

Mots clés : Modélisation hydrodynamique, modèle Marthe, solvants chlorés, écoulements de TCE, écoulements multiphasiques.

En bibliographie, ce rapport sera cité de la façon suivante :

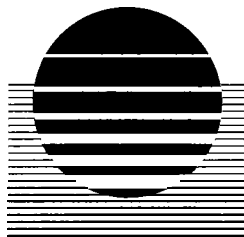
Thiéry D. (1998) - Modélisation numérique de la pollution par le TCE sur le bassin expérimental SCERES de l'IFARE : Ière partie : simulations préliminaires avant expérimentations. Rap. BRGM R40127, 31 p., 10 fig.

DOCUMENT PUBLIC

*Modélisation numérique de la pollution par  
le TCE sur le bassin expérimental SCERES  
de l'IFARE  
1 ère partie : simulations préliminaires avant  
expérimentations*

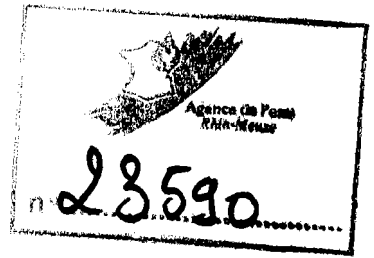
D. Thiéry

juin 1998  
R 40127



**BRGM**

L'ENTREPRISE AU SERVICE DE LA TERRE



## Synthèse

Ce rapport présente des calculs prévisionnels réalisés avec des paramètres de la littérature pour évaluer les ordres de grandeurs des temps de transferts du trichloroéthylène (TCE) sur le bassin SCERES (Site Contrôlé Expérimental de Recherche pour la Réhabilitation des Eaux et des Sols) de l'IFARE (Institut Franco-Allemand de Recherche sur l'Environnement). Les calculs ont été réalisés en diphasique avec le modèle MARTHE du BRGM. On a modélisé d'une part les écoulements du TCE dans la zone saturée (de l'aquifère) et d'autre part, de manière simplifiée, les infiltrations de TCE à travers la Zone Non Saturée. Dans le premier cas il y a 2 phases : l'eau et le TCE, dans le 2ième cas, il y a également 2 phases en négligeant la phase eau et en ne considérant que le couple air - TCE.

Les calculs montrent qu'avec les lois constitutives retenues le TCE, répandu dans la ZNS dans un état très sec, percolerait régulièrement à travers la ZNS en s'étalant latéralement dans un cylindre d'environ 120 cm. La simulation d'un épandage brutal du TCE dans la Zone Saturée serait beaucoup rapide. Le TCE percolerait pendant une dizaine d'heures et s'étalerait alors au fond du système aquifère où il se déplacerait lentement vers la limite aval sous l'effet du gradient hydraulique.

# Sommaire

<b>Synthèse</b> .....	<b>3</b>
<b>Sommaire</b> .....	<b>5</b>
<b>Introduction</b> .....	<b>7</b>
<b>1. Description du dispositif expérimental et des données disponibles</b> .....	<b>9</b>
1.1. Description succincte du bassin .....	9
1.2. Conditions initiales et conditions aux limites .....	9
1.3. Propriétés du Trichloroéthylène .....	9
1.4. Les propriétés du milieu poreux .....	10
<b>2. Modélisation numérique</b> .....	<b>13</b>
2.1. Modèle mathématique utilisé .....	13
<b>2.2. Modélisation Diphasique dans la zone saturée en eau</b> .....	<b>13</b>
2.2.1. Modélisation de dégrossissage en coupe verticale .....	14
2.2.2. Modélisation en coordonnées radiales .....	17
2.2.3. Modélisation en 3D.. .....	21
2.3. Modélisation des transferts à travers la zone saturée .....	24
2.3.1. Modélisation monophasique avec un schéma Zone Non Saturée .....	24
<b>Conclusion</b> .....	<b>27</b>
<b>Bibliographie</b> .....	<b>29</b>
<b>Liste des figures</b> .....	<b>31</b>

## Introduction

Une convention entre l'Agence de l'Eau Rhin-Meuse et l'IFARE (Institut Franco-Allemand de Recherche sur l'Environnement) a pour objet de mieux connaître le comportement des solvants chlorés dans les milieux souterrains. A cet effet il est prévu de réaliser des essais avec des modèles de simulation physique et numérique sur le bassin enterré de grandes dimensions SCERES (Site Contrôlé Expérimental de Recherche pour la Réhabilitation des Eaux et des Sols). En effet la meilleure approche pour aborder les processus complexes et mal connus mis en jeu (migration de fluides non miscibles eau, air et huile en milieu poreux, transferts entre phases) est de mener des recherches sur site expérimental en situation réelle mais contrôlée en parallèle avec des expériences sur modèles physiques 1D, 2D ou 3D en laboratoire. Le bassin SCERES, unique en Europe, présente des atouts fondamentaux pour une telle recherche. Les données acquises permettront la validation de modèles mathématiques de tous ou d'une partie des phénomènes mis en jeu.

Dans le cadre du projet "Etude du comportement des Solvants Chlorés dans le Milieu Souterrain - Investigation sur le Bassin SCERES" l'IFARE a demandé au BRGM, bon de commande ULP n°928/012307 du 14 avril 1998, de réaliser des simulations numériques en écoulement diphasique pour évaluer, dans une première phase, les vitesses de transfert du trichloroéthylène (TCE) en zone saturée et en zone non saturée, et dans une phase ultérieure l'interprétation et la modélisation d'expériences qui seront réalisées sur le bassin SCERES.

L'objet de ce rapport est de donner les résultats de modélisation de la première phase.

## 1.4. LES PROPRIETES DU MILIEU POREUX

Compte de la viscosité de l'eau, les perméabilités à saturation des 2 sables (sable principal et couche drainante) sont les suivantes :

- Sable principal : Perméabilité =  $8.1549 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$  (environ 80 Darcy)
- Couche drainante : Perméabilité =  $6.1162 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2$  (environ 600 Darcy).

Les sables ont une porosité égale à environ 40 % ( $0.40 \text{ m}^3$  de pore par  $\text{m}^3$  de terrain). D'autre part le profil fourni montre que la teneur en eau résiduelle est de l'ordre de 0.18 fois la porosité (soit 7.2 % du volume de terrain).

Les lois de perméabilité - saturation et de rétention n'étant pas connues, on a utilisé des paramètres plausibles pour ces milieux en présence de TCE. Pour la simulation des transferts de tétrachloroéthylène dans un massif sableux, Kueper et Frind (1991 a et b) utilisent une loi de Brooks et Corey sous la forme suivante :

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$$

$$\frac{h_c}{h_t} = (S_e)^{-1/\lambda}$$

$$K_{rw} = S_e^{3+2/\lambda}$$

$$K_{r\_NAQ} = (1 - S_e)^2 \cdot [1 - S_e^{(1+2/\lambda)}]$$

$$b_s = 1/\lambda$$

avec

$\theta$  = Teneur en phase aqueuse (teneur en eau volumique) [-]

$\theta_s$  = Saturation maximale (porosité) [-]

$\theta_r$  = Teneur en phase aqueuse résiduelle [-]

$h_c$  = Pression capillaire (valeur absolue de la succion) exprimée en hauteur d'eau [L]

$h_t$  = Succion de référence [L]

$S_e$  = Saturation relative en phase aqueuse [-]

$\lambda$  = Exposant

$b_t$  = Exposant dans le modèle MARTHE

# 1. Description du dispositif expérimental et des données disponibles

## 1.1. DESCRIPTION SUCCINCTE DU BASSIN

Le bassin d'étude est le site contrôlé SCERES (Site Contrôlé Expérimental de Recherche pour la Réhabilitation des Eaux et des Sols) de l'IFARE (Institut Franco-Allemand de Recherche sur l'Environnement). Ce site, localisé au Campus du CNRS à Strasbourg - Cronenbourg, est un bassin enterré de grandes dimensions : 25 m x 12 m x 3 m (soit 900 m<sup>3</sup>). Il est construit en béton armé et est parfaitement étanche. Dans sa configuration actuelle, il est rempli d'un milieu bicouche : un sable principal, sur 2.5 m d'épaisseur, qui repose sur une couche drainante, de 50 cm d'épaisseur, constituée d'un sable plus perméable. Le sable principal a perméabilité à l'eau de l'ordre de 8 10<sup>-4</sup> m/s. Le sable de la couche drainante a une perméabilité à l'eau de l'ordre de 6 10<sup>-4</sup> m/s (soit 7.5 fois plus)

## 1.2. CONDITIONS INITIALES ET CONDITIONS AUX LIMITES

Dans sa configuration actuelle l'épaisseur moyenne de la Zone Non Saturée (ZNS) au niveau du déversement est égale à 2 m. La Zone Saturée (ZS) a donc une épaisseur moyenne de 1m (0.5 m de sable principal et 0.5 m de couche drainante). Un gradient hydraulique de 0.28 % a été imposé à l'aide des fosses techniques amont et aval du bassin.

Le déversement de trichloroéthylène (TCE) sera réalisé sur une surface circulaire de 0.55 m de diamètre, soit une surface de 0.23758 m<sup>2</sup>. Le volume de TCE déversé sera de 0.009 m<sup>3</sup> (9 litres) avec un débit moyen de 0.4 l/mn.

## 1.3. PROPRIETES DU TRICHLOROETHYLENE

Pour tous les calculs on a choisi les valeurs suivantes, provenant de la littérature, pour le trichloroéthylène (TCE) :

- Masse volumique = 1456 kg/m<sup>3</sup> (densité par rapport à l'eau = 1.456)
- Viscosité dynamique = 5.66 10<sup>-4</sup> Pa.s (soit 0.566 centipoise)
- Masse moléculaire = 131.4 g (non utilisée)
- Limite de solubilité = 1100 mg/l (non utilisée)

On a par ailleurs admis les propriétés suivantes pour l'eau :

- Masse volumique = 1000 kg/m<sup>3</sup>
- Viscosité dynamique = 1.1 10<sup>-3</sup> Pa.s (soit 1 centipoise)

## Conclusion

Des calculs prévisionnels ont été réalisés avec des paramètres de la littérature pour évaluer les ordres de grandeurs des temps de transferts du trichloroéthylène sur le bassin SCERES de l'IFARE. Les calculs ont été réalisés en diphasique avec le modèle MARTHE du BRGM. Pour rester en écoulement diphasique on a modélisé d'une part les écoulements du TCE dans la zone saturée (de l'aquifère) et d'autre part, de manière simplifiée, les infiltrations de TCE à travers la Zone Non Saturée. Dans le premier cas il y a 2 phases : l'eau et le TCE, dans le 2ième cas, il y a également 2 phases en négligeant la phase eau et en ne considérant que le couple air - TCE.

Les calculs montrent qu'avec les lois constitutives retenues, le TCE répandu dans la ZNS dans un état très sec percolerait régulièrement à travers la ZNS en s'étalant latéralement dans un cylindre d'environ 120 cm de diamètre. La simulation d'un épandage brutal du TCE dans la Zone Saturée serait beaucoup rapide. Le TCE percolerait pendant une dizaine d'heures et s'étalerait alors au fond du système aquifère où il se déplacerait lentement vers la limite aval sous l'effet du gradient hydraulique.

Pour ces calculs de dimensionnement on a pas pris en considération la dissolution du TCE dans l'eau mais c'est tout à fait envisageable dans une phase ultérieure quand on disposera des lois constitutives (loi de rétention, lois de perméabilité relative) et de mesure des évolutions de la saturation en TCE et de la concentration en TCE. Ceci fera l'objet d'une phase ultérieure.