



Les Journées d'information du Cedre

La modélisation de la dispersion des produits chimiques

Paris, 27 mars 2013

Laurent Aprin

Institut des Sciences des Risques, LGEI, Ecole des Mines d'Alès



1. Introduction

- *Contexte*
- *Description phénoménologique*

2. Les mécanismes de dispersion en milieu aquatique

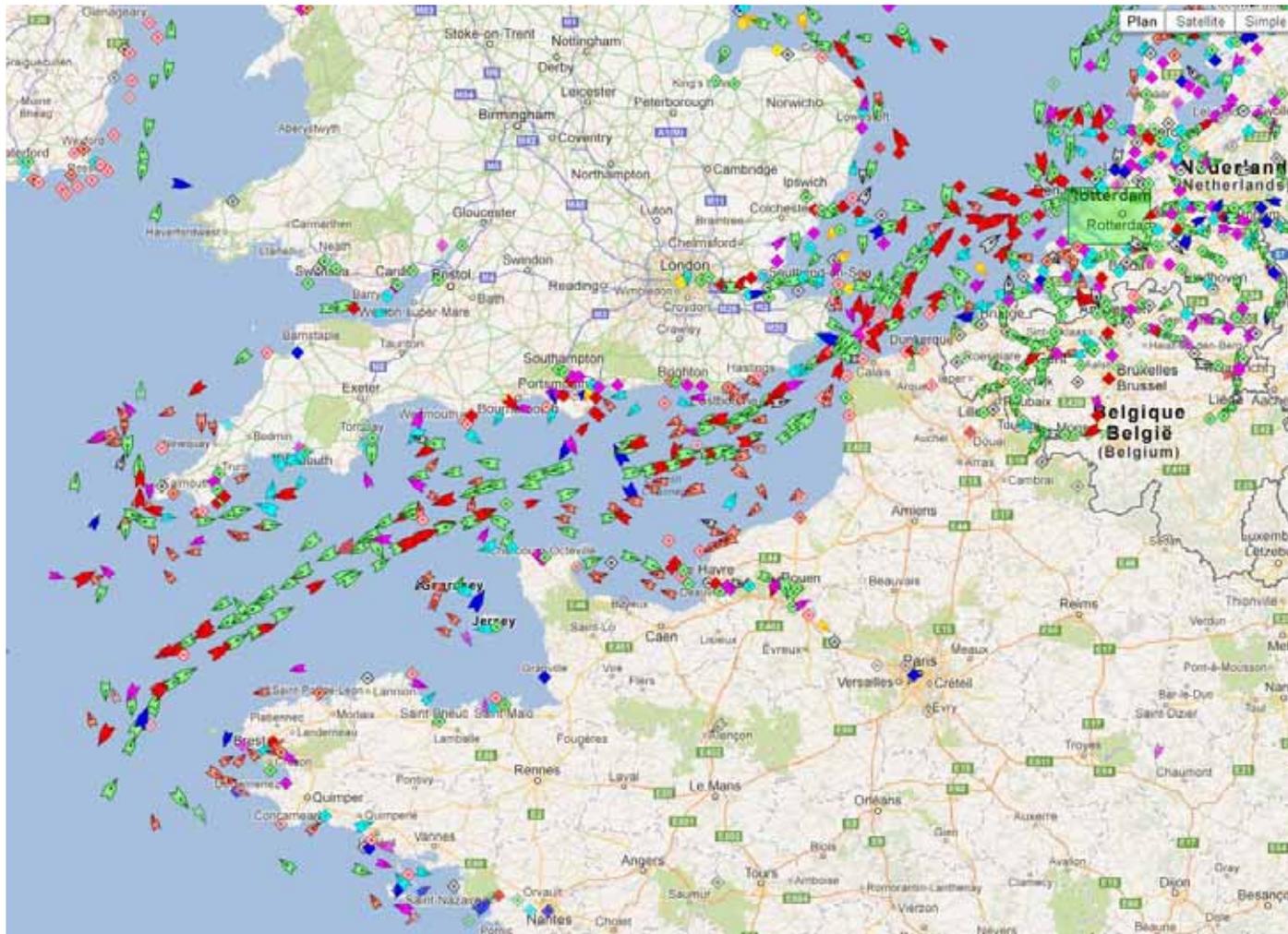
3. Les stratégies de modélisation

- *Rejet de produit en surface*
- *Rejet de produit en profondeur*

4. Exemple de modélisation



Contexte



MarineTraffic.com



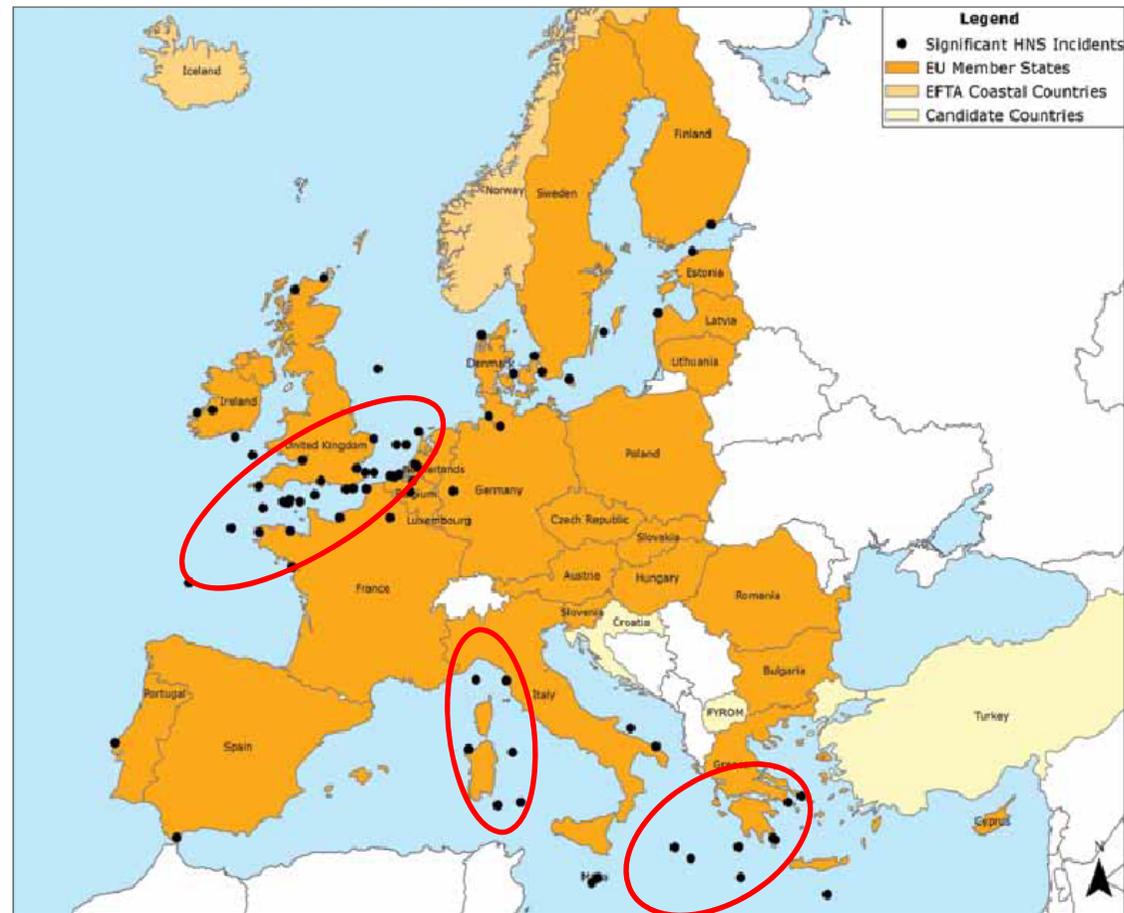
Contexte



Accidents maritimes significatifs impliquant des Substances Nocives et Potentiellement Dangereuses (SNDP)

Hazard and Noxious Substances (HNS)

SIGNIFICANT HNS INCIDENTS (1978-2010)





Contexte



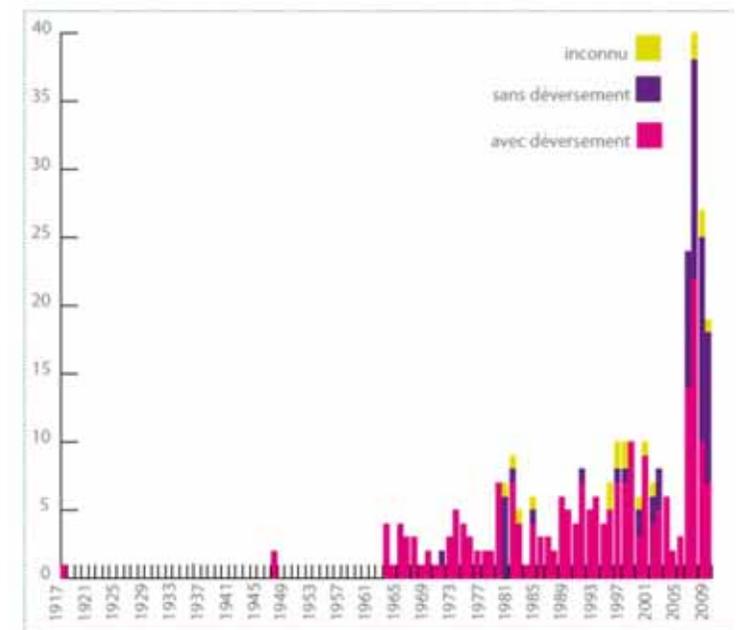
Evolution des accidents maritimes impliquant des SNPD

▶ Augmentation constante du transport des produits chimiques par voies maritimes

▶ Multiplication des échanges par 3.5 en 20 ans

▶ Grande diversité des produits chimiques

▶ Comportements physico-chimiques différents en milieu marin → Code SEBC



Number of accidents involving HNS

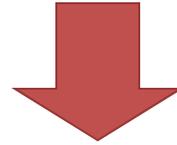
Augmentation de la probabilité d'accidents ayant des conséquences graves



Contexte



Grande variété des produits transportés



Différentes stratégies d'intervention



Caractéristiques du polluant

- ▶ Pétroles
- ▶ Produits chimiques
- ▶ Produits agroalimentaires

Caractéristiques des zones polluées

- ▶ Mer, océan, estuaires...
- ▶ Parc marins, zones protégées
- ▶ Zone d'aquacultures, de pêches ou de tourisms⁶



Exemple d'accident

levoli Sun (2000)

- ▶ Quantités transportées
 - ▶ Styrene :4000 T
 - ▶ Methyl Ethyl Ketone (MEK) :1000 T
 - ▶ Iso Propylique Alcohol (IPA) : 1000 T

- ▶ Quantités rejetées:
 - ▶ Styrene :400 T
 - ▶ Methyl Ethyl Ketone :100 T
 - ▶ Iso Propylique Alcohol : 1000 T



Entrée d'eau dans le compartiment du propulseur d'étrave



Contexte



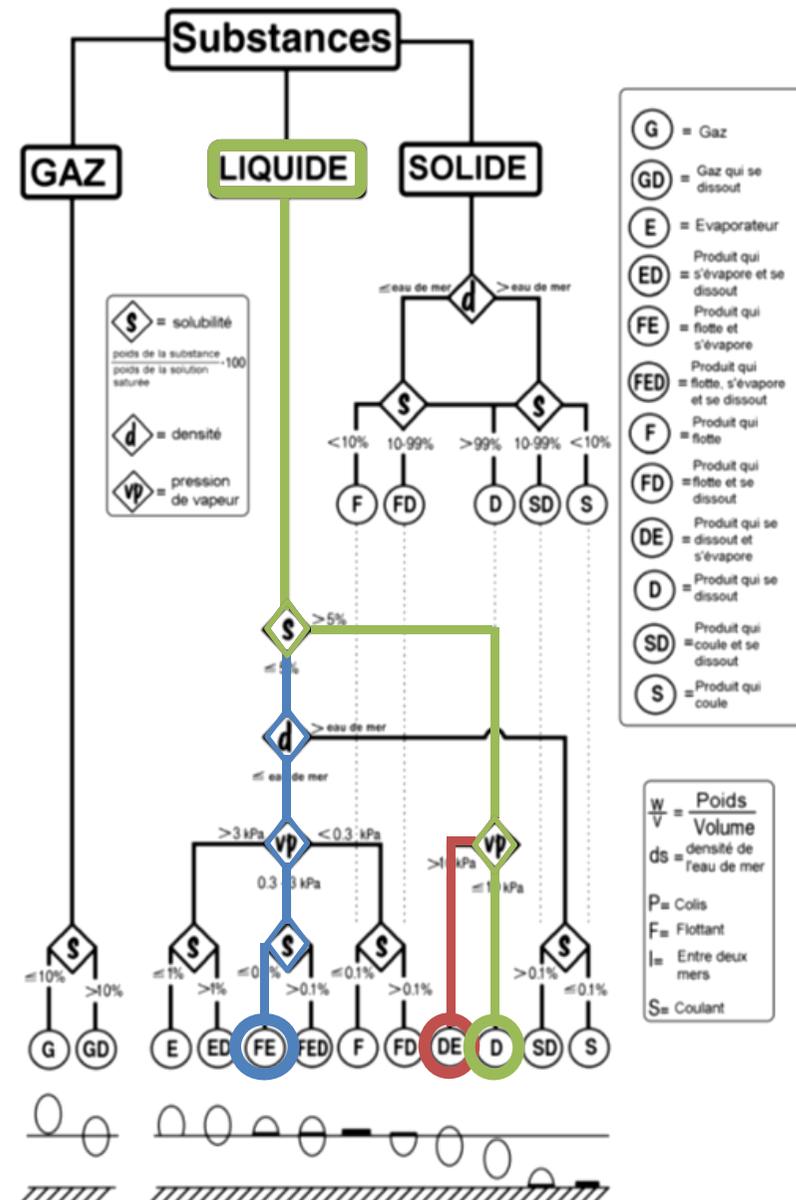
Exemple d'accident

levoli Sun (2000)

	Phase	S [%]	d [kg/m ³]	Vp [kPa]	
• Styrene	L	0,03	906	0,667	FE
• MEC	L	26,3	805	10,33	DE
• IPA	L	79	786	4,1	D



- Formation d'un nuage toxique ?
- Risque de feu ou d'explosion ?





Description phénoménologique



Conditions de la classification

- ▶ Produit pur
- ▶ Petite quantité
- ▶ 20°C
- ▶ Pression atmosphérique
- ▶ Eau douce

Conditions réelles

- ▶ Pureté non garantie
- ▶ Plusieurs tonnes
- ▶ 4°C
- ▶ 10 bar
- ▶ Eau de mer

Limites

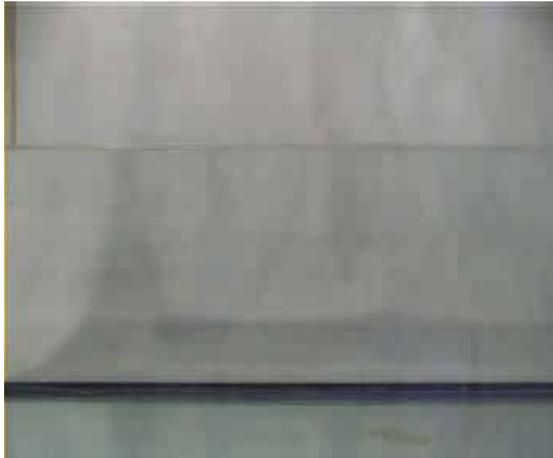
- ▶ Conditions non représentatives
- ▶ Présence possible de différents produits
 - ▶ Modification de la solubilisation
 - ▶ Réaction chimique
- ▶ Aucune prise en compte de la dynamique
 - ▶ Solubilisation
 - ▶ Compétitions des phénomènes



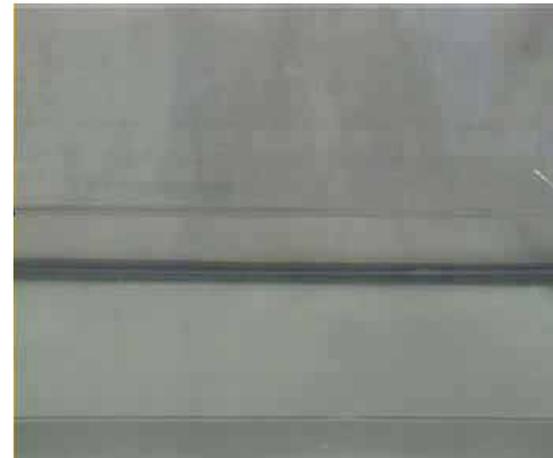
Description phénoménologique



Exemple de comportements



Coulant (ex: Toluene Diisocyanate)



Evaporant (ex : Styrene)



Flottant (ex :Dodecylbenzene)



Soluble (ex : butanol)



Les mécanismes de dispersion



Rejets de polluants en surface

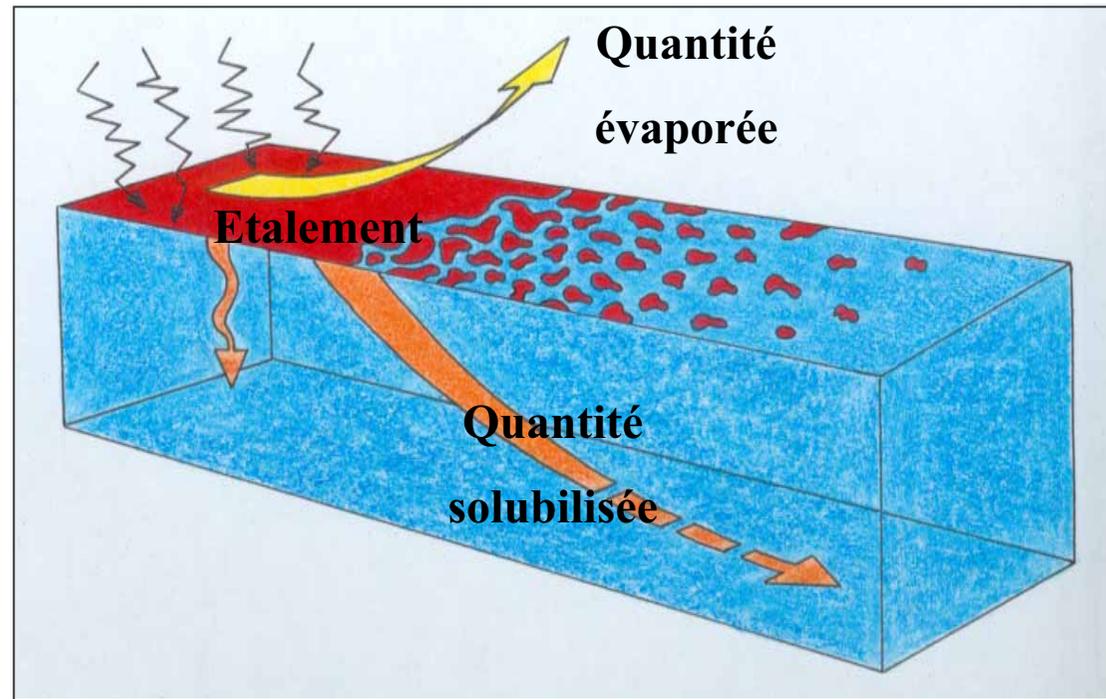
1. Détermination du terme source (quantité rejetée ou débit)-> Bernoulli
2. Bilan de matière en fonction du temps

Quelle surface de produit

Quelle quantité évaporée?

Quelle quantité solubilisée ?

Combien de temps ?

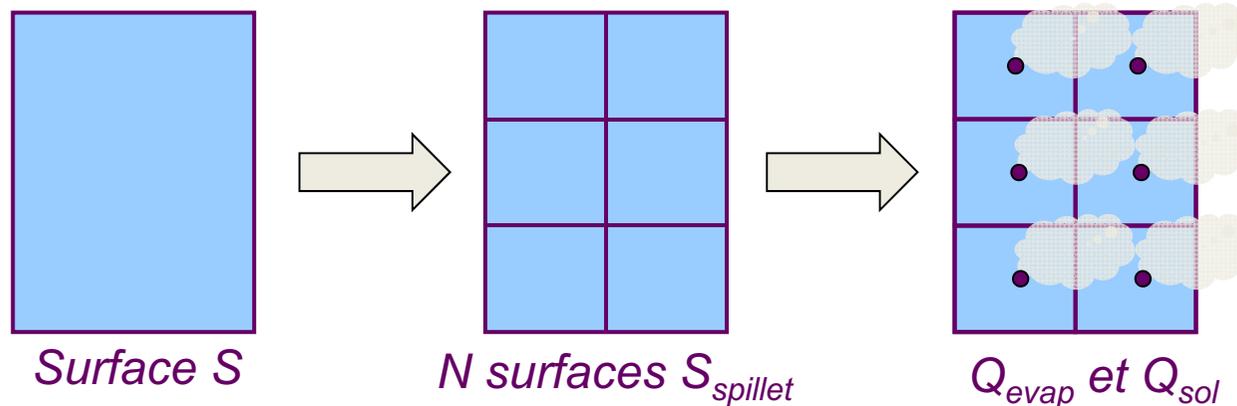




Stratégie de Modélisation

Division de la nappe en éléments unitaires (spillet) pour représenter la surface totale de la nappe

1. Calcul de l'évolution de chaque spillet au cours du temps (Schéma de discrétisation de type Runge-Kutta)
 - Taux d'étalement de chaque spillet (*Nihoul, 1983*)
 - Quantité évaporée (*Mackay et Matsugu, 1973*)
 - Quantité solubilisé (*Hayduk et Laudie, 1974*)
2. Bilan de matière pour chaque spillet





Modélisation



Stratégie de Modélisation

Division de la nappe en éléments unitaires (spillet) pour représenter la surface totale de la nappe

1. Calcul de l'évolution de chaque spillet au cours du temps (Schéma de discrétisation de type Runge-Kutta)
 - Taux d'étalement de chaque spillet (*Nihoul, 1983*)
 - Quantité évaporée (*Mackay et Matsugu, 1973*)
 - Quantité solubilisé (*Hayduk et Laudie, 1974*)
2. Bilan de matière pour chaque spillet
3. Couplage avec les prévisions hydrodynamiques
 1. Déplacement des spilletts à chaque pas de temps





Les mécanismes de dispersion



Rejet de polluants en profondeur

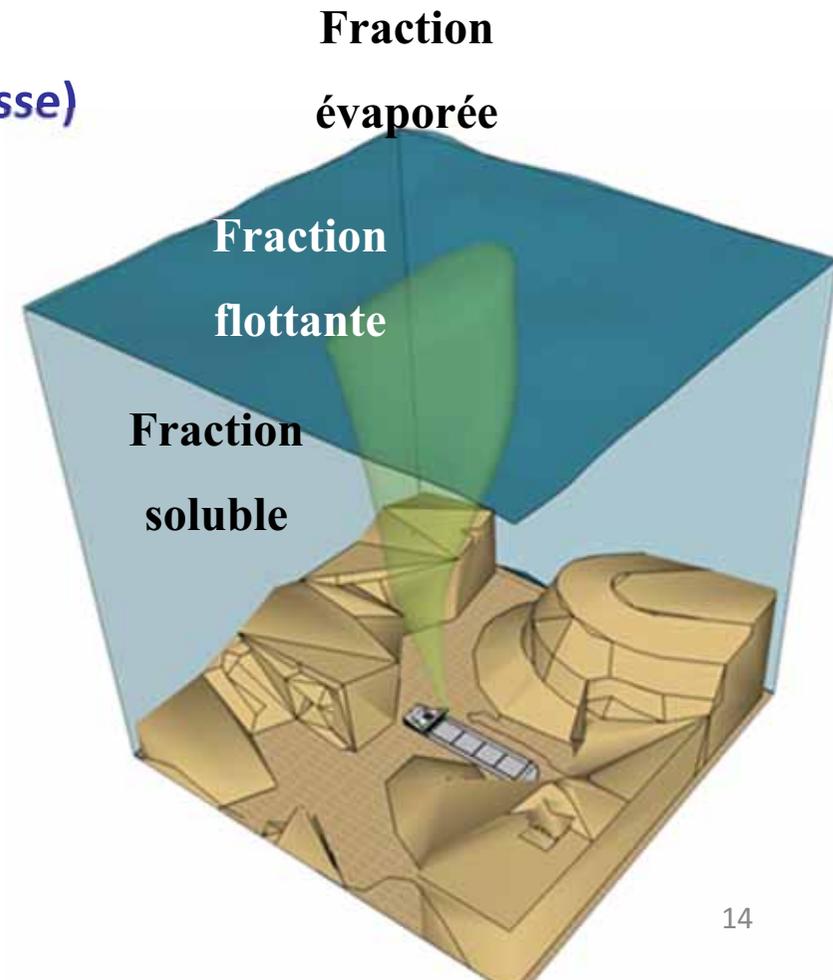
1. Détermination du terme source (quantité rejetée ou débit)-> Bernoulli
2. Mode de dispersion du produit
3. Hydrodynamique de remontée (vitesse)
4. Transfert de matière (solubilisation)

Apparition du produit en surface

Quel volume en surface ?

Quand ?

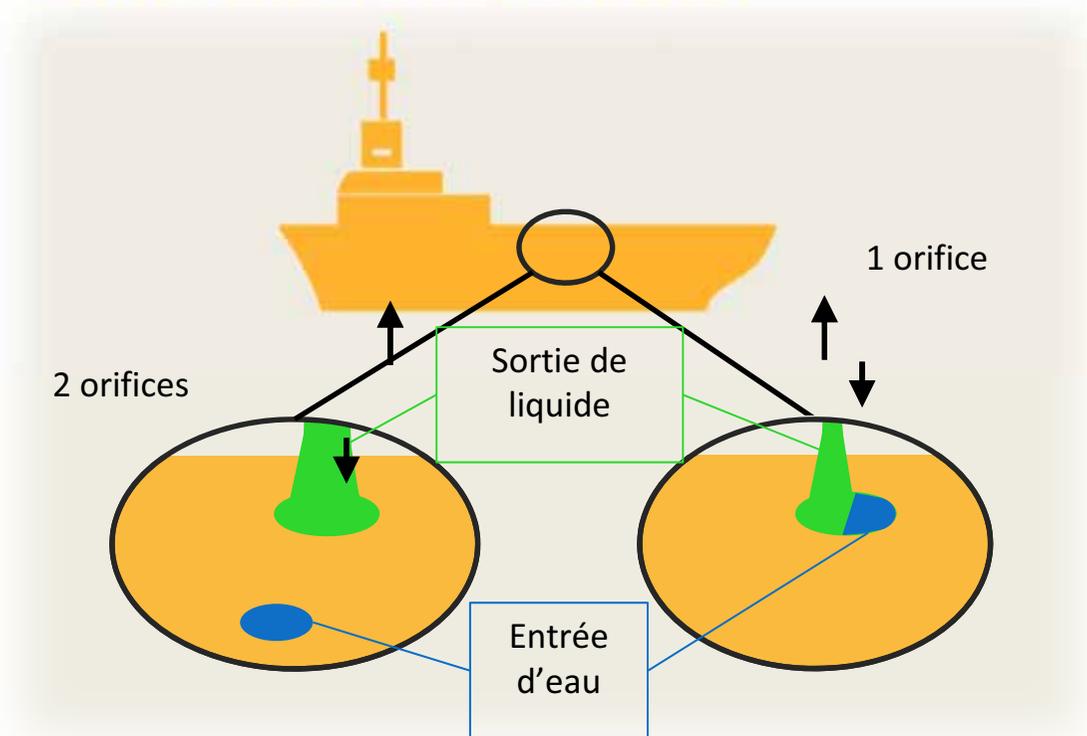
Combien de temps ?





Modélisation du débit à la brèche

1. Deux comportements hydrodynamiques



2. Modélisation par un bilan énergétique local (Bernoulli)



Modélisation



Modélisation du débit à la brèche

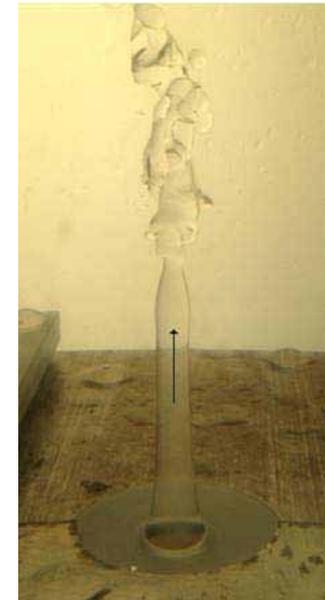
Débit Q constant,
Section Σ linéaire

Écoulement diphasique à
l'orifice de sortie



Débit Q linéaire,
Section Σ constante

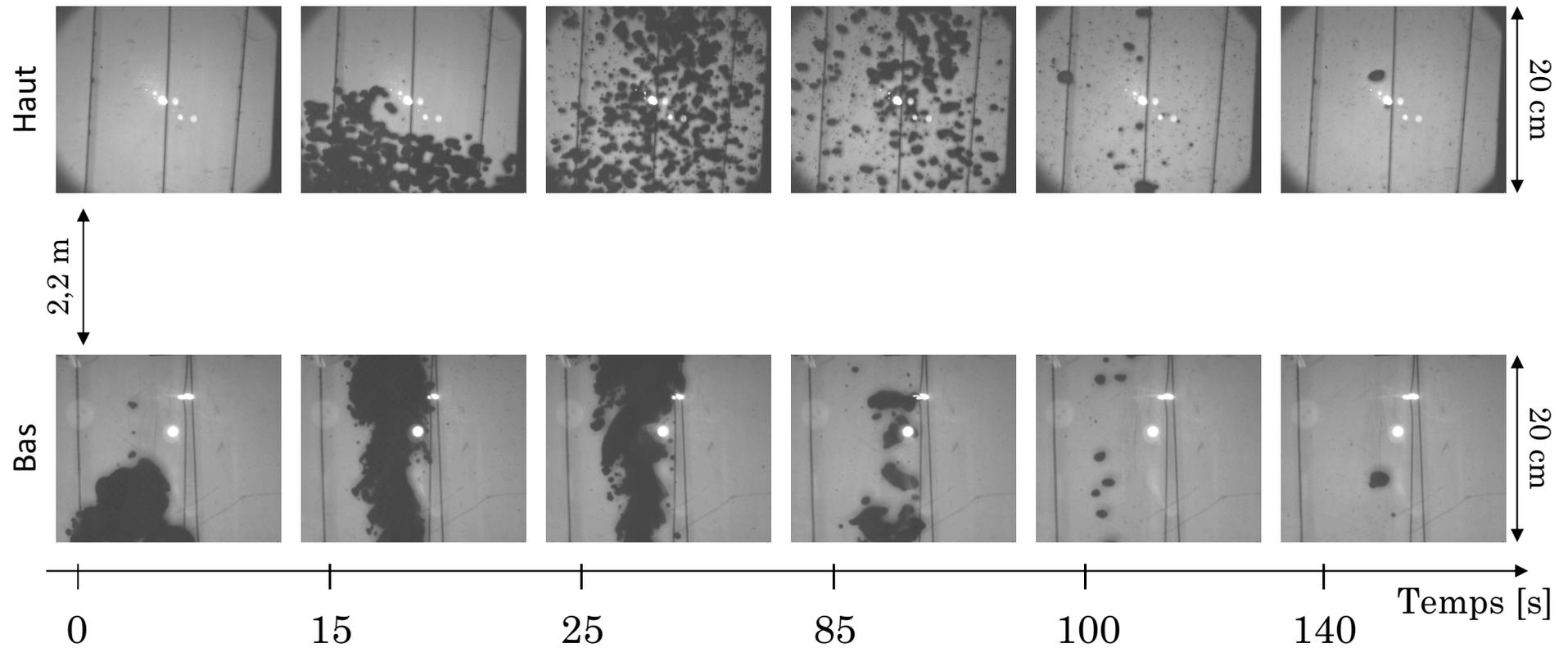
Écoulement monophasique à
l'orifice de sortie





Modélisation de la fragmentation du jet

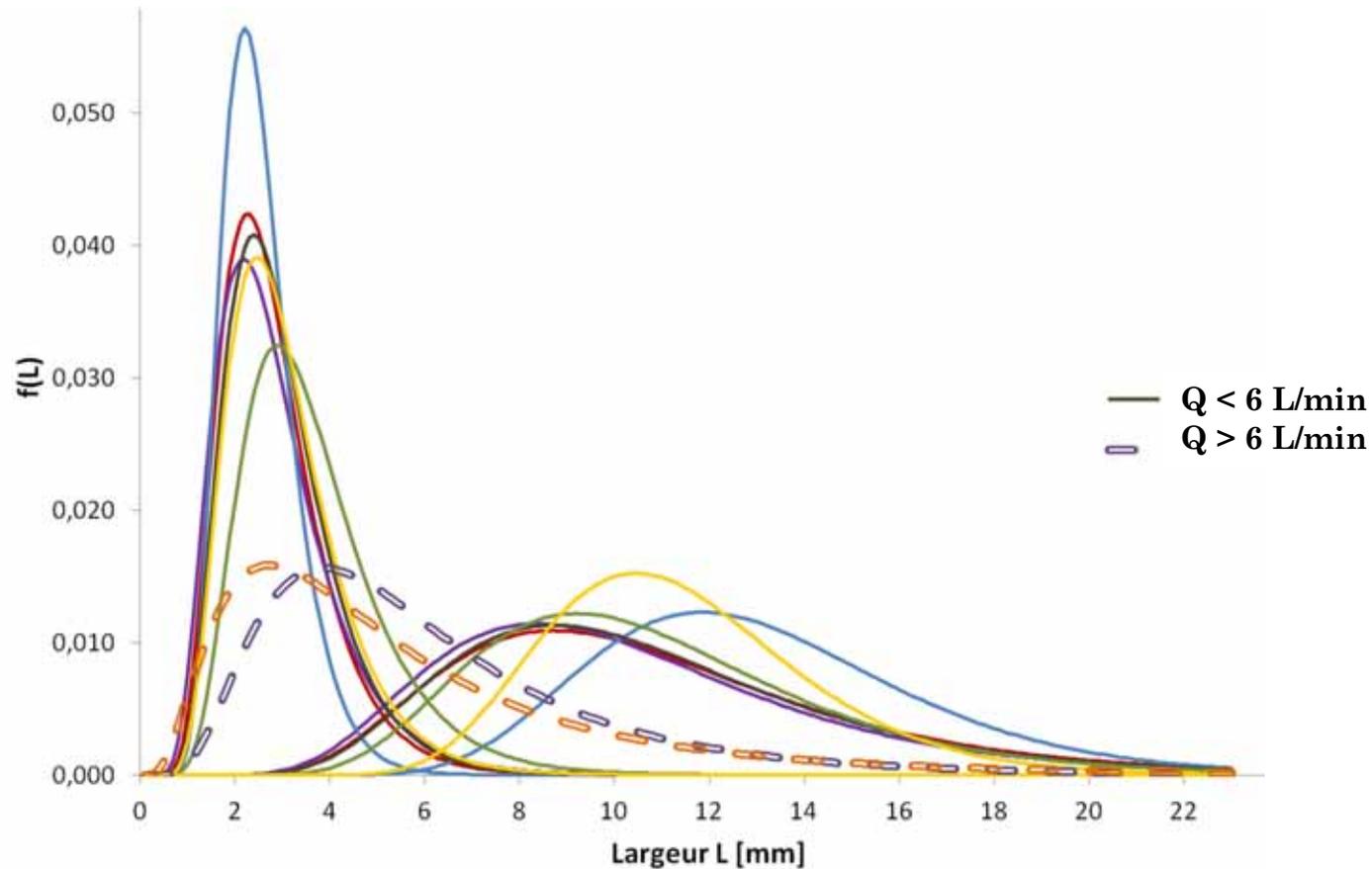
Evaluation de la distribution granulométrique





Modélisation de la fragmentation du jet

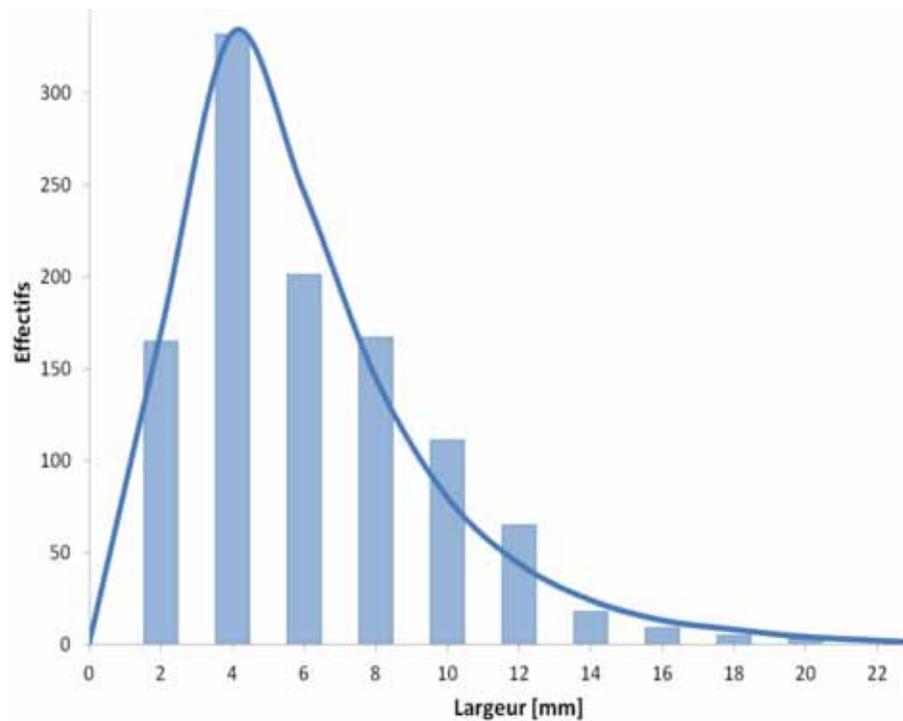
- ▶ 2 types de distributions granulométriques
- ▶ Diamètre maximal des gouttes de 22 mm



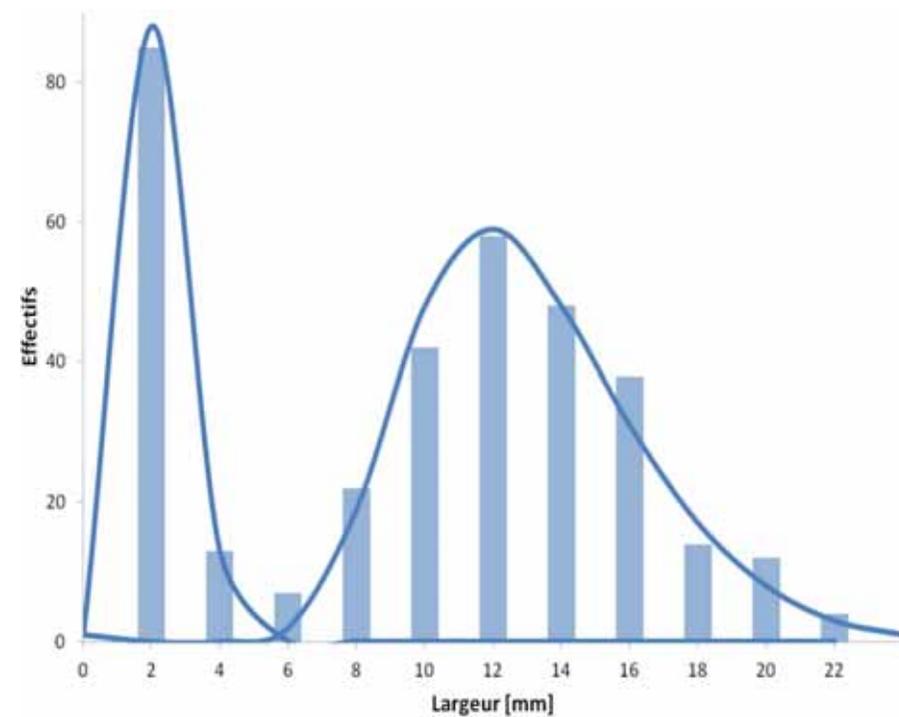


Modélisation de la fragmentation du jet

- ▶ Représentation des distributions granulométrique par des log-normale
 1. Rejet monophasique : distribution mono-modale
 2. Rejet diphasique : distribution bi-modale



Rejet monophasique

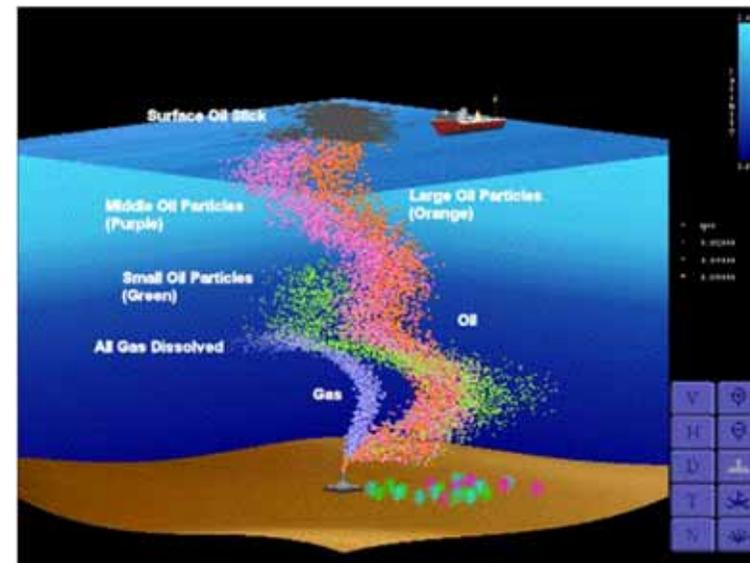
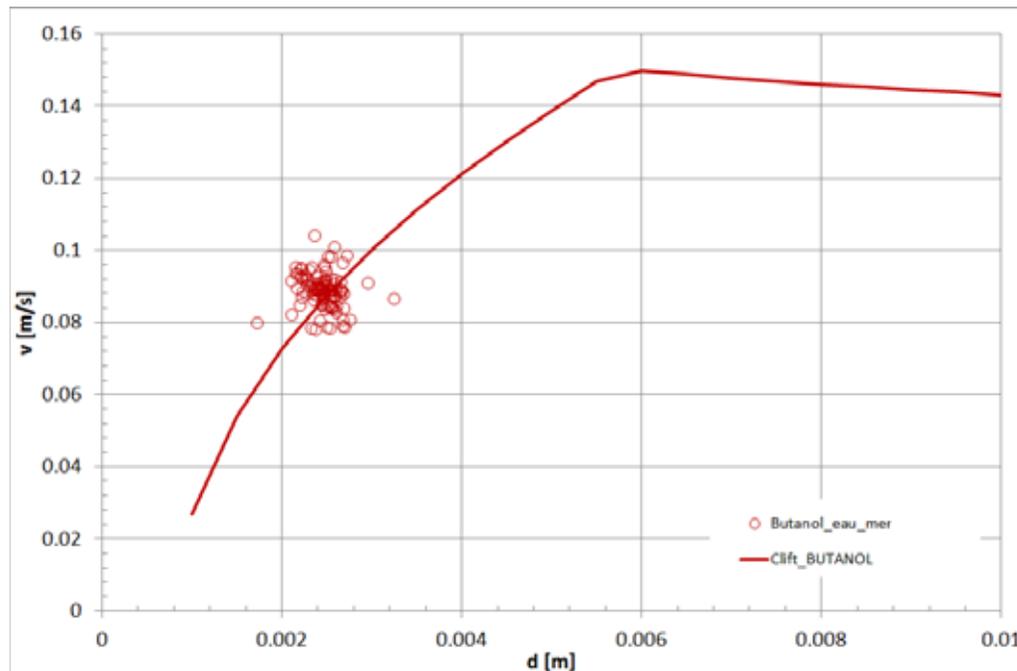


Rejet diphasique



Modélisation de l'hydrodynamique des gouttes

1. Modélisation de la vitesse de remontée des gouttes avec la corrélation de Clift (1978)
2. Couplage avec les prévisions hydrodynamiques pour prendre en compte le déplacement du panache de bulles



CDOG model, Clarkson University

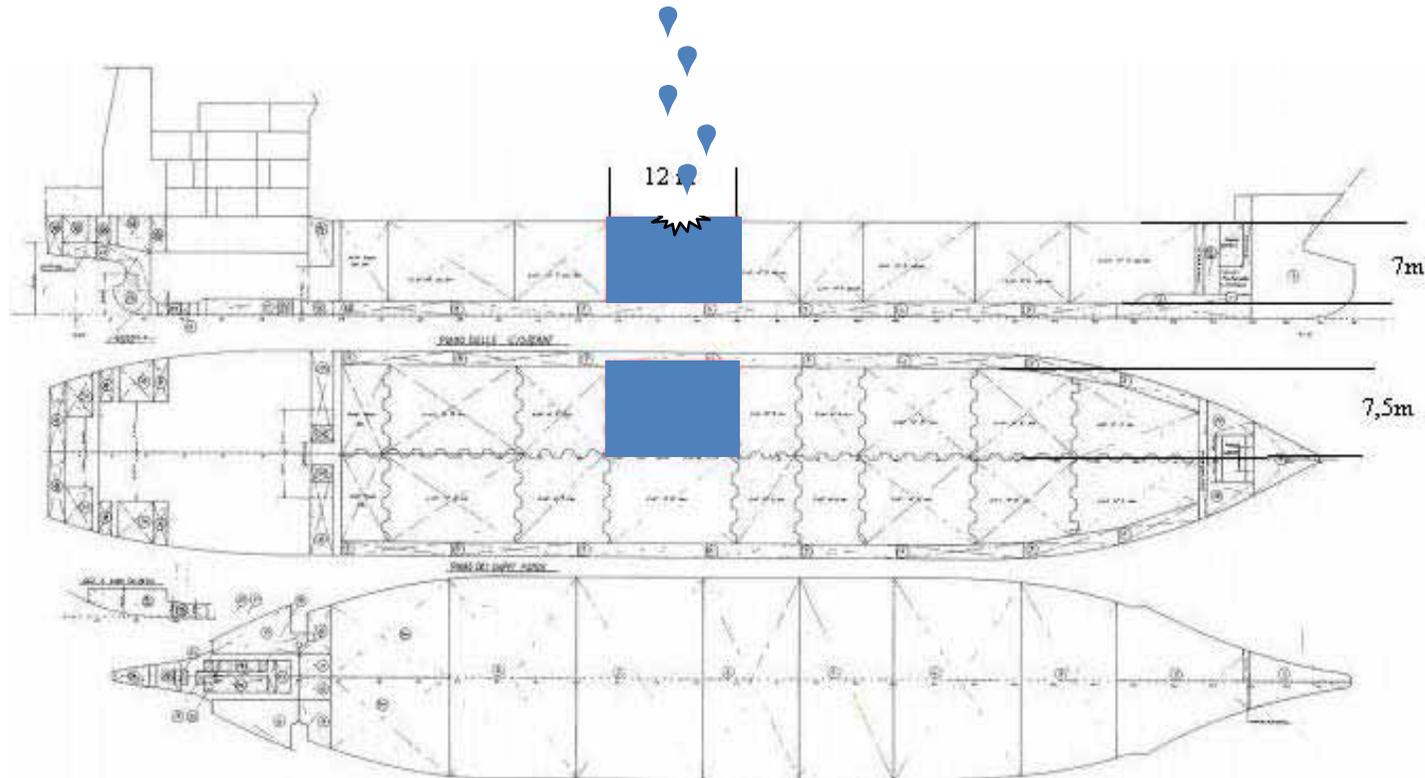


Exemple



Modélisation d'une fuite de butanol sur un chimiquier

1. Fuite d'une cuve de 600 m³
2. Brèche sur un piquage de 10cm de diamètre



Source: BEAMer

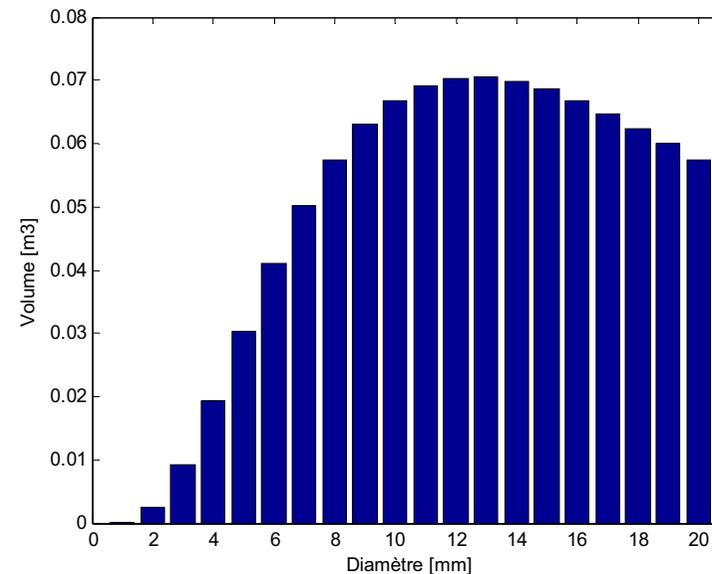
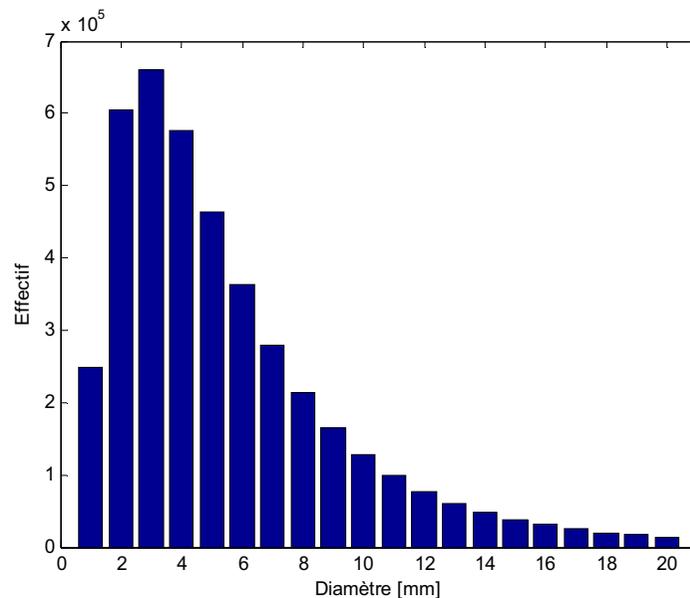


Exemple



Modélisation d'une fuite de butanol sur un chimiquier

1. Modélisation du débit de fuite : vidange en 1h44
2. Dispersion dans la colonne d'eau
 1. Nombre de gouttes par classe de diamètre pour 1 m³ de produit libéré
 2. Répartition du volume par classe pour 1 m³ de produit libéré





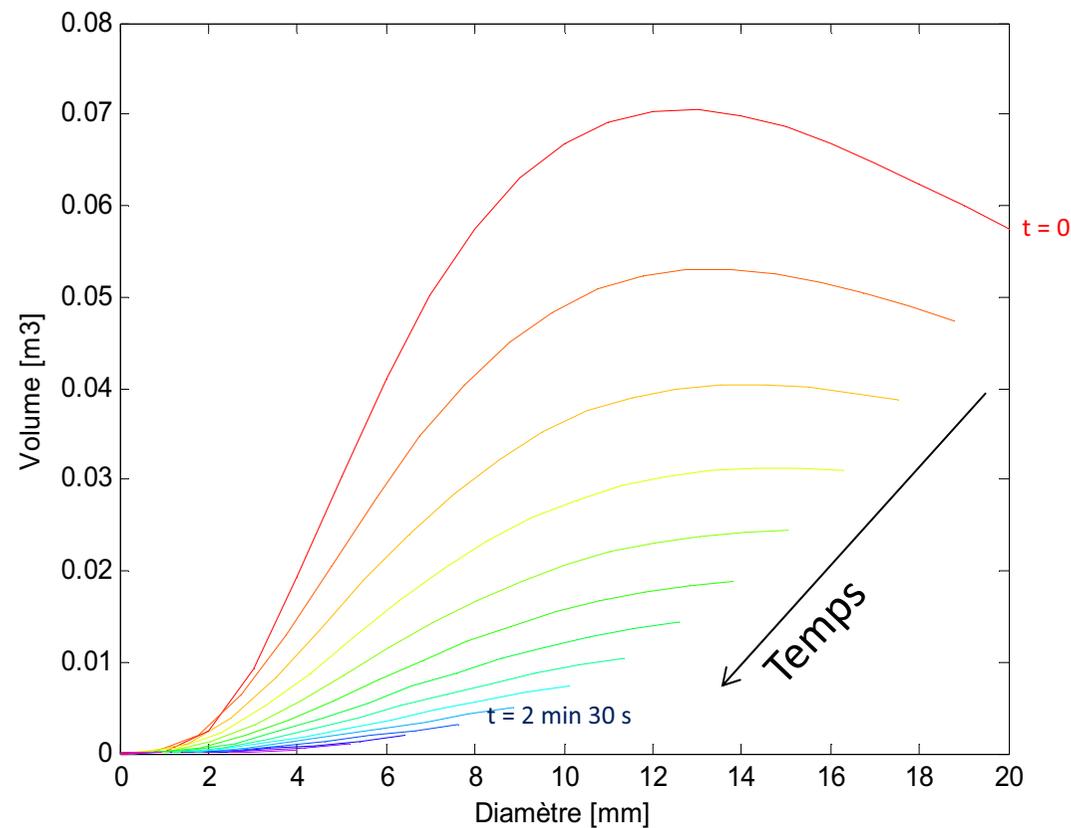
Exemple



Modélisation d'une fuite de butanol sur un chimiquier

1. Solubilisation des différentes classes de gouttes

- Evolution du volume en fonction du temps ($\Delta t = 15$ s)



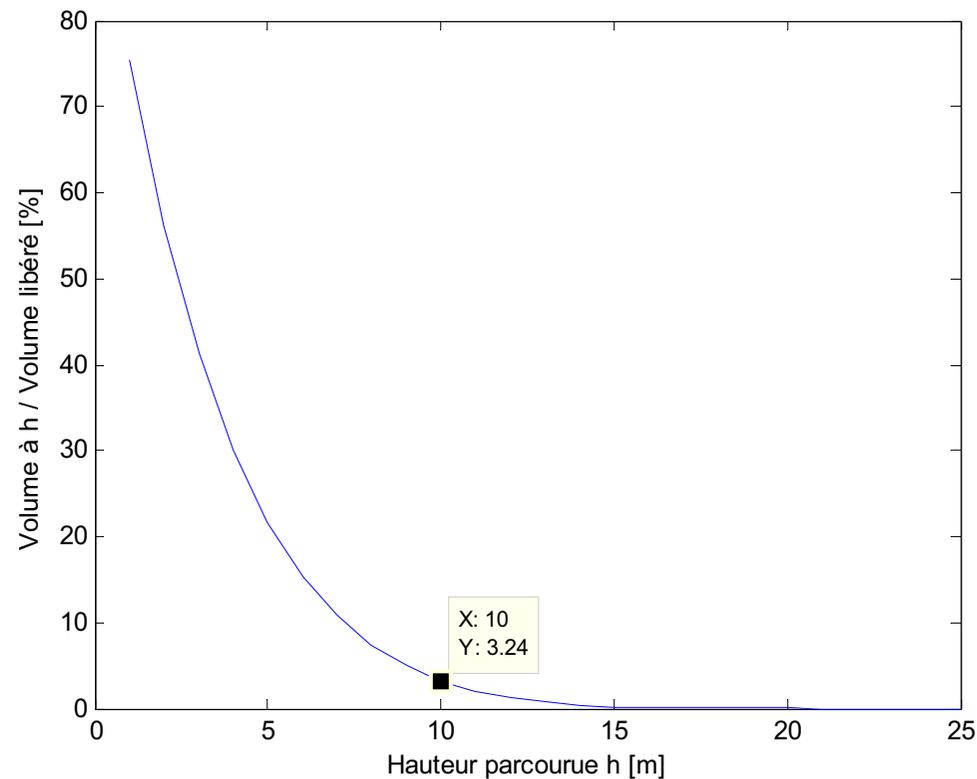


Exemple



Modélisation d'une fuite de butanol sur un chimiquier

Evolution du volume en surface sur le volume initial en fonction de la hauteur



Après 10 m : 96% du volume total est solubilisé
Après 20 m : le butanol est totalement solubilisé



Le futur



Modélisation de la dispersion des produits chimiques en mer

Prise en compte d'autres mécanismes

Sédimentation

Bio-accumulation

Volatilisation

Prise en compte des paramètres environnementaux

Température de l'eau

Salinité

Pression hydrostatique



**Merci de votre
attention**