

# CHEMMAP – Une Application Operationnelle pour l’Evaluation de la Pollution Marine.

Un Outil de Modelisation Operationnelle pour l’Aide a la Reponse.

**18<sup>eme</sup> Journee d’Information du Cedre**  
**23 Mars 2013, Paris – La Defense**

**Dr. Eric Comerma**

*Senior Researcher - RPS ASA | Europe, Africa & Middle East*

[ecomerma@asascience.com](mailto:ecomerma@asascience.com)

[www.asascience.com](http://www.asascience.com)



# Thèmes

- Introduction / Présentation ASA (RPS group)
- Outils de Modélisation Opérationnel
  - Applications, Composantes, Qualité de résultats
  - Processus principales a modéliser
  - Equilibre Précision vs Opérationnalité
- Outil de déversement de produits chimiques – CHEMMAP
  - Entourage Graphique
  - Sortie du Modèle

## **Applied Sciences Associates Inc. (now RPS ASA)**

Environmental, Coastal and Marine Consultancy in Rhode Island, USA

Scientific & Technological Solutions to manage and protect the marine environment.

Now part of the *RPS Group* (UK)

- **Services & Consultancy**

Water quality and hydrodynamic modeling

Support Oil Industry (E&P activities, EIA, drilling, etc.)

Natural Resource Damage Assessment

Operational Metocean Data Provision (winds and currents forecasts)

Training, Drill Exercises

- **Products & Modeling Tools**

In Support of Decision Making (Emergency, Pollution, Search & Rescue)

In Support of Environmental Evaluation (Impact, Risk, Mapping)

Water quality, hydrodynamic modeling, Biological Impact

GIS Framework, OGC Data distribution

Water, air, land dispersion modeling

Oil, Chemicals, LNG, Drilling materials

# Activités ASA

## Secteur Public

- Instituts/Centre de Recherche Pollution Marine, *Répondeurs* (ex.. Le Cedre - France, RWS – Dutch Water Institute, EMSA)
- Garde Cotes (ex.. Sasemar – Espagne, Irish CG)
- Administration Nationales (ex.. NOAA, BOEMRE – USA)
- Agences locales / régionales (ex.. MPA – Singapore)

## Secteur Prive

- **Boites de Consulting** (ERM, CH2M Hill, WP, URS)
- **Pétrolières** (TOTAL, Shell, Chevron, ExxonMobil, etc.)
- **Répondeurs** (OSRL)

## Produits et Services

- Etudes de conditions environnementales
- Modélisation de transport de polluants
- Deversement de produits HC/HNS
- Systeme de Gestion Integre de Donnees
- Developpement d'entourage webGIS



# **Outils de Modélisation: Opérationnel & Consulting**

# Applications

- **Evaluation Environnementale** <-> **Long terme**
  - Impacts dus au déversement de polluants, sur la ligne de cote, sur l'entourage/milieux marin, conséquence écologiques, etc.
  - Analyse du Risque et Plan d'Urgences
  - Grande base de données et combinaison de différents modèles pour évaluer l'interaction entre le polluant, l'environnement et les activités humaines

→ *Simulations d'ensemble (Stochastique)*

- **Support à l'Urgence** <-> **Court terme**
  - Les répondants ont besoin d'un outil (système) simple mais robuste pour évaluer le comportement du polluant (dérive, dispersion) dans les premières heures / jours
  - Intégration de tous les renseignements disponibles (info du polluant, localisation des ressources disponibles, etc.)
  - Données Met-Ocean en temps-reel (<-> Serveur de Données **EDS**)
  - À être utilisé pendant exercices et crises réelles.

→ *Simulations de Prévission*

# Outil Opérationnel: Composantes

- Entourage Graphique
  - Base sur SIG (Système Information Géographique)
  - Cartographie de la zone d'intéret
- Base de Données:
  - Produits Chimiques
  - Géographique - Statique (ex. trait de cote, bathymétrie)
  - Géographique - Dynamique (ex. vents, courants) >> Serveur EDS
- Model(es)
  - Composante eau (pollution dans l'eau)
  - Composante atmosphérique (dispersion dans l'atmosphère)
- Exportation / Importation:
  - Access a de données externes, fichier format standard
  - Exportation de résultant sur d'autre entourages (ex. Google Earth)

# Qualité/Précision des Résultats. Tendances

- **Multiplication de ressources de calcul:**  
Les modèles numériques peuvent mieux reproduire des processus plus sophistiqués en travaillant avec plus d'information (données).
- **Amélioration de l'inter-phasage entre modèle et outil graphique:**
  - Technologies plus robustes, rapides
  - Multiplication des sources d'information
- **Synergie :**  
>> Intégrer / combiner des observations dans les prédictions des modèles

## Qualité de la prédiction d'un modèle dépend de:

- Données d'entrée (inputs).....
- Performance du Modèle (processus physiques/chimiques) .....
- Utilisateurs (modélisateurs) .....

## Tendance

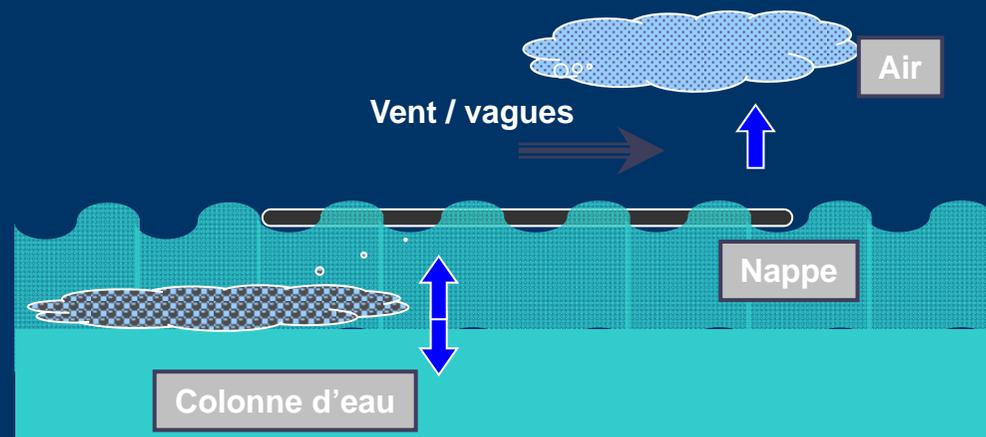
\*\*\*

\*

\*\*

# Modélisation Déversement Produits Chimique

- Processus de TRANSPORT et DISPERSION
  - Atmosphérique (vents)
  - Milieu marin et côtier: circulation (courants), vagues, turbulence, rivières
- Processus de REACTION CHIMIQUE:
  - Transformation des possibles composantes du produit chimique
  - Evaporation, dissolution, mélange avec sédiments, etc.
  - Processus long terme
- Composantes (milieux)
  - Volatiles (air)
  - Flottantes (eau)
  - Côtière (terre)
  - Disperse (eau)
  - Dissoutes (eau)
  - Sédiments (fond marin)

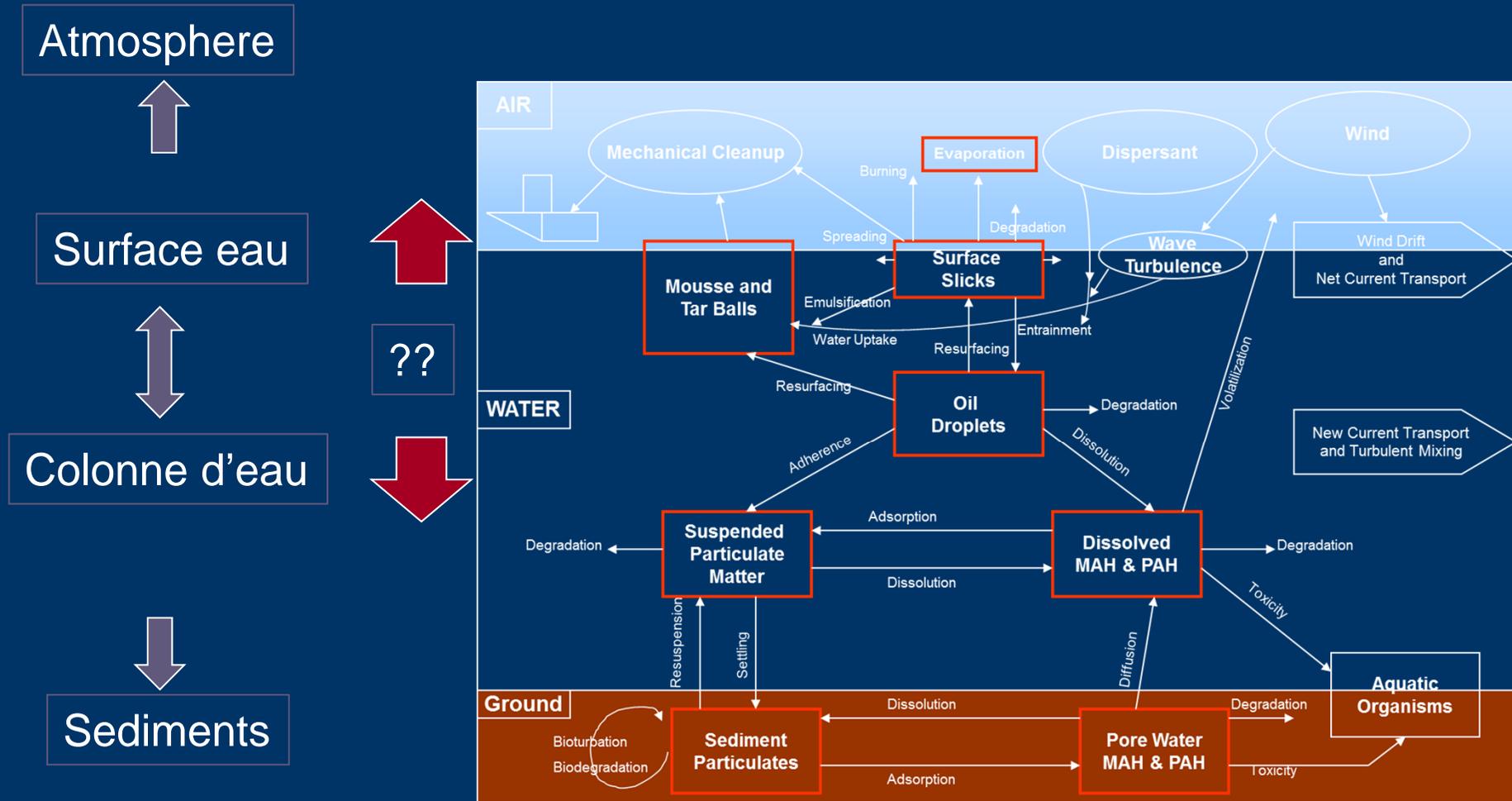


# Classification Produits Chimiques – Base de Données

- Flottabilité
- Evaporation
- Dissolution

Buoyancy Relative to Water	Solubility Behavior	Volatility
Floater: density < 1.0 g/cm <sup>3</sup>	Highly soluble: solubility > 1000 mg/L	Highly volatile: vapor pressure > 0.1 kPa
Neutral: density 1.01-1.03 g/cm <sup>3</sup>	Soluble: solubility 100 - 1000 mg/L	Semi-volatile: vapor pressure 10 <sup>5</sup> - 0.1 kPa
Sinker: density > 1.03 g/cm <sup>3</sup>	Semi-soluble: solubility 1 - 100 mg/L	Low-volatile: vapor pressure < 10 <sup>5</sup> kPa
	Insoluble: solubility < 1 mg/L	

# Quels sont les processus clés?



**Bilan total?** ↔ **Réponse en fonction de notre soucis**

**CHEMMAP:**  
Déversement de produits chimiques

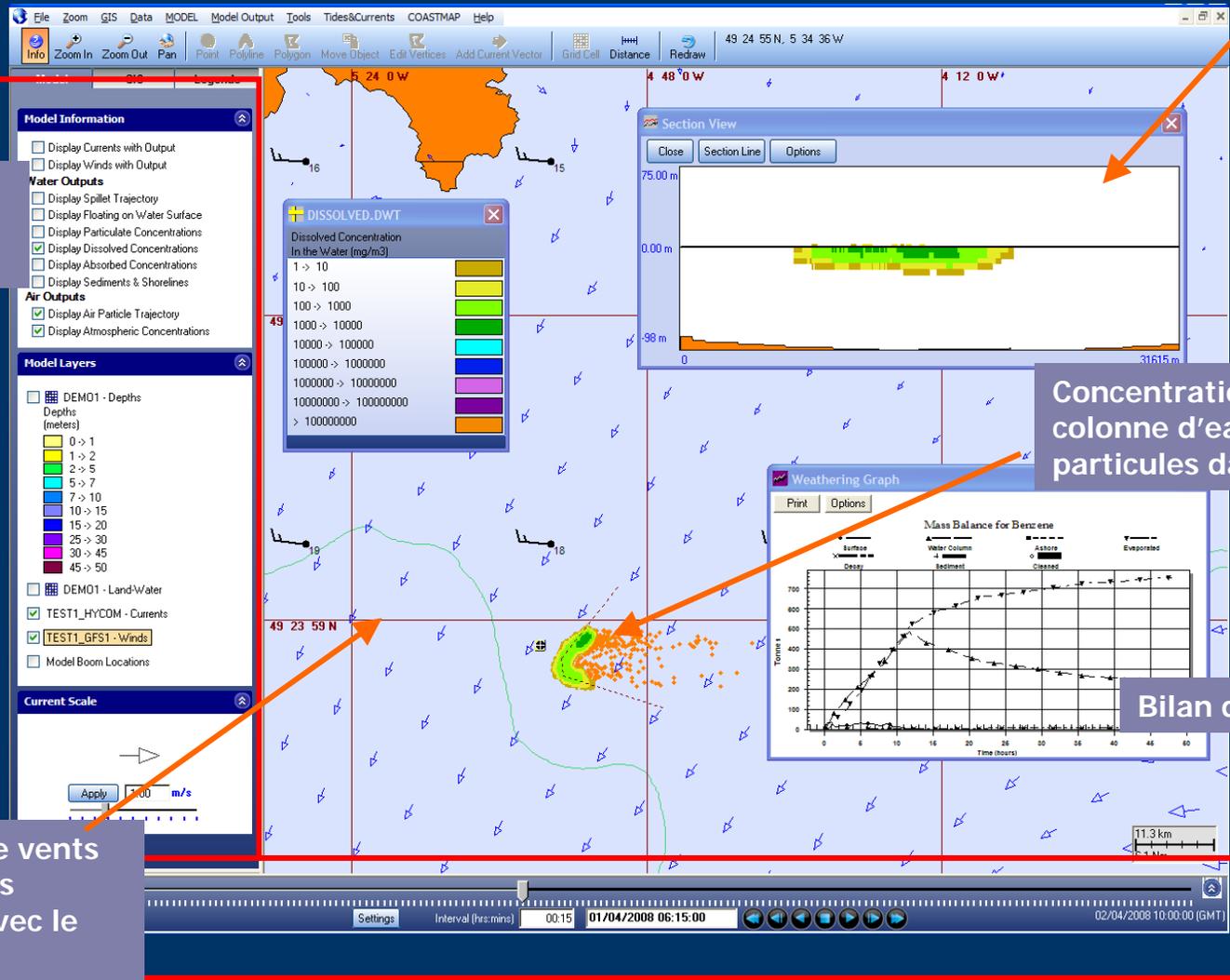
# Éléments de CHEMMAP

- Outil cartographique qui inclut plusieurs modèles pour simuler la trajectoire, évolution et effets biologiques du déversement d'un produit chimique dans un milieu aquatique et/ou terrestre.
- Il inclut une composante stochastique pour l'évaluation de risques / plans d'urgence, aussi bien qu'un modèle d'exposition pour évaluer l'effet / dosage (toxicité).
- Modules:
  - SIG (Système Information Géographique)
  - Cartographie nautique digitale (ex. C-MAP), et en ligne
  - Base de données de produits chimiques et une MSDS (*Material Safety Data Sheet*)
  - Access au serveur de données environnementales (ASA - EDS)
- Limitations:
  - Il ne reproduit pas de réactions chimiques (ex. acide/basique, pH)
  - Il ne travaille qu'avec de produits mono-composantes (ex. pas du pétrole)

# Entourage CHEMMAP

Résultats profil vertical

SIG / gestion de couches d'information



Concentration en colonne d'eau et particules dans l'air

Bilan de masse

Champs de vents et courants variable avec le temps

Animation / synchronisation du temps

# Base de Données Produits Chimiques

The image displays two overlapping windows from a chemical database application. The background window is for 1,1,1,2-Tetrachloroethane, and the foreground window is for Benzene.

**Background Window (1,1,1,2-Tetrachloroethane):**

- Buttons: OK, Chemical Summary, Save, Add Chemical, Unknown, Delete.
- Database Selection:  ASA Database,  Personal Database.
- Chemical Name: 1,1,1,2-Tetrachloroethane
- Author(s):
- Tabbed Interface: Descriptions, MSDS, Information, Physical, Chemical, Initialization, Toxicity.
- General Chemical Behavior (dependent on environmental conditions):
  - 1,1,1,2-Tetrachloroethane:
    - is a sinker
    - is highly volatile
    - is highly soluble
    - moderately adsorbs to particles
- Hazards: >>Hazard Information Unavailable.<< (User may enter Hazard Information under 'User Notes').
- Belongs to Reactivity: Halogenated Organic
- General Description:
  - Clear colorless liquid [NTP, 1992].
  - Water solubility - <1 mg/mL at 68.9°F [NTP, 1992].
  - C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>
  - 1,1,1,2-TETRACHLOROETHANE is incompatible with strong oxidizing agents and s...
- User Notes:

**Foreground Window (Benzene):**

- Buttons: OK, Chemical Summary, Add Chemical to Personal Database.
- Database Selection:  ASA Database,  Personal Database.
- Chemical Name: Benzene
- Tabbed Interface: Descriptions, MSDS, Information, Physical, Chemical, Initialization, Toxicity.
- Chemical Synonyms: benzol; cyclohexatriene;
- Molecular Formula: C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>
- CAS No.: 71-43-2
- Chemical State:
  - Pure Chemical**
    - Solid, powder
    - Solid, pellets
    - Solid, block
    - Liquid
    - Gas
  - In Bulk Liquid**
    - Dissolved in aqueous solution
    - Particulate suspended in aqueous solution
    - Dissolved in hydrophobic solvent
    - Dissolved in or adsorbed to hydrophobic material suspended in aqueous solution
    - Dissolved in aqueous solution & adsorbed to hydrophobic material emulsion in the aqueous solution
- UN No.: 1114
- Chemical Type Code:  Inorganic,  Organic,  Petroleum Product

# Vents et Courants via EDS

Demande en ligne des données de vents et courants pour le scénario à simuler (temps et espace) au serveur EDS/COASTMAP

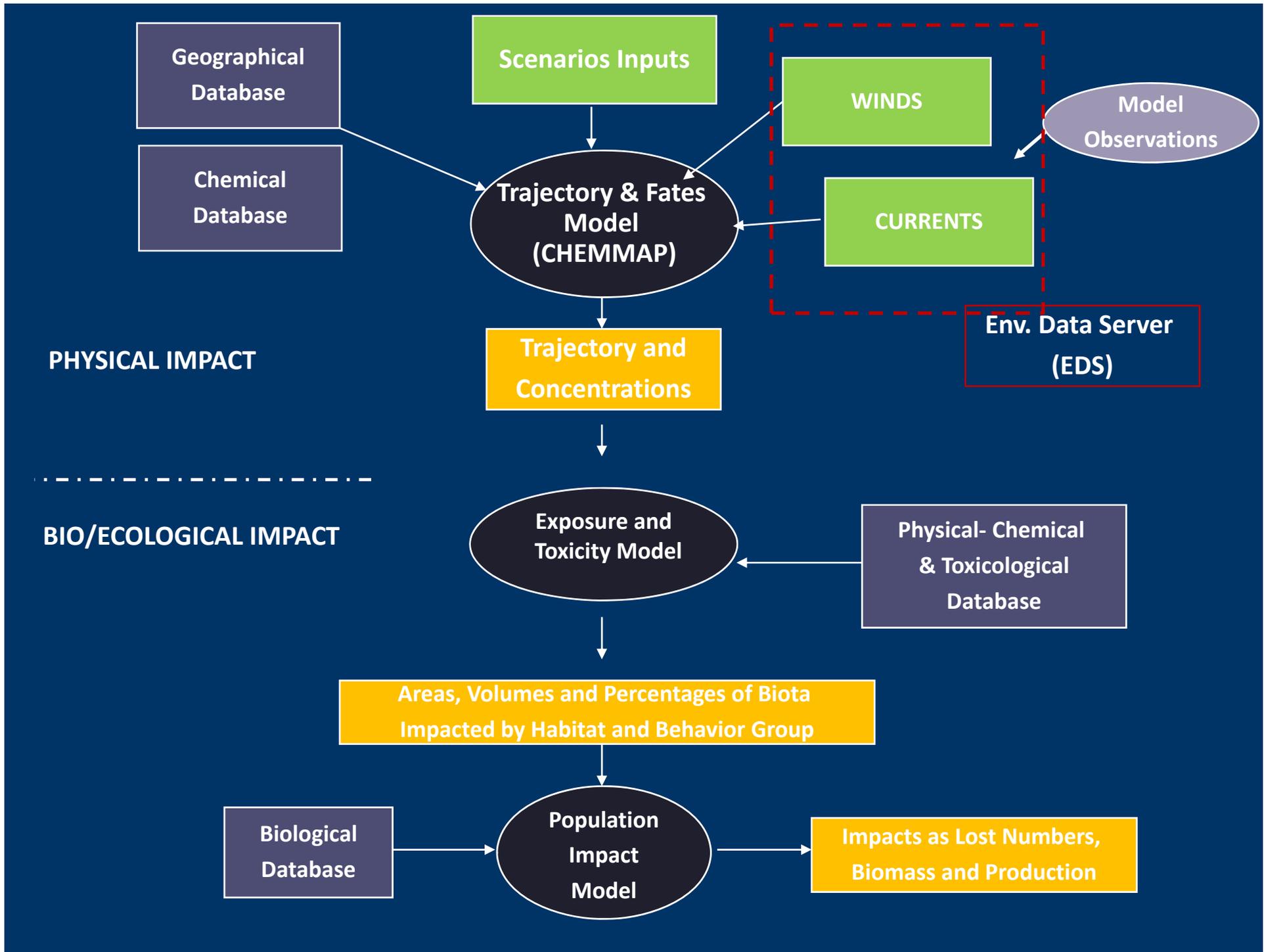
Pas de temps inclus dans le fichier de courants obtenus via EDS

Sources de données disponibles pour le scénario

Get Data   Download Complete   Currents File: GULF\_OF\_MEXICO\_CHEM1\_HYCOM.NC   All times GMT

Close   Previous   Run Chemical Model   Next   Save As Default

Extension du fichier de courants



# Résultats de Chemmap

## Types de Sortie du modèle

- 'Brute' - particules du modèle lagrangian
- 'Processe' > calcul des concentrations
- Séries temporelles de la concentration pour un certain point
- Distribution de la concentration a différents couches, et/ou maximum

## Carte de Concentrations:

- Dans l'air (vapeur)
- En Surface (liquide/solide - flottant)
- Dissoute (dans la colonne d'eau)
- Disperse (liquide – colonne d'eau)
- Sediment (liquide/solide)

## Valeurs maximales moyenne

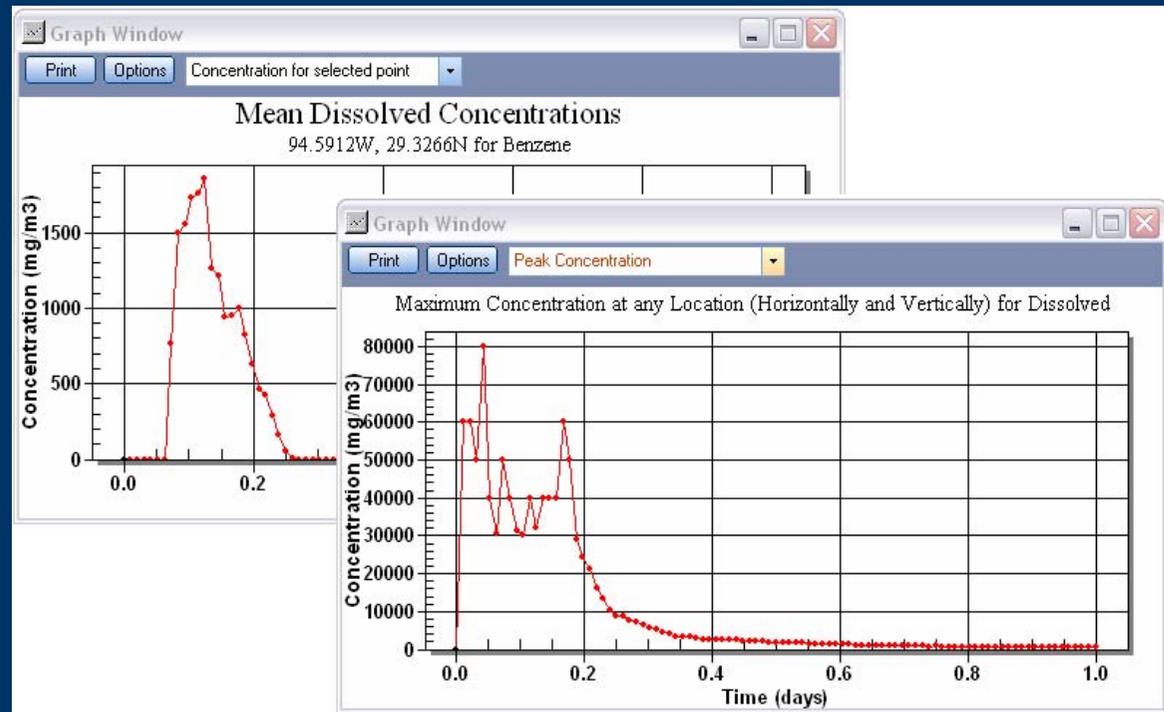
- *Time Weighted Average* ou
- *Immediate Dangerous to Life or Health*

The screenshot displays the 'Toxicity Parameters' section of the Chemmap software. The chemical 'Benzene' is selected. The interface includes tabs for Descriptions, MSDS, Information, Physical, Chemical, Initialization, and Toxicity. The Toxicity tab is active, showing various parameters and their values:

Parameter	Value
Predicted No effect Concentration, PNEC (ppb)	Unknown
No Observable Effects Concentration, NOEC (ppb)	Unknown
Lowest Observable Effects Concentration, LOEC (ppb)	Unknown
LC50 for fish (ppb)	Unknown
LC50 for invertebrates (ppb)	Unknown
EC50 for plants (ppb)	Unknown
EC50 for zooplankton (ppb)	Unknown
EC50 for benthic invertebrates (ppb)	Unknown
Log10BCF for fish	Unknown
Log10BCF for invertebrates	Unknown
Immediately Dangerous to Life or Health, IDLH (ppm)	500.00000
Time Weighted Average (ppm)	
TLV-TWA	0.50000
PEL-TWA	1.00000
REL-TWA	0.10000
Short Term Exposure Limit, STEL (ppm)	2.50000
Odor Threshold (ppm)	34.00000
Human Health threshold in air (ppm)	Unknown
Human Health threshold in water (ppb)	Unknown
Human Health threshold in food (ppb)	Unknown

# Resultats CHEMMAP

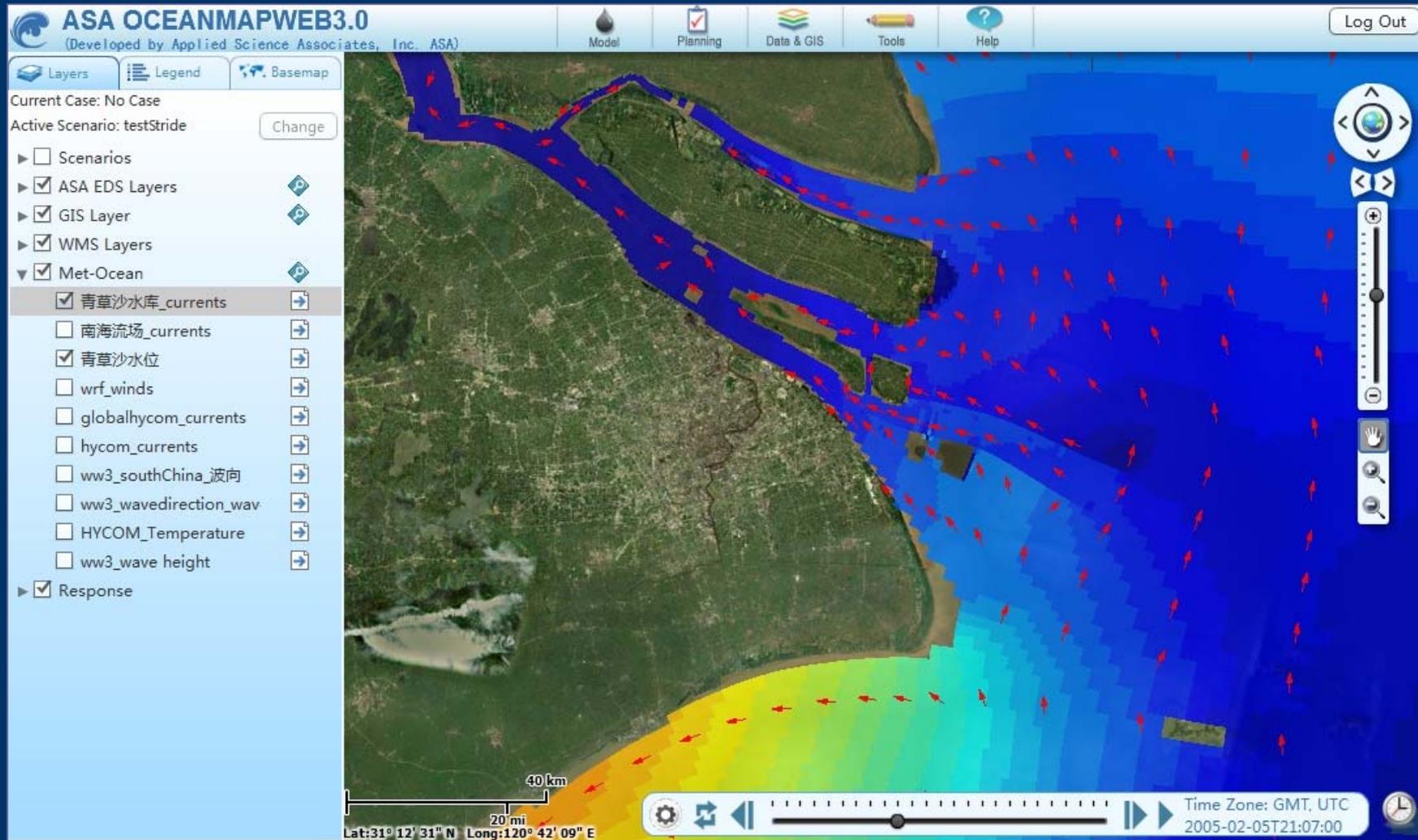
Variation de la concentration du produit chimique en fonction du temps



# L'avenir: Entourage web

## Echange de l'information

# Met-Ocean Data



# Chemical Modeling

**OCEANSMAP** Model Data & GIS Tools Help

Layers Legend Basemap  
 Current Case: No Case  
 Active Scenario: ChemSpill1

Scenarios  
    ChemSpill1  
      Trajectory  
      Spilllets  
      Swept Spilllets  
      Surface  
      Dissolved  
      Particulate  
      Absorbed  
      Sediment  
      Model Currents  
 ►  ASA EDS Layers  
 ▼  GIS Layer  
    ASA World Map  
    boat\_locations  
 WMS Layers  
 Met-Ocean  
 Response

**ChemMap** Scenario Chemical Winds Currents Review

Chemical Spill Amount: 1000 Tonnes

Release Duration: 0 (minutes) Release Depth: 0 (m)

ID	Chemical Name	cas1	cas2	cas3
17	acetaldehyde	75	7	0
31	Ammonia gas	7664	41	7
33	Ammonia-liquefied gas	7664	41	7
29	Benzene	71	43	2
3	Benzene (gas)	71	43	2
10	carbon tetrachloride	56	23	5

Refresh Chemical List

Number of Particles: 100 Horizontal Dispersion: 3 m<sup>2</sup>/s  
 Vertical Dispersion: 0.0001 m<sup>2</sup>/s

Previous Next

© OpenStreetMap contributors, CC-BY-SA  
 Time Zone: GMT, UTC  
 2013-01-15T02:00:00

# GIS Tools

OCEANSMAP Account will expire on 4/5/2013!

Model Data & GIS Tools Help

Layers Legend Basemap

Current Case: No Case  
Active Scenario: OilSpill10

Scenarios

- OilSpill10
  - Trajectory

**Edit Layer**

Target Layer: areas

Select icon to create feature

ID (serial)	name (text)	description (text)	Shape (Geometry)
1	area1	undefined	POLYGON

Delete feature Save All Merge intersected features

GIS Layer

- Angola\_Development
- Angola\_Interest
- Angola\_ProducingProject
- areas**
- Nigeria\_Cameroon\_Label
- Nigeria\_Cameroon\_Oil\_
- WMS Layers

Benin Nigeria EQUATORIAL GUINEA

200 km 100 mi

Lat: 1° 59' 09" N Long: 5° 27' 18" E

Time Zone: GMT, UTC  
2013-03-09T19:00:00