



Modélisation du transport des nappes d'hydrocarbures en zone continentale et estuarienne

Cédric Goeury

► To cite this version:

Cédric Goeury. Modélisation du transport des nappes d'hydrocarbures en zone continentale et estuarienne. Sciences de la Terre. Université Paris-Est, 2012. Français. NNT : 2012PEST1131 . pastel-00778087

HAL Id: pastel-00778087

<https://pastel.hal.science/pastel-00778087>

Submitted on 18 Jan 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE DE DOCTORAT

présentée par
CÉDRIC GOEURY

pour l’obtention du grade de Docteur de l’Université Paris-Est

Spécialité
MÉCANIQUE DES FLUIDES

Sujet de la thèse

Modélisation du transport des nappes d’hydrocarbures en zones continentales et estuariennes

Soutenue le 22 octobre 2012

Devant le jury composé de :

Philippe FRAUNÉ	Professeur des universités Université du Sud Toulon Var	Rapporteur
Olivier THUAL	Professeur des universités Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse	Rapporteur
Pascale DE CARO	Maître de Conférences Laboratoire de Chimie Agro-Industrielle/Toulouse	Examineur
Pierre DANIEL	Ingénieur Chercheur Météo France/Toulouse	Examineur
Florent LYARD	Directeur de recherche CNRS/INSU/LEGOS	Examineur
Régis MOILLERON	Professeur des universités Université Paris-Est/Créteil Val-de-Marne	Examineur
Jean-Michel HERVOUET	Ingénieur Chercheur Senior, HDR EDF R&D & Laboratoire Hydraulique Saint-Venant	Directeur de thèse

Thèse effectuée au sein du Laboratoire Hydraulique Saint-Venant
6, quai Watier
BP 49
78401 Chatou Cedex
France

En vérité le chemin
importe peu,
la volonté d'arriver
suffit à tout.
Albert Camus (1913-1960)

Lorsque l'homme aura
coupé le dernier arbre,
pollué la dernière goutte
d'eau, tué le dernier
animal et pêché le dernier
poisson, alors il se rendra
compte que l'argent
n'est pas comestible.
(Proverbe indien)

Summary

Numerical modelling of oil spill drifts in continental and estuarine waters

The application of the European Water Framework Directive on water quality for human consumption and industrial activities creates a need for water quality assessment and monitoring systems. The MIGR'HYCAR research project (<http://www.migrhycar.com>) was initiated to provide decisional tools for risks connected to oil spills in continental waters (rivers, lakes and estuaries), which represent more than 50% of accidental spills in France. Within the framework of this project, a new numerical oil spill model has been developed, as part of the TELEMAC hydro-informatics system (<http://www.opentelemac.org>), by combining Lagrangian and Eulerian methods. The Lagrangian model describes the transport of an oil spill near the free surface. The oil spill model enables to simulate the main processes driving oil plumes : advection, diffusion, oil beaching, oil re-floating, evaporation, dissolution, spreading and volatilization. Though generally considered as a minor process, dissolution is important from the point of view of toxicity. To model dissolved oil in water, an Eulerian advection-diffusion model is used. The fraction of dissolved oil is represented by a passive tracer. This approach is able to follow dissolved hydrocarbons in the water column. Laboratory experiments were conducted to characterise the numerous kinetics of the processes listed above. In addition, meso-scale dynamic experiments in artificial channels and test cases derived from the literature are used to validate the numerical model.

Keywords : oil spill, Lagrangian/Eulerian model, weathering processes, continental waters, dissolution.

Résumé

Modélisation du transport des nappes d'hydrocarbures en zone continentale et estuarienne

L'application de la Directive Cadre sur l'Eau et l'obligation de surveillance pour la consommation humaine et les activités récréatives ou industrielles, telles que la production d'eau potable, entraînent une forte demande pour des systèmes d'évaluation et de suivi de la qualité de l'eau. Le projet de recherche MIGR'HYCAR (<http://www.migrhycar.com>) a donc été mis en place pour répondre à un besoin opérationnel et à un défaut d'outils d'aide à la décision adaptés face aux déversements d'hydrocarbures en eaux continentales (rivières, lacs et estuaires) qui représentent plus de 50% des déversements accidentels en France. Au cours du projet de recherche MIGR'HYCAR, un modèle mathématique de dérive de nappe d'hydrocarbures, composé d'un modèle Lagrangien couplé à un modèle Eulérien, a été développé dans la plate-forme hydro-informatique TELEMAC (<http://www.opentelemac.org>). Le modèle Lagrangien décrit le mouvement de la nappe en surface en considérant celle-ci comme un ensemble de particules. Ainsi le modèle développé est capable de modéliser les principaux phénomènes agissant sur une nappe d'hydrocarbures une fois celle-ci déversée : convection, diffusion, échouage, relargage, étalement, évaporation, dissolution et volatilisation. Bien que le phénomène de dissolution ne concerne qu'un très faible volume d'hydrocarbures, ce processus peut avoir des conséquences importantes du point de vue de la toxicité. Afin de suivre l'évolution du pétrole dissous, un modèle Eulérien de suivi de traceurs a été adopté. La quantité de traceur dépend directement de la masse dissoute des particules lagrangiennes. Cette approche permet le suivi des hydrocarbures qui migrent dans la colonne d'eau. Des cinétiques effectuées en laboratoire ont pour but la calibration du modèle numérique. En complément de cas tests issus de la littérature et de cas réels, des résultats d'expérimentations effectuées en canal d'essai sont utilisés pour vérifier et valider la qualité des simulations numériques sur des situations où les conditions ne sont que partiellement contrôlées.

Mots clefs : pollutions aux hydrocarbures, modèle Lagrangien/Eulérien, processus de vieillissement, eaux continentales, dissolution.

Remerciements

Tout d'abord, je voudrais remercier Messieurs Olivier Thual et Philippe Fraunié qui ont accepté d'être les rapporteurs de mon mémoire de thèse. Je les remercie pour leur commentaires et leurs suggestions très intéressantes. Je suis également reconnaissant à Régis Moilleron d'avoir présidé mon jury et à Pierre Daniel, Florent Lyard et Pascale De Caro d'avoir accepté d'être examinateurs de ma thèse.

Ce travail a été effectué au sein du Laboratoire Hydraulique Saint-Venant, à Chatou, dirigé par Michel Benoit. Je lui exprime ma sincère reconnaissance pour m'avoir accueilli au sein de son équipe.

Mes travaux ont été encadrés au Laboratoire par Jean-Michel Hervouet. Lui exprimer ma reconnaissance en quelques phrases est difficile tant son soutien durant ce travail a été déterminant. Je le remercie vivement de m'avoir fait bénéficier de son expérience et de ses nombreuses connaissances physiques et numériques mais également pour son soutien et son enthousiasme perpétuel. J'ai énormément appris au cours des longues conversations scientifiques que nous avons eues à maintes reprises. A son contact, j'ai pu appréhender la richesse scientifique, humaine et culturelle de EDF R&D. Travailler avec lui a été pour moi une joie, et il a été et reste pour moi à la fois un excellent directeur mais aussi un modèle.

Cette thèse s'est inscrite au sein du projet ANR MIGR'HYCAR, dont les partenaires sont les suivants : ARTELIA (anciennement SOGREAH), Veolia Environnement Recherche et Innovation (VERI), le Laboratoire de Chimie Agroindustrielle (LCA), le Laboratoire d'Hydraulique Saint-Venant (LHSV), le Centre de Documentation, de Recherche et d'Expérimentations sur les pollutions accidentelles des eaux (CEDRE), EDF et TOTAL. Je tiens à remercier l'ensemble des personnes qui ont participé et m'ont apporté une aide décisive dans ce travail. A ce propos, je remercie chaleureusement Olivier Bertrand, chef de projet, qui a été mon interlocuteur privilégié. Il a toujours montré une gentillesse, une disponibilité et un dévouement qui n'ont d'égal que ses compétences. Pareillement, je remercie également les gens de VEOLIA Environnement Recherche et Innovation et notamment Didier Fangeat, Isabelle Baudin-Bizien, François Thouvenel et Mohammad Mourad, d'abord pour leur disponibilité et leur gentillesse mais également pour m'avoir permis d'effectuer des expérimentations au cours de cette thèse.

Remerciements

J'ai éprouvé beaucoup de plaisir au cours de ce travail de thèse. Ce plaisir, je le dois en partie à toutes les personnes que j'ai cotoyé au laboratoire, et qui m'ont soutenues tous à leur façon. Parmi les membres d'EDF et du laboratoire, ce soutien s'est manifesté par une disponibilité et une gentillesse qui ont grandement facilité mon intégration. Il me faut également remercier chaleureusement tous mes "collègues" doctorants ou stagiaires, embarqués comme moi dans ce même combat qu'est la thèse ! Merci à Antoine mon co-bureau durant mes deux premières années de thèse pour toutes ces discussions rugby que nous avons eu et que nous avons encore, Andrès mon premier et dernier co-bureau qui a accompli sa thèse en parallèle de la mienne et avec qui j'ai fait mes armes dans le monde de la recherche, Etienne pour toutes ces discussions et ces conseils durant ces années, Elodie qui a ouvert la voie aux doctorants du laboratoire, Chi-Tuan pour tous ces matchs de rugby qu'on va voir ensemble et son dévouement au Stade Toulousain même si souvent il le renie, Maria pour sa gentillesse et sa bonne humeur qui m'ont manqué après son départ, Amélie à qui je souhaite plein de courage pour sa dernière année de thèse, Christophe pour sa bonne humeur et sa gentillesse, Riadh pour toutes ces discussions scientifiques et sa disponibilité, Marissa pour sa bonne humeur et toujours nous apprendre plus sur la culture américaine, Sarah ma petite soeur de thèse à qui je souhaite bon courage pour ces trois années qui t'attendent. Je remercie Pablo pour avoir relu si attentivement mon mémoire et Florence pour avoir cherché aussi bien les fautes d'orthographe ! Et merci à toutes les autres personnes qui m'ont accompagné dans cette aventure qu'est la thèse.

Naturellement, je voudrais remercier mes proches, toute ma famille ainsi que ma belle famille, encore là ou pas, pour leur soutien, la confiance qu'ils ont toujours eu en moi et leurs encouragements qui m'ont permis d'arriver à bout de cette thèse.

Merci enfin à ma femme Salma à qui je dois tout depuis ces sept dernières années, sans elle la réalisation de ce travail n'aurait pas été possible, donc merci ma chérie pour ton soutien, tes encouragements lorsque le moral n'était pas au rendez-vous, et toutes les choses dont tu m'as allégé en prenant le relais pour que je sois le plus disponible possible pour ce travail. Je te dois beaucoup, les mots n'exprimeront jamais assez ce que tu représentes pour moi.

Table des matières

1	Introduction et contexte de l'étude	1
1.1	Introduction	2
1.2	Bilan énergétique mondial	4
1.3	Rappel historique	5
1.4	Problématique "Environnement/Energie"	5
1.4.1	Introduction	5
1.4.2	Fréquence des pollutions en eaux continentales	7
1.4.3	Les principaux types de produits accidentellement déversés	7
1.4.4	Principales causes des pollutions	9
1.5	L'importance de la qualité de l'eau	10
1.5.1	La toxicité des hydrocarbures	10
1.5.2	Toxicité des Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques	12
1.6	Conclusions	14
2	Etat de l'art	17
2.1	Introduction	18
2.2	Généralités sur les hydrocarbures	18
2.2.1	Le pétrole et les produits pétroliers	18
2.2.2	Caractéristiques physiques essentielles	19
2.3	Les différentes approches de modélisation de dérive de nappe d'hydrocarbures	20
2.3.1	Les différents types de modèles hydrodynamiques	21
2.3.2	L'approche Eulérienne	22
2.3.3	L'approche Lagrangienne	22
2.3.4	Approche hybride	23
2.4	Présentation des différents processus mis en jeu lors d'une pollution	24
2.4.1	Transport de la nappe d'hydrocarbures	25
2.4.2	Processus de vieillissement des hydrocarbures	26
2.4.3	Processus particuliers aux modèles de pollutions en eaux continentales	37
2.5	Conclusion	43

3	Le système de modélisation TELEMAC	47
3.1	Introduction	48
3.2	Présentation du système hydro-informatique TELEMAC	48
3.3	Les équations de l'hydrodynamique à surface libre	49
3.3.1	Les équations de Navier-Stokes	49
3.3.2	Les équations de Saint-Venant	52
3.3.3	Equation du traceur en 2D et 3D	55
3.4	Lois de fermeture	55
3.4.1	Modèle de turbulence $k - \epsilon$	55
3.4.2	Frottement au fond du domaine	59
3.5	Discussion des méthodes de résolution	60
3.5.1	Méthode des caractéristiques	60
3.6	Conclusion	64
4	Modèle numérique de dérive de nappe d'hydrocarbures dans les eaux conti-	67
	nentales	
4.1	Introduction	68
4.2	Présentation du modèle conceptuel	68
4.3	Transport des particules composant la nappe d'hydrocarbures en surface . . .	69
4.3.1	Convection de la nappe en surface	69
4.3.2	La diffusion stochastique	75
4.4	Processus de vieillissement	79
4.4.1	Etalement	79
4.4.2	Evaporation	84
4.4.3	Dissolution	90
4.5	Processus spécifiques aux eaux continentales	94
4.5.1	Echouage et relargage	94
4.5.2	La volatilisation	97
4.6	Conclusion	98
5	Caractérisation des hydrocarbures et expérimentations en canal d'essais	101
5.1	Introduction	102
5.2	Caractérisation des hydrocarbures	103
5.2.1	Teneur en hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP)	103
5.2.2	Courbes de distillation	103
5.2.3	Essais statiques à l'échelle du laboratoire	105
5.3	Mise en donnée du modèle numérique	106
5.3.1	Composition de la nappe d'hydrocarbures	106
5.3.2	Détermination des coefficients de transfert de masse de la dissolution et de la volatilisation	109
5.4	Expérimentations en canal d'essais	111
5.4.1	Les essais à l'échelle "polludrome"	111

5.4.2	Les essais en rivière artificielle	114
5.5	Conclusion	117
6	Vérification et validation du modèle numérique 2D	119
6.1	Introduction	120
6.2	Vérification du transport de nappe d'hydrocarbures	120
6.2.1	Cas théorique avec solution analytique	120
6.2.2	Convection : cas de l'accident de l'Erika	121
6.3	Vérification des processus de vieillissement de la nappe d'hydrocarbures	127
6.3.1	L'étalement	127
6.3.2	Evaporation	129
6.3.3	La dissolution	130
6.4	Simulation des essais effectués en canal	131
6.4.1	Les essais en rivière artificielle	132
6.4.2	Les essais du polludrome	136
6.4.3	Discussion	140
6.5	Conclusion	141
7	Modèle 3D de dérive de nappe d'hydrocarbures appliqué à l'accident de l'«Happy Bride»	145
7.1	Introduction	146
7.2	Modèle hydraulique 3D de l'estuaire de la Loire	146
7.2.1	Présentation du modèle	147
7.2.2	Calibration	148
7.2.3	Résultats numériques	151
7.3	Accident du Happy Bride	152
7.3.1	Description de l'accident	152
7.3.2	Observation de la pollution	152
7.3.3	Modélisation de l'accident	153
7.4	Conclusion	160
8	Conclusion et perspectives	163
8.1	Conclusion	164
8.2	Perspectives	166
8.2.1	Perspectives d'amélioration du modèle existant	166
8.2.2	Perspectives opérationnelles	167
8.2.3	Perspectives offertes par le système TELEMAC	168
A	Publications et communications durant la thèse	iii
B	Introduction aux méthodes stochastiques	vii
B.1	Equation maîtresse et équation de Fokker-Planck	vii
B.1.1	Probabilité absolue et conditionnelle	vii

Table des matières

B.1.2	Processus de Markov	ix
B.2	Equation maîtresse	ix
B.2.1	Equation de Fokker Planck	xi
B.3	Lien entre les équations de Langevin et de Fokker Planck	xiii
C	Capacité de retenue de l'hydrocarbure issu des marées noires	xvii
D	Modèle d'étalement de Maroihi <i>et al.</i> (1992)	xxi
D.1	Mise en équation	xxi
D.2	Résolution	xxii
D.2.1	Résolution de l'équation (D.10.1)	xxiii
D.2.2	Résolution de l'équation (D.10.2)	xxiii
E	Article soumis au <i>Journal of Hydraulic Research</i>	xxv
	Références	xli

Table des figures

1.1	Situation de la thèse au sein du projet	3
1.2	Consommation mondiale d'énergie primaire en Mtep (Méga tonne équivalent pétrole) au cours des années 1999 et 2009 (Source : BP Statistical Review of World Energy (BP, 2010))	5
1.3	Evolution pluriannuelle du nombre de déversements recensés (quantité > 7 tonnes, tous produits confondus) en eaux continentales et estuariennes dans la période 2005-2009 (Gouriou, 2012)	7
1.4	Quantités (tonnes) déversées par catégories de polluants, suite aux accidents significatifs (ampleur > 7 tonnes et suffisamment renseignés) identifiés en eaux continentales et estuariennes en Europe au cours de la période 2005-2009 (Gouriou, 2012)	8
1.5	Fréquence (%), par type d'hydrocarbures, des événements de déversements accidentels significatifs (ampleur > 7 tonnes, suffisamment renseignés) ayant entraîné une pollution d'eaux continentales ou estuariennes en Europe, pour la période 2005-2009 (Gouriou, 2012)	9
1.6	Fréquence (%), par type de cause, (a) des événements de déversements accidentels significatifs (ampleur > 7 tonnes, suffisamment renseignés) et (b) des quantités d'hydrocarbures déversées en eaux continentales ou estuariennes en Europe, pour la période 2005-2009 (Gouriou, 2012)	10
1.7	Classement des hydrocarbures selon leur structure (Gomez, 2010) (en fond bleu les hydrocarbures toxiques et en fond blanc les non toxiques)	11
2.1	Processus de vieillissement d'une nappe d'hydrocarbures (CEDRE, 2009) . .	25
2.2	Profil d'étalement d'une nappe d'hydrocarbures (Lehr et Simecek-Beatty, 2000)	28
2.3	Nappe émulsionnée (CEDRE, 2009)	35
2.4	Processus de vieillissement et de transport des hydrocarbures à la surface de l'eau (Danchuk, 2009)	37
3.1	Le système hydro-informatique TELEMAT (Hervouet, 2001)	48
3.2	Méthode des caractéristiques	62

Table des figures

3.3	Point M au sein de son élément	62
3.4	Représentation de la coordonnée barycentrique du nœud i	63
3.5	Organigramme du code de calcul	65
4.1	Processus de transport et de vieillissement de la nappe d'hydrocarbures . . .	69
4.2	Ecoulement à surface libre sur un fond rugueux	70
4.3	Champ de force s'exerçant sur le flotteur	74
4.4	Déplacement d'un amas de particules soumises à un champ convecteur (à gauche) et soumises à un champ convecteur et diffusif (à droite)	76
4.5	Forces agissant lors de l'étalement d'une nappe d'hydrocarbures	80
4.6	Modèle du film de Whitman	85
4.7	Equilibre thermodynamique entre deux phases	88
4.8	Répartition des caractéristiques de la particule sur les nœuds du maillage . .	92
4.9	Surface du nœud du maillage	93
4.10	Schéma d'une nappe d'hydrocarbures échouée sur une berge	95
5.1	Teneur en HAP des produits pétroliers testés	104
5.2	Courbes de distillation des produits pétroliers testés	104
5.3	Essais cinétiques préalables	105
5.4	Cinétique de la somme des HAP dans le fioul lourd	106
5.5	Découpage de la courbe de distillation du fioul lourd (courbe rouge : caractérisation des pseudo-composés, courbe grise : courbe de distillation du fioul lourd)	108
5.6	Interpolation des composés Naphtalènes	110
5.7	Schéma du polludrome	112
5.8	Observation de la nappe d'hydrocarbures à la surface du polludrome	113
5.9	Dispositif de la rivière artificielle	115
5.10	(a) Sonde HAP fluorométrique et (b) Système de prélèvement mis en place dans la rivière artificielle	116
5.11	Observation de la nappe d'hydrocarbures à la surface de la rivière artificielle, sans obstacle (a) et avec obstacles (b)	116
5.12	Processus d'obtention des résultats	117
6.1	Comparaison des concentrations normalisées suivant la direction x_1	121
6.2	Naufrage de l'Erika (source : Marine nationale)	123
6.3	Dérive des nappes en mer et situation au 31 décembre	124
6.4	Intervalle de confiance de la trajectoire moyenne en fonction du nombre de particules	126
6.5	Résultats de simulation de l'Erika pour 1000 particules	126
6.6	Comparaison entre les temps simulés et observés	127
6.7	Evolution de la surface du fioul lourd ("fuel #6")	128
6.8	Evaporation du gasoil lors de l'expérimentation de Mackay et Matsugu (1973) .	129

6.9	Evaporation du fioul lourd (IFO 300)	130
6.10	Comparaison des évolutions temporelles de la concentration calculée numériquement et analytiquement	131
6.11	Simulation d'une pollution dans la rivière artificielle (a) hauteur d'eau dans le modèle et (b) maillage non structuré	132
6.12	Simulation du déversement de kérosène dans la rivière artificielle à différents instants	133
6.13	Evolution de la concentration du kérosène dans la colonne d'eau	134
6.14	Concentration du fioul lourd dissous dans la colonne d'eau ("—" résultats expérimentaux, "- -" résultats numériques)	135
6.15	Concentration du fioul domestique dissous dans la colonne d'eau ("—" résultats expérimentaux, "- -" résultats numériques)	135
6.16	Configuration du polludrome	137
6.17	Evolution de la concentration du fioul lourd dans la colonne d'eau	137
6.18	Evolution de la concentration du gasoil dans la colonne d'eau du polludrome pour un déversement de 10 ml ("●" résultats expérimentaux, "—" 1 ^{er} groupe de HAP, "—" 2 ^{ème} groupe de HAP, "—" 3 ^{ème} groupe de HAP, "—" 4 ^{ème} groupe de HAP, "—" somme des HAP)	138
6.19	Evolution de la concentration du gasoil dans la colonne d'eau du polludrome pour un déversement de 200 ml ("●" résultats expérimentaux, "—" 1 ^{er} groupe de HAP, "—" 2 ^{ème} groupe de HAP, "—" 3 ^{ème} groupe de HAP, "—" 4 ^{ème} groupe de HAP, "—" somme des HAP)	139
6.20	Evolution de la concentration du fioul domestique dans la colonne d'eau	139
7.1	Maillage tridimensionnel de l'estuaire de la Loire	147
7.2	Comparaison du niveau d'eau entre les mesures et le modèle au niveau de Saint-Nazaire et Nantes pendant une période d'inondation (du 1 ^{er} au 15 mars 2007)("—" niveau moyen de la mer, "—" mesure, "—" niveau d'eau simulé, "—" débit amont)	149
7.3	Variation en temps de la salinité à Montoir durant une période de crue (janvier 2004) et une période de faible écoulement (octobre 2000)("—" mesure surface, "—" mesure fond, "—" modèle surface, "—" modèle fond, "—" débit, "—" PM Saint-Nazaire, "—" BM Saint-Nazaire)	150
7.4	Résultat de simulation de l'estuaire de la Loire	151
7.5	Dommages du Happy Bride après l'abordage	152
7.6	Bilan des observations en mer du 05/01/06 et prévision de dérive de MOTHY sur 48 heures	153
7.7	Bilan des observations en mer et des simulations du 05/01/06 ("—" observation à terre, "—" observation en milieu aquatique, "●" nappe simulée à 17h, "●" hydrocarbure échoué, "●" nappe simulée à 11h)	155

Table des figures

7.8	Bilan des observations en mer et des simulations du 06/01/06 (“—” observation à terre, “—” observation en milieu aquatique à 10h20, “—” observation en milieu aquatique à 17h, “●” nappe simulée à 10h20), “●” hydrocarbure échoué, “●” nappe simulée à 17h	156
7.9	Bilan des observations en mer et des simulations du 07/01/06 (“—” observation à terre, “●” nappe simulée à 17h, “●” nappe simulée à 11h), “●” hydrocarbure échoué	157
7.10	Bilan des prélèvements HAP lors de la pollution (source : IFREMER (http://www.ifremer.fr/envlit/))	158
7.11	Evolution de la concentration d’hydrocarbures dissous dans la colonne d’eau lors de la pollution du Happy Bride, (a) le 5 janvier et (b) le 11 janvier 2006	159
8.1	Fenêtres de visualisation de l’interface	168
C.1	Schéma d’un volume cubique de sédiments mazoutés	xviii

Liste des tableaux

1.1	Classement des substances polluantes selon la Directive Cadre sur l'Eau	12
1.2	Classification du caractère cancérigène des HAP (Lafon et al., 2000)	13
2.1	Tableau récapitulatif des propriétés des hydrocarbures (CEDRE, 2009)	19
2.2	Phases d'étalement d'un hydrocarbure (Fay, 1971)	27
2.3	Coefficient d'amplification de la solubilité (Mackay et Leinonen, 1977)	32
2.4	Capacité de tenue du pétrole sur différents types de berges, extrapolée des travaux de Cheng et Gundlach (Schmidt Etkin et al., 2007)	39
3.1	Constantes du modèle $k-\varepsilon$	58
4.1	Constantes d'étalement selon Fay (1971)	82
4.2	Constante de Fishtine pour les hydrocarbures (Boethling et al., 2000)	90
4.3	Taux de relargage du pétrole en fonction du type de berges	96
5.1	Liste des composés HAP analysés	102
5.2	Caractérisation des pseudo-composés	108
5.3	Coefficient de transfert de masse du Naphtalène et de ses dérivés	110
5.4	Teneur en HAP (somme des 43 composés) en $\mu g/l$	113
6.1	Caractéristiques du fioul de l'Erika (source : TotalFina)	122
6.2	Propriétés physiques des hydrocarbures utilisés dans le projet MIGR'HYCAR	131
6.3	Sensibilité du modèle numérique par rapport aux diverses données d'entrée .	136
C.1	Données recueillies lors de la marée noire de l'Exxon Valdez (1989) (Schmidt Etkin et al., 2007)	xvii
C.2	Données déduites des informations recueillies lors de la marée noire de l'Exxon Valdez (1989) : volume d'hydrocarbure infiltré dans le substrat par unité de surface (Schmidt Etkin et al., 2007)	xix

Nomenclature

Symboles latins

A_{berge}	$[m^2]$	Surface de la berge
A_o	$[m^2]$	Aire de la nappe d'hydrocarbure
C	$[kg.m^{-3}]$	Concentration du polluant
C_D	$[1]$	Coefficient de traînée
C_f	$[1]$	Coefficient de frottement adimensionnel
C_h	$[m^{\frac{1}{2}}.s^{-1}]$	Coefficient de Chézy
C_s	$[kg.m^{-3}]$	Concentration en sédiment
C_{wi}	$[kg.m^{-3}]$	Concentration du composé i dans l'eau
D_p	$[m]$	Profondeur d'infiltration de l'hydrocarbure dans le substrat
e	$[m]$	Epaisseur de la nappe
E	$[1]$	Fraction de pétrole contenue dans l'agrégat
F_{evap}	$[1]$	Fraction évaporée
F_E	$[mol.m^{-2}.s^{-1}]$	Flux de matière s'évaporant
F_{Di}	$[kg.m^{-2}.s^{-1}]$	Flux de matière dissoute
F_{Vi}	$[kg.m^{-2}.s^{-1}]$	Flux de matière dissoute se volatilisant
g	$[m.s^{-2}]$	Gravité
G	$[J]$	Enthalpie libre ou Energie de Gibbs
h	$[m]$	Profondeur de l'écoulement
H	$[1]$	Constante de la loi de Henry
H_{vap}	$[J.mol^{-1}]$	Enthalpie de vaporisation
H_w	$[m]$	Hauteur de la vague
k	$[m^2.s^{-2}]$	Energie cinétique turbulente
k_s	$[m]$	Taille des aspérités
K	$[m^{\frac{1}{3}}.s^{-1}]$	Coefficient de frottement de Strickler
K_c	$[m^2.s^{-1}]$	Coefficient de diffusion du traceur
K_{diss}	$[m.s^{-1}]$	Coefficient de transfert de masse de la dissolution
K_m	$[m^2.s^{-1}]$	Coefficient de diffusion moléculaire
K_{evap}	$[m.s^{-1}]$	Coefficient de transfert de masse global de l'évaporation

Nomenclature

K_h	$[m^2.s^{-1}]$	Coefficient de diffusion turbulente horizontale
K_t	$[m^2.s^{-1}]$	Coefficient de diffusion turbulente
K_{vol}	$[m.s^{-1}]$	Coefficient de transfert de masse de la volatilisation
K_z	$[m^2.s^{-1}]$	Coefficient de diffusion turbulente verticale
L_s	$[m]$	Largeur de la zone d'échouage de la vague
L_t	$[m]$	Taille d'un tourbillon
m	$[kg]$	Masse de la nappe d'hydrocarbures
m_i	$[kg]$	Masse du composé i
m_o	$[kg]$	Masse de la nappe en surface
M^*	$[kg]$	Capacité de retenue de l'hydrocarbure sur une berge
M_{wi}	$[g.mol^{-1}]$	Masse molaire du composé i
M_{wo}^l	$[g.mol^{-1}]$	Masse molaire moyenne de la nappe d'hydrocarbures
M_s	$[kg]$	Masse de pétrole dans la nappe de surface
M_e	$[kg]$	Masse de pétrole dans la colonne d'eau
P	$[Pa]$	Pression
P_i	$[Pa]$	Pression de vapeur saturante du composé i
$P_{refloat}$	$[1]$	Probabilité de remise à l'eau
P_{rt}	$[1]$	Nombre de Prandtl
R	$[m]$	Rayon de la nappe
R_{ij}	$[m^2.s^{-2}]$	Contrainte de Reynolds
S_c	$[m^2]$	Surface frontale de prise à l'eau
S_i	$[kg.m^{-3}]$	Solubilité du composé i de la nappe d'hydrocarbure
S_o	$[kg.m^{-3}]$	Solubilité moyenne de l'hydrocarbure
S_t	$[m^2]$	Aire de la zone d'échouage des vagues
S_w	$[m^2]$	Surface frontale de prise à l'air
T	$[K]$	Température de l'eau
T_{amb}	$[K]$	Température ambiante
T_B	$[K]$	Température d'ébullition
u^*	$[m.s^{-1}]$	Vitesse de cisaillement sur le fond
$\vec{U}, \vec{u}$	$[m.s^{-1}]$	Champ de vitesse de l'écoulement en 3D, respectivement 2D
$\vec{U}_c, \vec{u}_c$	$[m.s^{-1}]$	Vitesse du courant en 3D, respectivement 2D
$\vec{U}_{oil}, \vec{u}_{oil}$	$[m.s^{-1}]$	Vitesse de convection de la nappe en surface en 3D, respectivement 2D
$\vec{U}_s$	$[m.s^{-1}]$	Vitesse du courant au niveau de la surface libre
$\vec{U}_w, \vec{u}_w$	$[m.s^{-1}]$	Vitesse du vent 10 m au-dessus de la surface libre en 3D, respectivement 2D
V_0	$[m^3]$	Volume initial de la nappe
V	$[m^3]$	Volume d'hydrocarbure contenu dans la nappe
V^*	$[m^3]$	Volume d'hydrocarbure pouvant s'échouer sur une plage
X_i	$[1]$	Fraction molaire de la substance i dans la nappe
z_0	$[m]$	Couche limite
Z_s	$[m]$	Cote en surface
Z_f	$[m]$	Cote au fond du domaine

Symboles grecs

$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$	[1]	Coordonnées barycentriques
β	[1]	Coefficient d'influence du vent au niveau de la surface libre
δt	[s]	Pas de temps
ϵ	$[m^2.s^{-3}]$	Terme de dissipation d'énergie du mouvement turbulent
κ	[1]	Constante de Karman égale à 0,41
μ, μ_e	$[kg.m^{-1}.s^{-1}]$	Coefficient de viscosité dynamique de l'eau
ν, ν_e	$[m^2.s^{-1}]$	Coefficient de viscosité cinématique de l'eau
ν_o	$[m^2.s^{-1}]$	Coefficient de viscosité cinématique de l'hydrocarbure
ν_{wg}	$[m^3.mol^{-1}]$	Volume molaire du gaz
ν_t	$[m^2.s^{-1}]$	Viscosité cinématique turbulente
ν_{td}	$[m^2.s^{-1}]$	Viscosité cinématique incluant la turbulence et la dispersion
ρ_o	$[kg.m^{-3}]$	Masse volumique de l'hydrocarbure
ρ_a	$[kg.m^{-3}]$	Masse volumique de l'air
ρ, ρ_e	$[kg.m^{-3}]$	Masse volumique de l'eau
ρ_s	$[kg.m^{-3}]$	Masse volumique des sédiments
σ_c	[1]	Nombre de Schmidt
σ_{ea}	$[N.m^{-1}]$	Force de tension superficielle à l'interface eau/air
σ_{oa}	$[N.m^{-1}]$	Force de tension superficielle à l'interface pétrole/air
σ_{oe}	$[N.m^{-1}]$	Force de tension superficielle à l'interface pétrole/eau
$\vec{\tau}_b$	$[N.m^{-2}]$	Contrainte de frottement au fond du domaine
τ_g	[s]	Temps caractéristique des grands tourbillons de turbulence
τ_p	[s]	Temps caractéristique des petits tourbillons de turbulence
$\vec{\tau}_v$	$[N.m^{-2}]$	Contrainte de cisaillement exercée par l'eau sur la nappe
$\vec{\tau}_w$	$[N.m^{-2}]$	Contrainte du vent exercée sur la nappe

Notations

∇	[−]	Opérateur gradient
$\nabla \cdot$	[−]	Opérateur divergent
$\otimes$	[−]	Produit entre deux tenseurs d'ordre 1
t	[−]	Opérateur de transposition

Chapitre

1

Introduction et contexte de l'étude

Sommaire

1.1	Introduction	2
1.2	Bilan énergétique mondial	4
1.3	Rappel historique	5
1.4	Problématique “Environnement/Energie”	5
1.5	L'importance de la qualité de l'eau	10
1.6	Conclusions	14

1.1 Introduction

L'application de la Directive Cadre sur l'Eau (DCE) et l'obligation de surveillance pour la consommation humaine et les activités récréatives ou industrielles, telles que la production d'eau potable par exemple, entraînent une forte demande pour des systèmes d'évaluation et de suivi de la qualité de l'eau. Pour de grands accidents d'origine pétrolière, se produisant principalement en milieu océanique ou côtier, des moyens importants de suivi et de gestion de la crise sont à présent rapidement mis en place. En effet, ceux-ci bénéficient de la pression du grand public résultant de l'impact médiatique des grands événements et leurs conséquences majeures tels que les catastrophes de l'Exxon Valdez (1989) ou plus récemment de la plateforme pétrolière Deepwater Horizon (2011). La gestion des accidents de moindre importance, bien que beaucoup plus nombreux, est toujours assurée par des moyens limités, notamment en ce qui concerne les événements de pollution des eaux continentales. Pourtant, les pollutions accidentelles impliquant des hydrocarbures représentent environ 50% des événements (Bonnemains et al., 2011).

Jusqu'à présent, les autorités chargées de prendre des mesures de protection sanitaire ou économique face à ces déversements d'hydrocarbures en rivière ne disposent que très rarement d'outils d'aide à la décision performants et adaptés aux interventions opérationnelles. C'est donc pour répondre à un besoin opérationnel et à ce défaut d'outils que s'inscrit le projet MIGR'HYCAR (Gestion opérationnelle des risques liés aux migrations de nappes d'hydrocarbures dans les eaux continentales), supporté financièrement par l'Agence Nationale pour la Recherche (ANR) dans le cadre du programme PRECODD 2008, dont les partenaires sont les suivants : ARTELIA (anciennement SOGREAH), Veolia Environnement Recherche et Innovation (VERI), le Laboratoire de Chimie Agroindustrielle (LCA), le Laboratoire d'Hydraulique Saint-Venant (LHSV), le CEntre de Documentation, de Recherche et d'Expérimentations sur les pollutions accidentelles des eaux (CEDRE), EDF et TOTAL.

Les objectifs de ce projet sont :

- fournir une base de données sur le comportement physico-chimique des hydrocarbures,
- créer un outil numérique déterministe de suivi de nappe d'hydrocarbures,
- créer un logiciel opérationnel d'aide à la décision et à la gestion de la ressource en eau en situation de crise.

La thèse présentée dans ce mémoire s'inscrit dans le cadre de ce projet et a pour but le développement d'un outil de modélisation permettant la simulation de la migration des nappes d'hydrocarbures en eaux continentales et estuariennes. Cet outil, lié à une base de données de caractérisation physico-chimique des hydrocarbures, est destiné à une utilisation opérationnelle (cf. figure 1.1).

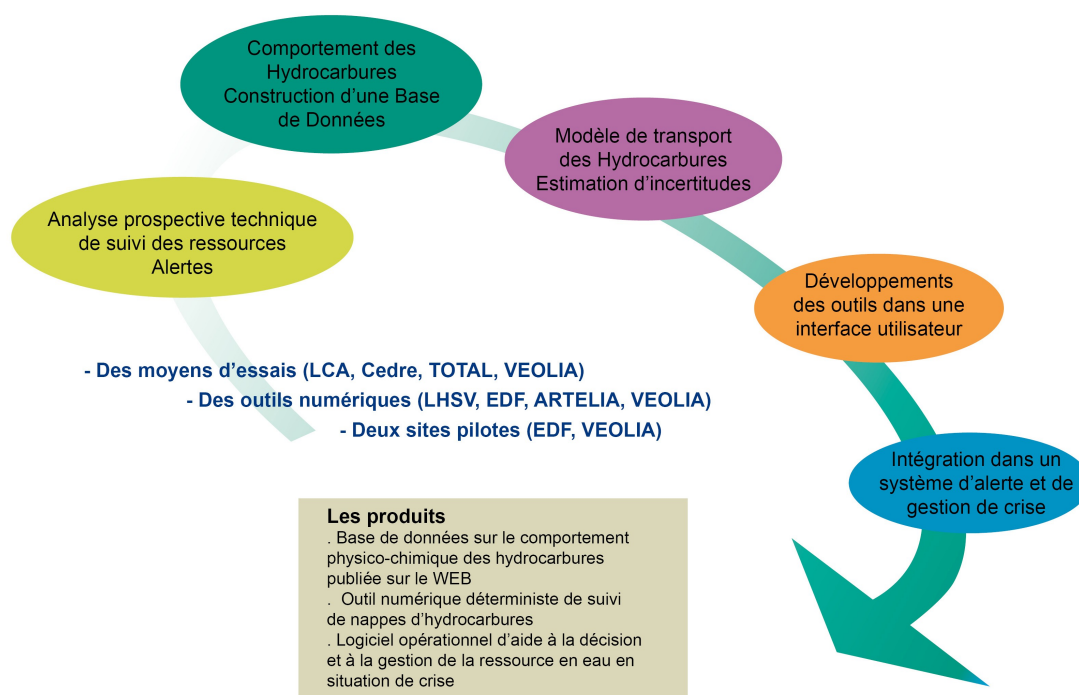


Figure 1.1: *Situation de la thèse au sein du projet*

La structure du mémoire est la suivante :

Le contexte de l'étude est présenté ci-après, au sein du premier chapitre, dans les paragraphes 1.2 à 1.5.

Dans le deuxième chapitre, une revue bibliographique est présentée. Celle-ci donne tout d'abord des généralités sur les hydrocarbures puis fait un état de l'art de la connaissance des processus physiques mis en jeu lors d'une pollution, ainsi que les méthodes de modélisation utilisées pour le suivi des dérives d'hydrocarbures.

Dans le troisième chapitre, le code de calcul TELEMAC est présenté. En effet, afin de prévoir le comportement du pétrole déversé, à court et à moyen termes, un outil de modélisation prédictif est développé dans ce code de calcul.

Le quatrième chapitre présente le modèle conceptuel pour la modélisation de la dérive de nappe d'hydrocarbures dans les eaux continentales. En deuxième partie de ce chapitre, les processus physiques développés dans le code de calcul et le travail effectué afin d'établir les lois régissant ces phénomènes sont développés.

Le cinquième chapitre décrit les expérimentations réalisées dans le cadre du projet MIGR'HYCAR afin de mieux connaître le comportement des hydrocarbures dans les eaux continentales. Plusieurs dispositifs expérimentaux d'échelles différentes ont été utilisés :

- En laboratoire, les cinétiques de différents hydrocarbures ont été réalisées. Ces cinétiques ont permis la calibration du modèle numérique.
- En canal d'essais, des expériences sur le comportement des hydrocarbures dans les eaux de surface ont été menées d'une part sur le site de l'agence fédérale allemande

de l'environnement (UBA) à Berlin et d'autre part sur le site du CEDRE dans le "polludrome". Ces essais sont utilisés pour la validation du code de calcul.

Dans le chapitre suivant (chapitre 6), différents cas tests sont établis afin de valider les modèles numériques présentés dans le quatrième chapitre. Chacun des algorithmes développés dans le code de calcul est vérifié de manière indépendante grâce à des cas tests issus de la littérature, à des formules analytiques, et aux expérimentations énoncées dans le cinquième chapitre.

Le septième chapitre présente l'application du modèle de dérive de nappe d'hydrocarbures à un accident réel. Le cas d'étude retenu est celui de la collision, en janvier 2006, entre le pétrolier Happy Bride et le butanier Sigmagas dans l'estuaire de la Loire, à proximité des appointements de la raffinerie de Donges, qui avait entraîné le déversement dans l'eau de 60 tonnes de fioul lourd.

1.2 Bilan énergétique mondial

La plupart des activités humaines modernes reposent sur une source d'énergie et une forte inégalité subsiste entre les pays riches et les pays moins développés. Aujourd'hui, la moitié de l'énergie produite mondialement est consommée par 15% de la population. Les réserves d'énergies fossiles (charbon, gaz naturel et pétrole) sont inégalement réparties, permettant ainsi à un nombre très limité de pays de tirer avantage de leurs abondantes richesses naturelles. Cette production leur permet de se développer et ils accroissent par conséquent eux aussi leur consommation. La demande d'énergie progresse ainsi rapidement dans le monde, plus particulièrement en Asie, au Moyen-Orient et en Afrique. La figure 1.2 illustre ces différences. Entre 1999 et 2009, la consommation mondiale d'énergie a progressé de 23,6% (Mons, 2011).

Selon Bocard (2006), *"cette croissance des besoins énergétiques de la planète fera que le pétrole, dont les réserves prouvées s'élèvent à plus de 140 milliards de tonnes (sans compter les réserves probables), restera une source d'énergie dans les 50 ans à venir"*.

Par ailleurs, la croissance des besoins énergétiques, et en conséquence l'augmentation de la consommation de pétrole, s'explique par :

- La croissance démographique qui perdure. Aujourd'hui, la population mondiale s'élève à 7 milliards d'individus, et on estime qu'elle pourrait atteindre 9 milliards de personnes entre 2020 et 2050.
- La montée en puissance des pays émergents, tels que la Chine et l'Inde, dont le développement économique s'accompagne notamment de fortes consommations de pétrole. Rappelons que la population de l'Inde et de la Chine réunie représente environ un quart de la population mondiale.
- La mondialisation du commerce et de l'économie engendre une expansion du secteur des transports. Ils représentent actuellement 50% de la consommation de pétrole.

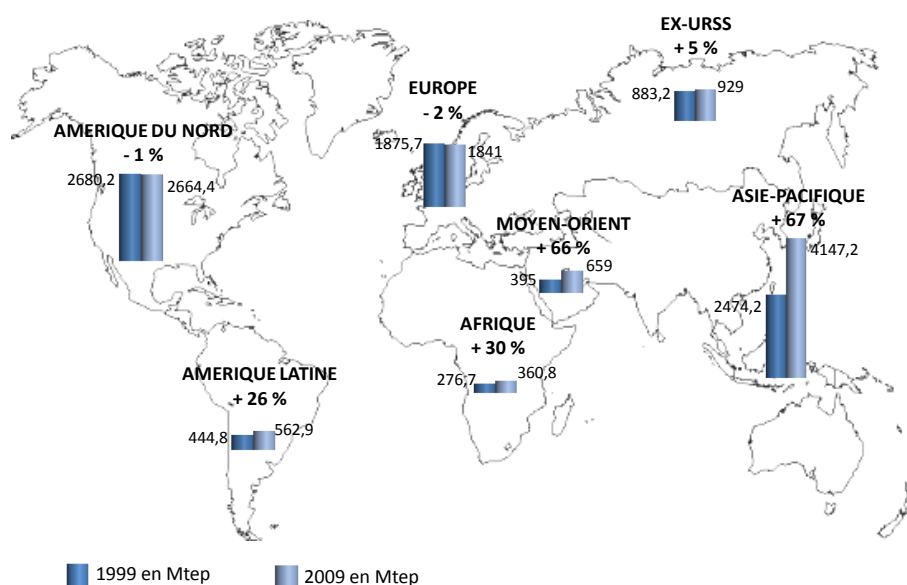


Figure 1.2: Consommation mondiale d'énergie primaire en Mtep (Méga tonne équivalent pétrole) au cours des années 1999 et 2009 (Source : BP Statistical Review of World Energy (BP, 2010))

1.3 Rappel historique

L'histoire du pétrole, aussi dit "l'or noir", a débuté en 1859 en Pennsylvanie (États-Unis) où le premier forage a été effectué. C'est onze ans plus tard que la première compagnie pétrolière "Standard Oil" voit le jour sur l'initiative de John D. Rockefeller. Cette compagnie sera démantelée afin de favoriser la concurrence. De ce démantèlement résulteront notamment les compagnies Exxon, Mobil, Chevron. Les premières compagnies européennes voient le jour au début du XX^e siècle. L'industrie du pétrole connaîtra un essor majeur avec l'expansion de l'automobile. Aujourd'hui, le pétrole est l'énergie fossile la plus consommée au monde. Le nombre de forages de puits de pétrole ne cesse d'augmenter avec 119 400 nouveaux puits forés en 2011 soit une hausse de 17% par rapport à l'année précédente. 68% des réserves sont sous le contrôle des dix plus grandes compagnies pétrolières. Le lecteur intéressé pourra se reporter à l'ouvrage intitulé "*Les enjeux de l'énergie*" (Mons, 2011).

1.4 Problématique "Environnement/Energie"

1.4.1 Introduction

L'importance du trafic des navires pétroliers et la multiplication des puits de forages offshore augmentent les risques de pollution accidentelle du milieu aquatique par des hydrocarbures. L'évolution des risques de déversements d'hydrocarbures en mer est un sujet de

grande polémique. Dans ce domaine, l'opinion du grand public résulte de l'impact médiatique des grands événements et leurs conséquences majeures telles que les catastrophes de "l'Exxon Valdez" en 1989 ou plus récemment de la plateforme pétrolière "Deepwater Horizon" de laquelle se sont écoulées environ 560 000 tonnes d'hydrocarbures souillant le golfe du Mexique en 2010.

Par ailleurs, l'environnement marin n'est pas le seul touché par les problèmes de marées noires. Les événements de pollution en eaux continentales impliquant des hydrocarbures représentent de l'ordre de 50% des événements. En France, environ 50 pollutions d'hydrocarbures ont lieu chaque année sur les trois grandes rivières d'Ile de France (Bonnemains et al., 2011). Que ce soit à l'échelle européenne ou mondiale, les déversements accidentels en eaux continentales sont plus mal renseignés qu'en eaux marines. Cette section présente une étude statistique des déversements d'hydrocarbures dans les eaux continentales. Cette étude prospective dédiée aux pollutions aux hydrocarbures dans les eaux continentales est issue du projet MIGR'HYCAR de l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) (Gouriou, 2012). Elle est complétée par la synthèse menée par l'association Robin des bois (Bonnemains et al., 2011).

Dans le cadre de ses activités, le CEDRE a réalisé une base de données relatives aux accidents survenus dans le monde depuis 1997, en milieu marin et dans les eaux douces - continentales et estuariennes. S'agissant des accidents dans les eaux continentales, cette partie ne présente que l'étude statistique des accidents survenus dans les années 2005 à 2009. Par ailleurs, les statistiques présentées doivent être nuancées du fait que les informations relatives aux déversements accidentels dans les eaux marines sont plus nombreuses et précises que celles provenant des déversements dans les eaux continentales. Ceci s'explique notamment par :

- le nombre plus élevé de déversements en rivières ou fleuves,
- le caractère généralement mineur de ce type de pollution (volumes bien souvent de l'ordre du mètre cube),
- le faible niveau de détail avec lequel ils sont notifiés,
- le manque de diffusion et de centralisation de ce type de données, ce d'autant plus pour les pollutions mineures.

A fortiori, ces raisons limitent l'analyse des déversements dans les eaux continentales. Aussi, les données retenues pour la présente analyse concernent les incidents pour lesquels les informations sont les plus complètes. Pour ce faire, l'analyse suivante est restreinte aux déversements répondant aux trois critères suivants :

- une ampleur significative, soit des quantités estimées supérieures à environ 7 tonnes (pour un certain nombre d'événements signalés comme conséquents, les volumes déversés ne sont pas toujours connus ou communiqués dans les sources d'informations),
- des renseignements suffisamment exhaustifs (type de produit, structure/source identifiée, etc.),
- événement ayant entraîné une pollution des eaux continentales.

Au vu de ces critères de sélection, l'analyse présentée n'a pas pour but de produire un bilan exhaustif des accidents ou des volumes totaux déversés, mais d'appréhender les différents types de polluants déversés lors d'événements significatifs (à titre d'exemple, les multiples

fuites survenant à partir de cuves à fioul domestique de particuliers, ou encore les rejets de faible ampleur à partir de petites installations (débourbeurs/déshuileurs, etc.), ne figurent pas parmi les incidents ici traités). Pour pallier ce manque de données, l'étude statistique ci-après est complétée par la synthèse menée par l'association Robin des bois (Bonnemains et al., 2011).

1.4.2 Fréquence des pollutions en eaux continentales

A l'échelle mondiale, le nombre annuel d'accidents recensés, de l'ordre d'une trentaine à une quarantaine, est relativement stable. Seule l'année 2008 fait figure d'exception avec une cinquantaine de pollutions identifiées excédant 7 tonnes. Ce même constat est observé à l'échelle européenne avec une moyenne annuelle de 10 déversements significatifs recensés (cf. figure 1.3).

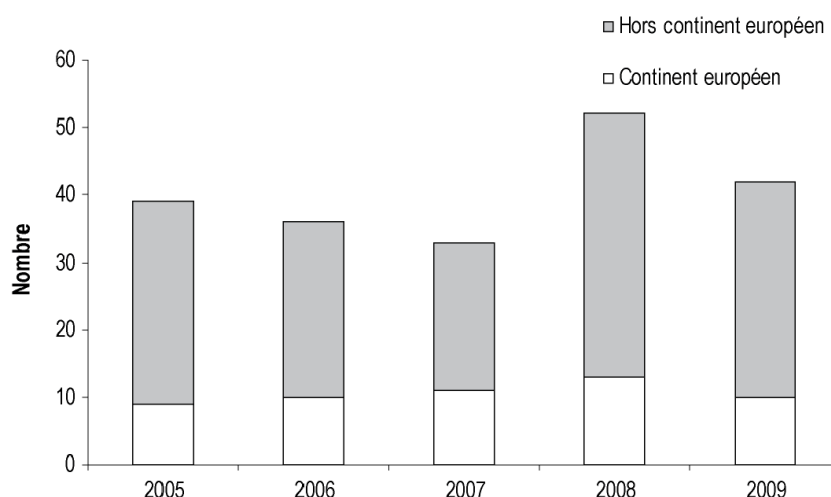


Figure 1.3: Evolution pluriannuelle du nombre de déversements recensés (quantité > 7 tonnes, tous produits confondus) en eaux continentales et estuariennes dans la période 2005-2009 (Gouriou, 2012)

A l'échelle nationale, ce constat doit être nuancé. Selon l'association des Robins des bois (Bonnemains et al., 2011), les pollutions en eaux intérieures sont en pleine croissance. Toutefois, cette différence de constat est liée à “un changement de classement des causes identifiées”. En effet, les pollutions les plus fréquemment impliquées sont des pollutions de plus faible ampleur mais de plus forte fréquence, comme par exemple les accidents de transport impliquant des poids lourds. En fait, ce type d'accident représente la principale cause de pollutions de nos rivières et les pollutions consécutives sont généralement en dessous du seuil de 7 tonnes.

1.4.3 Les principaux types de produits accidentellement déversés

Considérant les volumes annuels déversés accidentellement, les pollutions impliquant des hydrocarbures prédominent nettement. Elles représentent environ 90% des apports annuels de

polluants dans les eaux continentales ou estuariennes, loin devant tous les autres déversements chimiques qui constituent l'autre principale source de pollution (cf. figure 1.4).

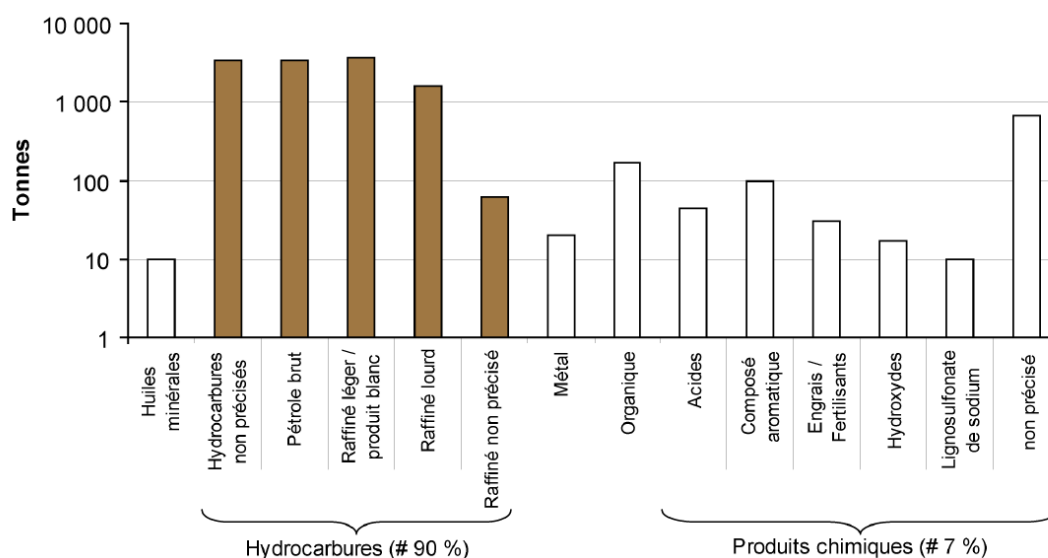


Figure 1.4: Quantités (tonnes) déversées par catégories de polluants, suite aux accidents significatifs (ampleur > 7 tonnes et suffisamment renseignés) identifiés en eaux continentales et estuariennes en Europe au cours de la période 2005-2009 (Gouriou, 2012)

Ces résultats, associés à ceux de la section précédente (cf. section 1.4.2), suggèrent une nette dominance des produits pétroliers par rapport aux autres polluants pour les déversements accidentels survenus au cours des années 2005 à 2009. Ceci confirme, en conséquence, l'importance de la problématique des déversements d'hydrocarbures dans les eaux continentales et estuariennes.

En outre, l'étude statistique montre que les produits pétroliers les plus couramment déversés dans les eaux continentales et estuariennes sont les produits raffinés dits "produits blancs". Ces produits sont impliqués dans 40% des pollutions d'hydrocarbures, avec notamment le gasoil qui à lui seul représente 27% des déversements d'hydrocarbures en eaux continentales. Les produits bruts viennent en deuxième position avec 20% des pollutions. Enfin, les produits raffinés lourds représentent environ 14% des pollutions (cf. figure 1.5).

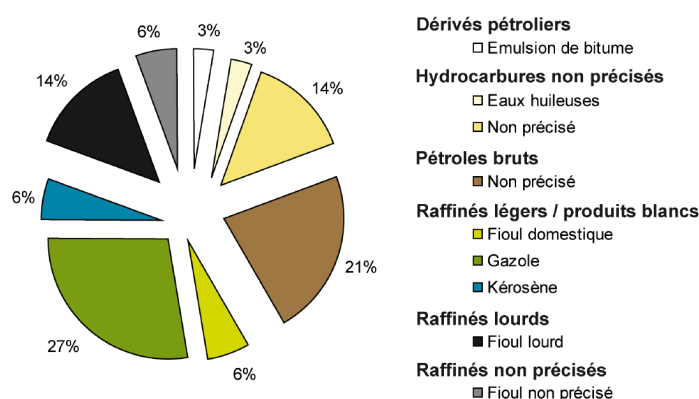


Figure 1.5: Fréquence (%), par type d'hydrocarbures, des événements de déversements accidentels significatifs (ampleur > 7 tonnes, suffisamment renseignés) ayant entraîné une pollution d'eaux continentales ou estuariennes en Europe, pour la période 2005-2009 (Gouriou, 2012)

1.4.4 Principales causes des pollutions

Généralement, les pollutions aux hydrocarbures dans les eaux continentales ont pour origines :

- l'usure des structures (usure, fissure ou corrosion) dans 22% des événements (cf. figure 1.6). L'exemple de l'effondrement d'un bac de stockage d'un dépôt pétrolier à Ambès (Gironde) survenu en 2007 illustre bien ce phénomène.
- le facteur humain, regroupant à la fois les erreurs humaines (erreurs de manipulation ou d'opération) et les actes intentionnels de malveillance, représente 20% des pollutions. La rupture d'un oléoduc russe en 2006 suite à un glissement de terrain provoqué par des travaux de construction illustre bien une erreur humaine. Cet accident a provoqué un déversement de 340 m³ de pétrole brut dans une rivière.
- les collisions de navires sont à l'origine de 14% des pollutions, comme par exemple le cas survenu en France dans l'estuaire de la Loire en janvier 2006, où le pétrolier “Happy Bride” et le butanier “Sigmagas” sont entrés en collision.
- les accidents de la route et notamment ceux impliquant des camions citernes sont impliqués dans 10% des pollutions accidentelles pour des pollutions d'ampleur importante.

S'agissant des déversements de plus faible ampleur, ce constat nécessite d'être nuancé. Selon l'association des Robins des Bois (Bonnemains et al., 2011), ces pollutions sont principalement causées par les accidents de la route impliquant des poids lourds et dans une moindre mesure la vétusté et donc l'usure des installations de type “cuve à fioul” pour le chauffage des particuliers. Le facteur humain intervient en troisième position.

Malgré une différence de hiérarchisation des principales causes de pollutions accidentelles entre les pollutions de grande (> 7 tonnes) et de faible ampleur (< 7 tonnes), les causes principales restent identiques.

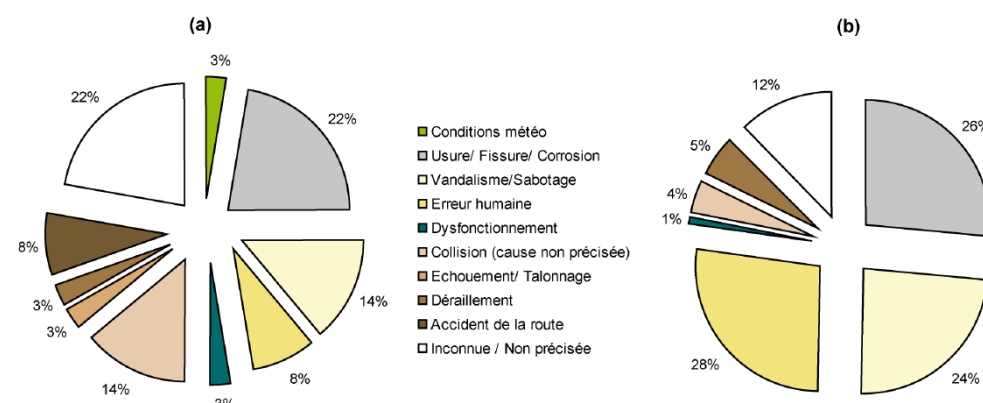


Figure 1.6: Fréquence (%), par type de cause, (a) des événements de déversements accidentels significatifs (ampleur > 7 tonnes, suffisamment renseignés) et (b) des quantités d'hydrocarbures déversées en eaux continentales ou estuariennes en Europe, pour la période 2005-2009 (Gouriou, 2012)

1.5 L'importance de la qualité de l'eau

L'eau est une ressource en partie renouvelable, essentielle au développement de la vie (biodiversité) et donc aux sociétés humaines (alimentation en eau potable et autres usages, sols agricoles et urbains). En France, la législation sur l'eau et les milieux aquatiques figure au Titre 1^{er} du Livre II, articles L 210-1 et suivants du Code de l'environnement. La protection de l'eau y est affirmée et fait l'objet d'une attention particulière : *"l'eau fait partie du patrimoine commun de la nation. Sa protection, sa mise en valeur et le développement de la ressource utilisable, dans le respect des équilibres naturels, sont d'intérêt général. L'usage de l'eau appartient à tous dans le cadre des lois et règlements ainsi que des droits antérieurement établis"* (Article L210-1 du code de l'environnement). Il est nécessaire de la protéger de l'impact des activités humaines en prévenant les pollutions de toutes natures et en restaurant si nécessaire les compartiments pollués, puisque la pollution porte atteinte à sa capacité d'auto-épuration. La difficulté consiste donc à protéger l'eau sans nuire de façon excessive au développement économique lié à l'énergie. Par ailleurs, afin de prévenir les pollutions aux hydrocarbures, il est nécessaire de comprendre comment ils peuvent menacer la qualité de l'eau et la section suivante a pour but de détailler leur toxicité.

1.5.1 La toxicité des hydrocarbures

Les hydrocarbures sont des mélanges complexes de composés chimiques. Leur aspect, leurs caractéristiques physiques ainsi que leur comportement dépendent de leur composition. Les hydrocarbures peuvent être classés selon leur structure (cf. figure 1.7).

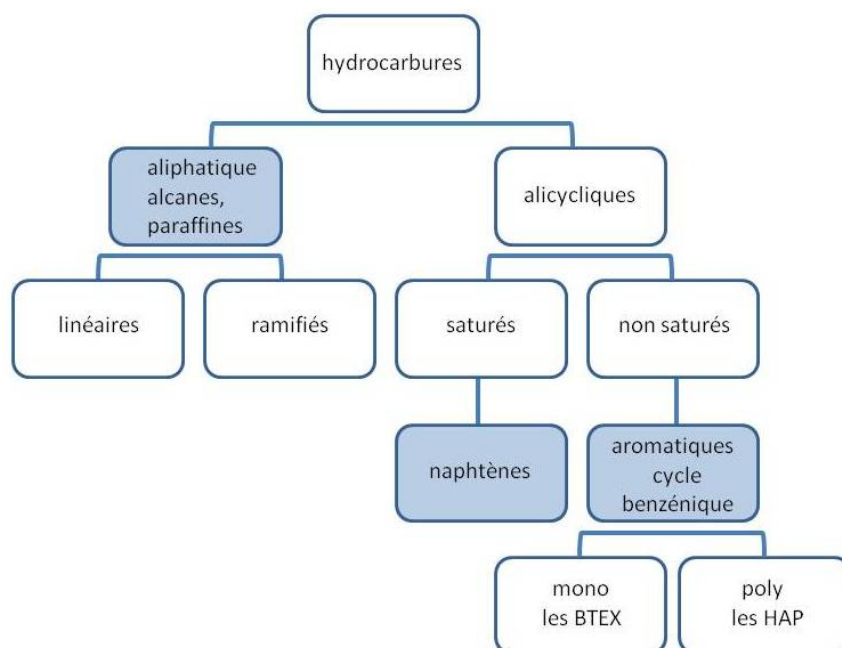


Figure 1.7: Classement des hydrocarbures selon leur structure (Gomez, 2010) (en fond bleu les hydrocarbures toxiques et en fond blanc les non toxiques)

D'après la figure 1.7, tous les hydrocarbures ne sont pas toxiques. Les hydrocarbures aliphatiques et les naphtènes ont un comportement toxique mais avec un effet beaucoup moindre que les composés HAP (hydrocarbures aromatiques polycycliques). Lors de pollutions en eaux continentales, seuls les composés HAP sont susceptibles d'interagir avec l'environnement marin en raison de leur solubilité, contrairement aux composés aliphatiques et aux naphtènes qui sont insolubles. Les hydrocarbures mono-aromatiques (HAM) sont quant à eux des composés plus solubles que les HAP, mais sont aussi des composés extrêmement volatils. Ainsi, lors d'une pollution pétrolière, une grande partie des HAM s'évapore avant même de se dissoudre dans l'eau et, s'ils se retrouvent dans l'eau, ces composés se volatilisent en quelques minutes. Après une pollution, il ne reste donc que quelques traces de ce type de produit dans l'eau. Les HAP sont les composés les plus nocifs pour l'homme. Ces composés sont cancérogènes et sont considérés par la directive cadre sur l'eau (Article 16-2) comme *“des substances dangereuses prioritaires”* (cf. tableau 1.1).

Chapitre 1. Introduction et contexte de l'étude

Substances dangereuses prioritaires	Substances prioritaires	Substances prioritaires en examen pour un éventuel classement "dangereuse prioritaire"
Objectifs : arrêt ou suppression progressive des rejets, émissions et pertes d'ici 2020	Objectifs : réduction progressive des rejets, émissions et pertes d'ici 2020 de manière à respecter les normes de qualité environnementale	
-diphényl'éther bromé	-alachlore	-anthracène
-cadmium et ses composés	-benzène	-atrazine
-C10-13 chloroalcane	-chlorfenvinphos	-chlorpyrifos
-hexachlorobenzène	-1,2 dichloroéthane	-di(2-éthylhexyl)phtalate
-hexochlorobutadiène	-dichloro-méthane	-diuron
-hexachlorocyclohexane	-fluoranthène	-endosulfan
-mercure et ses composés	-nickel et ses composés	-isoproturon
-nonylphénols	-trichlorométhane	-plomb et ses composés
-pentachlorobenzène		-naphthalène
-hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP)		-octylphénols
-composés du tributylétain		-pentachlorophénol
		-simazine
		-trichlorobenzène

Tableau 1.1: *Classement des substances polluantes selon la Directive Cadre sur l'Eau*

1.5.2 Toxicité des Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques

Les HAP sont des molécules organiques associant plusieurs noyaux organiques (entre 2 et 10). Ce sont des produits issus de la combustion incomplète de la matière organique. Les HAP ont un potentiel mutagène et cancérigène important.

La classification des matières prioritaires et dangereuses est faite par différentes agences sanitaires :

- EPA (Environmental Protection Agency (Etat-Unis)) Codification : A (cancérigène pour l'homme), B1 et B2 (cancérigène probable pour l'homme), C (cancérigène possible pour l'homme), D (inclassable), E (probablement non cancérigène),
- CIRC (Centre International de Recherche sur le Cancer (International)) Codification : 1 (cancérigène pour l'homme), 2A (probablement cancérigène pour l'homme), 2B (peut être cancérigène pour l'homme), 3 (inclassable),
- à l'échelle européenne Codification : CAT1 (substance cancérigène pour l'homme), CAT2 (substance assimilée à des substances cancérigènes pour l'homme), CAT3 (substance préoccupante pour l'homme en raison des effets cancérigènes).

De par leur caractère cancérigène et mutagène, un certain nombre de molécules HAP sont classées comme substances polluantes prioritaires et cancérigènes (cf. tableau 1.2).

1.5. L'importance de la qualité de l'eau

Les conséquences sur l'organisme d'une exposition par inhalation ou voie orale les plus fréquemment citées sont :

- des troubles gastro-intestinaux : selon une étude de [Badiali et al. \(1985\)](#), une période prolongée de contamination à l'anthracène augmente les risques de cancer du côlon et du rectum,
- des problèmes hépatiques et rénaux,
- des troubles respiratoires et rénaux : [Gupta et al. \(1993\)](#) ont recensé les problèmes respiratoires de 667 travailleurs d'une usine de caoutchouc. Cette étude montre que les personnes les plus exposées au benzo(a)pyrène ont développé de manière significative des problèmes et des maladies respiratoires.

A la suite de nombreuses études menées sur l'homme et l'animal, il apparaît que le mécanisme cancérigène des HAP est très complexe : un mélange de HAP classés non cancérigènes peut provoquer des cancers ([Lafon et al., 2000](#)).

Substances (HAP)	CIRC	US EPA	UE
naphtalène	non classé	C	non classé
acénaphtylène	non classé	D	non classé
acénaphène	non classé	non classé	non classé
Fluorène	3	D	non classé
phénanthrène	3	D	non classé
anthracène	3	D	non classé
fluoranthène	3	D	non classé
pyrène	3	D	non classé
benzo(a)anthracène	2A	B2	2
chrysène	3	B2	2
benzo(b)fluoranthène	2B	B2	2
benzo(k)fluoranthène	2B	B2	2
benzo(a)pyrène	2A	B2	2
dibenzo(a,h)anthracène	2A	B2	non classé
indéno(1,2,3-cd)pyrène	2B	B2	non classé
benzo(g,h,i)pérylène	3	D	non classé
benzo(e)pyrène	3	C	2
anthanthrène	3	non classé	non classé
coronène	3	B2	2
pérylène	3	non classé	2

Tableau 1.2: Classification du caractère cancérigène des HAP ([Lafon et al., 2000](#))

1.6 Conclusions

Les pollutions aux hydrocarbures dans les eaux continentales sont en pleine croissance avec une moyenne annuelle en France d'une dizaine de déversements supérieurs à 7 tonnes. Les accidents les plus souvent identifiés résultent d'erreurs de manipulation, de fuites accidentelles de citernes domestiques ou industrielles, de fuites de stations services, d'accidents de camions, de dégazages volontaires ou accidentels de bateaux fluviaux, etc...

Ces accidents ont un impact catastrophique sur l'environnement aquatique. Cependant, les autorités chargées de prendre des mesures de protection et les exploitants de prises d'eau ne disposent que très rarement d'outils d'aide à la décision adaptés aux interventions opérationnelles.

Pour répondre à ce besoin, il a été choisi de mettre en place un système d'alerte qui se base sur un outil inédit couplant un module Lagrangien capable de prédire le transport de la nappe d'hydrocarbures en surface avec un module Eulérien de qualité d'eau permettant d'évaluer l'impact environnemental des hydrocarbures dans la colonne d'eau. Pour le développement de cet outil, un état de l'art doit être réalisé afin d'établir les lois régissant le comportement des hydrocarbures dans les eaux continentales. Celui-ci est l'objet du chapitre [2](#).

Chapitre 2

Etat de l'art

Sommaire

2.1	Introduction	18
2.2	Généralités sur les hydrocarbures	18
2.3	Les différentes approches de modélisation de dérive de nappe d'hydrocarbures	20
2.4	Présentation des différents processus mis en jeu lors d'une pollution	24
2.5	Conclusion	43

2.1 Introduction

Afin de faire le choix des phénomènes physiques à considérer pour modéliser la dérive de nappe d'hydrocarbures en eaux continentales, il est important de faire un état de l'art détaillé. Cette bibliographie identifie les processus intervenant à court et moyen termes lors de la dérive de nappe d'hydrocarbures. Dans une première partie, la bibliographie se veut exhaustive et traite du devenir des pollutions par hydrocarbures dans les eaux marines et continentales en sachant que la grande majorité des modèles développés le sont dans les eaux côtières. Dans une seconde partie, le paragraphe 2.4.3 s'attachera à décrire plus particulièrement la physique des processus et leurs particularités dans les eaux continentales. Il apparaît que les modèles sont indispensables lors d'alertes de pollutions pour la mise en place de plans d'urgence limitant les conséquences environnementales de la pollution.

Les modèles bidimensionnels (2D) s'exécutent plus rapidement mais font l'hypothèse d'une vitesse moyennée sur la verticale. Les modèles tridimensionnels (3D) fournissent des simulations détaillées sur toute la colonne d'eau. Cette information supplémentaire est utile pour l'estimation de l'impact environnemental et d'autant plus à proximité d'une prise d'eau, notamment lors d'accidents se produisant en littoral, dans des eaux continentales ou dans des zones où l'écoulement est fortement stratifié.

Un autre enjeu important de la modélisation est la possibilité de disposer de nombreuses caractéristiques hydro-environnementales à intégrer dans les modèles de simulation, comme par exemple les données en temps réel. En effet, les prévisions météorologiques et les données hydrologiques sont importantes pour planifier les opérations de suivi de pollution, mais aussi, pour le calcul de la dérive. Les données hydrodynamiques sont elles aussi indispensables pour la modélisation de la nappe.

De plus, la physique des processus doit être analysée en tenant compte des produits étudiés (produits raffinés et biocarburants) et de leurs évolutions.

Il est important de se souvenir que l'analyse de la trajectoire de la dérive d'une nappe d'hydrocarbures est plus qu'une simple carte où l'hydrocarbure peut se déplacer. Afin de prendre en compte les erreurs possibles dans les données d'entrée et dans les hypothèses de modélisations des processus physiques, les modèles doivent explorer les scénarios potentiels résultant d'un déversement d'hydrocarbures, du mouvement de la nappe et de l'étalement de celle-ci. Le résultat, apparaissant alors à l'aide de cartes de probabilités, va permettre de produire un résultat détaillé avec des zones susceptibles d'être plus ou moins touchées.

2.2 Généralités sur les hydrocarbures

2.2.1 Le pétrole et les produits pétroliers

Les hydrocarbures sont des mélanges complexes de composés chimiques. Leurs aspects, leurs caractéristiques physiques ainsi que leurs comportements dépendent de leurs compositions (cf. tableau 2.1). Les déversements de produits pétroliers lors de pollutions impliquent principalement quatre types de produits aux comportements très différents :

2.2. Généralités sur les hydrocarbures

- les produits raffinés légers,
- les produits raffinés lourds,
- les pétroles bruts,
- les biocarburants.

Nature de l'hydrocarbure	Persistance/Évaporation
Produits raffinés légers, exemple : essence, gasoil, kérosène, fioul domestique	Persistance très faible voire nulle, Evaporation rapide (en quelques heures) Dispersion naturelle
Produits de viscosité $\nu_o \leq 2000 \text{ cSt}$ ($\text{cSt} = \text{mm}^2/\text{s}$), Bruts légers et moyens peu vieillis Fiouls légers et moyens peu vieillis exemple : brut brent (mer du Nord)	Persistance faible Evaporation forte (autour de 40% en 24 heures)
Produits de viscosité $\nu_o \geq 2000 \text{ cSt}$ ($\text{cSt} = \text{mm}^2/\text{s}$), Bruts légers et moyens vieillis Bruts lourds Fiouls lourds et résidus opérationnels exemple : bunker C ou fioul lourd (appellation française)	Persistance moyenne Evaporation faible (généralement inférieure à 10%)
Bruts paraffiniques dont le point d'écoulement est supérieur à la température de l'eau de mer.	Persistance forte, Hydrocarbures solides ou liquides et très visqueux Evaporation très faible

Tableau 2.1: *Tableau récapitulatif des propriétés des hydrocarbures (CEDRE, 2009)*

Bien qu'aucune pollution au biocarburant n'ait jamais été recensée jusqu'à ce jour, ces derniers sont considérés ici. La directive européenne 2003/30/EC a défini des objectifs en matière de teneur en carburants alternatifs. Pour 2010, l'objectif était d'atteindre un taux d'incorporation de 6%. En France, les objectifs fixés sont encore plus ambitieux, encourageant le développement des biocarburants à l'avenir.

Dans quelques années, ces biocarburants prendront progressivement la place du pétrole. Ces substances chimiques, hydrocarbures, alcools ou esters, qui servent de vecteurs d'énergie, sont donc sources potentielles de pollutions accidentelles.

2.2.2 Caractéristiques physiques essentielles

Un produit pétrolier répandu dans le milieu aquatique peut être caractérisé par un certain nombre de paramètres physiques décrivant son comportement et son état de vieillissement à un instant donné de son évolution. Ces paramètres physiques sont principalement :

Densité : les hydrocarbures ont presque toujours une densité inférieure à 1, ce qui leur permet de flotter. Cependant, une fois déversés, des phénomènes de vieillissement (évaporation et surtout émulsification) augmentent progressivement leur densité jusqu'à des valeurs proches de celles de l'eau saumâtre ou douce, ce qui rend leur flottabilité plus incertaine.

Viscosité : lors d'un déversement en mer ou dans les eaux continentales, du fait de phénomènes de vieillissement (évaporation et surtout émulsification), la viscosité augmente progressivement, éventuellement jusqu'à des valeurs très élevées, ce qui modifie le comportement du polluant dans l'eau.

Point d'écoulement : Le point d'écoulement d'un hydrocarbure est défini par la température à partir de laquelle le produit commence à s'écouler dans les conditions de test en laboratoire. Lorsque la température ambiante est sous ce point, l'hydrocarbure se comporte comme un solide.

Courbes de distillation : l'essai de distillation sert à calculer la volatilité du carburant sur toute la plage d'ébullition (ou de distillation) de l'hydrocarbure. L'hydrocarbure se compose de diverses substances qui s'évaporent à différentes températures. Les composants plus volatils s'évaporent à des températures plus basses, tandis que ceux qui le sont moins s'évaporent à des températures plus élevées. Le tracé de ces températures d'évaporation est désigné sous le nom de courbe de distillation.

Teneur en Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques : les HAP sont une famille de composés chimiques constitués d'atomes de carbone et d'hydrogène dont la structure des molécules comprend au moins deux cycles aromatiques condensés. Certains de ces composés présentent une très forte toxicité et sont dangereux pour l'homme et son environnement.

2.3 Les différentes approches de modélisation de dérive de nappe d'hydrocarbures

Lors d'un déversement d'hydrocarbures dans le milieu aquatique, pour organiser la récupération du pétrole et pouvoir protéger les zones exposées au risque de pollution, la connaissance de la trajectoire des nappes de polluants est essentielle. Le développement de modèles de dérive de nappe d'hydrocarbures dans les eaux continentales et en mer est motivé par la fréquence des pollutions et l'impact néfaste de ces pollutions sur l'environnement. Les modèles numériques permettent d'étudier l'impact de divers scénarios possibles et ainsi d'estimer la sensibilité environnementale d'une zone maritime, côtière ou fluviale avant même que ce type d'accidents ne se produise. Le but et la capacité des modèles de dérive de nappe d'hydrocarbures vont du simple suivi de trajectoire aux modèles 2D ou 3D de transport capables de prédire les distributions d'hydrocarbures en surface, dans la colonne d'eau et sur les berges. Les modèles les plus complexes peuvent de plus quantifier les réponses biologiques et les impacts environnementaux.

2.3. Les différentes approches de modélisation de dérive de nappe d'hydrocarbures

2.3.1 Les différents types de modèles hydrodynamiques

Actuellement, il existe des modèles 2D ou 3D. Les modèles 2D (Carmo et al. (2010), Janeiro et al. (2008)) s'exécutent rapidement mais intègrent les résultats sur la verticale et ne permettent pas d'obtenir des informations détaillées sur la colonne d'eau. Ils sont de plus basés sur des hypothèses et des approximations qui constituent des limitations et sont responsables de l'existence d'un domaine de validité des modèles (pression hydrostatique, vitesse verticale négligeable,...). Les modèles 3D permettent une description de l'écoulement sur toute la colonne d'eau (exemples : modèle OSCAR (Oil Spill Contingency and Response) (Reed et al., 1995) développé en Norvège, modèle MARS3D développé par l'IFREMER (Jouan et al., 2001)). L'inconvénient majeur des modèles 3D est le temps de calcul qui peut être long lorsqu'il s'agit de faire de la prévision (ASCE Task Committee, 1996), mais cette constatation est de moins en moins vraie.

La simulation hydrodynamique est la première étape pour développer des modèles concernant les eaux des lacs naturels, des réservoirs et des estuaires. La structure du courant est une donnée d'entrée essentielle pour le transfert de polluant notamment pour les dérives de nappe d'hydrocarbures. Les modèles 2D moyennés sur la verticale sont simples d'utilisation et peuvent fournir des résultats raisonnables lorsque les hypothèses permettent de négliger le détail de l'écoulement dans la dimension verticale. Les premiers modèles utilisés pour prévoir la dérive de nappe de pétrole étaient des modèles 2D qui calculaient uniquement le courant intégré sur la verticale, forcé par les vents. Pour estimer la vitesse de dérive en surface de la nappe, un pourcentage de la vitesse du vent en surface (wind factor) compris entre 1% et 5% est ajouté à la vitesse du courant ((Wang et al., 2005), (Shen et Yapa, 1988), (Verma et al., 2008)). Cependant, des difficultés ont été rencontrées lorsque le modèle conventionnel 2D est utilisé pour la simulation de circulations induites par le vent. En effet, ce type de modèle ne prend pas en compte la circulation engendrée par celui-ci. Le fait de moyenner sur la verticale engendre une perte d'information, se traduisant par le manque de représentativité de l'écoulement. L'impossibilité de pouvoir prédire les gradients de courants près de la surface constitue de plus un réel inconvénient pour simuler la dérive du pétrole dispersé.

Ces modèles ont depuis évolué vers des modèles plus complexes dits 2,5D. Dans ce cas le modèle 2D est couplé avec un modèle 1D vertical, permettant de reproduire la structure verticale des courants horizontaux, notamment près de la surface. Ces modèles calculent le profil des vitesses à partir d'un profil analytique de viscosité turbulente choisi. Wu et Tsanis (1995) ont adopté ce type de modèle pour tenir compte à la fois du cisaillement induit par le vent sur la surface libre et du cisaillement provoqué par le frottement au fond du domaine sur le profil vertical de vitesse. Le modèle ainsi adopté bénéficie de la rapidité de calcul des modèles 2D, mais est aussi capable de simuler les profils détaillés proches de la surface et du fond du domaine, qui sont nécessaires à la plupart des modèles numériques. Ce type de modèle est d'ailleurs couramment utilisé pour des applications opérationnelles dans la prévention des marées noires. C'est le cas du modèle MOTHY de Météo-France (Daniel, 1996) qui couple un modèle hydrodynamique 2D résolvant les équations de Saint-Venant et un modèle 1D qui calcule le profil de vitesse verticale dans la colonne d'eau. De ce fait, pour prendre en compte

l'hydrodynamique et avoir une bonne représentativité selon la verticale notamment pour les écoulements stratifiés, il est nécessaire d'adopter un modèle 3D ou 2,5D (pour ces derniers, l'hydrodynamique 2D doit rester d'un ordre de grandeur supérieur aux effets 3D).

En plus de la dimension, d'autres choix de modélisation restent à faire, en particulier celui d'une approche Eulérienne, Lagrangienne, ou hybride.

2.3.2 L'approche Eulérienne

Le mouvement d'une nappe d'hydrocarbures est gouverné par la convection due aux courants, par l'étalement produit par la diffusion et par les sources qui ajoutent du polluant. Le mouvement de la nappe d'hydrocarbures est alors décrit par l'équation de convection-diffusion :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -(\vec{U} \cdot \nabla)C + \nabla \cdot (K_c \nabla C) + S(t) \quad (2.1)$$

où C est la concentration du polluant, t le temps, $\vec{U} = (U_1, U_2, U_3)$ le champ de vitesse de l'écoulement calculé par le modèle hydrodynamique, S le terme source, K_c le coefficient de diffusion du polluant, ∇ est l'opérateur gradient (si f est un scalaire alors $\nabla f = (\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \frac{\partial f}{\partial x_3})$) et $\nabla \cdot$ est l'opérateur divergence (si $\vec{F} = (F_1, F_2, F_3)$ alors $\nabla \cdot \vec{F} = \frac{\partial F_1}{\partial x_1} + \frac{\partial F_2}{\partial x_2} + \frac{\partial F_3}{\partial x_3}$)

Il est commun d'utiliser la méthode Eulérienne pour résoudre cette équation aux dérivées partielles en hydraulique. En effet, avec la méthode Eulérienne, on ne s'intéresse pas au suivi de particules fluides dans leurs mouvements mais aux valeurs des grandeurs physiques en un point fixe. Selon Tkalic (2006), la méthode Eulérienne est susceptible d'être plus fréquemment utilisée dans le futur à cause de la nécessité de coupler les équations de transport et de cinétique chimique avec les modèles hydrodynamiques. De plus, afin de ne pas prendre un modèle de traceur passif pour la modélisation de la dérive des hydrocarbures, et de prendre en compte le processus d'étalement sous l'action de la gravité et de la tension de surface, Papadimitrakis et al. (2003) ont adopté une approche Eulérienne diphasique. Cependant, cette approche présente le défaut de donner des solutions de l'équation précédente ne détectant pas exactement les limites de la nappe d'hydrocarbures à un temps spécifique (Lonin, 1999). En effet, le problème majeur de l'approche Eulérienne est lié au phénomène de diffusion numérique notamment dans le cas de faibles sources (Galt, 1997).

2.3.3 L'approche Lagrangienne

Elliott et al. (1986) ont supposé que l'allongement de la nappe d'hydrocarbures se développe en raison des gouttes de pétrole qui coulent et qui refont surface ensuite sous l'effet de la tension dans la couche supérieure de la colonne d'eau. Cette hypothèse justifie ainsi le fait de considérer la nappe de pétrole comme un ensemble de petites gouttelettes pouvant être suivies par une méthode particulière. De plus, Elliott et al. (1986) ont appliqué une méthode de marche aléatoire pour suivre l'évolution des gouttes de pétrole. En effet, généralement, les études prennent en considération la dispersion horizontale d'un film de pétrole à l'aide des prédictions des courants hydrodynamiques et de la turbulence par la méthode de marche

2.3. Les différentes approches de modélisation de dérive de nappe d'hydrocarbures

aléatoire, comme dans les codes de calcul MARS3D (Jouan et al., 2001), MOTHY (Daniel, 1996) et dans le modèle développé par Wang et al. (2008). Les déplacements horizontal D_h et vertical D_v dû à la turbulence, pendant un pas de temps Δt sont donnés par :

$$D_h = R_1 \sqrt{2K_h \Delta t} \text{ dans la direction } \theta = 2\pi R_2 \quad (2.2)$$

$$D_v = (2R_3 - 1) \sqrt{2K_z \Delta t} \quad (2.3)$$

où K_h et K_z sont les coefficients de diffusion turbulente horizontale et verticale et $R_{1,2,3}$ des nombres aléatoires compris entre 0 et 1.

Selon Galt (1997), l'utilisation de particules lagrangiennes pour représenter la distribution de pétrole est utile et numériquement stable. Cette approche donne en sortie la représentation de la distribution de pétrole comme un essaim d'abeilles.

Dans ce mode opératoire, la distribution des particules lagrangiennes de pétrole représente la densité de pétrole et le nombre de particules par unité de surface donne une mesure locale de la concentration ($kg.m^{-2}$).

Un autre type de modèles de trajectoire utilise une distribution statistique pour les forçages géophysiques et pour les paramètres d'entrées. Dans ce cas, chaque particule lagrangienne va être soumise à un mouvement stochastique ajouté au forçage. La distribution n'est alors pas reliée à la concentration de l'hydrocarbure mais à la probabilité d'une nappe de provoquer un mouvement de pétrole vers une surface unité. Une autre possibilité est d'utiliser des données environnementales prédites avec des variations statistiques représentant les incertitudes dans les prévisions ou les processus des modèles. Dans cette configuration, le modèle va donner une représentation statistique des incertitudes du résultat ou une erreur supposée liée à la prévision, ce qui peut être perçu comme une approche de Monte Carlo. L'inconvénient majeur de cette approche est le temps de calcul qui est en corrélation avec le nombre de particules considéré lors de la simulation. De plus, un autre inconvénient de la méthode Lagrangienne apparaît lors de l'impact du pétrole sur les côtes, la concentration de pétrole échoué n'est pas directement disponible comme avec une description Eulérienne. Pour remédier à cet inconvénient, Galt (1997) énonce deux méthodes pour passer d'une distribution de point lagrangienne à une distribution de densité eulérienne. La plus simple consiste à diviser le domaine en cellules et à compter le nombre de particules dans chaque cellule, l'autre utilise les polygones de Thiessens afin d'obtenir la valeur de la densité eulérienne (kg/m^2).

2.3.4 Approche hybride

Deux types d'approches pour modéliser la dérive d'une nappe d'hydrocarbures sont donc couramment utilisées. L'approche Eulérienne facilite le couplage entre le modèle hydrodynamique et le module d'évolution des nappes d'hydrocarbures. Cependant, le défaut majeur de cette méthode est la diffusion numérique, notamment pour de faibles sources de pollution. L'approche Lagrangienne apparaît alors comme une solution possible à ce type de problème, mais elle est contrainte par le temps de calcul qui augmente de manière significative avec le nombre de particules employées dans ce type de modélisation.

Ainsi, de nouvelles méthodes couplant les deux approches sont récemment apparues afin de tirer avantage de chacune d'elles. Sue (2006) a adopté une méthode “hybride”, c'est-à-dire couplant à la fois une approche Eulérienne à une approche Lagrangienne pour prédire la dispersion de contaminant dans l'environnement aquatique. En effet, une approche Lagrangienne est utilisée pour minimiser les erreurs numériques au niveau de la source de pollution, et une approche Eulérienne est adoptée plus loin de la source afin d'éviter de trop longs temps de calcul. Cette approche a ensuite été adaptée aux pollutions par les hydrocarbures, notamment dans les travaux de Guo et Wang (2009). Ces auteurs ont développé une méthode hybride qui combine le suivi de particules avec une approche Eulérienne. L'approche Lagrangienne est utilisée pour décrire les zones où l'épaisseur de la nappe est importante. En dessous d'une certaine épaisseur critique, un modèle Eulérien est utilisé. Un second type de modèle hybride (Nagheeb et Kalahdoozan, 2008) utilise une description Lagrangienne pour les processus de transport de la nappe d'hydrocarbures, et ensuite le nombre de particules est converti en une concentration eulérienne.

Notre approche sera également hybride, mais de façon différente, avec une description Lagrangienne des nappes en surface et une description Eulérienne du pétrole dissous.

2.4 Présentation des différents processus mis en jeu lors d'une pollution

Lorsque l'hydrocarbure est déversé dans le milieu aquatique, un ensemble de processus de transport (convection et diffusion) et de transformation nommée “*vieillessement de la nappe d'hydrocarbures*” se déclenche, tel que représenté sur la figure 2.1. Par vieillissement, en anglais “*weathering*”, nous entendons les processus physico-chimiques ayant pour conséquence des changements de propriétés physiques de l'hydrocarbure au cours du temps, c'est-à-dire l'ensemble des processus suivants : étalement, évaporation, dissolution, volatilisation, dispersion, émulsification, photo-oxydation et biodégradation. Si certains processus sont actuellement bien compris, comme l'étalement et l'évaporation, d'autres restent mal connus (photo-oxydation et biodégradation). Les échelles de temps s'étendent de quelques jours (étalement, évaporation) à quelques années (biodégradation)(cf. figure 2.1).

Les principaux processus mis en jeu et leur modélisation sont décrits plus précisément par la suite. Notons qu'aux phénomènes de la figure 2.1 émanant du CEDRE (CEDRE, 2009), nous avons dû ajouter la volatilisation.

2.4. Présentation des différents processus mis en jeu lors d'une pollution

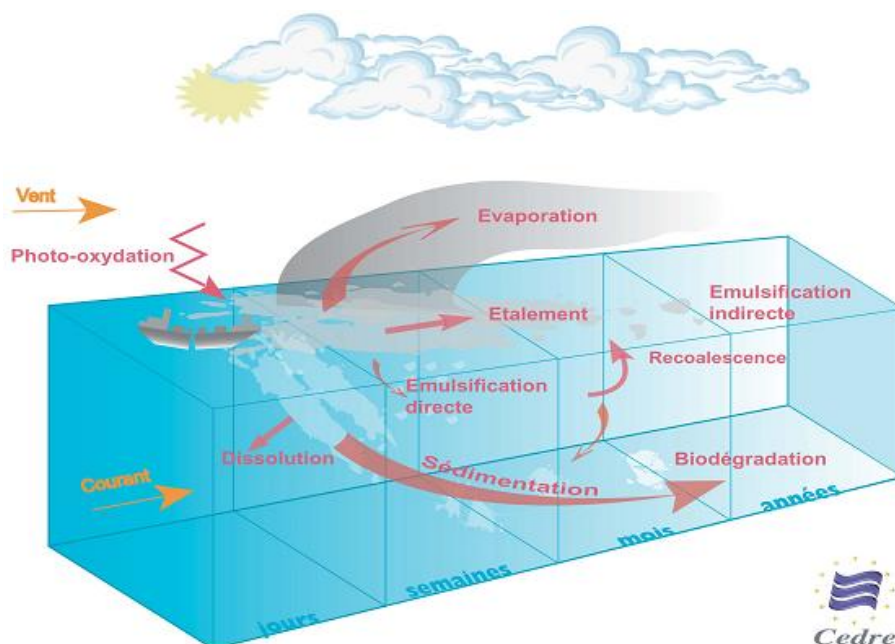


Figure 2.1: *Processus de vieillissement d'une nappe d'hydrocarbures (CEDRE, 2009)*

2.4.1 Transport de la nappe d'hydrocarbures

Le transport d'une nappe d'hydrocarbures est généralement induit par le courant, le vent, les vagues et la diffusion turbulente. Le vent et les courants sont les deux procédés majeurs composant le phénomène de convection en milieu continental (rivière, lac, estuaire). En rivière, compte-tenu de la courantologie, l'hydrocarbure est généralement transporté vers l'aval du cours d'eau. Il existe deux types de convection. La première est la convection à la surface du plan d'eau, qui pour une nappe "flottante" est liée aux frottements du vent et au courant de surface. La seconde se déroule dans la colonne d'eau et entraîne des particules d'hydrocarbures en suspension ou dissoutes. En plus de la convection, la turbulence générée par le déferlement des vagues et les forces de cisaillement exercées par les côtes et le fond marin a pour effet de morceler la nappe de surface et de la diffuser horizontalement et verticalement.

Modélisation du transport

Pour la convection dite "de surface", de nombreux modèles 2D de dérive de nappe d'hydrocarbures utilisent un paramètre constant pour relier la vitesse du vent en surface à la dérive de la nappe. Ce paramètre est pris égal à environ 3,5% (Reed et al. (1999) ; Chao et al. (2001) ; Wang et al. (2008)) de la vitesse du vent. La nappe d'hydrocarbures est alors supposée dériver sur l'eau à 3,5% de la vitesse du vent combinée à 100% de celle du courant. Pour des vents faibles ou moyens, l'angle de déviation entre la trajectoire de la nappe et celle du vent, est inférieur à 10 degrés. Dans le cas de forts vents, cette déviation est considérée comme nulle. Si ce type de modèle reste adapté au cas d'un traceur passif dans une zone de prédominance des courants de marée et sans stratification verticale (exemple : la Manche), son utilisation

est inappropriée dans des régions fortement stratifiées, où la structure tridimensionnelle du courant est importante. De plus, les modèles hydrodynamiques 2D fournissent une vitesse d'écoulement moyennée sur la verticale, il est alors nécessaire d'estimer la vitesse en surface en fonction de la vitesse verticale moyennée. Pour ce faire, l'approche la plus récurrente dans la littérature est la déduction de la vitesse en surface en faisant l'hypothèse d'un profil de vitesse verticale logarithmique dans la colonne d'eau (Yapa et Shen, 1994). Les modèles 2, 5D et 3D, quant à eux, prennent directement en compte l'effet du vent en surface de l'écoulement à l'aide de solutions analytiques trouvées pour un profil de viscosité imposé comme par exemple avec le modèle proposé par Wu et Tsanis (1995).

Pour la convection et la diffusion turbulente de la nappe en surface et du polluant présent dans la colonne d'eau, les équations eulériennes de transport contiennent naturellement un terme de convection et de diffusion par l'écoulement (Eq. (2.1)).

Dans l'approche Lagrangienne, les particules de la nappe en surface ou en suspension vont avoir un mouvement aléatoire en plus du mouvement régulier dû au courant principal pour représenter la diffusion turbulente. La vitesse stochastique est alors ajustée à partir de l'échelle de temps et du coefficient de diffusion (Guo et Wang (2009) ; Lonin (1999)).

2.4.2 Processus de vieillissement des hydrocarbures

i L'étalement

Description du processus de l'étalement

L'étalement est l'un des processus les plus importants, non seulement pour pouvoir prédire l'étendue de la pollution, mais aussi parce qu'il conditionne les autres processus de transformation de la nappe. En effet, l'étalement, en accroissant les surfaces d'échange, augmente les transferts de masse par évaporation et dissolution. Le processus d'étalement est à l'origine de deux variables clefs : l'aire et l'épaisseur de la nappe. L'aire de la nappe est par la suite utilisée dans les calculs de l'évaporation qui détermine les changements de composition de la nappe et ses propriétés avec le temps. L'épaisseur est utilisée dans de nombreux modèles pour le calcul du taux de dispersion naturelle qui détermine la persistance de l'hydrocarbure à la surface de l'eau (Reed et al., 1999).

L'étalement d'une nappe met en jeu les forces suivantes :

Forces gravitationnelles :

- forces de gravité

Forces de tension de surface :

- tensions superficielles aux interfaces eau-air, hydrocarbure-air, eau-hydrocarbure.

Forces de viscosité :

- frottement visqueux à l'interface eau-pétrole.

Forces d'inertie :

- quantité de mouvement dans la nappe d'hydrocarbures.

2.4. Présentation des différents processus mis en jeu lors d'une pollution

Une étude de [Fay \(1971\)](#), vérifiée expérimentalement, montre qu'il existe, après un déversement, trois phases d'étalement en fonction du temps (cf. tableau 2.2).

Phase	Force motrice	Force résistante
1	gravité	inertie
2	gravité	viscosité
3	tension superficielle	viscosité

Tableau 2.2: *Phases d'étalement d'un hydrocarbure (Fay, 1971)*

Modélisation de l'étalement

Suivant les deux types d'approches choisies (Eulérienne et Lagrangienne), différents modèles d'étalement sont utilisés.

– Eulérienne

L'approche Eulérienne simplifie la description de l'étalement de la nappe en considérant celle-ci comme un film mince régi par des équations de type Saint-Venant. Selon [Warluzel et Benque \(1981\)](#), en négligeant l'inertie de la nappe, l'épaisseur de celle-ci est régie par l'équation suivante :

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot \left(e \left(\vec{U}_s + \vec{\tau}_w / f \right) \right) - \nabla \cdot (E_s \nabla e) = S_{ce} \quad (2.4)$$

où e est l'épaisseur de la nappe d'hydrocarbures, $\vec{U}_s = (U_s^{x1}, U_s^{x2})$ la vitesse du courant au niveau de la surface libre, $\vec{\tau}_w = (\tau^{x1}, \tau^{x2}) \approx 0,03f\vec{U}_w$ la contrainte de cisaillement due au vent, $\vec{U}_w = (U_w^{x1}, U_w^{x2})$ la vitesse du vent, f le coefficient de frottement entre l'eau et l'hydrocarbure, $E_s = g\rho_o\Delta e^2/f$, $\Delta = \frac{\rho_e - \rho_o}{\rho_e}$, ρ_e la masse volumique de l'eau, ρ_o la masse volumique de l'hydrocarbure, g la gravité et S_{ce} un terme source nécessaire pour la prise en compte des cinétiques physico-chimiques de l'hydrocarbure (évaporation, dispersion,...).

A partir de cette même expression, [Maroihi et al. \(1992\)](#) ont donné une expression analytique de l'évolution de la surface de la nappe d'hydrocarbures.

– Lagrangienne

La plupart des algorithmes particuliers de dérive de nappe d'hydrocarbures (Lagrangien) ([Leymarie et Le Saux \(1988\)](#); [Shen et Yapa \(1988\)](#)) sont basés sur la théorie de [Fay \(1971\)](#), bien qu'il soit largement admis que cette description ne puisse pas expliquer l'étalement correctement. Cette approche nécessite très peu de paramètres propres à l'hydrocarbure. [Lehr et al. \(1984\)](#) ont proposé un modèle pour prendre en compte les effets observés d'étalement non symétrique. L'extension de la nappe dans la direction du vent est supposée augmenter avec le temps proportionnellement à la vitesse du vent, tandis que l'allongement latéral est toujours décrit par l'équation d'étalement due à la gravité décrite par [Fay \(1971\)](#). Le facteur

de dépendance au vent est empirique et a été déterminé par des observations. La nappe se déforme donc sous la forme d'une ellipse. Ce modèle d'étalement a été repris par [Guo et Wang \(2009\)](#); [Chao et al. \(2001\)](#). [Johansen \(1984\)](#) (cité par [Reed et al. \(1999\)](#)) et [Elliott et al. \(1986\)](#) ont développé le concept d'étalement cisailé dû à la dispersion naturelle et à la ré-émergence des particules d'hydrocarbures.

Selon [Reed et al. \(1999\)](#), des travaux effectués en laboratoire ([Delevigne et Sweeney, 1988](#)) et en conditions réelles ([Reed, 1994](#)) valident cette approche qui est généralement acceptée comme la description correcte de la physique conduisant à l'étalement. Ce même concept est utilisé par [Tkalic \(2006\)](#) dans un modèle qui prend en compte les échanges entre la nappe de surface et les gouttelettes de pétrole dispersées dans la colonne d'eau. Les particules dispersées peuvent remonter en surface. Lorsque ces gouttes réapparaissent en surface, elles sont distancées par les gouttes en tête de nappe qui n'ont pas ou peu quitté la surface et ont été convectées par des courants plus forts. Ceci est à l'origine d'une queue elliptique se développant derrière la nappe, et qui intervient ainsi dans le processus de l'étalement de la nappe (cf. figure 2.2).

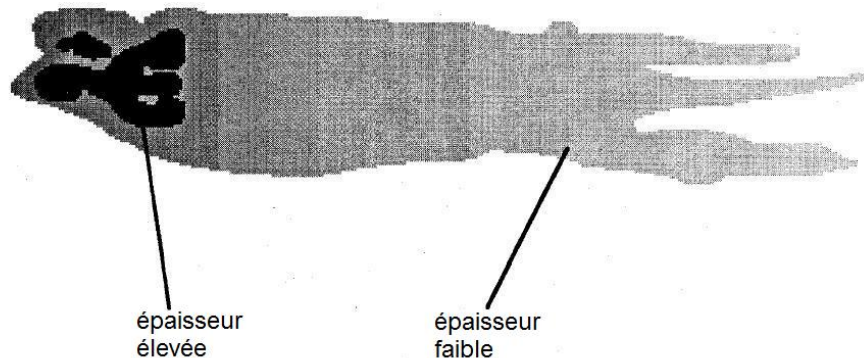


Figure 2.2: Profil d'étalement d'une nappe d'hydrocarbures ([Lehr et Simecek-Beatty, 2000](#))

[Boufadel et al. \(2007\)](#) ont montré qu'en milieu marin les mécanismes majeurs affectant une nappe d'hydrocarbures sont la cinématique des vagues, la diffusion turbulente et la flotabilité des gouttes d'hydrocarbures. Par ailleurs, dans cette étude, la prise en compte de la cinématique des vagues se fait par la théorie de Stokes.

[Reed et al. \(1999\)](#) fait référence à [Lehr \(1996\)](#) qui a montré que les algorithmes du processus de l'étalement pour une libération instantanée du pétrole ne sont pas utilisables dans le cadre de pollutions qui sont dues à des déversements continus (fuite). En effet dans de tels cas de figure, à une certaine distance de la source, l'étalement de surface de la nappe d'hydrocarbures est gouverné par d'autres mécanismes que la gravité.

ii L'évaporation

Description du processus

L'évaporation est le processus de transformation le plus important en termes de transfert de masse lors des deux premiers jours d'évolution de la nappe. Selon Bocard (2006), l'évaporation varie selon la nature de l'hydrocarbure : elle peut être totale dans le cas d'une essence ou d'un gasoil, de l'ordre de 40 à 50% dans le cas d'un pétrole brut léger et d'environ 10 à 15% dans le cas d'un fioul lourd. En rivière, les produits que l'on retrouve principalement lors des déversements sont des produits dits "blancs" (essence, kérosène, gasoil ou fioul domestique). Dans ce cas, l'évaporation est un processus atténuateur de premier ordre. Une compréhension de l'évaporation est importante du point de vue pratique pour les opérations de nettoyage et pour le développement de modèles prédictifs. L'évaporation est influencée par la nature de l'hydrocarbure (densité, viscosité), la température du milieu, la vitesse du vent et la surface de la nappe due à l'étalement.

Modélisation de l'évaporation

Dans les modèles de dérive de nappe d'hydrocarbures, il existe trois méthodes pour calculer le taux d'évaporation : l'approche pseudo-composante, la méthode analytique et les méthodes empiriques.

Dans l'approche pseudo-composante, l'hydrocarbure est divisé en un nombre de composants ou fractions déterminés par intervalles de points d'ébullition. À l'aide de la courbe de distillation du produit considéré, les fractions volumiques et les points d'ébullition moyens de ces composants sont déterminés. La pression de vapeur partielle de chaque composant est déterminée à l'aide du point d'ébullition moyen pour chaque composant et de la température de l'hydrocarbure grâce à des formules empiriques ou semi-empiriques (équation d'Antoine (Jones, 1997)). Le taux d'évaporation de chaque composant est supposé proportionnel à sa pression de vapeur partielle (hypothèse du corps pur), à condition qu'elle soit négligeable dans l'air. Ce taux d'évaporation dépend également d'un coefficient de transfert de masse. Mackay et Matsugu (1973) ont mené une campagne d'essais pour déterminer une expression de ce coefficient de transfert de masse en fonction de divers paramètres influents (température, surface de la nappe et vitesse du vent). Ces travaux sont à la base des divers coefficients de transfert utilisés dans les modèles d'évaporation rencontrés dans la littérature comme par exemple le modèle d'évaporation pseudo-composants de Jones (1997) utilisé dans le modèle ADIOS. Ci-dessous est présenté le modèle pseudo-composants adopté par le laboratoire norvégien SINTEF (Doré, 2001).

$$\frac{dQ_i}{dt} = \frac{-\alpha(t)Q_i(t)M_{wo}^l(t)P_i(t)}{\rho_o(t)h(t)RT} \quad (2.5)$$

où l'indice i représente le i^{eme} composé de la nappe d'hydrocarbures, Q_i le poids du composé i par unité de surface, α le coefficient de transfert de masse, M_{wo}^l la masse molaire de la nappe, P_i la pression de vapeur saturante du composé i , ρ_o la masse volumique du

Chapitre 2. Etat de l'art

pétrole, h l'épaisseur de la nappe, R la constante des gaz parfaits et T la température de l'eau.

Une des particularités du modèle proposé par le SINTEF est l'expression du coefficient de transfert de masse qui peut adopter trois formes différentes, cependant aucun conseil n'est donné sur le choix entre ces modèles (Doré, 2001), qui pourrait être fonction des critères d'analyse numérique (modèle explicite, implicite, ...).

$$\alpha(t) = \begin{cases} A + BU(t) \text{ avec } A = 0,0074 \text{ m/s et } B = 0,00187 \\ 0,0012U(t) \\ \left(\frac{U^*}{U(t)}\right)^2 U(t) \end{cases} \quad (2.6)$$

avec :

$$U^* = \begin{cases} CU(t) \text{ pour } U(t) < 7 \text{ m/s} \\ Cu_1 + (Du_2 - Cu_1) \left(\frac{U(t)-u_1}{u_2-u_1}\right) \text{ pour } u_1 < U(t) < u_2 \\ DU(t) \text{ pour } U(t) > u_2 \end{cases} \quad (2.7)$$

avec C et D des constantes empiriques.

Le principal inconvénient de la méthode pseudo-composante est la nécessité de connaître un grand nombre de données sur l'hydrocarbure. Ceci est d'autant plus compliqué que dès qu'une pollution aux hydrocarbures intervient dans l'environnement, le temps de réponse court que doit fournir un modèle ne permet pas l'analyse du produit dispersé avant la simulation. Par conséquent, soit le modèle doit chercher les données nécessaires à ce type d'approche dans une base préétablie, soit des méthodes plus simples doivent être appliquées.

Une méthode plus simple dite "méthode analytique" et nécessitant peu d'information sur l'hydrocarbure a été proposée par Stiver et Mackay (1984). Cette approche est fondée sur des simplifications et traite l'hydrocarbure comme un seul composant, en linéarisant la courbe de distillation de l'hydrocarbure pour calculer le point d'ébullition initial ainsi que le gradient d'évaporation. Le taux d'évaporation est lié à la pression de vapeur, à l'aire de la nappe, un coefficient de transfert de masse qui dépend de la vitesse du vent, la température ambiante et la nature de l'hydrocarbure. L'équation d'évaporation utilisée par ces auteurs est la suivante :

$$\frac{dF_{evap}}{dt} = \frac{K_\epsilon A_o}{V_0} \exp \left[6,3 - 10,3 \left(\frac{C_1 + C_2 F_{evap}}{T} \right) \right] \quad (2.8)$$

avec F_{evap} : fraction évaporée, K_ϵ le coefficient de transfert de masse ($K_\epsilon = 2,5 \times 10^{-3} U_w^{0,78}$ où U_w est la vitesse du vent), A_o la surface de la nappe, V_0 le volume initial de la nappe, C_1 et C_2 des constantes et T la température de l'eau.

C_1 et C_2 sont déterminées en linéarisant des courbes de distillation pour chaque hydrocarbure. Elles sont respectivement l'ordonnée à l'origine et la pente de cette droite. On obtient donc une relation linéaire entre la fraction évaporée et la température d'ébullition : $T_B = C_1 + C_2 F_{evap}$. Par intégration de l'équation (2.8), Shen et Yapa (1988) ont proposé une

2.4. Présentation des différents processus mis en jeu lors d'une pollution

nouvelle formulation de la fraction évaporée d'un hydrocarbure. Celle-ci est régulièrement citée dans la littérature (Wang et al. (2005), Guo et Wang (2009)).

Enfin, toujours dans l'optique de simplifier les modèles d'évaporation en faisant appel à un minimum d'information sur l'hydrocarbure déversé, des méthodes empiriques ont été développées (Fingas, 1997). La loi d'évaporation est fonction du type d'hydrocarbure et ne dépend que du temps. Cet auteur conclut de ses expériences que le vent et la surface n'ont pas d'influence significative sur le taux d'évaporation. Selon cet auteur, la plupart des hydrocarbures peuvent être décrits par la relation empirique suivante :

$$F_{evap} = [0,165(\%D_{180^\circ}) + 0,045(T - 15)] \ln(t) \quad (2.9)$$

où F_{evap} est la fraction évaporée de l'hydrocarbure, T la température en degrés Celsius, t le temps en minutes et $\%D_{180^\circ}$ le pourcentage d'hydrocarbure distillé à $180^\circ C$.

Cependant, certains hydrocarbures comme par exemple le diesel sont mieux représentés par une équation en $\sqrt{t}$:

$$F_{evap} = [0,0254(\%D_{180^\circ}) + 0,01(T - 15)] \sqrt{t} \quad (2.10)$$

Le seul paramètre de ces équations est le pourcentage d'hydrocarbure distillé à $180^\circ C$ ($\%D_{180^\circ}$).

Cette méthode nécessite une petite base de données et peu de calculs. Toutefois, une partie de la communauté scientifique reste sceptique quant à ce type de méthode.

Remarque : le phénomène d'évaporation fonctionne exactement comme un processus de décroissance exponentielle (Jouan et al., 2001).

iii La dissolution

Description du phénomène

Généralement, on estime qu'une très faible partie de la masse d'hydrocarbure déversée va se dissoudre dans l'eau, ainsi peu de modèles prennent ce phénomène en compte. Cependant, les composés les plus solubles étant souvent les plus toxiques, la dissolution même en très faible quantité de ces substances peut avoir un très fort impact écologique (surtout dans le cas des produits "blancs" pour lesquels, en rivière, le risque de contamination des réseaux d'eau potable peut être un véritable problème).

Le procédé physique de la dissolution est bien connu mais sa description dans le cas d'un déversement d'hydrocarbure est complexe en raison du grand nombre de composants constituant le produit. Il est *a priori* nécessaire de connaître la dissolution de chacun des composants.

L'évaporation est un autre facteur entrant en jeu lorsqu'il s'agit de décrire la dissolution. En effet, la solubilité et la volatilité des composants sont très fortement corrélées. Plus un composé est soluble, plus il est volatil.

Le transfert de masse dû à l'évaporation prédomine sur celui dû à la dissolution. Ainsi, la masse de la nappe d'hydrocarbures diminue au cours du temps. Cet épuisement des composés

au sein de la nappe réduit considérablement le taux de transfert de matières dissoutes dans l'eau. Il peut y avoir en plus une évaporation directe des composants dissous dans l'eau.

Il existe aussi une dissolution des composants des gouttelettes en suspension mais ce procédé est complexe. En réalité, le taux de dissolution augmente rapidement à cause de l'augmentation de l'interface eau-polluant. Cependant, ce procédé n'a pas été étudié et il n'y a pas d'algorithme disponible pour le traiter quantitativement (ASCE Task Committee, 1996).

Modélisation de la dissolution

Payne et al. (1983) ont développé un modèle physique pour la dissolution prenant en compte deux approches. La première approche est une modélisation spécifique de chaque composant qui prédit leur concentration individuelle à la surface de la nappe et dans la colonne d'eau. Un des désavantages de cette méthode est qu'elle ne tient pas compte de la masse totale de la nappe de pétrole. Payne et al. (1983) ont développé une seconde approche avec un nombre limité de pseudo-composants (méthode analogue à l'approche utilisée pour l'évaporation (Cekirge et al., 1995)). La nappe d'hydrocarbures est décomposée en un certain nombre de produits unitaires. Le devenir de ces produits (particulièrement leur évaporation et leur dissolution) est décrit grâce à leurs propriétés. En limitant leur nombre, la masse totale de la nappe de pétrole peut être prédite (ASCE Task Committee, 1996). Hibbs et al. (1997) et Mackay et Leinonen (1977) ont adopté ce type d'approche pseudo-composante pour modéliser la dissolution des hydrocarbures. Dans ces modèles, l'estimation de la masse dissoute se fait via l'expression du flux F_{Di} :

$$F_{Di} = K_{diss}(S_i \cdot X_i e_i - C_{wi}) \quad (2.11)$$

avec pour chaque composé i , F_{Di} le flux de matière dissoute par unité d'aire, S_i la solubilité, X_i la fraction molaire, C_{wi} la concentration du composé i dans l'eau, K_{diss} le coefficient de transfert de masse de la dissolution et e_i un coefficient d'amplification de la solubilité dépendant de la nature du produit qui se dissout (cf. tableau 2.3) (Mackay et Leinonen, 1977).

Ce coefficient ne se trouve pas dans l'expression de Hibbs et al. (1997).

Composé	Coefficient
	d'amplification de la solubilité
alkanes	1, 4
cycloalkanes	1, 4
aromatiques	2, 2
alcènes	1, 8

Tableau 2.3: Coefficient d'amplification de la solubilité (Mackay et Leinonen, 1977)

2.4. Présentation des différents processus mis en jeu lors d'une pollution

Cette expression du flux suppose un comportement idéal du composant dans l'hydrocarbure et est basée sur la théorie du double film de [Whitman \(1923\)](#) (cf. section 4.4.2.ii). Cette théorie permet de spécifier le coefficient de transfert de masse de la dissolution (K_{diss}) modélisé par une résistance au niveau des deux interfaces hydrocarbure/eau sous la forme :

$$\frac{1}{K_{diss}} = \frac{1}{k_w} + \frac{S_i M_{wo}^l}{k_o \rho_o} \quad (2.12)$$

où k_w est le coefficient de transfert de masse au niveau de l'interface de l'eau, k_o le coefficient de transfert de masse à l'interface de l'hydrocarbure, ρ_o la masse volumique de l'hydrocarbure et M_{wo} la masse molaire moyenne de l'hydrocarbure.

Beaucoup de modèles utilisent une valeur constante pour le coefficient de transfert de masse de la dissolution K_{diss} (même si une étude a montré qu'il était dépendant du niveau de turbulence des deux côtés de l'interface). Dans la littérature, la valeur du coefficient de transfert de masse de la dissolution est toujours comprise dans l'intervalle [0, 2 cm/h ; 4 cm/h] donné par [Betancourt et al. \(2005\)](#).

Pour des raisons similaires à celles évoquées dans la partie concernant l'évaporation, des modèles nécessitant moins d'information que les modèles pseudo-composants ont été développés. Le modèle de dissolution le plus souvent utilisé dans la littérature ([Shen et Yapa \(1988\)](#) ; [Wang et al. \(2005\)](#)) est le modèle de [Cohen et al. \(1980\)](#). Ce modèle donne l'expression du taux de dissolution total d'un hydrocarbure :

$$\frac{dm}{dt} = K_{diss} A_o S_o \exp(-\alpha t) \quad (2.13)$$

où m est la masse de la nappe d'hydrocarbures en surface, A_o l'aire de la nappe, S_o la solubilité moyenne de l'hydrocarbure et α une constante dépendante de l'hydrocarbure considéré.

[Betancourt et al. \(2005\)](#) fournissent des valeurs pour la solubilité S_o et le coefficient α pour deux catégories d'hydrocarbures différentes, les fiouls lourds et les fiouls légers.

iv La dispersion

Description du phénomène de dispersion

La dispersion en mer est provoquée par le déferlement des vagues qui fractionne la nappe en gouttelettes de tailles différentes. Ces gouttelettes sont alors soumises à des mouvements verticaux liés à leurs flottabilités et à la turbulence qui règne dans le milieu. Les gouttelettes de petite taille, à la flottabilité réduite, auront tendance à rester dans la colonne d'eau ou à couler, alors que les grosses gouttelettes referont surface à l'arrière de la nappe (cf. figure 2.2). En effet, la nappe en surface se déplace sous l'effet du courant et du vent tandis que les gouttelettes au sein de la colonne d'eau ne sont soumises qu'à l'action du courant. Celle-ci se déplaçant alors moins rapidement que la nappe en surface, lorsqu'elles refont surface, elles se situent à l'arrière de la nappe ([Elliott et al., 1986](#)).

Les vagues ne se forment pas en milieu continental, à l'exception de celles formées au passage d'un bateau. Cependant, la turbulence générée par les forces de cisaillement peut

entraîner le pétrole dans la colonne d'eau (Danchuk, 2009). En effet, les contraintes exercées par les rives et le lit de la rivière agissent contre la pression et les forces de gravité s'exerçant sur l'écoulement. Les changements de profondeur, de direction et de vitesse de la rivière, comme par exemple un coude, augmentent le taux de turbulence. La turbulence cause des collisions entre les particules suspendues et les gouttes de pétrole, ce qui a pour effet de morceler la nappe de surface en grosses gouttes de pétrole qui sont alors dispersées.

Modélisation de la dispersion

Le pétrole peut être affecté par une variété de forces naturelles comme notamment les vagues. Le processus de mélange du pétrole est très complexe et la plupart des modèles utilisent la méthode de Delvigne et Sweeney (1988) qui estime la masse d'hydrocarbures entraînée par unité de surface et par unité de temps. Cette méthode découle d'un travail expérimental en bassins de différentes tailles. Une relation empirique pour le calcul du taux d'entraînement dans la colonne d'eau en fonction de l'énergie des vagues et du type d'hydrocarbure en a été déduite (Reed et al., 1999). Le nombre de gouttes d'un certain diamètre peut être relié à la taille des gouttes par une loi de puissance, indépendante du type de pétrole et des conditions de vagues :

$$Q_{d \leq D} = CD^p \quad (2.14)$$

avec $Q_{d \leq D}$ la masse de pétrole entraînée par unité de surface incluse dans les gouttes de diamètre $d \leq D$, p une constante déterminée par les expériences ($p = 1, 7$), C une fonction dépendant du pétrole et de la hauteur H_w de la vague ($C = aH_w^q$ où a est une constante reliée aux caractéristiques de l'hydrocarbure et notamment à sa viscosité et q une constante déterminée par les expériences ($q = 1, 14$))

En raison du phénomène de turbulence, les gouttes de pétrole sont uniformément mélangées dans la colonne d'eau. Tandis que les plus grosses gouttes peuvent émerger derrière la nappe de surface, les plus fines peuvent être dispersées de manière permanente dans les couches inférieures de la colonne d'eau. Selon Tkalic (2006), Tkalic et Chan (2002), le transfert de masse des gouttes d'hydrocarbures à travers la colonne d'eau est décrite par l'équation cinétique suivante :

$$\frac{dM_e}{dt} = \lambda_{ow} M_s \quad (2.15)$$

avec M_s et M_e les masses de pétrole dans la nappe de surface et dans la colonne d'eau et λ_{ow} le taux d'entraînement du pétrole dans la colonne d'eau.

La masse totale dans la nappe et dans la colonne d'eau est $M_a = M_s + M_e$. La cinétique des gouttes refaisant surface peut être décrite par l'équation du premier ordre suivante :

$$\frac{dM_e}{dt} = -\lambda_{wo}(M_e - M_e^s) \quad (2.16)$$

avec M_e^s la masse de pétrole restant dans la colonne d'eau quand les grosses gouttes ont refait surface derrière la nappe d'hydrocarbures et λ_{wo} le taux d'entraînement du pétrole vers

2.4. Présentation des différents processus mis en jeu lors d'une pollution

la surface.

En combinant les deux équations précédentes représentant deux processus en compétition, d'une part le processus de dispersion de la nappe de pétrole dans la colonne d'eau et d'autre part le processus d'émergence des grosses gouttes de pétrole issues de la colonne d'eau à l'arrière de la nappe de surface, l'équation suivante est obtenue :

$$\frac{dM_e}{dt} = \lambda_{ow}(M_a - M_e) - \lambda_{wo}(M_e - M_e^s) \quad (2.17)$$

v L'émulsification

Description du processus

L'émulsification est un processus qui conduit à la formation d'une émulsion d'eau et de pétrole (cf. figure 2.3).



Figure 2.3: *Nappe émulsionnée (CEDRE, 2009)*

Les caractéristiques de la nappe d'hydrocarbures changent grandement sous l'effet de cette émulsification, notamment au niveau du volume (multiplié par 3 ou 4), de la viscosité et de la densité du produit qui tend vers celle de l'eau. La rapidité du processus dépend des conditions du milieu. En mer, le phénomène d'émulsification est le processus le plus défavorable au regard de l'impact des pollutions et des possibilités de traitement en raison de l'augmentation du volume du polluant et de l'augmentation de la viscosité. Les corrélations établies dans les laboratoires permettent de connaître la teneur maximale en eau pour divers types de pétrole mais ne sont pas suffisantes pour modéliser le processus de façon fiable, en particulier sa vitesse dans les conditions réelles.

La modélisation du comportement d'hydrocarbures en eaux continentales est basée sur les mêmes principes que pour un déversement en mer. Seule l'émulsification peut ne pas être prise en compte car l'état d'agitation de la surface n'est généralement pas suffisant.

Modélisation de l'émulsification

La plupart des modèles utilisent un algorithme de calcul explicite, développé par Mackay et al. (1980). Cet algorithme simplifié dépend de deux paramètres qui sont le contenu maximal en eau et la constante d'émulsification. Ces paramètres sont caractéristiques de l'hydrocarbure considéré et sont donc calculés en laboratoire. Ce modèle est notamment utilisé dans ADIOS (Doré, 2001) :

$$\frac{dY}{dt} = K_{em} \left\| \vec{U}_w \right\|^2 \left(1 - \frac{Y}{Y_f} \right) \quad (2.18)$$

avec Y la fraction d'eau contenue dans le pétrole, K_{em} la constante d'émulsification, $\vec{U}_w$ la vitesse du vent et Y_f la fraction maximale d'eau pouvant être contenue dans la nappe.

K_{em} la constante d'émulsification permet de faire débiter celle-ci dès qu'une certaine fraction d'hydrocarbure est évaporée. Sa valeur est donc nulle tant qu'une certaine fraction n'est pas évaporée, puis, une fois ce seuil atteint, elle est fixée constante.

Fingas et al. (1999) suggèrent de prendre en compte la stabilité des pétroles lors de l'émulsification. La stabilité est la mesure de la perte d'eau contenue dans l'émulsion sous des conditions stagnantes. Les émulsions méso-stables vont perdre de l'eau si on garde des conditions stagnantes pendant 24 heures. Tandis que les émulsions instables vont perdre toute leur eau sous les mêmes conditions. La viscosité d'une émulsion stable peut être de 2 à 3 ordres de grandeurs plus grande que la viscosité du pétrole parent tandis que pour les émulsions instables, la viscosité n'augmente pas de plus d'un ordre de grandeur par rapport au pétrole parent. Les relations empiriques permettent d'avoir des prédictions fiables sur la viscosité des pétroles lors des émulsifications (Reed et al., 1999).

vi La photo-oxydation

La photo-oxydation est un processus d'oxydation de la nappe sous l'effet des radiations solaires ultra-violettes. Ce processus, négligeable dans les premières heures, prend de l'importance au bout d'une semaine. Ces phénomènes ne sont pas modélisés actuellement et n'ont pas fait l'objet d'études poussées.

vii La biodégradation

La biodégradation est due à la présence de micro-organismes dans l'eau. Elle peut se dérouler sur plusieurs années. Dans le cadre du projet MIGR'HYCAR, étant donné que la nappe d'hydrocarbures n'est modélisée qu'à l'échelle de la semaine, ce phénomène n'est pas considéré.

viii L'interaction entre le pétrole et la glace

Il y a un important contraste entre un hydrocarbure à surface libre et un hydrocarbure sous une glace solide. La physique de l'étalement sous la glace est complexe et est peu connue (ASCE Task Committee, 1996).

2.4. Présentation des différents processus mis en jeu lors d'une pollution

Singsaas (1994) a montré que les processus d'évaporation, de dispersion, et d'émulsification sont retardés de manière significative (Reed et al., 1999). En effet, les limitations de l'étalement dictées par la présence de glace et les faibles températures apparaissent comme les facteurs déterminants gouvernant le vieillissement de l'hydrocarbure. Yapa et al. (2005) ont formulé deux modèles 2D pour la prise en compte de l'étalement d'un hydrocarbure en présence de glace : un pour simuler l'étalement de l'hydrocarbure sous la glace et un autre pour l'étalement de l'hydrocarbure au milieu de fragments de glace. Un inconvénient majeur de l'interaction entre le pétrole et la glace est le nombre de configurations possibles à considérer. Ces différentes configurations nécessitent des modèles d'étalement différents.

De plus, selon Reed et al. (1999), la modélisation du vieillissement du pétrole en présence de glace à la surface de l'eau reste largement limitée par la modélisation de la physique de la glace qui nécessite une échelle appropriée différente de celle de la dérive de la nappe d'hydrocarbures.

2.4.3 Processus particuliers aux modèles de pollutions en eaux continentales

Généralement, lors de la création de modèle de dérive de nappe d'hydrocarbures lors d'un déversement en pleine mer, la profondeur d'eau est tellement importante que les effets de sédimentation ne sont pas pris en compte. Les modèles de dérive les plus avancés consistent à prendre en compte des algorithmes de vieillissement pour l'évaporation, la dissolution, la dégradation, le mélange vertical dans la colonne d'eau, en plus des processus de transport de convection et de diffusion. La plupart des modèles de pollution ont été développés pour les océans et les zones côtières. La modélisation du comportement des hydrocarbures dans un cours d'eau est basée sur les mêmes phénomènes que pour un déversement en mer, à l'exception de l'émulsification. Cependant, les rivières ont aussi des processus physiques différents à considérer par rapport à ceux qu'on peut trouver en pleine mer (cf. figure 2.4).

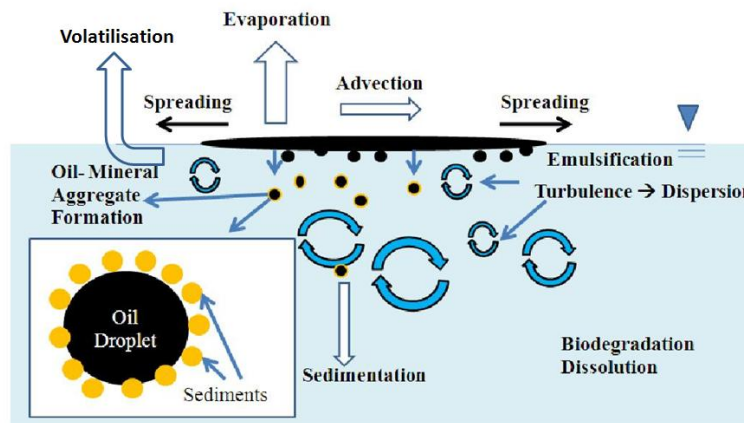


Figure 2.4: *Processus de vieillissement et de transport des hydrocarbures à la surface de l'eau (Danchuk, 2009)*

Les variations et les amplitudes de vitesses des écoulements dans les rivières ainsi que les obstructions aux écoulements tels que les îles ou les ouvrages (ponts, seuils, épis) requièrent une modélisation précise des vitesses des écoulements. La modélisation en rivière nécessite des schémas de calculs qui peuvent détecter les interactions entre le pétrole et les profils complexes des berges. De plus, les changements de hauteur d'eau affectent l'aire de la nappe ainsi que sa position relative à la berge (Yapa et Shen, 1994). Le Mississippi requiert par exemple la prise en compte de processus qui restent non pris en compte dans des modèles en pleine mer comme la retenue du pétrole sur les berges et les agrégats pétrole-minéraux (OMA) (Danchuk, 2009). La persistance du pétrole sur les côtes dépend du type de berges, des caractéristiques des sédiments, de la présence de végétaux (et donc des saisons) et de l'adhésion du pétrole sur la côte. L'interaction pétrole-minéraux est aussi un processus important dans la colonne d'eau. Lorsqu'une partie de l'hydrocarbure est dispersée dans la colonne d'eau sous forme de gouttelettes suspendues, et sous certaines conditions, des particules matérielles (minéraux, sédiments,...) peuvent couvrir les gouttes de pétroles formant des agrégats pétrole-minéraux (OMA). De plus, du fait de hauteurs d'eau plus faibles en milieu continental qu'en milieu océanique, les concentrations d'espèces dissoutes dans la colonne d'eau sont plus importantes (Hibbs et al., 1999). Pour prédire l'impact de ces espèces sur la biodiversité, il est important de tenir compte du phénomène de volatilisation. En effet, en considérant ce phénomène, il est possible de déterminer l'évolution temporelle des concentrations en espèces dissoutes dans la colonne d'eau. Par conséquent, afin de modéliser la dérive d'une nappe d'hydrocarbures dans les eaux continentales, il peut être important de prendre en compte l'interaction entre le pétrole et les berges, la formation dans la colonne d'eau des agrégats pétrole-minéraux et le phénomène de volatilisation des espèces dissoutes dans la colonne d'eau.

i Interaction entre les nappes d'hydrocarbures et les berges

Description du processus

Les études de rétention des berges et de vieillissement du pétrole après une pollution (Owens et al., 2008) ont montré que la longévité du pétrole sur une berge varie avec les caractéristiques de la berge. Cette dépendance du type de côtes sur l'écoulement a besoin d'être reconnue et incorporée dans les modèles de suivi de trajectoire de nappe d'hydrocarbures et dans les plans d'alerte à la pollution. Il est important d'identifier les facteurs affectant les distributions du pétrole sur les berges, d'évaluer la sensibilité du modèle à la remise à l'eau de l'hydrocarbure et d'améliorer la représentation des types de côtes existant le long des rivières ainsi que les interactions entre le pétrole et les berges.

Modélisation du phénomène

Cette interaction pétrole/berges est l'un des processus majeurs les plus importants à prendre en compte. Cependant l'échouage est soumis à des phénomènes divers et est très difficile à modéliser. L'adhésion de la nappe sur le sédiment, les rochers, les galets, les surfaces bétonnées, dépend de la nature de l'hydrocarbure, de son état de vieillissement et est

2.4. Présentation des différents processus mis en jeu lors d'une pollution

difficilement prévisible.

Généralement, la prise en compte du processus d'échouage nécessite de calculer la capacité maximale de tenue du pétrole sur la berge. Cette capacité maximale de tenue détermine quelle quantité de pétrole un certain type de sédiment peut retenir par unité de longueur. Ce coefficient est issu soit des données acquises lors de marées noires (Schmidt Etkin et al., 2007), soit de données expérimentales (Boufadel et al., 2006). Chao et al. (2001) ont appliqué cette méthode à l'aide d'une loi empirique reposant sur les travaux de Humphrey et al. (1993). Lorsque le pétrole excède cette valeur il va être relâché dans la rivière. Reed et al. (1999) ont calculé la capacité de tenue du pétrole à partir de sa viscosité, de la perméabilité des sédiments, de la porosité et du niveau d'eau. La loi de Darcy a été utilisée pour déterminer la profondeur de pénétration du pétrole à la surface des sédiments. Cependant, cette équation appliquée dans le domaine littoral ne prend pas en compte le type de plage. Cheng et al. (2000) ont formulé la capacité de retenue en kg de l'hydrocarbure (M^*) sur une berge en fonction des caractéristiques de l'hydrocarbure et de la berge par la relation :

$$M^* = \rho_o(S_t e_m + C_v D_p L_s) \quad (2.19)$$

avec e_m l'épaisseur maximale de la nappe, S_t l'aire de la zone d'échouage des vagues, D_p la profondeur d'infiltration de l'hydrocarbure dans le substrat, C_v le volume d'hydrocarbure contenu dans les sédiments, L_s la largeur de la zone d'échouage de la vague et ρ_o la masse volumique de l'hydrocarbure.

Les valeurs des différents paramètres de l'équation (2.19) sont directement issues des données obtenues par les équipes de nettoyage lors de marée noire (cf. tableau 2.4).

Type de berge	Epaisseur maximale d'hydrocarbures en surface (mm) en fonction de la viscosité du pétrole			Capacité de tenue d'hydrocarbure en sous-sol		Capacité de rétention maximale d'hydrocarbures estimée (m^3 Pétrole/ m^2 Sediment)		
	Léger < 30 mm^2/s	Moyen 30 – 2000 mm^2/s	Lourd > 2000 mm^2/s	Profondeur de pénétration (mm)	teneur en pétrole par volume (%)	Léger < 30 mm^2/s	Moyen 30 – 2000 mm^2/s	Lourd > 2000 mm^2/s
Falaise	0,5	2	2	0	0	0,0005	0,0020	0,0020
Plage de sable	4	17	25	50	9,8	0,0040	0,0170	0,0250
Sable/Gravier	2	9	15	180	8,3	0,0021	0,0091	0,0151
Estran	3	6	10	0	0	0,0030	0,0060	0,0100
Côte rocheuse	1	5	10	0	0	0,0010	0,0050	0,0100
Marécage	6	30	40	-	-	0,0060	0,0300	0,0400
Sol argileux	1	4	10	0	0	0,0010	0,0040	0,0100

Tableau 2.4: Capacité de tenue du pétrole sur différents types de berges, extrapolée des travaux de Cheng et Gundlach (Schmidt Etkin et al., 2007)

Une fois le taux maximal de pétrole ayant pénétré le substrat (la berge) atteint, le pétrole à

la surface de celui-ci peut être relargué dans l'environnement plus facilement s'il est accessible. Dans les études de [Danchuk et Wilson \(2010\)](#) et de [Zhang et al. \(1997\)](#), un modèle de demi-vie pour la remise à l'eau du pétrole échoué sur la berge est utilisé. La demi-vie de remise à l'eau représente l'adhérence du pétrole sur une berge en fonction de la porosité de celle-ci, des propriétés du pétrole, de la végétation et des processus environnementaux. Le temps de demi-vie pour la remise à l'eau du pétrole, λ , est utilisé pour déterminer la probabilité d'une parcelle de pétrole de se remettre à flotter, $P_{refloat}$, après s'être échouée sur une berge durant un temps t en heure. La méthode adoptée par [Danchuk et Wilson \(2010\)](#) est la suivante :

- Pour chaque particule d'hydrocarbure dans le modèle Lagrangien, un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 est tiré, $R_{(0,1)}$
- La probabilité de remise à l'eau $P_{refloat}$ est calculée par :

$$P_{refloat} = 1 - \exp\left(-\frac{t \ln 2}{\lambda}\right) \quad (2.20)$$

- $P_{refloat}$ est comparé à $R_{(0,1)}$, si $R_{(0,1)} < P_{refloat}$, alors la particule est remise à l'eau

Les points importants de l'étude de [Danchuk et Wilson \(2010\)](#) dans le cas du Mississippi ont montré que :

- Les différents types de berges pour différents débits vont retenir le pétrole différemment,
- L'utilisation de la méthode de demi-vie pour la remise à l'eau du pétrole corrélée en fonction du type de la berge montre la sensibilité du modèle par rapport au paramètre du temps de demi-vie λ .
- Les différentes combinaisons de débits, de géométrie de rivière et de côte mènent à une variation significative du dépôt de pétrole.

En conclusion, selon ces auteurs, il est important, lors de la modélisation d'un environnement contenant une multitude de berges différentes, de représenter chacun de ces types afin de prédire correctement la distribution de pétrole qui va en résulter.

ii Les agrégats pétrole-minéraux

Description du phénomène des agrégats pétroles-minéraux (OMA)

Le mélange vertical peut causer un détachement de pétrole à la surface de la nappe. Celui-ci sera alors dispersé dans la colonne d'eau sous forme de gouttelettes suspendues. Une fois dans la colonne d'eau, et sous certaines conditions, des matières en suspension (MES) peuvent couvrir les gouttes de pétrole formant des agrégats pétrole-minéraux (OMA). Ce processus est différent de l'adsorption de sédiments par le pétrole. Le taux de formation de ces agrégats dépend des caractéristiques particulières, des concentrations de ces minéraux ([Delvigne \(2002\)](#); [Guyomarch et al. \(1999\)](#)), des tailles des gouttes de pétrole ainsi que de leur nombre, des températures, de la salinité, de l'énergie de mélange et des propriétés du pétrole.

Les OMA réduisent les nappes d'hydrocarbures en surface, augmentent la biodégradation dans la colonne d'eau et réduisent le taux de pétrole adhérent à la berge. [Lee et Stoffyn-Egli](#)

2.4. Présentation des différents processus mis en jeu lors d'une pollution

(2001) ont conclu que la formation d'agrégats est un processus important, responsable de 10 à 30% de pétrole non pris en compte. Le débit annuel de la rivière, la concentration des sédiments suspendus et la température varient au cours des saisons. La combinaison de ces trois paramètres augmente la formation des agrégats. La formation d'agrégats estimée doit être ajoutée à l'équation de l'équilibre des masses de la nappe d'hydrocarbures. Près de 36% d'une nappe d'hydrocarbures peut devenir un agrégat pétrole-minéraux. Ce taux dépend des conditions environnementales et des caractéristiques de la nappe.

Calcul des OMA

Selon Danchuk (2009), le pétrole qui interagit avec les sédiments suspendus peut former des agrégats qui ont une flottabilité positive ou négative. Les agrégats pétrole-minéraux sont formés lorsque le pétrole est recouvert d'une fine pellicule de minéraux. La taille et la concentration des sédiments, la température, la salinité, la concentration du nombre de gouttes et les propriétés du pétrole influencent la formation des OMA.

Danchuk (2009) cite Khelifa et al. (2002) pour calculer le potentiel de formation des agrégats en fonction de la température, de la masse d'asphaltène et de résine (ARC) contenue dans le pétrole. Il donne l'équation suivante :

$$W_o = W_{ar} 0,3 \exp \left[3,23 \left(\frac{\nu}{\nu_o} \right)^{-0,22} \right] \quad (2.21)$$

où W_o est le rapport entre la masse de pétrole stabilisée par les agrégats et la masse initiale de pétrole introduit dans le système. Le rapport de viscosité est donné par :

$$\frac{\nu}{\nu_o} = \beta \exp(\gamma W_{ar}) \quad (2.22)$$

avec β et γ qui sont fonctions de la température, W_{ar} est le pourcentage en masse des asphaltènes et des résines dans le pétrole, ν_o est la viscosité de la goutte et ν est la viscosité de l'eau. Ensuite, la relation suivante permet de calculer le potentiel d'OMA :

$$E = \frac{E_{max} \left(\frac{C_s}{C_{s50}} \right)^n}{\left[1 + \left(\frac{C_s}{C_{s50}} \right)^n \right]} \quad (2.23)$$

où E est la fraction de pétrole contenu dans l'agrégat, E_{max} est le contenu maximal, C_s est la concentration en sédiment. Les valeurs $E_{max} = 85\%$ et $n = 3$ sont utilisées par Danchuk (2009) pour son étude dans le cas du Mississippi. La concentration critique en sédiment C_{s50} (kg/m^3) est donnée par la relation :

$$C_{s50} = \frac{\alpha \rho_s D_s}{\rho_o D_o} C_o \quad (2.24)$$

avec α un facteur sans dimension, ρ_s la masse volumique des sédiments, D_s le diamètre moyen des sédiments, ρ_o la masse volumique du pétrole, D_o le diamètre moyen des gouttes d'hydrocarbures et C_o la concentration massique du pétrole.

iii La volatilisation

Description du processus

La volatilisation est le phénomène de transfert de matière d'espèces dissoutes présentes dans l'eau vers l'atmosphère. La plupart des modèles de dérive de nappe d'hydrocarbures ne prennent pas en compte ce phénomène. En effet, lorsque l'on considère des pollutions intervenant dans les océans, les hauteurs d'eau sont très importantes. Les espèces dissoutes sous la nappe d'hydrocarbures peuvent être alors considérées comme infiniment diluées, et donc la volatilisation de ces espèces dans l'atmosphère peut être négligée. Cependant dès que l'on se place dans le domaine des eaux continentales (rivière, lac, estuaire), les hauteurs d'eau sont nettement plus faibles qu'en milieu océanique. La concentration en espèces dissoutes est alors plus importante (Hibbs et al., 1999). Pour prédire les risques sur la biodiversité, il est alors important d'estimer et de suivre l'évolution de la concentration des espèces dissoutes dans la colonne d'eau. Cette évolution est directement influencée par le phénomène de volatilisation. En effet, selon French McCay et Payne (2001), la volatilisation des espèces les plus volatiles de la colonne d'eau (Hydrocarbures Aromatiques Monocycliques (HAM)) fait que les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP) sont les espèces majoritaires présentes dans la colonne d'eau après une pollution.

Modélisation

L'expression générale du flux de matière qui se volatilise dans l'atmosphère est issue de la théorie du double film de Whitman (1923) (Hibbs et Gulliver, 1999) et a pour expression :

$$F_{Vi} = K_{vol}C_i \quad (2.25)$$

$$\text{avec } \frac{1}{K_{vol}} = \frac{1}{k_l} + \frac{1}{k_g H} \quad (2.26)$$

$$\Rightarrow K_{vol} = \frac{k_l k_g H}{k_l + k_g H} \quad (2.27)$$

avec pour chaque composé i : K_{vol} est le coefficient de transfert de masse de la volatilisation, F_{Vi} le flux de matière dissoute se volatilisant, C_i la concentration du composé i dans la phase aqueuse, k_l et k_g les coefficients de transfert à l'interface liquide (eau) et à l'interface gazeuse (atmosphère) et $H = (PM_{wi})/(S_i RT)$ la constante de la loi de Henry avec P la pression, M_{wi} la masse molaire, S_i la solubilité, T la température et R la constante universelle des gaz parfaits.

Comme pour les processus de dissolution et d'évaporation, la difficulté principale pour la prise en compte du processus de volatilisation est la détermination du coefficient de transfert de masse K_{vol} . Différentes formules existent pour déterminer l'expression des coefficients de transfert de masse k_l et k_g . Reed et al. (1995) ont utilisé les relations proposées par Lyman et al. (1982) :

$$k_l = 20\sqrt{\frac{44}{M_w}} \text{ (cm/h)} \text{ et } k_g = 3000\sqrt{\frac{18}{M_w}} \text{ (cm/h)} \quad (2.28)$$

Cependant, selon Hibbs et al. (1997) qui cite Moong et Jirka (1995), les meilleures relations empiriques de détermination de k_l et k_g ont un intervalle de confiance à 95% compris entre une valeur allant de 1 à 3 fois la valeur de k_i ($i = g$ ou l). Par conséquent, ces relations permettent seulement de donner un ordre de grandeur des coefficients de transfert. La détermination de ces coefficients représente une des plus grandes sources d'incertitude dans les modèles de dérive de nappe d'hydrocarbures.

2.5 Conclusion

Nous disposons maintenant d'une vue générale de la littérature traitant de la modélisation de la dérive de nappe d'hydrocarbures. Nous pouvons à présent choisir les algorithmes à intégrer dans notre module en justifiant ces choix.

Dans ce travail, nous considérons que le mouvement de la nappe d'hydrocarbures est essentiellement dû à la dérive sous l'effet du vent et du courant de surface. La nappe subira au cours de son déplacement des pertes par évaporation au contact de l'air, celui-ci étant renouvelé en présence du vent, et par dissolution au contact de l'eau. Ces processus dépendant directement de l'étalement à travers l'aire de la nappe, conduiront à une réduction progressive du volume total de la nappe en surface. Le transport des substances dissoutes dans la colonne d'eau par le courant sera représenté. Ce flux d'hydrocarbures dissous sera alimenté par la nappe d'hydrocarbures en surface. La volatilisation des espèces dissoutes dans la colonne d'eau lorsqu'il n'existe pas de nappe d'hydrocarbures flottant en surface est considérée.

Par ailleurs, les phénomènes suivants seront négligés :

- La biodégradation de l'hydrocarbure au contact de l'eau et de l'air. Ce phénomène intervient à long terme : il s'agit d'un processus très lent qui agit principalement après que les effets de l'évaporation et de la dissolution se soient fait sentir. Le modèle ainsi développé permet des prévisions à court terme (quelques jours).
- Le transfert dans l'écoulement d'hydrocarbures par d'autres phénomènes que la dissolution : il peut s'agir de la photo-oxydation rendant soluble un composé initialement non soluble, de la sédimentation d'agglomérats de particules d'hydrocarbures, de l'adsorption d'hydrocarbures par les sédiments, la dispersion de l'hydrocarbure par brassage mécanique. La physique de ces processus n'est pas encore bien appréhendée il en ressort une modélisation non encore opérationnelle et complexe.
- L'émulsification créée par les vagues désigne le mélange du polluant et de l'eau. L'émulsion tend à modifier la densité de la nappe d'hydrocarbures et conduit à long terme à une sorte de mousse. Ce processus se retrouve essentiellement dans le domaine côtier où la houle génère un brassage "régulier" du mélange eau-hydrocarbure. Il est donc moins pertinent de prendre en compte l'émulsification dans les eaux continentales (à l'exception des estuaires) et pour les produits considérés.

Chapitre 2. Etat de l'art

Les différents processus physiques étant définis et choisis, il est important de présenter l'outil dans lequel ils seront modélisés.

Chapitre 3

Le système de modélisation TELEMAC

Sommaire

3.1	Introduction	48
3.2	Présentation du système hydro-informatique TELEMAC	48
3.3	Les équations de l'hydrodynamique à surface libre	49
3.4	Lois de fermeture	55
3.5	Discussion des méthodes de résolution	60
3.6	Conclusion	64

3.1 Introduction

La prédiction de dérive de nappes d'hydrocarbures nécessite le couplage des équations de transport et des cinétiques chimiques avec un modèle hydrodynamique. En effet, la qualité de prévision du transport de nappe d'hydrocarbures dépend de la qualité des données hydrodynamiques. Ce chapitre présente ainsi les outils numériques du système hydro-informatique TELEMAC utilisés par la suite. Il est inspiré du livre “*Hydrodynamics of free surface flows : modelling with the finite element method*” (Hervouet, 2007).

3.2 Présentation du système hydro-informatique TELEMAC

Le système hydro-informatique TELEMAC est un système complet de modélisation open-source (www.opentelemac.org) permettant des simulations numériques dans les domaines de l'hydrodynamique bi- et tri-dimensionnelle : houle (Artemis, Tomawac), courants (TELEMAC-2D, TELEMAC-3D), transport sédimentaire (Sisyphe) et qualité de l'eau (Delwaq, développé par Deltares) (cf. figure 3.1).

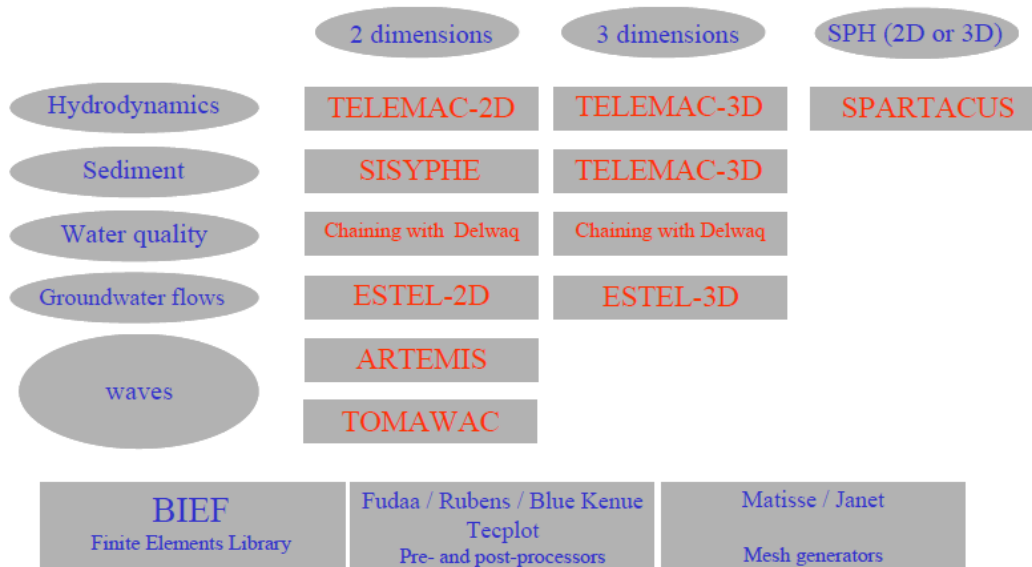


Figure 3.1: Le système hydro-informatique TELEMAC (Hervouet, 2001)

Le système TELEMAC est développé depuis 1987 par le Laboratoire National d'Hydraulique et Environnement (LNHE) de la Direction des Recherches et Développement d'EDF :

- Le logiciel TELEMAC-2D résout les équations de Barré de Saint-Venant à deux dimensions. Ses principaux résultats sont, en chaque point du maillage, la hauteur d'eau et le champs de vitesse horizontal moyenné sur la verticale.
- Le logiciel TELEMAC-3D résout les équations tridimensionnelles de l'hydraulique à surface libre (avec ou sans l'hypothèse de pression hydrostatique) et de transport-diffusion

3.3. Les équations de l'hydrodynamique à surface libre

de grandeurs intrinsèques (température, salinité, concentration). Ses résultats principaux sont, en chaque point du maillage, la vitesse dans les trois directions et la concentration des grandeurs transportées. Le maillage, construit entre le fond et la surface libre, évolue avec le temps.

Le code de calcul TELEMAC est dédié à l'hydraulique à surface libre, maritime ou fluviale. Les domaines d'application du logiciel sont nombreux :

- Maritime : le dimensionnement d'ouvrages portuaires, l'étude de l'impact de la construction de digues submersibles ou de dragages, l'impact du rejet d'un émissaire côtier, l'étude de panaches thermiques ou salins ;
- Fluvial : l'étude de l'impact de la construction d'ouvrages (ponts, seuils, épis), les ruptures de barrages, les études d'inondation, le transport de traceurs conservatifs ou non ;
- Cas spéciaux d'applications : la rupture de réservoirs industriels, la chute d'avalanche dans un réservoir, etc...

3.3 Les équations de l'hydrodynamique à surface libre

3.3.1 Les équations de Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes sont les équations de base de la mécanique des fluides. Louis Marie Henri Navier (1785-1836) a proposé, en 1820, d'intégrer un terme de dissipation d'énergie dans l'équation d'Euler pour tenir compte des forces de frottements dans le fluide. Par la suite, en collaboration avec George Gabriel Stokes (1819-1903), ils vont publier en 1845 les équations connues depuis sous le nom d'équations de Navier-Stokes ([Gallagher, 2010](#)).

i Intégrale de volume

Considérons un ensemble de particules fluides contenues dans un volume Ω de surface Σ . On cherche à déterminer la dérivée particulaire de l'intégrale de volume $I(t)$ (Eq. (3.1)) de la fonction scalaire ($M \mapsto A(M, t)$) :

$$I(t) = \iiint_{\Omega} A(M, t) dv \quad (3.1)$$

La fonction $A(M, t)$ est définie au point géométrique M . Pour suivre la grandeur A dans son mouvement, il faut attacher le point géométrique M à un élément matériel et le suivre dans son mouvement. Le domaine d'intégration Ω varie au cours du temps, la dérivée particulaire s'écrit donc :

$$\frac{dI}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\iiint_{\Omega(t)} A(M, t) dv \right) = \frac{d}{dt} \left(\iiint_{\Omega(t)} A(x_1, x_2, x_3, t) dx_1 dx_2 dx_3 \right) \quad (3.2)$$

Pour calculer cette intégrale et passer la dérivée sous l'intégrale, il est nécessaire de faire un changement de variables $\Omega \mapsto \Omega_0$ (fixe) :

$$\frac{dI}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\iiint_{\Omega_0} A(x_1^0, x_2^0, x_3^0, t) J dx_1^0 dx_2^0 dx_3^0 \right) \quad (3.3)$$

$$\text{avec } J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial x_1^0} & \frac{\partial x_1}{\partial x_2^0} & \frac{\partial x_1}{\partial x_3^0} \\ \frac{\partial x_2}{\partial x_1^0} & \frac{\partial x_2}{\partial x_2^0} & \frac{\partial x_2}{\partial x_3^0} \\ \frac{\partial x_3}{\partial x_1^0} & \frac{\partial x_3}{\partial x_2^0} & \frac{\partial x_3}{\partial x_3^0} \end{vmatrix}$$

Puisque Ω_0 est fixe, on peut désormais passer la dérivée en temps $\frac{d}{dt}$ sous le signe intégral :

$$\frac{dI}{dt} = \iiint_{\Omega_0} \frac{d(AJ)}{dt} dv_0 = \iiint_{\Omega_0} \left(J \frac{dA}{dt} + A \frac{dJ}{dt} \right) dv_0 \quad (3.4)$$

En repassant de nouveau en variables eulériennes ($\Omega_0 \mapsto \Omega$) :

$$\frac{dI}{dt} = \iiint_{\Omega(t)} \left(\frac{dA}{dt} + A \frac{1}{J} \frac{dJ}{dt} \right) dv \quad (3.5)$$

Or, $\frac{1}{J} \frac{dJ}{dt} = \nabla \cdot \vec{U}$ (où ∇ est l'opérateur tensoriel "nabla", en 3D $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right)$) ce qui donne finalement, l'expression de la dérivée particulaire de l'intégrale de volume $I(t)$ suivante :

$$\frac{dI}{dt} = \frac{d}{dt} \iiint_{\Omega(t)} A(M, t) dv = \iiint_{\Omega(t)} \left(\frac{dA}{dt} + A \nabla \cdot (\vec{U}) \right) dv \quad (3.6)$$

$$= \iiint_{\Omega(t)} \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \nabla \cdot (A \cdot \vec{U}) \right) dv \quad (3.7)$$

$$= \iiint_{\Omega(t)} \frac{\partial A}{\partial t} dv + \iint_{\Sigma} A \cdot \vec{U} \vec{n} ds \quad (3.8)$$

Ceci n'est autre que la démonstration du théorème de Leibnitz.

ii Equation de continuité

En appliquant le théorème de Leibnitz (Eq. (3.8)) sur la masse volumique ρ d'un fluide ayant une vitesse $\vec{U} = (U_1, U_2, U_3)$, l'équation de conservation de la masse est déduite :

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} \rho d\Omega \right) = \int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma} \rho \vec{U} \cdot \vec{n} d\Gamma \quad (3.9)$$

Le flux à travers les frontières du domaine, $\int_{\Gamma} \rho \vec{U} \cdot \vec{n} d\Gamma$, peut être ramené à l'intégrale du volume $\int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho \vec{U}) d\Omega$ par le théorème de Stokes (Eq. (3.7)). En faisant alors tendre le domaine Ω vers 0, l'expression locale de l'équation de conservation de la masse est obtenue :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U}) = 0 \quad (3.10)$$

iii Equation de conservation de la quantité de mouvement

En mécanique, le principe fondamental de la dynamique d'un corps solide est régi par la deuxième loi de Newton :

$$\vec{f} = \frac{d}{dt}(m\vec{U}) \quad (3.11)$$

L'établissement de la loi de conservation de la quantité de mouvement en mécanique des fluides est simplement l'écriture de la deuxième loi de Newton appliquée au domaine fluide contenu dans le domaine Ω . L'équivalent du terme $\frac{d}{dt}(m\vec{U})$ peut s'écrire sous la forme $\frac{d}{dt}(\int_{\Omega} \rho \vec{U} d\Omega)$ pour un fluide contenu dans un volume de contrôle Ω . En appliquant le théorème de Leibnitz et plus particulièrement l'équation (3.7), l'intégrale de volume de la quantité de mouvement peut s'écrire :

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega} \rho \vec{U} \right) = \int_{\Omega} \frac{\partial(\rho \vec{U})}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla(\rho \vec{U} \otimes \vec{U}) d\Omega \quad (3.12)$$

où $\otimes$ désigne le produit entre deux tenseurs d'ordre 1.

Le vecteur $\vec{f}$ représente la somme des forces volumiques extérieures, qui agissent sur le corps, et les forces de surface agissant à la surface de celui-ci :

- les forces extérieures volumiques sont notées $\vec{g} + \vec{F}$, en distinguant l'accélération de la force de gravité ($\vec{g} = (0, 0, -g)$) et les autres forces ($\vec{F} = (F_{x_1}, F_{x_2}, F_{x_3})$) (accélération de Coriolis, etc...).
- Soit $d\Gamma$ un élément de surface du domaine Ω dont la normale extérieure est $\vec{n}$, les forces de contact s'exerçant sur $d\Gamma$ sont $d\vec{F} = \underline{\underline{\sigma}} \vec{n} d\Gamma$, où $\underline{\underline{\sigma}}$ est le tenseur symétrique d'ordre 2 des contraintes.

Les forces s'exerçant sur le domaine Ω sont donc :

$$\int_{\Omega} \rho (\vec{g} + \vec{F}) d\Omega + \int_{\Gamma} \underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n} d\Gamma = \int_{\Omega} \rho (\vec{g} + \vec{F}) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} d\Omega \quad (3.13)$$

Donc finalement, en description locale, l'expression de la conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{\partial(\rho \vec{U})}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{U} \otimes \vec{U}) = \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \rho \vec{g} + \rho \vec{F} \quad (3.14)$$

En considérant un fluide newtonien pour un écoulement incompressible, le tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ peut être exprimé comme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -P \underline{\underline{\delta}} + 2\mu \underline{\underline{D}}$$

où P est la pression exprimée en Pascals, $\underline{\underline{\delta}}$ est le tenseur identité, μ est le coefficient de viscosité et $\underline{\underline{D}}$ est le tenseur du taux des déformations symétriques par construction :

$$\underline{\underline{D}} = \frac{1}{2} (\nabla \vec{U} + {}^t \nabla \vec{U}) \quad (3.15)$$

où t désigne l'opérateur de transposition.

Le coefficient de viscosité dynamique μ est constant et dépend du fluide. Il est égal à $\rho\nu$, où ν est le coefficient de viscosité cinématique (en m^2/s).

En résumé, dans le cas d'un fluide incompressible et newtonien, les équations de Navier-Stokes sous forme cartésienne s'écrivent :

– Conservation de la masse :

$$\frac{\partial U_1}{\partial x_1} + \frac{\partial U_2}{\partial x_2} + \frac{\partial U_3}{\partial x_3} = 0 \quad (3.16)$$

– Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial U_1}{\partial t} + U_1 \frac{\partial U_1}{\partial x_1} + U_2 \frac{\partial U_1}{\partial x_2} + U_3 \frac{\partial U_1}{\partial x_3} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_1} + \nu \Delta U_1 + F_{x_1} \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial U_2}{\partial t} + U_1 \frac{\partial U_2}{\partial x_1} + U_2 \frac{\partial U_2}{\partial x_2} + U_3 \frac{\partial U_2}{\partial x_3} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_2} + \nu \Delta U_2 + F_{x_2} \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial U_3}{\partial t} + U_1 \frac{\partial U_3}{\partial x_1} + U_2 \frac{\partial U_3}{\partial x_2} + U_3 \frac{\partial U_3}{\partial x_3} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_3} - g + \nu \Delta U_3 + F_{x_3} \quad (3.19)$$

Avec l'équation de conservation de la masse et le fait que μ est constant en espace, le terme $\frac{1}{\rho} \nabla \cdot (2\mu \underline{D})$ peut se simplifier sous la forme $\nu \Delta \vec{U}$ (où Δ désigne l'opérateur laplacien, en 3D $\Delta = \left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial x_3} \right)$).

Les équations de Navier-Stokes comportent quatre inconnues (P, U_1, U_2 et U_3) qui peuvent être déterminées à l'aide de l'équation de continuité et des projections de l'équation de conservation de la quantité de matière sur chaque composante spatiale.

3.3.2 Les équations de Saint-Venant

Adhémar Barré, comte de Saint-Venant (1797-1886) se fait connaître en 1834 par deux études présentées à l'Académie des Sciences sur la mécanique théorique et la mécanique des fluides. Il entre à l'Académie des Sciences en 1868. Les équations appelées “de Barré de Saint-Venant” ont été publiées en 1871 et sont aujourd'hui d'une extrême importance en hydraulique maritime et fluviale. Elles régissent les écoulements à surface libre en eaux peu profondes (Weiyen, 1992).

i Hypothèses

Les équations de Saint-Venant se déduisent des équations de Navier-Stokes dans le cas où la profondeur de l'écoulement (h) est faible devant l'échelle horizontale (L) de la variation de la surface libre et de la vitesse ($\frac{h}{L} \ll 1$). En plus de cette hypothèse, l'existence de termes non linéaires dans l'équation de Navier-Stokes oblige à d'autres hypothèses et approximations. Il sera fondamental de garder en mémoire ces hypothèses et approximations qui constituent des limitations et sont responsables de l'existence d'un domaine de validité des équations de Saint-Venant :

3.3. Les équations de l'hydrodynamique à surface libre

- Pression hydrostatique : l'accélération du fluide selon l'axe vertical due à la pression équilibre la gravité. On parle alors de *pression hydrostatique*, cette hypothèse permet de relier directement la pression à la hauteur d'eau.
- Vitesses verticales négligeables : la vitesse verticale est négligée dans les équations de Saint-Venant (sauf pour établir l'équation de continuité). Cette hypothèse est en accord avec l'hypothèse d'hydrostaticité qui exige que les accélérations verticales soient négligeables.
- Imperméabilité de la surface et du fond : cette hypothèse suppose qu'il n'y a aucun transfert de masse d'eau à travers la surface et le fond.

Le domaine d'application du code de calcul développé au cours de cette thèse englobe les eaux continentales, c'est-à-dire les lacs, les rivières et les estuaires. Dans la plupart de ces applications les hypothèses des équations de Saint-Venant sont vérifiées, notamment en rivière. Cependant certaines applications sortent du cadre de validité de ces équations et nécessitent une modélisation 3D comme par exemple dans les estuaires, où la salinité, notamment au niveau de l'embouchure, peut provoquer des écoulements fortement stratifiés dont la vitesse verticale est non négligeable.

ii Equation de continuité moyennée sur la verticale

Afin d'établir les équations de Saint-Venant, il est nécessaire de moyenner verticalement les équations de Navier-Stokes pour un fluide incompressible ($\rho = \text{constant}$) avec hypothèse de pression hydrostatique, par intégration du fond à la surface du domaine. Considérons les deux nouvelles variables représentant les composantes horizontales de la vitesse de l'écoulement moyennées sur la verticale :

$$u_1 = \frac{1}{h} \int_{Z_f}^{Z_s} U_1 dx_3 \text{ et } u_2 = \frac{1}{h} \int_{Z_f}^{Z_s} U_2 dx_3 \quad (3.20)$$

où h est la hauteur d'eau, Z_s et Z_f sont les cotes en surface et au fond du domaine respectivement (nous avons donc la relation $h = Z_s - Z_f$).

En reprenant l'équation de continuité (3.16) et en intégrant celle-ci sur la verticale, la relation suivante peut être établie :

$$\int_{Z_f}^{Z_s} \left[\frac{\partial U_1}{\partial x_1} + \frac{\partial U_2}{\partial x_2} + \frac{\partial U_3}{\partial x_3} \right] dx_3 = 0 \quad (3.21)$$

Par intégration et la règle de calcul intégral de Leibnitz :

$$\begin{aligned} \int_{Z_f}^{Z_s} \left(\frac{\partial U_1}{\partial x_1} + \frac{\partial U_2}{\partial x_2} + \frac{\partial U_3}{\partial x_3} \right) dx_3 &= U_3(Z_s) - U_3(Z_f) \\ + \frac{\partial}{\partial x_1} \int_{Z_f}^{Z_s} U_1 dx_3 - U_1(x_1, x_2, Z_s) \frac{\partial Z_s}{\partial x_1} &+ U_1(x_1, x_2, Z_f) \frac{\partial Z_f}{\partial x_1} \end{aligned}$$

$$+ \frac{\partial}{\partial x_2} \int_{Z_f}^{Z_s} U_2 dx_3 - U_2(x_1, x_2, Z_s) \frac{\partial Z_s}{\partial x_2} + U_2(x_1, x_2, Z_f) \frac{\partial Z_f}{\partial x_2} \quad (3.22)$$

En prenant en compte l'hypothèse d'imperméabilité des parois, cette équation se simplifie en :

$$\frac{\partial}{\partial x_1}(hu_1) + \frac{\partial}{\partial x_2}(hu_2) + \frac{\partial Z_s}{\partial t} - \frac{\partial Z_f}{\partial t} = 0 \quad (3.23)$$

Soit :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \text{div}(h\vec{u}) = 0 \quad (3.24)$$

où $\vec{u} = (u_1, u_2)$ est la vitesse de l'écoulement en 2D.

Par analogie avec l'équation de continuité des équations de Navier-Stokes, on peut remarquer que dans les équations de Saint-Venant, la hauteur d'eau joue le rôle de la masse volumique.

iii Equation de quantité de mouvement moyennée sur la verticale

L'équation de Navier-Stokes (Eq. (3.14)) peut être développée en une forme dite "non-conservative" :

$$\frac{\partial(\rho\vec{U})}{\partial t} + \nabla(\rho\vec{U} \otimes \vec{U}) = \rho \frac{\partial\vec{U}}{\partial t} + \rho\vec{U}\nabla(\vec{U}) + \vec{U} \left(\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{U}) \right) \quad (3.25)$$

$$= \rho \frac{\partial\vec{U}}{\partial t} + \rho\vec{U}\nabla(\vec{U}) \quad (3.26)$$

$$\rho \frac{\partial(\vec{U})}{\partial t} + \rho\vec{U}\nabla(\vec{U}) = -\nabla P + \rho\vec{g} + \mu\Delta\vec{U} + \rho\vec{F} \quad (3.27)$$

En moyennant l'équation (3.27) sur la verticale de la même manière que pour l'équation de continuité, les équations de quantité de mouvement de Saint-Venant peuvent être exprimées :

$$\frac{\partial(hu_1)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_1}(hu_1u_1) + \frac{\partial}{\partial x_2}(hu_1u_2) = -gh \frac{\partial Z_s}{\partial x_1} + hF_{x_1} + \nabla \cdot (h\nu_{td} \vec{\nabla} u_1) \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial(hu_2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_1}(hu_1u_2) + \frac{\partial}{\partial x_2}(hu_2u_2) = -gh \frac{\partial Z_s}{\partial x_2} + hF_{x_2} + \nabla \cdot (h\nu_{td} \vec{\nabla} u_2) \quad (3.29)$$

avec ν_{td} la viscosité cinématique incluant la turbulence et la dispersion.

3.3.3 Equation du traceur en 2D et 3D

Selon la loi de Fick, la variation de masse d'une substance passive de concentration C ($d(\rho C)/dt$) est égale à la variation du flux de matière $\nabla \cdot \vec{J}$, ce qui se traduit par :

$$\frac{d(\rho C)}{dt} = \nabla \cdot \vec{J} + F_{source} \quad (3.30)$$

En appliquant le théorème de Leibnitz (Eq. 3.8) à la dérivée en temps, l'équation de conservation 3D d'un polluant de concentration C est obtenue :

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C \vec{u}) = \nabla \cdot \vec{J} + F_{source} \quad (3.31)$$

avec $\vec{J} = K_c \vec{\nabla} C$ le flux de matière où K_c est le coefficient de diffusion du traceur.

En 2D, cette équation doit être moyennée sur la verticale, or, par analogie, avec les équations de Navier-Stokes, on peut remarquer que dans les équations de Saint-Venant, la hauteur d'eau joue le rôle de la masse volumique, ce qui donne :

$$\frac{\partial(hC)}{\partial t} + \nabla \cdot (hC \vec{u}) = \nabla \cdot (K_c \vec{\nabla} C) + C_{scc} S_{cc} \quad (3.32)$$

avec C_{scc} la valeur de quantité de polluant ajoutée à la source et S_{cc} le flux de la source en m/s.

3.4 Lois de fermeture

3.4.1 Modèle de turbulence $k - \epsilon$

Le mouvement d'un fluide newtonien est régi par les équations de Navier-Stokes qui dans l'approximation de Boussinesq sont décrites par les équations de quantité de mouvement (3.17-3.19) et l'équation de continuité (3.16). Afin de simplifier l'écriture de ces équations, la notation tensorielle dite "d'Einstein" est adoptée par la suite :

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_k \partial x_k} + g_i \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.34)$$

où l'indice i représente la direction de l'écoulement considérée, et les indices se répétant au moins deux fois dans un même terme représentent implicitement la sommation du terme considéré selon toutes les directions (exemple avec le terme $U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j}$ l'indice j est répété deux fois et i une seule fois donc $U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = U_1 \frac{\partial U_i}{\partial x_1} + U_2 \frac{\partial U_i}{\partial x_2} + U_3 \frac{\partial U_i}{\partial x_3}$).

Les écoulements turbulents continuent à obéir aux équations de Navier-Stokes. Cependant, à cause du terme non linéaire de convection, les instabilités sont amplifiées lorsque la vitesse

croît. La difficulté réside alors dans le fait que les fluctuations qui apparaissent sont d'échelles de plus en plus fines, trop petites vis-à-vis de la résolution, soit des instruments de mesures courants, soit d'un maillage de calcul (Viollet et al., 2002). Le raisonnement doit alors se faire au niveau de grandeurs moyennes.

Considérons une quantité $\phi(\vec{x}, t)$, décomposée en une moyenne $\bar{\phi}$ et une fluctuation ϕ' :

$$\phi(\vec{x}, t) = \bar{\phi} + \phi' \quad (3.35)$$

La moyenne temporelle effectuée sur une seule expérience menée sur un temps long ($\bar{\phi}$) est définie par :

$$\bar{\phi} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \phi(\vec{x}, t) dt \quad (3.36)$$

On peut aussi considérer que la moyenne est faite sur un grand nombre de réalisations de la même expérience. En introduisant cette décomposition aux équations (3.34) et (3.33) et en appliquant ensuite l'opérateur moyenne :

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \bar{U}_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_k \partial x_k} + g_i - \left(\frac{\partial \bar{U}_i' \bar{U}_j'}{\partial x_j} \right) \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.38)$$

Le dernier terme de l'équation (3.37) ($R_{ij} = \bar{U}_i' \bar{U}_j'$) représente le transfert de quantité de mouvement par les fluctuations turbulentes. Ce terme est communément appelé "contrainte de Reynolds" et apparaît comme une inconnue supplémentaire introduite par la décomposition de Reynolds. Dès lors, pour résoudre le système d'équations (3.37), il est nécessaire d'introduire une "hypothèse de fermeture" permettant ainsi le calcul des contraintes turbulentes à partir des variables représentant l'écoulement moyen. Le modèle de turbulence de Boussinesq (1880) consiste à considérer que l'interaction entre le champ moyenné et le champ fluctuant se réduit à un terme de dissipation et de diffusion :

$$R_{ij} = \frac{2}{3} k \delta_{ij} - 2\nu_t \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.39)$$

L'équation précédente fait intervenir deux nouveaux termes :

- le terme isotrope d'énergie cinétique turbulente $k = \frac{1}{2} \bar{U}_i' \bar{U}_i'$ attribue à l'énergie cinétique turbulente le rôle d'une pression turbulente due aux mouvements d'agitation,
- la viscosité turbulente ν_t .

Les écritures des équations de Navier-Stokes et de Saint-Venant, respectivement présentées section 3.3.2 et section 3.3.1, restent alors valables (en considérant les variables comme les grandeurs moyennes) en remplaçant la viscosité (propriété physique du fluide) par la viscosité

turbulente (qui dépend de l'écoulement). Le problème revient maintenant à évaluer, d'une part, la viscosité turbulente ν_t et d'autre part, l'énergie cinétique de la turbulence.

La soustraction de l'équation instantanée de Navier-Stokes (3.33) et l'équation moyennée (3.37) conduit à l'équation de la quantité de mouvement fluctuante :

$$\frac{\partial U'_i}{\partial t} = \frac{\partial U_i}{\partial t} - \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} \quad (3.40)$$

$$\frac{\partial U'_i}{\partial t} = -\bar{U}_j \frac{\partial U'_i}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P'}{\partial x_i} + \nu \left(\frac{\partial^2 U'_i}{\partial x_k \partial x_k} \right) - \left(U'_j \frac{\partial U'_i}{\partial x_j} + U'_j \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{\partial U'_i U'_j}{\partial x_j} \right) \quad (3.41)$$

$$\frac{\partial U'_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.42)$$

En multipliant scalairement l'équation de la quantité de mouvement fluctuante obtenue par le vecteur vitesse fluctuante, puis en moyennant l'expression résultante :

$$\frac{\partial \bar{U}'_i U'_j}{\partial t} = \overline{U'_i \frac{\partial U'_j}{\partial t}} + \overline{U'_j \frac{\partial U'_i}{\partial t}} \quad (3.43)$$

Il est possible d'évaluer l'équation régissant le transport de l'énergie cinétique turbulente $k = \frac{1}{2} \bar{U}'_i U'_i$:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{U}_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + P_p - G_g - \varepsilon \quad (3.44)$$

où σ_k est une constante (cf. tableau 3.1) et :

- P_p est le terme de production d'énergie turbulente. Il représente le transfert d'énergie entre l'écoulement moyen et fluctuant.

$$P_p = \nu_t \left(\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{U}_i}{\partial x_j} = 2\nu_t D_{ij} D_{ij} \quad (3.45)$$

- G_g est le terme source de gravité dans le cas où il y a un gradient de température :

$$G_g = \beta \frac{\nu_t}{Pr_t} g \frac{\partial T}{\partial z}$$

avec $\beta = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T}$, Pr_t est le nombre de Prandtl.

- ε est le terme de dissipation d'énergie du mouvement turbulent (transformée en chaleur)

$$\varepsilon = \nu \left(\frac{\partial U'_i}{\partial x_l} \frac{\partial U'_j}{\partial x_l} \right)$$

Le terme de dissipation ε est calculé à partir d'une équation analogue à celle du terme de production d'énergie turbulente k avec les mêmes types de mécanismes de production, de diffusion et de destruction :

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + U_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} [P_p + (1 - C_{3\varepsilon}) G_g] - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.46)$$

Connaissant k et ε , il reste à déterminer l'expression de la viscosité turbulente ν_t . De manière intuitive, plus la taille d'un tourbillon (L_t) est importante, plus il transportera loin le fluide. De même, plus la vitesse du tourbillon ($\sqrt{k}$) sera élevée plus la dispersion sera rapide. Il est donc cohérent de relier la viscosité turbulente ν_t à ces paramètres, l'analyse dimensionnelle permet d'écrire :

$$\nu_t \approx \sqrt{k} L_t \quad (3.47)$$

La relation précédente nécessite de déterminer une expression pour L_t qui représente l'échelle spatiale des grands tourbillons. Kolmogorov en 1938 a suggéré les hypothèses suivantes ([Viollet et al., 2002](#)) :

- l'énergie k est portée par les plus grands tourbillons qui ne “voient pas” l'effet de la viscosité ν ,
- la viscosité n'influence que les plus petits tourbillons, responsables de la majeure partie de la dissipation,
- la puissance ϵ dissipée par les plus petits tourbillons doit provenir des plus grands ($P_p \approx \epsilon$).

Ces hypothèses permettent, avec le théorème de Vaschy-Buckingham, la détermination des différentes échelles de turbulence et notamment l'échelle des grands tourbillons L_t .

$$L_t = f(k, \epsilon, P_p, \nu) \Rightarrow L_t = f(k, \epsilon) \text{ (car hypothèses 1 et 3 de Kolmogorov)} \quad (3.48)$$

La relation précédente fait intervenir les 3 variables (L_t, k, ϵ) ayant 2 unités différentes ($[m]$, $[s]$), par le théorème de Vaschy-Buckingham, on sait qu'il existe une relation adimensionnelle reliant (L_t, k, ϵ). Par analyse dimensionnelle, la relation suivante est obtenue : $L_t = \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\epsilon}$, ce qui permet d'écrire :

$$\nu_t \approx \sqrt{k} L_t \approx \frac{k^2}{\epsilon} \quad (3.49)$$

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (3.50)$$

La viscosité turbulente ν_t est une donnée importante pour le modèle de dérive de nappe d'hydrocarbures notamment pour définir la diffusion du modèle Lagrangien représentant la nappe en surface.

Les constantes du modèle $k-\varepsilon$ ont été déterminées de manière empirique à l'aide d'expériences simples. Les valeurs des paramètres généralement employées sont issues des travaux de Launder et Sharma (1974) ([Pope, 2000](#)) (cf. tableau 3.1).

C_μ	$C_{\mu T}$	Pr_t	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	$C_{3\varepsilon}$	σ_k	σ_ε
0,09	0,09	1,0	1,44	1,92	0 if $G_g > 0$ and 1 if $G_g \leq 0$	1,0	1,3

Tableau 3.1: Constantes du modèle $k-\varepsilon$

L'intégration de l'équation de Reynolds le long de la verticale apporte des termes de dispersion à cause de la non-uniformité du profil de vitesse verticale. Pour prendre en compte

ces termes dispersifs, **Rastogi et Rodi (1978)** ont proposé une extension du modèle classique $k-\varepsilon$, adapté aux équations de Saint-Venant.

Les valeurs de k et ε moyennées sur la verticale sont définies par :

$$k = \frac{1}{h} \int_{Z_f}^{Z_s} \frac{1}{2} \overline{U'_i U'_j} dz \quad (3.51)$$

$$\varepsilon = \frac{1}{h} \int_{Z_f}^{Z_s} \nu \overline{\frac{\partial U'_i}{\partial x_j} \frac{\partial U'_i}{\partial x_j}} dz \quad (3.52)$$

Les équations de k et ε prennent la forme :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = \frac{1}{h} \nabla \cdot \left(h \frac{\nu_t}{\sigma_k} \vec{\nabla}(k) \right) + P_p - \varepsilon + P_{kv} \quad (3.53)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = \frac{1}{h} \nabla \cdot \left(h \frac{\nu_t}{\sigma_\varepsilon} \vec{\nabla}(\varepsilon) \right) + \frac{\varepsilon}{k} [C_{1\varepsilon} P_p - C_{2\varepsilon} \varepsilon] + P_{\varepsilon v} \quad (3.54)$$

Les termes de production sont maintenant calculés avec des gradients de vitesse horizontale :

$$P_p = \nu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

P_{kv} et $P_{\varepsilon v}$ sont dues aux forces de cisaillement du fluide le long de la verticale.

3.4.2 Frottement au fond du domaine

Selon **Rastogi et Rodi (1978)**, les constantes P_{kv} et $P_{\varepsilon v}$ dépendent de la vitesse de cisaillement sur le fond u^* et s'expriment par :

$$P_{kv} = C_k \frac{(u^*)^3}{h} \text{ et } P_{\varepsilon v} = C_\varepsilon \frac{(u^*)^4}{h^2}$$

où :

$$C_k = \frac{1}{\sqrt{C_f}} \text{ et } C_\varepsilon = 3,6 \frac{C_{2\varepsilon} \sqrt{C_\mu}}{C_f^{3/4}} \quad (3.55)$$

C_f est le coefficient de frottement adimensionnel.

Par définition, la vitesse de cisaillement sur le fond est égale à $\sqrt{\frac{\tau_b}{\rho}}$, où τ_b est la contrainte de frottement au fond du domaine, avec :

$$\vec{\tau}_b = -\rho \frac{C_f}{2} \sqrt{u^2 + v^2} \vec{u} = -\rho (u^*)^2 \frac{\vec{u}}{\sqrt{u^2 + v^2}} \quad (3.56)$$

La vitesse de cisaillement est aussi égale à :

$$u^* = \sqrt{\frac{C_f}{2} (u^2 + v^2)} \quad (3.57)$$

Les nouveaux paramètres C_k et C_ε ont été déterminés sur la base d'un écoulement au centre d'un canal rectiligne en régime fluvial.

Finalement, le coefficient de frottement C_f est déduit de la loi de frottement choisie dans le code de calcul (Chézy, Strickler, Haaland, Nikuradse ou Manning).

3.5 Discussion des méthodes de résolution

3.5.1 Méthode des caractéristiques

Il existe dans TELEMAC plusieurs méthodes pour traiter la partie convective des équations de mouvement : SUPG, schémas distributifs N et PSI. Nous détaillons ci-après la méthode des caractéristiques, peu utilisée en raison de la difficulté de mise en oeuvre mais communément appliquée dans TELEMAC à la convection des vitesses, y compris en parallélisme avec décomposition de domaine. Le calcul des courbes caractéristiques sert aussi au transport des particules, c'est pourquoi nous le détaillons ici.

i Méthode des pas fractionnaires

La méthode des pas fractionnaires consiste à résoudre une équation aux dérivées partielles en un certain nombre d'étapes distinctes. Soit f un scalaire défini par l'équation suivante (équation du type Navier-Stokes ou Saint-Venant) :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \text{terme de convection} = \text{terme de diffusion} + \text{terme source} + \text{terme de pression} \quad (3.58)$$

La discrétisation en temps du scalaire f est donnée par :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f^{n+1} - f_D + f_D - f_C + f_C - f^n}{\Delta t} \quad (3.59)$$

La résolution numérique de cette équation est faite en trois étapes :

- Première étape : $\frac{f_C - f^n}{\Delta t} = \text{terme de convection}$
- Deuxième étape : $\frac{f_D - f_C}{\Delta t} = \text{terme de diffusion} + \text{terme source}$
- Troisième étape : $\frac{f^{n+1} - f_D}{\Delta t} = \text{terme de pression}$

Cette méthode de résolution est couramment utilisée dans le système TELEMAC pour résoudre les équations de Navier-Stokes (cf. section 3.3.1) dans TELEMAC-3D et les équations de Saint-Venant (cf. section 3.3.2) dans TELEMAC-2D. Par analogie au système TELEMAC, une technique de pas fractionnaire est aussi utilisée pour la modélisation de dérive de nappe d'hydrocarbures : les différents processus physiques (transport et vieillissement), bien que se produisant simultanément sont résolus successivement au sein du même pas de temps.

ii Méthode de résolution de la convection : méthode des caractéristiques

Cette méthode de résolution s'applique uniquement à la résolution de l'étape de convection (étape 1) :

$$\frac{f_C - f^n}{\Delta t} = \text{terme de convection} \quad (3.60)$$

Considérons l'équation de transport du scalaire f suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{U} \nabla f = 0 \quad (3.61)$$

Cette équation exprime le transport suivant la direction $\vec{x}$ de la quantité scalaire f à la vitesse $\vec{U}$. Posons $\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{U}$, l'équation (3.61) devient alors :

$$\frac{df(\vec{x}(t), t)}{dt} = \nabla f \frac{d\vec{x}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (3.62)$$

$$\frac{df(\vec{x}(t), t)}{dt} = \vec{U} \nabla f + \frac{\partial f}{\partial t} = 0 \quad (3.63)$$

La variation totale de la quantité $f \left(\frac{d\vec{x}(t), t}{dt} \right)$ est donc nulle sur les courbes caractéristiques (C) d'équation $\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{U}$. En intégrant la variation de la quantité f sur (C), entre les instants t_n et t_{n+1} , on obtient :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{df(\vec{x}(t), t)}{dt} dt = f^{n+1}(P) - f^n(Q) = 0 \quad (3.64)$$

$$\Rightarrow f^{n+1}(P) = f^n(Q) \quad (3.65)$$

Q représente le pied de la courbe caractéristique passant par P au temps t_{n+1} . Le terme pied désigne l'intersection entre la courbe caractéristique (C) et l'hyperplan $t = t_n$. Pour trouver la valeur du scalaire f au point P au temps t_{n+1} , il est donc nécessaire de :

- calculer la courbe caractéristique d'équation $\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{U}$ pour trouver le pied de la caractéristique Q ,
- interpoler la valeur de f à l'instant t_n au point Q .

iii Calcul de la courbe caractéristique (C)

Le pas de temps $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ est divisé en sous pas de temps $\delta t = \frac{\Delta t}{n_{sub}}$ durant lesquels la vitesse $\vec{U}$ est considérée constante. En partant du point P , une suite de points $P = P_0, \dots, P_k, P_{k+1}, \dots, P_n = Q$ est créée. A chaque sous pas de temps δt , on se déplace de la position P_k à P_{k+1} :

- on part du point P_k de vitesse U_{P_k} et on se déplace à P_{k+1} par l'équation :

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{U} \Rightarrow P_{k+1} = P_k + U_{P_k} \delta t \quad (3.66)$$

- on se relocalise dans l'élément auquel appartient P_{k+1} : calcul des coordonnées barycentriques $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$
- on calcule la nouvelle vitesse $U_{P_{k+1}}$ par interpolation linéaire grâce aux coordonnées barycentriques :

$$U_{P_{k+1}} = \alpha_1 U_1 + \alpha_2 U_2 + \alpha_3 U_3 \quad (3.67)$$

- on recommence le processus pour déterminer la position P_{k+2} , et ainsi de suite...

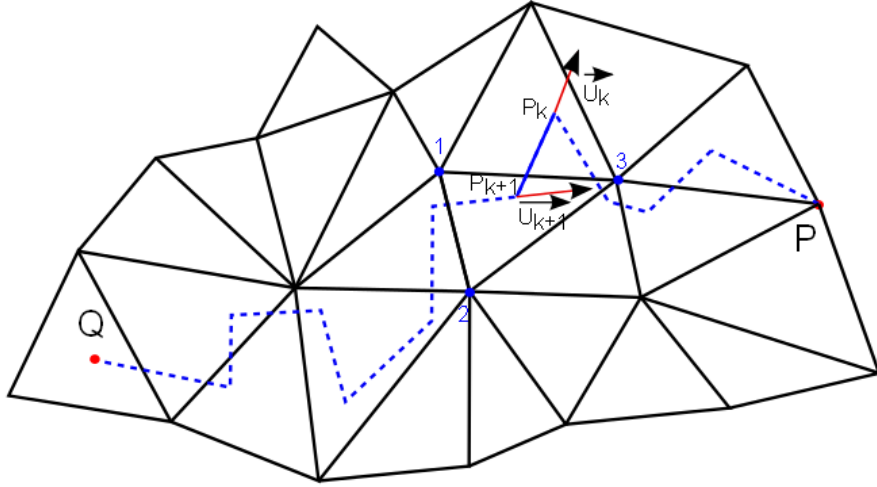


Figure 3.2: *Méthode des caractéristiques*

Dans le modèle développé au cours de cette thèse, la nappe d'hydrocarbures flottant en surface est modélisée par une approche Lagrangienne. Ce modèle décrit la nappe comme un ensemble de particules. Le transport de chacune de ces particules est alors traité par la méthode présentée ci-dessus : pour une particule on avance dans le temps, cette dernière se trouvant au point Q va être convectée au point P (P n'étant pas forcément un nœud du maillage) en suivant la courbe caractéristique (ligne brisée en pointillé sur la figure 3.2).

iv Détermination des coordonnées barycentriques

Par définition des coordonnées barycentriques, on cherche à déterminer $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ tel que pour le point $M(x, y)$ se situant dans un élément triangulaire de nœuds $(N1(X_1, y_1), N2(X_2, y_2), N3(X_3, y_3))$ (cf. figure 3.3), la relation suivante soit vérifiée :

$$\overrightarrow{OM} = \alpha_1 \overrightarrow{ON_1} + \alpha_2 \overrightarrow{ON_2} + \alpha_3 \overrightarrow{ON_3} \text{ avec } \sum_{i=1}^3 \alpha_i = 1 \quad (3.68)$$

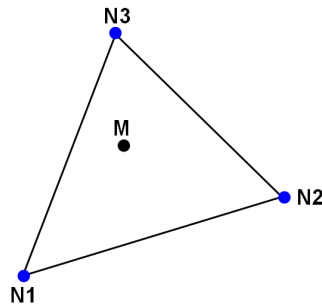


Figure 3.3: *Point M au sein de son élément*

3.5. Discussion des méthodes de résolution

En projetant cette relation, on a :

$$x = (1 - \alpha_2 - \alpha_3)x_1 + \alpha_2x_2 + \alpha_3x_3 \quad (3.69)$$

$$y = (1 - \alpha_2 - \alpha_3)y_1 + \alpha_2y_2 + \alpha_3y_3 \quad (3.70)$$

$$\begin{pmatrix} x - x_1 \\ y - y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} \quad (3.71)$$

En posant J la matrice inversible définie par

$$J = \begin{pmatrix} x_2 - x_1 & x_3 - x_1 \\ y_2 - y_1 & y_3 - y_1 \end{pmatrix} \quad (3.72)$$

On obtient :

$$\alpha_1 = 1 - \alpha_2 - \alpha_3 = \frac{\text{aire du triangle } (N_2MN_3)}{\text{surface de } (N_1N_2N_3)} \quad (3.73)$$

$$\alpha_2 = \frac{(y_3 - y_1)(x - x_1) - (x_3 - x_1)(y - y_1)}{\det(J)} = \frac{\text{aire du triangle } (N_1MN_3)}{\text{surface de } (N_1N_2N_3)} \quad (3.74)$$

$$\alpha_3 = \frac{-(y_2 - y_1)(x - x_1) + (x_2 - x_1)(y - y_1)}{\det(J)} = \frac{\text{aire du triangle } (N_1MN_2)}{\text{surface de } (N_1N_2N_3)} \quad (3.75)$$

De manière plus générale, on peut écrire que la coordonnée barycentrique α_i du point M , est égale à $\alpha_i = \frac{\text{Surface grisée}}{\text{Surface de l'élément}}$ (cf. figure 3.4).

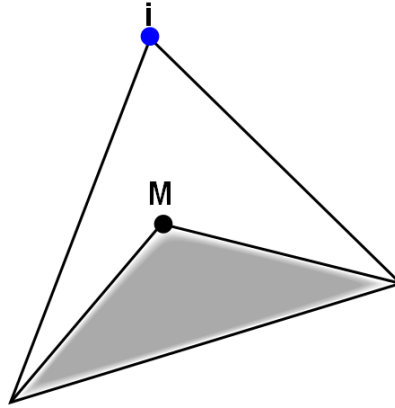


Figure 3.4: Représentation de la coordonnée barycentrique du nœud i

En utilisant, ces coordonnées barycentriques, il est alors possible d'interpoler les fonctions $f(x, y)$ au sein d'un élément en fonction des valeurs de la fonction aux nœuds de l'élément :

$$f(M) = \alpha_1 f(N1) + \alpha_2 f(N2) + \alpha_3 f(N3) \quad (3.76)$$

3.6 Conclusion

Le système hydro-informatique TELEMAC est un outil de modélisation bi- et tri-dimensionnel dédié aux écoulements à surface libre dans les domaines maritimes et fluviaux. Développé depuis 25 ans, ce code de calcul a été validé sur de nombreux cas d'étude. La prévision de dérive de nappes d'hydrocarbures nécessite le couplage des équations de transport et des cinétiques chimiques propre à l'hydrocarbure avec un modèle hydrodynamique. Ainsi, le modèle mathématique de dérive de nappe d'hydrocarbures composé d'un modèle Lagrangien associé à un modèle Eulérien a été couplé à ce système complet de modélisation (cf. figure 3.5). La qualité de prévision est directement reliée à la qualité des données hydrodynamiques.

Au cours de ce chapitre, les principales équations (Saint-Venant (2D), Navier-Stokes (3D) et modèle $k-\epsilon$) ont été présentées. Ces équations fournissent les données hydrodynamiques nécessaires au calcul du modèle mathématique de dérive de nappe d'hydrocarbures. Le transport des particules lagrangiennes représentant la nappe d'hydrocarbures en surface est traité de façon analogue à la méthode des caractéristiques tandis que la dissolution dans la colonne d'eau est régie par l'équation de convection-diffusion de conservation du traceur (2D) ou (3D). Les différents processus physiques (transport et vieillissement), bien que se produisant simultanément, sont traités successivement au sein du même pas de temps à l'aide de la technique des pas fractionnaires. Ces différents processus spécifiques aux rejets de polluant dans les eaux continentales sont présentés dans le chapitre suivant.

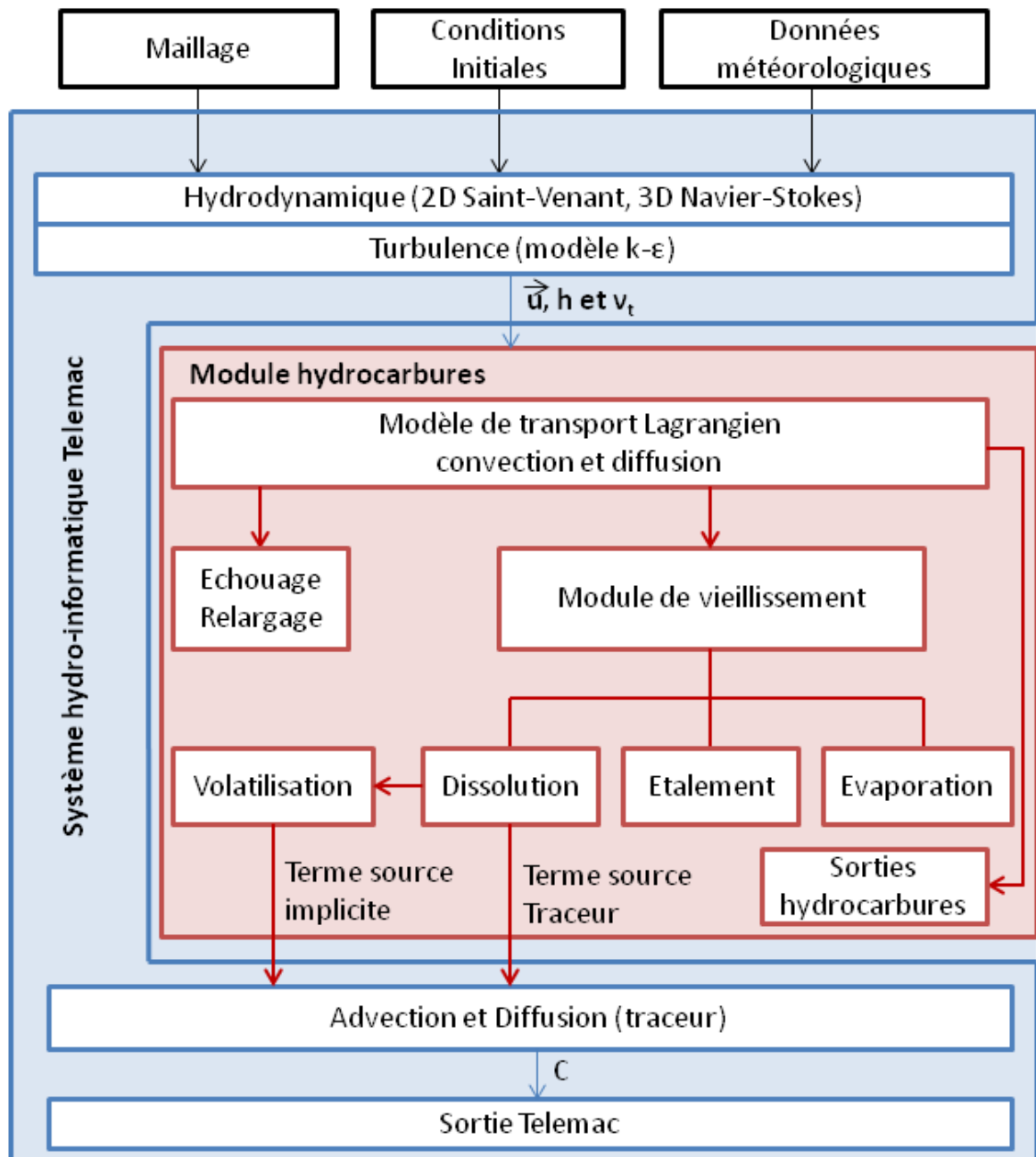


Figure 3.5: Organigramme du code de calcul

Modèle numérique de dérive de nappe d'hydrocarbures dans les eaux continentales

Sommaire

4.1	Introduction	68
4.2	Présentation du modèle conceptuel	68
4.3	Transport des particules composant la nappe d'hydrocarbures en surface	69
4.4	Processus de vieillissement	79
4.5	Processus spécifiques aux eaux continentales	94
4.6	Conclusion	98

4.1 Introduction

Afin de modéliser le comportement du pétrole déversé, à court et moyen termes, un modèle numérique est développé. Il a pour but d'évaluer les risques environnementaux et de permettre la mise en oeuvre des moyens de lutte adaptés contre la pollution. Ce chapitre présente les différentes équations nouvelles dont la résolution a été programmée au sein du système hydro-informatique TELEMAC.

4.2 Présentation du modèle conceptuel

Un modèle mathématique de dérive de nappe d'hydrocarbures composé d'un modèle Lagrangien couplé à un modèle Eulérien est introduit dans ce chapitre. Le modèle Lagrangien décrit le mouvement de la nappe en surface en considérant celle-ci comme un ensemble de particules d'hydrocarbures. Chaque particule est alors considérée comme un mélange de constituants représentant des catégories de produits chimiques (Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP) et des pseudo-composés caractérisés par les courbes de distillation). En considérant qu'aucune interaction n'est possible entre chaque constituant, l'évolution de chacun d'eux est suivie au cours du temps. Chaque particule d'hydrocarbure possède des propriétés physiques (surface, masse, propriétés physico-chimiques de ses constituants, propriétés générales de l'hydrocarbure déversé) et numériques (numéro de l'élément du maillage auquel elle appartient, ses coordonnées barycentriques dans cet élément, etc...) nécessaires au déroulement du calcul. Ainsi le modèle développé est capable de modéliser les principaux phénomènes agissant sur la nappe d'hydrocarbures une fois celle-ci déversée : convection, diffusion, échouage, relargage, étalement, évaporation, dissolution et volatilisation.

Le phénomène de dissolution ne concerne qu'une très faible quantité d'hydrocarbure déversé (environ 1% de la masse initiale (ASCE Task Committee, 1996)). Cependant, les composés les plus solubles étant souvent les plus toxiques, la dissolution même en très faible quantité de ces substances peut avoir un très fort impact écologique (en rivière, le risque de contamination des réseaux d'eau potable peut être un véritable problème). Pour modéliser la dissolution des HAP dans la colonne d'eau, un modèle Eulérien de transport et de diffusion de polluant est utilisé. Selon Tkalich et al. (2003), ce type d'approche s'avère plus adapté dès lors qu'une étude environnementale rend nécessaire le couplage d'un modèle hydrodynamique Eulérien avec un modèle de qualité d'eau. La fraction de chaque HAP partant en dissolution dans la colonne d'eau est alors représentée par un traceur dont la masse dépend directement de la masse dissoute des particules. Les variables hydrodynamiques nécessaires au calcul pour l'approche Lagrangienne et Eulérienne sont fournies par le système hydro-environmental TELEMAC (cf. chapitre 3).

Le but de ce modèle numérique est de fournir une prévision à court terme de zones potentiellement affectées lors d'une pollution aux hydrocarbures dans les eaux continentales, à savoir dans des eaux relativement calmes. Par conséquent, les processus biologiques comme, par exemple, le processus de biodégradation peuvent être négligés, tout comme les processus de dispersion et d'émulsification (qui sont principalement causés par les vagues déferlantes

4.3. Transport des particules composant la nappe d'hydrocarbures en surface

(Jouan et al., 2001)). Lorsqu'une nappe d'hydrocarbures est déversée à la surface de l'eau, celle-ci va s'étaler sous l'action combinée des forces de gravité, des forces de viscosité, des forces de tension superficielle et des effets d'inertie pour former une nappe d'huile (Fay, 1971). Au même instant, la nappe d'hydrocarbures est soumise aux actions des courants et du vent. Ces actions déterminent le transport (convection et diffusion turbulente) de la nappe et son point d'impact sur les berges. De plus, au cours de sa dérive, la nappe va subir un certain nombre de transformations provoquées par les processus de vieillissement telles que l'évaporation et la dissolution tandis que les composés chimiques dissous dans la colonne d'eau vont se volatiliser dans l'atmosphère (cf. figure 4.1).

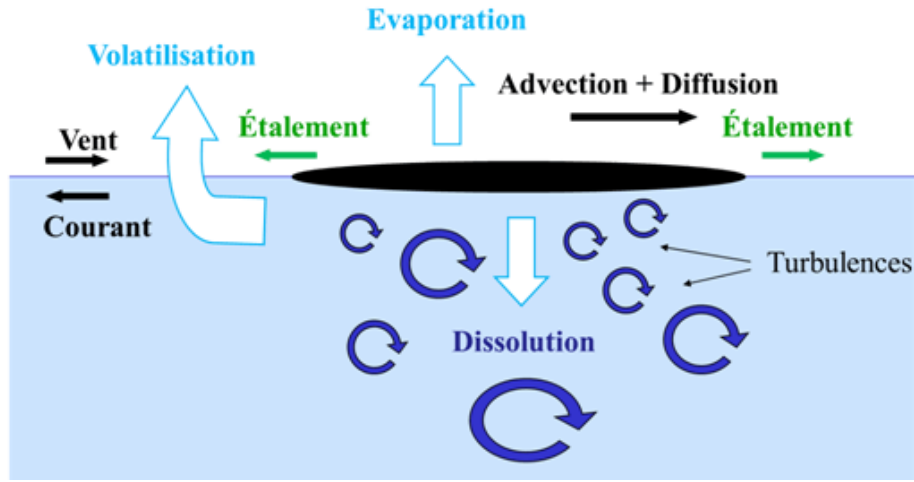


Figure 4.1: Processus de transport et de vieillissement de la nappe d'hydrocarbures

4.3 Transport des particules composant la nappe d'hydrocarbures en surface

4.3.1 Convection de la nappe en surface

A la surface de l'eau, une nappe d'hydrocarbures a tendance à dériver sous l'action combinée du vent et des courants (marées, tempêtes, circulation résiduelle, ...). Ainsi le vecteur vitesse $\vec{U}_{oil}$ de dérive d'une nappe d'hydrocarbures est donné par :

$$\vec{U}_{oil} = \vec{U}_s + \beta \vec{U}_w \quad (4.1)$$

avec $\vec{U}_{oil} = (U_{o1}, U_{o2})$ la vitesse de convection de la nappe en surface, $\vec{U}_s = (U_{s1}, U_{s2})$ la vitesse du courant à la surface, $\vec{U}_w = (U_{w1}, U_{w2})$ la vitesse du vent dix mètres au-dessus de la surface libre et β le coefficient d'influence du vent sur le transport de la nappe.

Nous avons vu dans le chapitre précédent (cf. chapitre 3) que le champ de vitesse de l'écoulement est déterminé par TELEMAC-2D ou TELEMAC-3D. TELEMAC-3D fournit

notamment la vitesse de l'écoulement dans les trois directions de l'espace, les vitesses horizontales au niveau de la surface libre, nécessaires à la convection de la nappe de surface, sont connues et utilisables directement pour le calcul. Dans TELEMAC-2D, la vitesse moyennée sur la verticale n'est pas satisfaisante pour des évolutions de nappes dérivant en surface et doit être corrigée. Il est alors nécessaire de déterminer la vitesse à la surface libre de l'écoulement en fonction de la vitesse moyennée sur la verticale fournie par le code de calcul.

i Estimation de la vitesse en surface de l'écoulement dans le cas 2D

En hydraulique fluviale, il est classique de considérer qu'au voisinage du fond et pour un écoulement pleinement développé, il subsiste une couche limite d'épaisseur très faible e_v qui colle à la paroi : à l'intérieur de cette couche, l'écoulement est dit laminaire et au-delà, il est dit turbulent.

Considérons un écoulement à surface libre sur un fond infiniment large et long ayant des aspérités de taille k_s (cf. figure 4.2). On se place dans le cas turbulent (comme la plupart des écoulements fluviaux et maritimes), et on suppose que l'écoulement est permanent (toutes les grandeurs sont constantes dans le temps : $\partial_t = 0, \forall t$) et uniforme (la vitesse $\vec{U}$ et toutes les grandeurs turbulentes sont constantes par rapport à la direction longitudinale x_1 : $\partial_{x_1} = 0, \forall t, x_1$).

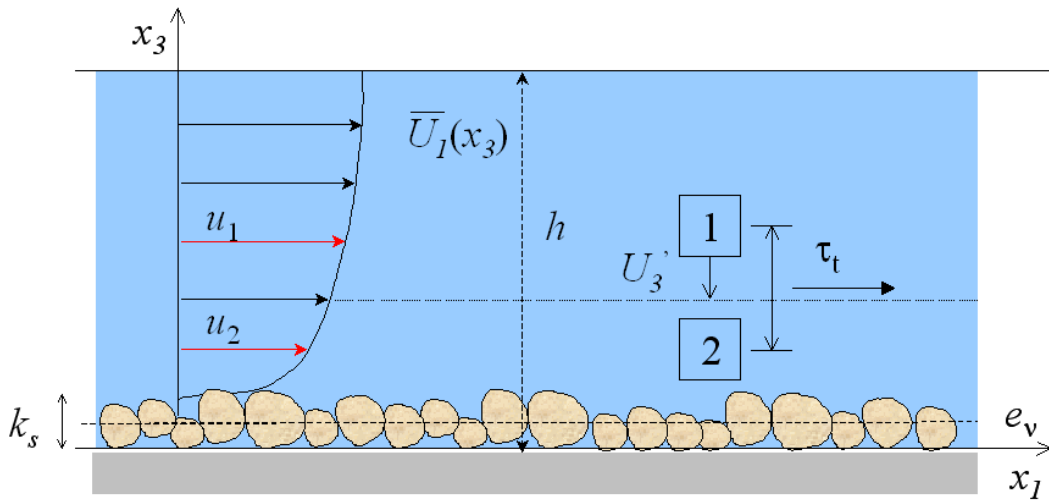


Figure 4.2: *Écoulement à surface libre sur un fond rugueux*

L'équation de continuité issue de la décomposition de Reynolds (Eq. (3.38)) permet de montrer que $\overline{U_3} = 0$. Les équations de Navier-Stokes (Eq. (3.37)), quant à elles, permettent d'obtenir les relations suivantes :

4.3. Transport des particules composant la nappe d'hydrocarbures en surface

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(\nu \frac{\partial \bar{U}_1}{\partial x_3} - \overline{U'_1 U'_3} \right) = 0 \quad (4.2)$$

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_3} - g - \frac{\partial}{\partial x_3} (\overline{U'_3 U'_3}) = 0 \quad (4.3)$$

avec ρ la masse volumique de l'eau, $\bar{P}$ la pression, ν la viscosité cinématique, g la gravité, $\vec{U} = (\bar{U}_1, \bar{U}_2, \bar{U}_3)$ le champ de vitesse moyen de l'écoulement et $\vec{U}' = (U'_1, U'_2, U'_3)$ la fluctuation du champ de vitesse de l'écoulement.

Dans l'expression (4.3), le terme de fluctuation $\rho \overline{U'_3 U'_3}$ pouvant être négligé devant le terme de pression $\bar{P}$. Par intégration nous obtenons alors $\bar{P}^* = \bar{P} + \rho g x_3$. En réinjectant cette nouvelle expression de la pression dans l'équation (4.2), la nouvelle relation suivante est obtenue :

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{P}^*}{\partial x_1} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_3} \left(\nu \frac{\partial \bar{U}_1}{\partial x_3} - \overline{U'_1 U'_3} \right)}_{\text{Constante}} \quad (4.4)$$

$$\Rightarrow \left(\nu \frac{\partial \bar{U}_1}{\partial x_3} - \overline{U'_1 U'_3} \right) = \frac{\tau_b}{\rho} \left(1 - \frac{x_3}{h} \right) \quad (4.5)$$

avec τ_b la contrainte de frottement sur la paroi du fond (cf. section 3.4.2).

Longueur de mélange

Le concept de longueur caractéristique de mélange a été introduit par Prandtl dans le but de calculer la contrainte turbulente de cisaillement.

La parcelle de fluide, localisée dans la couche 1 et ayant une vitesse notée $\vec{u}_1$, se déplace dans la couche 2 à cause de la turbulence. La vitesse du fluide est toujours $\vec{u}_1$ lorsque celui-ci arrive dans la couche 2. Cette vitesse décroît par la suite par échange de quantité de mouvement avec le fluide de la couche 2. Ce phénomène va accélérer le fluide de la couche 2, ce qui peut être vu comme une contrainte de cisaillement turbulent τ_t se produisant sur la couche 2, et ayant pour effet d'accélérer cette dernière.

Les fluctuations de vitesse instantanée horizontale de la parcelle de fluide dans la couche 2 sont :

$$U'_1 = u_1 - u_2 = l \frac{d\bar{U}_1}{dx_3} \quad (4.6)$$

En supposant que les fluctuations de vitesse instantanée verticale ont la même amplitude, c'est-à-dire, $U'_3 = -l \frac{d\bar{U}_1}{dx_3}$ (le signe négatif est dû au mouvement selon $-\vec{e}_{x_3}$ de la parcelle de fluide), la contrainte de cisaillement verticale s'écrit donc :

$$\tau_t = -\rho U'_1 U'_3 = \rho l^2 \left(\frac{d\bar{U}_1}{dx_3} \right)^2 \quad (4.7)$$

Chapitre 4. Modèle numérique de dérive de nappe d'hydrocarbures dans les eaux continentales

Il est possible d'exprimer sous forme adimensionnelle la vitesse $\overline{U}_1$ et les distances (l, x_3, h) à l'aide de la vitesse de frottement u^* (définie par $u^* = \sqrt{\tau_b/\rho}$ (cf. section 3.4.2)) selon :

$$x_3^+ = \frac{x_3 u^*}{\nu}, \quad h^+ = \frac{h u^*}{\nu}, \quad l^+ = \frac{l u^*}{\nu}, \quad U_1^+ = \frac{\overline{U}_1}{u^*} \quad (4.8)$$

En utilisant, les nouvelles variables adimensionnelles (x_3^+, l^+, h^+, U_1^+) , et la contrainte de cisaillement verticale τ_t , l'équation (4.5) s'écrit :

$$\left(1 + l^{+2} \left| \frac{\partial U_1^+}{\partial x_3^+} \right| \right) \frac{\partial U_1^+}{\partial x_3^+} = 1 - \frac{x_3^+}{h^+} \quad (4.9)$$

Sous-couche visqueuse

Lorsque l'on se place près de la paroi, la taille des grands tourbillons de turbulence est limitée par la distance à la paroi. Expérimentalement, il a été montré que la longueur de mélange $l = \kappa x_3$ ($\kappa \approx 0,41$ est la constante de Karman). L'équation (4.9) peut alors s'écrire :

$$\frac{\partial U_1^+}{\partial x_3^+} = 1 - \frac{x_3^+}{h^+} \approx 1 \quad (4.10)$$

$$\Rightarrow U_1^+ = x_3^+ \text{ soit } \overline{U}_1 = \frac{x_3 u^{*2}}{\nu} \quad (4.11)$$

Il a été trouvé expérimentalement que ce profil est valable pour une épaisseur $x_{3v} = \frac{11\nu}{u^*}$, dite épaisseur de la sous-couche visqueuse dans le cas où le fond de l'écoulement est "lisse".

Profil de vitesse dans la colonne d'eau

Lorsque l'on se place dans la colonne d'eau suffisamment loin de la paroi (x_3 très grand devant e_v), la longueur de mélange doit prendre en compte le fait qu'au niveau de la surface libre de l'écoulement, les fluctuations verticales de l'écoulement sont nulles et donc la longueur de mélange peut s'exprimer comme $l = \kappa x_3 \sqrt{1 - \frac{x_3}{h}}$ (Violeau, 2012). L'équation (4.9) peut alors s'écrire comme :

$$l^{+2} \left| \frac{\partial U_1^+}{\partial x_3^+} \right| \frac{\partial U_1^+}{\partial x_3^+} = 1 - \frac{x_3^+}{h^+} \Rightarrow \frac{\partial U_1^+}{\partial x_3^+} = \frac{1}{\kappa x_3^+} \quad (4.12)$$

Par intégration de l'expression précédente (Eq. (4.12)) et en considérant la constante d'intégration sous la forme $\frac{1}{\kappa} \ln \delta + \zeta$, le profil de vitesse s'écrit :

$$\overline{U}_1 = u^* \left(\frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{x_3}{\delta} \right) + \zeta \right) \quad (4.13)$$

Selon Thual (2010), les observations expérimentales montrent qu'un fond peut être considéré comme :

4.3. Transport des particules composant la nappe d'hydrocarbures en surface

- lisse si $\frac{u^* k_s}{\nu} < 5$ (où k_s est la taille des rugosités au fond du domaine) : dans ce cas, le profil logarithmique se raccorde au profil visqueux en $x_{3v} = \frac{11\nu}{u^*}$ et s'écrit :

$$\overline{U}_1 = u^* \left(\frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{x_3 u^*}{\nu} \right) + 5, 2 \right) \quad (4.14)$$

avec $\delta = \nu/u^*$, $\zeta = 11 - \ln(11)/\kappa = 5, 2$

- rugueux si $\frac{u^* k_s}{\nu} > 70$: dans ce cas, le profil logarithmique se raccorde au profil nul en $x_{30} = \frac{k_s}{33}$ et s'écrit :

$$\overline{U}_1 = u^* \left(\frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{x_3}{k_s} \right) + 8, 5 \right) \quad (4.15)$$

avec $\delta = k_s$ et $\zeta = \ln(33)/k_s = 8, 5$

Dans le cadre des applications maritimes ou fluviales, le fond est, dans la grande majorité des cas, rugueux.

Vitesse moyennée sur la verticale

La plupart des écoulements maritimes et fluviaux sont turbulents et ont une épaisseur de sous-couche visqueuse négligeable devant la hauteur d'eau de l'écoulement. En l'absence de vent, la distribution verticale du profil de vitesse est alors logarithmique.

En moyennant l'expression du profil de vitesse logarithmique (Eq. (4.13)) entre la surface libre et une certaine couche limite z_0 ($z_0 = x_{3v}$ dans le cas d'un fond lisse et $z_0 = x_{30}$ dans le cas d'un fond rugueux), la vitesse moyennée fournie par les codes de calcul 2D peut être déterminée :

$$\frac{\overline{u}_1}{u^*} = \frac{1}{h - z_0} \int_{z_0}^h \left(\frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{x_3}{\delta} \right) + \zeta \right) dx_3 = \frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{z_0}{\delta} \right) - \frac{1}{\kappa} + \zeta + \frac{1}{\kappa} \frac{h \ln \left(\frac{h}{z_0} \right)}{h - z_0} \quad (4.16)$$

En considérant $z_0 \ll h$, c'est-à-dire $h - z_0 \sim h$, et en reprenant l'expression du profil de vitesse (4.13) à la surface de l'eau, à savoir au point $x_3 = h$, l'expression de la vitesse moyennée sur la verticale en fonction de la vitesse en surface de l'écoulement est déduite :

$$\frac{\overline{u}_1}{u^*} = \frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{h}{\delta} \right) - \frac{1}{\kappa} + \zeta \Rightarrow \overline{u}_1 = \overline{U}_1(h) - \frac{u^*}{\kappa} \quad (4.17)$$

En remplaçant dans l'équation (4.17) l'expression de u^* par celle donnée dans le chapitre précédent (Eq. (3.57)), l'expression de la vitesse en surface de l'écoulement en fonction de la vitesse moyennée sur la verticale, est trouvée :

$$\overline{U}_1(h) = \overline{u}_1 \left(1 + \frac{1}{\kappa} \sqrt{\frac{C_f}{2}} \right) \quad (4.18)$$

avec C_f le coefficient de frottement adimensionnel (cf. section 3.4.2)

La vitesse en surface de l'écoulement est de 15 à 20% plus forte que la vitesse moyennée sur la verticale suivant la valeur du coefficient de frottement.

ii Influence du vent

Une nappe d'hydrocarbures dérivant à la surface de l'eau peut s'approcher des berges sous l'action du vent. Dans les différents modèles de dérive de nappe d'hydrocarbures décrits dans la littérature (cf. chapitre 2), ce processus est pris en compte à l'aide d'un coefficient appelé "drift factor" (coefficient β dans l'équation (4.1)).

Le coefficient β trouvé dans la littérature est compris dans l'intervalle [1%, 5%] avec une valeur moyenne de 3,5% fréquemment utilisée dans les modèles numériques (Reed et al., 1999). Cette valeur est donnée sans plus de justification et semble être obtenue de manière empirique. Le but de cette partie est de déterminer de manière théorique une valeur du facteur d'influence du vent β .

Considérons un corps flottant de forme quelconque transporté sous l'effet du courant marin $\vec{U}_c = (U_{c1}, U_{c2})$ et du vent $\vec{U}_w = (U_{w1}, U_{w2})$, tous deux constants et horizontaux mais de directions éventuellement différentes, (cf. figure 4.3) :

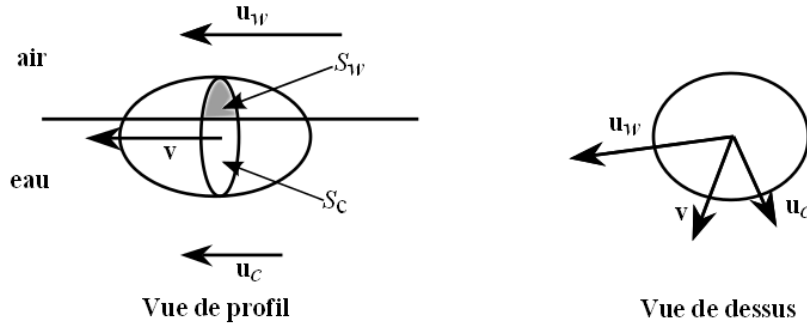


Figure 4.3: Champ de force s'exerçant sur le flotteur

Au bout d'un certain temps lorsque le régime permanent est atteint, le corps flottant avance à vitesse constante $\vec{V} = (V_1, V_2)$. Les forces exercées par l'eau et par l'air peuvent être représentées par deux coefficients de traînée notés respectivement $C_{D,c}$ et $C_{D,w}$ ainsi que deux surfaces de prise à l'eau et à l'air notées S_c et S_w . En effet, la force subie par un corps solide immobile complètement immergé dans un fluide en mouvement à vitesse constante a pour expression $F = \frac{1}{2}\rho S C_d |\vec{U}| \vec{U}$ avec C_d le coefficient de traînée du corps et S sa surface frontale (si le corps possède une vitesse $\vec{V}$, il faut remplacer le vecteur $\vec{U} = (U_1, U_2)$ par $\vec{U} - \vec{V}$).

Lorsque le régime permanent est atteint, la somme des forces s'exerçant sur le corps flottant s'annule (principe fondamental de la dynamique) :

$$\rho_e S_c C_{D,c} |\vec{V} - \vec{U}_c| (\vec{V} - \vec{U}_c) + \rho_a S_w C_{D,w} |\vec{V} - \vec{U}_w| (\vec{V} - \vec{U}_w) = 0 \quad (4.19)$$

avec ρ_a et ρ_e respectivement la masse volumique de l'air et de l'eau.

En décomposant la vitesse du flotteur $\vec{V}$ dans la base $(\vec{U}_c, \vec{U}_w)$ tel que $\vec{V} = a\vec{U}_c + b\vec{U}_w$, l'équation (4.19) équivaut par projection sur $\vec{U}_c$ et $\vec{U}_w$ au système suivant :

4.3. Transport des particules composant la nappe d'hydrocarbures en surface

$$\alpha_c |(a-1)\vec{U}_c + b\vec{U}_w|(a-1) + \alpha_w |a\vec{U}_c + (b-1)\vec{U}_w|a = 0 \quad (4.20)$$

$$\alpha_c |(a-1)\vec{U}_c + b\vec{U}_w|b + \alpha_w |a\vec{U}_c + (b-1)\vec{U}_w|(b-1) = 0 \quad (4.21)$$

avec $\alpha_w = \rho_a S_w C_{D,w}$ et $\alpha_c = \rho_e S_c C_{D,c}$.

Ces équations forment un système linéaire aux inconnues $|a\vec{U}_c + (b-1)\vec{U}_w|$ et $|(a-1)\vec{U}_c + b\vec{U}_w|$. Ce couple d'équations n'admet une solution que si son déterminant est nul, c'est-à-dire, si $(a-1)(b-1) - ba = 0$, ce qui donne $a + b = 1$. En remplaçant ensuite b par $1 - a$, dans la deuxième équation, on obtient :

$$[-\alpha_c(1-a)^2 + \alpha_w a^2]|\vec{U}_c - \vec{U}_w| = 0 \quad (4.22)$$

En supposant que le courant et le vent ne sont pas alignés (cette hypothèse est vérifiée dès lors que l'on considère que le couple de vecteur $(\vec{U}_c, \vec{U}_w)$ représente une base), et en posant $\beta = \sqrt{\frac{\alpha_w}{\alpha_c}}$, une solution pour les coefficients a et b peut être déterminée :

$$a = \frac{1}{1+\beta} \text{ et } b = \frac{\beta}{1+\beta} \quad (4.23)$$

$$\vec{V} = \frac{1}{1+\beta}(\vec{U}_c + \beta\vec{U}_w) \quad (4.24)$$

Dans le cas où le corps flottant est considéré comme sphérique et à moitié immergé, les surfaces frontales sont égales. Il en est de même pour les coefficients de traînée, car en conditions réelles on est à grand nombre de Reynolds. Nous obtenons alors $\beta = \sqrt{\frac{\rho_a}{\rho_e}} = 0,036$.

Pour une nappe d'hydrocarbures, la définition d'une surface frontale est impossible. Cependant, le raisonnement est valable aussi pour un coefficient de frottement analogue au coefficient de traînée appliqué à la surface de la nappe d'hydrocarbures. En considérant que la rugosité à l'interface air-hydrocarbure est la même qu'à l'interface eau-hydrocarbure, la surface de la nappe est identique vue de dessous ou vue de dessus, les coefficients de frottement $C_{f,c}$ et $C_{f,w}$ demeurent alors identiques. Ceci a pour conséquence d'obtenir un coefficient β identique au raisonnement précédent. Une nappe d'hydrocarbures dérive donc sur l'eau à 3,6% de la vitesse du vent ajoutée à 100% de celle du courant, l'égalité des rugosités aux deux interfaces étant toutefois une hypothèse.

4.3.2 La diffusion stochastique

Une substance étrangère, comme par exemple une parcelle de pétrole plongée dans un courant, subira un effet diffusif (cf. figure 4.4). Cette diffusion est due en majeure partie à la turbulence de l'écoulement. Ainsi, afin de modéliser le déplacement d'un corps dans le courant d'un fluide il est nécessaire de prendre en compte ce phénomène de turbulence. La méthode retenue ici consiste à modéliser la turbulence avec un modèle stochastique. Ce dernier semble approprié car il permet d'obtenir des informations fines sur la turbulence et est facilement applicable à une méthode particulière.

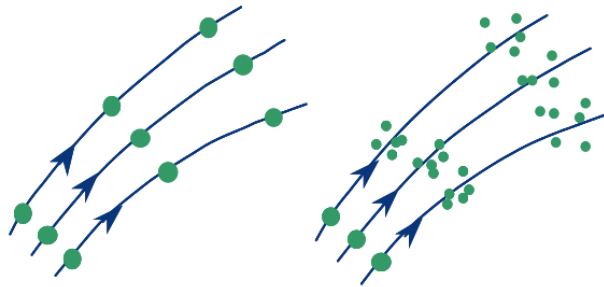


Figure 4.4: *Déplacement d'un amas de particules soumises à un champ convecteur (à gauche) et soumises à un champ convecteur et diffusif (à droite)*

Tout phénomène d'évolution temporelle dont l'analyse peut être soumise au calcul de probabilités est qualifié de processus stochastique. La nature erratique et non reproductible des réalisations du processus tient au fait que leur évolution est en général le résultat de l'action d'un très grand nombre de paramètres dont l'effet est inconnu. La particule brownienne se déplace sous l'effet de ses collisions avec les particules fluides, les lois dynamiques gouvernant ces dernières sont connues. Ce sont ces mêmes lois qui vont être utilisées pour modéliser la diffusion stochastique du polluant dans le modèle mathématique de dérive de nappe d'hydrocarbures.

Origine du mouvement brownien

Le mouvement brownien a été découvert par le botaniste Robert Brown en 1827 ; il désigne le mouvement désordonné d'une grosse particule immergée dans un fluide. La particule est assez grosse pour pouvoir être suivie au microscope optique et présente un mouvement en tous sens par suite des collisions avec les petites particules du fluide. Le mouvement de la grosse particule est révélateur de l'agitation moléculaire régnant au sein du fluide : si entre deux instants la grosse particule va d'un côté plus que de l'autre c'est que, par suite des fluctuations de pression, le bilan d'impulsion n'est pas nul. La variation de vitesse de la grosse particule résulte d'un grand nombre de petits sauts que l'on supposera décorrélés les uns des autres ; ce que l'on observe est en réalité le déplacement net global après de nombreux petits sauts de la vitesse : il résulte du fait que, pendant un intervalle de temps donné, la particule reçoit plus de coups d'un côté que de l'autre. Un tel déplacement est évidemment moins rapide qu'un déplacement en présence d'une force systématique, constante par exemple.

Modèle stochastique

La description Eulérienne du mouvement de la nappe d'hydrocarbures en surface peut être décrite par les composantes horizontales (x_1, x_2) de l'équation de convection diffusion (Eq. (3.31)) (écrite en notation d'Einstein et sous forme non conservative pour $i = 1, 2$) :

4.3. Transport des particules composant la nappe d'hydrocarbures en surface

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = K_m \frac{\partial^2 C}{\partial x_i \partial x_i} \quad (4.25)$$

En considérant la décomposition du scalaire C en une moyenne $\bar{C}$ et une fluctuation C' (décomposition de Reynolds : $C = \bar{C} + C'$) ainsi que le modèle de fermeture $\frac{\partial C' U'_i}{\partial x_i} = -K_t \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i}$, l'équation (4.25) peut être ramenée à la forme :

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{U}_i \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(K_m + K_t) \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} \right] \quad (4.26)$$

Le terme de diffusion moléculaire (K_m) peut être négligé par rapport au terme de diffusion turbulente (K_t). En effet, les molécules ont un libre parcours moyen (l) et une vitesse (u) moins élevée que des particules de tailles plus importantes de libre parcours moyen (l') et de vitesse (u') :

$$\Rightarrow K_t = u'l' \gg K_m = ul \quad (4.27)$$

Pour estimer le coefficient de diffusion turbulente K_t , reprenons le raisonnement vu dans la section 3.4.1 : à savoir que plus la taille d'un tourbillon (L_t) est importante, plus il transportera loin le fluide et que plus la vitesse du tourbillon ($\sqrt{k}$) sera élevée plus la dispersion sera rapide, reliant ainsi la viscosité turbulente à ces paramètres grâce à la relation (3.47). Ce même raisonnement est applicable à la diffusion turbulente (K_t) exercée par les tourbillons. Une première approximation consiste alors à écrire $K_t \approx \nu_t \approx \sqrt{k} L_t$. Généralement, le coefficient de diffusion turbulente est relié à la viscosité turbulente par le nombre de Schmidt turbulent σ_c :

$$K_t = \frac{\nu_t}{\sigma_c} \quad (4.28)$$

Le terme σ_c représente le rapport de la viscosité turbulente (ν_t) à la diffusivité turbulente (K_t). Cette constante pourrait être modifiée pour représenter les caractéristiques du corps. Dans le cas de particules considérées comme passives (c'est-à-dire qu'elles n'influencent pas l'écoulement), le nombre de Schmidt est constant et est égal à 0,72 (Violeau, 2009).

Pour pouvoir considérer que les déplacements d'un corps dans un fluide sont aléatoires, il faut faire l'hypothèse que la turbulence peut être modélisée avec un bruit blanc. La modélisation de la turbulence par un bruit blanc nécessite que le pas de temps de la simulation (Δt) soit très grand devant le temps caractéristique des petits tourbillons de turbulence ($\tau_p = \sqrt{\nu/\epsilon}$), mais aussi que Δt soit petit devant le temps caractéristique des grands tourbillons ($\tau_g = k/\epsilon$) afin que l'impact de ces tourbillons soit bien pris en compte (Minier et Peirano, 2001). L'hypothèse du bruit blanc est très importante, car elle permet de définir le déplacement d'un corps comme un processus de Markov (cf. annexe B.1.2), à savoir que le déplacement du corps à chaque pas de temps est indépendant des déplacements de ce corps aux pas de temps précédents.

La description Eulérienne du mouvement de la nappe d'hydrocarbures est régie par l'équation (4.26) dans laquelle le coefficient de diffusion moléculaire K_m est négligé. Réinterprétons

la concentration $\overline{C}(\vec{X}, t)$ comme une probabilité $P(\vec{X}, t)$ de trouver une particule à la localisation $\vec{X}$ au temps t . Pour le cas où la variable recherchée correspond au déplacement d'un corps, la fonction de densité de probabilité est définie par :

$$f(\vec{x}; t) = P\{\vec{X}(t) = \vec{x}\} \quad (4.29)$$

Cette fonction représente la probabilité qu'à l'instant t la position $\vec{X}(t)$ du corps soit égale à $\vec{x}$. L'équation de transport de cette densité de probabilité est la suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{U} \vec{\nabla} f = \nabla \cdot [K_t \vec{\nabla} f] \quad (4.30)$$

En développant le terme à droite de l'égalité de l'équation (4.30), il est possible d'écrire la relation suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \left(\vec{U} - \vec{\nabla} K_t \right) \vec{\nabla} f + K_t \nabla \cdot \vec{\nabla} f \quad (4.31)$$

L'équation (4.31) est une équation du type Fokker-Planck (cf. annexe B.2.1). La solution pour un processus aléatoire qui suit ce type d'équation peut être définie par une solution dite d'Itô (Gardiner, 2004) :

$$d\vec{X}(t) = \left(\vec{U} - \vec{\nabla} K_t \right) dt + \sqrt{2K_t} d\vec{W}(t) \quad (4.32)$$

Le vecteur $\vec{W}(t)$ est connu comme étant le vecteur du processus de Wiener représentant le mouvement brownien des particules (Minier et Peirano, 2001), c'est-à-dire le caractère aléatoire de leurs trajectoires. Ce vecteur possède les caractéristiques suivantes :

$$\|d\vec{W}\| = \epsilon(t)dt \text{ et } \|d\vec{W}\|^2 = dt \quad (4.33)$$

où $\|\cdot\|$ est la norme de l'espace vectoriel et le terme $\epsilon(t)$ représente un processus aléatoire de moyenne nulle.

Un vecteur aléatoire ($\vec{Z}$) de moyenne nulle et d'écart type égal à 1 peut être défini tel que :

$$d\vec{W} = \vec{Z} \sqrt{dt} \quad (4.34)$$

Le déplacement des particules d'hydrocarbures représentant la nappe en surface en 3D s'écrit donc sous la forme :

$$d\vec{X}(t) = \left(\vec{U} - \vec{\nabla} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_c} \right) \right) dt + \sqrt{\left(\frac{2\nu_t}{\sigma_c} dt \right)} \vec{Z}(t) \quad (4.35)$$

En 2D, le raisonnement effectué jusqu'à maintenant reste vrai. Le déplacement des particules d'hydrocarbures représentant la nappe en surface est décrit par :

$$d\vec{X}(t) = \left(\vec{u} - \frac{1}{h} \vec{\nabla} \left(h \frac{\nu_t}{\sigma_c} \right) \right) dt + \sqrt{\left(\frac{2\nu_t}{\sigma_c} dt \right)} \vec{Z}(t) \quad (4.36)$$

Dans les équations précédentes (Eq. (4.36) et Eq. (4.35)), les quantités ν_t et h sont calculées par le modèle hydrodynamique TELEMAC (cf. chapitre 3) et le champ de vitesse $\vec{U}$ en 3D (respectivement $\vec{u}$ en 2D) doit être remplacé par le champ de vitesse de la nappe en surface $\vec{U}_{oil}$ en 3D (Eq. (4.1)) (respectivement $\vec{u}_{oil}$ en 2D).

Pour générer le vecteur aléatoire $\vec{Z}$, on utilise un générateur de nombres pseudo-aléatoires (fonction Random en fortran). Ce générateur retourne des nombres réels compris entre 0 et 1 (R_1, R_2). Afin d'avoir un générateur de nombres aléatoires (Z_{x_1}, Z_{x_2}) de densité de probabilité suivant la loi Normale centrée réduite et indépendant on utilise la méthode de Box-Muller (Jourdain, 2009) :

$$Z_{x_1} = \sqrt{-2 \ln(R_1)} \cos(2\pi R_2) \text{ et } Z_{x_2} = \sqrt{-2 \ln(R_1)} \sin(2\pi R_2) \quad (4.37)$$

4.4 Processus de vieillissement

Les processus de vieillissement ont pour conséquence des changements de propriétés physico-chimiques de l'hydrocarbure au cours du temps. La compréhension de l'évolution de ces propriétés physico-chimiques au sein du milieu aquatique est essentielle à l'estimation de l'impact environnemental mais aussi à la prise de décision en termes de stratégie d'intervention et de lutte contre les pollutions.

4.4.1 Étalement

L'étalement est un processus important à prendre en compte dans le modèle de dérive de nappe d'hydrocarbures, non seulement pour pouvoir prévoir l'étendue de la pollution, mais aussi parce qu'il conditionne les autres processus de transformation de la nappe. En effet, l'étalement, en accroissant les surfaces d'échange, augmente les transferts de masse par évaporation et dissolution qui déterminent les changements de composition de la nappe et ses propriétés avec le temps. L'épaisseur de la nappe résultant de l'étalement est également une donnée essentielle pour estimer la persistance de l'hydrocarbure sur les berges (cf. section 4.5.1).

i Forces mises en jeu lors du phénomène d'étalement

Les forces mises en jeu lors de l'étalement d'une nappe d'hydrocarbures déversée en eaux calmes sont les forces de gravité, les forces de viscosité, des forces de tension superficielle et les effets d'inertie (cf. figure 4.5).

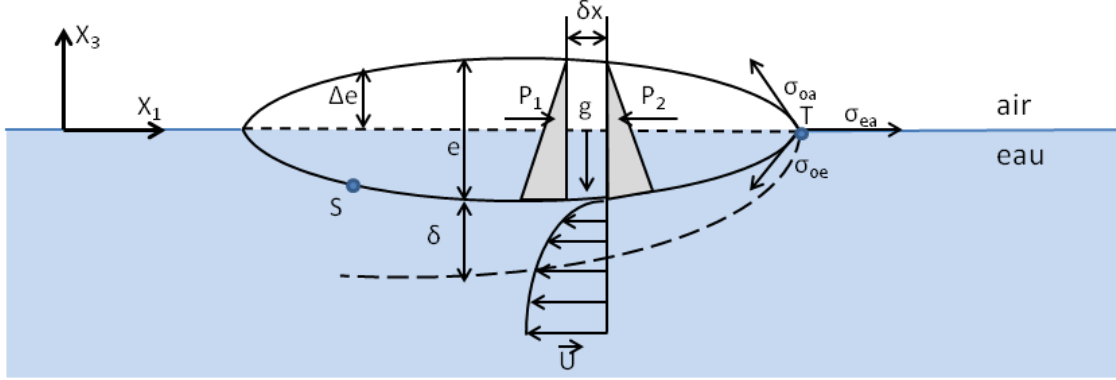


Figure 4.5: Forces agissant lors de l'étalement d'une nappe d'hydrocarbures

– les forces de gravité

Elles sont prépondérantes à court terme lorsque la couche d'hydrocarbures à la surface de l'eau est relativement épaisse : sous l'action de la force de gravité, le centre de masse de la nappe tend à baisser, ce qui a pour conséquence d'étaler la nappe. En supposant que la pression est hydrostatique, il est possible d'écrire au point de référence S la pression dans l'eau et le pétrole permettant ainsi de déterminer le coefficient Δ caractérisant l'épaisseur de la couche du film de pétrole au-dessus du niveau moyen de l'eau :

$$P_a - P_{ref} = -\rho_o g e = -\rho_e g (1 - \Delta) e \quad (4.38)$$

$$\Rightarrow \Delta = \frac{\rho_e - \rho_o}{\rho_e} \quad (4.39)$$

où P_a est la pression atmosphérique, P_{ref} la pression au point S , ρ_e et ρ_o les masses volumiques respectivement de l'eau et de l'hydrocarbure, g la gravité et e l'épaisseur de la nappe.

En reprenant un raisonnement analogue, il est possible de déterminer la pression P au sein de la nappe d'hydrocarbures pour un point d'ordonnée x_3 positive :

$$P = P_a + \rho_e g (1 - \Delta) e - \rho_o g (x_3 + (1 - \Delta) e) \quad (4.40)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial P}{\partial x_1} = \rho_o \Delta g \frac{\partial e}{\partial x_1} \quad (4.41)$$

Le même raisonnement peut être effectué selon l'autre composante horizontale. Ainsi, les composantes horizontales de la force d'étalement par unité de volume dues à la force de gravité $\vec{F}_{gv} = (F_{gv1}, F_{gv2})$ sont exprimées selon :

$$F_{gvi} = \rho_o \Delta g \frac{\partial e}{\partial x_i} \quad (4.42)$$

– Les forces de viscosité

L'étalement de la nappe est ralenti par le frottement visqueux de l'eau sur le pétrole. La contrainte de cisaillement induite par ce phénomène s'exprime par :

$$\tau_v = \mu_e \frac{U_1}{\delta} \quad (4.43)$$

avec τ_v la contrainte visqueuse, μ_e la viscosité dynamique de l'eau et δ l'épaisseur de la couche limite.

– Les forces de tension superficielle

Au bord de la nappe, c'est-à-dire au point de rencontre des 3 phases air, eau et pétrole, une force d'étalement est induite par les différentes forces de tension superficielle qui apparaissent aux interfaces eau/air (σ_{ea}), pétrole/air (σ_{oa}) et pétrole/eau (σ_{oe}). L'expression de la tension superficielle s'exerçant au bord de la nappe d'hydrocarbures peut se ramener à l'expression :

$$\vec{\sigma} = \vec{\sigma}_{ea} - \vec{\sigma}_{oa} - \vec{\sigma}_{oe} \quad (4.44)$$

La valeur de $\vec{\sigma}$ est positive, c'est donc une force motrice de l'étalement.

– Les effets d'inertie

Les effets d'inertie sont négligés dans le présent travail, si ce n'est pour la formule (4.51) employée pour la première phase d'étalement.

ii Modèle d'étalement développé

Au cours de cette thèse, deux modèles d'étalement ont été mis en oeuvre :

- le premier modèle est issu de la théorie de **Fay (1971)**. Cette dernière est basée sur une description assez simple des mécanismes de l'étalement et a été validée par des essais en laboratoire, ce qui en fait un des modèles les plus utilisés (**Daniel, 1997**). Ce modèle d'étalement s'adapte facilement à une approche Lagrangienne et est donc appliqué à chacune des particules composant la nappe d'hydrocarbures en surface.

- le second modèle développé est issu des formulations eulériennes de l'étalement d'une nappe d'hydrocarbures trouvées dans la littérature, et notamment de la formule analytique déterminée par **Maroihi et al. (1992)**. Ce modèle est également appliqué à chacune des particules composant la nappe d'hydrocarbures en surface.

Les deux modèles développés sont issus des deux approches les plus fréquentes dans la littérature. L'utilisateur du modèle de dérive de nappe d'hydrocarbures peut ainsi choisir le modèle correspondant le mieux à son cas d'étude. Pour ces deux approches, les particules composant la nappe d'hydrocarbure sont supposées cylindriques.

iii Modèle issu de la théorie de **Fay (1971)**

L'estimation des forces en présence lors d'une pollution mène à considérer 3 phases successives dans l'étalement d'une nappe d'hydrocarbures (**Fay, 1971**). En équilibrant les forces qui prédominent dans chaque phase, il est alors possible de déterminer une expression du rayon de la nappe en fonction du temps en supposant celle-ci de forme cylindrique ($V = \pi R^2 e$ avec V le volume d'hydrocarbure, R le rayon de la nappe et e son épaisseur) :

Chapitre 4. Modèle numérique de dérive de nappe d'hydrocarbures dans les eaux continentales

- 1^{ère} phase : gravité (motrice) - inertie (résistante)

$$\int_0^{2\pi} \int_0^R \int_0^e g \Delta \frac{\partial e}{\partial r} \rho_o r dr d\theta de \approx \rho_o g \Delta \frac{e^2}{2} 2\pi R = \rho_o \pi R^2 e \left(\frac{R}{t^2} \right) \approx \int_0^{2\pi} \int_0^R \int_0^e \rho_o \frac{\partial u}{\partial t} r dr d\theta de \quad (4.45)$$

$$\Rightarrow R = k_i (\Delta g V t^2)^{\frac{1}{4}} \quad (4.46)$$

- 2^{ème} phase : gravité (motrice) - viscosité (résistante)

$$\int_0^{2\pi} \int_0^R \int_0^e g \Delta \frac{\partial e}{\partial r} \rho_o r dr d\theta de \approx \rho_o g \Delta \frac{e^2}{2} 2\pi R = \rho_e \nu_e \cdot \pi R^2 \left(\frac{R}{t} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{(\nu_e t)}} \approx \int_0^{2\pi} \int_0^R \rho_e \nu_e \cdot \left(\frac{U_1}{\delta} \right) r dr d\theta \quad (4.47)$$

$$\Rightarrow R = k_v \left(\frac{g V^2 \Delta t^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\nu_e}} \right)^{\frac{1}{6}} \quad (4.48)$$

- 3^{ème} phase : tension superficielle (motrice) - viscosité (résistante)

$$\int_0^{2\pi} \sigma R d\theta \approx 2\pi R \sigma = \rho_e \nu_e \cdot \pi R^2 \left(\frac{R}{t} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{(\nu_e t)}} \approx \int_0^{2\pi} \int_0^R \rho_e \nu_e \cdot \left(\frac{U_1}{\delta} \right) r dr d\theta \quad (4.49)$$

$$\Rightarrow R = k_t \left(\frac{\sigma^2 t^3}{\rho_e^2 \nu_e} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (4.50)$$

Les valeurs des constantes sont regroupées dans le tableau 4.1.

Régime	Valeurs
inertiel	$k_i = 1, 14$
visqueux	$k_v = 1, 45$
tension de surface	$k_t = 2, 30$

Tableau 4.1: Constantes d'étalement selon Fay (1971)

Dans la plupart des pollutions, les forces d'inertie n'interviennent que pendant une période très courte qui suit la catastrophe (Warluzel et Benque (1981), Sebastiao et Guedes Soares (1995)). Cette constatation est à l'origine des formulations eulériennes de l'étalement d'une nappe d'hydrocarbures trouvées dans la littérature (cf. section iv).

Puisque les forces d'inertie agissent sur la nappe d'hydrocarbures durant un instant très court, la taille initiale de la nappe est calculée au temps de transition entre les phases de gravité/inertie et de gravité/viscosité. Le temps de transition séparant les 2 premières phases est obtenu en équilibrant l'aire de la nappe issue de l'équation (4.46) avec celle de la phase 2 (Eq. (4.48)). En réinjectant ainsi l'expression du temps trouvée dans l'expression du rayon de la phase 1, le rayon initial R_i de la nappe est obtenu :

$$R_i = \frac{k_v^2}{k_i} \left(\frac{\Delta g V^5}{\nu_e^2} \right)^{\frac{1}{12}} \quad (4.51)$$

Ensuite, l'évolution de l'aire de la nappe est calculée à partir des phases 2 et 3 de la théorie de [Fay \(1971\)](#).

Cependant, une série d'expériences de déversement conduites entre août 1971 et août 1972 par [Hollinger et Mennella \(1973\)](#) au large des côtes de Virginie ont toutes mis en évidence une configuration typique de l'étalement d'une nappe d'hydrocarbures : une région centrale d'épaisseur de 1 mm ou plus, contenant plus de 90% du volume déversé pour une surface de moins de 10% entourée d'une nappe plus vaste, d'épaisseur plus petite de plusieurs ordres de grandeur. L'interprétation de ces observations suggère que l'étalement de la tache centrale est commandé par la gravité, tandis que la couche mince périphérique est rapidement sujette aux forces de tension superficielle.

Ces observations permettent ainsi de considérer que les forces de tension superficielle agissant sur moins de 10% de la nappe d'hydrocarbures peuvent être négligées.

L'évolution de l'aire de la nappe est donc calculée à partir de l'équation (4.48). Cette approche est la méthode déployée dans le modèle ADIOS ([Vos, 2005](#)).

iv Modèle issu de la formule analytique de [Maroihi et al. \(1992\)](#)

L'évolution de l'épaisseur d'une nappe d'hydrocarbures peut être décrite par les équations de continuité et de quantité de mouvement de Saint-Venant :

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (e \vec{u}_o) = 0 \quad (4.52)$$

$$\frac{\partial(e \vec{u}_o)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (e \vec{u}_o \vec{u}_o) = -e \vec{\nabla} \left(\frac{P_a}{\rho_o} + \Delta g e \right) + \frac{1}{\rho_o} \left(\vec{\tau}_w - K(\vec{u}_o - \vec{u}_c) + \sigma \vec{\nabla} \phi \right) \quad (4.53)$$

où $\vec{u}_o$ est la vitesse de la nappe, P_a la pression atmosphérique, ρ_o la masse volumique de l'hydrocarbure, Δ une constante telle que $\Delta = \frac{\rho_e - \rho_o}{\rho_e}$, g la gravité, K le coefficient de frottement, $\vec{\tau}_w = K \vec{u}_w$ la contrainte du vent exercée sur la nappe, $\vec{u}_c$ la vitesse du courant et $\phi = \frac{r^2}{R^2}$ (avec r la distance au centre de la nappe et R son rayon).

En négligeant les forces d'inertie, en tirant de l'équation (4.53), le champ de vitesse $\vec{u}_o$ de la nappe en fonction des autres paramètres et en portant cette expression dans l'équation de continuité, la nouvelle équation portant sur l'épaisseur de la nappe est déterminée :

$$\frac{\partial(e)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\vec{u}_w + \vec{u}_c + \left(\frac{\sigma}{K} \right) \vec{\nabla} \phi \right) e \right) = \left(\frac{\rho_o \Delta g}{K} \right) \vec{\nabla} (e^2 \vec{\nabla} e) \quad (4.54)$$

En recherchant une solution à l'équation précédente sous la forme $e = B R^{-2} f(\eta)$ (où $\eta = r/R$), [Maroihi et al. \(1992\)](#) ont proposé la solution suivante (cf. Annexe D) :

$$\begin{cases} f(\eta) = (1 - \eta^2)^{\frac{1}{2}} \text{ avec } f(1) = 0 \\ B = \frac{3V}{2\pi} \\ A_o - \frac{1}{a} \arctan(a A_o) = 4\pi \mu t \end{cases} \quad (4.55)$$

Chapitre 4. Modèle numérique de dérive de nappe d'hydrocarbures dans les eaux continentales

où A_o est la surface de la nappe, V le volume de la nappe, μ et a des constantes telles que $\mu = \sigma/K$ et $a = \frac{2}{3V} \left(\frac{2\mu K}{\Delta g \rho_o} \right)$.

En négligeant les forces de tension de surface (expérience de [Hollinger et Mennella \(1973\)](#)) et en considérant le coefficient de frottement tel que $K = \frac{\rho_o \nu_o}{e}$ (où e est l'épaisseur de la nappe et ν_o la viscosité dynamique de l'hydrocarbure). La formulation de la surface (Eq. (4.55)) de la nappe proposée par [Maroihi et al. \(1992\)](#) peut se simplifier en :

$$A_o = \left(\frac{27\pi}{2} \frac{V^3 \Delta g}{\nu_o} t \right)^{\frac{1}{4}} \quad (4.56)$$

L'équation (4.56) est utilisée pour évaluer la surface de chaque particule. L'avantage de ce modèle est qu'il nécessite peu de paramètres (la masse volumique du pétrole ρ_o , la viscosité cinématique ν_o , et le volume d'hydrocarbure que contient la particule V_p).

4.4.2 Evaporation

L'évaporation est le processus de transformation le plus important en termes de transfert de masse ([Bocard \(2006\)](#), [ASCE Task Committee \(1996\)](#)). Elle change les caractéristiques de l'hydrocarbure déversé. Ce sont les composés les plus volatils et solubles qui s'évaporent en premier. L'épuisement de ces composés au sein de la nappe réduit considérablement leur taux de transfert par dissolution dans l'eau. L'évaporation est donc un facteur important à prendre en compte pour décrire le phénomène de dissolution des composés solubles dans l'eau. Une compréhension de l'évaporation est importante du point de vue pratique pour les opérations de nettoyage mais également pour le développement de modèles prédictifs estimant l'impact environnemental. L'évaporation est influencée par la nature de l'hydrocarbure (densité, viscosité), la température du milieu, la vitesse du vent, la surface de la nappe due à l'étalement.

i Equations de base

La variation de masse d'une nappe d'hydrocarbures soumise au seul phénomène d'évaporation est décrite par l'équation suivante :

$$\frac{dm_o}{dt} = -M_{wo}^g \frac{dN}{dt} \quad (4.57)$$

avec m_o la masse de la nappe en surface, M_{wo}^g la masse molaire du gaz, dN/dt le flux molaire exprimé en mol/s .

L'expression du flux molaire (dN/dt) est déterminée à l'aide de la théorie du double film de [Whitman \(1923\)](#). Le transfert d'un composé depuis la phase gazeuse vers la phase liquide dépend, d'une part, de l'équilibre thermodynamique entre les deux phases et, d'autre part, des transferts simultanés à l'intérieur de chacune des deux phases. Les conditions existant à proximité de l'interface étant très difficiles à observer, ou à explorer expérimentalement, plusieurs théories ont vu le jour afin de quantifier le transfert entre les deux phases. Ces théories sont fondées sur le fait que la résistance au transfert de masse se trouve localisée près de l'interface.

ii Théorie du double film de Whitman

Cette théorie ancienne suggérée par **Whitman (1923)** considère que la résistance au transfert de masse est localisée dans deux films minces situés de part et d'autre de l'interface, et qu'à l'intérieur de chacun d'eux le phénomène est régi par la diffusion moléculaire en régime permanent (cf. figure 4.6). A l'extérieur des films, la turbulence est telle que les concentrations ou pressions partielles sont uniformes. Ces films sont constitués principalement par les sous-couches limites laminaires pariétales des écoulements des deux phases. Les gradients de concentration étant prépondérants dans les films laminaires, c'est donc dans ces films que va se situer la majeure partie de la résistance au transfert.

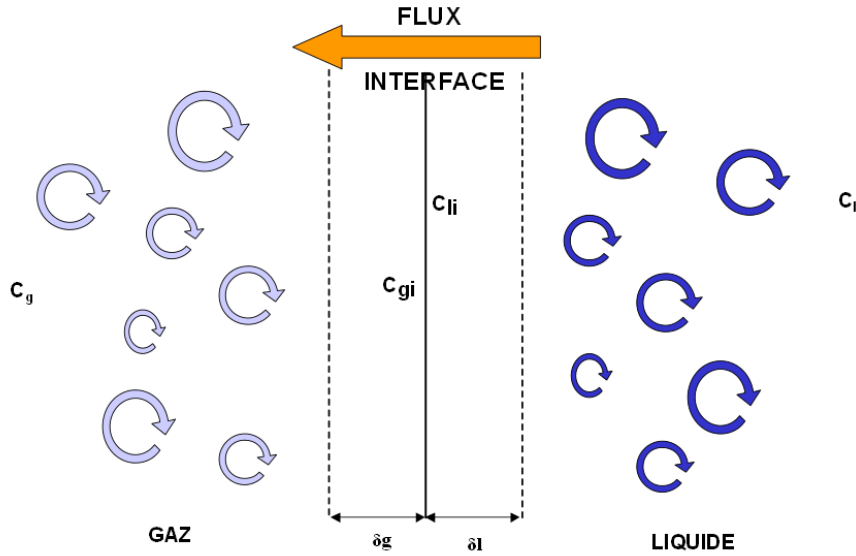


Figure 4.6: *Modèle du film de Whitman*

Les hypothèses de la théorie du double film de **Whitman (1923)** sont les suivantes :

- la résistance au transfert est exclusivement localisée dans ces films,
- l'interface proprement dite ne présente pas de résistance au transfert,
- l'équilibre thermodynamique entre les deux phases est atteint à l'interface et obéit aux mêmes relations à l'équilibre que pour les deux phases dans leur ensemble.

iii Théorie appliquée au cas de l'évaporation des hydrocarbures

Lors de l'évaporation, le flux de matière se déplaçant de la nappe d'hydrocarbures (phase liquide) vers l'atmosphère (phase gazeuse) s'écrit :

$$F_E = k_l(C_{li} - C_l) = k_g(C_g - C_{gi}) \quad (4.58)$$

avec k_l et k_g les coefficients de transfert côté liquide et côté gaz, F_E le flux de matière, C_{li} et C_{gi} les concentrations liquide et gazeuse au niveau de l'interface, C_l et C_g les concentrations moyennes du soluté dans la phase liquide et la phase gazeuse.

Chapitre 4. Modèle numérique de dérive de nappe d'hydrocarbures dans les eaux continentales

Dans la théorie du double film, le concept du coefficient de transfert global est introduit. Il repose sur l'additivité des résistances partielles au transfert de masse et fait intervenir les concentrations lorsque l'équilibre thermodynamique entre les phases liquide et gazeuse est atteint :

$$F_E = K_{evap}(C_g - C_g^*) \quad (4.59)$$

avec K_{evap} le coefficient de transfert de masse global de l'évaporation, C_g^* la concentration du soluté en phase gazeuse qui est en équilibre avec la concentration du soluté dans le liquide C_l .

La loi de Henry définit les concentrations à l'équilibre dans la phase aqueuse et la phase gazeuse. En appliquant cette loi au niveau de l'interface et à la concentration C_g^* , il est alors possible d'écrire :

$$C_g^* = HC_l \text{ et } C_{gi} = HC_{li} \quad (4.60)$$

$$\Rightarrow F_E = k_l(C_{li} - C_l) = k_l(H^{-1}C_{gi} - H^{-1}C_g^*) \quad (4.61)$$

où $H = (P_o \nu_{wg})/(RT)$ est la constante de Henry, avec ν_{wg} le volume molaire du gaz.

En considérant la relation $(C_g - C_g^*) = (C_g - C_{gi}) + (C_{gi} - C_g^*)$ pour la détermination du coefficient de transfert global K_{evap} , et $C_g = \frac{P_o}{RT}$ (hypothèse du gaz parfait), l'expression du flux de matière s'évaporant est donnée par :

$$F_E = \frac{K_{evap}}{RT}(P - P_o^*) \quad \text{avec} \quad \frac{1}{K_{evap}} = \frac{1}{k_g} + \frac{H}{k_l} \quad (4.62)$$

avec P_o^* la pression en vapeur à l'interface, P la pression en vapeur à une distance infinie au-dessus de la nappe d'hydrocarbures ($P_\infty = 0$).

L'expression du flux molaire de [Stiver et Mackay \(1984\)](#) est ainsi retrouvée :

$$\frac{dN}{dt} = \frac{K_{evap} A_o P_o}{RT} \quad (4.63)$$

où A_o est la surface de la nappe d'hydrocarbures.

iv Modèle pseudo-composants développé dans le cadre de la thèse

L'expression du flux molaire (Eq. (4.63)) combinée avec l'équation (4.57), mène à la relation suivante :

$$\frac{dm_o}{dt} = -M_{wo}^g \frac{K_{evap} A_o P_o}{RT} \quad (4.64)$$

Dans l'expression précédente, la notion de mélange pour l'hydrocarbure est occultée, en effet, on ne considère pas plusieurs produits au sein même de l'hydrocarbure. Afin de faire

cette distinction et donc de considérer le pétrole comme renfermant plusieurs produits, une théorie de modèle pseudo-composants est ici développée.

En reprenant l'équation (4.64) de la variation de masse provoquée par l'évaporation et en considérant l'hydrocarbure comme un mélange c'est-à-dire $M_{wo}^g = \sum_i y_i M_{wi}$ (avec M_{wi} la masse molaire du composé i) et $m_o = \sum_i m_i$, l'expression de la variation de la masse du composé i s'évaporant est déduite :

$$\frac{dm_i}{dt} = \frac{M_{wi} K_{evap} A_o y_i P_o}{RT} \quad (4.65)$$

En combinant alors la loi de Raoult et la loi de Henry, il est possible d'écrire $y_i P_o = x_i P_i$, où x_i est la fraction molaire du composé i définie par :

$$x_i = \frac{\frac{m_i}{M_{wi}}}{\sum_j \frac{m_j}{M_{wj}}} \quad (4.66)$$

L'équation (4.65) devient alors :

$$\frac{dm_i}{dt} = -K_{evap} A_o \frac{P_i m_i}{\sum_j \frac{m_j}{M_{wj}} RT} \quad (4.67)$$

L'équation (4.67) permet de modéliser le phénomène d'évaporation pour chaque composé i constituant la nappe d'hydrocarbures. Dans le modèle développé, cette équation est résolue pour chacune des particules constituant le modèle Lagrangien. La surface de la nappe A_o , devient donc A_{po} , l'aire de chaque particule.

Les travaux expérimentaux de Mackay et Matsugu (1973), pour la détermination du coefficient de transfert de masse, ont mis en évidence l'influence du rayon de la nappe (R) et les effets du vent (U_w) sur ce terme. Cependant, l'intervention du rayon de la nappe dans la formulation du coefficient du transfert de masse semble due aux effets de bords lors de l'expérimentation. Dans ce travail, ce terme calculé dans les conditions expérimentales de Mackay et Matsugu (1973) est directement intégré dans la constante de la formulation proposée par Jones (1997) :

$$K_{evap} = 0,00172 U_w^{\frac{7}{9}} (M_{wo}^l)^{-\frac{1}{3}} \quad (4.68)$$

où M_{wo}^l est la masse molaire moyenne de la nappe d'hydrocarbures.

Les masses molaires M_{wi} des différents composés de la nappe d'hydrocarbures sont calculées à partir de leur température d'ébullition T_{Bi} (Jones, 1997).

De plus, en accord avec les observations de Mackay et Matsugu (1973), la température (T) apparaissant dans l'équation (4.67) est celle de l'eau sur laquelle la nappe est déversée.

La pression de vapeur saturante d'une substance chimique augmente rapidement avec la température. De nombreuses équations décrivent cette dépendance et permettent de calculer la pression saturante à une température donnée. L'estimation d'Antoine ou des formulations analogues sont les relations les plus fréquemment utilisées (Jones (1997), Oinstein (2004) cité par Vos (2005)). Cependant selon Boethling et al. (2000), lorsque les températures auxquelles

on cherche à estimer la pression en vapeur saturante du composé i décroissent, la formulation d'Antoine tend à surestimer l'enthalpie de vaporisation de la substance chimique, sous-estimant alors sa pression en vapeur saturante P_i . Le point délicat des modèles d'évaporation est donc la détermination de la pression en vapeur saturante du composé i (P_i).

v Expression de la pression en vapeur saturante

Equilibre thermodynamique et enthalpie libre

La fonction enthalpie libre G (aussi nommée énergie de Gibbs) est la fonction d'état la plus appropriée pour l'étude des équilibres chimiques :

$$G \longrightarrow G(T, P, \xi) \quad (4.69)$$

où P est la pression, T la température et ξ l'état d'avancement de la réaction chimique.

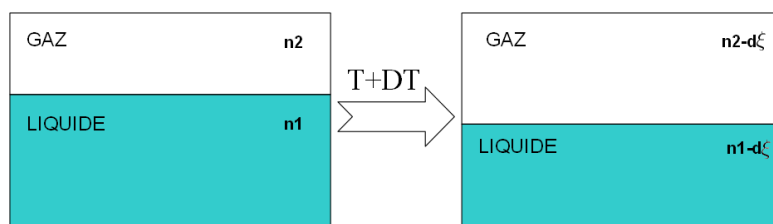


Figure 4.7: *Equilibre thermodynamique entre deux phases*

La variation de l'enthalpie libre pour un système en équilibre liquide/gaz (cf. figure 4.7) s'écrit :

$$dG = dG_v + dG_l \quad (4.70)$$

$$\text{avec } dG_i = \frac{\partial G_i}{\partial P} \partial P + \frac{\partial G_i}{\partial T} \partial T + \frac{\partial G_i}{\partial \xi} \partial \xi \quad (4.71)$$

Le changement d'équilibre du système liquide/gaz se fait d'une manière isotherme ($T = cste$) et isobare ($P = cste$), ce qui permet de simplifier l'équation (4.70) :

$$dG = g_v d\xi - g_l d\xi \quad (4.72)$$

L'équilibre du système est obtenu lorsque $dG/d\xi = 0$. L'équilibre physique d'un corps pur sous 2 phases est possible quelles que soient les proportions des 2 phases si son potentiel chimique ($g_i(T, P)$) est le même dans les 2 phases.

La formule de Clapeyron

Considérons un équilibre diphasique liquide/gaz dans les conditions (P, T) .

$$g_v(T, P) = g_l(T, P) \quad (4.73)$$

Le déplacement du système thermodynamique vers les nouvelles conditions $(P + dP, T + dT)$, son nouvel état d'équilibre, se traduit par un équilibre des potentiels chimiques :

$$g_v(T + dT, P + dP) = g_v(T, P) + dg_v(T, P) = g_l(T, P) + dg_l(T, P) = g_l(T + dT, P + dP) \quad (4.74)$$

$$\Rightarrow dg_v(T, P) = dg_l(T, P) \quad (4.75)$$

Avec les expressions de l'enthalpie libre (G) $dG = VdP - SdT$ et de l'enthalpie de vaporisation (H_{vap}) $\Delta H_{vap} = T\Delta S$ (car P est constant lors du changement d'état), l'équation (4.75) devient :

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta H_{vap}}{T} \cdot \frac{1}{V_v} \quad (4.76)$$

En assimilant la vapeur d'hydrocarbure à un gaz parfait ($PV_v = RT$) et en intégrant l'expression précédente :

$$\int_{P_0}^P \frac{dP}{P} = \frac{\Delta H_{vap}}{RT} \cdot \int_{T_B}^T \frac{1}{T^2} dT \quad (4.77)$$

$$\Rightarrow \ln\left(\frac{P}{P_0}\right) = \frac{\Delta H_{vap}}{RT_B} \left(1 - \frac{T_B}{T}\right) \quad (4.78)$$

avec $P_0 = P_a$ et $T = T_{amb}$ (la température ambiante), l'expression de la pression en vapeur saturante du composé i est déduite :

$$P_i = P_a \exp \left[\frac{\Delta H_{vap}^i}{RT_{Bi}} \left(1 - \frac{T_{Bi}}{T_{amb}}\right) \right] \quad (4.79)$$

L'équation (4.79) montre que l'estimation de la pression en vapeur saturante dépend de la précision de l'estimation de l'enthalpie de vaporisation ΔH_{vap}^i . Dans le modèle développé, la méthode de Grain-Watson est adoptée. En effet, d'après l'état de l'art sur l'estimation de l'enthalpie de vaporisation, il est recommandé d'utiliser l'expression de Watson qui a, d'après Boethling et al. (2000) et Grain et al. (1982), une dépendance vis-à-vis de la température plus réaliste par rapport à la formulation d'Antoine.

vi Méthode de Grain-Watson

Afin de déterminer la pression P , il est nécessaire de déterminer l'enthalpie de vaporisation $\Delta H_{vap(B)}$. Fishtine (1963) (Boethling et al., 2000) a proposé une expression de $\Delta H_{vap(B)}$ en fonction de la température d'ébullition du produit T_B , et de la constante de Fishtine K_f selon :

$$\Delta H_{vap(B)} = T_B K_f \ln(82,06 T_B) \quad (4.80)$$

Cette enthalpie de vaporisation est valable pour la température T_B . La constante de Fishtine K_f est déterminée grâce au tableau 4.2.

Type d'hydrocarbures	Nombre d'atomes de carbone dans le composé											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12-20
n-alcanes	0,97	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
alcanes (isomères)				0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99
alcènes		1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01
hydrocarbures cycliques saturés			1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
Dérivés alkylés des hydrocarbures cycliques saturés				0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99

Tableau 4.2: Constante de Fishtine pour les hydrocarbures (Boethling et al., 2000)

D'après le tableau 4.2, la constante de Fishtine peut être considérée constante et égale à 1 pour les hydrocarbures. Une fois l'enthalpie de vaporisation déterminée à la température T_B , il est nécessaire de la déterminer à la température T_{amb} . Pour ce faire, Grain a proposé l'équation (4.81) pour déterminer l'enthalpie de vaporisation à la température T_{amb} , à partir de la formulation de Watson :

$$\Delta_{vap}H(T_{amb}) = \Delta H_{vap(B)} \left(3 - 2 \frac{T_{amb}}{T_B} \right)^m \quad (4.81)$$

avec $m = 0,4133 - 0,2575(T_{amb}/T_B)$.

4.4.3 Dissolution

Les pollutions aux hydrocarbures ont des impacts sur l'environnement mais aussi sur la santé humaine, avec des conséquences économiques non négligeables (coût de dépollution, arrêt de production d'eau potable et des activités de pêche dans les zones touchées...). La complexité et le nombre élevé de composés pouvant être présents dans l'eau représentent la difficulté majeure dans l'évaluation quantitative des risques. Après un rejet d'hydrocarbures

dans le milieu aquatique, les HAP (Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques) sont particulièrement présents dans l'environnement (Lafon et al., 2000). Il s'avère que les composés aromatiques (HAP et HAM (Hydrocarbures Aromatiques Monocycliques)) sont les espèces les plus solubles au sein de la nappe d'hydrocarbures. Cependant, la volatilisation des HAM fait disparaître ce type de molécules qui n'apparaissent plus que sous forme de traces quelques heures après la pollution. Les HAP présentent un caractère mutagène et cancérigène qu'il faut contrôler (cf. section 1.5.1). Devant cette nécessité d'évaluer les zones potentiellement affectées par les HAP après une pollution, un module de qualité d'eau a été développé à l'aide d'un modèle Eulérien représentant la concentration en HAP dissous dans l'eau.

i Expression du flux de transfert de masse

Le calcul de la concentration d'hydrocarbures dissous dans l'eau en équilibre avec une nappe de polluant en surface, selon la loi de Raoult, nécessite la connaissance de la fraction molaire de chacun de ces hydrocarbures dans la phase huileuse composée par la nappe (Bocard, 2006). En effet, le flux de matière de l'hydrocarbure i passant de la phase huileuse à la phase aqueuse, donné par la théorie du double film (Whitman, 1923) s'écrit :

$$\Phi_i = K_{diss(i)}(S_i X_i - C_i) \quad (4.82)$$

avec Φ_i le flux d'hydrocarbure partant en dissolution de la substance i , $K_{diss(i)}$ le coefficient de transfert de la dissolution du composé i , S_i la solubilité de la substance i dans l'eau, C_i la concentration du composé i dans l'eau et X_i la fraction molaire de la substance i dans la nappe.

Par la suite, l'expression du flux de transfert de masse par dissolution (Eq. (4.82)) est appliquée à chacune des particules.

ii Solution analytique de l'équation de dissolution

La variation de concentration du HAP i dans la phase aqueuse, due au flux de matière déterminé précédemment (Eq. (4.82)), est régie par l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{K_{diss(i)} A_{po}}{V} (S_i X_i - C_i) \quad (4.83)$$

avec C_i la concentration de pétrole dans l'eau, V le volume d'eau sous la particule d'hydrocarbure et A_{po} l'aire de la particule.

Par résolution analytique de l'équation différentielle (4.83), la concentration dissoute du composé i dans la colonne d'eau à l'instant t (C_i^{n+1}) en fonction de la concentration au pas de temps précédent ($t - 1$) (C_i^n) est donnée par la relation suivante :

$$C_i^{n+1} = S_i X_i^n + (C_i^n - S_i X_i^n) \exp(-\gamma \Delta t) \quad (4.84)$$

où Δt est le pas de temps et γ une constante définie par $\gamma = (K_{diss(i)} A_{po})/V$.

Dans ce modèle, les valeurs de solubilité des différents HAP (S_i) sont issues de la littérature (Mackay et al., 2006).

De même, d'après Hibbs et Gulliver (1999) et Shen et Yapa (1988), la valeur du coefficient de transfert de masse de la dissolution K_{diss} , donnée sans aucune justification, est de l'ordre du cm/hr . Une calibration de ce coefficient K_{diss} est en fait nécessaire car la modélisation du phénomène de dissolution dépend des différents types de produits déversés (hydrocarbures raffinés, lourds et légers).

A partir de l'expression (4.84), la variation de masse du HAP i dissous dans la phase aqueuse s'écrit :

$$mass_i^{n+1} - mass_i^n = (C_i^{n+1} - C_i^n) \cdot V \quad (4.85)$$

$$\Rightarrow mass_i^{n+1} - mass_i^n = [1 - \exp(-\gamma \Delta t)] (S_i X_i^n - C_i^n) V \quad (4.86)$$

iii Passage de l'approche Lagrangienne à l'approche Eulérienne

Le code de calcul TELEMAC est un code aux éléments finis dont les principaux résultats (vitesses, viscosité, hauteur d'eau, concentration de traceurs, etc...) sont définis en chaque nœud du maillage (cf. chapitre 3). Si on considère une particule lagrangienne P dans son élément (cf. figure 4.8), sa masse dissoute doit être répartie en chacun des nœuds de l'élément.

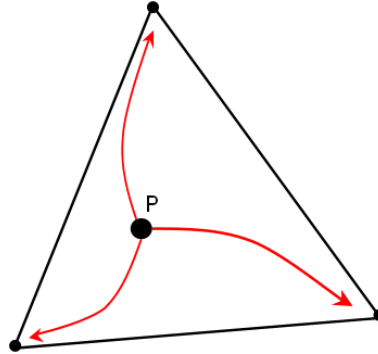


Figure 4.8: Répartition des caractéristiques de la particule sur les nœuds du maillage

Par conséquent, dans le but de calculer le coefficient γ en chaque nœud j , l'aire de chaque particule (A_{po}) est répartie entre les nœuds de l'élément auquel elle appartient par interpolation à l'aide des coordonnées barycentriques (Eq. (3.76)) :

$$A_r(j) = A_{po} \alpha(j) \quad (4.87)$$

avec $\alpha(j)$ la coordonnée barycentrique au nœud j et $A_r(j)$ l'aire partielle de la particule au nœud j .

Une surface (2D) ou un volume (3D) sont définis autour de chaque nœud du maillage en ajoutant l'aire des quadrilatères définis par les médianes de chaque élément triangulaire (surface grise sur la figure 4.9). Cette surface ainsi définie est équivalente à l'intégrale des fonctions tests de la formulation variationnelle (Hervouet, 2007). En 2D, pour avoir un volume

défini en chaque nœud du maillage, il suffit de multiplier la surface du nœud par la hauteur d'eau de celui-ci.

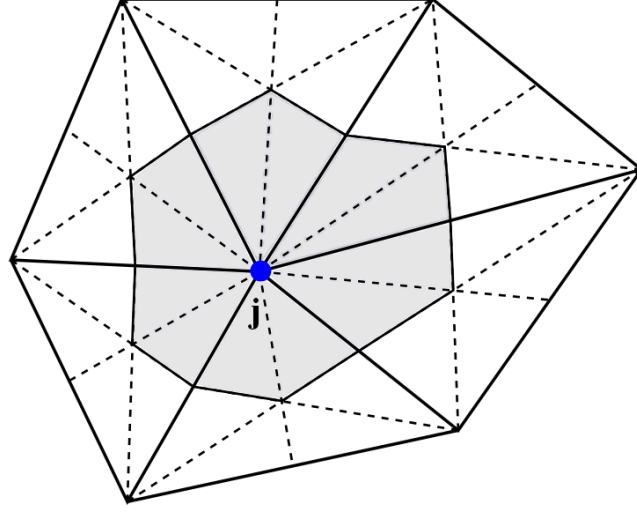


Figure 4.9: Surface du nœud du maillage

Toutes les étapes précédentes permettent de calculer le coefficient $\gamma(j)$ en chaque nœud (j) de l'élément où se situe la particule. La masse dissoute du HAP i dans la colonne d'eau est définie en chaque nœud j ($mass_{i_{diss}}(j)$) par la relation suivante :

$$mass_{i_{diss}}^{n+1}(j) = [1 - \exp(\gamma_j \delta t)] (S_i X_i^n - C_i^n) V_j \quad (4.88)$$

En effectuant cette étape pour chaque nœud de l'élément dans lequel la particule se situe, la masse dissoute totale pour le composé i ($masstot_{i_{diss}}$) est déduite et donnée par la relation :

$$masstot_{i_{diss}}^{n+1} = \sum_{i=0}^{nb_{nœud}} mass_{i_{diss}}^{n+1}(j) \quad (4.89)$$

La quantité de traceur ajoutée au pas de temps t au nœud j par dissolution est alors définie par :

$$C_j^{n+1} = C_j^n + \frac{mass_{i_{diss}}^{n+1}(j)}{V_j} \quad (4.90)$$

Ensuite, l'équation de convection diffusion (Eq. (3.32) en 2D et Eq. (3.31) en 3D) est utilisée pour simuler le transport et la dispersion du nuage de polluant dans la colonne d'eau.

4.5 Processus spécifiques aux eaux continentales

4.5.1 Echouage et relargage

i Propriétés générales

En rivière, en lac ou en estuaire, le rivage est la zone naturelle de dépôt, enlèvement, puis nouveau dépôt d'un polluant flottant. Dans les eaux continentales, ce rivage est le lieu de concentration majeure de polluant. L'évaluation de l'impact à terme de la pollution sur les berges est très complexe et dépend de nombreux paramètres :

- **nature de l'hydrocarbure :**

L'adhésion du pétrole sur les berges et l'infiltration de celui-ci dans le substrat sur lequel il s'est échoué dépend du type d'hydrocarbures considéré et de ses caractéristiques, plus particulièrement de sa viscosité. Les fiouls légers (diesel,...) tendent à beaucoup moins adhérer au substrat que les fiouls lourds. À l'inverse, les fiouls lourds ont tendance à moins s'infiltrer dans le substrat que des fiouls plus légers. Par conséquent, il peut être conclu que plus un hydrocarbure est adhérent à une berge, et plus son potentiel d'infiltration dans le substrat est faible. De plus, les fiouls déversés deviennent plus adhérents et donc s'infiltreront moins au fur et à mesure du vieillissement de l'hydrocarbure.

- **nature du substrat :**

Le degré d'infiltration d'un hydrocarbure dans un substrat dépend en grande partie de la perméabilité du substrat. L'infiltration va être moins importante sur une plage avec de fins sédiments empaquetés très étroitement les uns dans les autres que dans des substrats où la taille des grains est plus importante. En effet, plus les pores sont larges et interconnectés, plus le substrat sera perméable et permettra une infiltration importante de l'hydrocarbure.

- **paramètres météorologiques :**

L'influence des saisons joue un rôle important pour ces phénomènes d'échouage et de relargage. En effet, la température affecte l'infiltration d'un hydrocarbure dans un substrat, et l'adhérence d'un hydrocarbure sur une berge dépend très largement de la végétation sur celle-ci. Ces paramètres sont directement reliés aux changements météorologiques saisonniers.

- **champ hydrodynamique :**

L'hydrodynamique, par exemple le phénomène de marée, peut produire un nettoyage mécanique par élévation et diminution de la hauteur d'eau.

La compréhension des interactions complexes entre le pétrole et le rivage après une pollution reste limitée (Danchuk (2009), Bocard (2006)). Celle-ci est pourtant essentielle pour la modélisation des dérives de nappes d'hydrocarbures dans les eaux continentales.

ii Modèle d'échouage de l'hydrocarbure

L'arrivée de l'hydrocarbure sur une berge est gérée par le modèle Lagrangien de transport (Eq. (4.36) (2D) et Eq. (4.35) (3D)). Lorsqu'une particule arrive sur la côte, il est nécessaire de savoir si elle est échouée ou non, celle-ci est considérée comme échouée si elle satisfait à

une des deux conditions suivantes :

- l'épaisseur de la particule est supérieure à la hauteur d'eau sous celle-ci,
- la taille des rugosités est supérieure à la hauteur d'eau sous la particule.

Si une des deux conditions précédentes est remplie, alors la particule peut s'échouer sur la berge s'il y a la place pour l'accueillir. Pour calculer le volume de berge disponible pour l'échouage, une formulation basée sur l'équation proposée par [Cheng et al. \(2000\)](#) (Eq. (2.19)) est utilisée. Le volume calculé tient alors compte du volume de pétrole pouvant s'échouer sur le rivage et s'infiltrer dans le substrat. L'avantage de la méthode de calcul de [Cheng et al. \(2000\)](#) est l'utilisation de paramètres qui sont directement issus des informations fournies par les équipes de nettoyage lors de pollutions, comme par exemple lors de la marée noire de l'Exxon Valdez en 1989 (cf. annexe C). Un défaut semble pourtant apparaître dans cette formulation. En effet, la capacité de retenue de l'hydrocarbure ne fait pas apparaître la pente du rivage, qui représente pourtant un paramètre essentiel au calcul de cette variable dans les travaux de Boufadel ([Boufadel \(2000\)](#), [Boufadel et al. \(2007\)](#)). En adaptant la formule de [Cheng et al. \(2000\)](#) pour prendre en compte cette dépendance, le volume d'hydrocarbure pouvant s'échouer sur une plage (cf. figure 4.10) s'écrit :

$$V^* = A_{berge} e_m + (C_v \cos \theta) \frac{1}{2} D_p L_{berge} \cos \theta \quad (4.91)$$

où A_{berge} est l'aire du rivage, e_m l'épaisseur maximale de la nappe pouvant s'échouer, D_p la profondeur d'infiltration de l'hydrocarbure dans le substrat, C_v le volume d'hydrocarbure contenu dans les sédiments, θ la pente de la berge et L_{berge} la largeur du rivage.

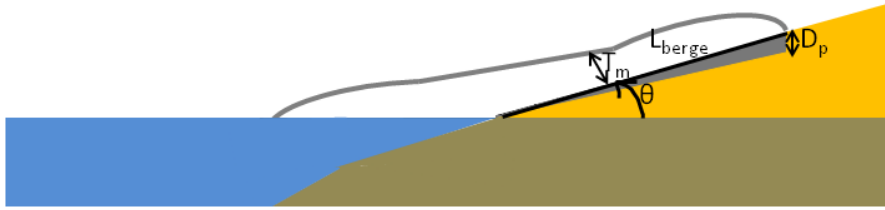


Figure 4.10: Schéma d'une nappe d'hydrocarbures échouée sur une berge

Dans le modèle développé au cours de cette thèse, 3 différents types de berges sont considérés :

- plages de sable,
- plages de gravier,
- côtes rocheuses.

Ces trois types de berge se différencient par la taille de grain des sédiments. Le modèle de fermeture au fond du domaine (cf. section 3.4.2) fait intervenir le coefficient de frottement C_f et non la taille de grain des sédiments. La taille des rugosités au fond k_s peut être liée au coefficient de frottement en combinant les formules suivantes :

- Coefficient de Chézy (C_h) en fonction du C_f : $C_h = \sqrt{2g/C_f}$,
- Coefficient de Chézy en fonction du coefficient de Strickler (K) : $C_h = Kh^{\frac{1}{6}}$,

- La formule de Ramette ([Ramette, 1981](#)) pour lier la taille de rugosités k_s au coefficient de Strickler K : $K = (8, 2\sqrt{g})/(k_s^{\frac{1}{6}})$.

$$\Rightarrow k_s = \frac{C_f^3 8, 2^6 h}{2^3} \quad (4.92)$$

La taille des rugosités (k_s) peut être assimilée au diamètre moyen D_{50} selon Nikuradse ([Julien, 2010](#)). Maintenant que le type de berges est déterminé par l'intermédiaire du coefficient de frottement, la valeur des paramètres e_m , C_v et D_p nécessaire à la détermination du volume d'hydrocarbure pouvant s'échouer (Eq. (4.91)) peut être choisie à partir des données issues du tableau 2.4.

iii Relargage

La particule une fois échouée sur le rivage peut être remise à l'eau si les deux conditions hydrodynamiques suivantes sont satisfaites :

- l'épaisseur de la particule est inférieure à la hauteur d'eau sous celle-ci,
- la taille des rugosités est inférieure à la hauteur d'eau sous la particule.

Si malgré ces conditions la particule est toujours échouée, elle peut être relarguée de manière probabiliste pour modéliser des phénomènes aléatoires tels qu'un vent soutenu s'élevant brusquement pendant un court instant, provoquant ainsi une remise à l'eau d'une certaine partie de l'hydrocarbure échoué. Dans le cas d'un fleuve, le relargage peut être provoqué par le passage d'un bateau qui va engendrer une vague pouvant alors "décoller" une partie de l'hydrocarbure échoué. Ce phénomène probabiliste se traduit de la manière suivante : suivant le type de berges la particule aura un temps de demi-vie pour le relargage suivant la méthode de [Danchuk et Wilson \(2010\)](#). La méthode consiste alors :

- à déterminer pour chaque particule de fioul dans le modèle Lagrangien un nombre aléatoire compris entre 0 et 1, $R_{(0,1)}$,
- à calculer une probabilité de remise à l'eau $P_{refloat}$,

$$P_{refloat} = 1 - \exp(-k_f t) \quad (4.93)$$

- à comparer $P_{refloat}$ avec $R_{(0,1)}$. Si $R_{(0,1)} < P_{refloat}$, alors la particule est remise à l'eau.

Dans notre modèle, la valeur du coefficient k_f en fonction du type de berges est issue des travaux de [Reed et al. \(1986\)](#) et de [Reed et al. \(1989\)](#) pour le modèle COZOIL (cf. tableau 4.3).

Type de berges	Pourcentage relargué		Valeur de k_f
	1 jour	5 jours	
Sable	18-26	63-78	0,20-0,30
Gravier	10-18	40-63	0,10-0,20
Côtes rocheuses	60-63	99-99,3	0,90-0,99

Tableau 4.3: Taux de relargage du pétrole en fonction du type de berges

4.5.2 La volatilisation

Pour mesurer les risques sur la biodiversité, il est important d'estimer et de suivre l'évolution de la concentration des espèces dissoutes dans la colonne d'eau. Cette évolution est alors directement influencée par le phénomène de volatilisation. En effet, la volatilisation rapide des espèces les plus volatiles de la colonne d'eau fait que les espèces les moins solubles et les moins volatiles sont majoritairement présentes dans la colonne d'eau quelques heures après une pollution.

i Expression du transfert dû à la volatilisation

Une phase aqueuse, contenant des hydrocarbures dissous qui sont aussi relativement volatils, se met en équilibre avec la phase gazeuse par le transfert d'une partie de ces hydrocarbures. Le flux de masse se volatilisant dans l'atmosphère peut s'exprimer à partir de la théorie du double film de [Whitman \(1923\)](#) par la relation :

$$F_{Vi} = -K_{vol}C \quad (4.94)$$

où F_{Vi} est le flux de transfert de masse se volatilisant, K_{vol} le coefficient de transfert de volatilisation et C la concentration du polluant dans la phase aqueuse.

Dans le modèle développé, cette expression du flux est appliquée à chacun des composés HAP i qui se dissout dans la colonne d'eau, ce qui nécessite la connaissance du coefficient de transfert de masse K_{vol} pour chacun des composés. Afin d'évaluer le plus précisément possible l'évolution des différents HAP dissous dans la colonne d'eau, provenant de différents types d'hydrocarbures, ce coefficient doit être calibré.

Lors de la résolution de l'équation de conservation du traceur en 3D, le flux de matière se volatilisant dans l'atmosphère représente une condition limite de type Neumann :

$$\nu_v \frac{\partial C}{\partial n} = -K_{vol}C \quad (4.95)$$

où n est la normale sortante du domaine et ν_v un coefficient de diffusion propre à la volatilisation.

En 2D, cette condition limite est directement insérée dans l'équation de conservation du traceur (cf. section ii).

ii La volatilisation en 2D

En formulation variationnelle par projection sur les fonctions tests ϕ_i , la volatilisation, en dimension 3, apparaît comme un terme de flux à la surface libre Γ qui s'écrit sous la forme $\int_{\Gamma} \nu_v \nabla C \cdot \vec{n} \phi_i d\Gamma$.

En dimension 2 et après passage à la forme non conservative, la formulation précédente devient :

$$\frac{1}{h_i} \int_{\Omega} \nu_v \nabla C \cdot \vec{n} \phi_i d\Omega \quad (4.96)$$

Avec l'équation (4.95), l'expression précédente peut s'écrire sous la forme :

$$- \frac{1}{h_i} \int_{\Omega} K_{vol} C^{n+1} \phi_i d\Omega \quad (4.97)$$

Après mass-lumping, on obtient alors :

$$- K_{vol} \frac{C_i^{n+1}}{h_i} \int_{\Omega} \phi_i d\Omega \quad (4.98)$$

On trouve ainsi un terme implicite qui sera traité avec l'équation de convection diffusion.

4.6 Conclusion

Au cours de ce chapitre, les équations mathématiques du modèle numérique de dérive de nappe d'hydrocarbures dans les eaux continentales ont été présentées. Le modèle développé est capable de simuler les principaux phénomènes agissant sur une nappe d'hydrocarbures : convection, diffusion, échouage, relargage, étalement, évaporation, dissolution et volatilisation. Pour ce faire, l'approche choisie consiste à coupler un modèle Lagrangien décrivant la nappe en surface et un modèle Eulérien permettant le suivi de l'évolution des hydrocarbures dissous dans la colonne d'eau. Les données hydrodynamiques requises pour le transport de l'approche Lagrangienne et Eulérienne sont fournies par le code de calcul TELEMAC (cf. chapitre 3).

Afin de prendre en compte les différents types de produits (produits raffinés et lourds) dans la physique des processus de dérive de nappe d'hydrocarbures, une calibration du modèle numérique est nécessaire. Pour ce faire, dans le chapitre suivant, les différentes expérimentations réalisées au sein du projet MIGR'HYCAR ainsi que la calibration du modèle numérique sont présentées. En effet, une première série d'essais visant à caractériser les différents hydrocarbures étudiés a été utilisée pour calibrer le modèle. En parallèle, des expérimentations en canal d'essais ont été effectuées pour mener à bien sa validation.

Chapitre 5

Caractérisation des hydrocarbures et expérimentations en canal d'essais

Sommaire

5.1	Introduction	102
5.2	Caractérisation des hydrocarbures	103
5.3	Mise en donnée du modèle numérique	106
5.4	Expérimentations en canal d'essais	111
5.5	Conclusion	117

5.1 Introduction

Dans le cadre du projet MIGR'HYCAR, des expérimentations visant à caractériser les nappes d'hydrocarbures en milieu contrôlé sont effectuées. Il a été choisi de travailler avec 7 hydrocarbures commerciaux fournis par TOTAL : fioul lourd (IFO 380), bitume (Azalt 35/50), gasoil, fioul domestique, SP98, SP95-E10 et base kérosène (Jet). Ces produits ont dans un premier temps été caractérisés au CEDRE (densité, viscosité, point d'écoulement, courbes de distillation, teneurs en Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP)). Le travail expérimental est ensuite réparti selon trois échelles :

- (1) des essais statiques à l'échelle du laboratoire réalisés au LCA,
- (2) des essais dynamiques à l'échelle du polludrome réalisés au CEDRE,
- (3) des essais dynamiques à l'échelle de la rivière artificielle réalisés par Veolia Environnement Recherche et Innovation (VERI) sur le site de l'Agence Allemande pour l'Environnement (UmweltBundesAmt, Berlin-Marienfelde).

Les expériences ont pour objectif de caractériser les hydrocarbures et de permettre la vérification et la validation du modèle numérique.

Le point commun à l'ensemble de ces essais est le suivi de la fraction soluble de 43 HAP, comprenant des composés soufrés et ramifiés. En effet, il a été décidé d'analyser les 16 HAP prioritaires répertoriés par l'US EPA (United States Environmental Protection Agency), auxquels ont été ajoutés des dérivés soufrés et ramifiés (cf. tableau 5.1).

Naphtalène	N	C1-Dibenzothiophène	D1
C1-Naphtalène	N1	C2-Dibenzothiophène	D2
C2-Naphtalène	N2	C3-Dibenzothiophène	D3
C3-Naphtalène	N3	Fluoranthène	FL
Benzo(b)thiophène	BT	Pyrène	PY
C1-Benzo(b)thiophène	BT1	C1-Fluoranthène/Pyrène	FL1
C2-Benzo(b)thiophène	BT2	C2-Fluoranthène/Pyrène	FL2
C3-Benzo(b)thiophène	BT3	C3-Fluoranthène/Pyrène	FL3
Biphényle	B	Benzo(a)anthracène	BAA
Acénaphthylène	ANY	Chrysène	C
Acénaphthène	ANA	C1-Chrysène	C1
Fluorène	F	C2-Chrysène	C2
C1-Fluorène	F1	C3-Chrysène	C3
C2-Fluorène	F2	Benzo(a)pyrène	BAPD
C3-Fluorène	F3	Benzo(b)fluoranthène	BBF
Phénanthrène	P	Benzo(k)fluoranthène	BKF
Anthracène	A	Benzo(e)pyrène	BEP
C1-Phénanthrène/Anthracène	P1	Benzo(a)pyrène	BAP
C2-Phénanthrène/Anthracène	P2	Pérylène	PE
C3-Phénanthrène/Anthracène	P3	Indéno(1,2,3-cd)pyrène	IN
Dibenzothiophène	D	Dibenzo(a,h)anthracène	DBA
		Benzo(g,h,i)peryène	BPE

Tableau 5.1: Liste des composés HAP analysés

Ce chapitre est divisé en trois parties. Dans la première (cf. section 5.2), la caractérisation des hydrocarbures étudiés est présentée. Elle permet la mise en donnée du modèle mathématique qui constitue la deuxième partie de ce chapitre (cf. section 5.3). Dans la troisième partie, les expérimentations dynamiques effectuées en canal d'essais sont présentées (cf. section 5.4).

La plupart des résultats expérimentaux présentés dans ce chapitre sont directement issus du projet MIGR'HYCAR ([Groupe de travail MIGR'HYCAR \(2010\)](#), [Sablayrolles et al. \(2011\)](#)).

5.2 Caractérisation des hydrocarbures

5.2.1 Teneur en hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP)

Le transfert des HAP de la nappe d'hydrocarbures est influencé par de multiples paramètres identifiés lors de l'étude de laboratoire, mais dépend avant tout de la teneur initiale de ces composés au sein des produits pétroliers testés. Aussi, afin de pouvoir à terme modéliser les échanges entre la nappe et les phases air et eau, il convient de quantifier dans les produits raffinés considérés l'ensemble des molécules analysées dans la colonne d'eau. Les valeurs présentées sur la figure 5.1 correspondent à la somme des 43 molécules cibles. Les résultats montrent que la teneur la plus importante est obtenue pour le fioul domestique. Elle se révèle élevée en comparaison du gasoil, coupe pétrolière dont il se rapproche le plus (cf. figure 5.2). Cette différence est due aux propriétés de combustion recherchées pour le gasoil qui doit contenir des alcanes linéaires en proportions importantes, et à l'inverse peu de composés aromatiques. L'IFO 380 contient également une proportion importante de ces composés, principalement issus de la coupe de fluidifiant fortement aromatisé généralement utilisée pour atteindre des spécifications particulières de viscosité. De manière générale, dans les différents hydrocarbures testés, les HAP sont principalement représentés par la série des naphthalènes (composé parent et dérivés ramifiés), molécules les plus solubles mais également les plus sensibles aux phénomènes d'évaporation (à partir de la nappe) ou de volatilisation (après une première phase de dissolution).

5.2.2 Courbes de distillation

Le volume de polluant demeurant à la surface de l'eau est contrôlé essentiellement par les phénomènes d'évaporation, la contribution de la dissolution à la réduction des quantités déversées étant marginale en comparaison. Les courbes de distillation ont été déterminées par le CEDRE (cf. figure 5.2). La valeur de 250°C est mise en évidence car il est généralement admis que l'évaporation maximale d'un produit correspond approximativement à la coupe distillant jusqu'à 250°C.

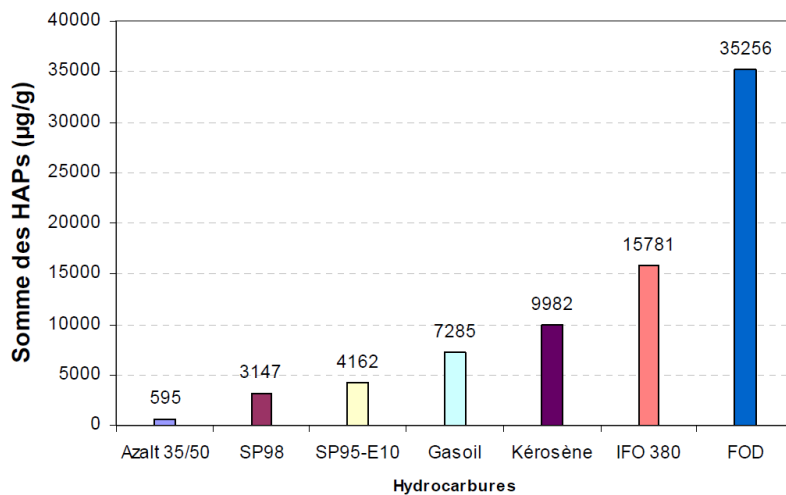


Figure 5.1: Teneur en HAP des produits pétroliers testés

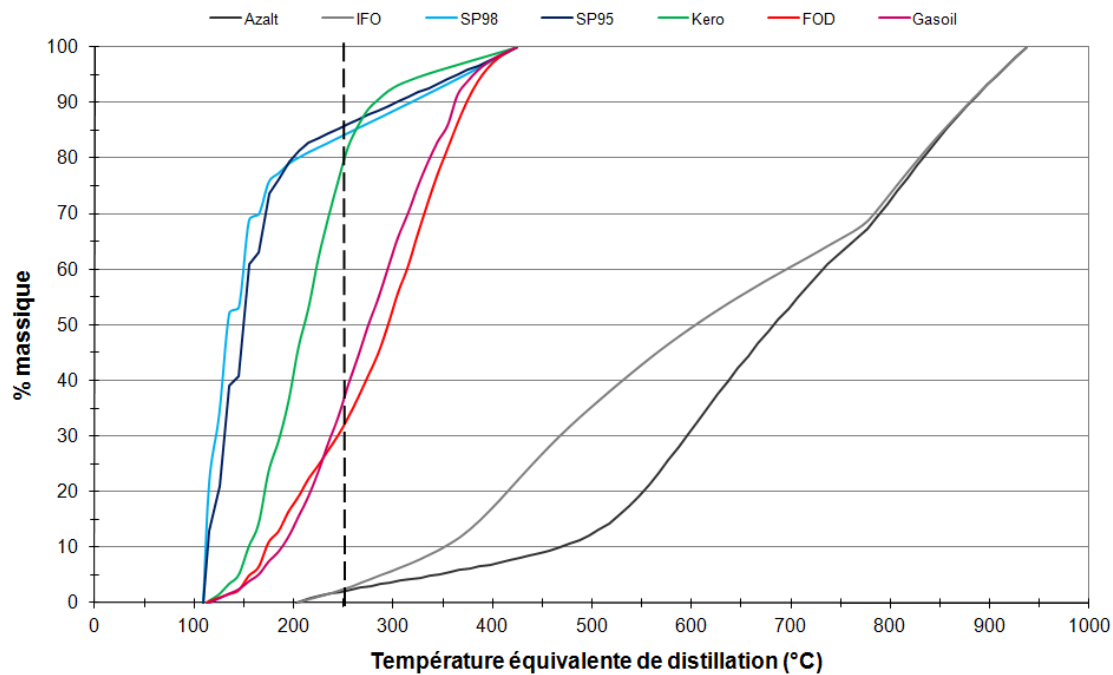


Figure 5.2: Courbes de distillation des produits pétroliers testés

5.2.3 Essais statiques à l'échelle du laboratoire

Les essais à l'échelle du laboratoire ont pour objectif de caractériser le comportement de la fraction soluble des hydrocarbures en fonction des conditions physico-chimiques du milieu récepteur. Les hydrocarbures raffinés légers (essence SP98 et SP95-E10, gasoil, kérosène et fioul domestique) et raffinés lourds (fioul lourd IFO 380 et bitume Azalt 35/50) ont été testés et 4 paramètres ont été sélectionnés pour l'étude : la température, le taux de matières en suspension, la salinité et le taux de couverture de l'hydrocarbure en surface.

Des essais cinétiques préalables (23 expériences avec 8 relevés par expérience) ont été réalisés afin de déterminer la durée de mise en contact optimale entre l'eau et l'hydrocarbure pour l'observation des composés HAP suivis (cf. figure 5.3).

Les cinétiques ont été réalisées à température ambiante pour chaque hydrocarbure fourni par TOTAL, avec de l'eau ultrapure comme milieu récepteur. Pour la mise en contact des hydrocarbures avec l'eau, un bécher de 3 l muni d'un barreau aimanté a été préparé. Ensuite 1 500 g d'eau ultrapure puis 150 mg d'hydrocarbure ont été introduits, avant de placer l'ensemble sous agitation lente, sans vortex et à l'obscurité pendant 48 h. Les temps de prélèvements ont été de 0,25 h - 0,50 h - 2 h - 3 h - 4 h - 7 h - 10 h - 24 h - 32 h - 48 h. Deux mesures ont été réalisées pour chaque point des cinétiques. Les 16 HAP (Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques) prioritaires répertoriés par l'US EPA (United States Environmental Protection Agency) ont été analysés, auxquels ont été ajoutés des dérivés soufrés et ramifiés (cf. tableau 5.1).



Figure 5.3: *Essais cinétiques préalables*

A l'issue de la mise en contact entre l'hydrocarbure et l'eau, 100 ml de la partie soluble ont été prélevés à la pipette jaugée à un trait, puis déposés dans un bécher de 150 ml. 10 ml d'étalons d'extraction (naphtalène-d8, biphényle-d10, phénanthrène-d10, chrysène-d12, benzo[a]pyrène-d12) y ont été ajoutés avant l'introduction du barreau Twister® à l'aide d'une pince. Le bécher a ensuite été couvert avec un verre de montre et placé à l'abri de la lumière pendant 2 h sous agitation forte (vortex). Après deux heures d'agitation, le barreau Twister® a été extrait avec une pince, rincé par un jet d'eau ultrapure à la pissette puis séché sur papier absorbant, avant d'être introduit dans son conditionnement d'envoi. Les analyses ont été menées au CEDRE. La technique employée pour l'analyse des hydrocarbures solubles

est la SBSE (Stir Bar Sorptive Extraction) suivie de désorption thermique et d'analyse par GC-MS (chromatographie en phase gazeuse couplée à un spectromètre de masse). La SBSE est une technique développée récemment (Baltussen et al., 1998) ; elle a trouvé d'importantes applications dans le domaine de l'environnement, notamment pour l'extraction des HAP dans l'eau (David et Sandra, 2007). Les chromatogrammes issus de la méthode d'analyse ont été analysés par le LCA. Les données ont été rapportées à la concentration des étalons d'extraction deutérés. Les composés ramifiés ont été quantifiés selon la courbe de calibration du composé parent. La figure 5.4 présente la cinétique des 43 HAP présents dans le fioul lourd.

Les cinétiques obtenues sont utilisées pour la mise en donnée du modèle numérique et plus particulièrement pour la détermination des coefficients de transfert de masse de dissolution et de volatilisation des différents hydrocarbures étudiés.

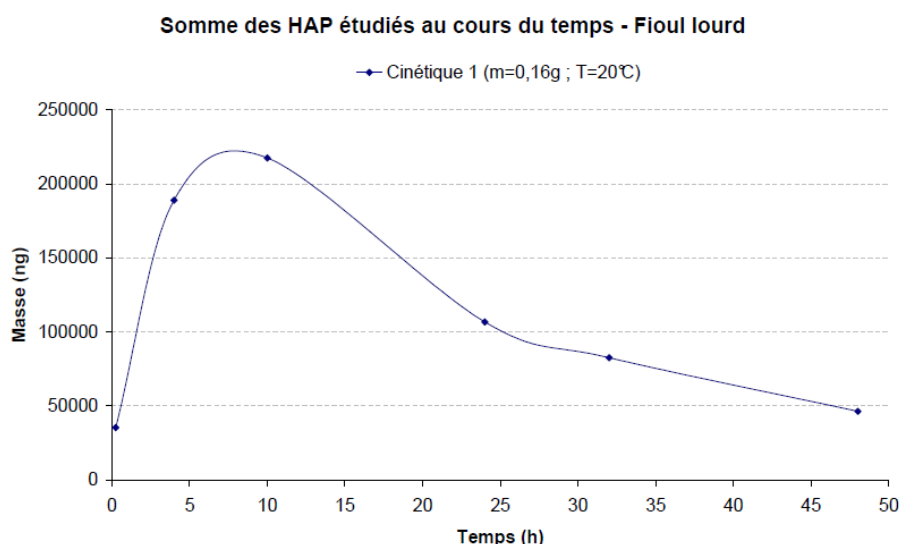


Figure 5.4: *Cinétique de la somme des HAP dans le fioul lourd*

5.3 Mise en donnée du modèle numérique

Au cours du chapitre 4, les modèles mathématiques des divers processus de vieillissement de la nappe d'hydrocarbures ont été présentés. Ces processus nécessitent la connaissance de la composition de la nappe d'hydrocarbures et des coefficients de transfert de masse de volatilisation et de dissolution. Au cours de cette section, la méthodologie adoptée pour réaliser la mise en donnée du modèle mathématique de dérive de nappe d'hydrocarbures est présentée. Il a été pris pour exemple le cas du fioul lourd.

5.3.1 Composition de la nappe d'hydrocarbures

La nappe d'hydrocarbures est considérée comme un mélange de constituants représentant des catégories de produits chimiques :

- les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP) : ce sont des composés solubles et toxiques dont le suivi est essentiel à l'estimation de l'impact environnemental,
- les pseudo-composés caractérisés par la courbe de distillation de l'hydrocarbure déversé : cette méthode de caractérisation des composés permet d'avoir une meilleure représentation du phénomène d'évaporation qui est le phénomène le plus important en termes de perte de masse au cours des premiers jours d'une pollution.

i Classification des HAP

Les propriétés physico-chimiques des HAP dépendent de leurs nombres de cycles aromatiques. En effet, selon [Vessigaud \(2007\)](#), il y a des différences très marquées entre les HAP à 2 cycles benzéniques et ceux à 4 cycles et plus. Ainsi au cours de cette thèse, les 43 HAP étudiés sont regroupés selon leur nombre de cycles benzéniques, plus précisément dans les 4 groupements HAP suivants :

- 1^{er} groupe : les HAP ayant 2 cycles benzéniques (molécules volatiles et solubles),
- 2^{ème} groupe : les HAP ayant 3 cycles benzéniques (molécules semi-volatiles et semi-solubles),
- 3^{ème} groupe : les HAP ayant 4 cycles benzéniques (molécules faiblement volatiles et solubles),
- 4^{ème} groupe : les HAP ayant 5 cycles benzéniques et plus (molécules très faiblement volatiles et solubles).

La détermination des caractéristiques de chaque regroupement de HAP (température d'ébullition (T_{Bi}), solubilité (S_i) et masse molaire (M_{wi})) est effectuée à partir d'une moyenne pondérée de la quantité initiale des différents constituants composant le groupement caractéristique.

ii Définition des pseudo-composés

La courbe de distillation du fioul lourd est donnée figure 5.5. La présence de divers composés avec différentes températures d'ébullition devrait se traduire par des marches en escalier qui ne sont pas observables. En effet, la présence de divers composés lors de la distillation produit l'évaporation d'un mélange de molécules. Le comportement de la composition n'est pas la somme des comportements des composés pris séparément. Afin d'approcher au plus près cette courbe avec un nombre fini de composés, on choisit arbitrairement un nombre de points sur la courbe, dont la température sera considérée comme la température d'ébullition d'un composé fictif qu'on appellera pseudo-composé (cf. figure 5.5).

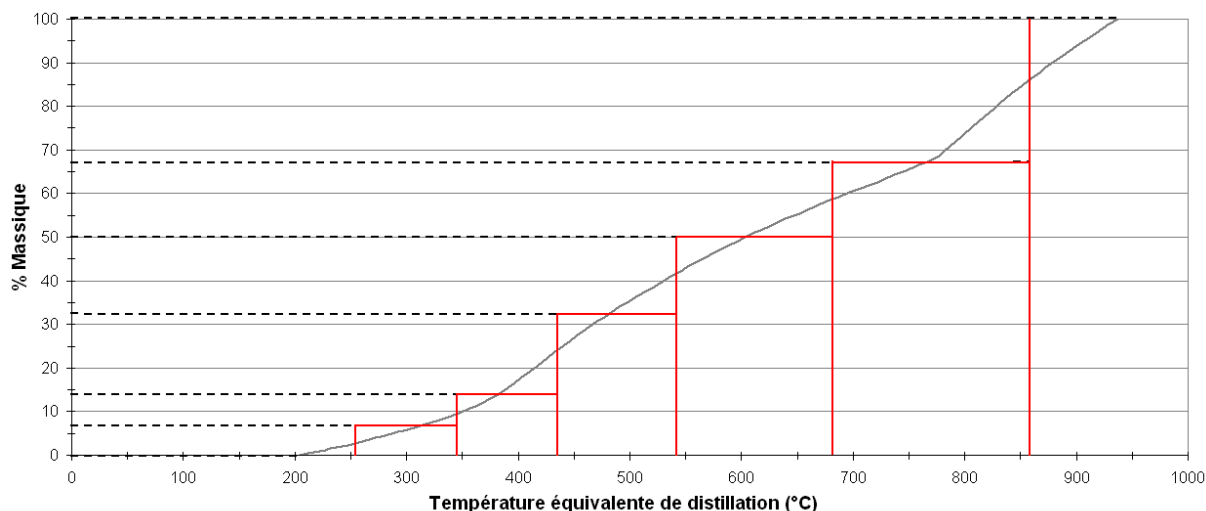


Figure 5.5: Découpage de la courbe de distillation du fioul lourd (courbe *rouge* : caractérisation des pseudo-composés, courbe *grise* : courbe de distillation du fioul lourd)

Ainsi, l'approche utilisée permet d'obtenir la table donnant la température d'ébullition en fonction du pourcentage massique caractérisant les pseudo-composés de la nappe d'hydrocarbures.

Température d'ébullition (°C)	% massique
255,65	6,36
342	6,89
432,05	20,09
547,98	17,09
686,85	16,92
852,01	32,65

Tableau 5.2: Caractérisation des pseudo-composés

Ces données ne tiennent pas compte des HAP qui doivent être intégrés dans le tableau 5.2. Connaissant la température d'ébullition et la fraction massique de chaque groupe de HAP, ils sont introduits en étant retranchés à la fraction du pseudo-composé ayant la température d'ébullition la plus proche. Pour plus d'exactitude, il peut être judicieux de choisir dans la liste des températures d'ébullition des pseudo-composés celles des groupements de HAP.

Les caractéristiques de chaque pseudo-composé et notamment leur masse molaire (M_{wi}) sont déterminées à partir de leur température d'ébullition (Jones, 1997).

L'approche pseudo-composante pour le calcul de l'évaporation est régulièrement utilisée dans les modèles de dérive de nappes d'hydrocarbures (ADIOS, Jones (1997) ; DREAM, Reed (2001)). Une autre approche consiste à linéariser la courbe de distillation de l'hydrocarbure.

Cette méthode employée dans les modèles d'évaporation analytique traite alors l'hydrocarbure comme un seul constituant (cf. section 2.4.2.ii) et rend moins précise la représentation du processus d'évaporation. En effet, la méthode analytique a tendance à surestimer au bout d'une dizaine d'heures l'évaporation de l'hydrocarbure (Doré, 2001).

5.3.2 Détermination des coefficients de transfert de masse de la dissolution et de la volatilisation

Dans le chapitre précédent (cf. section 4.4.3 et section 4.5.2), la nécessité de la prise en compte des différents types d'hydrocarbures lors de la modélisation des processus de volatilisation et de dissolution en calibrant les coefficients de transfert de masse relatif à ces phénomènes physiques a été évoquée.

La méthode retenue au cours de ce travail pour paramétrer ces coefficients se fait par l'exploitation des cinétiques effectuées sur chaque produit (cf. section 5.2.3). Les courbes "en cloche" des cinétiques (cf. figure 5.4) mettent en évidence deux processus dans la phase aqueuse : la volatilisation (transfert des matières dissoutes dans l'atmosphère) et la dissolution (transfert entre la nappe d'hydrocarbures et l'eau en dessous de celle-ci). Ces deux phénomènes sont respectivement décrits par les deux équations différentielles ordinaires du premier ordre, Eq. (5.1) et Eq. (5.2).

En supposant que, lors du dépôt, l'étalement est instantané et que l'agitateur magnétique homogénéise la solution, un traitement unidimensionnel des phénomènes en présence est adopté :

$$\frac{dC_i}{dt} = - \frac{K_{vol}A}{V} C_i \quad (5.1)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{K_{diss}A_o}{V} (S_i X_i - C_i) \quad (5.2)$$

En combinant les solutions des équations (5.1) et (5.2), l'évolution de la concentration des HAP dissous dans le bécher est déterminée.

$$\Rightarrow C_i(t) = S_i X_i (1 - \exp(-\gamma_d t)) \exp(-\gamma_v t) \quad (5.3)$$

avec C_i la concentration de pétrole dans l'eau, V le volume d'eau sous la particule d'hydrocarbure, A_o l'aire de la nappe d'hydrocarbures, A l'aire non recouverte par la nappe, K_{diss} le coefficient de transfert de la dissolution, K_{vol} le coefficient de transfert de volatilisation, S_i la solubilité de la substance i dans l'eau, X_i la fraction molaire de la substance i dans la nappe, $\gamma_d = \frac{K_{diss}A_o}{V}$ et $\gamma_v = \frac{K_{vol}A}{V}$.

La solution une fois déterminée (Eq. (5.3)) est calculée à l'aide du logiciel MATLAB afin d'obtenir les coefficients de transfert des 43 HAP qui interpolent au mieux les cinétiques. La figure 5.6 montre le résultat pour le naphtalène (N) et ses dérivés (N_1, N_2, N_3).

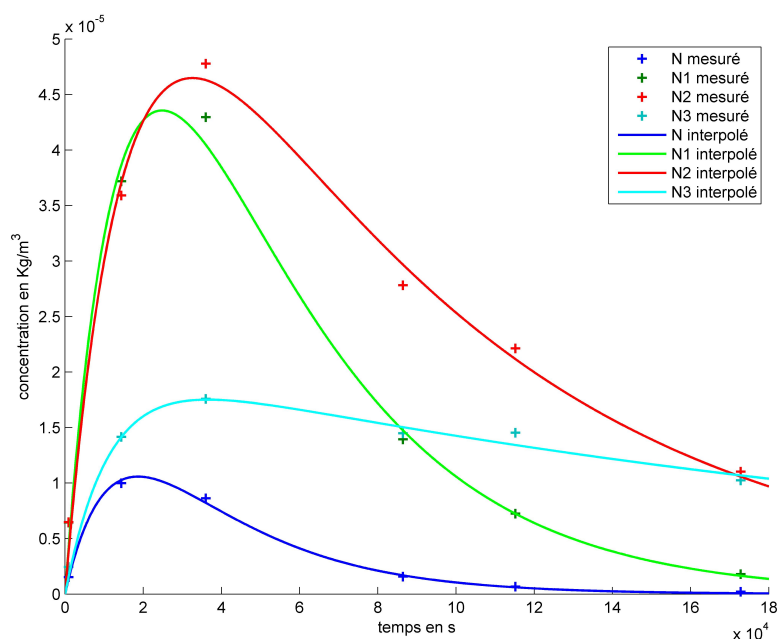


Figure 5.6: *Interpolation des composés Naphtalènes*

Une telle identification de paramètres est nécessaire car les variables X_i dans les équations les lient entre elles et rendent impossible une résolution analytique sans hypothèse simplificatrice telle que considérer X_i constant. Les coefficients de transfert de dissolution et de volatilisation des composés HAP au sein du fioul lourd ainsi obtenus sont reportés dans le tableau 5.3. La détermination des coefficients de transfert de chaque regroupement de HAP est effectuée à partir d'une moyenne pondérée de la quantité initiale des différents constituants composant le groupement caractéristique.

coefficient de transfert	Naphtalène	C1–Naphtalène	C2–Naphtalène	C3–Naphtalène
$K_{diss} \cdot 10^{-6}$	3,75	3,13	4,76	8,05
$K_{vol} \cdot 10^{-5}$	3,07	2,21	1,05	0,34

Tableau 5.3: *Coefficient de transfert de masse du Naphtalène et de ses dérivés*

Cette méthodologie déjà complexe présente encore cependant une limitation. En effet, le phénomène d'évaporation n'est pas pris en compte dans la fraction molaire X_i au sein de l'équation (5.2). Pour une meilleure détermination de ces coefficients de transfert, deux axes d'améliorations peuvent être envisagés :

- des expériences simplifiées permettant une analyse indépendante de chaque phénomène,
- une programmation plus détaillée pour déterminer ces coefficients en tenant compte de chaque phénomène en présence.

5.4 Expérimentations en canal d'essais

Nous présentons ici les expérimentations en canal d'essais qui doivent permettre de vérifier et de valider la qualité des simulations numériques dans des situations où les conditions ne sont que partiellement contrôlées (cf. chapitre 6).

5.4.1 Les essais à l'échelle "polludrome"

i Introduction

L'étude a pour objectif de déterminer la fraction soluble de plusieurs types d'hydrocarbures pour un type d'eau (eau du réseau pour éviter les biais générés par des teneurs en particules en suspension non maîtrisables) en se plaçant à l'échelle pilote (volume d'eau d'environ 8 m^3), et en simulant partiellement les conditions dynamiques d'une rivière (création d'un courant).

ii Protocole expérimental

La mise en eau du Polludrome est effectuée quelques jours avant l'essai afin que la température de l'eau atteigne la température ambiante. L'eau utilisée est celle du réseau. Les conditions expérimentales appliquées pour cette série d'essais sont les suivantes :

- Produits testés et quantités déversées

Les produits raffinés légers (essence SP98 et SP95-E10, gasoil, kérosène et fioul domestique) et raffinés lourds (fioul lourd IFO 380) ont été testés. Le bitume, ne flottant pas à la surface de l'eau dans des conditions dynamiques, n'est pas considéré dans cette série d'expérimentations. La quantité déversée dans le canal d'essais a été fixée à environ 10 grammes d'hydrocarbures pour chaque produit.

- Température ambiante

Les essais sont réalisés à 20°C .

- Volume d'eau

Le volume d'eau présent lors des essais est de $7,56 \text{ m}^3$ (hauteur d'eau de 90 cm pour une surface de $8,4 \text{ m}^2$).

- Vitesse du courant

La vitesse du courant employée est en moyenne de $0,3 \text{ m/s}$

- Heures de prélèvements

La fréquence et la durée d'échantillonnage sont sensiblement adaptées au cas des produits testés. Ainsi, pour les produits les plus volatils tels que l'essence, la durée totale d'un essai n'excède pas 24 heures mais le pas d'échantillonnage est plus resserré. Les prélèvements typiquement réalisés sont les suivants :

- IFO380, gasoil, fioul domestique et kérosène : 0 (blanc) ; 1 ; 2 ; 3 ; 5 ; 8 ; 13 ; 24 ; 27 ; 30 ; 33 ; 48 ; 51 ; 54 ; 57 et 72 heures
- Essences (SP 95-E10 et SP 98) : 0 (blanc) ; 1 ; 2 ; 3 ; 4 ; 5 ; 6 ; 7 ; 8 ; 13 et 24 heures

Il est à noter l'importance des blancs quand il s'agit d'un dispositif expérimental régulièrement utilisé pour l'étude de pétroles bruts, produits pétroliers généralement peu volatils en

Chapitre 5. Caractérisation des hydrocarbures et expérimentations en canal d'essais

comparaison des raffinés légers.

- Nombre échantillons par prélèvement

A chaque temps de prélèvement, 3 échantillons de 100 ml sont prélevés pour les analyses par SBSE. Tous les prélèvements sont réalisés 30 cm sous la surface au point A. Les points de prélèvements sont localisés sur le canal sur la figure 5.7.

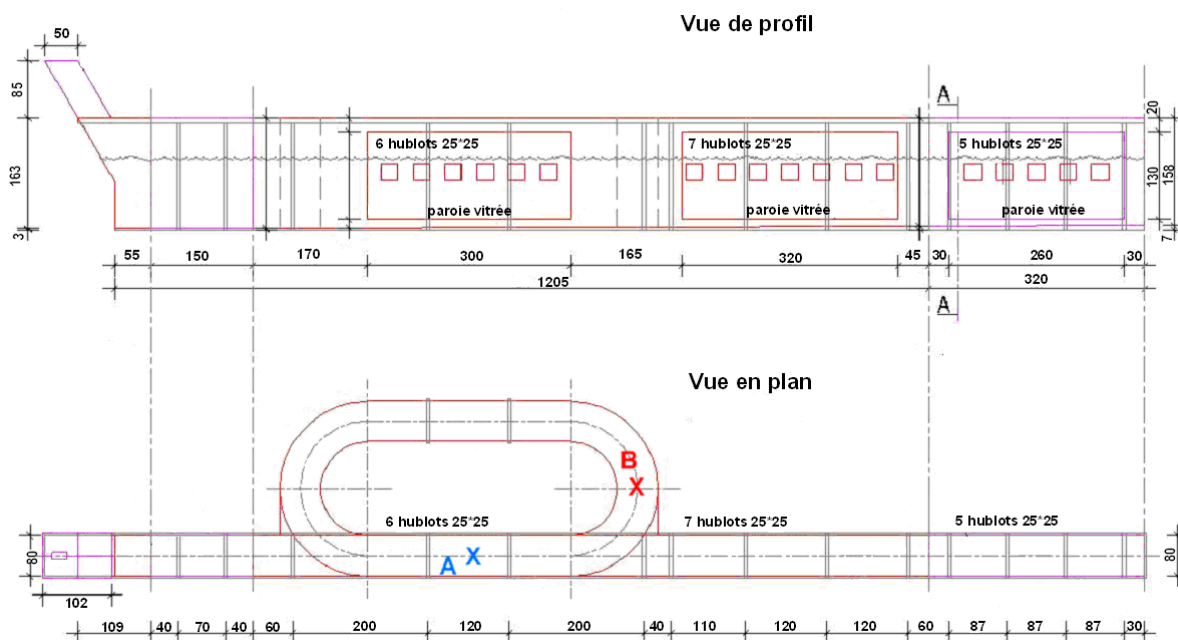


Figure 5.7: Schéma du polludrome

La méthode d'analyse des prélèvements utilisée est identique à celle présentée et utilisée pour les essais statiques en laboratoire (cf. section 5.2.3). Dans le cadre de cette étude, consacrée à la simulation des conditions en rivière, le polludrome (cf. figure 5.7) a été utilisé dans sa configuration anneau, ce qui permet de faire circuler l'eau en continu.

iii Résultats

La dérive de la nappe d'hydrocarbures à la surface du polludrome est présentée sur la figure 5.8.

Pour chaque série d'essais, les teneurs cumulées en HAP n'étaient pas négligeables du fait de l'utilisation du canal pour des essais sur des quantités importantes d'hydrocarbures. Des composés se sont adsorbés sur certaines zones, d'où un bruit de fond mesuré de l'ordre du $\mu\text{g/l}$ avant tout déversement. Les valeurs mesurées lors des différents essais ont été corrigées de la valeur minimale obtenue lors de chaque test. Elles sont présentées dans le tableau 5.4.



Figure 5.8: Observation de la nappe d'hydrocarbures à la surface du polludrome

Temps (heures)	FOD	Gasoil	SP95	Kerosène	IFO 380
0	0,3	0,4	0,3	0,0	0,2
1	6,1	1,4	0,7	0,1	0,0
2	3,5	2,1	0,4	0,1	0,2
3	2,4	1,9	0,3	0,1	0,5
4			0,4		
5		0,1	0,5		0,2
6	2,8		0,5	0,1	
7			0,4		
8		0,1	0,2		0,3
9	1,3			0,2	
13			0,0		0,4
14	1,6			0,2	
24	0,5	0,1	0,0	0,1	1,5
27	0,4	0,2		0,0	2,6
30	0,2				2,1
33	0,2				3,0
48	0,5				4,2
51	0,3				4,8
54	0,4				4,5
57	0,0				4,7
72	0,3				3,9

Tableau 5.4: Teneur en HAP (somme des 43 composés) en $\mu\text{g/l}$

Ainsi, il apparaît que les maximums de dissolution sont en accord avec les teneurs globales mesurées sur ces différents produits raffinés telles qu'illustrées figure 5.1. Concernant les cinétiques, le fioul lourd se singularise par des évolutions relativement lentes, ce qui s'explique par la présence majoritaire de composés lourds. Ceci est confirmé par la courbe de distillation. Par ailleurs, ces molécules à haut poids moléculaire expliquent cette croissance continue du fait de la faible volatilisation des fractions solubilisées. Les gasoils et fiouls domestiques ont des coupes pétrolières proches, en accord avec des distributions en HAP et des courbes de distillation voisines. Les différences entre les valeurs maximales sont également en accord avec les teneurs globales des deux produits. Enfin, pour les produits les plus légers, les tendances n'apparaissent pas clairement car les valeurs obtenues lors des expérimentations sont proches du bruit de fond.

5.4.2 Les essais en rivière artificielle

i Introduction

Les expérimentations en rivière artificielle, menées par Veolia Environnement Recherche et Innovation (VERI) et auxquelles j'ai pu participer, ont pour objectif une caractérisation expérimentale du comportement des hydrocarbures sélectionnés selon les conditions hydrauliques et morphologiques des eaux continentales. La rivière artificielle constitue une échelle intermédiaire entre l'échelle du laboratoire, avec des conditions bien contrôlées, et l'échelle réelle avec des conditions non contrôlées sur le terrain. En termes d'échelle de temps, ce canal d'essais est utilisé pour des tests à échelle de temps très courte, de l'ordre de la dizaine de minutes.

Ces expérimentations à une "mésos-échelle" (ou échelle intermédiaire) sont utilisées pour la validation de l'outil numérique sur un cas aux conditions en partie contrôlées. En effet, par rapport aux autres dispositifs expérimentaux, la rivière artificielle est la plus proche du milieu naturel.

ii Dispositif expérimental

L'UBA (UmweltBundesAmt : Agence Fédérale Allemande pour l'Environnement) dispose sur son site de Berlin de 16 systèmes identiques de rivières artificielles de 100 m de longueur chacun. Parmi ces rivières appelées FSA (Fließ und Stillgewässer simulationsAnlage : simulateur de cours d'eau et de lacs), huit sont situées en extérieur. Un courant est généré dans ces rivières à l'aide d'une pompe à vis. Un système de mesure en continu des paramètres physiques équipe chaque rivière, ainsi qu'une station météorologique (cf. figure 5.9).

Les expérimentations réalisées en extérieur vont consister à suivre le comportement d'hydrocarbures dans l'écoulement du canal artificiel et notamment la dérive de nappes en surface et la dissolution dans la colonne d'eau.

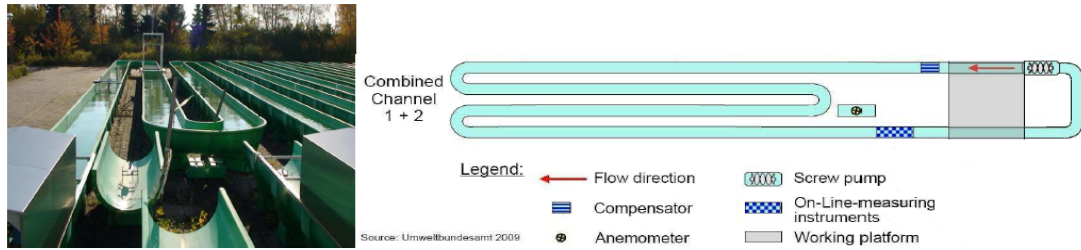


Figure 5.9: *Dispositif de la rivière artificielle*

iii Protocole expérimental

Après avoir fixé le débit dans la rivière artificielle à une valeur connue, une quantité donnée d'un hydrocarbure est injectée, et le transport de la pollution dans la rivière artificielle est suivi. Les hydrocarbures déversés dans ce canal d'essais d'une hauteur d'eau de 50 cm sont le fioul lourd, le gasoil, le kérosène, l'essence SP-95 et le fioul domestique. Au cours des essais, deux vitesses d'écoulement représentatives de la réalité (0,1 et 0,2 m/s) ont été choisies.

Avant de réaliser les essais avec les hydrocarbures, l'écoulement dans la rivière artificielle est caractérisé par des mesures hydrauliques. Les vitesses moyennes d'écoulement dépendent de la fréquence de rotation de la pompe. Les conditions hydrauliques sont également modifiées en perturbant l'écoulement par la présence d'obstacles (cf. figure 5.11.b) le long de l'écoulement. Quatre conditions d'écoulement doivent donc être sondées complètement (2 vitesses, avec ou sans obstacle). Les vitesses d'écoulement sont caractérisées selon trois méthodes différentes :

- mesures unidimensionnelles de profils de vitesse avec un micromoulinet,
- mesures ponctuelles avec une sonde de type “vectrino”,
- mesures de vitesses de surface 2D : Large Scale Particle Image Velocimetry (LSPIV). LSPIV est une méthode totalement non-intrusive pour mesurer les vitesses de surface d'un écoulement. Cette technique est basée sur la capture vidéo d'un écoulement auquel on a ajouté des particules flottantes visibles par la caméra. Un traitement logiciel permet d'obtenir le champ instantané des vitesses de surface (Muste et al., 2008).

Le mode d'injection a été choisi de manière à ne pas influencer la forme de la nappe d'hydrocarbure lors du dépôt à la surface de la rivière artificielle. A l'aide d'une éprouvette en verre de 20 ml, le polluant est versé dans un cylindre en inox qui est à moitié immergé et rattaché au rebord de la rivière artificielle. Lorsque la totalité du polluant est déversée (10 ou 20 ml), le cylindre est alors remonté pour laisser la nappe d'hydrocarbures dériver.

Les concentrations dissoutes en HAP résultant de ce déversement sont suivies à l'aide d'une sonde utilisant le principe de fluorescence (cf. figure 5.10.a).

Lorsque la sonde détecte un pic de concentration dans la colonne d'eau, un prélèvement d'eau est réalisé à l'aide du dispositif présenté sur la figure 5.10.b.

En suivant le même protocole que pour les cinétiques (cf. section 5.2.3), ces prélèvements sont ensuite analysés par le CEDRE pour déterminer la concentration des HAP dissous

présents dans la colonne d'eau.

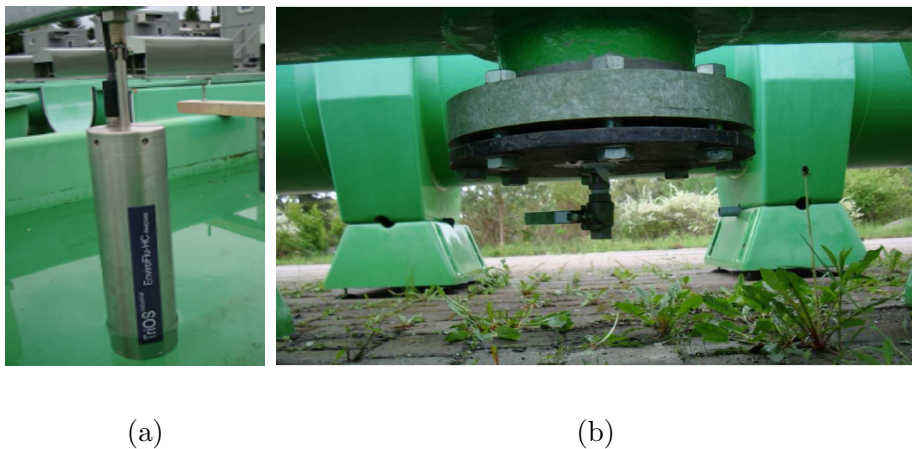


Figure 5.10: (a) Sonde HAP fluorométrique et (b) Système de prélèvement mis en place dans la rivière artificielle

iv Résultats

La dérive de la nappe d'hydrocarbures à la surface de la rivière artificielle est présentée sur la figure 5.11.

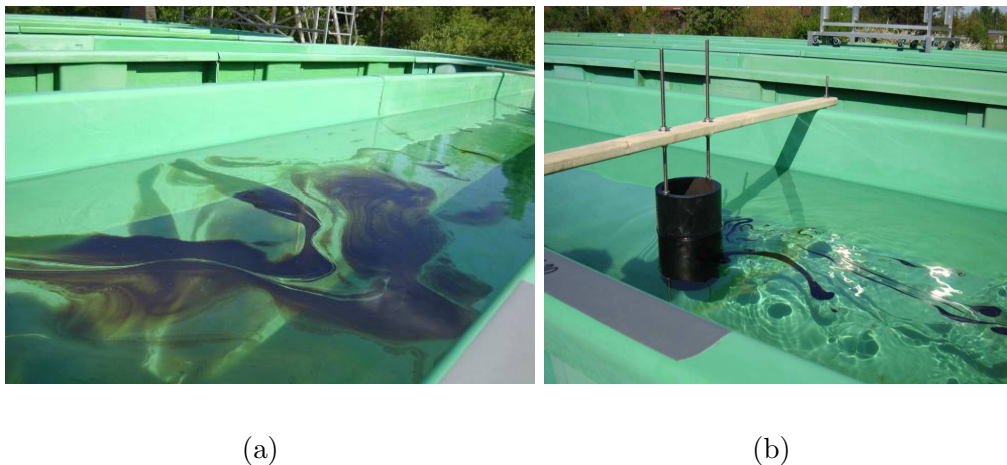


Figure 5.11: Observation de la nappe d'hydrocarbures à la surface de la rivière artificielle, sans obstacle (a) et avec obstacles (b)

Pour chaque prélèvement effectué, on dispose donc d'une concentration des HAP totaux dissous dans la colonne d'eau et du signal de la sonde fluorométrique en (%) (cf. figure 5.12.a). Avec les nombreux tests effectués le même jour pour le même hydrocarbure, il est possible de tracer une courbe de calibration (cf. figure 5.12.b). Cette courbe permet la conversion du signal de la sonde donné en % en concentration de HAP dissous totaux dans la colonne d'eau (en ng/l). Puis, l'évolution de la courbe de concentration est obtenue par soustraction de la

concentration de HAP présents dans la colonne d'eau avant l'expérimentation (prélèvement "blanc") (cf. figure 5.12.c).

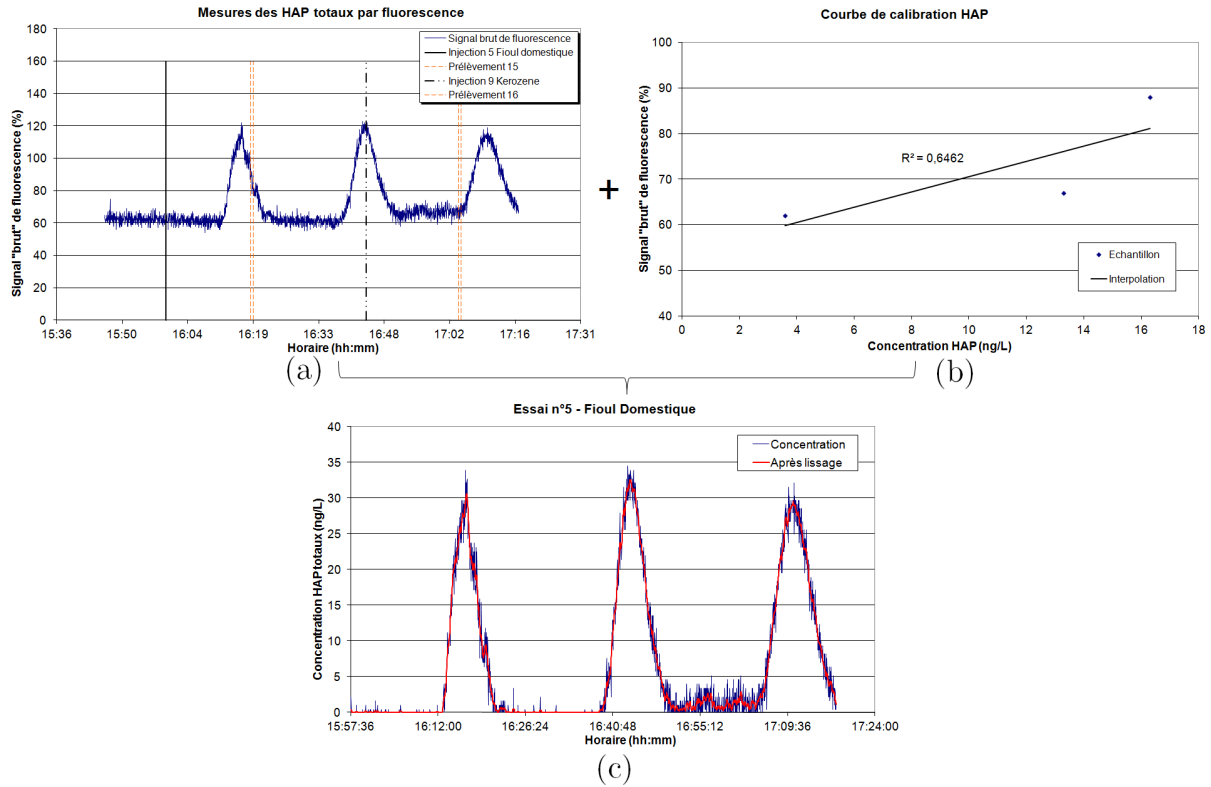


Figure 5.12: *Processus d'obtention des résultats*

5.5 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons présenté les expérimentations réalisées au sein du projet MIGR'HYCAR. Une première série d'expériences caractérisant les produits étudiés ont permis la mise en donnée du modèle présenté dans le chapitre 4. Une fois celle-ci effectuée, le modèle va pouvoir être testé en reproduisant les expérimentations que nous venons de décrire.

Ces simulations font partie de la vérification du code de calcul abordé dans le chapitre suivant.

Chapitre 6

Vérification et validation du modèle numérique 2D

Sommaire

6.1	Introduction	120
6.2	Vérification du transport de nappe d'hydrocarbures	120
6.3	Vérification des processus de vieillissement de la nappe d'hydrocarbures	127
6.4	Simulation des essais effectués en canal	131
6.5	Conclusion	141

La plupart des résultats présentés dans ce chapitre ont été soumis au *Journal of Hydraulic Research* dans l'article intitulé "*A Lagrangian/Eulerian oil spill model for continental waters*". Cet article a été écrit en collaboration avec EDF R&D (Jean-Michel Hervouet) et Veolia Environnement Recherche et Innovation (VERI) (Isabelle Baudin-Bizien et François Thouvenel).

6.1 Introduction

Le modèle mathématique de dérive de nappe d'hydrocarbures dans les eaux continentales et sa calibration ont été présentés, il est nécessaire maintenant de le vérifier et de le valider sur différents cas tests. Ceux-ci vont permettre d'établir son domaine de validité.

Dans un premier temps, le modèle Lagrangien de transport de la nappe est testé, en simulant l'accident de l'Erika survenu en décembre 1999, et le modèle de diffusion stochastique est vérifié à l'aide d'un cas théorique comportant une solution analytique. Ensuite, les algorithmes des processus de vieillissement, d'étalement, d'évaporation et de dissolution sont vérifiés de manière indépendante. La dernière partie de ce chapitre est dédiée à la vérification des algorithmes de dissolution et de volatilisation en reproduisant les expériences en canal d'essais réalisées au sein du projet MIGR'HYCAR (cf. chapitre 5).

6.2 Vérification du transport de nappe d'hydrocarbures

6.2.1 Cas théorique avec solution analytique

Ce cas test théorique est effectué afin de valider le terme de diffusion stochastique. Pour ce cas, un bassin carré de 20 m de côté (L) est considéré. Un maillage uniforme triangulaire composé d'environ 9000 nœuds avec une taille de maille de 0,3 m dans les directions x_1 et x_2 est utilisé. Il n'y a aucun écoulement dans le domaine et le coefficient de dispersion (D) est de $0,05 \text{ m}^2/\text{s}$. Un certain nombre de particules (N_p) est déchargé au milieu du domaine ($x_1 = 10, 0; x_2 = 10, 0$). Lors de la simulation, le pas de temps est pris égal à 0,1 s. L'évolution des particules est seulement due au terme stochastique de l'équation (4.36) et la concentration en particules dans le domaine évolue suivant la loi de Fick (Eq (6.1)).

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla C) \\ C(X_0, t = 0) = N_p \delta(X_0) \end{cases} \quad (6.1)$$

En considérant le cas unidimensionnel suivant x_1 où le coefficient de diffusion (D) est constant, la concentration en particules peut être évaluée analytiquement selon :

$$C(x_1, t) = \frac{N_p}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x_1^2}{4Dt}\right) \quad (6.2)$$

Dans le but d'analyser les résultats analytiques et numériques, il est nécessaire de récrire toutes les variables ainsi que la solution analytique sous forme adimensionnelle, posons les nouvelles variables suivantes :

$$C^*(x_1^*, t^*) = \frac{C(x_1, t)L}{N_p}, \quad x_1^* = \frac{x_1}{L}, \quad t^* = \frac{t}{T}, \quad Re = \frac{L^2}{Dt} \quad (6.3)$$

où T est le temps total de la simulation et Re est le nombre de Reynolds adimensionnel. Avec les variables écrites sous forme adimensionnelle, l'équation (6.2) devient :

$$C^*(x_1^*, t^*) = \sqrt{\frac{Re}{4\pi t^*}} \cdot \exp\left(-\frac{Re x_1^{*2}}{4t^*}\right) \quad (6.4)$$

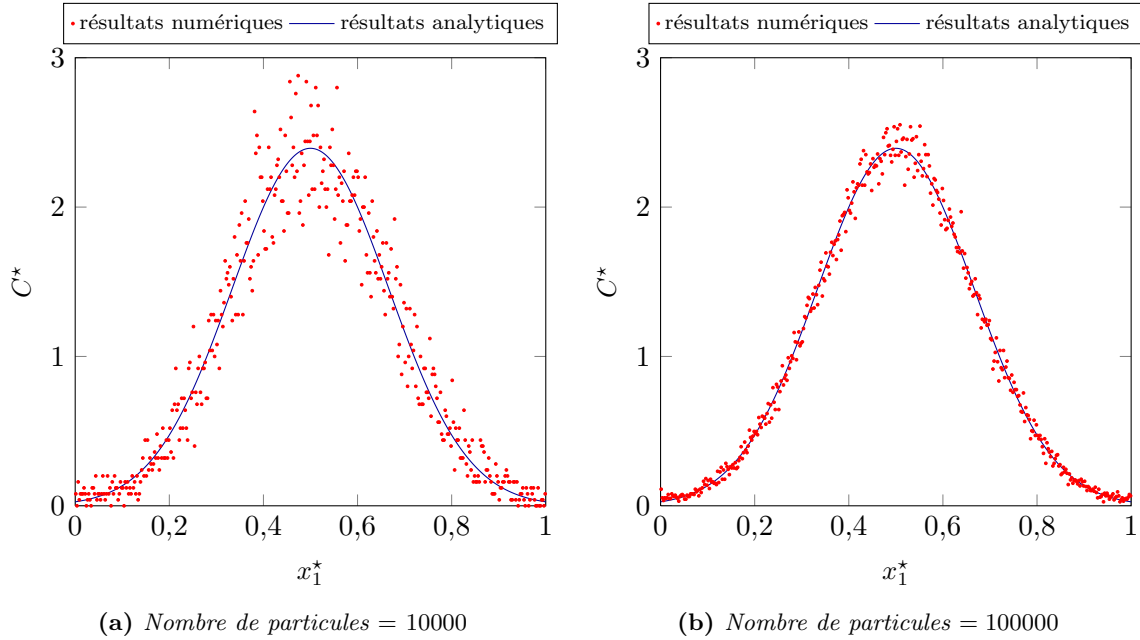


Figure 6.1: Comparaison des concentrations normalisées suivant la direction x_1

La figure 6.1 représente l'effet du nombre de particules sur la précision des résultats (h-convergence). Avec l'augmentation du nombre de particules, les prédictions numériques deviennent plus précises. Le pourcentage d'erreur relative de l'écart maximal entre les solutions analytique et numérique décroît de 17% ($N_p = 10000$) à 7% ($N_p = 100000$). Ce résultat est en accord avec Joly (2009). Selon cet auteur, le pas de temps n'influence pas la précision des résultats. Par conséquent, les résultats obtenus à partir du modèle numérique sont en accord avec la solution analytique, et l'outil développé est consistant.

6.2.2 Convection : cas de l'accident de l'Erika

Afin de valider le modèle de transport développé, l'accident de l'Erika est reproduit numériquement. Bien que cette pollution soit intervenue en pleine mer et non pas en eaux continentales, les données concernant la dérive de la nappe d'hydrocarbures liée à cet accident sont très nombreuses et bien documentées. Les différents processus intervenant au cours du

transport de la pollution ne modifient pas significativement les trajectoires des nappes d'hydrocarbures. C'est pourquoi, le modèle développé doit être capable de prédire le transport d'une nappe d'hydrocarbures, que celle-ci soit en mer ou en eaux intérieures.

i Descriptif de l'accident

Cette partie est directement issue du rapport du CEDRE (Tiercelin et al., 2000).

Le 11 décembre 1999, le pétrolier maltais Erika, chargé de 31 000 tonnes de fuel lourd n°2, en route de Dunkerque (France) à Livourne (Italie), est pris dans des conditions météorologiques très défavorables (vent d'Ouest force 8 à 9, creux de 6 m). Après avoir lancé un message d'alerte, puis procédé à des transferts de cuve à cuve, le capitaine informe les autorités qu'il maîtrise la situation et fait route vers Donges à vitesse réduite. Le 12 décembre, à 6h05 du matin, il lance un SOS : son navire est en train de se casser en deux. L'équipage est évacué sain et sauf par des hélicoptères de la Marine nationale aidés par des renforts de la Royal Navy. Le navire se casse en deux à 8h15 (heure locale) dans les eaux internationales, à une trentaine de milles au sud de la pointe de Penmarc'h (Pointe sud du Finistère). La quantité déversée au moment du naufrage est alors estimée entre 7 000 et 10 000 tonnes. Les caractéristiques du produit déversé sont regroupées dans le tableau 6.1.

Bulletin d'analyse du fioul n°2 de l'Erika	
densité	1025
point d'écoulement	3°C
	38 cSt (100°C)
viscosité	555 cSt (50°C)
	20 000 cSt (10°C)
soufre	2,28%
vanadium	82,7 ppm
nickel	45 ppm
asphaltène	3,78%

Tableau 6.1: *Caractéristiques du fioul de l'Erika (source : TotalFina)*

La partie avant du navire sombre dans la nuit du 12 au 13 décembre à peu de distance du lieu de la cassure. La partie arrière, prise en remorque le 12 décembre à 14h15 par le remorqueur de haute mer "Abeille Flandre", pour empêcher sa dérive vers Belle-Ile, coule le lendemain à 14h50 (cf. figure 6.2). Les deux morceaux de l'épave, éloignés de 10 km l'un de l'autre, gisent à environ 120 mètres de profondeur.



Figure 6.2: *Nauffrage de l'Erika (source : Marine nationale)*

ii Observation de la pollution

Dès le 12 décembre, le Préfet maritime de l'Atlantique lance un programme quotidien de vols de surveillance par les avions spécialisés des Douanes (avions Polmar I et II) et des avions de la Marine nationale.

Le travail d'observation se déroule dans des conditions météorologiques difficiles pour les hommes et le matériel. Certaines nappes sont perdues, retrouvées, puis reperdues, au fil de leur dérive et de leur désagrégation.

Dès le 15 décembre, un vol est spécifiquement consacré à la recherche de plaques de fioul en avant du front des nappes. Ce vol et les observations ultérieures ne montrent rien. Les premiers arrivages du 23 décembre, non attendus, sur la côte du sud Finistère, soulèvent la question de leur origine. Le 24 décembre, les analyses montrent qu'ils proviennent bien de l'Erika. Une partie de la pollution a donc échappé aux observations, déclenchant une vague de critiques contre les prévisions de dérive. Elle peut provenir soit du navire avant sa cassure, soit des épaves. L'essentiel de la pollution est bien arrivé, du 24 au 27 décembre, dans la zone indiquée par la prévision de dérive. Mais des nappes moins importantes, qui ont touché le littoral du Morbihan à l'ouest de Belle-Ile, ont aussi échappé aux observations aériennes et n'ont pu être prises en compte dans les prévisions de dérive (Daniel et al., 2001). C'est seulement le 30 décembre, quand la houle soulevée par la tempête s'est enfin calmée, qu'il est possible au Préfet maritime de mettre simultanément en œuvre 4 avions pour un inventaire complet au large des côtes touchées (cf. figure 6.3). Cet inventaire met en évidence des centaines de plaques (1 à 5 m) et de galettes (moins de 1 m) et une multitude de lignes de boulettes. Ce qui n'était pas arrivé à terre était bien là, ni coulé, ni disparu, mais désagrégé en une multitude de petites unités invisibles par mer forte.

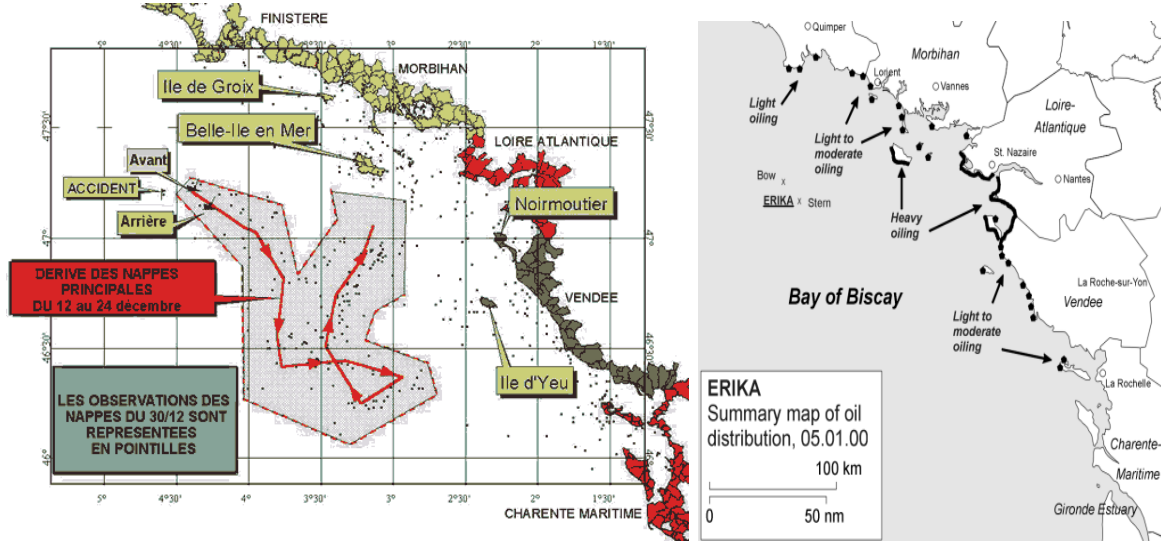


Figure 6.3: Dérive des nappes en mer et situation au 31 décembre

iii Modélisation de l'accident

Le modèle hydrodynamique TELEMAC-2D présenté dans le chapitre 3 et le modèle de transport présenté dans la section 4.3 sont utilisés pour simuler l'accident de l'Erika. Pour ce faire, un maillage composé approximativement de 90000 nœuds et de 150000 éléments triangulaires est utilisé. Sur les frontières maritimes, la hauteur d'eau et/ou les vitesses sont imposées pour reproduire les effets de la marée. Pour les côtes, une condition de frontière solide est utilisée. Dans le cadre de la simulation, des données de vent du mois de décembre, réanalysées *a posteriori*, sont utilisées. Ces données libres proviennent du modèle CFSR (Climate Forecast System Reanalysis (<ftp://nomads.ncdc.noaa.gov/CFSR>)).

Estimation de la trajectoire par intervalle de confiance

Dans le cas d'une nappe d'hydrocarbures fractionnée sous forme de n particules lagrangiennes ayant une diffusion stochastique, le principe de la méthode de Monte-Carlo permet d'estimer numériquement l'intervalle de confiance de la trajectoire de la nappe.

Au cours d'une simulation, une réalisation d'une suite $(\vec{X}_j)_{j \geq 1}$ de variables aléatoires indépendantes représentant la position des particules d'hydrocarbures est calculée. La trajectoire réelle de la nappe μ est alors approchée par la moyenne empirique $\bar{X}_n = (1/n) \sum_{j \geq 1} X_j$.

Cherchons l'intervalle centré sur $\bar{X}_n$ et de rayon r qui contient μ avec une confiance de 95%, ceci s'écrit :

$$\Pr(\bar{X}_n - r \leq \mu \leq \bar{X}_n + r) = 0,95 \quad (6.5)$$

où $\Pr(\bar{X}_n - r \leq \mu \leq \bar{X}_n + r)$ est la probabilité que la moyenne μ de la population tombe dans un intervalle du type $[\bar{X}_n - r; \bar{X}_n + r]$

6.2. Vérification du transport de nappe d'hydrocarbures

Sachant que $\Pr(\bar{X}_n - r \leq \mu \leq \bar{X}_n + r) = \Pr(\mu - r \leq \bar{X}_n \leq \mu + r)$, il est possible de récrire l'équation (6.5) sous la forme :

$$\Pr\left(\frac{-r\sqrt{n}}{\sigma} \leq \left(\frac{\bar{X}_n - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}}\right) \leq \frac{r\sqrt{n}}{\sigma}\right) = 0,95 \quad (6.6)$$

Les variables aléatoires $(\bar{X}_j)_{j \geq 1}$ sont distribuées par construction (cf. section 4.3.2) suivant la loi normale, le théorème de la limite centrale (Jourdain, 2009) peut donc être utilisé et permet d'écrire :

$$\frac{\sqrt{n}}{\sigma} (\bar{X}_n - \mu) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} N(0, 1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (6.7)$$

Par conséquent, avec l'équation (6.7) et en posant $a = (r\sqrt{n})/(\sigma)$, l'équation (6.6) devient :

$$\Pr\left(\frac{-r\sqrt{n}}{\sigma} \leq \left(\frac{\bar{X}_n - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}}\right) \leq \frac{r\sqrt{n}}{\sigma}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \int_{-a}^a \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx \quad (6.8)$$

Dans l'équation (6.8), la valeur de l'intégrale vaut 0,95 et satisfait ainsi l'équation (6.6) si $a = 1,96$. Par conséquent, la probabilité pour que la valeur μ que l'on cherche à calculer se trouve dans l'intervalle $[\bar{X}_n - \frac{1,96\sigma}{\sqrt{n}}; \bar{X}_n + \frac{1,96\sigma}{\sqrt{n}}]$ est de l'ordre de 0,95.

Comparaison entre les observations et les prédictions

Une fois évalué l'intervalle de confiance à 95% de la trajectoire de la nappe, il est important de déterminer un intervalle de confiance en fonction du nombre de particules puisque cela permet de se faire une idée de la précision de la trajectoire obtenue tout en nécessitant très peu de calculs supplémentaires (cf. figure 6.4).

Plus le nombre de particules est élevé, plus la précision de l'estimation est augmentée. En effet, à partir de 20 particules, la largeur de l'intervalle de confiance à 95% contenant la trajectoire moyenne est faible. Cela signifie qu'on peut accorder du crédit à la valeur $\bar{X}_n$ calculée. Par la suite, nous allons considérer des simulations avec 1000 particules.

Excepté durant les premiers instants qui suivent le déversement, où les simulations numériques donnent une trajectoire plus à l'est que la réalité avec un écart maximal de 16 km, les prévisions numériques sont conformes aux observations aériennes (cf. figure 6.5). De plus, l'écart temporel maximal entre les observations et la trajectoire simulée est de un jour (cf. figure 6.6). Cet écart est certainement dû aux incertitudes sur le temps exact du déversement d'hydrocarbure lors de l'accident mais aussi à l'effet des vagues qui est non pris en compte au cours de la simulation.

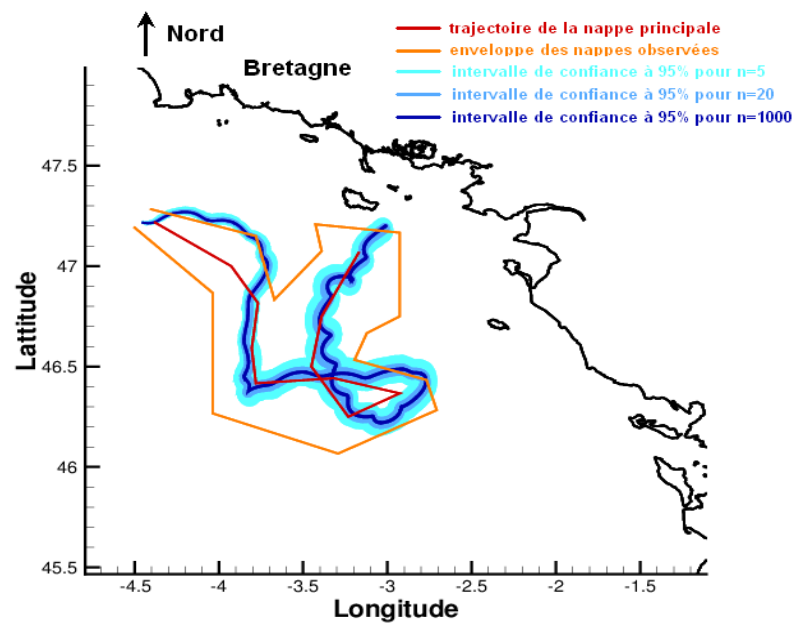


Figure 6.4: *Intervalle de confiance de la trajectoire moyenne en fonction du nombre de particules*

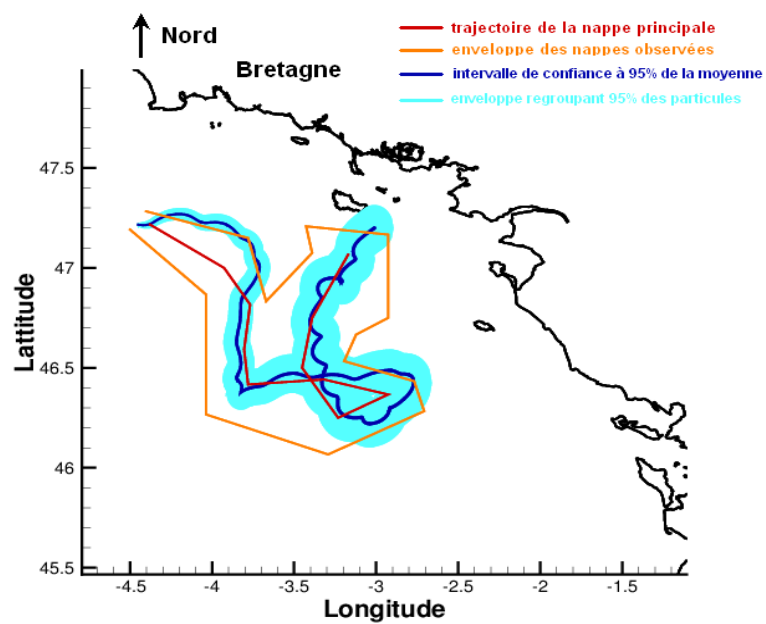


Figure 6.5: *Résultats de simulation de l'Erika pour 1000 particules*

6.3. Vérification des processus de vieillissement de la nappe d'hydrocarbures

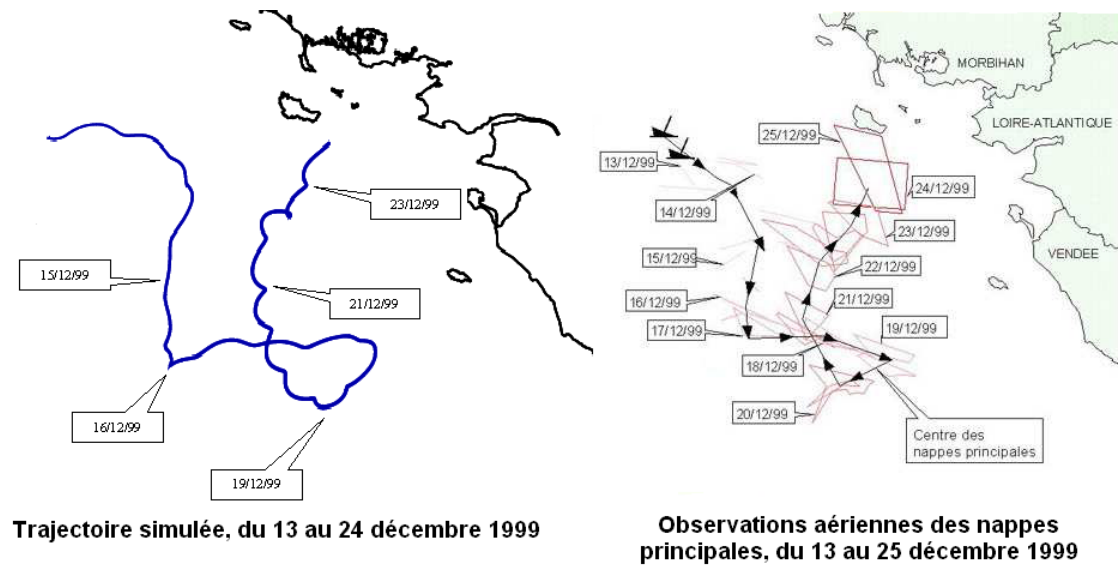


Figure 6.6: Comparaison entre les temps simulés et observés

iv Conclusion

Le modèle de transport Lagrangien de nappe d'hydrocarbures développé est capable de simuler correctement la dérive du pétrole comme celui de l'Erika. Ce cas test permet de valider le coefficient d'influence du vent β . En effet, l'Erika ayant sombré dans une zone où les courants de marée sont relativement faibles ($\leq 0,5$ m/sec), les effets du vent sont prédominants et la qualité des prévisions de dérive d'hydrocarbures dépend en premier lieu de la fiabilité des prévisions météorologiques et de ce coefficient d'influence du vent.

6.3 Vérification des processus de vieillissement de la nappe d'hydrocarbures

Dans cette section, les algorithmes des processus de vieillissement agissant sur la nappe d'hydrocarbures sont vérifiés de manière indépendante. Cette vérification est nécessaire avant de les coupler pour la modélisation des expérimentations réalisées en canal d'essai. Rappelons que dans chacune des simulations réalisées, le nombre de particules est égal à 1000.

6.3.1 L'étalement

Dans le modèle mathématique de dérive de nappe d'hydrocarbures présenté dans ce mémoire, deux modèles d'étalement, l'un issu de la théorie de Fay (1971) et l'autre de la formule analytique de Maroihi et al. (1992), ont été développés (cf. section 4.4.1). La théorie de Fay (1971) est largement utilisée dans la littérature, par exemple dans le modèle ADIOS (<http://response.restoration.noaa.gov/adios>). En effet, elle est basée sur une description claire des mécanismes d'étalement. Elle est utilisée notamment dans le modèle

d'étalement développé par le SINTEF (Vos, 2005), et a été validée par des expérimentations en laboratoire (Fay, 1971). Cependant, par manque de données expérimentales disponibles, l'algorithme issu de la théorie de Fay (1971) développé au cours de ce travail n'a pas pu être vérifié. Par conséquent, la validation du phénomène d'étalement présentée dans cette section est réalisée uniquement pour le nouveau modèle développé dans cette thèse à partir de la formule analytique de Maroihi et al. (1992) (Eq. (4.56)).

Des expériences d'étalement ont été réalisées sur différents types d'hydrocarbures par Osamor et Alhert (1981). Un certain volume d'hydrocarbure est déversé dans un réservoir rectangulaire en plexiglas (1,5 m de long et 1 m de large). L'évolution de la nappe en surface est ensuite suivie à l'aide d'une caméra qui permet de quantifier la surface de la nappe. Dans cette section, les résultats pour le fioul lourd (appelé “#6 fuel”) sont présentés. Durant l'expérience, 25 ml de fioul lourd sont déversés sur une eau au repos contenue dans le réservoir en plexiglass. Les caractéristiques du fioul lourd sont la masse volumique $\rho_o = 951 \text{ Kg/m}^3$ et la viscosité cinématique $\nu_o = 0,0028 \text{ m}^2/\text{s}$. Une comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux est présentée figure 6.7.

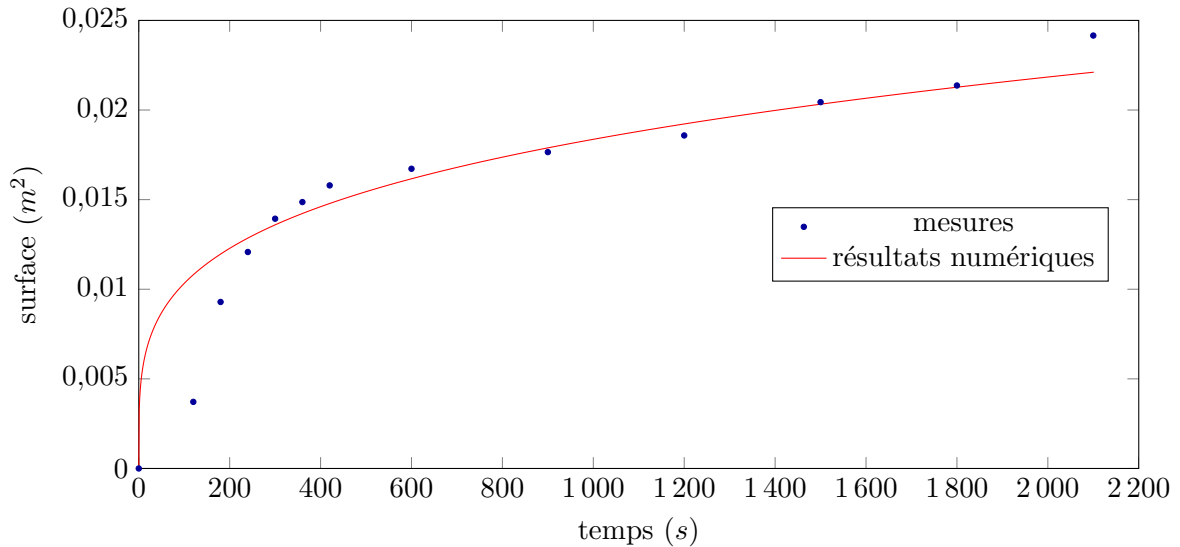


Figure 6.7: Evolution de la surface du fioul lourd (“fuel #6”)

Les résultats du modèle numérique sont en accord avec ceux obtenus par l'expérience, bien que le modèle surestime la phase initiale de l'étalement. En effet, 2 minutes près le déversement, le pourcentage d'erreur relative entre les résultats simulés et expérimentaux est de 65%, mais après 4 minutes l'erreur relative est en dessous de 10%. Ceci peut s'expliquer par le fait que lors de l'expérimentation le fioul lourd est déversé graduellement durant 90 secondes, avec des forces d'inertie prépondérantes, tandis que dans la simulation le fioul lourd est déversé instantanément et les forces d'inertie sont négligées (Eq. (4.56)).

6.3.2 Évaporation

Dans le but d'évaluer la précision de l'algorithme de l'évaporation (Eq. (4.67)), une expérience réalisée par Mackay et Matsugu (1973) est simulée. Un volume de 15 l de gasoil a été déversé dans un bac carré en bois (1,22 m de côté). Ensuite, le volume d'hydrocarbure est évalué périodiquement en mesurant la profondeur d'hydrocarbures dans le récipient. Les conditions extérieures sont connues (vitesse du vent 6,7 m/s, température 288 K). Dans l'étude numérique, la base de données du logiciel ADIOS (<http://response.restoration.noaa.gov/ADIOS>) fournit les données expérimentales de composition du gasoil. Le pas de temps est de 0,5 s et le pas d'espace du maillage est de 15 mm.

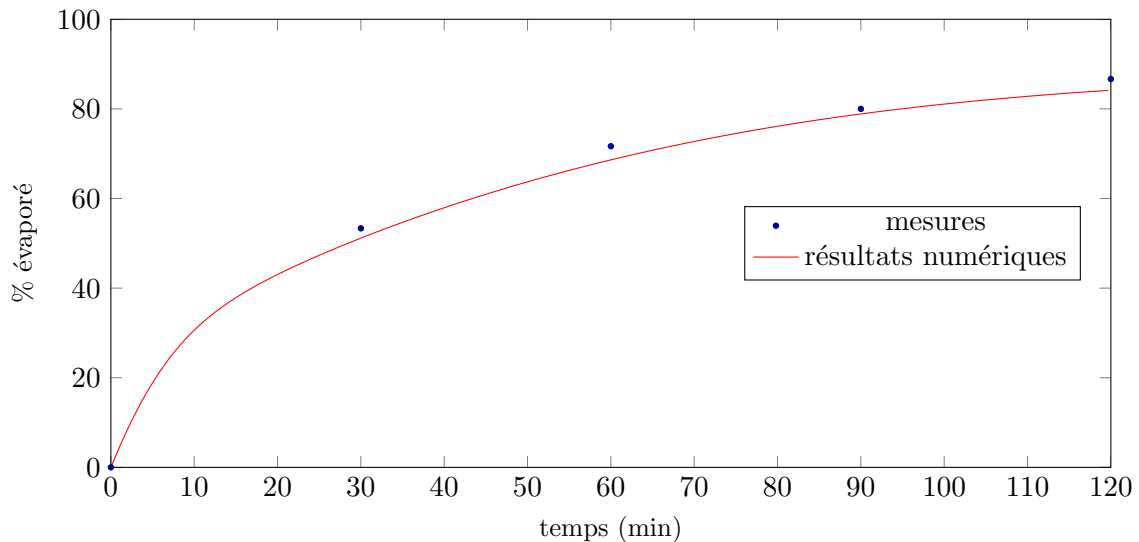


Figure 6.8: *Evaporation du gasoil lors de l'expérimentation de Mackay et Matsugu (1973)*

L'évaporation du gasoil simulée reproduit de manière satisfaisante les résultats expérimentaux (cf. figure 6.8). Pour compléter ce résultat, une comparaison entre notre modèle et le modèle issu du code de calcul ADIOS est effectuée pour du fioul lourd (IFO 300). Pour ce test, un déversement instantané dans un bac est considéré. Une surface de bac de 500 m² a été choisie. Les conditions météorologiques sont un vent de 1 m/s et une température de 288 K. Le pas de temps de la simulation est de 0,5 s et le pas d'espace du maillage est de 1,5 m.

Les résultats fournis par le code de calcul ADIOS et par notre modèle donnent des résultats très proches (cf. figure 6.9). 120 heures après le déversement, une différence de 0,5% de la fraction évaporée est observée. Une des raisons expliquant cet écart entre les deux modèles est la différence entre les méthodes utilisées pour déterminer la pression en vapeur saturante nécessaire à l'algorithme d'évaporation. Dans ce travail, la méthode de Gray-Watson (Boethling et al., 2000) est utilisée tandis que dans le modèle ADIOS, la détermination de la vapeur saturante se fait via l'équation d'Antoine (Jones, 1997).

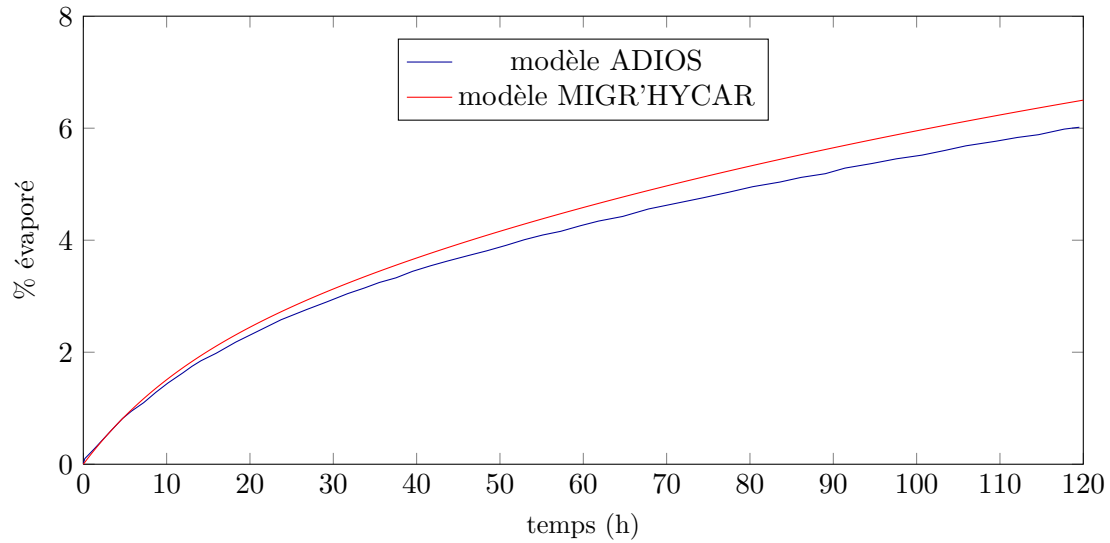


Figure 6.9: *Evaporation du fioul lourd (IFO 300)*

6.3.3 La dissolution

Pour valider le processus de dissolution, un cas test où seul ce phénomène intervient est simulé. Un bassin cylindrique de rayon (R) de 7,5 cm et de hauteur d'eau de 0,1 m est considéré. Un maillage uniforme triangulaire composé de 1307 nœuds est utilisé mais la résolution est la même pour chaque point.

Dans ce cas test, on cherche à atteindre asymptotiquement la saturation en partant d'une concentration nulle. La solution analytique est fondée sur une solution exacte de l'équation (4.83). La concentration, homogène dans tout le domaine, est vérifiée en un point du maillage. Ici, le domaine de calcul est recouvert d'un mélange de deux hydrocarbures dont l'un est extrêmement soluble ($S_i = 0,032$) et l'autre pas. Le volume d'hydrocarbures déversé est pris suffisamment grand pour avoir une fraction molaire du composé soluble ($X_i = 0,646097$) quasi constante au cours du temps. La figure 6.10 présente l'évolution de la concentration obtenue par le calcul numérique en fonction du temps.

Dans ce test, la solution numérique coïncide avec la solution analytique car le résultat du pas fractionnaire de dissolution est justement calculé avec cette solution analytique. Ceci reste vrai quel que soit le pas de temps mais constitue une approximation d'ordre 1 en temps dès lors qu'on ajoute un autre phénomène dans un autre pas fractionnaire.

6.4. Simulation des essais effectués en canal

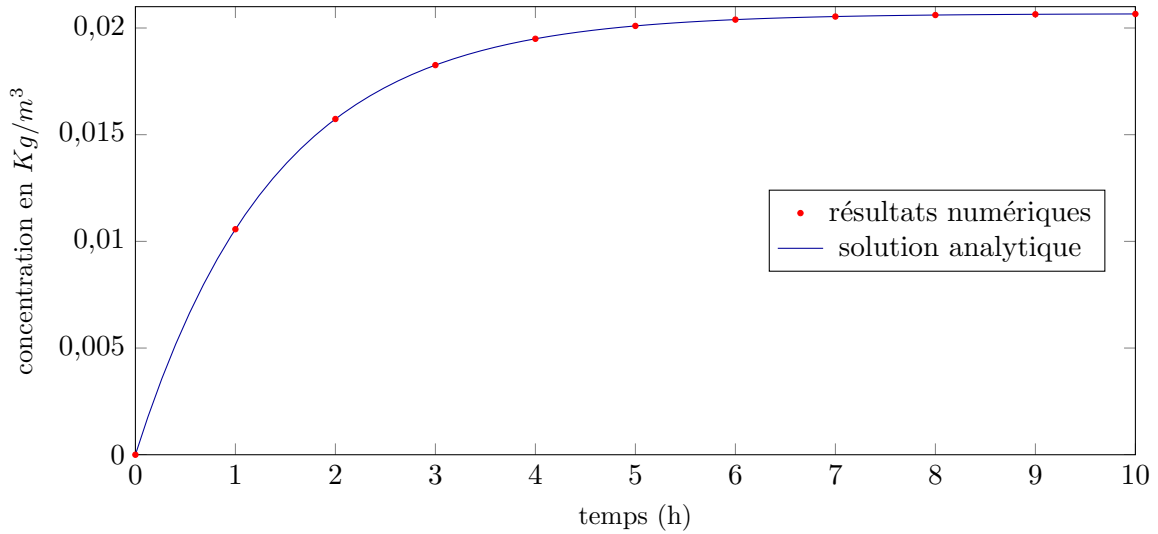


Figure 6.10: Comparaison des évolutions temporelles de la concentration calculée numériquement et analytiquement

6.4 Simulation des essais effectués en canal

Les expérimentations réalisées en canal d'essais (polludrome et rivière artificielle) permettent de tester la capacité du modèle numérique à simuler l'évolution des matières dissoutes dans la colonne d'eau. Le modèle numérique présenté dans le chapitre 4 est utilisé pour simuler les processus de transport et de vieillissement se produisant lors du déversement d'hydrocarbures dans les dispositifs expérimentaux présentés dans la section 5.4. Les caractéristiques de chaque produit déversé, telles que la composition de l'hydrocarbure, la courbe de distillation et les propriétés physiques (cf. tableau 6.2), etc... sont fournies par la société TOTAL et le CEDRE.

hydrocarbures	Propriétés physiques	
	masse volumique (kg/m^3) ρ_o (à 20°C)	viscosité (mm^2/s) ν_o (à 20°C)
fioul lourd	950	4465
fioul domestique	840	7
gasoil	830	2
kérosène	795	2

Tableau 6.2: Propriétés physiques des hydrocarbures utilisés dans le projet MIGR'HYCAR

Dans cette section, seule la reproduction numérique des essais faisant intervenir le fioul lourd, le fioul domestique et le kérosène est effectuée dans le cas de la rivière artificielle. Lors des expérimentations dans le polludrome, ces 3 hydrocarbures sont également étudiés. Cependant, au vu du tableau 5.4, l'essai faisant intervenir le kérosène n'est pas exploitable. En

effet, la concentration mesurée est presque confondue avec le bruit de fond. En remplacement de cette expérience, l'essai du gasoil est alors considéré.

Rappelons qu'au cours de la modélisation, les 43 HAP étudiés lors des expérimentations sont regroupés selon leurs nombres de cycles benzéniques en 4 groupes (cf. section 5.3) (groupe 1 : HAP composés de 2 cycles benzéniques,..., groupe 4 : HAP composés de 5 ou plus cycles benzéniques). L'évolution de la concentration obtenue expérimentalement, présentée par la suite, représente la somme des HAP dissous dans la colonne d'eau. Dans les essais en rivière artificielle, l'échelle de temps très courte (≈ 10 min) fait que la somme des espèces dissoutes dans la colonne d'eau est majoritairement composée des HAP solubles composés de 2 cycles benzéniques. Par conséquent, seule la somme des HAP est présentée tandis que pour les essais du polludrome réalisés à une échelle de temps de l'ordre de la journée, la contribution de chaque type de HAP sur la somme des espèces dissoutes est présentée. De plus, dans chacune des simulations réalisées, le nombre des particules est pris égal à 1000.

6.4.1 Les essais en rivière artificielle

i Résultats numériques

La géométrie de la rivière artificielle est maillée à l'aide d'un maillage composé de 23234 nœuds et de 43000 éléments triangulaires dont le pas d'espace est de 0,08 m en moyenne (cf. figure 6.11.b). Le débit et la hauteur d'eau sont imposés respectivement comme conditions limites entrante et sortante du canal. Pour les parois du canal, une condition de frontière solide est utilisée. Pour la modélisation, la loi de Strickler pour les frottements au fond avec un coefficient de 90 (frottements faibles) est considérée. Les deux modèles d'étalement ont été testés lors de la reproduction des expérimentations de la rivière artificielle. Le choix du modèle a finalement porté sur celui issu de la formule analytique de Maroihi et al. (1992) qui donne des résultats numériques en cohérence avec les résultats expérimentaux contrairement au modèle issu de la théorie de Fay (1971).

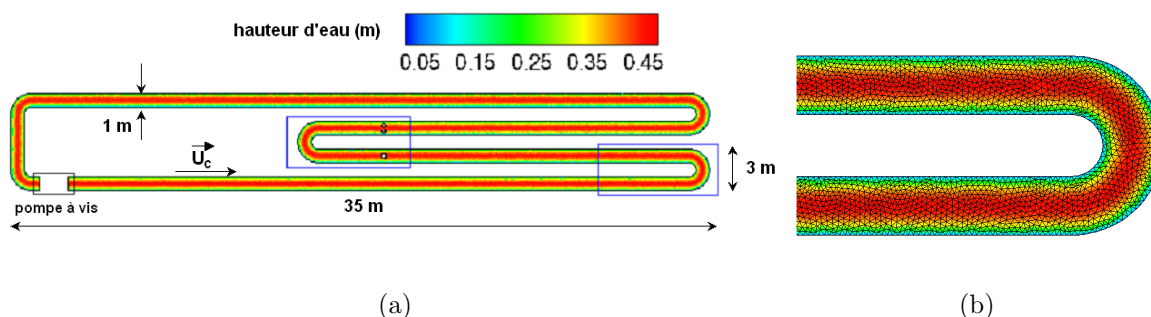


Figure 6.11: Simulation d'une pollution dans la rivière artificielle (a) hauteur d'eau dans le modèle et (b) maillage non structuré

Dans la première simulation, un déversement de kérosène se produisant dans la première courbe de la rivière artificielle est considéré. Un volume de 20 ml est déversé pour cet essai. La vitesse d'écoulement est imposée à 0,1 m/s. Trois obstacles en forme de pile de pont sont

6.4. Simulation des essais effectués en canal

intentionnellement ajoutés dans la rivière (cf. figure 5.11.b). Le résultat issu de la simulation est montré sur la figure 6.12, les particules représentent la nappe d'hydrocarbures en surface de l'écoulement tandis que le traceur eulérien représente les hydrocarbures dissous dans la colonne d'eau.

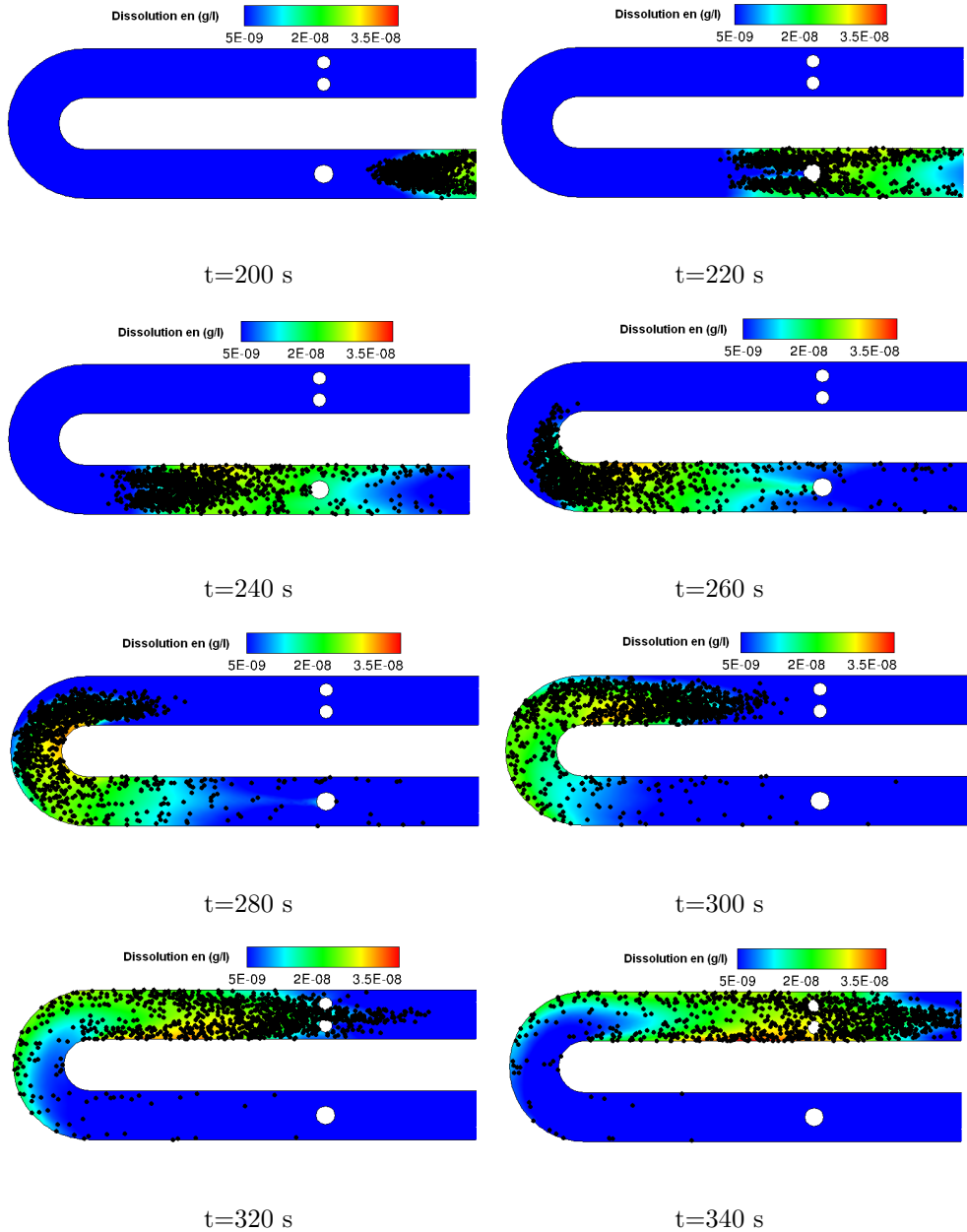


Figure 6.12: *Simulation du déversement de kérosène dans la rivière artificielle à différents instants*

Afin d'établir les incertitudes dans les résultats expérimentaux, deux essais identiques sont faits, l'un après l'autre pour avoir des conditions expérimentales inchangées (cf. figure 6.13). Ceci met en évidence la difficulté de travailler avec des hydrocarbures. Pour un essai avec les mêmes conditions expérimentales, les résultats varient très significativement. En effet, l'essai

(1) montre un maximum de concentration à 33 ng/l et une masse dissoute totale de 0,14 mg tandis que l'essai (2) a un maximum de concentration à 26 ng/l et une masse dissoute totale plus de deux fois inférieure à l'essai (1) (0,06 mg). Cet écart est difficile à comprendre car les deux expériences ont été effectuées à 30 minutes d'intervalle (10h30 pour l'essai (1) et 11h pour l'essai (2)) sous des conditions météorologiques stables.

La concentration numérique des hydrocarbures dissous dans la colonne d'eau (32 ng/l) a le même ordre de grandeur et reproduit de manière satisfaisante les concentrations obtenues expérimentalement (26-33 ng/l) (cf. figure 6.13). Cependant, un écart en temps (environ 80 s pour l'essai (1) et 160 s pour l'essai (2)) est observé entre les résultats numériques et expérimentaux. Ce décalage en temps peut être expliqué par les conditions extérieures perturbant l'écoulement, comme par exemple les rafales de vent, qui ne peuvent pas être simulées et qui peuvent avoir pour conséquence une accélération ou un ralentissement de la nappe en surface et donc de la matière dissoute.

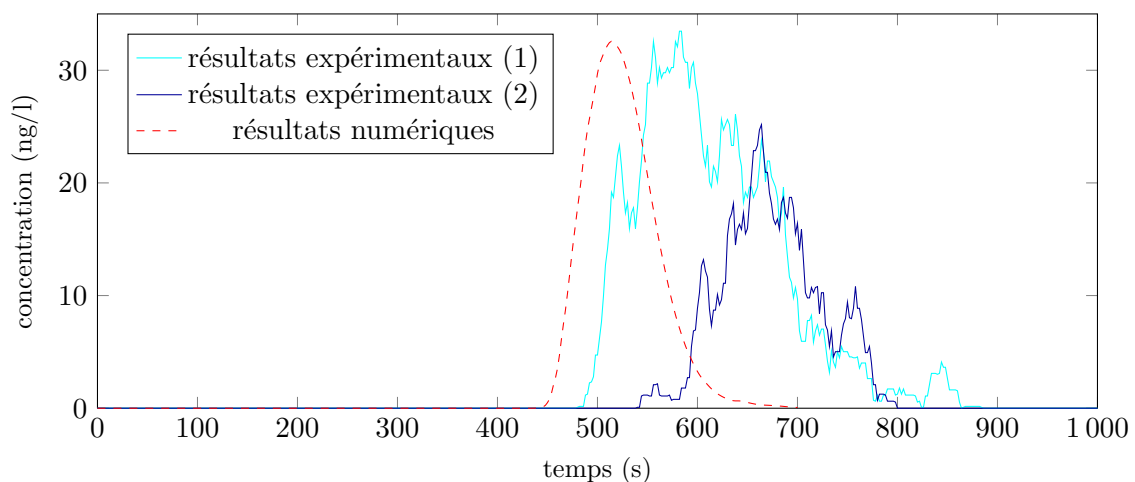


Figure 6.13: *Evolution de la concentration du kérosène dans la colonne d'eau*

En complément de ce premier résultat, les déversements des fiouls lourd et domestique sont étudiés. Dans le cas du fioul lourd, les deux expérimentations dont les résultats sont présentés figure 6.14 concernent un déversement d'hydrocarbure de 20 ml (cf. figure 6.14.a) et de 10 ml (cf. figure 6.14.b) se produisant dans la première courbe de la rivière artificielle dont l'écoulement est perturbé par la présence d'obstacle. La vitesse d'écoulement est imposée à 0,1 m/s et 0,2 m/s dans les cas présentés respectivement sur les figures 6.14.a et 6.14.b.

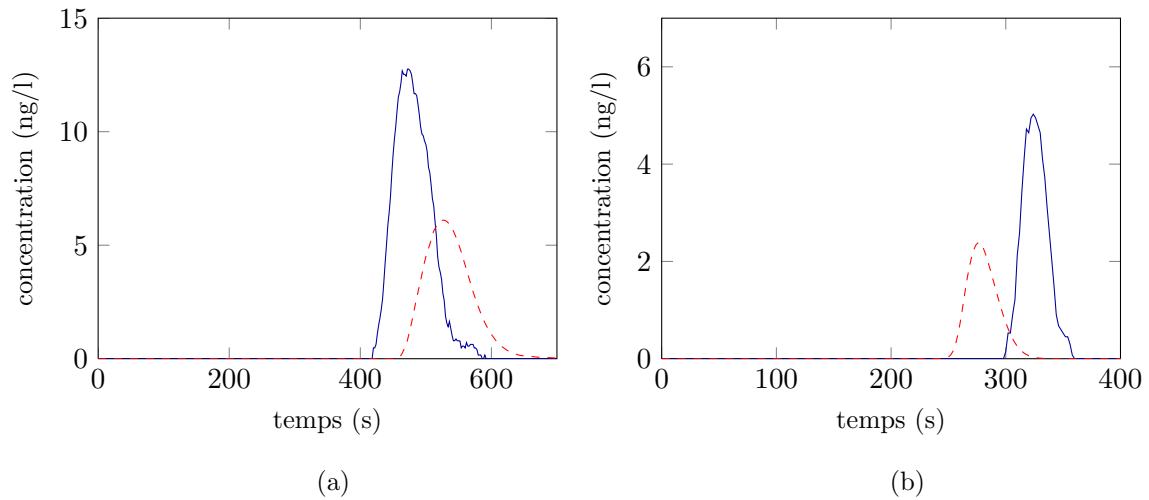


Figure 6.14: Concentration du fioul lourd dissous dans la colonne d'eau (“—” résultats expérimentaux, “- -” résultats numériques)

Les deux expérimentations faisant intervenir le fioul domestique, présentées figure 6.15, concernent un déversement d'hydrocarbure de 20 ml (cf. figure 6.15.a) se produisant dans la première courbe de la rivière artificielle et de 10 ml (cf. figure 6.15.b) se situant 3 m après la pompe à vis. La vitesse de l'écoulement est imposée à 0,1 m/s et il n'y a aucun obstacle dans le canal.

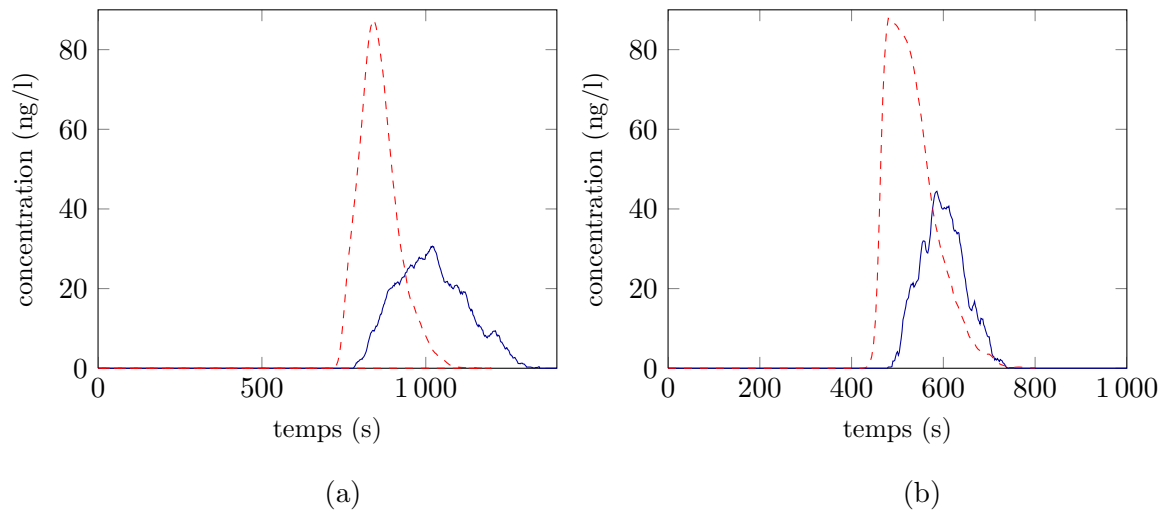


Figure 6.15: Concentration du fioul domestique dissous dans la colonne d'eau (“—” résultats expérimentaux, “- -” résultats numériques)

Pour chaque déversement, la concentration en espèces dissoutes calculée par le modèle numérique est du même ordre de grandeur que la concentration expérimentale. Toutefois, le modèle surestime la concentration dissoute du fioul domestique et sous-estime celle du fioul lourd. Les différences observées entre les résultats expérimentaux et numériques peuvent être

Chapitre 6. Vérification et validation du modèle numérique 2D

expliquées par les incertitudes de mesure, qui sont importantes comme l'ont montré les 2 essais réalisés avec le kérosène, et les incertitudes dues à la mise en donnée du modèle numérique (cf. section 5.3). Afin d'évaluer les paramètres physiques dont la variation influence de manière significative le résultat numérique et pour lesquels il est impératif d'être le plus précis possible, une étude de sensibilité est réalisée. Le résultat numérique de l'essai réalisé avec le fioul lourd présenté figure 6.14.a fait office de référence. Dans le tableau 6.3 sont présentés les facteurs multiplicatifs testés ainsi que les écarts obtenus par rapport à la concentration de référence.

paramètres	facteur	écart/concentration de l'essai référence
ρ_o	$\times 1,07$	(+)13%
	$\div 1,07$	(-)16%
ν_o	$\times 3$	(+)34%
	$\div 3$	(-)25%
K_{vol}	$\times 4$	(+)0%
	$\times 20$	(+)0%
	$\times 100$	(+)1%
K_{diss}	$\times 4$	(+)300%
	$\div 4$	(-)75%
	$\times 20$	(+)1700%

Tableau 6.3: Sensibilité du modèle numérique par rapport aux diverses données d'entrée

Cette étude de sensibilité montre très clairement que les paramètres les plus importants sont le coefficient de transfert de dissolution (K_{diss}) et la viscosité cinématique (ν_o). Ceci est en cohérence avec le fait que la masse dissoute dépend directement de la surface de la nappe, qui est pour cette étude reliée à la viscosité cinématique (ν_o) (Eq. (4.56)), mais également du coefficient de transfert de masse (K_{diss}).

6.4.2 Les essais du polludrome

La géométrie du polludrome est maillée à l'aide d'un maillage composé de 1601 nœuds et de 2954 éléments triangulaires dont le pas d'espace est de 0,1 m en moyenne (cf. figure 6.16). Lors des essais menés par le CEDRE, un courant de 30 cm/s a été imposé grâce à une hélice posée au fond du canal. Cette hélice mesure environ 30 cm de diamètre et son bord inférieur est placé à 10 cm du fond. L'hélice est modélisée numériquement par un système créant de la quantité de mouvement sans apport de masse. Pour les parois du canal, une condition de frontière solide est utilisée. Les parois étant en plexiglas les frottements peuvent être négligés. Les frottements au fond sont modélisés à l'aide de la loi de Strickler avec un coefficient de 90 (frottements faibles). Comme pour la rivière artificielle, les deux modèles d'étalement ont été testés lors de la reproduction des essais du polludrome. Ici, le choix du modèle a finalement porté sur celui issu de la théorie de Fay (1971) qui donne des résultats numériques en cohérence avec les résultats expérimentaux. En effet, le modèle issu de la formule analytique de Maroihi et al. (1992) donne des résultats notoirement faux (un ordre de grandeur de différence), ce

6.4. Simulation des essais effectués en canal

qui peut être expliqué en invoquant les différences d'échelles de temps.

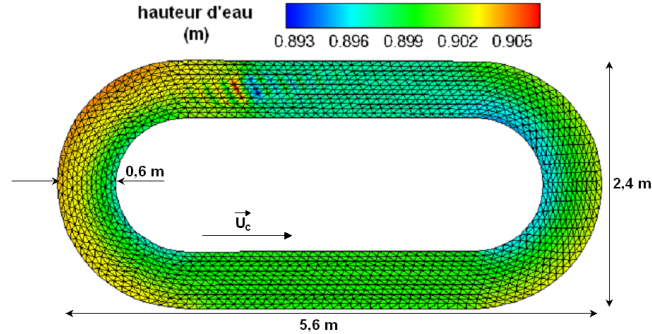


Figure 6.16: Configuration du polludrome

Dans un premier temps, le déversement de 10 ml de fioul lourd au sein du canal d'essai du polludrome est reproduit numériquement. Les conditions expérimentales décrites dans la section 5.4.1 sont celles utilisées dans le modèle. La figure 6.17 présente l'évolution expérimentale et numérique de la concentration des HAP dissous dans la colonne d'eau.

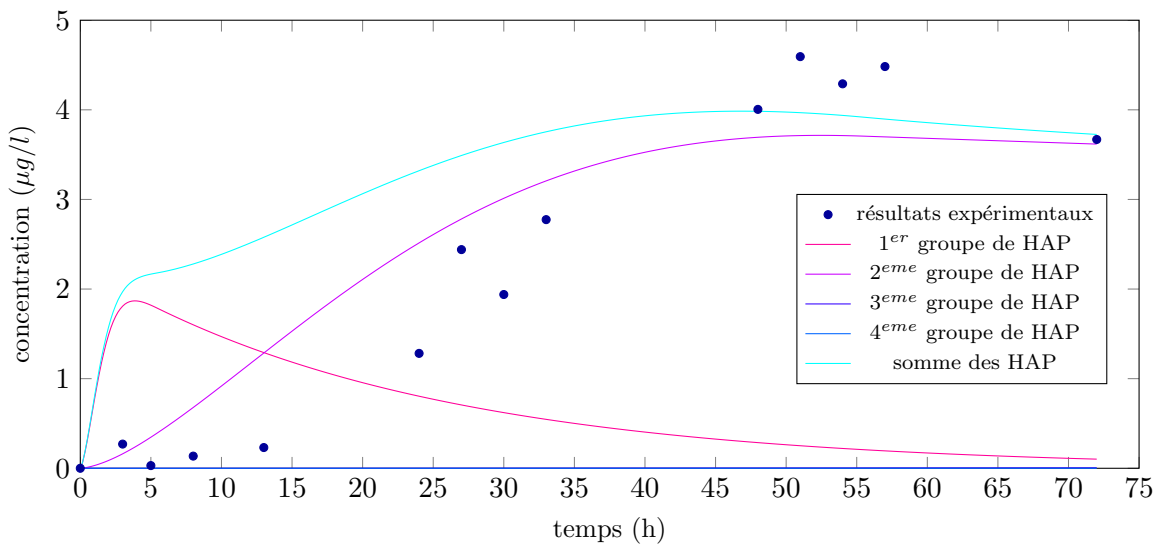


Figure 6.17: Evolution de la concentration du fioul lourd dans la colonne d'eau

Les résultats numériques sont en cohérence avec l'évolution de la concentration observée lors de l'expérimentation, la cinétique lente du fioul lourd est reproduite de manière satisfaisante par le modèle. Comme le montrent les résultats numériques, cette cinétique peut s'expliquer par la présence importante de HAP à haut poids moléculaire dans le fioul lourd et notamment des HAP comportant 3 cycles benzéniques (courbe violette sur la figure 6.17). Ces molécules faiblement volatiles se dissolvent moins rapidement que les HAP ayant 2 cycles benzéniques (courbe rouge sur la figure 6.17). En effet, la concentration simulée des HAP à 3 cycles benzéniques atteint un maximum de concentration au bout de 53 h tandis qu'il est

atteint au bout de 4 h pour les HAP ayant 2 cycles benzéniques. Le maximum en concentration dissoute observé lors de l'expérience apparaît au bout de 51 h, confirmant ainsi que la cinétique du fioul lourd est principalement due aux HAP à haut poids moléculaire.

En complément de ce premier test, le modèle numérique est maintenant testé dans le cas du gasoil pour deux volumes d'injection différents (10 et 200 ml).

Lors du déversement de 10 ml (cf. figure 6.18), les résultats numériques montrent un maximum de concentration de 2,8 $\mu\text{g/l}$, 3h30 après le déversement. Ceci est corroboré par l'expérience qui présente un pic de concentration d'intensité de 2,1 $\mu\text{g/l}$, 2 h après le début de l'essai. Cette cinétique rapide est due aux HAP solubles et volatiles composés de 2 cycles aromatiques (courbe rouge sur la figure 6.18). Cependant, après ce maximum, les observations expérimentales de la somme des HAP dissous dans la colonne d'eau montrent une décroissance de l'évolution de la concentration qui n'est pas observée numériquement. L'évolution numérique de la concentration montre une stagnation de la concentration provoquée par la compensation de la décroissance des HAP du groupe 1 et par la croissance de concentration des HAP à haut poids moléculaire (groupe 2). Ces différences observées lors d'un faible déversement de polluant peuvent être provoquées par la présence d'un bruit de fond qui augmente les incertitudes sur les mesures.

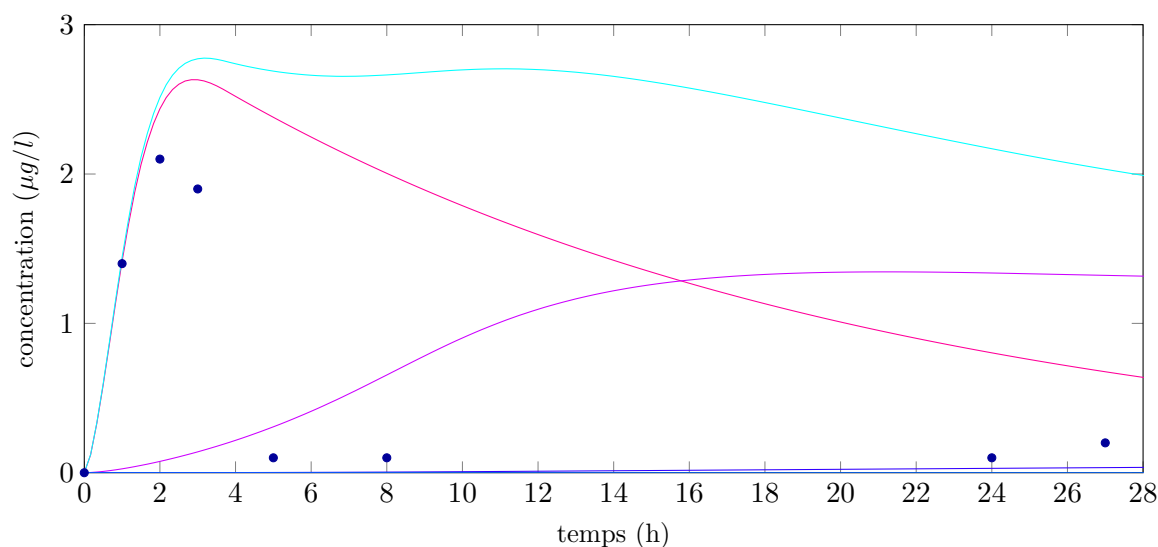


Figure 6.18: Evolution de la concentration du gasoil dans la colonne d'eau du polludrome pour un déversement de 10 ml (“•” résultats expérimentaux, “—” 1^{er} groupe de HAP, “—” 2^{ème} groupe de HAP, “—” 3^{ème} groupe de HAP, “—” 4^{ème} groupe de HAP, “—” somme des HAP)

Pour éviter ce problème, un essai avec une injection de polluant plus importante (200 ml) est étudié (cf. figure 6.19). Les résultats numériques sont satisfaisants et reproduisent bien l'expérimentation. Ils montrent en particulier une saturation du canal d'essai en HAP qui ont deux cycles benzéniques. La concentration de ces espèces reste à saturation et ne se volatilise pas car l'étalement de la nappe couvre tout le domaine quelques heures après le déversement.

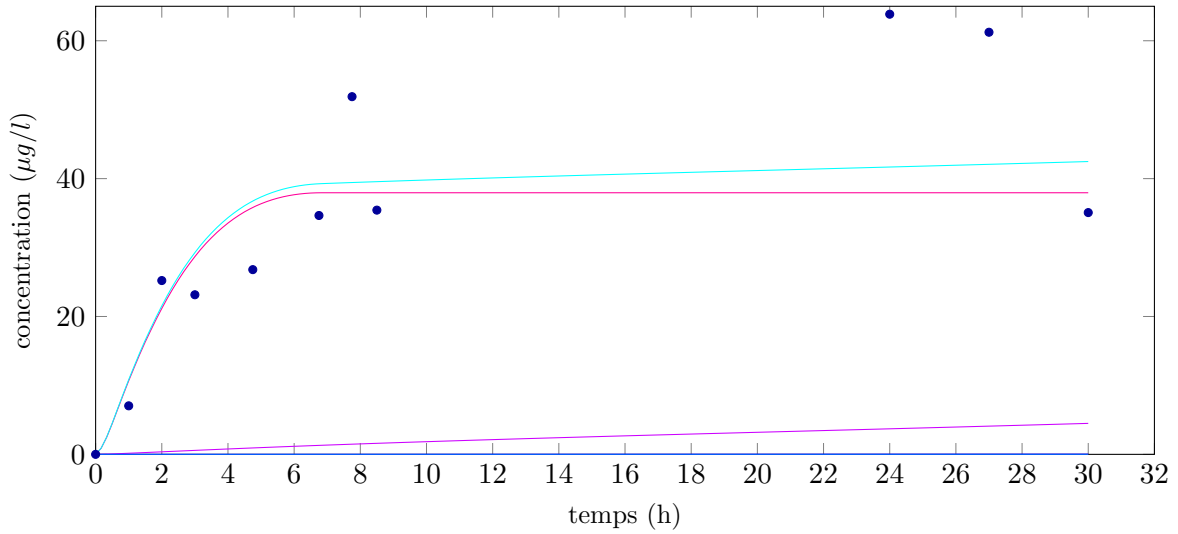


Figure 6.19: Evolution de la concentration du gasoil dans la colonne d'eau du polludrome pour un déversement de 200 ml (“•” résultats expérimentaux, “—” 1^{er} groupe de HAP, “—” 2^{ème} groupe de HAP, “—” 3^{ème} groupe de HAP, “—” 4^{ème} groupe de HAP, “—” somme des HAP)

Finalement, un déversement de 10 ml de fioul domestique est présenté figure 6.20.

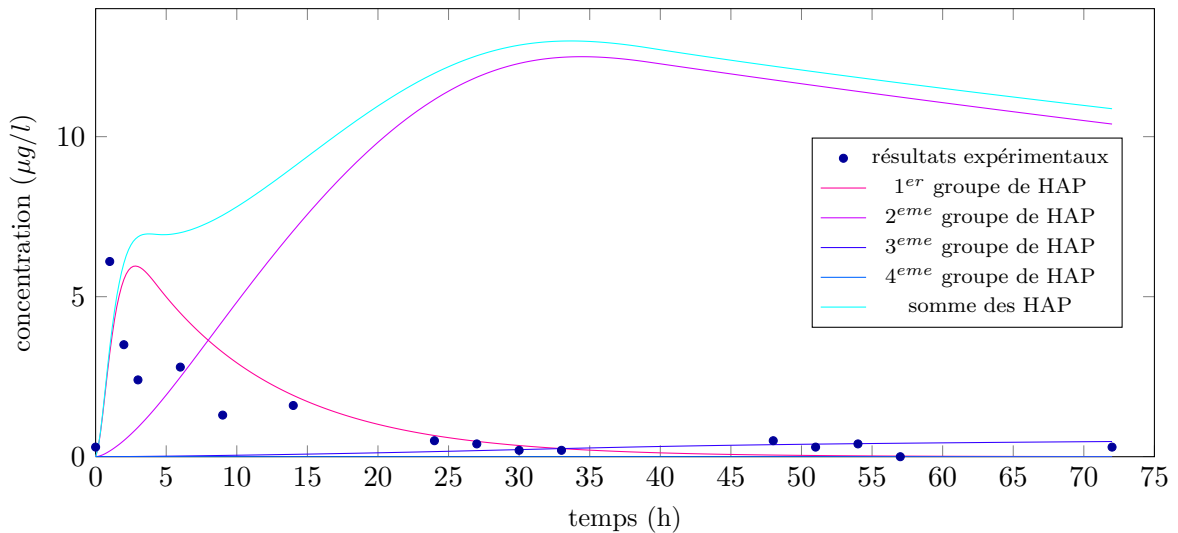


Figure 6.20: Evolution de la concentration du fioul domestique dans la colonne d'eau

Les résultats numériques sont en cohérence avec les résultats expérimentaux attendus durant les 5 premières heures qui suivent l'injection du polluant dans le canal d'essai. Les matières dissoutes sont alors principalement issues des HAP comportant deux cycles benzéniques (courbe rouge sur la figure 6.20). Cependant, une fois passé cet intervalle de temps, les résultats numériques présentent une augmentation de la somme des HAP dissous produite

par le deuxième groupe de HAP (courbe **violette** sur la figure 6.20), qui n'est pas observée à l'échelle de l'expérimentation qui présente alors une décroissance des espèces dissoutes dans la colonne d'eau. Cette différence peut être induite par la présence de substances déjà présentes dans la colonne d'eau avant le déversement et constituant le bruit de fond. Ces substances diminuent par leur présence le flux de transfert de dissolution des espèces solubles se trouvant dans la nappe d'hydrocarbures. Par conséquent, la qualité de l'eau constitue un paramètre très important à considérer lors des expérimentations. Afin de vérifier cette supposition, il serait utile d'effectuer un nouvel essai avec le fioul domestique, avec une quantité injectée plus importante.

6.4.3 Discussion

Le modèle mathématique de dérive de nappes d'hydrocarbures a été utilisé pour l'évaluation de la concentration en HAP dans la colonne d'eau de la rivière artificielle et du polludrome après un déversement d'hydrocarbure. Les concentrations simulées ont le même ordre de grandeur que les résultats issus de l'expérimentation. Cependant, des différences sont observées, celles-ci pouvant être expliquées par les raisons suivantes :

- Les produits étudiés au cours de ces expériences sont tous des produits commerciaux comportant un nombre important de composés conduisant à des incertitudes importantes lors des expérimentations (cf. section 6.4.1). De plus, de par la complexité de ce type de produit, il est nécessaire d'effectuer des hypothèses dans le modèle numérique. Celui-ci ne tient pas compte notamment des interactions entre chacun des composés au sein de la nappe d'hydrocarbures, ce qui peut constituer une source d'incertitude dans les résultats numériques.

- La mise en donnée du modèle numérique et notamment la détermination des coefficients de transfert de masse de la dissolution et de la volatilisation des HAP au sein des hydrocarbures est basée sur une identification des paramètres à partir des cinétiques chimiques du projet MIGR'HYCAR. Le phénomène d'évaporation n'est pas pris en compte lors de la résolution, constituant ainsi une nouvelle source d'incertitude. De plus, les données des cinétiques utilisées sont obtenues pour des déversements relativement faibles (150 mg) et il devient alors légitime de se demander si un facteur d'échelle est nécessaire pour passer d'expérimentations effectuées dans un bécher en laboratoire à une expérimentation en canal d'essais. Enfin, le manque de prélèvement effectué durant les 5 premières heures des cinétiques augmente les incertitudes sur la détermination des coefficients de transfert de masse de la dissolution et de la volatilisation des HAP.

- Durant les essais en rivière artificielle, la température de l'eau dans le canal est comprise entre 18°C et 23°C, tandis que les coefficients de transfert de masse calibrés à partir des cinétiques sont déterminés à la température de 20°C. Cette raison constitue une autre différence entre le modèle et les résultats expérimentaux. De plus, lors de l'interprétation des résultats expérimentaux, une courbe de calibration est tracée pour chaque jour d'essais pour prendre en compte les effets de la température, les radiations solaires, etc., et ainsi minimiser les incertitudes sur les résultats. Cependant, les résultats bruts de la sonde HAP exprimés en % de fluorescence sont convertis en concentration (ng/l) à l'aide de la courbe de calibration

qui est supposée linéaire et qui constitue une nouvelle hypothèse qui peut induire de nouvelles incertitudes.

- Pour chaque série d'essais dans le polludrome, les teneurs cumulées en HAP n'étaient pas négligeables du fait de l'utilisation régulière du canal pour des essais sur des quantités importantes d'hydrocarbures bruts, qui sont des produits généralement peu volatils en comparaison des raffinés légers. Des composés se sont adsorbés sur certaines zones, d'où un bruit de fond mesuré de l'ordre du $\mu g/l$ avant tout déversement. Pour certains produits et notamment le kérosène, les concentrations mesurées sont proches du bruit de fond et ne permettent pas l'exploitation des résultats. De plus, pour les faibles déversements, ce bruit de fond constitue une incertitude supplémentaire.

6.5 Conclusion

Dans ce chapitre, différents cas test ont été simulés afin de valider le modèle numérique présenté au chapitre 4.

Dans un premier temps, le modèle Lagrangien de transport de la nappe en surface a été validé en reproduisant l'accident de l'Erika survenu en 1999 au large du Finistère. Ce cas test a montré que la qualité des prévisions de dérive d'hydrocarbures dépendait en premier lieu de la fiabilité des prévisions météorologiques. A l'aide de l'approche de Monte-Carlo, il est apparu que l'estimation de la trajectoire est fiable à partir de 20 particules. Un second cas test comportant une solution analytique a permis de vérifier le modèle de diffusion stochastique. En effet, plus le nombre de particules est élevé, plus la solution numérique est en accord avec la solution analytique, vérifiant ainsi la h-convergence.

Dans un second temps, les algorithmes des processus de vieillissement, d'étalement, d'évaporation et de dissolution ont été vérifiés de manière indépendante. Pour l'évaporation, la comparaison entre l'algorithme développé, le résultat de l'expérimentation de Mackay et Matsugu (1973) pour un fioul léger (gasoil) et le résultat numérique issu du modèle ADIOS pour un fioul lourd (IFO 300) a montré des résultats cohérents, permettant ainsi la validation de l'algorithme. Dans le cas de la dissolution, la solution calculée par l'algorithme est en cohérence avec la solution analytique car elle est intrinsèquement liée à cette dernière. L'algorithme d'étalement issu de la formule analytique de Maroihi et al. (1992) a, quant à lui, montré une bonne corrélation avec les expériences de Osamor et Alhert (1981), permettant ainsi sa validation.

Finalement, l'ensemble des algorithmes de transport et de vieillissement de la nappe d'hydrocarbures a été testé en reproduisant les expérimentations réalisées au sein du projet MIGR'HYCAR en canal d'essais. Dans le cas de la rivière artificielle, les expérimentations ont été menées à court terme (de l'ordre de la dizaine de minutes) tandis que dans le cas du polludrome, les essais ont été réalisés à une échelle temps plus longue (de l'ordre de 30 heures). La simulation numérique de ces dispositifs à l'aide du modèle développé a montré des résultats en accord avec ceux obtenus expérimentalement. Toutefois, il est à noter que des différences, dues principalement aux incertitudes de mesures et de choix d'hypothèses pour le modèle

Chapitre 6. Vérification et validation du modèle numérique 2D

numérique, sont observables. Par ailleurs, la reproduction de ces expériences a permis de constater que le modèle d'étalement issu de la formule analytique de Maroishi et al. (1992) est adapté à de courtes échelles de temps (<1 h) tandis que le modèle de Fay (1971) est plus adapté à de grandes échelles de temps (>1 h).

Une fois le modèle testé et validé en 2D, il est important de le confronter sur un cas réel de pollution survenu dans les eaux continentales. Pour ce faire, le site test de l'estuaire de la Loire a été choisi, pour évaluer la pertinence de l'outil dans le cas de l'accident de l'Happy Bride. De par la dynamique complexe des estuaires, la modélisation 3D apparaît comme le moyen le plus adapté dans ces zones où l'hydrodynamique est déterminée par l'amplitude de la marée, le débit fluvial, la salinité et les conditions météorologiques.

Modèle 3D de dérive de nappe d'hydrocarbures appliqué à l'accident de l'“Happy Bride”

Sommaire

7.1	Introduction	146
7.2	Modèle hydraulique 3D de l'estuaire de la Loire	146
7.3	Accident du Happy Bride	152
7.4	Conclusion	160

Chapitre 7. Modèle 3D de dérive de nappe d'hydrocarbures appliqué à l'accident de l'“Happy Bride”

L'article intitulé “*3-D oil spill model : Application to the “Happy Bride” accident*” soumis à la conférence Simhydro 2012 est directement issu de ce chapitre de thèse. Ce travail a été effectué en collaboration avec EDF R&D (Jean-Michel Hervouet), ARTELIA (Oliver Bertrand et Régis Walther) et le CEDRE (Vincent Gouriou).

7.1 Introduction

Dans ce chapitre, le modèle déterministe tridimensionnel est validé en modélisant la collision qui s'est produite entre deux navires transporteurs de gaz de pétrole liquéfié (GPL), le Sigmagas et le Happy Bride, au niveau du terminal pétrolier de Donges dans la soirée du mercredi 4 janvier 2006 (Rousseau, 2007). Une brèche dans le “Happy Bride” a laissé échapper 60 tonnes de fioul lourd (destiné à sa propulsion) dans l'estuaire. Cet événement est présenté ci-dessous à travers une discussion sur les résultats obtenus et les axes d'amélioration à considérer. Au préalable, le modèle hydraulique 3D de l'estuaire de la Loire est présenté.

7.2 Modèle hydraulique 3D de l'estuaire de la Loire

L'estuaire de la Loire, en raison de sa configuration physique et de sa démographie, est un espace à fortes contraintes où les activités humaines se superposent. Les divers pôles industriels et commerciaux sont pour la plupart concentrés à proximité des grandes agglomérations. Les activités du Port Autonome de Nantes Saint-Nazaire (aujourd'hui Grand Port Maritime) ont notamment permis l'essor de nombreuses industries autour de la zone industrialo-portuaire de Montoir-Donges.

Parallèlement, l'organisation et la distribution de la production d'eau potable reflètent les spécificités locales, c'est-à-dire peu d'unités de production par rapport à la population à desservir, et une prédominance des eaux de surface.

Tous ces éléments font de l'estuaire un milieu sensible pour lequel une pollution par hydrocarbure peut avoir un fort impact sur les eaux de la Loire, et par répercussion sur leurs exploitations, que ce soit pour les usages agricoles, l'eau potable, ou encore les besoins de la centrale EDF de Cordemais.

Les estuaires, zones de rencontre du fleuve et de la mer, présentent une dynamique complexe. En effet, l'intrusion des eaux salées génère des courants de densité et de stratification. La modélisation 3D apparaît alors comme le moyen le plus adapté pour étudier ces zones où l'hydrodynamique est déterminée par l'amplitude de la marée, le débit fluvial, la salinité et les conditions météorologiques. Le Groupement d'Intérêt Public Loire Estuaire (GIPEL) (<http://www.loire-estuaire.org>) a confié à ARTELIA une étude de développement et d'exploitation d'un modèle hydro-sédimentaire en trois dimensions sur l'estuaire de la Loire dans le cadre de son “Programme de restauration de la Loire estuarienne en aval de Nantes”. Ce modèle hydrodynamique a été repris dans le cadre du projet MIGR'HYCAR et a fait l'objet d'une validation en termes de propagation de marée dans l'estuaire et notamment du large jusqu'à Nantes. Une description succincte du modèle est présentée ci-dessous.

7.2.1 Présentation du modèle

Le modèle s'étend d'Ancenis à l'amont à l'ensemble de la Grande Baie à l'aval, en incluant la Baie de Bourgneuf au Sud et la pointe de Croisic au Nord, soit environ 90 kilomètres de rivière et 40 kilomètres en pleine mer. Le maillage horizontal est composé de 7052 nœuds et 12855 éléments triangulaires dont la taille varie entre 50 mètres et 2500 mètres. Il est raffiné au niveau du lit mineur de la Loire et optimisé de manière à réduire le nombre de nœuds sans que cela se répercute sur les résultats attendus. Une fois le maillage horizontal terminé, il ne reste plus qu'à définir un empilement adéquat des plans horizontaux pour générer le maillage tridimensionnel. Dix plans sont ainsi utilisés, répartis en plans fixes dans la partie basse pour mieux représenter les zones de stratification et en plans de répartition sigma pour la partie haute de l'écoulement (cf. figure 7.1).

Le débit journalier mesuré à Montjean est imposé à la limite amont du modèle (Ancenis) et intègre en crue les débits de la Sèvre et de l'Erdre. La marée astronomique est imposée à la limite maritime, avec le niveau moyen calculé à partir de la mesure de la marée à Saint-Nazaire sur la période simulée.

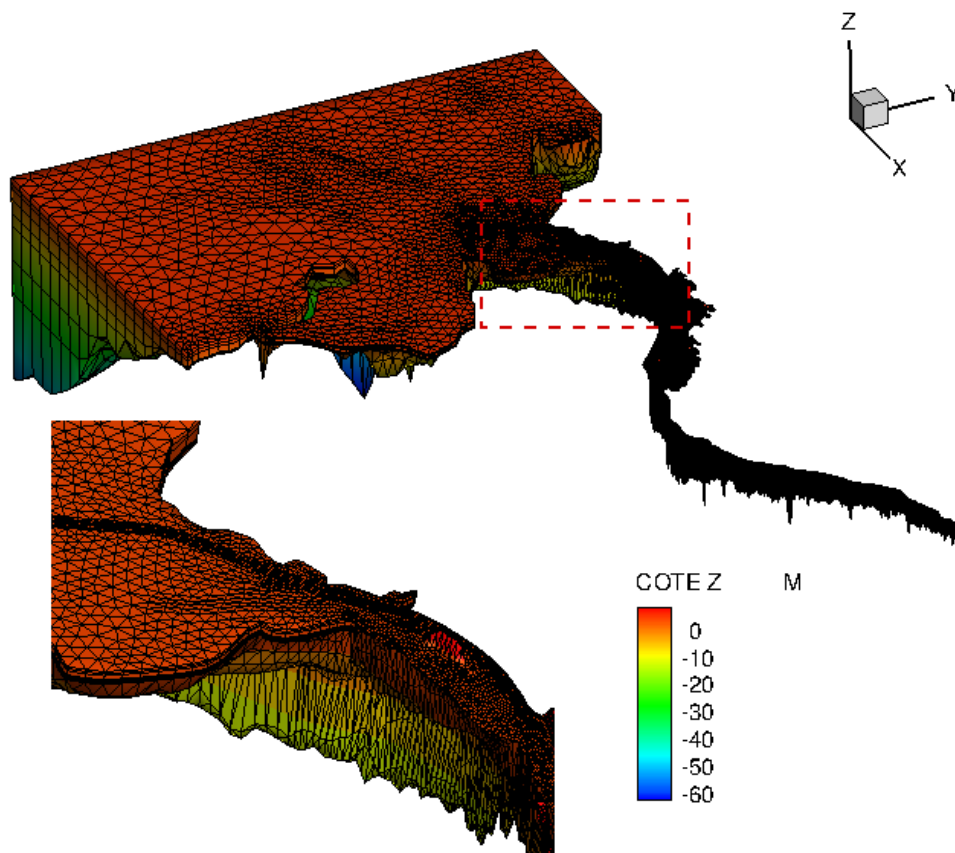


Figure 7.1: *Maillage tridimensionnel de l'estuaire de la Loire*

7.2.2 Calibration

Pour la calibration du modèle hydraulique, la direction du vent imposée est constante spatialement. La valeur de l'intensité du vent en mer est prise au point d'extraction CROISIC1 de la base Prévimer et appliquée de manière homogène sur toute la partie maritime du modèle, elle décroît ensuite linéairement vers 0 entre l'extrémité aval du chenal d'accès au port de Saint-Nazaire et Donges aval, elle est nulle dans la partie fluviale. En effet, le but de la prise en compte du vent dans le modèle n'est pas de simuler des régimes de surcote dans l'estuaire, auquel cas il faudrait un modèle hydrométéorologique bien plus élaboré. D'autre part, la surcote est déjà prise en compte par l'évolution temporelle du niveau moyen aux conditions aux limites. Le but de la prise en compte du vent dans le modèle 3D est de pouvoir générer dans l'estuaire externe les circulations d'eau tridimensionnelles susceptibles de modifier significativement les circulations résiduelles de la marée astronomique. Un tel effet du vent devient par contre négligeable dans l'estuaire interne où les effets de stratification haline et turbide conjugués à la marée et aux débits de la Loire sont prépondérants.

Le calage hydrodynamique a pour but de représenter correctement la propagation de la marée à l'intérieur de l'estuaire. On règle pour ce faire des coefficients de frottement par zones. La loi de frottement retenue est de type Nikuradse à l'aval de Sainte-Luce-sur-Loire et de type Strickler à l'amont. La formulation de Nikuradse est plus physique en trois dimensions puisque rapportée à la vitesse du fond, par rapport à une formulation de type Strickler qui dépend de la vitesse moyenne verticale. Par contre, dès que la valeur de frottement englobe d'autres pertes de charges que celles dues au frottement du fond (végétation sur les berges, épis, seuils, piles de pont), il est plus pertinent d'utiliser la formulation de Strickler qui permet d'appliquer une perte de charge reliée à la vitesse moyenne de l'écoulement. La prise en compte de la crème de vase lors du calage implique d'imposer localement un coefficient de frottement inférieur à un frottement représentatif de fonds sableux. Ce coefficient est variable en fonction du débit (ARTELIA, 2009). Les résultats obtenus pour la propagation de la marée dans l'estuaire sont présentés sur la figure 7.2 à Nantes et à Saint-Nazaire.

La salinité est vérifiée avec les mesures des stations fixes pour les périodes de débit moyen d'octobre 2000 et de crue de janvier 2004 (cf. figure 7.3).

La période d'octobre 2000 pour laquelle les débits varient entre 300 et 1100 m^3/s est très intéressante au niveau des mesures de salinité. En effet, les points fixes de mesure au fond et en surface montrent clairement :

- En vive-eau : une période de mélange importante associée à une amplitude importante des variations de la salinité en aval de l'estuaire.
- En morte-eau : les mesures sont très stratifiées entre fond et surface, et surtout on assiste, plus à l'amont, à une forte remontée de la salinité par densité lorsque les débits sont faibles.

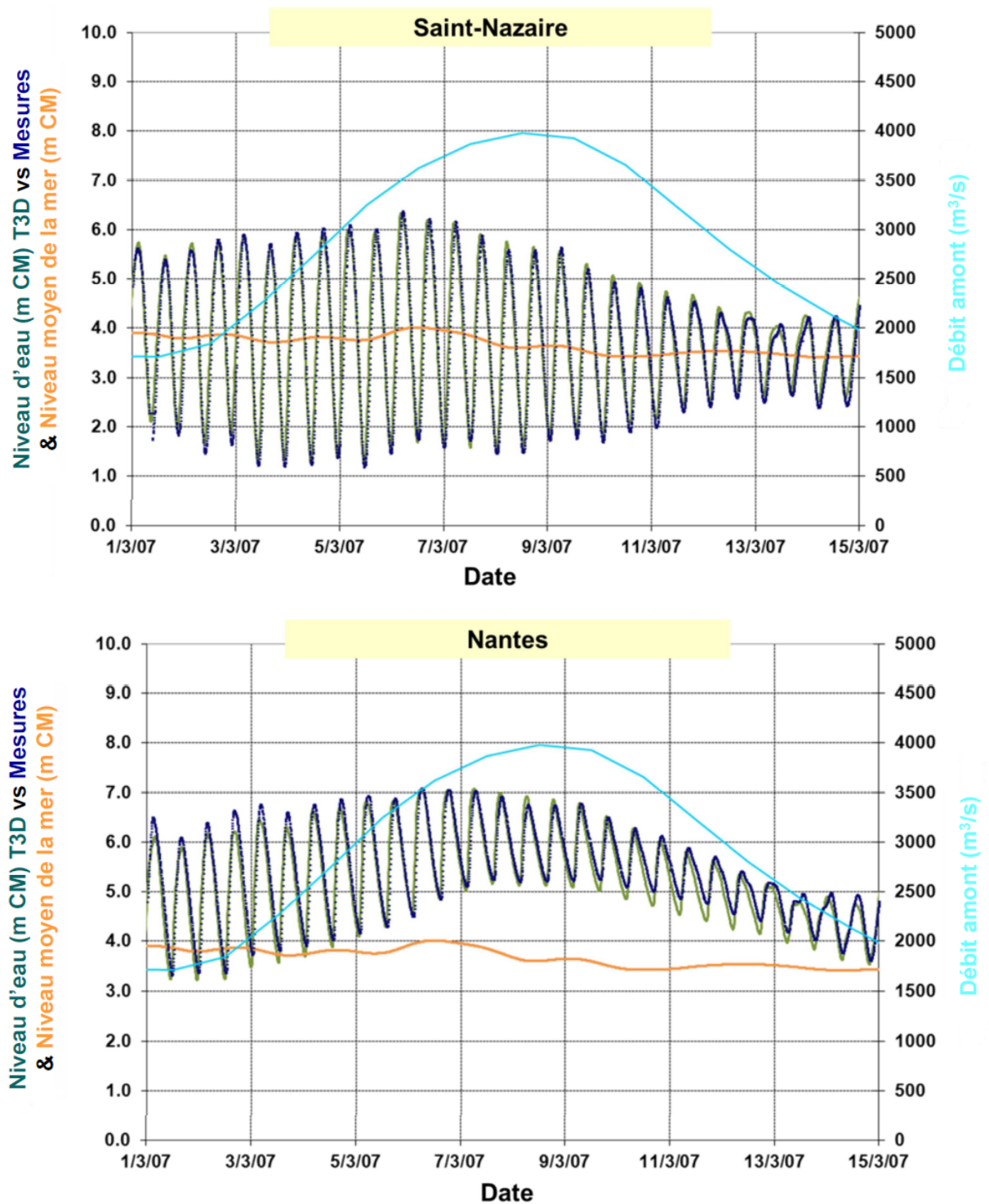


Figure 7.2: Comparaison du niveau d'eau entre les mesures et le modèle au niveau de Saint-Nazaire et Nantes pendant une période d'inondation (du 1^{er} au 15 mars 2007) (“—” niveau moyen de la mer, “—” mesure, “—” niveau d'eau simulé, “—” débit amont)

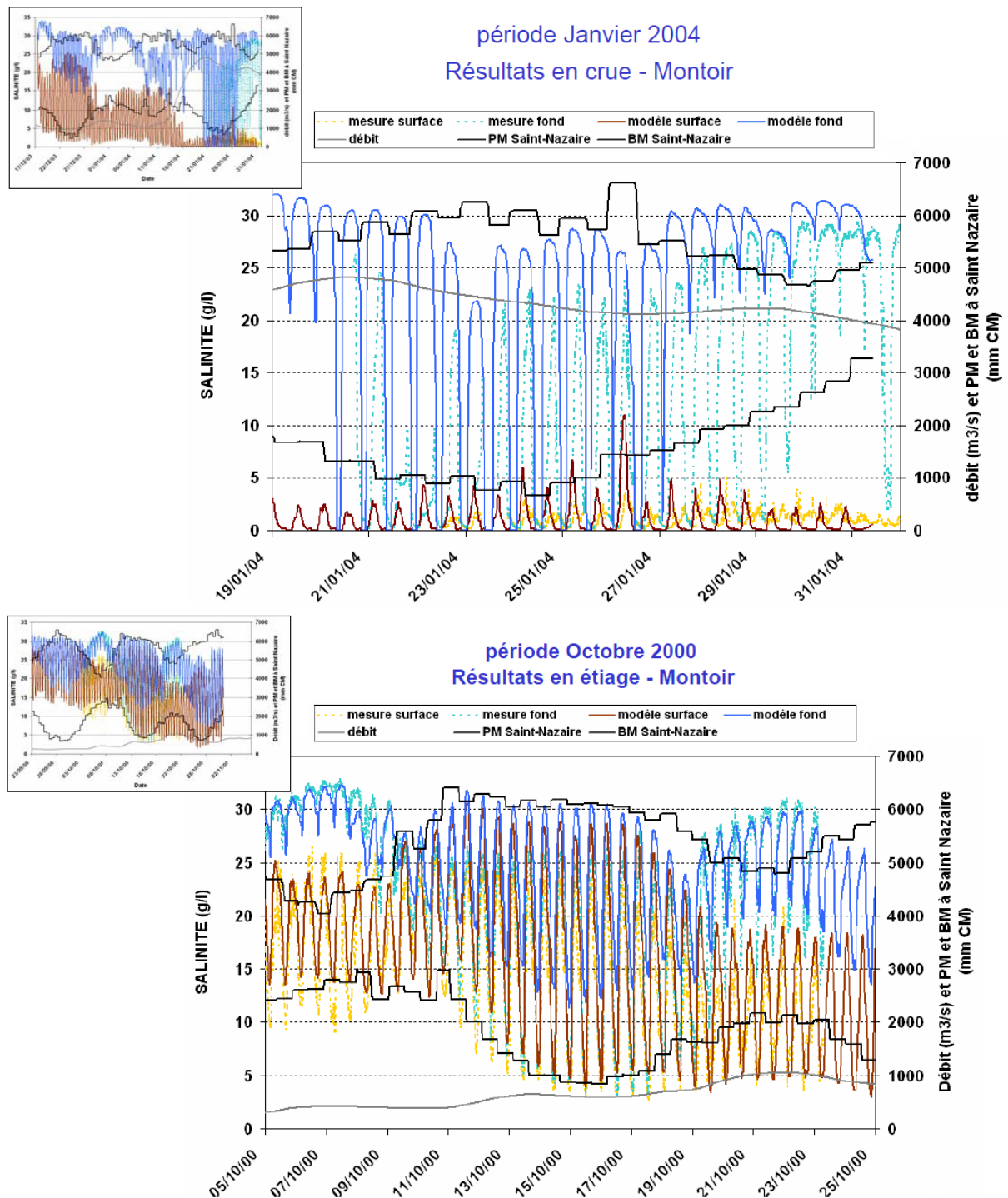


Figure 7.3: Variation en temps de la salinité à Montoir durant une période de crue (janvier 2004) et une période de faible écoulement (octobre 2000) (“- -” mesure surface, “- -” mesure fond, “—” modèle surface, “—” modèle fond, “—” débit, “—” PM Saint-Nazaire, “—” BM Saint-Nazaire)

La période de crue de janvier 2004 montre une forte stratification haline dans le chenal de navigation, notamment au niveau de Montoir en morte-eau. En vive-eau la stratification est moins importante mais néanmoins présente. La salinité, même lors des périodes de débits supérieurs à $4000 \text{ m}^3/\text{s}$, s'étend par densité sur le fond du chenal de navigation. Les brusques périodes de mélange vertical sont dues à des coups de vent dépassant les 10 m/s . Le modèle reproduit d'ailleurs assez bien ce mélange dû au vent.

La validation en salinité a permis de reproduire les fortes stratifications mesurées en crue ainsi que les remontées salines par densité mesurées lors des périodes de morte-eau grâce à l'utilisation d'un modèle de longueur de mélange (ARTELIA, 2009).

7.2.3 Résultats numériques

Avec le calage du modèle ainsi obtenu, l'hydrodynamique de l'estuaire de la Loire est simulée. La figure 7.4 illustre le champ de vitesse de l'écoulement et la salinité correspondant au flot peu avant d'atteindre la pleine mer.

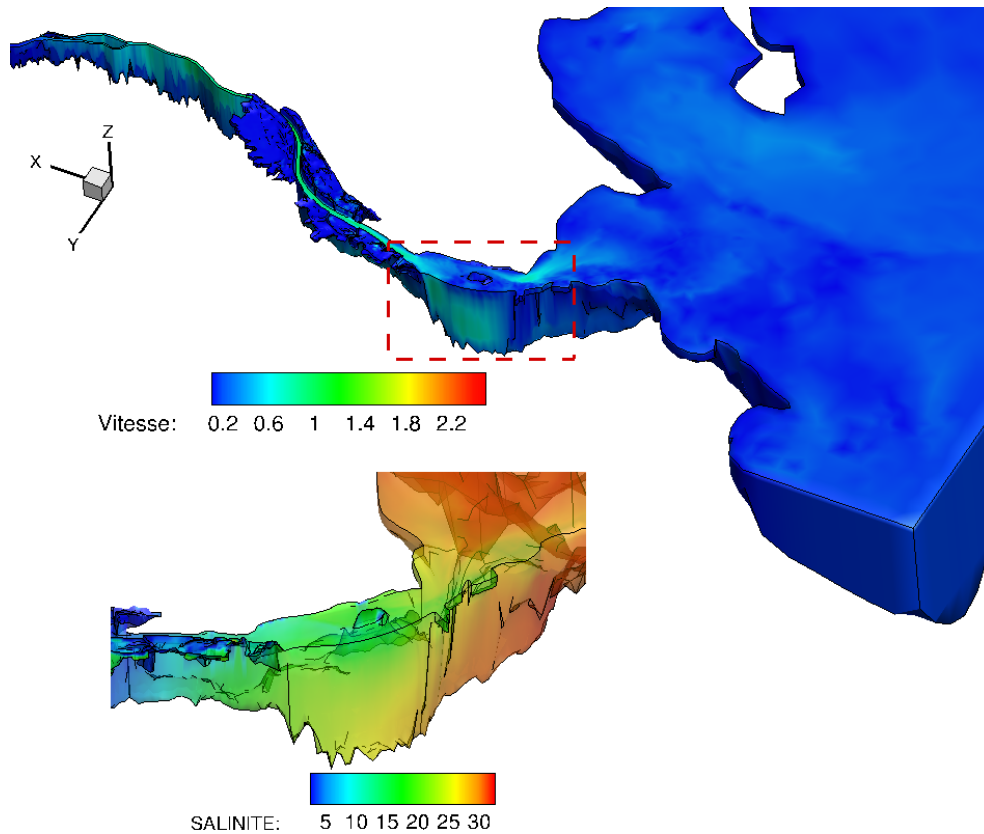


Figure 7.4: *Résultat de simulation de l'estuaire de la Loire*

L'intrusion saline dans l'estuaire se fait au niveau du banc de Bilho (encadré rouge sur la figure 7.4). L'eau salée provenant de l'aval, plus dense que l'eau douce descend dans la colonne d'eau, accélérant alors les courants dans la colonne d'eau en direction de l'amont de l'estuaire. Ce phénomène favorise la stratification haline dans l'estuaire.

7.3 Accident du Happy Bride

Une fois la calibration du modèle tridimensionnel de l'estuaire de la Loire effectuée, il est possible d'évaluer la pertinence du modèle de dérive de nappe d'hydrocarbures dans le cas de l'accident de l'Happy Bride. Ainsi, les observations sont comparées aux résultats du modèle sur les trois jours simulés.

7.3.1 Description de l'accident

La raffinerie de Donges produit du butane (gaz issu de la distillation du pétrole brut). Une partie de la production est acheminée par voie maritime. Par conséquent, il y a régulièrement des navires transporteurs de GPL dans l'estuaire de la Loire. Le 4 janvier 2006, le navire de GPL “Sigmagas” quitte la raffinerie après s'être approvisionné en butane tandis que le butanier “Happy Bride” entre dans le chenal pour se rendre à la raffinerie. Quelques minutes avant leur croisement, le Sigmagas est victime d'une avarie de barre qui entraîne une modification de son cap vers bâbord sur une trajectoire de collision avec le Happy Bride. La collision entre les deux navires a lieu à 20h20. Le Sigmagas percute la partie médiane bâbord du Happy Bride, fendant une des soutes du navire et entraînant le déversement de l'intégralité du volume de la cuve (60 m³ d'IFO 380) (Rousseau, 2007) (cf. figure 7.5).



Figure 7.5: Dommages du Happy Bride après l'abordage

Plus de détails sur le déroulement de cet accident sont disponibles dans le rapport d'enquête BEA mer (2006).

7.3.2 Observation de la pollution

Une série de reconnaissances aériennes, nautiques et terrestres menée par le Service Départemental d'Incendie et de Secours 44 (SDIS 44), les Douanes, la Gendarmerie nationale, le Port Atlantique Nantes Saint-Nazaire (PANSN), le CEDRE, l'ITOPF (International Tanker Owners Pollution Federation) et la société TOTAL commence alors dès le 5 janvier pour évaluer l'ampleur de la pollution. Le 5 janvier, l'avion des Douanes fait état d'une nappe

de 17 km sur 300 mètres (quantité estimée à $13 m^3$) à partir du pont de Saint-Nazaire vers l'ouest / sud-ouest. En complément des observations, le modèle MOTHY de Météo France (<http://www.meteorologie.eu.org/mothy/>) est utilisé pour disposer dans les plus brefs délais des prévisions météorologiques sur la zone touchée et des cartes de dérive de nappes d'hydrocarbures (cf. figure 7.6).

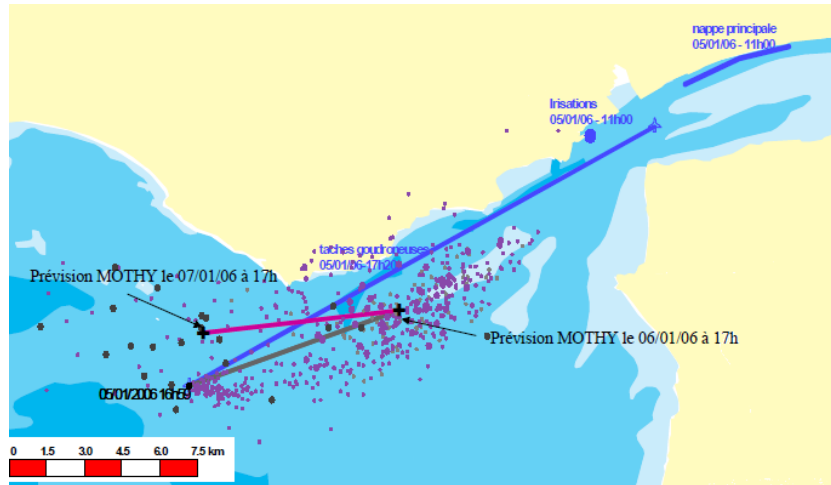


Figure 7.6: Bilan des observations en mer du 05/01/06 et prévision de dérive de MOTHY sur 48 heures

7.3.3 Modélisation de l'accident

Le modèle mathématique de dérive de nappe d'hydrocarbures présenté dans le chapitre 4 et le modèle hydrodynamique tridimensionnel TELEMAC-3D présenté dans le chapitre 3 sont utilisés pour simuler la dérive de la pollution provoquée par la collision entre les butaniers “Sigmagas” et “Happy Bride”. Dans le cadre de la simulation, des données de vent du mois de janvier 2006, analysées *a posteriori*, sont utilisées. Ces données libres proviennent du modèle CFSR (Climate Forecast System Reanalysis (<ftp://nomads.ncdc.noaa.gov/CFSR>)). Le cisaillement du profil vertical de vent au-dessus de la surface libre de la mer est caractérisé par la contrainte de cisaillement à l'interface eau/air ($\vec{\tau}_w = \rho_a C_{D,w} \vec{U}_w \|\vec{U}_w\|$). Dans cette étude, le coefficient de frottement en surface $C_{D,w}$ est estimé à partir de la formulation de Flather (Flather, 1976).

Concernant les données nécessaires au calcul des processus de vieillissement de la nappe d'hydrocarbures, le produit déversé au cours de la pollution du Happy Bride est le fioul lourd étudié dans le projet MIGR'HYCAR. En effet, les hydrocarbures étudiés sont ceux les plus couramment déversés dans nos eaux continentales, et le produit IFO 380 en fait partie comme l'illustre cet exemple. La caractérisation de ce fioul a donc été effectuée et la mise en donnée du modèle numérique est présentée au sein de la section 5.3. De plus, compte tenu du fait que l'accident est simulé sur plusieurs jours, le modèle d'étalement considéré est celui issu de la théorie de Fay (1971) en cohérence avec la conclusion du chapitre 6.

Chapitre 7. Modèle 3D de dérive de nappe d'hydrocarbures appliqué à l'accident de l'«Happy Bride»

i Transport de la nappe en surface

Les figures 7.7 à 7.9 comparent l'évolution de la pollution relevée par les équipes de surveillance durant les 3 premiers jours avec les résultats de la simulation.

Situation du jeudi 5 janvier 2006 (figure 7.7)

Au moment de la collision, le courant s'écoule en aval de l'estuaire de la Loire (marée haute à 19h50) portant ainsi la pollution à l'embouchure de l'estuaire. Ce phénomène est amplifié par la stratification due à la salinité de l'eau. En effet, l'eau douce provenant de l'aval, moins dense que l'eau salée, remonte dans la colonne d'eau, accélérant alors les courants de surface en direction de l'aval de l'estuaire. Dans les premières heures qui suivent le déversement, la nappe d'hydrocarbures est localisée dans la partie nord de l'estuaire, comme le montrent les cartographies des équipes de gestion de crise de l'accident (CEDRE, 2006a), qui sont corroborées par les simulations de dérive de nappe du modèle mathématique présenté dans le chapitre 4.

Situation du vendredi 6 janvier 2006 (figure 7.8)

Le 6 janvier, une reconnaissance par hélicoptère est organisée pour évaluer l'ampleur de la pollution dans le polygone délimité par St Brévin, le Pointeau, la zone de bouchots, le phare du Grand Charpentier, la pointe de Chémoulin et le rivage de Saint-Nazaire (CEDRE, 2006b). Dans cette zone de survol, les résultats numériques aux différents instants relevés sont en cohérence avec les observations. En effet, les traînées de la pollution à 10h20 et 17h se retrouvent dans les résultats numériques. Cependant, le modèle de dérive de nappe d'hydrocarbures montre la présence d'une majeure partie de la pollution en dehors de la zone de reconnaissance aérienne. Sans survol de cette zone (la Baule), il est difficile de conclure sur ces résultats. De plus, les observations à terre montrent des dépôts résiduels sur le rivage sud-ouest de Paimboeuf, ainsi que sur le banc de Bilho. Ces pollutions résiduelles ne sont pas détectées par le modèle numérique. Les résultats montrent que des améliorations peuvent être apportées en affinant l'adhérence de la nappe d'hydrocarbures sur les berges de l'estuaire. Ce paramètre est cependant très délicat car il dépend de la localisation (différenciation des différents types de berges) mais également de la date à laquelle le déversement simulé a lieu (végétation, etc...).

Situation du samedi 7 janvier 2006 (figure 7.9)

Les observations terrestres montrent la présence de boulettes d'hydrocarbures dans la baie de la Baule et des résidus à l'embouchure de l'estuaire. Les résultats donnés par le modèle corroborent ces observations.

Comme pour la journée précédente, des dépôts résiduels sont observés à proximité de la raffinerie de Donges. Ces dépôts sont probablement dus à la dispersion mécanique du pétrole échoué, provoquée par le phénomène de marée dans l'estuaire.

7.3. Accident du Happy Bride



Figure 7.7: Bilan des observations en mer et des simulations du 05/01/06 (“—” observation à terre, “—” observation en milieu aquatique, “●” nappe simulée à 17h, “●” hydrocarbure échoué, “●” nappe simulée à 11h)

Chapitre 7. Modèle 3D de dérive de nappe d'hydrocarbures appliqué à l'accident de l'“Happy Bride”

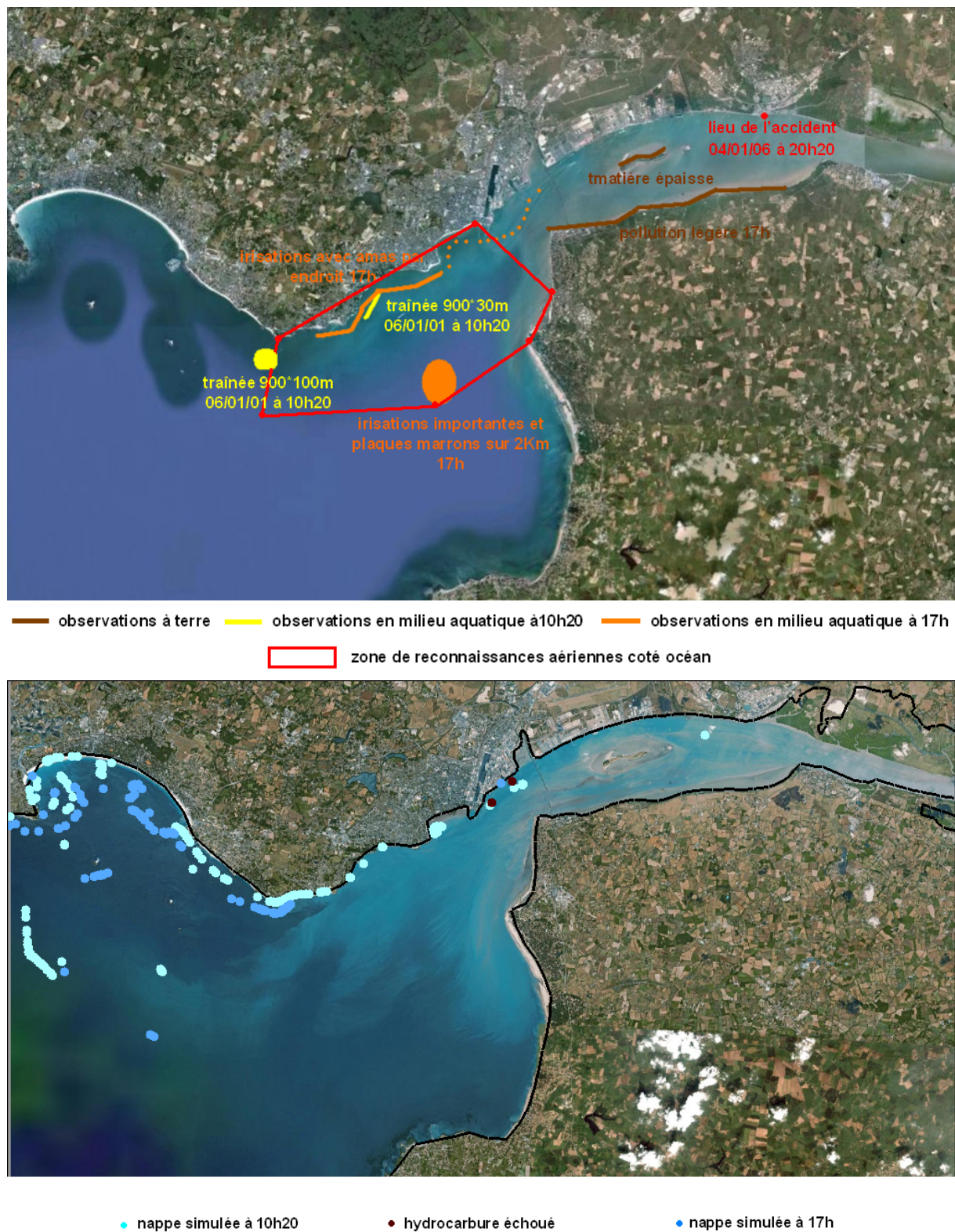


Figure 7.8: Bilan des observations en mer et des simulations du 06/01/06 (“—” observation à terre, “—” observation en milieu aquatique à 10h20, “—” observation en milieu aquatique à 17h, “•” nappe simulée à 10h20), “•” hydrocarbure échoué, “•” nappe simulée à 17h

7.3. Accident du Happy Bride



Figure 7.9: Bilan des observations en mer et des simulations du 07/01/06 (“—” observation à terre, “●” nappe simulée à 17h, “●” nappe simulée à 11h), “●” hydrocarbure échoué

Chapitre 7. Modèle 3D de dérive de nappe d'hydrocarbures appliqué à l'accident de l'«Happy Bride»

Conclusion

Les résultats obtenus sont encourageants et démontrent la faisabilité de la prévention de transport de nappes d'hydrocarbures dans les eaux continentales.

Les résultats numériques montrent que des améliorations peuvent être apportées en traitant plus finement l'adhérence de la nappe d'hydrocarbures sur les berges de l'estuaire. La dérive de la nappe est fortement influencée par les conditions de vent. Une meilleure prise en compte du vent, en insérant des données plus détaillées spatialement et temporellement, peut aussi permettre de représenter plus précisément la dérive de la nappe d'hydrocarbures.

ii Suivi de l'évolution des HAP dans la colonne d'eau

Au moment de la pollution, la Direction Départementale des Affaires Sanitaires et Sociales (DDASS 44) et l'Ifremer ont procédé à des prélèvements de coquillages destinés à évaluer la contamination par les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP) dans les zones sensibles de l'estuaire de la Loire.

Les organismes marins dont les coquillages sont utilisés comme indicateurs quantitatifs de la contamination chimique car ils possèdent la propriété d'accumuler les contaminants présents dans ce milieu jusqu'à atteindre un équilibre avec lui. Les dosages dans les organismes sont facilités par les concentrations élevées que l'on y rencontre.

Les résultats des prélèvements du 11 janvier 2006 traduisent une augmentation significative de la contamination des coquillages par les Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP) par rapport aux valeurs du 5 janvier 2006, en particulier dans la partie nord de l'estuaire.

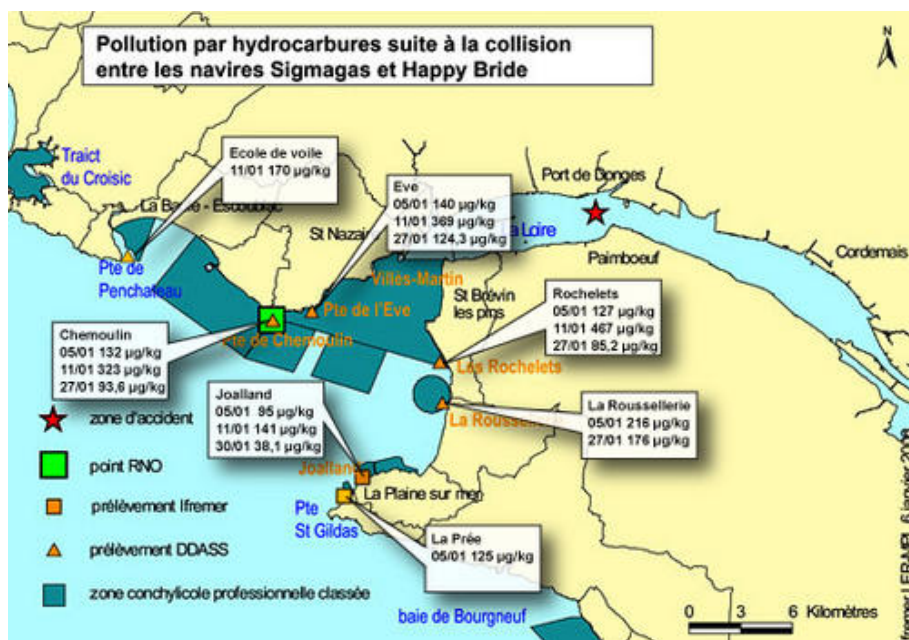
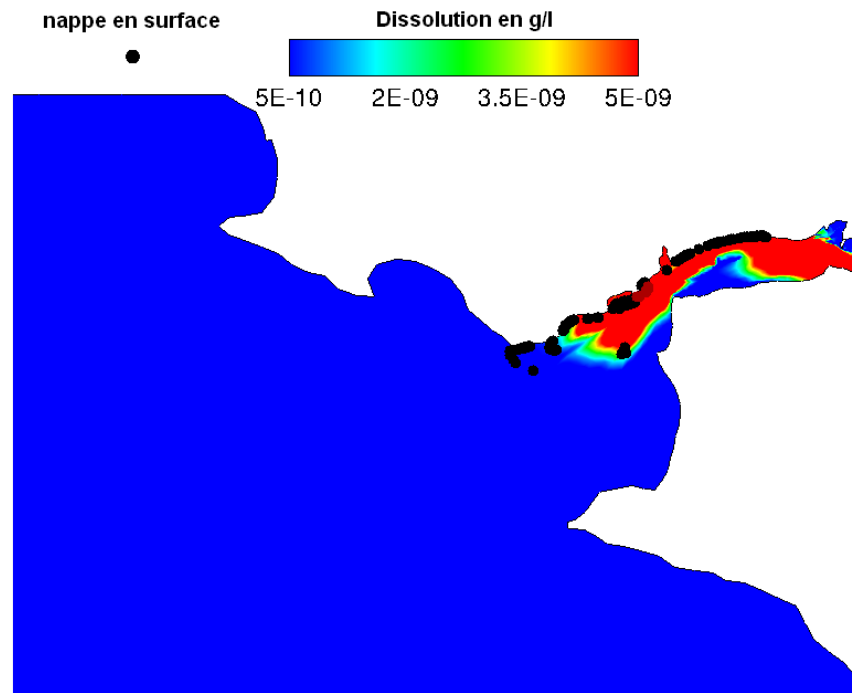
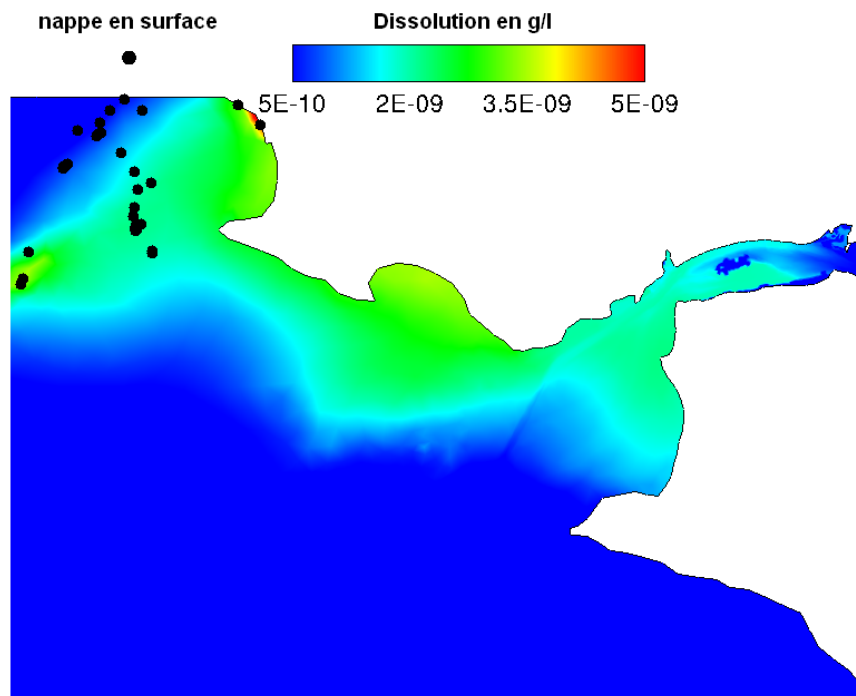


Figure 7.10: Bilan des prélèvements HAP lors de la pollution (source : IFREMER (<http://www.ifremer.fr/envlit/>))



(a)



(b)

Figure 7.11: Evolution de la concentration d'hydrocarbures dissous dans la colonne d'eau lors de la pollution du Happy Bride, (a) le 5 janvier et (b) le 11 janvier 2006

Chapitre 7. Modèle 3D de dérive de nappe d'hydrocarbures appliqué à l'accident de l'“Happy Bride”

Il est difficile de comparer les concentrations obtenues par le code de calcul avec les analyses réalisées au cours de la pollution car le phénomène de bioaccumulation se produisant au sein des organismes vivants nécessite la connaissance du temps d'exposition aux HAP subi par les coquillages, ainsi qu'un facteur de concentration entre milieu et organisme pour convertir la concentration en g/l obtenue par le modèle numérique en μg de HAP dissous contenu dans un kg d'organismes (cf. figure 7.10). La comparaison entre le modèle numérique et les observations est donc effectuée de manière qualitative, et nécessitera par la suite une prospection plus détaillée pour compléter cette étude.

Les observations sont corroborées par les résultats numériques. En effet, le 5 janvier, c'est le début de la pollution et les points de prélèvements des analyses des HAP dans les coquillages sont des zones encore non affectées par la pollution (cf. figure 7.11.a). Les jours suivants, le nuage de polluant se déplace et atteint de manière significative le rivage nord de l'estuaire de la Loire (cf. figure 7.11.b). Ceci explique les quantités importantes de HAP prélevées sur les rivages de Saint-Nazaire et au niveau de la pointe de Chémoulin ($\approx 350 \mu\text{g/kg}$) et les quantités nettement plus faibles au niveau des points de prélèvements proches de la pointe Saint Gildas ($\approx 130 \mu\text{g/kg}$). Cependant, les résultats numériques montrent qu'une partie non négligable de HAP dissous se situe au niveau des plages de la Baule, où la configuration géométrique de cette zone a tendance à piéger une certaine partie de la pollution, tandis que le prélèvement effectué ne montre pas une quantité de HAP dissous significative.

7.4 Conclusion

Le site test de l'estuaire de la Loire a été choisi pour évaluer la pertinence de l'outil développé dans le cas de l'accident de l'Happy Bride. Cette application montre la complexité de l'hydrodynamique dans les zones fortement stratifiées où l'eau de mer et l'eau douce provenant des eaux continentales se mélangent. A cette première difficulté s'ajoute la nécessité de bien reproduire le transport des pollutions aux hydrocarbures qui est régi par le courant et les conditions météorologiques. De par la dynamique complexe des estuaires, la modélisation 3D apparaît comme le moyen le plus adapté aux modèles mathématiques de dérives de nappes d'hydrocarbures dans ces zones où l'hydrodynamique est déterminée par l'amplitude de la marée, le débit fluvial, la salinité et les conditions météorologiques.

Les résultats obtenus sont encourageants et démontrent la faisabilité de la prévention de transport de nappes d'hydrocarbures dans les eaux continentales. Cependant en ce qui concerne le transport de la nappe en surface, des améliorations peuvent être apportées en traitant plus finement l'adhérence de la nappe d'hydrocarbures sur les berges de l'estuaire et la prise en compte du vent, en insérant des données plus détaillées spatialement et temporellement.

De plus, afin de valider les concentrations en espèces dissoutes fournies par le modèle numérique, il est utile d'étudier plus précisément le processus de bioaccumulation des organismes vivants afin d'être capable de convertir les concentrations obtenues avec le modèle numérique en g/l en μg de HAP dissous contenu dans un kg de coquillages testé.

Chapitre

8

Conclusion et perspectives

Sommaire

8.1 Conclusion	164
8.2 Perspectives	166

8.1 Conclusion

Tandis que pour les grands accidents d'origine pétrolière, principalement en milieu océanique ou côtier, des moyens importants de suivi et de gestion de la crise sont rapidement mis en place, la gestion des accidents de moindre importance, bien que beaucoup plus nombreux, est toujours assurée par des moyens limités, notamment en ce qui concerne les événements de pollution des eaux continentales. La connaissance limitée de la nature et de l'importance de tels événements rend généralement les autorités chargées de prendre des mesures de protection sanitaire ou économique impuissantes face aux conséquences environnementales. Les pollutions aux hydrocarbures dans les eaux continentales sont en pleine croissance avec une moyenne sur la période 2008-2010 d'un déversement toutes les 40 heures (Bonnemains et al., 2011). Les accidents les plus souvent identifiés résultent d'erreurs de manipulations, de fuites accidentelles de citernes domestiques ou industrielles, de fuites de stations services, d'accidents de camions, de dégazages volontaires ou accidentels de bateaux fluviaux, etc... (Gouriou, 2012).

L'application de la Directive Cadre sur l'Eau et l'obligation de surveillance de la qualité d'eau pour la consommation humaine et les activités récréatives ou industrielles entraînent une forte demande pour des systèmes d'évaluation et de suivi de la qualité de l'eau. La présente thèse s'inscrit dans ce contexte et détaille le développement d'un outil de modélisation permettant la simulation de la migration des nappes d'hydrocarbures en eaux continentales et estuariennes. Cet outil, lié à une base de données de caractérisation physico-chimique des hydrocarbures, est destiné à une utilisation opérationnelle.

Afin de faire le choix des phénomènes physiques à considérer pour modéliser la dérive de nappes d'hydrocarbures en eaux continentales, un état de l'art détaillé a été effectué (cf. chapitre 2). Cette bibliographie a montré que la prédiction de dérive de nappes d'hydrocarbures nécessite le couplage des équations de transport et des cinétiques chimiques avec un modèle hydrodynamique. En effet, la qualité de prévision du transport de nappe d'hydrocarbures dépend directement de la qualité des données hydrodynamiques.

Un modèle mathématique de dérive de nappe d'hydrocarbures, composé d'un modèle Lagrangien couplé à un modèle Eulérien, a ainsi été développé dans la plate-forme hydro-informatique TELEMAC (<http://www.opentelemac.org>), présentée au chapitre 3. Ce système est un outil de modélisation bi- et tri-dimensionnel dédié aux écoulements à surface libre dans les domaines maritimes et fluviaux. Développé depuis 25 ans, ce code de calcul a été validé sur de nombreux cas d'étude montrant ainsi sa fiabilité dans de nombreux domaines d'applications.

Au sein du chapitre 4, le modèle numérique 2D et 3D développé au cours de la thèse a été présenté. Le choix s'est porté sur un modèle inédit de dérive de nappe d'hydrocarbures composé d'un module Lagrangien couplé à un module Eulérien. Le modèle Lagrangien décrit le mouvement de la nappe en surface en considérant celle-ci comme un ensemble de particules. Classiquement, l'action du vent sur ce mouvement est représentée par un coefficient de l'ordre de 3% dont l'origine est peu renseignée dans la littérature (cf. chapitre 2). Dans le modèle

développé dans cette thèse, une valeur de 3,6% a été déterminée théoriquement (cf. chapitre 4). D'autres phénomènes physiques, tels que la convection, la diffusion, la dissolution, l'étalement, l'évaporation, l'échouage et le relargage ont été mis en oeuvre dans ce modèle. L'ajout d'un modèle d'échouage et relargage est nécessaire dans les eaux continentales pour la prédiction de la distribution de l'hydrocarbure dans l'eau et sur les berges. Dans la colonne d'eau, le processus de dissolution, ayant des conséquences importantes du point de vue de la toxicité, a été traité avec soin bien qu'il ne concerne qu'un très faible volume d'hydrocarbure. En effet, les HAP, composés solubles, sont les substances les plus toxiques et ont un fort impact écologique. Afin de suivre l'évolution de ces composés dissous, un modèle Eulérien de suivi d'un traceur a été adopté, la quantité de traceur dépendant directement de la masse dissoute des particules lagrangiennes. Ce phénomène de dissolution est contrebalancé par la volatilisation. Ce processus, pris en compte ici, est souvent considéré comme négligeable dans les autres modèles. Il confirme l'absence des composés les plus volatils quelques heures après la pollution.

Afin de prendre en compte les différents types d'hydrocarbures (raffinés lourds et légers) dans le modèle, les coefficients de transfert de masse de volatilisation et de dissolution ont été calibrés à partir des essais de caractérisation des hydrocarbures effectués au sein du projet MIGR'HYCAR (cf. chapitre 5). Les courbes de distillation issues de la caractérisation de ces différents hydrocarbures ont permis d'adopter une approche pseudo-composante pour les modèles de dissolution et d'évaporation. L'avantage de cette approche est d'avoir une meilleure représentation de ces phénomènes, ce qui donne un modèle plus prédictif.

Afin d'apprécier la capacité du module à traiter des cas réels, et de disposer d'éléments sur sa validation dans son ensemble, il a été validé en simulant des cas expérimentaux ainsi que des situations réelles pour lesquelles des mesures ou des observations de dérives de nappes étaient disponibles (cf. chapitre 6 pour le modèle 2D et chapitre 7 pour le modèle 3D).

Dans le chapitre 6, le modèle développé en 2D a été validé sur différents cas. En effet, en présentant des résultats numériques très proches des observations, le modèle Lagrangien de transport de la nappe a été validé sur l'accident de l'Erika survenu en décembre 1999. Le modèle de diffusion stochastique a été vérifié à l'aide d'un cas théorique comportant une solution analytique, de même que les algorithmes des processus de vieillissement, d'étalement, d'évaporation et de dissolution ont été vérifiés de manière indépendante. Les expériences en canal d'essais réalisées au sein du projet MIGR'HYCAR (cf. chapitre 5) ont permis la validation des algorithmes de dissolution et de volatilisation.

Dans le chapitre 7, le modèle développé en 3D a été validé sur le cas de l'"Happy Bride". Suite à la collision de ce navire transporteur de gaz de pétrole liquéfié (GPL) avec un butanier, une brèche dans une de ses soutes a laissé échapper 60 tonnes de fioul lourd dans l'estuaire de la Loire. De par la dynamique complexe des estuaires, la modélisation 3D est apparue comme le moyen le plus adapté dans ces zones où l'hydrodynamique est déterminée par l'amplitude de la marée, le débit fluvial, la salinité et les conditions météorologiques. Les résultats obtenus ont démontré la pertinence du modèle dans des applications industrielles.

8.2 Perspectives

Comme on l’aura vu tout au long de ce mémoire, appréhender une physique et une chimie complexes tout en gardant l’objectif d’un produit fini opérationnel a nécessité une sélection des phénomènes prépondérants, ainsi que des choix stratégiques de modélisation. Le modèle sera intégré au système TELEMAC et pourra donc, d’une part être soumis à l’épreuve des faits, y compris par d’autres équipes, et d’autre part bénéficier d’une maintenance évolutive. Parmi les sujets qui auraient mérité une plus longue attention ou pour lesquels il existe d’ores et déjà des pistes d’amélioration que le manque de temps n’a pas permis d’explorer, nous listons ci-après ceux qui paraissent les plus pertinents.

8.2.1 Perspectives d’amélioration du modèle existant

i Amélioration de la mise en donnée du modèle numérique

Au chapitre 5, la mise en donnée du modèle numérique a été présentée, notamment la détermination des coefficients de transport de masse de la dissolution et de la volatilisation des HAP. La méthode de résolution choisie est basée sur une identification des paramètres à partir des cinétiques chimiques du projet MIGR’HYCAR. Le phénomène d’évaporation n’est pas pris en compte lors de la résolution. Pour une meilleure détermination de ces coefficients de transfert, deux axes d’améliorations peuvent être envisagés :

- des expériences simplifiées permettant une analyse indépendante de chaque phénomène,
- une programmation plus détaillée pour déterminer ces coefficients en tenant compte de chaque phénomène en présence.

ii Etalement

La plupart des algorithmes pour décrire le processus d’étalement sont actuellement basés sur la théorie de [Fay \(1971\)](#) ou des approches analogues ([Vos, 2005](#)). Ce type de description ne rend pas bien compte du comportement d’étalement différent entre un hydrocarbure de viscosité importante et un hydrocarbure de viscosité cinématique proche de l’eau. En effet, la paramétrisation du frottement utilisée par [Fay \(1971\)](#) fait intervenir la viscosité moléculaire de l’eau et non celle de l’hydrocarbure déversé. Pour cette raison, le domaine de validité de ce modèle est restreint aux déversements en eaux calmes et pour un nombre limité d’hydrocarbures, avec un certain intervalle de viscosité. Au cours de la thèse, un nouveau modèle d’étalement a été proposé. Il fait intervenir la viscosité de l’hydrocarbure déversé et nécessiterait des compléments de validation car il existe peu de données pour sa validation. De plus, la validité de ces modèles lorsque l’écoulement est turbulent reste à vérifier. A l’heure actuelle, l’étalement est le phénomène physique le plus difficile à modéliser dans les modèles de dérive de nappe d’hydrocarbures. Il serait utile d’établir des expérimentations en conditions contrôlées afin d’établir de nouveaux modèles pour ce processus.

iii Validation du modèle numérique

Au cours de cette thèse, la mise en donnée et la validation du modèle numérique ont été effectuées à partir des expérimentations réalisées par le projet MIGR'HYCAR. Les produits étudiés au cours de ces expériences sont tous des produits commerciaux comportant un nombre important de composés conduisant à des incertitudes importantes lors des expérimentations. De plus, de par la complexité de ce type de produit, il est nécessaire d'effectuer des hypothèses pour la mise en donnée des modèles numériques. Par conséquent, afin d'évaluer ce qui est susceptible de se produire lors d'un déversement, il est nécessaire de faire des expériences moins complexes en travaillant avec des hydrocarbures modèles composés de peu de constituants, limitant ainsi les sources d'incertitudes.

iv Estimation des incertitudes du modèle numérique

Maintenant que le modèle numérique est construit, il est nécessaire d'élaborer des méthodes d'analyse des incertitudes induites par la modélisation, les mesures, la caractérisation de la nappe à suivre, des conditions hydro-météorologiques. La méthode préconisée à ce stade est celle de Monte-Carlo, mais la possibilité d'exploiter au moins en partie une approche de type "logique floue", notamment sur la caractérisation physico-chimique des hydrocarbures peut aussi être envisagée. De plus, ces méthodes et outils d'évaluation des incertitudes permettraient d'élaborer un indicateur pour l'évaluation du risque d'échouage en espace et en temps.

8.2.2 Perspectives opérationnelles

i Développement d'une interface utilisateur

Dans le projet MIGR'HYCAR, une interface conviviale permettant de piloter, via TELEMAC, le modèle numérique présenté dans ce mémoire, est développée par Veolia Environnement Recherche et Innovation (VERI) (cf. figure 8.1). Cette interface de modélisation a pour but une mise en oeuvre simple du programme dans un contexte de crise, et doit rassembler toutes les informations utiles afin que l'utilisateur puisse prendre les mesures adéquates. En effet, l'interface fournira aux exploitants, après identification d'une pollution, une synthèse claire des risques attendus en une page, permettant de communiquer avec les autorités locales et les intervenants. En fin d'alerte, l'interface permettra de rassembler toutes les informations utiles dans un rapport de synthèse (description de l'épisode, enquête de terrain, actions entreprises, résultats d'analyse,...). Ces rapports seront archivés dans une base de données.

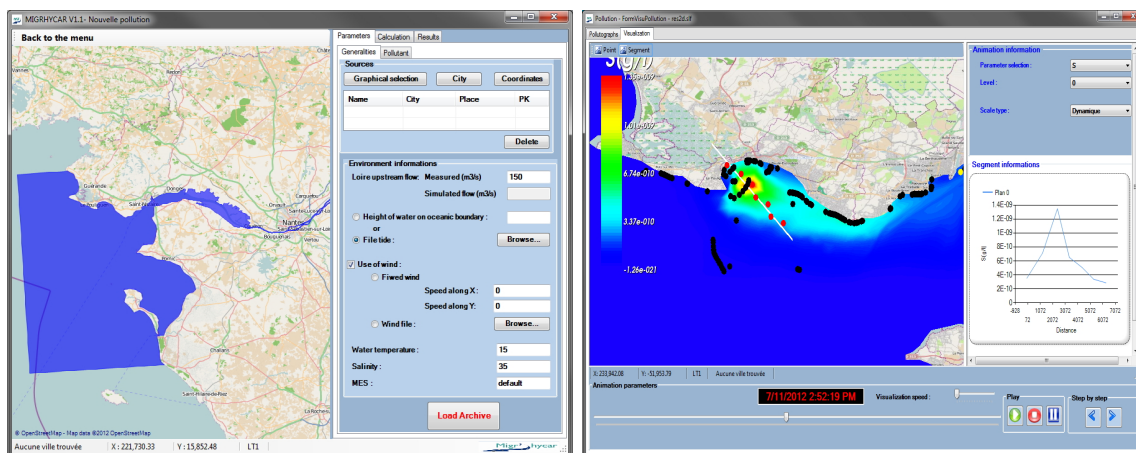


Figure 8.1: Fenêtres de visualisation de l'interface

ii Optimisation du temps de calcul

Un des objectifs du projet MIGR'HYCAR est la réalisation d'un système complet d'alerte et de gestion de crise. Dès lors qu'on parle de système opérationnel, l'optimisation et le temps de réponse du modèle sont des aspects importants à considérer. Le temps de calcul du modèle 2D, dans le cas de l'accident de l'Erika, est de 20 heures de calcul pour simuler un mois de temps physique. En 3D, le temps de calcul augmente de manière significative, dans le cas du Happy Bride, un jour de temps physique est simulé en 9 heures de calcul.

Pour devenir un outil d'aide à la décision et à la gestion de la ressource en eau en situation de crise, le temps de calcul du modèle doit être diminué. Il est donc envisagé par la suite de paralléliser le code de calcul afin de donner des temps de réponse plus courts. Tout le système TELEMAC fonctionnant déjà en parallélisme avec décomposition de domaines, le travail devrait se limiter à la gestion des particules représentant les nappes. En effet, chaque processeur devra suivre les particules de son sous-domaine, transmettre les informations sur celles qui le quittent et intégrer celles qui arrivent.

8.2.3 Perspectives offertes par le système TELEMAC

TELEMAC peut être utilisé pour une large gamme de phénomènes, depuis les tourbillons à l'arrière des piles de ponts jusqu'au transport de polluants dans des zones côtières étendues. Ce système comprend notamment des modules de transport de sédiments (SISYPHE), d'états de mer (TOMAWAC) et d'agitation en zone côtière et portuaire (ARTEMIS) (cf. chapitre 3).

i Extension du modèle aux pollutions maritimes

Pour étendre le modèle développé aux pollutions intervenant en milieu maritime, l'effet de la houle sur la dynamique de la nappe d'hydrocarbures doit être pris en compte par une modélisation intégrée des forçages hydrodynamiques (houle, courants de houle et de marée). Pour ce faire, le module de simulation TOMAWAC peut être mis en oeuvre avec le code de

calcul TELEMAC. Ce module permet le calcul de la propagation spectrale des états de mer en tenant compte des principaux processus physiques affectant la houle (réfraction, déferlement, apports dus au vent, interaction avec les courants,...).

ii Interaction des hydrocarbures avec les sédiments

Les eaux continentales sont des eaux de faible profondeur généralement soumises à de forts courants. Le mélange vertical résultant de ces courants peut causer le départ de pétrole de la surface de la nappe. Celui-ci sera alors dispersé dans la colonne d'eau sous forme de gouttelettes suspendues. L'adsorption des gouttes d'hydrocarbures sur des particules de sédiments en suspension peut provoquer la sédimentation sur le fond d'une certaine quantité de pétrole. Dans le système TELEMAC, le modèle SISYPHE utilise les calculs hydrodynamiques réalisés au préalable par TELEMAC-2D ou 3D pour résoudre les équations de transport des sédiments cohésifs (vases, limons,...) et non cohésifs (sables, graviers). Le transport sédimentaire est décomposé selon deux contributions : l'une liée au charriage des sédiments près du fond et l'autre représentant la part de sédiment remise en suspension et convectée par l'écoulement. Le dépôt des sédiments sur le fond et leur remise en suspension après érosion sont représentés. Ainsi, en couplant le modèle de dérive de nappe d'hydrocarbures intégré au sein de TELEMAC-2D ou 3D avec le modèle SISYPHE, le processus de sédimentation des gouttes d'hydrocarbures intervenant au cours de pollution pourra être modélisé.

Pour bien faire,
mille jours ne sont pas suffisants,
pour faire mal,
un jour suffit amplement.
(Proverbe chinois)

Publications et communications durant la thèse

A. Article de revues internationales avec comité de lecture :

- C. Goeury, J.-M. Hervouet, I. Baudin-Bizien, and F. Thouvenel. A Lagrangian/Eulerian oil spill model for continental waters. *Journal of Hydraulic Research*, (soumis en mai 2012).

B. Communications de conférences internationales avec actes et comité de lecture :

- C. Goeury, J.-M. Hervouet, M. Benoit, I. Baudin-Bizien, and D. Fangeat. Numerical modelling of oil spill drifts for management of risks on continental waters. *Water Pollution XI, WIT press*, 11-13 May 2011, Orlando (Etats-Unis).
- C. Goeury, J.-M. Hervouet, I. Baudin-Bizien, and F. Thouvenel. Numerical modelling of oil spill in inland waters. *Proceedings of the XVIIIth Telemac & Mascaret User Club*, 19-21 October 2011, Chatou (France).
- C. Goeury, J.-M. Hervouet, O. Bertrand, R. Walther, and V. Gouriou. 3-D oil spill model : application to the “Happy Bride” accident *Proceedings of SimHydro 2012*, 12-14 September 2012, Nice (France).
- C. Goeury, J.-M. Hervouet, O. Bertrand, R. Walther, I. Baudin-Bizien, F. Thouvenel, J. Mazzella. An oil spill model for inland waters applied to the “Happy Bride” accident. *Proceedings of XIXth Telemac & Mascaret User Club*, 17-19 October 2012, Oxford (Angleterre).

C. Poster de conférences internationales avec actes :

- C. Goeury, J.-M. Hervouet, M. Benoit, I. Baudin-Bizien, D. Fangeat, and O. Bertrand.

Annexe A. Publications et communications durant la thèse

Numerical modelling of oil spill drifts for operational management of risks in continental waters. *Proceedings of the International Oil Spill Conference (IOSC)*, 23-26 May 2011, Portland (Etats-Unis).

Introduction aux méthodes stochastiques

Cette annexe introduit les concepts de base des méthodes stochastiques utilisées au cours de la thèse. Ce chapitre représente une compilation des informations recueillies dans les cours de [Aslangul \(2005\)](#) et de [Martin \(2001\)](#).

B.1 Equation maîtresse et équation de Fokker-Planck

B.1.1 Probabilité absolue et conditionnelle

Soit une variable aléatoire y susceptible de prendre des valeurs discrètes $\{y_n\} \equiv Y$. Effectuons une succession de tirages aux instants $t_1 < t_2 < t_3 < \dots < t_n$ produisant successivement les valeurs $y_1, y_2, \dots, y_n$. La suite de ces valeurs obtenues aux différents instants constitue une réalisation du processus stochastique y_t . Un processus stochastique est défini comme une dynamique dont les événements successifs sont donnés par une loi de probabilité. Il est alors nécessaire d'introduire les notions suivantes :

- $P_1(y_1, t_1)$, probabilité de trouver la valeur y_1 à l'instant t_1
- $P_2(y_1, t_1; y_2, t_2)$, probabilité conjointe de trouver la valeur y_1 à l'instant t_1 et la valeur y_2 à l'instant t_2 avec $t_1 < t_2$

Un processus aléatoire est complètement déterminé si on connaît toutes les probabilités $P_n(y_1, t_1, y_2, t_2, \dots, y_n, t_n)$ pour $n = 1, 2, 3, \dots$. Ces quantités sont positives et normalisées à l'unité :

$$P_n(y_1, t_1, y_2, t_2, \dots, y_n, t_n) > 0, \text{ et } \sum_{y_1 \in Y} \sum_{y_2 \in Y} \dots \sum_{y_n \in Y} P_n(y_1, t_1, y_2, t_2, \dots, y_n, t_n) = 1 \quad (\text{B.1})$$

Si toutes les possibilités de résultats sont sommées à l'instant t_k , la probabilité de la suite $(y_1, \dots, y_{k-1}, y_{k+1}, \dots, y_n)$ aux instants antérieurs sera retrouvée, d'où la relation :

$$\sum_{y_k \in Y} P_n(y_1, t_1, y_2, t_2, \dots, y_n, t_n) = P_{n-1}(y_1, t_1, \dots, y_{k-1}, t_{k-1}, y_{k+1}, t_{k+1}, \dots, y_n, t_n) \quad (\text{B.2})$$

De plus, si toutes les probabilités $\{P_n\}$ sont connues, il est possible de déterminer les grandeurs moyennes relatives à ce processus, par exemple, pour une fonction $g(y)$ quelconque, on trouve la valeur moyenne, à l'instant t_1 , en calculant :

$$\sum_{y_1 \in Y} P_1(y_1, t_1) g(y_1) = \langle g(y) \rangle(t_1) \quad (\text{B.3})$$

Ces notions sont également valables en continu :

$$\int_{y_k \in Y} P_n(y_1, t_1, y_2, t_2, \dots, y_n, t_n) = P_{n-1}(y_1, t_1, \dots, y_{k-1}, t_{k-1}, y_{k+1}, t_{k+1}, \dots, y_n, t_n) \quad (\text{B.4})$$

$$\int_{y_1 \in Y} \int_{y_2 \in Y} \dots \int_{y_n \in Y} P_n(y_1, t_1, y_2, t_2, \dots, y_n, t_n) = 1 \quad (\text{B.5})$$

A partir de $P_1(y_1, t_1)$ et de $P_2(y_1, t_1; y_2, t_2)$, une probabilité conditionnelle $W_1(y_2, t_2|y_1, t_1)$ peut être introduite. La probabilité conditionnelle désigne la probabilité pour que l'on ait y_2 à l'instant t_2 sachant que l'on a eu y_1 à l'instant t_1 . Elle est définie par la relation suivante :

$$P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) = W_1(y_2, t_2|y_1, t_1) P_1(y_1, t_1) \quad (\text{B.6})$$

W_1 peut être considéré comme une probabilité de transition : c'est la probabilité pour que le système qui est parvenu à y_1 en t_1 , aille à y_2 en t_2 . De plus, si l'expression précédente est sommée sur toutes les valeurs possibles y_2 , la relation suivante est obtenue :

$$\sum_{y_2 \in Y} P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) = P_1(y_1, t_1) = \sum_{y_2 \in Y} W_1(y_2, t_2|y_1, t_1) P_1(y_1, t_1) \quad (\text{B.7})$$

$$\Rightarrow \sum_{y_2 \in Y} W_1(y_2, t_2|y_1, t_1) = 1 \quad (\text{B.8})$$

Les probabilités conditionnelles sont donc normalisées. Par ailleurs, il est possible d'écrire par définition :

$$P_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) = W_2(y_3, t_3|y_1, t_1, y_2, t_2) W_1(y_2, t_2|y_1, t_1) P_1(y_1, t_1) \quad (\text{B.9})$$

En sommant sur toutes les possibilités à l'instant t_2 , l'équation (B.9) :

$$P_2(y_1, t_1; y_3, t_3) = \left[\sum_{y_2 \in Y} W_2(y_3, t_3|y_1, t_1, y_2, t_2) W_1(y_2, t_2|y_1, t_1) \right] P_1(y_1, t_1) \quad (\text{B.10})$$

$$\text{avec B.6} \Rightarrow W_1(y_3, t_3|y_1, t_1)P_1(y_1, t_1) = \left[\sum_{y_2 \in Y} W_2(y_3, t_3|y_1, t_1, y_2, t_2)W_1(y_2, t_2|y_1, t_1) \right] P_1(y_1, t_1) \quad (\text{B.11})$$

$$\Rightarrow W_1(y_3, t_3|y_1, t_1) = \sum_{y_2 \in Y} W_2(y_3, t_3|y_1, t_1, y_2, t_2)W_1(y_2, t_2|y_1, t_1) \text{ avec } (t_1 < t_2 < t_3) \quad (\text{B.12})$$

B.1.2 Processus de Markov

Un processus stochastique est dit de Markov s'il satisfait à la relation de définition suivante :

$$W_n(y_{n+1}, t_{n+1}|y_1, t_1, \dots, y_n, t_n) = W_1(y_{n+1}, t_{n+1}|y_n, t_n) \quad (\text{B.13})$$

Cette relation signifie que le système, une fois arrivé en y_n à l'instant t_n après être passé successivement en $y_1, \dots, y_n$, évolue en y_{n+1} à l'instant suivant t_{n+1} d'une façon qui ne dépend que de y_n . L'évolution à partir d'un instant donné ne dépend explicitement que de la situation de cet instant et non de l'histoire antérieure. Si on écrit la probabilité P_n pour un processus markovien en fonction de ces probabilités conditionnelles, il n'apparaît plus par construction que le produit des probabilités conditionnelles d'ordre 1, W_1 :

$$P_n(y_1, t_1, y_2, t_2, \dots, y_n, t_n) = [\prod_{p=1}^{n-1} W_1(y_{p+1}, t_{p+1}|y_p, t_p)] \quad (\text{B.14})$$

Pour un processus de Markov, il n'y a donc que deux quantités fondamentales desquelles tout est déductible :

- la probabilité P_1
- la probabilité conditionnelle W_1

Pour un processus de Markov, l'équation (B.12) se récrit sous la forme suivante :

$$W(y_2, t_2|y_1, t_1) = \sum_{y' \in Y} W(y_2, t_2|y_1, t_1, y', t')W(y', t'|y_1, t_1) \text{ avec } (t_1 < t' < t_2) \quad (\text{B.15})$$

ou, dans le cas d'une variable aléatoire prenant des valeurs continues :

$$W(y_2, t_2|y_1, t_1) = \int_{y' \in Y} W(y_2, t_2|y_1, t_1, y', t')W(y', t'|y_1, t_1) \text{ avec } (t_1 < t' < t_2) \quad (\text{B.16})$$

Que ce soit sous forme discrète ou sous forme continue, cette équation est l'équation dite de "Smoluchowski-Chapman-Kolmogorov".

B.2 Equation maîtresse

Soit un système dont on sait qu'à l'instant t_0 , une propriété donnée prend la valeur y avec la densité de probabilité $\phi_0(y)$, cette fonction contient l'information complète initiale

Annexe B. Introduction aux méthodes stochastiques

sur le système. On se place sous l'hypothèse markovienne. La répartition $p(y, t)$ s'obtient en sommant, à partir de l'état initial, sur toutes les valeurs possibles au départ, on a :

$$p(y, t) = \sum_{y_0 \in Y} W(y, t|y_0, t_0)p(y_0, t_0) \quad (\text{B.17})$$

$$\Rightarrow p(y, t + \Delta t) = \sum_{y_0 \in Y} W(y, t + \Delta t|y_0, t_0)p(y_0, t_0) \quad (\text{B.18})$$

L'hypothèse markovienne va permettre de relier directement $p(y, t + \Delta t)$ à $p(y, t)$ en utilisant la relation de Smoluchowski-Chapman-Kolmogorov (B.15), en choisissant t comme instant intermédiaire où la valeur y' est réalisée :

$$W(y, t + \Delta t|y_0, t_0) = \sum_{y' \in Y} W(y, t + \Delta t|y', t)W(y', t|y_0, t_0) \text{ avec } (t_0 < t < t + \Delta t) \quad (\text{B.19})$$

En réinjectant cette relation dans l'équation (B.18), la relation suivante est obtenue :

$$p(y, t + \Delta t) = \sum_{y_0 \in Y} \sum_{y' \in Y} W(y, t + \Delta t|y', t)W(y', t|y_0, t_0)p(y_0, t_0) \quad (\text{B.20})$$

$$\Rightarrow p(y, t + \Delta t) = \sum_{y' \in Y} W(y, t + \Delta t|y', t)p(y', t) \text{ avec } p(y, t = 0) = \phi_0(y) \quad (\text{B.21})$$

Cette équation établit un lien direct entre $p(y', t)$ et $p(y, t + \Delta t)$ pour un processus parti de $\phi_0(y)$ à l'instant t_0 , mais sans mention explicite de l'état initial.

Considérons les variables y_n représentant les valeurs discrètes que peut prendre y et on pose : $p(y_n, t) = p_n(t)$ et $W(y_n, t + \Delta t|y_m, t) \equiv W_{nm}(t, \Delta t)$

La relation de normalisation des probabilités conditionnelles donne :

$$\sum_n W_{nm}(t, \Delta t) = 1 \Leftrightarrow \sum_m W_{mn}(t, \Delta t) = 1 \quad (\text{B.22})$$

L'équation (B.21) devient alors :

$$p_n(t + \Delta t) = \sum_m W_{nm}(t, \Delta t)p_m(t) \quad (\text{B.23})$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\Delta t} [p_n(t + \Delta t) - p_n(t)] = \frac{1}{\Delta t} \left[\sum_m W_{nm}(t, \Delta t)p_m(t) - p_n(t) \right] \quad (\text{B.24})$$

En utilisant la relation de normalisation $p_n(t) = \sum_m W_{mn}(t, \Delta t)p_n(t)$ et en posant $w'_{nn}(t)$ la limite du rapport $W_{nn'}(t, \Delta t)/\Delta t$ lorsque δt tend vers 0, l'équation (B.24) devient :

$$\frac{dp_n}{dt} = \sum_m w_{nm}p_m(t) - \sum_m w_{mn}p_n(t) \quad (\text{B.25})$$

Cette équation est une équation de conservation, en effet, la variation du nombre de systèmes à l'état n est due à l'arrivée de systèmes provenant de l'état m (premier membre

de droite de l'équation) et au départ de systèmes se situant initialement à l'état n (second membre de droite de l'équation). La version continue de cette équation est la suivante :

$$\frac{\partial p(y, t)}{\partial t} = \int [W(y, y')p(y', t) - W(y', y)p(y, t)]dy' \quad (\text{B.26})$$

B.2.1 Equation de Fokker Planck

En reprenant l'équation d'évolution d'un processus de Markov (B.21), c'est-à-dire :

$$p(y, t + \Delta t) = \int_{y' \in Y} W(y, t + \Delta t | y', t) p(y', t) dy' \quad (\text{B.27})$$

Par la suite, l'approximation d'un processus à dynamique lente est effectuée, ce qui signifie que les variations de y (Δy) restent très petites (les fluctuations restent au voisinage de y). De plus en admettant que pour un écart $|y' - y|$ donné, la fonction $W(y, t + \Delta t | y - \Delta y, t)$ varie lentement par rapport à y , il est possible de faire des développements limités. En posant $\Delta y = y - y'$, l'équation (B.27) peut se récrire sous la forme :

$$p(y, t + \Delta t) = \int W(y, t + \Delta t | y - \Delta y, t) p(y - \Delta y, t) d\Delta y \quad (\text{B.28})$$

Le développement de Taylor de la fonction $W(y, t + \Delta t | y - \Delta y, t) p(y - \Delta y, t)$ au point $y + \Delta y$ s'écrit :

$$\begin{aligned} W(y, t + \Delta t | y - \Delta y, t) p(y - \Delta y, t) = & W(y + \Delta y, t + \Delta t | y, t) p(y, t) \\ & + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n!} (-\Delta y)^n \frac{\partial^n}{\partial y^n} W(y + \Delta y, t + \Delta t | y, t) p(y, t) \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

En réinjectant cette expression (Eq. (B.29)) dans l'équation (B.28), la formulation suivante est obtenue :

$$\begin{aligned} p(y, t + \Delta t) = & \int W(y + \Delta y, t + \Delta t | y, t) p(y, t) \\ & + \int \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n!} (-\Delta y)^n \frac{\partial^n}{\partial y^n} W(y + \Delta y, t + \Delta t | y, t) p(y, t) d\Delta y \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow p(y, t + \Delta t) = & p(y, t) \\ & + \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial y^n} \left\{ \left[\frac{1}{n!} \int (\Delta y)^n W(y + \Delta y, t + \Delta t | y, t) \right] p(y, t) \right\} d\Delta y \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{p(y, t + \Delta t) - p(y, t)}{\Delta t} = & \frac{1}{\Delta t} \\ & \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial y^n} \left\{ \left[\frac{1}{n!} \int (\Delta y)^n W(y + \Delta y, t + \Delta t | y, t) \right] p(y, t) \right\} d\Delta y \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

En prenant alors la limite lorsque $\Delta t \rightarrow 0$ et en posant :

$$M_n(y) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{n!} \frac{1}{\Delta t} \int (\Delta y)^n W(y + \Delta y, t + \Delta t | y, t) d\Delta y \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{n!} \frac{1}{\Delta t} \langle (\Delta y)^n \rangle \quad (\text{B.33})$$

L'équation (B.32) devient :

$$\frac{\partial}{\partial t} p(y, t) = \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial y^n} \{ M_n(y) p(y, t) \} \quad (\text{B.34})$$

Pour une diffusion ordinaire avec de la dérive et de la diffusion, l'écart moyen $\langle \Delta y \rangle$ (représentant la dérive) et l'écart quadratique $\langle (\Delta y)^2 \rangle$ (représentant la diffusion) croissent avec le temps de sorte qu'ils sont tous les deux proportionnels à Δt . Il en découle que les deux premiers moments $M_n(y)$ ne sont pas nuls. Si la dynamique est lente, ce qui est l'hypothèse effectuée, les moments d'ordre supérieur à 2 sont nuls, ce qui mène à l'équation de Fokker-Planck :

$$\frac{\partial}{\partial t} p(y, t) = - \frac{\partial}{\partial y} \{ M_1(y) p(y, t) \} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{ M_2(y) p(y, t) \} \quad (\text{B.35})$$

Cette équation est valide pour tout processus markovien à diffusion lente. Dans le cas d'une particule brownienne, ceci suppose que les petites particules du bain produisent des collisions multiples où le transfert d'impulsion reste petit. De plus cette équation est bien une équation de bilan en effet, si on pose le courant J tel que :

$$J(y, t) = M_1(y) p(y, t) - \frac{\partial}{\partial y} \{ M_2(y) p(y, t) \} \quad (\text{B.36})$$

L'équation (B.35) s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} p(y, t) + \text{div} J(y, t) = 0 \quad (\text{B.37})$$

Le premier terme du courant $J(y, t)$ (Eq. (B.36)) donne la dérive. Le second terme est le courant de diffusion. L'équation de Fokker Planck est une équation aux dérivées partielles linéaire dont la solution unique sera fixée par la condition initiale $p(y, t = 0) = p_0(y)$.

B.3 Lien entre les équations de Langevin et de Fokker Planck

On considère l'équation de Langevin sous la forme générale suivante :

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t) + g(y, t)\eta(t) \quad (\text{B.38})$$

Dans cette équation $\eta(t)$ est la fonction aléatoire qui est considérée comme étant un bruit blanc gaussien, c'est-à-dire :

$$\langle \eta(t) \rangle = 0 \text{ et } \langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 2D\delta(t - t') \quad (\text{B.39})$$

Par la suite, la fonction du processus de Wiener $W(t)$ associée au bruit blanc gaussien est considérée. Son expression est :

$$W(t) = \int_0^t \eta(t') dt' \quad (\text{B.40})$$

Cette fonction $W(t)$ possède les propriétés suivantes :

$$\langle W(t) - W(t') \rangle = 0 \text{ et } \langle (W(t) - W(t'))^2 \rangle = t - t' \quad (\text{B.41})$$

La quantité $W(t)$ peut être intégrée mais non différenciée :

$$\frac{dW(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{W(t + \Delta t) - W(t)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta W}{\Delta t} \quad (\text{B.42})$$

Compte tenu de la définition du bruit gaussien, le calcul de cette probabilité peut s'effectuer :

$$\Delta W = \int_{-v\Delta t}^{+v\Delta t} \exp\left[-\frac{(\Delta W)^2}{4D\Delta t}\right] d\Delta W = \text{erf}\left(\sqrt{\frac{v\Delta t}{2D}}\right) \quad (\text{B.43})$$

$$\text{avec } \text{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-z^2) dz \quad (\text{B.44})$$

L'équation (B.43) montre que ΔW tend vers 0 lorsque Δt tend vers 0, donc il n'y a pas de valeur finie possible pour la dérivée. Il n'est alors pas possible *a priori* d'utiliser la quantité $dW(t) = \eta(t)dt$. Or, cette quantité apparaît dans l'intégration de l'équation (B.38) :

$$y(t) - y(0) = \int_0^t f(y, t') dt' + \int_0^t g(y, t') \eta(t') dt' \quad (\text{B.45})$$

Pour définir la deuxième intégrale du membre de droite, il est alors nécessaire d'utiliser les intégrales dites stochastiques.

Une intégrale stochastique se présente sous la forme :

$$\int_{t_0}^t f(t) dW(t) \quad (\text{B.46})$$

Afin de calculer cette intégrale, celle-ci est discrétisée sur l'intervalle de temps :

Annexe B. Introduction aux méthodes stochastiques

$$S_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n f(\tau_i)(W(t_i) - W(t_{i-1})) \text{ avec } \tau_i \in [t_i, t_{i-1}] \quad (\text{B.47})$$

En posant $f(\tau_i) = W(\tau_i)$ et avec les propriétés précédentes (Eq. (B.41)), il est possible d'écrire :

$$\langle S_n \rangle = \lim_{n \rightarrow +\infty} \sum_{i=1}^n \tau_i - t_{i-1} \quad (\text{B.48})$$

$$\text{avec } \tau_i = \alpha t_i + (1 - \alpha)t_{i-1} \Rightarrow \langle S_n \rangle = \alpha(t - t_0) \quad (\text{B.49})$$

Pour définir la valeur de l'intégrale stochastique, il est nécessaire de choisir le point intermédiaire τ_i et le choix d'Ito est de prendre $\alpha = 0$ donnant alors :

$$\int_{t_0}^t f(t) dW(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n f(t_{i-1})(W(t_i) - W(t_{i-1})) \quad (\text{B.50})$$

Maintenant que l'intégration de l'équation de Langevin (B.38) est possible, nous allons regarder comment relier cette équation à l'équation de Fokker Planck (Eq. B.35).

Soit une fonction $\phi(y)$ développée en série telle que :

$$d\phi = \partial_y \phi dy + \frac{1}{2} \partial_{yy} \phi (dy)^2 + \dots \quad (\text{B.51})$$

En remplaçant dans l'expression précédente dy par sa formulation donnée par l'équation (B.38), il est possible d'écrire :

$$d\phi = \partial_y \phi (f(y, t) dt + g(y, t) dW(t)) + \frac{1}{2} \partial_{yy} \phi ((f(y, t) dt + g(y, t) dW(t))^2) + o(dt) \quad (\text{B.52})$$

En négligeant les termes d'ordre supérieur à 1, et sachant que $dW(t)$ peut être regardé comme étant d'ordre $\frac{1}{2}$ en temps, l'équation précédente se simplifie sous la forme :

$$d\phi = dt \left(f(y, t) \partial_y \phi + \frac{g^2(y, t)}{2} \partial_{yy} \phi \right) + g(y, t) \partial_y \phi dW(t) \quad (\text{B.53})$$

Sachant que :

$$\left\langle \frac{d\phi}{dt} \right\rangle = \int \phi(h) \partial_t p(h, t | h_0, t_0) dh \quad (\text{B.54})$$

et

$$\left\langle \frac{d\phi}{dt} \right\rangle = \frac{\langle d\phi \rangle}{dt} = \langle f(y, t) \partial_y \phi + \frac{g^2(y, t)}{2} \partial_{yy} \phi \rangle \quad (\text{B.55})$$

Il est possible d'écrire :

$$\int \phi(y) \partial_t p(y, t | y_0, t_0) dy = \int \left[f(y, t) \partial_y \phi + \frac{g^2(y, t)}{2} \partial_{yy} \phi \right] p(y, t | y_0, t_0) dy \quad (\text{B.56})$$

B.3. Lien entre les équations de Langevin et de Fokker Planck

En intégrant par parties le terme à droite de l'égalité :

$$\int \phi(y) \partial_t p(y, t | y_0, t_0) dy = \left\{ [\phi p f] - \int \phi \partial_y (p f) \right\} + \frac{1}{2} \left\{ [\partial_y \phi (p g^2)] - \int \partial_y \phi \partial_y (p g^2) \right\} \quad (\text{B.57})$$

$$= - \int \phi \partial_y (p f) - \frac{1}{2} \int \partial_y \phi \partial_y (p g^2) \quad (\text{B.58})$$

$$= - \int \phi \partial_y (p f) + \frac{1}{2} \left\{ [-\phi \partial_y (p g^2)] + \int \phi \partial_{yy} (p g^2) \right\} \quad (\text{B.59})$$

$$= - \int \phi \partial_y (p f) + \frac{1}{2} \int \phi \partial_{yy} (p g^2) \quad (\text{B.60})$$

$$= \int dy \phi(y) \left\{ -\partial_y (p f) + \frac{1}{2} \partial_{yy} (p g^2) \right\} \quad (\text{B.61})$$

$$\partial_t p(y, t | y_0, t_0) = - \partial_y (p(y, t | y_0, t_0) f(y, t)) + \frac{1}{2} \partial_{yy} (p(y, t | y_0, t_0) g^2(y, t)) \quad (\text{B.62})$$

On retrouve ainsi, en partant de l'équation de Langevin (B.38), l'équation de Fokker Planck (B.35).

Capacité de retenue de l'hydrocarbure issu des marées noires

Certaines données issues des équipes de nettoyage des plages après d'importantes marées noires (SCAT) donnent des informations utiles au calcul de la capacité maximale de retenue des hydrocarbures pour différents types de berges, comme par exemple lors de la marée noire de l'Exxon Valdez en 1989 (cf. tableau C.1).

Type de berges	Profondeur d'infiltration (m)			Volume de sédiments mazoutés (m³)/Aire (m²)		
	maximum	moyen	écart type	maximum	moyen	écart type
pavé	1,270	0,077	0,131	1,1430	0,0617	0,1206
rocher	0,762	0,079	0,114	0,4115	0,0532	0,0811
roche	0,508	0,066	0,104	0,5029	0,0405	0,0815
galet	0,406	0,067	0,094	0,4064	0,0458	0,077
falaise	0,305	0,050	0,08	0,2438	0,0339	0,066
sable	0,305	0,035	0,069	0,2540	0,0132	0,0353
gravier	0,203	0,018	0,047	0,1828	0,0118	0,0347
vase	0,102	0,038	0,049	0,1016	0,0341	0,0584

Tableau C.1: Données recueillies lors de la marée noire de l'Exxon Valdez (1989) (*Schmidt Etkin et al., 2007*)

Une des données recueillies lors des marées noires est le volume de sédiment souillé par unité de surface ($m^3_{oil\text{sediment}}/m^2_{sediment}$). Cette donnée est importante pour estimer le volume d'hydrocarbure infiltré dans le substrat lors du phénomène d'échouage. Toutefois, le modèle pour décrire ce phénomène nécessite la connaissance de la capacité maximale de retenue de l'hydrocarbure qui doit être donnée en volume d'hydrocarbure par surface de sédiments

Annexe C. Capacité de retenue de l'hydrocarbure issu des marées noires

souillée ($m_{oil}^3/m_{sediment}^2$). Le volume de sédiments mazoutés doit donc être converti en volume d'hydrocarbure en calculant le volume des pores entre les sédiments (cf. figure C.1).

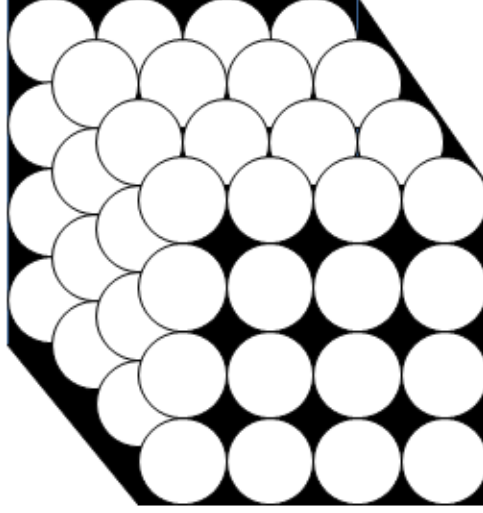


Figure C.1: Schéma d'un volume cubique de sédiments mazoutés

Le volume de sédiments étudié V_c correspond au volume du cube de côté a . Celui-ci contient des sédiments représentés par des sphères de rayon r .

Pour la suite du calcul, il est important de connaître le nombre de sédiments n_p dont est composé le pavé considéré :

$$n_p = \left(\frac{a}{2r}\right)^3 \quad (\text{C.1})$$

Le volume de pétrole contenu dans notre élément de volume V_c est alors déduit en retranchant à V_c le volume occupé par les sédiments :

$$V_{oil} = a^3 \left\{ 1 - \left(\frac{1}{2r}\right)^3 \left(\frac{4}{3}\pi r^3\right) \right\} \quad (\text{C.2})$$

$$\Rightarrow V_{oil} = a^3 \left\{ 1 - \left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{3}\pi\right) \right\} \quad (\text{C.3})$$

Ce qui donne un volume de $0,4764 m_{oil}^3/m_{substrat}^3 = 476,4 l_{oil}/m_{substrat}^3$. Toutefois, ce résultat ne correspond pas à la réalité. En effet, il est supposé que dans la plupart des cas seulement 10 à 20% de l'espace des pores du substrat sont remplis d'hydrocarbure, l'autre espace disponible étant rempli d'air et d'eau. Par conséquent, en supposant que l'espace disponible est de 20% de l'espace calculé précédemment, le volume de sédiments mazoutés figurant dans le tableau (C.1) est multiplié par 80 l/m^3 pour obtenir la capacité maximale de retenue d'hydrocarbure pour chaque type de berges. Les capacités maximales de retenue d'hydrocarbure ainsi déduites sont regroupées dans le tableau (C.2).

Type de berges	Volume d'hydrocarbures infiltré dans le substrat(m^3)/Aire (m^2)		
	maximum	moyen	écart type
falaise	0,0195	0,00272	0,00528
rocher	0,03292	0,00426	0,00648
roche	0,04024	0,00324	0,00652
pavé	0,09144	0,00494	0,00964
galet	0,03252	0,00366	0,00616
gravier	0,01462	0,00094	0,00278
sable	0,02032	0,00106	0,00282
vase	0,00812	0,00272	0,00468

Tableau C.2: *Données déduites des informations recueillies lors de la marée noire de l'Exxon Valdez (1989) : volume d'hydrocarbure infiltré dans le substrat par unité de surface (Schmidt Etkin et al., 2007)*

Modèle d'étalement de Maroihi *et al.* (1992)

Cette annexe présente la formulation proposée par Maroihi *et al.* (1992) pour décrire le phénomène d'étalement.

D.1 Mise en équation

L'évolution de l'épaisseur d'une nappe d'hydrocarbures peut être décrite par les équations de continuité et de quantité de mouvement de Saint-Venant :

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (e \vec{u}_o) = 0 \quad (\text{D.1})$$

$$\frac{\partial (e \vec{u}_o)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (e \vec{u}_o \vec{u}_o) = -e \vec{\nabla} \left(\frac{P_a}{\rho_o} + \Delta g e \right) + \frac{1}{\rho_o} \left(\vec{\tau}_w - K(\vec{u}_o - \vec{u}_c) + \sigma \vec{\nabla} \phi \right) \quad (\text{D.2})$$

où $\vec{u}_o$ est la vitesse de la nappe, P_a la pression atmosphérique, ρ_o la masse volumique de l'hydrocarbure, Δ une constante telle que $\Delta = \frac{\rho_e - \rho_o}{\rho_e}$, g la gravité, K le coefficient de frottement, $\vec{\tau}_w = K \vec{u}_w$ la contrainte du vent exercée sur la nappe, $\vec{u}_c$ la vitesse du courant et $\phi = \frac{r^2}{R^2}$ (avec r la distance au centre de la nappe et R son rayon).

En négligeant les forces d'inertie, en tirant de l'équation (D.2), le champ de vitesse $\vec{u}_o$ de la nappe en fonction des autres paramètres et en portant cette expression dans l'équation de continuité, la nouvelle équation portant sur l'épaisseur de la nappe est déterminée :

$$\frac{\partial (e)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\vec{u}_w + \vec{u}_c + \left(\frac{\sigma}{K} \right) \vec{\nabla} \phi \right) e \right) = \left(\frac{\rho_o \Delta g}{K} \right) \vec{\nabla} (e^2 \vec{\nabla} e) \quad (\text{D.3})$$

Dans le cas de vents calmes, l'advection associée au vent ($\vec{u}_w$) et aux courants ($\vec{u}_c$) est spatialement constante. De plus, en supposant en première approximation, une symétrie cylindrique de la nappe et en posant $\frac{\sigma}{K} = \mu$ et $\frac{\rho_o \Delta g}{K} = \lambda$, l'équation (D.3) s'écrit en coordonnées polaires :

$$\frac{\partial (e)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(2\mu \frac{r^2}{R^2} e \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda r e^2 \frac{\partial e}{\partial r} \right) \quad (\text{D.4})$$

D.2 Résolution

Maroihi *et al.* (1992) ont recherché une solution à l'équation précédente (Eq. D.4) sous la forme $e = BR^{-2}f(\eta)$ (où $\eta = r/R$ et B est une constante). Les termes de l'équation (D.4) s'écrivent alors :

$$\begin{aligned}\frac{\partial e}{\partial t} &= -2R^{-3}f(\eta)\frac{dR}{dt}B + BR^{-2}\frac{df}{d\eta}\frac{\partial \eta}{\partial t} \\ &= -R^{-3}B\left(2f(\eta)\frac{dR}{dt} + \eta\frac{df}{d\eta}\frac{dR}{dt}\right)\end{aligned}\quad (D.5)$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(2\mu\frac{r^2}{R^2}e\right) &= \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(2\mu\eta^2BR^{-2}f(\eta)) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \eta}(2\mu\eta^2BR^{-2}f(\eta))\frac{\partial \eta}{\partial r} \\ &= \frac{\eta}{r^2}\left(4\mu\eta BR^{-2}f(\eta) + 2\mu\eta^2BR^{-2}\frac{\partial f}{\partial \eta}\right) \\ &= 2\mu BR^{-4}\left(2f(\eta) + \eta\frac{\partial f}{\partial \eta}\right)\end{aligned}\quad (D.6)$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda re^2\frac{\partial e}{\partial r}\right) &= \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda re^2BR^{-2}\frac{df}{d\eta}\frac{\eta}{r}\right) \\ &= \lambda B^3R^{-6}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(f^2(\eta)\frac{df}{d\eta}\eta\right)\right) \\ &= \lambda B^3R^{-6}\left(2f(\eta)\frac{df}{d\eta}\frac{\eta^2}{r^2}\frac{df}{d\eta} + f^2(\eta)\frac{d^2f}{d\eta^2}\frac{\eta^2}{r^2} + f^2(\eta)\frac{df}{d\eta}\frac{\eta}{r^2}\right) \\ &= \lambda B^3R^{-8}\left(2f(\eta)\left(\frac{df}{d\eta}\right)^2 + f^2(\eta)\frac{d^2f}{d\eta^2} + \frac{1}{\eta}f^2(\eta)\frac{df}{d\eta}\right)\end{aligned}\quad (D.7)$$

En imposant alors la condition suivante :

$$\left(2f(\eta)\left(\frac{df}{d\eta}\right)^2 + f^2(\eta)\frac{d^2f}{d\eta^2} + \frac{1}{\eta}f^2(\eta)\frac{df}{d\eta}\right) = -\left(2f(\eta) + \eta\frac{\partial f}{\partial \eta}\right)\quad (D.8)$$

L'équation (D.4) devient :

$$BR^{-4}\left(2f(\eta) + \eta\frac{df}{d\eta}\right)\left(-R\frac{dR}{dt} + 2\mu + \lambda B^2R^{-4}\right) = 0\quad (D.9)$$

Par conséquent, la résolution de l'équation (D.4) par une solution s'écrivant sous la forme $e = BR^{-2}f(\eta)$ mène à résoudre le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \left(2f(\eta)\left(\frac{df}{d\eta}\right)^2 + f^2(\eta)\frac{d^2f}{d\eta^2} + \frac{1}{\eta}f^2(\eta)\frac{df}{d\eta}\right) = -\left(2f(\eta) + \eta\frac{\partial f}{\partial \eta}\right) & (1) \\ -R\frac{dR}{dt} + 2\mu + \lambda B^2R^{-4} = 0 & (2) \end{cases}\quad (D.10)$$

D.2.1 Résolution de l'équation (D.10.1)

$$\begin{aligned} \eta \left(2f(\eta) \left(\frac{df}{d\eta} \right)^2 + f^2(\eta) \frac{d^2f}{d\eta^2} + \frac{1}{\eta} f^2(\eta) \frac{df}{d\eta} \right) &= -\eta \left(2f(\eta) + \eta \frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \\ \frac{d}{d\eta} \left(\eta f^2(\eta) \frac{df}{d\eta} \right) &= -\frac{d}{d\eta} (\eta^2 f(\eta)) \\ \frac{d}{d\eta} \left(\eta f^2(\eta) \frac{df}{d\eta} + \eta^2 f(\eta) \right) &= 0 \end{aligned} \quad (D.11)$$

En intégrant cette dernière équation et en considérant la condition limite $f(1) = 0$, il est alors possible de déterminer la fonction f selon :

$$f(\eta) = \sqrt{1 - \eta^2} \quad (D.12)$$

Cette expression de la fonction f permet alors de déterminer la constante B , en effet, la conservation du volume V_o de la nappe d'hydrocarbure s'écrit :

$$\int_0^{2\pi} \int_0^R B R^{-2} f(\eta) r dr d\theta = V_o \Rightarrow B = \frac{3V_o}{2\pi} \quad (D.13)$$

D.2.2 Résolution de l'équation (D.10.2)

En considérant l'expression de l'aire de la nappe $A_o = \pi R^2$, l'expression (D.10.2) devient :

$$\frac{1}{2} \frac{dA_o}{\pi} = 2\mu \left(1 + \frac{\lambda B^2 \pi^2}{2\mu A_o^2} \right) dt \quad (D.14)$$

$$\Rightarrow \frac{dA_o}{1 + \frac{\lambda B^2 \pi^2}{2\mu A_o^2}} = 4\pi\mu dt \quad (D.15)$$

En posant $a^2 = \frac{2\mu}{\lambda B^2 \pi^2}$, il est possible d'écrire :

$$\frac{dA_o}{1 + \frac{1}{(aA_o)^2}} = 4\pi\mu dt \quad (D.16)$$

$$\frac{(aA_o)^2 dA_o}{(aA_o)^2 + 1} = dA_o - \frac{dA_o}{1 + (aA_o)^2} = 4\pi\mu dt \quad (D.17)$$

En intégrant alors cette dernière équation, la formulation de Maroihi et al. (1992) est obtenue :

$$A_o - \frac{1}{a} \arctan(aA_o) = 4\pi\mu t \quad (D.18)$$

Annexe **E**

Article soumis au *Journal of
Hydraulic Research*

1 Research paper

2 **A Lagrangian/Eulerian oil spill model for continental waters**

3 CÉDRIC GOEURY, *Saint-Venant Laboratory for Hydraulics, Université Paris-Est, (joint research unit be-*
4 *tween EDF, CETMEF and Ecole des Ponts ParisTech), Chatou, France.*

5 *Email: cedric-externe.goeury@edf.fr*

6 JEAN-MICHEL HERVOUET, *EDF R&D, National Hydraulics and Environment Laboratory (LNHE), Cha-*
7 *tou, France & Saint-Venant Laboratory for Hydraulics, Université Paris-Est, (joint research unit EDF,*
8 *CETMEF, Ecole des Ponts ParisTech), Chatou, France.*

9 *Email: j-m.hervouet@edf.fr (author for correspondence)*

10 ISABELLE BAUDIN-BIZIEN, *VEOLIA Environnement Recherche et Innovation (VERI), Rueil-Malmaison,*
11 *France.*

12 *Email: Isabelle.Baudin-Bizien@veolia.com*

13 FRANÇOIS THOUVENEL, *VEOLIA Environnement Recherche et Innovation (VERI), Rueil-Malmaison,*
14 *France.*

15 *Email: Francois.Thouvenel@veolia.com*

16 **ABSTRACT**

17 The application of the European Water Framework Directive on water quality for human consumption and industrial activities creates a need
18 for water quality assessment and monitoring systems. The MIGR'HYCAR research project was initiated to provide decisional tools for risks
19 connected to oil spills in continental waters, which represent more than 50% of accidental spills in France. Within the framework of this project,
20 a new numerical oil spill model has been developed by combining Lagrangian and Eulerian methods. The Lagrangian model describes the
21 transport of an oil spill near the free surface. The oil spill model enables to simulate the main processes driving oil plumes: advection, diffusion,
22 evaporation, dissolution, spreading and volatilization. Though generally considered as a minor process, dissolution is important from the point
23 of view of toxicity. To model dissolved oil in water, an Eulerian advection-diffusion model is used. The fraction of dissolved oil is represented
24 by a passive tracer. This approach is able to follow dissolved hydrocarbons in the water column. Laboratory experiments were conducted to
25 characterise the numerous kinetics of the processes listed above. In addition, meso-scale dynamic experiments in an artificial channel and test
26 cases derived from the literature are used to validate the numerical model. Promising results are found and presented in this paper.

27 **Keywords:** oil spill, Lagrangian/Eulerian model, weathering processes, continental waters, PAHs dissolution.

28 **1 Introduction**

29 Oil spills can be due to human error, accidental or voluntary discharge
30 of cargo residues, domestic or industrial tank overflows, leakage from
31 fuel stations, traffic accidents, amongst other causes. When faced
32 with hydrocarbon contamination of inland waterways, public author-
33 ities can seldom rely on dedicated decision-making tools to intervene
34 in an effective way. Whereas considerable management and moni-
35 toring resources are rapidly deployed for off- or inshore oil incidents,
36 the more frequent occurrence of continental water pollution is dealt
37 with using relatively modest means. A limited grasp of the nature and

38 magnitude of such events often renders both industry and government
39 powerless in controlling their impacts (Bonnemains *et al.* 2011).

40 In the last three decades, many researchers have studied the be-
41 haviour and fate of oil spills. Among these oil spill models, two ap-
42 proaches are usually found: Lagrangian models and Eulerian models.
43 The Lagrangian models (Lonin (1999), Zheng *et al.* (2003)) represent
44 the oil slick by a large set of hydrocarbon packets. Each packet is ad-
45 vected by the action of current and wind. However, the number of
46 particles in these models must be restricted in order to limit the com-
47 putational time. In Eulerian oil spill models (Papadimitrakakis *et al.*
48 (2006), Tkalich *et al.* (2003)), the mass and momentum equations

Preprint version

ISSN XXXX-XXXX print/ISSN XXXX-XXXX online
<http://www.informaworld.com>

are solved for the oil slick. The main drawback of the Eulerian formulation is the problem of numerical dispersion, especially for small pollutant sources. Consequently, recently published numerical models couple Lagrangian and Eulerian approaches. For example, Sue (2006) adopted a hybrid method to predict contaminant dispersion. A Lagrangian method is used to minimize numerical errors in the vicinity of the contaminant point source, and a Eulerian model is adopted in the far field to avoid an increase in computational burden. This approach has been adapted by Guo and Wang (2009) to model oil spills. The oil discharge is modeled by a release of particles. Then, when the particle thickness reaches a critical value, the Eulerian approach is used. A second type of hybrid oil spill model (Nagheeb and Kalahdoozan 2008) uses a Lagrangian description for the transport processes, with the number of particles then being converted into an Eulerian concentration.

However, most oil spill models focus on the marine and coastal environment. There has been little published research on continental water spills. Existing models have different capabilities. For instance, Hibbs *et al.* (1997) developed a one-dimensional two-phase riverine model able to compute the concentration of individual compounds dissolved in the water column. Yapa and Shen (1994) proposed a two dimensional model able to compute the position and weathering processes occurring during the oil spill but not the concentration of the dissolved oil.

The application of the European Water Framework Directive and monitoring obligations on water quality for human consumption and industrial activities create a need for water quality assessment and monitoring systems. Consequently, the Migr'Hycar research project (www.migrhycar.com) was initiated to provide decisional tools, and fulfil operational needs for risks connected to oil spill drifts in continental waters (rivers, lakes, estuaries). In this research project, a Lagrangian/Eulerian oil spill model has been developed within the TELEMAC hydro-informatic system. A Lagrangian approach is used to predict the surface oil slick transport and an Eulerian model is adopted for simulating the water quality, which must be coupled with the hydrodynamic model. This model aims to simulate the processes of advection, turbulent diffusion, evaporation, volatilization and dissolution in the water column.

The remainder of this paper is structured as follows: in section 2, the numerical model and general formulations of main physical phenomena are described. In section 3 the model calibration is detailed. Then, the verification of the model is shown in section 4.

2 Model and physical processes

The oil spill model we introduce here combines an Eulerian and a Lagrangian approach. The Lagrangian model simulates the transport of an oil spill near the surface. The oil slick is represented by a large set of hydrocarbon particles. Each particle is considered as mixture of discrete non-interacting hydrocarbon components. Particles are therefore represented by component categories (Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs), pseudo-components characterized by distillation curves), and the fate of each component is tracked separately. Each particle has associated to it, amongst other properties, an area, a mass, its barycentric coordinates within the element it is located in, and the physico- chemical properties of each of its components. The model accounts for the main processes that act on the spilled oil: advection, effect of wind, diffusion, evaporation and dissolution. Though generally considered to be a minor process, dissolution is

important from the point of view of toxicity. To simulate PAH dissolution in water, an Eulerian advection-diffusion model is used. This approach is more useful when an environmental study makes it necessary to couple an Eulerian hydrodynamic model and a water quality model (Tkalic *et al.* 2003). The fraction of each dissolved PAH is represented by a tracer whose mass directly depends on the dissolved mass of oil particles. The hydrodynamic data required for either Lagrangian and Eulerian transport approach are provided by Telemac-2D hydrodynamic model. This code solves shallow water equations based on the finite element method (section 2.1).

The purpose of the numerical model is to provide short-term forecasting in relatively calm waters. Consequently, biological processes which affect the oil spill over a long time can be neglected, as well as dispersion and emulsification phenomena (which are mainly caused by breaking waves). When oil is spilled on the water surface, it spreads due to inertia, gravity, viscous and surface tension forces (Fay 1971) forming a slick. At the same time, the surface slick is transported by the advection and the turbulent diffusion due to current and wind action. The oil slick composition changes due to weathering processes such as evaporation and dissolution, whereas oil components dissolved in the water are volatilized to the atmosphere (Figure 1).

2.1 Hydrodynamic model

In this work, hydrodynamic is provided to the oil spill model using the Telemac-2D depth-averaged hydrodynamic model. Telemac-2D was developed by the National Hydraulics and Environment Laboratory, a department of Electricité de France's Research and Development Division.

This open source freeware program (www.opentelemac.org) solves the following governing equations:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(hu) + \frac{\partial}{\partial y}(hv) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial hu}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(huu) + \frac{\partial}{\partial y}(huv) = -gh \frac{\partial Z_s}{\partial x} + hF_x + \nabla \cdot (h\nu_e \vec{\nabla}(u)) \quad (2)$$

$$\frac{\partial hv}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(huv) + \frac{\partial}{\partial y}(hvv) = -gh \frac{\partial Z_s}{\partial y} + hF_y + \nabla \cdot (h\nu_e \vec{\nabla}(v)) \quad (3)$$

Where x and y are the horizontal cartesian coordinates, t the time, u and v the components of the depth-averaged velocity, h the water depth, ν_e an effective diffusion representing depth-averaged turbulent viscosity ν_t and dispersion, Z_s the free surface elevation, F_x and F_y the force terms (friction, etc...).

The depth-averaged turbulent kinetic energy (k) and its dissipation rate (ϵ) are given by the turbulent model $k-\epsilon$:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}(k) + v \frac{\partial}{\partial y}(k) = \frac{1}{h} \nabla \cdot \left(h \frac{\nu_t}{\sigma_k} \vec{\nabla}(k) \right) + P - \epsilon + P_{kv} \quad (4)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}(\epsilon) + v \frac{\partial}{\partial y}(\epsilon) = \frac{1}{h} \nabla \cdot \left(h \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \vec{\nabla}(\epsilon) \right) + \frac{\epsilon}{k} [C_{1\epsilon}P - C_{2\epsilon}\epsilon] + P_{ev} \quad (5)$$

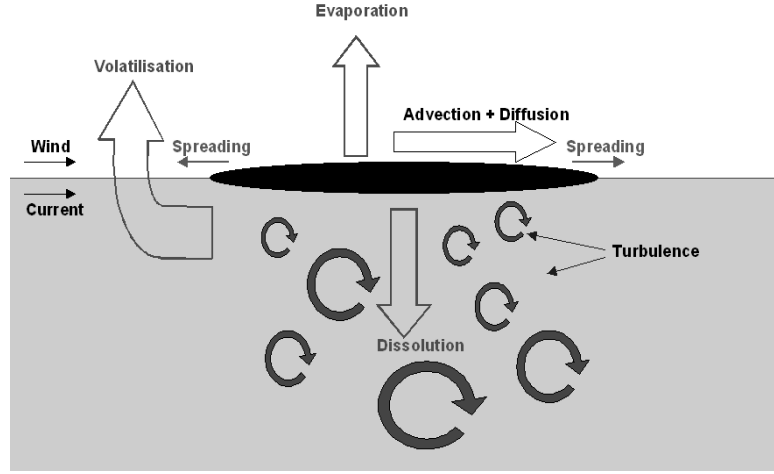


Figure 1: Fate and Transport of oil slick

$$\text{with } P = \nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial u}{\partial y},$$

$$P_{kv} = C_k \frac{u_*^3}{h} \quad \text{and} \quad P_{ev} = C_e \frac{u_*^4}{h^2} \quad (6)$$

Where u_* is the shear velocity on the bottom, $C_k = (1/\sqrt{C_f})$ and $C_e = 3.6(C_{2e}\sqrt{C_\mu})/(C_f^{3/4})$ with C_f the non-dimensional friction coefficient and $\nu_t = C_\mu(k^2/\epsilon)$, $C_\mu = 0.09$, $C_{1e} = 1.44$, $C_{2e} = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$ and $\sigma_e = 1.3$ (Hervouet 2007).

Telemac-2D solves the previous equation system using the finite element method on a triangular element mesh. Telemac-2D can take into account the propagation of long waves, the bed friction, the influence of the Coriolis force and meteorological factors, the turbulence, sub-and supercritical flows, river and marine flows, the influence of temperature or horizontal salinity gradients on density and dry areas in the computational domain, amongst other processes (Hervouet 2007).

2.2 Transport processes

Advection

On the free surface, the drifting of the oil slick is induced by the flow velocity and by the action of wind. The oil slick drift velocity is expressed as:

$$\mathbf{u}_{oil} = \mathbf{u}_c + \beta \mathbf{u}_w \quad (7)$$

where $\mathbf{u}_{oil}$ is the oil slick velocity, $\mathbf{u}_c$ the current velocity at the free surface, $\mathbf{u}_w$ the wind velocity above the water surface and β the drift of the surface slick due to the wind.

Estimation of the current velocity at the free surface: Assuming a logarithmic profile for the vertical velocity, the current surface velocity $\mathbf{u}_c$ can be related to the depth-averaged velocity $\langle \mathbf{u} \rangle$ and

the non-dimensional friction coefficient C_f as:

$$\mathbf{u}_c = \langle \mathbf{u} \rangle \left(1 + \frac{1}{\kappa} \sqrt{\frac{C_f}{2}} \right) \quad (8)$$

Where κ is the von Karman constant ($\kappa = 0.41$)

Wind effect on the oil spill drift: The force acting on a floating solid body with constant flow velocity is:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2} \rho S C_d |\mathbf{u}| \mathbf{u} \quad (9)$$

Where $\mathbf{u}$ is the flow surface velocity, S the projected area of the solid body, ρ the fluid density and C_d the drag friction coefficient. If the solid moves with velocity $\mathbf{v}$, it is necessary to replace the fluid surface velocity $\mathbf{u}$ by the relative velocity $\mathbf{u}_r = \mathbf{v} - \mathbf{u}$ in equation (9).

Newton's second law at steady state applied to the particle advected by wind and current (Figure 2) can be expressed as:

$$\rho_w S_c C_{d,c} |\mathbf{v} - \mathbf{u}_c| (\mathbf{v} - \mathbf{u}_c) + \rho_a S_w C_{d,w} |\mathbf{v} - \mathbf{u}_w| (\mathbf{v} - \mathbf{u}_w) = 0 \quad (10)$$

Where ρ_a is the air density, ρ_w the water density, $C_{d,c}$ the drag coefficient in the water, $C_{d,w}$ the drag coefficient in the air, S_w the partial projected area of the solid body subjected to the wind, S_a the partial projected area of the solid body subjected to the current, $\mathbf{u}_c$ the current water velocity and $\mathbf{u}_w$ the wind velocity.

By decomposing the velocity of the solid body as $\mathbf{v} = \alpha \mathbf{u}_c + \gamma \mathbf{u}_w$, the following relationship is obtained:

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{u}_c + \beta \mathbf{u}_w}{1 + \beta} \quad \text{with} \quad \beta = \sqrt{\frac{\rho_a S_w C_{d,w}}{\rho_w S_c C_{d,c}}} \quad (11)$$

This approach can be applied to an oil slick by approximating the drag forces with the friction forces exerted by the wind and the water on the slick surface. This surface is equal above and below the water

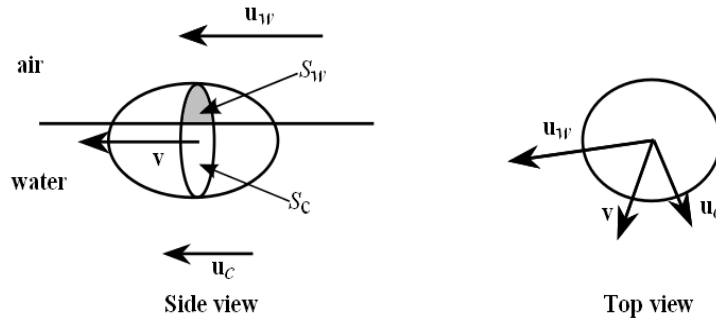


Figure 2: Forces acting on a floating body

surface. If the friction coefficients for water and air are also assumed to be equal, the wind drift factor can be simplified to:

$$\beta = \sqrt{\frac{\rho_a}{\rho_w}} \approx 0.036 \quad (12)$$

The oil spill drift velocity induced by wind action is 3.6% of the wind velocity. This theoretical result is close to the empirical drift factor usually used in oil spill models. According to ASCE (1996), this drift velocity typically varies from 2.5% to 4.4% of the wind velocity, with a mean value comprised between 3% and 3.5%.

Diffusion

Eddies generated by turbulence affect the motion of petroleum particles in water and randomize their trajectory. Consequently, a stochastic approach is adopted in order to take this phenomenon into account. The Advection-Diffusion equation (13) is well-adapted to modelling transport and dispersion of continuous contaminants, but, since the present model uses a discrete particle description of contaminant transport and dispersion, a transformation must be applied to equation (13) to obtain a Lagrangian equation.

$$\frac{\partial hC}{\partial t} + \nabla \cdot (hC \langle \mathbf{u} \rangle) = \nabla \cdot \left(\frac{h\nu_t}{\sigma_c} \nabla C \right) \quad (13)$$

Where h is the water depth, C the depth-averaged pollutant concentration, σ_c the neutral turbulent Schmidt number and ν_t the turbulent viscosity. The turbulent Schmidt number can be set to $\sigma_c = 0.72$ (Violeau 2009).

A transformation must be applied to equation (13) to obtain a Lagrangian equation. The first transformation step consists of interpreting the concentration $C(\mathbf{X}, t)$ as a probability $P(\mathbf{X}, t)$ of finding a particle at a location $\mathbf{X}$ at a time t . Then, the non-conservative formulation of equation (13) leads to the Fokker-Planck equation:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \left[\langle \mathbf{u} \rangle - \frac{1}{h} \nabla \left(\frac{h\nu_t}{\sigma_c} \right) \right] \nabla P + \nabla \cdot \left(\frac{\nu_t}{\sigma_c} \nabla P \right) \quad (14)$$

A stochastic solution to equation (14) is obtained by specifying the hydrocarbon particle position $\mathbf{X}(t)$ according to the following

Langevin equation (Gardiner 2004):

$$\mathbf{X}(t + \delta t) = \mathbf{X}(t) + \left[\langle \mathbf{u} \rangle - \frac{1}{h} \nabla \left(\frac{h\nu_t}{\sigma_c} \right) \right] \delta t + \sqrt{\frac{2\nu_t}{\sigma_c}} \delta t \xi(t) \quad (15)$$

Where δt is the time step, $\xi(t)$ a vector with independent, standardized random components. In the above relationship, quantities h and ν_t are computed from Telemac-2D (section 2.1) and the depth-averaged velocity $\langle \mathbf{u} \rangle$ must be replaced by the oil slick velocity $\mathbf{u}_{oil}$ (Eq. (7)).

2.3 Weathering processes

Spreading

Spreading is the most important weathering process. In fact, all mass transfer phenomena which occur during an oil spill are influenced by the area of the surface slick. Oil discharged into a water surface will immediately start to increase its surface area. This slick expansion is controlled by mechanical forces such as gravity, inertia, surface tension and viscosity (Fay 1971). Based on the layer averaged Navier-Stokes formulation proposed by Warluzel and Benque (1981), Maroihi et al. (1992) have described the spreading process as follows:

$$S - \arctan(aS) = 4\pi\mu t \quad (16)$$

$$\text{with } \mu = \frac{\sigma_{wa} - \sigma_{oa} - \sigma_{ow}}{K} \text{ and } a = \frac{2}{3V} \sqrt{\frac{2\mu K}{\Delta\rho_o g}} \quad (17)$$

Where σ_{wa} is the water-air surface tension, σ_{oa} the oil-air surface tension, σ_{ow} the oil-water surface tension, K the friction coefficient at the oil water interface, V the volume of spilled oil, g the gravity, Δ a parameter which relates the oil and water densities (ρ_o, ρ_w respectively): $\Delta = \frac{\rho_w - \rho_o}{\rho_w}$.

According to the same authors, experiments show that more than 90% of the surface slick is controlled by gravity. This area is surrounded by a thinner oil slick controlled by surface tension. In this paper, the surface tension is neglected and the friction coefficient is $K = \frac{\rho_o \nu_o}{e}$ (where e is the slick thickness and ν_o the oil kinematic

viscosity). The slick surface formulation (16) can be simplified to:

$$S = \left(\frac{27\pi V^3 \Delta g_t}{2 \nu_o} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (18)$$

The previous expression (Eq.(16)) is used to determine each particle area A_p . The main advantage of this equation is that it contains few parameters: the oil density ρ_o , the oil kinematic viscosity ν_o and the volume of spilled oil V .

Mass transfer processes

The mass transfer between two phases is quantified theoretically, based on the hypothesis that the mass transfer resistance is located close to the interface between the two phases. In the next sections, all processes are based on Whitman's (1923) theory, which formulates the mass transfer flux for mass transfer phenomena.

Evaporation

Evaporation is the most important mass transfer process that oil undergoes after a spill. In a few days, light crude or refined products can lose up to 75% of their volume (ASCE 1996). An understanding of evaporation is important both from the practical viewpoint of cleaning up spills and for developing predictive models. The evaporation model used is based on a pseudo-component approach. The change in mass of the petroleum component i is characterized, using the molar flux expression of Stiver and Mackay (1984) and the thermodynamic phase equilibrium equation, by the following relationship:

$$\frac{dm_i}{dt} = -K_{evap} A_p \frac{P_i m_i}{\sum_j \frac{m_j}{M_{wj}} RT} \quad (19)$$

with $P_i = \exp \left[\frac{\Delta H_i}{RT_{Bi}} \left(1 - \frac{T_{Bi}}{T} \right) \right]$

where m_i is the mass of the component i , K_{evap} the evaporation mass transfer coefficient, P_i the vapor pressure of component i , M_{wj} the molar mass of component j , R is the universal gas constant, T the ambient temperature, T_{Bi} the boiling point of component i and ΔH_i the molar enthalpy of component i .

The Gray-Watson method (Boethling 2000) is used to determine the molar enthalpy ΔH_i in equation (19):

$$\Delta H_i(T) = T_{Bi} R \ln(82.06 T_{Bi}) \left(3 - 2 \frac{T}{T_{Bi}} \right)^m$$

with $m = 0.4133 - 0.2575 \frac{T}{T_{Bi}}$ (20)

With the molar mass of component i calculated according to Jones (1997) and the previous relationship (Eq. 20), all component parameters (M_{wj} , ΔH_i , T_{Bi}) can be expressed as a function of the component's boiling point T_{Bi} . Therefore, the parameters of the evaporation algorithm are the component's boiling point T_{Bi} and the initial petroleum composition, which are characterized by the distillation curve, and the mass transfer coefficient K_{evap} . In this model this coefficient is calculated according to the theory of Mackay and Matsugu (1973).

Dissolution

Dissolution is an important phenomenon from a toxicological and environmental point of view, although it only accounts for a negligible fraction of the oil mass. The oil quantity affected by this process is about 1% of the initial mass. Due to their physico-chemical properties, only PAHs are assumed to be dissolved in the water (Hibbs *et al.* 1999). The concentration of dissolved PAH i in the water column at time t (C_i^{n+1}) as a function of the concentration at the previous time step ($t-1$) (C_i^n) is given by the following relation:

$$C_i^{n+1} = S_i^n X_i^n + [C_i^n - S_i^n X_i^n] \exp(-\alpha \delta t) \quad (21)$$

Where δt is the time step, S_i^n the component i solubility in water, X_i^n the molar fraction of component i and $\alpha = \frac{K_{diss} A_p}{V}$ where K_{diss} the mass transfer coefficient, A_p the particle area, V the node volume.

The order of magnitude of the dissolved mass transfer coefficient K_{diss} is of several cm/h (Yapa and Shen (1994), Hibbs *et al.* (1997)). These values are given by these authors without justification, and therefore the dissolved mass transfer coefficient must be calibrated. Using the relationship linking mass and concentration, the mass loss

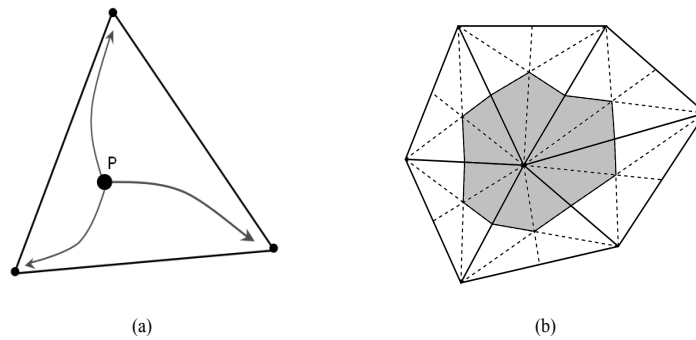


Figure 3: Particle P inside an element (a) and node area (b)

at time $t \equiv (n + 1)\delta t$ for each component i can be deduced:

$$mass_i^{n+1} - mass_i^n = [1 - \exp(-\alpha\delta t)] (S_i^n X_i^n - C_i^n) V \quad (22)$$

Switching from Lagrangian to Eulerian formulation: As mentioned in section 2.1, Telemac-2D is based on a vertex centred finite-element formulation, which means that variables are defined on mesh nodes. If we consider a particle P inside an element (Figure 3a), its dissolved mass must be distributed between the element's nodes.

Therefore, in order to compute the coefficient α at each node j , the area of each particle (A_p) is distributed between the nodes of the local element using the following formula:

$$A_p SHP(j) = A_r(j) \quad (23)$$

Where $SHP(j)$ is the barycentric coordinate at node j and $Ar(j)$ the partial particle area at node j . A node area is defined around each mesh node by adding the quadrilaterals defined by the medians of each triangular element (grey area in Figure 3b). This is equivalent to the integral of test functions (Hervouet 2007). The volume V is obtained by multiplying the node area by the depth of the node.

The previous steps allow the coefficient α_j to be calculated at each node j of each element that contains a particle. The dissolved mass of PAH i in the water column is defined at each node j by the following relation:

$$mass_{i,diss}^{n+1} = [1 - \exp(\alpha_j\delta t)] (S_i^n X_i^n - C_i^n) V_j \quad (24)$$

The total amount of dissolved mass for each particle component i is:

$$mass_{i,diss,tot}^{n+1} = \sum_{j=0}^{num_{node}} mass_{i,diss}^{n+1} \quad (25)$$

Thus, the quantity of tracer at the time step t , at node j , added by dissolution is defined by:

$$T_j^{n+1} = T_j^n + \frac{mass_{i,diss}^{n+1}}{V_j} \quad (26)$$

The advection-diffusion equation (Eq. 13) can then be used to

simulate the transport and dispersion of dissolved PAHs in the water column. The parameters useful for the dissolution algorithm are the solubility of the component i in water (S_i), which is available in the literature and the dissolution mass transfer coefficient (K_{diss}), which must be calibrated.

Volatilization

Dissolved oil components can be volatilized into the atmosphere only in areas not covered by the surface slick. The volatilization flux is expressed as follows:

$$F_i = -K_{vol} C_i \quad (27)$$

Where F_i is the mass flux of component i ($kg/m^2 s$), C_i the concentration of component i in the water (kg/m^3) and K_{vol} the overall volatilization rate coefficient (m/s).

This flux expression contains only one parameter, the volatilization rate coefficient K_{vol} . As for the dissolution mass transfer coefficient, different values can be found in the literature (Hibbs et al. 1999), but they are not explained. This coefficient must thus be calibrated.

3 Model calibration

As seen in the previous section, the dissolution and volatilization mass transfer coefficients need to be calibrated. In this section, we propose a methodology to determine these coefficients using petroleum kinetics. Within the Migr'Hycar project, some tests were carried out by the LCA (Laboratoire de Chimie Agro-industrielle) located in Toulouse (France). The aim of these experiments was to study the dissolution dynamics of the most significant PAHs (listed in table 1) and their derived products.

During the kinetic experiments, representative hydrocarbons were tested (heavy fuel, home heating oil, kerosene). In a beaker, the hydrocarbons are in contact with water during two days. Water samples are taken at different times. An analysis of each sample allows the PAHs concentration to be defined and the hydrocarbons kinetics are obtained.

These hydrocarbon kinetics are used to calibrate the numerical model. During the kinetic experiments, evaporation, dissolution and the volatilization phenomenon act in the aqueous phase. In order to be able to define the volatilization mass transfer coefficient (K_{vol}) and the dissolution mass transfer coefficient (K_{diss}), the parameter

Table 1: List of studied PAHs

Naphtalene	N	Chrysene	C
Benzo[b]thiophene	BT	Benzo[a]anthracene	BAA
Biphenyl	B	Benzo[b]fluoranthene	BBF
Acenaphthylene	ANY	Benzo[k]fluoranthene	BKF
Fluorene	F	Benzo[e]pyrene	BEP
Phenanthrene	P	Perylene	Pe
Anthracene	A	Indeno(1,2,3,-cd)pyrene	IN
Dibenzothiophene	D	Dibenz[a,h]anthracene	DBA
Fluoranthene	FL	Benzo(g,h,i)perylene	BPE
Pyrene	PY		

Table 2: Mass transfer coefficient results

kerosene	1 st class	2 nd class	3 rd class	4 th class
K_{diss} (m/s)	$1.23 \cdot 10^{-5}$	$5.63 \cdot 10^{-6}$	$2.0 \cdot 10^{-6}$	$1.37 \cdot 10^{-6}$
K_{vol} (m/s)	$4 \cdot 10^{-5}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$7.89 \cdot 10^{-7}$	$1.05 \cdot 10^{-8}$
home heating oil	1 st class	2 nd class	3 rd class	4 th class
K_{diss} (m/s)	$2.54 \cdot 10^{-5}$	$3.57 \cdot 10^{-5}$	$4.46 \cdot 10^{-5}$	$1.27 \cdot 10^{-6}$
K_{vol} (m/s)	$2.7 \cdot 10^{-5}$	$1.3 \cdot 10^{-6}$	$4.18 \cdot 10^{-7}$	$2 \cdot 10^{-8}$
heavy fuel	1 st class	2 nd class	3 rd class	4 th class
K_{diss} (m/s)	$5.54 \cdot 10^{-6}$	$6.52 \cdot 10^{-6}$	$3.47 \cdot 10^{-6}$	$1.33 \cdot 10^{-6}$
K_{vol} (m/s)	$1.08 \cdot 10^{-5}$	$3.66 \cdot 10^{-7}$	$5.18 \cdot 10^{-8}$	$1.2 \cdot 10^{-8}$

identification technique is used: a MATLAB algorithm was used to fit the experimental hydrocarbons kinetics in order to calculate the mass transfer coefficient for each PAH. For modelling purposes, the PAHs are classified according to their number of benzene rings and are therefore represented by four components. The four modelled pseudo-components are:

- First class: 2-ring PAHs (volatile and soluble aromatics);
- Second class: 3-ring PAHs (semi-volatile and semi-soluble aromatics);
- Third class: 4-ring PAHs (low volatility and solubility aromatics);
- Fourth class: 5 and more ring PAHs (very low volatility and solubility aromatics)

The results are summarized in the table 2. Values of the dissolution mass transfer coefficient found in the literature range from $6.5 \cdot 10^{-7}$ m/s to $1.15 \cdot 10^{-5}$ m/s (Shen and Yapa 1988). The dissolution mass transfer coefficients from heavy fuel and kerosene found previously are within this interval. However, the home heating oil value is much higher: the maximal value ($4.46 \cdot 10^{-5}$ m/s) is four times larger than the literature value ($1.15 \cdot 10^{-5}$ m/s). The volatilization mass transfer coefficient for the two benzene-ring PAHs found by the identification parameter technique have the same order of magnitude than the reference value of $1.2 \cdot 10^{-5}$ m/s reported by Hibbs *et al.* (1999). This coefficient decreases with the number of benzene rings. This can be explained by the low volatility of heavy components. It can be concluded that the complexity of hydrocarbons composition makes calibration essential before modelling the hydrocarbons behaviour in the aquatic environment.

4 Numerical verification

Verification of the numerical model was carried out by simulating benchmark test cases. Firstly, the transport model is verified using a well-documented real spill case and a theoretical case with analytical solution. Secondly is affected to the weathering process verification (Spreading and Evaporation). The last part is dedicated to the verification of the dissolution algorithm using an artificial river experiment.

4.1 Transport process verification

Real oil spill Accident

Oil spill in continental waters have never been as well documented as real seawater oil spills where aerial plans are generally deployed to report the oil slick location. During the 1990s, a tanker broke in two sections and sank in seawater. Approximately 15,000 tons of oil were released into the marine environment. Aerial survey missions reported slick locations. The comparison between the simulated trajectory and the observations is made in order to validate the advection modelling.

The transport model presented in section 2.2 and the Telemac hydrodynamic model (section 2.1) are applied to simulate the oil spill. A mesh composed of approximately 90000 nodes and 150000 triangles is used for this study. On offshore boundaries, the free surface elevation and/or velocity are imposed to reproduce tidal effects. For the shoreline, a solid wall condition is used. Reanalysis of CFSR (Climate Forecast System Reanalysis) surface wind data was carried out over the period of the oil spill to reproduce wind conditions. The numerical prediction of the slick centroid is compared with the aerial observations, as shown in Figure 4.

Simulation results agree with the observed trajectory except in the initial phase of the spill, where the spill is predicted more to the east than the aerial observations with a maximal gap of 16 km. Moreover, there is a one day lag between the numerical prediction and the aerial observations. This lag is probably due to uncertainty in the exact time of the oil release, and also to wave effects, which are not considered in the model. The model is in good agreement with the observations and this test case shows the capacity of the model to predict a real case accident. Moreover, this test case allows the wind factor determined previously to be validated: since tide currents are relatively low in the offshore area, wind action is the main driver of oil slick transport.

Theoretical case with analytical solution

This simple theoretical case validates the stochastic diffusion modelling. In this case, a square basin with a 20 m side (L) is considered. A uniform triangular mesh composed of 9000 nodes with a grid size of 0.3 m in both x and y directions is used. There is no flow velocity in the channel. The dispersion coefficient (D) is $0.05 \text{ m}^2/\text{s}$ along the longitudinal axis x . A number (N_p) of oil particles are instantaneously discharged at point $x = 10.0$, $y = 10.0$ m. The particle evolution is only due to the stochastic term of equation (15) and particle concentration evolves according to Fick's law. Consider the constant values for depth, velocities and dispersion coefficient, concentration of oil

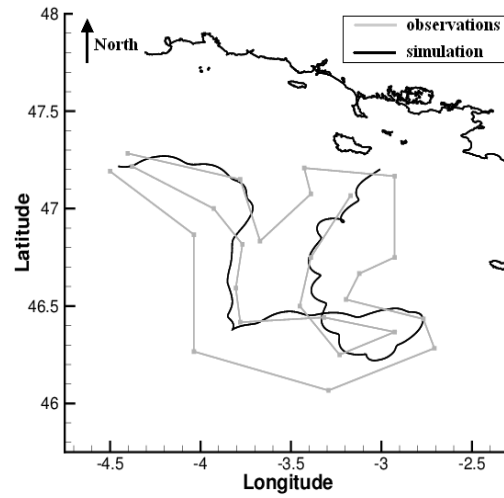


Figure 4: Trajectory of the oil slick

can be evaluated analytically using diffusion equation as:

$$C^*(x^*, t^*) = \sqrt{\frac{R_e}{4\pi t^*}} \cdot \exp\left(-\frac{R_e x^{*2}}{4t^*}\right) \quad (28)$$

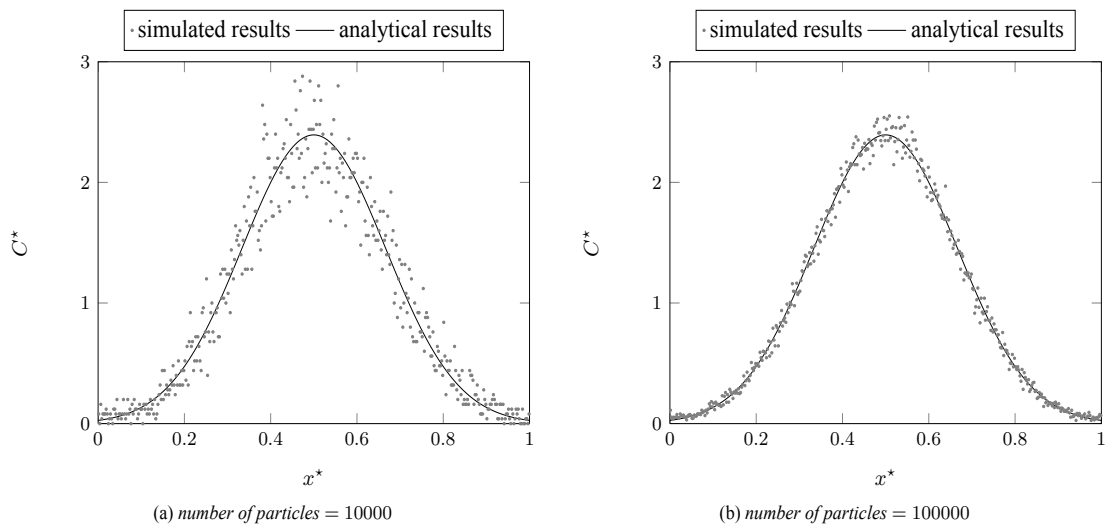
where $C^*(x^*, t^*) = (C(x, t)L)/N_p$ is the non dimensional pollutant concentration, $x^* = x/L$ the non dimensional x coordinate, $t^* = t/T$ the non dimensional time, T being the total simulation time and $R_e = L^2/(Dt)$ the non dimensional Reynolds number.

Figure 5 represents the number of particles effect on accuracy of the results (h-convergence). Increasing the number of particles, the model predictions are more accurate. The percentage of relative

error of the maximal gap between numerical and analytical solution decreases from 17% ($N_p = 10000$) to 7% ($N_p = 100000$). This result is in agreement with Joly (2009). Moreover, according to the same author, the time step does not influence the result accuracy. It can be concluded that the results obtained from numerical model and analytical method are in good agreement and the developed tool is consistent.

4.2 Weathering process verification

Whereas all three major weathering processes (spreading, evaporation and dissolution) occur simultaneously, evaporation has a signifi-

Figure 5: Comparison of normalized concentrations along x direction

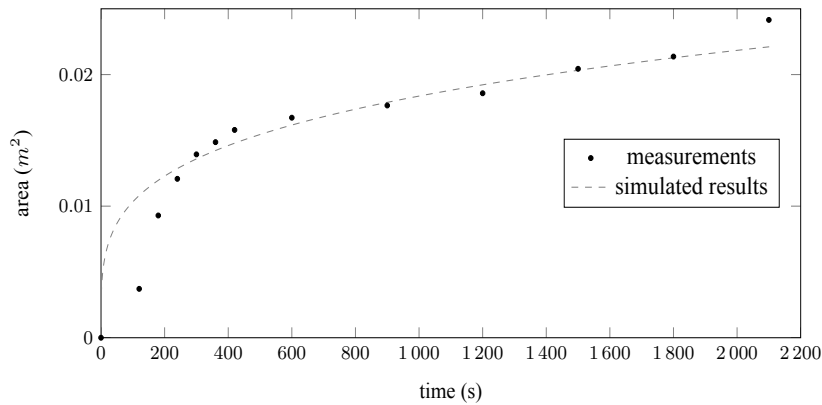


Figure 6: Spreading evolution of heavy fuel ("fuel #6")

cant effect on dissolution, and the magnitude of both evaporation and dissolution is linked to the slick area. Moreover, dissolution has a small effect on the total oil mass balance. For this reason, spreading and evaporation modelling will be each verified separately before the complete weathering process modelling is verified using the artificial river tests.

Spreading

A spreading experiment has been presented by Osamor and Ahlert (1981). During these experiments, a volume of hydrocarbons was spilled in a rectangular Plexiglass tank (1.5 m long by 1 m wide). The evolution of the slick surface is followed with a camera which allows to quantify the increasing area of the surface slick. In this paper, the result for the heavy fuel (called "fuel #6") is used. During this experiment, 25 ml of heavy fuel was spilled on still water in the tank. The oil parameters used are the density $\rho_o = 951 \text{ kg/m}^3$ and the kinematic viscosity $\nu_o = 0.0028 \text{ m}^2/\text{s}$. The simulation time and spatial steps are $\Delta t = 0.5 \text{ s}$ and $\Delta x = 0.015 \text{ m}$ respectively. A comparison between numerical results and these experimental data is presented in Figure 6.

The spreading model results are within the values obtained for the experiment, although the model over-estimates the initial spreading phase: 2 minutes after the release, the percentage of relative error between the predicted and measurement results is 65%. After 4 minutes, it becomes less than 10%. This can be explained by the fact that during the experiments the heavy fuel was released gradually during 90 s and therefore inertial forces seem to predominate whereas in the simulations the fuel release is instantaneous, and the inertial forces are neglected in the adopted spreading equation (18) (Maroihi *et al.* 1992).

Evaporation

In order to evaluate the accuracy of Eq. (19), a laboratory experiment led by Mackay and Matsugu (1973) is simulated. A gasoline volume of 15 litres was spilled in a wooden pan (1.22 m long by 1.22 m wide). Then, the oil volume was measured periodically using the depth measurement. The outdoor conditions are known (wind velocity 6.7 m/s, temperature 288 K). In this numerical study, the ADIOS data base (<http://response.restoration.noaa.gov/ADIOS>) supplies the experimental data for the gasoline composition. The simulation time

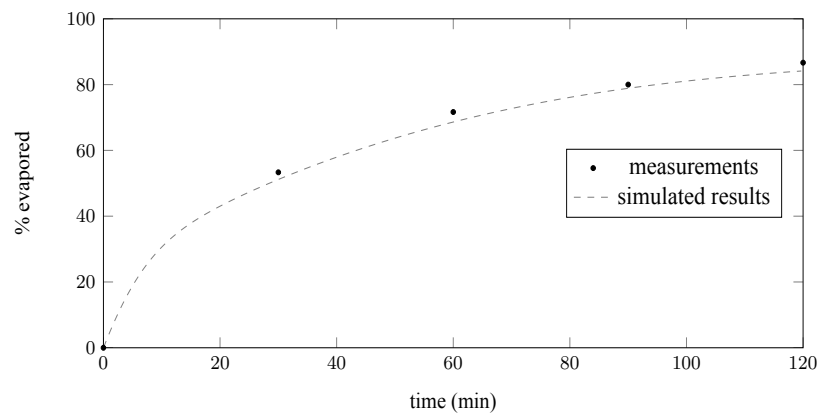


Figure 7: Gasoline evaporation (Mackay and Matsugu 1973)

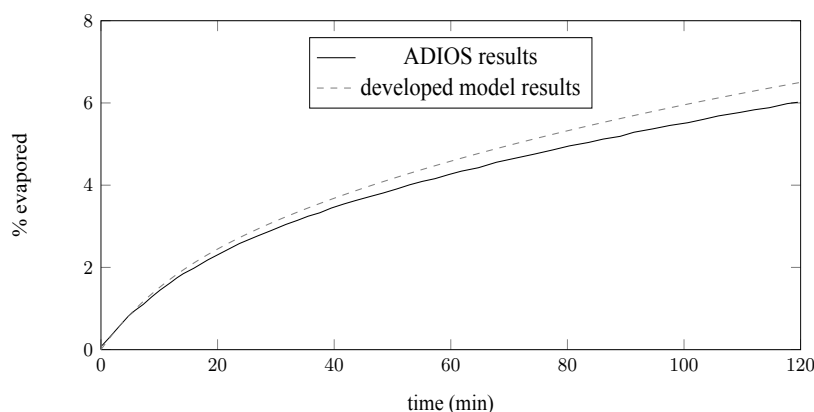


Figure 8: Heavy fuel (IFO 300) evaporation

and spatial steps are $\Delta t = 1$ s and $\Delta x = 0.015$ m respectively.

The evolution of the model evaporation reproduces the experimental results satisfactorily (Figure 7). Subsequently, a comparison between the evaporation model and the ADIOS prediction for the heavy fuel (IFO 300) is carried out. For this test, an instantaneous oil release in a tank is considered. A tank surface area of 500 m^2 has been chosen. An uniform south wind of 1 m/s and a water temperature of 288 K are assumed. The simulation time and spatial steps are $\Delta t = 0.5$ s and $\Delta x = 1.5$ m respectively. The results are shown in Figure 8.

The results provided by ADIOS and by the present model are fairly close. After 2 hours, an evaporated fraction difference of 0.5% can be observed between the models. This difference can be explained by the vapor pressure determination. In this paper, the Gray Watson (Boethling 2000) method is used to determine the vapor pressure (section 2.3), whereas the Antoine's equation (Jones 1997) is used in the ADIOS model.

4.3 The artificial river case

Experiments

An artificial river test campaign was conducted by Veolia Environnement Recherche et Innovation in order to observe the capacity of the pollutant to dissolve PAHs.

The UBA (Umweltbundesamt German Federal Agency for Environment) has on its site 16 identical systems of artificial rivers. The channel is about 100 m long. Among these rivers called FSA (acronym for Fließ und StillgewässersimulationsAnlage: simulator rivers and lakes), eight are located outdoors. A water flow is generated in these flumes with a screw pump. A system for continuous measurement of physical parameters is installed for each river, and there is one weather station. Two flumes were linked together to increase the installation length and sinuosity (Figure 9).

The hydrocarbon is spilled through a ring on water surface, the pollutant is injected inside (Figure 10a). Then, the ring is removed to allow the pollutant transport.

To observe the evolution of the concentration of dissolved PAHs, a fluorescence probe is used. Every morning a blank sample is made to know the initial concentration of PAHs already present in the channel. When the signal (%) is approximately on the peak, a water sample is taken during 30 seconds using an automatic device located near the probe. The samples are then sent to the CEDRE (Center of Documentation, Research and Experimentation on Accidental Water Pollution) for the analysis of dissolved concentrations of PAHs in samples. For each sample, there is therefore a concentration of total PAHs (ng/L) and a probe signal (%).

With the various tests carried out the same day and with the same hydrocarbon, it is possible to draw a calibration curve. This curve will allow to convert the signal probe in % into a total PAH concentration.

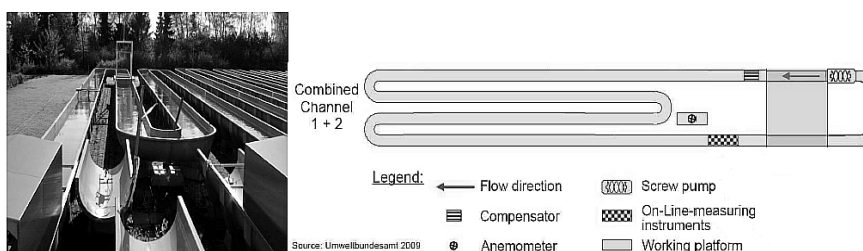


Figure 9: Artificial river sketch (source: Umweltbundesamt)

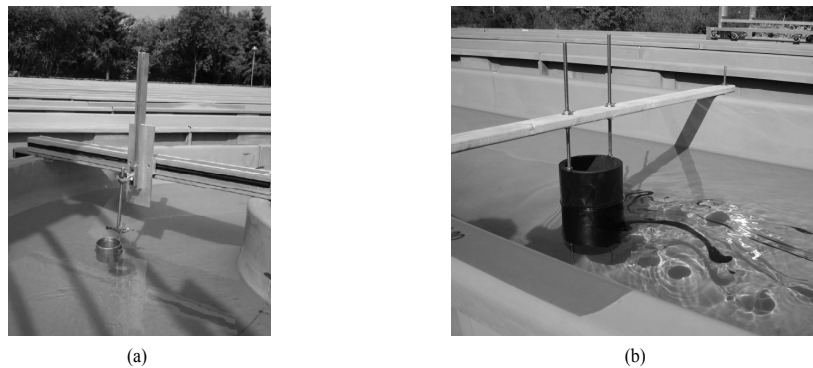


Figure 10: Release device (a); heavy fuel around obstacle (b)

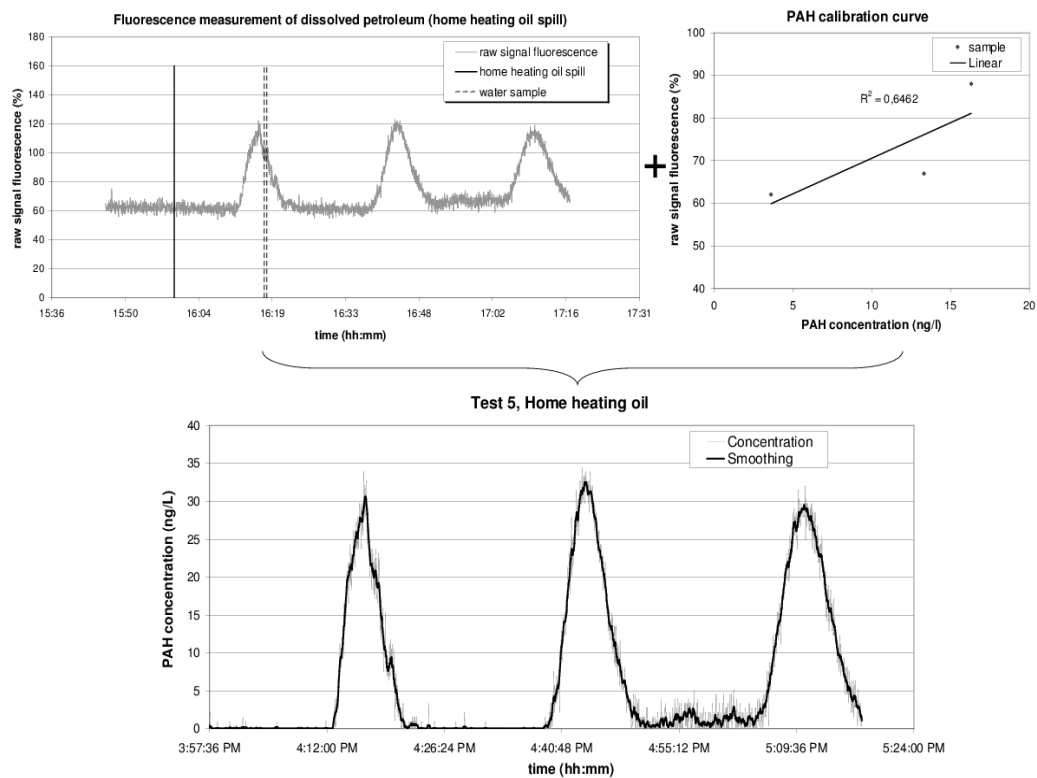


Figure 11: Process to obtain results

434 tration in ng/l (Figure 11). Then, the real concentration as function of
435 time is obtained by subtracting the value of the corresponding blank.
436 The profiles obtained are used to validate the numerical model.

437 Numerical Verification

438 The meso-scale artificial river experiments allow to test the PAHs dis-
439 solution model prediction capacity. The numerical model presented
440 in section 2 is used to simulate oil slick transport and weathering pro-

cesses in the artificial river presented in Figure 9. The finite element
mesh consists of 23234 nodes and 43000 triangles of average size
0.08 m (Figure 12). The flow velocity and surface elevation are im-
posed respectively on inflow and outflow boundary conditions. For
shoreline nodes, solid wall conditions are considered.

In this work, the artificial river test campaign is reproduced numer-
ically (heavy fuel, home heating oil and kerosene spills). The prod-
uct characteristics such as the petroleum composition, the distillation

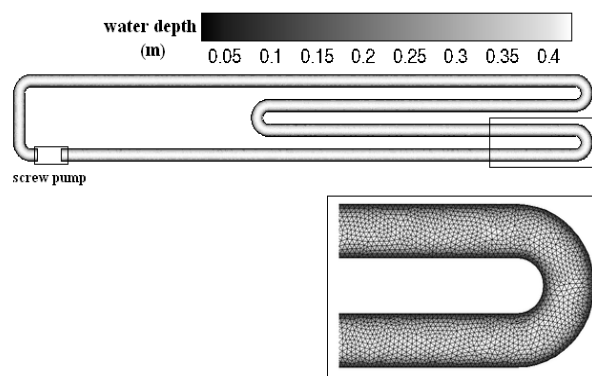


Figure 12: Artificial river model

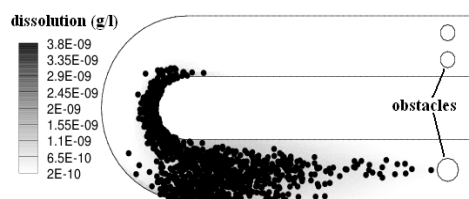


Figure 13: Oil spill simulation in the artificial river

curve and physical properties (heavy fuel ($\rho_o = 950$, $\nu_o = 4465$),
 kerosene ($\rho_o = 795$, $\nu_o = 2$) and home heating oil ($\rho_o = 840$,
 $\nu_o = 7$) with ρ_o (at 20°C) the oil density (kg/m^3) and ν_o (at 20°C)
 the kinetic viscosity (mm^2/s) amongst other properties are supplied
 by the French oil compagny TOTAL and the CEDRE.

In the first simulation, a kerosene spill which occurs in the first
 artificial river curve is considered. A volume of $2 \cdot 10^{-5} m^3$ has been
 spilled into the channel. The flow velocity is imposed to 0.1 m/s on

inflow boundary. There are obstacles in the channel (Figure 10b).

A simulation result is shown in Figure 13. The particles represent
 the oil surface slick whereas the eulerian tracer represents the
 dissolved petroleum in the water column. The numerical and experi-
 mental concentrations of the petroleum dissolved in the water column
 are shown in Figure 14.

The numerical dissolved and dispersed hydrocarbon concentra-
 tions (32 ng/l) in the water column has the same order of magnitude

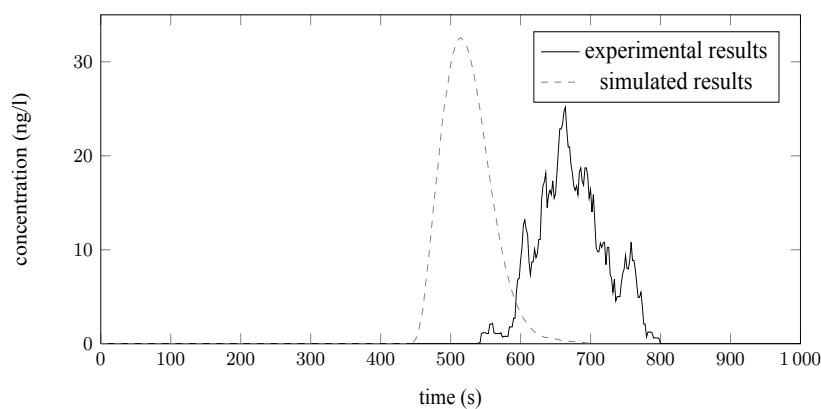


Figure 14: Kerosene concentration evolution in the water column

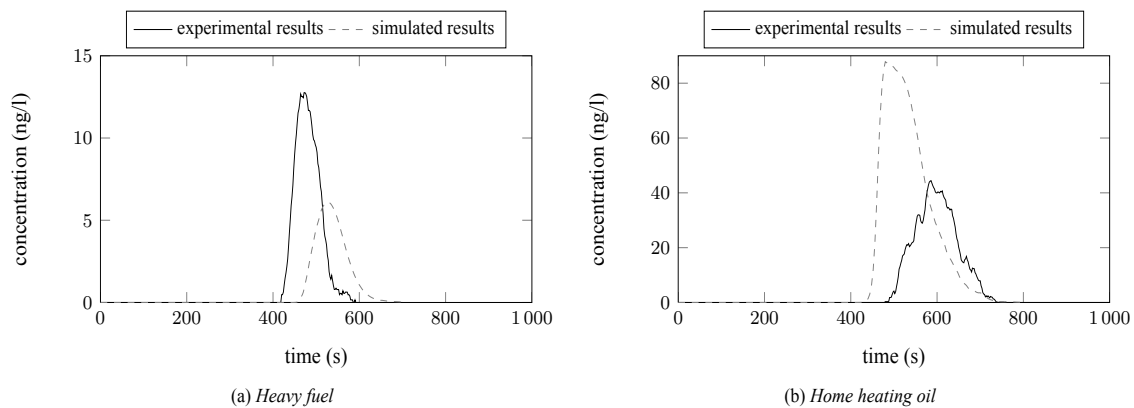


Figure 15: Oil concentration evolution in the water column

and compare well with experiments (26 ng/l). However, there is a delay (about 160 s) between the model results and the experimental expected values. This lag can be explained by the outdoor conditions which cannot be modelled, such as gusts of wind.

Then, heavy fuel and home heating fuel spills have been studied. These two cases concern an oil spill which occurs in the first artificial river curve, with a river flow imposed to 0.1 m/s. There is no obstacle in the first case (Figure 15a) in contrary of the second case (Figure 15b).

The algorithm reproduces satisfactorily the dissolved hydrocarbons in the water column. For each oil spill, the same order of magnitude is found for the dissolved petroleum concentration in the water column. Although, the model over-estimates the dissolved home heating oil concentration whereas it under-estimates the dissolved heavy fuel concentration. One reason may be a scaling factor because the kinetic data used for the model calibration (section 3) have been obtained for relatively small spills ($1.5 \cdot 10^{-4}$ kg).

5 Discussion

Since the model developed in this paper will be deployed in a warning system for emergency situations, its main applications are:

- to simulate oil spills in continental waters (lakes, rivers, estuaries)
- to estimate PAHs toxicity in the aquatic environment
- to become a decision support tool for water intake operators and public authorities

The Lagrangian oil surface slick model presents a reasonable performance on a real tanker accident. This benchmark shows the model's capability to simulate oil spills whose predominant driving force is the wind (in offshore area, tidal currents are weak, and wind becomes the main driver of oil slick transport). Validation of the modelling of weathering processes has been carried out, firstly by separately verifying spreading and evaporation, and then by testing the complete weathering process. Spreading and evaporation modelling are in satisfactory agreement with observations. Nevertheless, the model over-estimates the initial spreading phase. This can be explained by the

fact that during the experiments the heavy fuel was released gradually, thus inertial forces predominate, whereas in the spreading equation developed in this work these forces are neglected. The oil fate model is used to predict the general outcome and concentrations of the various PAHs in the water column resulting from oil spills in the artificial river. In general, the predicted PAH concentrations are of the same order of magnitude as the expected results. Differences observed can be explained by the following:

Firstly, the absence of hydrocarbon component interactions in the slick, for reason of the very complex petroleum mixture effects on oil weathering predictions, constitutes a difference between model and experiment results.

Next, uncertainties in the experiment measurements were caused by the linear hypothesis of PAH probe response in result treatment (section 4.3). A calibration curve is drawn every day in order to take into account air and water temperatures, solar radiation, amongst other properties and minimize the measurement uncertainties.

Futhermore, another reason of this model failure may be a scaling factor because the kinetic data used for the model calibration (section 3) have been obtained for relatively small spill ($1.5 \cdot 10^{-4}$ kg).

Finally, in the river experiment, the temperature ranges from 18°C to 23°C whereas the calibrated mass transfer coefficients are determined at the temperature of 20°C. This reason constitutes a difference between model and experiment results.

6 Conclusion

Mathematical modelling is a powerful tool within a decision-making process, allowing the impact of an oil spill to be anticipated or mitigated. For this reason, in the framework of the Migr'Hycar project, a Lagrangian/Eulerian model has been developed to simulate oil spills in continental waters. The Lagrangian model describes the transport and fate processes of an oil surface slick. Each Lagrangian hydrocarbon particle is considered as a mixture of discrete non-interacting hydrocarbon components. In this model, particles are represented by component categories (Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs), pseudo-components characterized by distillation curves), and the fate of each component is tracked separately. To model PAHs dissolution in water, a Eulerian advection-diffusion model is used. This approach

is more useful when an environmental study requires coupling of an Eulerian hydrodynamic model and a water quality simulation. This oil slick model has been coupled with the Telemac hydrodynamic model for flow propagation. The dissolution and volatilization mass transfer coefficients have been calibrated using fuel kinetics test results. Model validation was carried out with the following test cases: transport processes were validated using the well-documented seawater spill (advection) and the analytical Fick's law equation (stochastic diffusion), weathering processes were validated using laboratory experiments (spreading and evaporation processes) and artificial river test measurements (dissolution and volatilization). A good agreement between these cases and the numerical prediction has been obtained. It can be concluded that the algorithms reproduce satisfactorily the values expected, although more experimental data are still needed for a better validation, particularly for dissolution processes.

Acknowledgement

The Migr'Hycar research project is supported by the French Research Agency ANR as a result of the PRECODO 2008 call for proposals. The PRECODO Eco-technology and Sustainable Development Programme is a research scheme aimed at supporting emerging techniques, procedures and concepts that can help control the environmental impact of industrial and urban activity. The authors would like to thank all Migr'Hycar partners who have contributed significantly to this paper (EDF, Saint-Venant Laboratory for Hydraulics (Michel Benoit), VERI (Emmanuel Soyeux), Laboratoire de Chimie Agro-industrielle (Mireille Vignoles, Caroline Sablayrolles and Pascale de Caro), CEDRE (Vincent Gouriou and Julien Guyomarch), Artelia (Olivier Bertrand), TOTAL (Nicolas Lesage and Yann Fortin)).

References

ASCE (1996). State of the Art Review of Modeling Transport and Fate of Oil Spills. *Journal of Hydraulic Engineering*, 122:594–609.

Boethling, R. (2000). *Handbook of Property Estimation Methods for Chemicals: Environmental and Health Sciences*. CRC Press LLC.

Bonnemains, J., Bossard, C., Crépeau, E., and Fenn, E. (2011). Atlas 2008–2010 des marées noires dans les eaux intérieures. Technical report, Association des Robins des Bois.

Fay, J. (1971). Physical processes in the spread of oil on a water surface. Proc. In *Proceedings of the Joint Conference on Prevention and Control of oil spills*, pages 463–467, American Petroleum Institute.

Gardiner, C. (2004). *Handbook of stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. Springer Series in Synergetics, Stuttgart.

Guo, W. and Wang, Y. (2009). A numerical oil spill model based on a hybrid method. *Marine Bulletin Pollution*, 58:726–734.

Hervouet, J.-M. (2007). *Hydrodynamics of free surface flows*. Wiley, Chichester.

Hibbs, D., Chen, Y., Gulliver, J., and Vaughan, R. (1997). A two phase riverine spill model. Proc. *International Oil Spill Conference*, pages 567–572, United States.

Hibbs, D., Gulliver, J., Voller, V., and Chen, Y.-F. (1999). An aqueous concentration model for riverine spills. *Journal of Hazardous Materials*, 64:37–53.

Joly, A. (2009). Study and implementation of a stochastic method for turbulent diffusion in a finite element two-dimensional shallow water equations solver. Technical report, EDF R&D.

Jones, R. K. (1997). A simplified Pseudo-component Oil Evaporation Model. Proc. *Proceedings of the twentieth Arctic and Marine oilspill program*, pages 43–61, .

Lonin, S. A. (1999). Lagrangian model for oil spill diffusion at sea. *Spill Science & Technology Bulletin*, 5:331–336.

Mackay, D. and Matsugu, R. (1973). Evaporation rates of liquid hydrocarbon spills on land and water. *Journal of Chemical engineering*, 52:434–439.

Maroihi, K., Deleersnijder, E., and Loffet, A. (1992). Mathematical simulation of oil spill at sea and comparison with observations by remote sensing. *Hydroecological application*, 2:23–31.

Nagheby, M. and Kalahdoozan, M. (2008). An Eulerian-Lagrangian model for prediction of oil spill trajectory in seawater. Proc. *COPEDEC VII*, page 212, Dubai.

Osamor, C. and Ahlert, R. (1981). Oil slick Dispersal Mechanics. Technical report, Chemical and Biochemical Engineering.

Papadimitrakakis, J., Psaltaki, M., Christolis, M., and Markatos, N. (2006). Simulating the fate of an oil spill near coastal zones: The case of a spill (from a power plant) at the Greek Island of Lesbos. *Environmental Modelling and Software*, 21:170–177.

Shen, H. and Yapa, P. (1988). Oil slick transport in rivers. *Journal Hydraulic Engineering*, 114:529–542.

Stiver, W. and Mackay, D. (1984). Evaporation rates of spills of hydrocarbons and petroleum mixtures. *Environmental Sciences and Technology*, 18:834–840.

Sue, S.-W. (2006). A hybrid approach to particle tracking Eulerian-Lagrangian models in simulation of coastal dispersion. *Environmental Modelling and Software*, 21:234–242.

Tkalich, P., Huda, M. K., and Gin, K. Y. H. (2003). A multiphase oil spill model. *Journal of Hydraulic Research*, 41:115–152.

Violeau, D. (2009). Explicit Algebraic Reynolds stresses and scalar fluxes for density stratified shear flows. *Physics of fluids*, 21:035103.

Warluzel, A. and Benque, J. (1981). Un modèle mathématique de transport et d'étalement d'une nappe d'hydrocarbures. Proc. *Mechanics of oil slicks*, pages 199–211, Paris.

Yapa, P. and Shen, H. (1994). Modeling River Oil-Spills – A Review. *Journal of Hydraulic Research*, 32:765–782.

Zheng, L., Yapa, P., and Shen, F. (2003). A model for simulating deepwater oil and gas blowouts –Part I: Theory and Model formulation. *Journal of Hydraulic Research*, 41:339–351.

Références

- ARTELIA (2009). Développement et exploitation d'un modèle hydrosédimentaire en trois dimensions sur l'estuaire de la Loire. Technical report. (Cité en pages 148 et 151.)
- ASCE Task Committee (1996). State-of-the-art review of modeling transport and fate of oil spills. *J. Hydraulic Eng.*, 122 (11), pp.594-609. (Cité en pages 21, 32, 36, 68 et 84.)
- Aslangul, C. (2005). Physique statistique des fluides classiques. Technical report, Université de Pierre et Marie Curie. (Cité en page vii.)
- Badiali, D., Marcheggiano, A., and Pallone, F. (1985). Melanosis of the rectum in patients with chronic constipation. *Dis. Colon Rectum*. (Cité en page 13.)
- Baltussen, E., David, F., Sandra, P., Janssen, H.-G., and Cramers, C. (1998). Retention model for sorptive extraction-thermal desorption of aqueous samples : application to the automated analysis of pesticides and polyaromatic hydrocarbons in water samples. *J. Chromatogr. A*, 805, pp. 237-247. (Cité en page 106.)
- BEA mer (2006). Abordage entre les deux navires citernes de gaz de pétrole liquifié Sigmagas et Happy Bride survenu le 4 janvier 2006 dans l'estuaire de la Loire. Technical report. (Cité en page 152.)
- Betancourt, F., Palacio, A., and Rodriguez, A. (2005). Effects of the Mass Transfer Process in Oil Spill. *American Journal of Applied Sciences* 2(5) :939-946. (Cité en page 33.)
- Bocard, C. (2006). *Marées noires et sols pollués par des hydrocarbures*. Edition Technip. (Cité en pages 4, 29, 84, 91 et 94.)
- Boethling, R., Mackay, D., and Lyman, W. (2000). *Handbook of Property Estimation Methods for Chemicals : Environmental and Health Sciences*. CRC Press LLC. (Cité en pages XXV, 87, 89, 90 et 129.)
- Bonnemains, J., Bossard, C., Crépeau, E., and Fenn, E. (2011). Atlas des marées noires dans les eaux intérieures du 1er janvier 2008 au 31 décembre 2010. Technical report, Association des Robins des Bois. (Cité en pages 2, 6, 7, 9 et 164.)

Références

- Boufadel, M. (2000). A mechanistic study of nonlinear solute transport in a groundwater-surface water system under steady state and transient hydraulic condition. *Water Resources Research*, 36 :2549-2565. (Cité en page 95.)
- Boufadel, M., Du, K., Kaku, V., and Weaver, J. (2007). Lagrangian simulation of oil droplets transport due to regular waves. *Environmental Modelling & Software*, 22, pp.978-986. (Cité en pages 28 et 95.)
- Boufadel, M., Suidan, M., and Venosa, A. (2006). Tracer Studies in Laboratory Beach Simulating Tidal Influences. *Journal of Environmental Engineering*, 132 :616-623. (Cité en page 39.)
- BP (2010). British Petroleum Statistical Review of World Energy. Technical report. (Cité en pages XIX et 5.)
- Carmo, J., Pinho, J., and Vieira, J. (2010). Oil Spills in Coastal Zones : Predicting Slick Transport and Weathering Processes. *The Open Ocean Engineering Journal*, 3, 129-142. (Cité en page 21.)
- CEDRE (2006a). Cartographies de l'accident "Happy Bride". Technical report, CEDRE. (Cité en page 154.)
- CEDRE (2006b). Collision entre les butaniers Happy Bride et Sigmagas dans l'estuaire de la Loire : Rapport d'intervention du 5 janvier au 3 mars 2006. Technical report, CEDRE. (Cité en page 154.)
- CEDRE (2009). Observation aérienne des pollutions pétrolières en mer : Guide opérationnel. Technical report, CEDRE. (Cité en pages XIX, XXV, 19, 24, 25 et 35.)
- Cekirge, H., Koch, M., Long, C., Giammona, C., Binkley, K., Engelhardt, R., and Jamail, R. (1995). State-of-the-art techniques in oil spill modelling. *International Oil Spill Conference*. (Cité en page 32.)
- Centre of Documentation, Research and Experimentation on Accidental Water Pollution (2012). *CEDRE home page*. <http://www.cedre.fr>.
- Chao, X., Shankar, J., and FattCheong, N. (2001). Two- and three-dimensional oil spill model for coastal waters. *Ocean engineering*, vol. 28, no. 12, pp.1557-1573. (Cité en pages 25, 28 et 39.)
- Cheng, N.-S., Law, A.-K., and Findikakis, A. (2000). Oil transport in the surf zone. *Journal of Hydraulic Engineering*, Vol 126, pp.803-809. (Cité en pages 39 et 95.)
- Cohen, Y., Mackay, D., and Shiu, W. (1980). Mass transfer rates between oil slicks and water. *The Canadian J. Chem. Eng.*, 58 :569-575. (Cité en page 33.)

- Danchuk, S. (2009). The fate and transport of light petroleum hydrocarbons in the lower Mississippi river delta. Technical report, the Graduate Faculty of the Louisiana State University and Agricultural and Mechanical College. (Cité en pages XIX, 34, 37, 38, 41 et 94.)
- Danchuk, S. and Wilson, C. (2010). Effects of shoreline sensitivity on oil spill trajectory modeling of the Lower Mississippi River. *Environment Sciences Pollution Res*, 17 :331-340. (Cité en pages 40 et 96.)
- Daniel, P. (1996). Operational Forecasting of Oil Spill at Météo-France. *Spill Science & Technology Bulletin*, Vol.3, No.1/2, pp.53-64. (Cité en pages 21 et 23.)
- Daniel, P. (1997). Modélisation de la dérive des nappes d'hydrocarbures en mer. *La Météorologie, série.8, No.19*, pp.6-17. (Cité en page 81.)
- Daniel, P., Josse, P., Dandin, P., Gouriou, V., Marchand, M., and Tiercelin, C. (2001). Forecasting the Erika oil spills. *International Oil Spill Conference*, pp.649-655. (Cité en page 123.)
- David, F. and Sandra, P. (2007). Stir bar sorptive extraction for trace analysis. *J. Chromatogr. A*, pp.54-69. (Cité en page 106.)
- Delvigne, G. (2002). Physical appearance of oil in oil-contaminated sediment. *Spill Science and technology Bulletin*, Vol.8, pp.55-63. (Cité en page 40.)
- Delvigne, G. and Sweeney, C. (1988). Natural Dispersion of oil. *Oil and Chemical Pollution*, Vol.4, pp.281-310. (Cité en page 34.)
- Doré, A. (2001). Actualisation du modèle de prévision de la dérive de nappes MOTHY. Technical report, CEDRE, METEO France. (Cité en pages 29, 30, 36 et 109.)
- Elliott, A., Hurford, N., and Penn, C. (1986). Shear Diffusion and the Spreading of oil slicks. *Marine Pollution Bulletin*, vol.17, No.7, pp. 308-313. (Cité en pages 22, 28 et 33.)
- Emergency Response Division, OR&R, NOS, NOAA (2012). Adios home page. <http://response.restoration.noaa.gov/adios>.
- Fay, J. (1971). Physical processes in the spread of oil on a water surface. *Proceeding of the joint conference on prevention and control of oil spills*. American Petroleum Institute. (Cité en pages XXV, 27, 69, 81, 83, 127, 128, 132, 136, 142, 153 et 166.)
- Fingas, M. (1997). Studies on the evaporation of crude oil and petroleum products : I. the relationship between evaporation rate and time. *Journal of Hazardous Materials* 56, pp.227-256. (Cité en page 31.)
- Fingas, M., Fieldhouse, B., and Mullin, J. (1999). Water-in-oil emulsions : results of formation studies and applicability to oil spill modelling. *Spill Science and Technology Bulletin* 5(1), 81-91. (Cité en page 36.)

Références

- Flather, R. (1976). Results from surge prediction model of the North-West European continental shelf for April, November and December 1973. Technical report, Institute of Oceanography (UK). (Cité en page 153.)
- French McCay, D. and Payne, J. (2001). Model of oil fate and water concentrations with and without application of dispersants. *Proceedings of the 24th Arctic and Marine Oilspill*, pp.611-645. (Cité en page 42.)
- Gallagher, I. (2010). Autour des équations de Navier-Stokes. *Images des Mathématiques*. CNRS. (Cité en page 49.)
- Galt, J. (1997). The Integration of Trajectory Models and Analysis into Spill Response Information System. *Spill Science & Technology Bulletin*, Vol.4, No.2, pp.123-129. (Cité en pages 22 et 23.)
- Gardiner, C. (2004). *Handbook of stochastic Method for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. Springer Series in Synergetics, Stuttgart. (Cité en page 78.)
- Gomez, D. (2010). Etude approfondie de l'influence de la nature chimique fine des polluants hydrocarbures sur le calcul du risque sanitaire. Technical report, AXE environnement. (Cité en pages XIX et 11.)
- Gouriou, V. (2012). Analyse réglementaire de l'alerte et de la gestion des crises liées aux déversements accidentels d'hydrocarbures dans les eaux continentales et estuariennes en Europe. Technical report, CEDRE. (Cité en pages XIX, 6, 7, 8, 9, 10 et 164.)
- Grain, C., Lyman, W., Reehl, W., and Rosenblatt, D. (1982). Handbook of Chemical Property Estimation Methods. *Mc Graw-Hill*, Chap. 14, pp.1-20. (Cité en page 89.)
- Groupe de travail MIGR'HYCAR (2010). Projet MIGR'HYCAR-Gestion opérationnelle des risques liés aux migrations de nappes d'hydrocarbures dans les eaux continentales. Technical report, Projet ANR. (Cité en page 103.)
- Groupement d'Intérêt Public Loire Estuaire (2012). *GIP Loire home page*. <http://www.loire-estuaire.org>.
- Guo, W. and Wang, Y. (2009). A numerical oil spill model based on a hybrid method. *Marine Pollution Bulletin*. (Cité en pages 24, 26, 28 et 31.)
- Gupta, P., Banerjee, D., and Bhargava, S. (1993). Prevalence of impaired lung function in rubber manufacturing factory workers exposed to benzo(a)pyrene and respirable particulate matter. *Indoor Environ 2* :26-31. (Cité en page 13.)
- Guyomarch, J., Merlin, F., and Bermanose, P. (1999). Oil interaction with mineral fines and chemical dispersion : behavior of the dispersed oil in coastal or estuarine condition. *In Environment Canada's 22nd Arctic and Marine Oil spill (AMOP)*, pp137-149. (Cité en page 40.)

- Hervouet, J.-M. (2001). Système de modélisation Telemac : Manuel utilisateur. Technical report, EDF R&D. (Cité en pages XIX et 48.)
- Hervouet, J.-M. (2007). *Hydrodynamics of Free Surface Flows : Modelling with the finite element method*. Edition Wiley. (Cité en pages 48 et 92.)
- Hibbs, D., Chen, Y., Gulliver, J., and Voller, V. (1997). A two-phase riverine spill model. *International Oil Spill Conference*, pp.567-571. (Cité en pages 32 et 43.)
- Hibbs, D. and Gulliver, J. (1999). Processes controlling aqueous concentrations for riverine spills. *Journal of Hazardous Materials*, pp.57-73. (Cité en pages 42 et 92.)
- Hibbs, D., Gulliver, J., Voller, V., and Chen, Y.-F. (1999). An aqueous concentration model for riverine spills. *Journal of Hazardous Materials*, pp.37-53. (Cité en pages 38 et 42.)
- Hollinger, J. and Mennella, R. (1973). Measurements of the distribution and volume of sea surface oil spills using multifrequency microwave radiometry. *Nat. Res. Lab, rep 7512*, 5 pp. (Cité en pages 83 et 84.)
- Humphrey, B., Owens, E., and Sergy, G. (1993). Development of a stranded oil in coarse sediment model. *Proceedings of International Oil Spill Conference*, pp.575-582. (Cité en page 39.)
- Ifremer (2012). *Site Ifremer consacré à l'environnement littoral*. <http://www.ifremer.fr/envlit/>.
- Janeiro, J., Fernandes, E., Martins, F., and Fernandes, R. (2008). Wind and freshwater influence over hydrocarbon dispersal on Patos Lagoon, Brazil. *Marine Pollution Bulletin*, 56, 650-665. (Cité en page 21.)
- Joly, A. (2009). Study and implementation of a stochastic method for turbulent diffusion in a finite element two-dimensional shallow water equations solver. Technical report, EDF R&D. (Cité en page 121.)
- Jones, R. (1997). A Simplified Pseudo-component Oil Evaporation model. *Proceedings of the Twentieth Arctic and Marine Oilspill Program*. (Cité en pages 29, 87, 108 et 129.)
- Jouan, M., Lazure, P., Daniel, P., and Josse, P. (2001). Evaluation du potentiel de MARS3D pour la prévision de dérive de nappe d'hydrocarbures et comparaison avec MOTHY dans le cas de l'Erika. Technical report, IFREMER & Météo France. (Cité en pages 21, 23, 31 et 69.)
- Jourdain, B. (2009). *Probabilité et statistique*. Editions Ellipse, France. (Cité en pages 79 et 125.)
- Julien, P. (2010). *Erosion and Sedimentation*. Cambridge University Press, Colorado State University. (Cité en page 96.)

Références

- Lafon, D., Pichard, A., and Bisson, M. (2000). Evaluation du danger toxicologique du fioul rejeté sur les côtes. Technical report, INERIS. (Cité en pages [XXV](#), [13](#) et [91](#).)
- Lee, K. and Stoffyn-Egli, P. (2001). Characterization of oil-mineral aggregates. *Proceedings of the International Oil Spill Conference*, pp. 991-996. American Petroleum Institute. (Cité en page [40](#).)
- Lehr, W., Fraga, R., and Cekirge, H. (1984). A new technique to estimate initial spill size using a modified fay-type spreading formula. *Marine Pollution Bulletin*, Vol.15, No.9, pp.326-329. (Cité en page [27](#).)
- Lehr, W. and Simecek-Beatty, D. (2000). The relation of langmuir circulation processes to the standard oil spill spreading, dispersion, and transport algorithms. *Spill Science & Technology Bulletin*, Vol.6, No.3/4, pp.247-253. (in press). (Cité en pages [XIX](#) et [28](#).)
- Leymarie, J. and Le Saux, J. (1988). Etude de la migration des hydrocarbures en rivière. Technical report, EDF R&D. (Cité en page [27](#).)
- Lonin, S. (1999). Lagrangian model for oil spill diffusion at sea. *Spill & Technology Bulletin* 5 (5/6), pp.331-336. (Cité en pages [22](#) et [26](#).)
- Lyman, W., Reehl, W., and Rosenblatt, D. (1982). *Handbook of Chemical Property Estimation Methods*. McGraw-Hill Book Collection, New York. (Cité en page [42](#).)
- Mackay, D., Buist, I., and Mascarenhas, R. Paterson, S. (1980). Oil spill processes and models. Technical report, Environment Canada EE-8. (Cité en page [36](#).)
- Mackay, D. and Leinonen, P. (1977). Mathematical model of the behavior of oil spills on water with natural and chemical dispersion. Technical report, Economic and Technical Review Report EPS-3-EC-77-19. Fisheries and Environment Canada, Ottawa, ON. (Cité en pages [XXV](#) et [32](#).)
- Mackay, D. and Matsugu, R. (1973). Evaporation Rates of Liquid Hydrocarbon Spills On Land and Water. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol.51, pp.434-439. (Cité en pages [XX](#), [29](#), [87](#), [129](#) et [141](#).)
- Mackay, D., Shiu, W., Ma, K.-C., and Lee, S. (2006). *Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organics Chemicals*. Taylor & Francis Group, Paris. (Cité en page [91](#).)
- Maroihi, K., Deleersnijder, E., and Loffet, A. (1992). Simulation mathématique des nappes d'hydrocarbures et comparaison avec les observations par télédétection. *Hydroécol. Appl.*, 4, pp.23-31. (Cité en pages [27](#), [81](#), [83](#), [84](#), [127](#), [128](#), [132](#), [136](#), [141](#), [142](#), [xxi](#), [xxii](#) et [xxiii](#).)
- Martin, P. (2001). Physique Statistique des processus irréversibles. Technical report, Ecole Normale Supérieur de Lyon. (Cité en page [viii](#).)
- Météo France (2012). *MOTHY home page*. <http://www.meteorologie.eu.org/mothy/>.

- MIGR'HYCAR Consortium (2012). *MIGR'HYCAR home page*. <http://www.migrhycar.com/>.
- Minier, J.-P. and Peirano, E. (2001). The pdf approach to turbulent polydispersed two-phase flows. *Physics Reports*, pp.1-214. Elsevier. (Cité en pages 77 et 78.)
- Mons, L. (2011). *Les enjeux de l'énergie*. Petite Encyclopédie LAROUSSE. (Cité en pages 4 et 5.)
- Muste, M., Fujita, I., and Hauet, A. (2008). Large-scale particle image velocimetry for measurements in riverine environments. *Water Resources Research*, vol. 44. (Cité en page 115.)
- Nagheeb, M. and Kalahdoozan, M. (2008). An Eulerian-Lagrangian model for prediction of oil spill trajectory in seawater. *Proc. COPEDEC VII*, pp.212-220. (Cité en page 24.)
- NOAA National Centers for Environmental Prediction (2012). *NOMADS Data Access home page*. <http://nomads.ncdc.noaa.gov/data.php/>.
- Osamor, C. and Alhert, R. (1981). Oil slick dispersal mechanics. Technical report, U.S Environmental Protection Agency. (Cité en pages 128 et 141.)
- Owens, E., Taylor, E., and Humphrey, B. (2008). The persistence and character of stranded oil on coarse-sediment beaches. *Marine Pollution Bulletin*, 5 :14-26. (Cité en page 38.)
- Papadimitrakakis, J., Psaltaki, M., Christolis, M., and Markatos, N. (2003). Simulating the fate of an oil spill near coastal zones : The case of a spill (From a power plant) at the greek island of Lesbos. *Environmental Modelling & Software* 21 pp.170-177. (Cité en page 22.)
- Payne, J., Kristein, B., Mc Nabb, G., Lambach, J., de Olivera, C., Jordan, R., and Hom, W. (1983). Multivariate analysis of petroleum hydrocarbon weathering in the subarctic marine environment. *Proceedings of Oil Spill Conference*. American Petroleum Institute. (Cité en page 32.)
- Pope, S. (2000). *Turbulent flows*. Cambridge university press. (Cité en page 58.)
- Ramette, M. (1981). Guide d'hydraulique fluviale. Technical report, EDF R&D LNH. (Cité en page 96.)
- Rastogi, A.-K. and Rodi, W. (1978). Predictions of heat and mass transfer in open channels. *Journal of the Hydraulics Division*, pp.397-420. ASCE. (Cité en page 59.)
- Reed, M. (2001). Technical description of the Dose-Related Exposure Assessment Model (DREAM). Technical report, SINTEF. (Cité en page 108.)
- Reed, M., French, D., Rines, H., and Rye, H. (1995). A three-dimensional oil and chemical spill model for environmental impact assessment. *Proceedings of the 1995 International Oil Spill Conference*, pp.61-66. (Cité en pages 21 et 42.)

Références

- Reed, M., Gundlach, E., and Kana, T. (1989). A coastal zone oil spill model : development and sensitivity studies. *Oil & Chemical Pollution*, 5, pp.411-449. (Cité en page 96.)
- Reed, M., Johansen, O., Brandvik, P., Daling, P., Lewis, A., Fiocco, R., Mackay, D., and Prentki, R. (1999). Oil spill modeling towards the close of the 20th century : Overview of the state of the art. *Spill science & Technology Bulletin*, Vol. 5, no. 1, pp.3-16. (Cité en pages 25, 26, 28, 34, 36, 37, 39 et 74.)
- Reed, M., Spaulding, M., Gundlach, E., Kana, T., and Siah, S. (1986). Formulation of a shoreline/oil spill interaction model. *Proceedings of the ninth Arctic and Marine Oilspill Program Technical Seminar*, pp.77-100. (Cité en page 96.)
- Rousseau, C. (2007). Bulletin d'information du CEDRE : Les pollutions en eaux intérieures. Technical report, CEDRE. (Cité en pages 146 et 152.)
- Sablayrolles, C., Guyomarch, J., and Thouvenel, F. (2011). Rapports sur les résultats de la caractérisation du comportement physico-chimique des hydrocarbures selon les conditions hydrauliques et morphologiques du site. Technical report, Projet ANR. (Cité en page 103.)
- Schmidt Etkin, D., French McCay, D., and Michel, J. (2007). Review of the State-of-the-Art on the modeling interaction between spilled oil and shorelines for the development of algorithms for oil spill risk analysis modeling. Technical report, US Department of Interior. (Cité en pages XXV, 39, xvii et xix.)
- Sebastiao, P. and Guedes Soares, C. (1995). Modelling the Fate of Oil Spills at Sea. *Spill Science & Technology Bulletin*, vol.2, No.2/3, pp.121-131. (Cité en page 82.)
- Shen, H. and Yapa, P. (1988). Oil Slick Transport in Rivers. *Journal of Hydraulic Engineering*, vol.114, No.5, pp.529-543. (Cité en pages 21, 27, 30, 33 et 92.)
- Stiver, W. and Mackay, D. (1984). Evaporation Rate of Spills of Hydrocarbons and Petroleum Mixtures. *Environmental Science & technology*, vol.18, No.11, pp.834-840. (Cité en pages 30 et 86.)
- Sue, S.-W. (2006). A hybrid approach to particle tracking Eulerian-Lagrangian models in simulation of coastal dispersion. *Environmental Modelling and Software*, vol.21, pp.234-242. (Cité en page 24.)
- TELEMAC Consortium (2012). *TELEMAC home page*. <http://www.opentelemac.org/>.
- Thual, O. (2010). *Hydrodynamique de l'environnement*. Edition de l'école Polytechnique. (Cité en page 72.)
- Tiercelin, C., Marchand, M., and Rousseau, C. (2000). Bulletin d'information du CEDRE : Spécial accident de l'Erika. Technical report, CEDRE. (Cité en page 122.)
- Tkalich, P. (2006). A CFD solution of oil spill problems. *Env. Modelling & Software*, 21(2), pp.271-282. (Cité en pages 22, 28 et 34.)

- Tkalich, P. and Chan, E. (2002). Vertical mixing of oil droplets by breaking waves. *Marine Pollution Bulletin* 44 (11), pp.1219-1229. (Cité en page 34.)
- Tkalich, P., Huda, K., and Yew Hoong Gin, K. (2003). A multiphase oil spill model. *Journal of Hydraulic Research* 41, pp.115-152. (Cité en page 68.)
- Verma, P., Wate, S., and Devotta, S. (2008). Simulation of impact of oil spill in the ocean - a case study of Arabian Gulf. *Environ Monit Assess* 146 :191-201. (Cité en page 21.)
- Vessigaud, S. (2007). Re-mobilisation des hydrocarbures aromatiques polycycliques de terres industrielles de cockerie et mécanismes impliqués dans le "vieillissement" du fluoranthène. Technical report, Institut National Polytechnique de Lorraine. (Cité en page 107.)
- Violeau, D. (2009). Explicit algebraic Reynolds stresses and scalar fluxes for density-stratified shear flows. *Physic of Fluids* 21 :035103. (Cité en page 77.)
- Violeau, D. (2012). *Fluids Mechanics and the SPH method : Theory and Applications*. Oxford University Press, London. (Cité en page 72.)
- Viollet, P.-L., Chabard, J.-P., Esposito, P., and Laurence, D. (2002). *Mécanique des fluides appliquée*. Presse de l'école nationale des Ponts et Chaussées, Paris. (Cité en pages 56 et 58.)
- Vos, R. (2005). Comparison of 5 oil weathering models. Technical report, Rijkswaterstaat. (Cité en pages 83, 87, 128 et 166.)
- Wang, S., Shen, Y., Guo, Y., and Tang, J. (2008). Three-dimensional numerical simulation for transport of oil spills in seas. *Ocean Eng.*, 35, pp.503-510. (Cité en pages 23 et 25.)
- Wang, S., Shen, Y., and Zheng, Y. (2005). Two-dimensional numerical simulation for transport of oil spills in seas. *Ocean Eng.*, 32, pp.1556-1571. (Cité en pages 21, 31 et 33.)
- Warluzel, A. and Benque, J. (1981). Un modèle mathématique de transport et d'étalement d'une nappe d'hydrocarbure. *AIRH*, pp.199-212. (Cité en pages 27 et 82.)
- Weiyang, T. (1992). *Shallow water hydrodynamics : Mathematical Theory and numerical Solution for a two-dimensional System of Shallow Water Equations*. Elsevier Oceanography Series, 55, Nanjing Research Institute of Hydrology and Water Resources. (Cité en page 52.)
- Whitman, W. (1923). The two-film theory of absorption. *Chemical and Metallurgical Engineering*, 29 :147. (Cité en pages 33, 42, 84, 85, 91 et 97.)
- Wu, J. and Tsanis, I. (1995). A vertical/horizontal integration wind-induced circulation model (VHI3D) : A method for including surface and bottom logarithmic profiles. *Advances in Water Resources*, Vol.18, No. 2, pp.77-87. (Cité en pages 21 et 26.)
- Yapa, P., Dasanayaka, L., Shen, H., and Shen, H. (2005). Modeling Oil Transport and Spreading in Icy Waters. Technical report, Clarkson University. (Cité en page 37.)

Références

- Yapa, P. and Shen, H. (1994). Modeling River Oil-Spills - A Review. *Journal of Hydraulic Research*, Vol.41, pp.339-351. (Cité en pages 26 et 38.)
- Zhang, D., Easton, A., and Steiner, J. (1997). Simulation of Coastal Oil Spills using the Random Walk Particle Method with Gaussian Kernel Weighting. *Spill Science & Technology Bulletin*, Vol.4, No.2, pp.71-88. (Cité en page 40.)