,\eta}$  calculée. En considérant que le seuil de toxicité en NAPL dilué est de 1 mg/L et que le seuil de mesure détectable est de 1  $\mu\text{g}/\text{L}$ , on pourra mesurer le temps nécessaire pour que l’eau en sortie passe en dessous des seuils.

#### 3.5 Analyse de sensibilité

On effectuera une étude paramétrique sur les propriétés estimées par le changement d’échelle (perméabilité et dispersion) afin d’évaluer leur sensibilité sur les résultats, notamment sur les temps caractéristiques liés au seuils de toxicité ou détection. La sensibilité des résultats pourra être menée à différentes échelles temporelles : sur l’ensemble de l’évènement, au temps court (arrivée du front de pollution) ou au temps long pour les franchissements de seuil.

## 4 Modélisation de l'expérience à double couche

Pour modéliser l'expérience à double couche, on négligera l'approche double milieu (avec porosité immobile  $\varepsilon_{im}$  et coefficient d'échange  $\alpha$ ) développée précédemment pour simplifier la modélisation de l'expérience. Seules la porosité globale  $\varepsilon$ , la perméabilité du milieu poreux et le coefficient de dispersion seront par conséquent renseignés dans le modèle. Dans cette partie, le fichier pré-construit vous est fourni, **experience\_double.mph**, avec toutefois la paramétrisation non renseignée. La saturation initiale de la zone  $\eta$  est identique à l'expérience à simple couche.

### 4.1 Calcul de la saturation initiale de NAPL

A partir de la courbe de mesure de concentration en sortie, il est possible de calculer la quantité totale de NAPL diluée au cours de l'expérience. A l'aide des autres informations du milieu poreux calculé dans les parties précédentes, on peut remonter à la saturation initiale du milieu hétérogène  $S_{NAPL,\gamma}$  (la quantité de NAPL dans la première couche étant déjà connue). Attention, on mesure une concentration moyenne en sortie commune aux deux milieux qui s'écoulent à des vitesses différentes (il faut donc considérer le débit global).

### 4.2 Simulation et confrontation aux résultats expérimentaux

En remplissant les propriétés du fichier **experience\_double.mph**, à l'aide des informations extraites ou reconstruites précédemment, effectuer une modélisation de l'expérience (en utilisant un coefficient de dispersion estimé via la courbe de dispersion et la vitesse de la nappe pour chaque couche). On confrontera dans un premier les résultats de simulations aux concentrations moyennes au cours du temps (fichier **result\_double.txt**). Une mesure du profil en travers de concentration en sortie à  $t = 50$  h a été également été mesuré (voir fichier **results\_double\_t50h.txt**) et pourra être comparé à vos résultats de simulation. Enfin, on pourra mesurer les temps caractéristiques liés aux seuils définis précédemment pour chaque couche.

#### 4.2.1 Analyse de sensibilité sur les paramètres

Une analyse de sensibilité aux paramètres (perméabilité et dispersion) sera ensuite effectuée, pour le suivi temporel de concentration moyenne en sortie ainsi que pour le profil de concentration à  $t = 50$  h. On cherchera à connaître l'effet de chaque paramètres sur les signaux de sortie (effet de la dispersion, effet de la vitesse d'écoulement). La sensibilité des paramètres pourra être observée également en terme de temps caractéristiques de franchissement de seuils.