UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

ÉCOLE DOCTORALE : SCIENCES DE LA TERRE, DE L'UNIVERS ET DE L'ENVIRONNEMENT

Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg UMR 7517

THÈSE

Présentée par :

Salsabil MARZOUGUI JAAFAR

Soutenue le **29 Janvier 2013**

Pour obtenir le grade de : **Docteur de l'université de Strasbourg**

Discipline : Sciences de la Terre et de l'Univers

Transfert d'un composé organo-chloré depuis une zone source localisée en zone non saturée d'un aquifère poreux vers l'interface sol-air : expérimentations et modélisations associées

THÈSE dirigée par :
M. SCHAFER Gerhard Professeur, Université de Strasbourg

RAPPORTEURS :
Mme JOUNIAUX Laurence Directeur de recherche, IPGS UMR7516, Université de Strasbourg
Mme SIMONNOT Marie-Odile Professeur, EEIGM, Université de Lorraine
M. BERTIN Henri Directeur de recherche, ENSAM, Bordeaux

EXAMINATEURS :
M. YONUES Rafic Professeur, Université de Beyrouth
M. JELLALI Salah Maître de conférences, CERTE, Tunisie

à ma famille...

Le travail présenté dans ce mémoire a été effectué dans le Laboratoire d'Hydrologie et de Géochimie de Strasbourg (LHyGeS) au sein de l'équipe Transferts Réactifs dans les Hydrosystèmes Anthropisés (TReHA). Je remercie M. Philippe Ackerer, directeur du laboratoire jusqu'à fin 2012, de m'avoir accueilli au sein de leur établissement.

Je tiens à exprimer ma plus sincère gratitude à mon directeur de thèse, Pr. Gerhard Schäfer, qui m'a apporté tout au long de ce travail, son soutien, ses conseils et les précieuses discussions que nous avons mené durant l'élaboration de ce travail. Qu'il trouve ici le témoignage de ma profonde reconnaissance.

Je remercie vivement **M. Rafik Youne**s d'avoir accepté d'être président de mon Jury de thèse, mes trois rapporteurs **Mme Laurence Jouniaux** et **Mme Marie Odile Simonot** et **M. Henri Bertin** pour leur lecture attentive du manuscrit. Je remercie également **M. Salah Jellali** d'avoir accepté d'être examinateur de mon manuscrit. Je tiens aussi à remercier **Mme Sylvie Traverse** et **M. Manuel Marcoux** d'avoir accepté notre invitation pour le jury de thèse.

Mes remerciements vont aussi à Olivier Razakarisoa et Solenn Cotel, ingénieurs de recherche au CNRS pour leurs contributions et leurs conseils pendant les études expérimentales effectuées sur le site SCERES au sein de l'antenne de LHyGeS au Campus de Cronenbourg 'IFARE'.

Je remercie aussi Pascal Friedmann, technicien au CNRS, pour sa participation sur le bassin SCERES et pendant les analyses au laboratoire.

Ce travail de thèse a été inscrit dans le cadre du Projet FLUXOBAT (Programme Ecotechnologies et Développement Durable (PRECODD) commencé en 2008). Je tiens à remercier tous les partenaires de projet : BURGEAP, IMFT, INERIS, TERRA environnement, CSTB et Communité Urbaine de Grand Lyon.

Je remercie également toute l'équipe « TReHA » et tous mes collègues de LHyGeS avec qui pendant les années de doctorat j'ai partagé le quotidien. Merci donc à Fanilo, Laurianne, Morgane, Najib, Amor et Noura.

Cela va de soi, j'exprime mes sentiments envers mes amis en particulier Hanene, Emna, Sana, Ines et ahmed Modalal, Ferdaws et Ahmed Maghraoui, Fatma et Ali Halal, Fatma et Samer Merhi, Abdelatif, Saber, Assil, Amani et Lamjed. Je voudrais les remercier énormément pour leurs soutiens pendant les moments difficiles, MERCI POUR TOUT.

D’autres personnes qui comptent beaucoup pour moi et qui m’ont toujours soutenu et encouragé pour continuer dans cette voie, je remercie donc mes chers parents, ma sœur Chaïma et mes deux frères Rami et Mohamed Hani. Sans leurs soutiens irremplaçables, je ne serai pas là où je suis. Aucun mot ne pourrait exprimer mes sentiments envers eux. Que dieu vous prête une longue vie pour voir tous vos rêves s’accomplir.

Je remercie aussi ma grande famille, ma belle famille, mes tantes et mes oncles pour leurs encouragements inconditionnels durant les années de mes études supérieures.

Enfin, je dois tout mon amour à mon cher mari Ali qui m’a apporté tout au long de mes études en France, soutien, encouragement, compréhension, respect et amour qui m’ont permis de ne jamais dévier de mon objectif final. Je ne saurais trouver les mots pour exprimer tous mes sentiments. Je t’adresse les plus sincères des remerciements.

Sommaire

Avant propos.....1

SOMMAIRE.....3

Table des illustrations.....8

Introduction.....19

Chapitre 1 : Généralités sur les solvants chlorés, leur devenir dans le milieu poreux et leur transfert depuis le sol vers l'extérieur.....27

1.1 Solvants chlorés.....29

1.1.1 Définition.....29

1.1.2 Utilisation dans l'industrie.....29

1.1.3 Menace pour l'écosystème.....29

1.1.4 Propriétés physico-chimiques des solvants chlorés.....29

1.2 Comportement du DNAPL dans le milieu poreux.....31

1.2.1 Infiltration du DNAPL dans le sol.....31

1.2.2 Devenir du DNAPL dans le sous sol.....32

1.3 Mécanismes de transport des COV dans le milieu poreux.....33

1.3.1 Transport par diffusion.....33

1.3.2 Transport par convection.....34

1.4 Intrusion des vapeurs de COV dans l'air intérieur des bâtiments.....35

1.4.1 Fuites possibles à travers une dalle de béton.....36

1.4.2 Mécanismes de transport à travers la dalle de béton.....37

1.4.3 Caractéristiques du béton et influences sur le transfert diffusif et convectif.....38

1.5 Que va-t-on modéliser et comment ?.....38

1.5.1 Panache de vapeurs dans le milieu poreux.....38

1.5.2 Flux de vapeurs à l'interface sol/atmosphère.....39

1.5.3 Effet de la densité et du gradient de pression motrice des vapeurs 39

1.5.4 Flux de vapeurs de COV à travers l'interface sol/air intérieur des bâtiments 39

Chapitre 2: Matériels et mesures expérimentaux 41

2.1 Site expérimental SCERES 43

2.1.1 Aquifère poreux et ses conditions aux limites 45

2.1.2 Composition de l'aquifère 46

2.1.3 DNAPL utilisé 48

2.1.4 Zone source de pollution 49

2.2 Dalle de béton fissurée 51

2.2.1 Caractéristiques de la dalle 52

2.2.2 Mise en place de la dalle : 53

2.3 Cloche en acier inoxydable 54

2.4 Mesures effectuées lors de SCERES1 et 2 56

2.4.1 Concentrations de vapeurs de TCE dans la zone non saturée 56

2.4.2 Pressions de l'air du sol 58

2.4.3 Profils hydriques 62

2.4.4 Déplacement vertical du toit de la nappe 64

2.4.5 Flux de vapeurs à l'interface sol/atmosphère et dalle de béton/atmosphère : Chambre à flux 66

2.4.6 Autres mesures effectuées pendant les expérimentations sur SCERES 72

2.5 Etudes des paramètres de la dalle de béton 73

2.5.1 Perméabilité 73

2.5.2 Coefficient de la diffusion effective 77

2.5.3 Porosité de la dalle de béton 79

2.5.4 Tortuosité de la dalle de béton 79

Chapitre 3 : Approches de calcul et outils numériques 81

3.1 Positionnement de notre étude 83

3.2 Solution semi –analytique du transport 1D convectif-diffusif-dispersif 84

3.3 SIMUSCOPP 90

3.3.1 Description du code de calcul SIMUSCOPP 90

3.3.2 Relations constitutives 92

3.3.3 Discrétisation spatiale utilisée 94

3.4 COMSOL 96

3.4.1 Description du COMSOL 97

3.4.2 Équations utilises pour la modélisation du problème 97

3.5 Solution analytique d'un système type mélangeur 99

3.6 Code numérique 1D 101

Chapitre 4: Prediction of vertical DNAPL vapour fluxes in soils using quasi-analytical approaches: bias related to density-driven and pressure-gradient-induced advection 103

4.1 Introduction 106

4.2 Mathematical tool 108

4.2.1 Flow model 98

4.2.2 Transport model 110

4.2.3 Numerical flow and transport model 111

4.3 Case studies 113

4.3.1 Characteristics of porous media 113

4.3.2 Water content and effective diffusion coefficient 115

4.3.3 Initial and boundary conditions 116

4.3.4 Calculated DNAPL vapour concentration and pressure profiles and vapour fluxes 118

4.4 Detailed error analysis 127

4.4.1 Diffusion-based quasi-analytical approach (approach 1) 127

4.4.2 Diffusion-dispersion-advection-based quasi-analytical approach (approach 2) 128

4.4.3 Relative errors 129

4.4.4 Predicted vapour fluxes under steady-state conditions 130

4.5 Conclusions 137

Chapitre 5 : Etude expérimentale du panache de vapeurs de TCE dans SCERES et simulations numériques associées (SCERES1 et SCERES2) 139

5.1. Expériences sur SCERES 141

5.1.1 Déroulement de SCERES1 141

5.1.2 Déroulement de SCERES2 143

5.1.3 Réseau de mesures choisi 144

5.2 Evolution du profil hydrique et de la température pendant les expériences 146

5.2.1 Profil hydrique 146

5.2.2 Température 148

5.3 Caractérisation de la dalle 1 et la dalle 2 149

5.3.1 Perméabilité 149

5.3.2 Coefficient de la diffusion effective 153

5.4 Pression de l'air du sol et concentration de vapeurs de TCE lors de SCERES1 et SCERES2 161

5.4.1 Champ de pression dans l'air du sol 161

5.4.2 Champ de concentration de vapeurs de TCE 170

5.5 Simulation numérique de SCERES1 et SCERES2 180

5.5.1 Maillage de la zone source 181

5.5.2 Courbes de pression capillaires et de perméabilité relatives 182

5.5.3 Paramètres choisis dans les simulations 184

5.5.4 Panache de vapeurs de TCE simulé 186

5.5.5 Etude de sensibilité 201

Chapitre 6 : Etude du transfert de vapeurs de TCE aux interfaces sol/atmosphère et dalle de béton/air intérieur (SCERES1 et SCERES2) 207

6.1 Flux de vapeurs de TCE à l'interface sol/atmosphère 209

6.1.1 Flux de vapeurs de TCE mesurés 209

6.1.2 Flux de vapeurs de TCE calculé à l'interface sol/atmosphère 219

6.2 Flux de vapeurs de TCE à l'interface dalle de béton/air intérieur de la cloche 225

6.2.1 Transfert des vapeurs de TCE à travers la dalle de béton sans mise en dépression 226

6.2.2 Transfert des vapeurs de TCE à travers la dalle de béton induit par la mise en dépression de la cloche 231

6.2.3 Modélisation en 3D de la mise en dépression de la cloche (COMSOL) 245

Chapitre 7 : Conclusions générales et perspectives 279

Bibliographie 289

ANNEXES 301

Figures

Figure 1 : Principales sources de pollution des sols 21

Figure 2 : Nombre de sites pollués ou potentiellement pollués en Europe en 2006 (EEB, 2011) 22

Figure 1. 1 : Coupe longitudinale d'un sol pollué par un DNAPL 33

Figure 1. 2 : Intrusion des vapeurs de DNAPL dans l'air intérieur des bâtiments 36

Figure 2. 1 : Le site expérimental SCERES (photo prise en 2009) 44

Figure 2. 2 : Vue de dessus du site SCERES et ses différents équipements lors du projet FLUXOBAT 44

Figure 2. 3 : Coupe longitudinale du bassin SCERES 46

Figure 2. 4 : Vue de dessus du bassin SCERES 46

Figure 2. 5 : Position de la zone source de TCE sur SCERES 49

Figure 2. 6 : Embouts en laiton crépines servant à l'injection de TCE dans le sous sol 50

Figure 2. 7 : Tuyaux d'injection de la zone source à la surface du sol 51

Figure 2. 8 : Dalle 1 (suivant l'axe AA') 52

Figure 2. 9 : Dalle 2 52

Figure 2. 10 : Étapes de mise en place de la dalle de béton sur le site SCERES 54

Figure 2. 11 : La cloche en acier inoxydable installée sur la dalle (suivant l'axe AA') 55

Figure 2. 12: Expérience de la mise en dépression dans la cloche 56

Figure 2. 13 : Dispositif de prélèvement des vapeurs de TCE dans la zone non saturée 57

Figure 2. 14 : Points de mesure de concentration des vapeurs de TCE (1C, 2C, 3C) sous la dalle de béton 58

Figure 2. 15: Points de mesure de concentration des vapeurs de TCE (1C, 2C, 3C) et de pression de l'air du sol (1P,2P) sous la dalle de béton-coupe verticale 58

Figure 2. 16 : Profondeur de mesure de la pression de l'air du sol 59

Figure 2. 17 : Capteur de pression différentielle d'air Greisinger 60

Figure 2. 18 : Capteurs de pression différentielle de l'air (1P,2P) placés sous la dalle de béton, vue de dessus 60

Figure 2. 19: Pression dans l'air de sol en un point M 61

Figure 2. 20 : La sonde capacitive EnviroSMART 62

Figure 2. 21 : Etalonnage des sondes Sentek (Milieu hors des blocs) 63

Figure 2. 22 : Emplacement des tubes d'accès pour la sonde TDR sur SCERES (suivant l'axe AA') 64

Figure 2. 23 : La sonde TDR 64

Figure 2. 24 : Fosse amont et aval du site SCERES 65

Figure 2. 25 : Tubes piézométriques 65

Figure 2. 26 : Dispositif expérimental pour la mesure du flux de vapeurs de solvants chlorés à l'interface sol/l'atmosphère 67

Figure 2. 27 : Tube de charbon actif (OrboTM) 67

Figure 2. 28 : Analyseur de gaz INNOVA 68

Figure 2. 29 : Mesures de vitesse et directions de vent sur SCERES 73

Figure 2. 30 : Dispositif expérimental pour mesurer la perméabilité macroscopique de la dalle 74

Figure 2. 31 : TinyPerm, appareil de mesure de perméabilité locale 76

Figure 2. 32 : Dispositif expérimental pour la quantification de coefficient de diffusion effective D_{eg} de la dalle de béton 77

Figure 3. 1 : Tube tortueux 86

Figure 3. 2 : Comparaison entre les modèles de tortuosité : Penman Millington Quirk, Millington Quirk et Curie 88

Figure 3. 3 : Discrétisation spatiale suivant le plan vertical (x, z) 96

Figure 3. 4 : Discrétisation spatiale dans le plan horizontal (x, y) 96

Figure 3. 5 : Flux de masse dans un système de type mélangeur (dalle/cloche) 99

Figure 3. 6 : Schéma de la colonne divisée en N maille 102

Figure 4. 1 : Progress of computation 112

Figure 4. 2 : Schematic representation of the three case studies 113

Figure 4. 3 : Water content and effective diffusion coefficient as a function of depth used in the three case studies (Dridi and Schäfer 2006) 116

Figure 4. 4 : Initial conditions and boundary conditions 117

Figure 4. 5 : Influence of vapour density on TCE vapour concentrations (Run 1) transient concentration profiles in the soil columns for cases a) A, b) B and c) C and d) concentration profile at steady state obtained for case B compared with those of two homogeneous media with different intrinsic permeabilities 119

Figure 4. 6 : Diffusive, dispersive, convective and total fluxes in z-direction calculated in Run 1 at steady state for cases a) A, b) B and c) C, and d) driving pressure calculated at steady state in Run 1 for cases A, B and C 121

Figure 4. 7 : Normalised TCE vapour concentration in the column calculated at steady state in Runs 1, 2 and 3 for different prescribed upstream boundary concentrations for cases a) A, b) B and c) C 122

Figure 4. 8 : TCE vapour concentration calculated in Run 4 for cases a) A, b) B and c) C 123

Figure 4. 9 : Diffusive, dispersive, convective and total fluxes calculated in the z-direction for Run 4 at steady state for cases a) A, b) B, and c) C, and d) driving pressure calculated at steady state for Run 4 for cases A, B and C.....124

Figure 4. 10 : Normalised vapour concentration calculated at steady state for Runs 1, 3, 4, 6, 7, 9 and 11 for cases a) A, b) B and c) C, and d) the total vapour fluxes calculated at the soil surface in Run 11 for cases A, B and C.....126

Figure 4. 11 : Relative error as a function of the distance between the two points Δz for vapour density-driven induced advection (Run 1) at steady-state transport conditions for: cases studies a) A, b) B and c) C.....132

Figure 4. 12 : Relative error of the effective diffusion coefficient determined from approach 1, $\varepsilon = (D'_{eg} - \tilde{D}_{eg})/\tilde{D}_{eg}$, as a function of the distance between the two points Δz based on the database of Run 1 at steady-state transport conditions for case studies A (a), B (b) and C.....134

Figure 4. 13 : Relative error as a function of the distance between the two points Δz in the case of combined influence of density driven advection and pressure-gradient advection (Run 4) at steady-state transport conditions for cases studies a) A, b) B, and c) C, and d) relative errors at steady state for case A for Runs 4, 6, 9 and 11.....136

Figure 5. 1: Frise chronologique de l'expérience SCERES1 141

Figure 5. 2 : Zoom sur le déroulement de la mise en dépression pendant SCERES1 en présence de la dalle1.....142

Figure 5. 3 : Frise chronologique de l'expérience SCERES2.....143

Figure 5. 4 : Déroulement de la mise en dépression pendant SCERES2 en présence de la dalle2.....144

Figure 5. 5 : Réseau de mesures sur SCERES 145

Figure 5. 6: Coupe longitudinale le long de la dalle : mesures effectuées pendant SCERES1.....145

Figure 5. 7: Coupe longitudinale le long de la dalle : mesures effectuées pendant SCERES2.....145

Figure 5. 8 : Profils hydriques relevés au tube d'accès S1 (Figure 2. 20) 147

Figure 5. 9 : Conditions aux limites du bassin SCERES 148

Figure 5. 10: Température mesurée à la profondeur 0.45, 0.65 et 1.25 m lors SCERES1 et SCERES2 149

Figure 5. 11 : Essai de perméabilité globale de la dalle 1 150

Figure 5. 12 : Essais de perméabilité globale de la dalle 2.....151

Figure 5. 13 : Concentration de vapeurs de TCE dans la cloche_Dalle1 154

Figure 5. 14 : Concentrations de vapeurs de TCE mesurées sous la dalle aux points de mesures 1C, 2C et 3C _Dalle1 en fonction du temps 154

Figure 5. 15 : Colonne du milieu poreux.....155

Figure 5. 16 : Évolution de concentration de vapeurs de TCE mesurée dans la cloche et approchée par une courbe de tendance 156

Figure 5. 17 : Courbes de concentration moyenne de vapeurs de TCE calculée et mesurées sous la dalle 157

Figure 5. 18 : Courbes de sortie des concentrations de vapeurs de TCE calculées et mesurées sous la dalle 158

Figure 5. 19 : Evolution des flux de vapeurs de TCE diffusifs simulés et expérimental à partir du code numérique monodimensionnel pour le cas de la dalle 1 a)pendant 30 jours et b) pendant 3 jour....159

Figure 5. 20 : Concentration de vapeurs de TCE dans la cloche_Dalle2 160

Figure 5. 21 : Concentrations de vapeurs de TCE sous la dalle aux points de mesures 1C, 2C et 3C _Dalle2 en fonction du temps 161

Figure 5. 22 : Pressions relatives de l'air de sol à la profondeur 0.25 m et 0.45 m au niveau de la zone source_SCERES2 en fonction du temps 163

Figure 5. 23 : Température du sol mesurée à la profondeur de 0,25 m, température à la surface du sol et température de l'air extérieur à la hauteur 0,5 m pendant les 4 premiers jours de SCERES2 en fonction du temps.....163

Figure 5. 24 : Profil de saturation en eau pendant la montée du toit de la nappe_au niveau du tube d'accès S1 164

Figure 5. 25 : Pression de l'air de sol pendant le battement de la nappe_SCERES1 166

Figure 5. 26 : Pression de l'air de sol pendant le battement de la nappe_SCERES2 167

Figure 5. 27 : Pressions relatives sous la dalle résultant de la mise en dépression de l'air dans la cloche lors deSCERES1, avec la dalle1.....168

Figure 5. 28 : Pressions relatives sous la dalle causées par la mise en dépression de l'air dans la cloche lors de SCERES2, avec la dalle2.....168

Figure 5. 29 : Évolution de la concentration en vapeurs de TCE au point GA1 à différentes profondeurs lors de SCERES1 171

Figure 5. 30 : Évolution de la concentration en vapeurs de TCE au point GL à différentes profondeurs lors de SCERES1 171

Figure 5. 31 : Évolution de la concentration en vapeurs de TCE à différentes profondeurs aux points GA1 et GL lors de SCERES2 173

Figure 5. 32 : Évolution des concentrations de vapeur de TCE mesurées à la profondeur de 0,2 m aux points GM1, GI, GA1 lors deSCERES1.....174

Figure 5. 33 : Profil vertical des concentrations en TCE mesurées au point GA1 à 5, 10, 17 et 20 jours après l'injection de la zone source lors de SCERES1 175

Figure 5. 34 : Profil vertical des concentrations en TCE mesurées au point GA1 à 6, 11, 20 et 24 jours après l'injection de la zone source lors de SCERES2 176

Figure 5. 35 : Concentrations de vapeurs de TCE proche de la surface du sol sur l'axe de symétrie de SCERES au régime permanent_SCERES1.....177

Figure 5. 36 : Évolution de la concentration en vapeurs de TCE directement sous la dalle lors de SCERES1.....178

Figure 5. 37 : Évolution de la concentration en vapeurs de TCE sous la dalle à différentes profondeurs lors de SCERES2 179

Figure 5. 38 : Profils verticaux des concentrations en TCE en amont de la dalle mesurés 6, 12, 21 et 26 jours après l'injection de la zone source lors de SCERES2.....180

Figure 5. 39 : Extrait du maillage du domaine modélisé en coupes verticale et longitudinale et maillage de la zone source du TCE.....182

Figure 5. 40 : Pression capillaire pour le sable moyen dans le système diphasique eau/air 183

Figure 5. 41: Pression capillaire pour le sable fin dans le système diphasique eau/air.....183

Figure 5. 42 : Schématisation choisie de la dalle de béton et du gravier dans le modèle numérique SIMUSCOPP 186

Figure 5. 43 : Coupe longitudinale de la distribution simulée des concentrations de vapeurs de TCE (ppmv) à 5heures, 5, 10 et 17 jours après l'injection lors de SCERES1.....188

Figure 5. 44 : Coupe longitudinale et transversale de la distribution des vapeurs de TCE (ppmv) au niveau de la zone source 5 heures après le début de l'injection lors de SCERES1.....189

Figure 5. 45 : Évolution du profil vertical de la saturation en TCE calculée au centre da la zone source après l'injection du TCE lors de SCERES1 190

Figure 5. 46 : Évolution du profil vertical de la saturation en TCE calculée au centre da la zone source après l'injection du TCE lors de SCERES2 190

Figure 5. 47 : Concentration de TCE calculée lors de SCERES1 au niveau de la zone source en fonction du temps pour trois points de mesure localisés à 6,25 cm, 43,75 cm et 68,75 cm du centre de la zone source.....191

Figure 5. 48 : Concentrations de vapeurs de TCE mesurées et simulées au point GA1 aux profondeurs 0.25 m et 0.45 m lors de SCERES1 193

Figure 5. 49 : Concentrations de vapeurs de TCE mesurées et simulées au point GA1 aux profondeurs 0.25 m et 0.45 m lors de SCERES2 193

Figure 5. 50 : Coupe longitudinale de la distribution calculée des concentrations de vapeurs de TCE sous la dalle 1 au bout de 20 jours après l'injection du TCE lors de SCERES1.....194

Figure 5. 51 : Profondeurs prises pour le calcul des concentrations de vapeurs de TCE au niveau de la dalle 196

Figure 5. 52 : Concentrations de vapeurs de TCE mesurées sous la dalle au point 3C et celles calculées dans la dalle et dans le gravier G1 lors de SCERES1 197

Figure 5. 53 : Coupe longitudinale de la distribution des vapeurs de TCE calculée sous la dalle 2 au bout de 24 jours après l'injection de TCE lors de SCERES2.....198

Figure 5. 54 : Concentrations de vapeurs de TCE de TCE mesurées sous la dalle au point 3C et celles calculées dans la dalle et dans le gravier G1 lors de SCERES2 200

Figure 5. 55 : Évolution des concentrations de vapeurs de TCE calculées dans le gravier pendant la période de la mise en dépression lors de SCERES2 201

Figure 5. 56 : Profil vertical des concentrations mesurées et simulées au point GA1 au 20ème jour après l'injection de TCE 202

Figure 5. 57: Effet de la prise en compte de la variation de pression atmosphérique sur les pressions de l'air du sol à 0.4 m de profondeur 204

Figure 6. 1 : Flux de vapeurs de TCE mesurés aux points H, GA1 et GL lors de SCERES1 210

Figure 6. 2 : Flux de vapeurs de TCE mesurés aux points H, GA1 et GL pendant l'expérience SCERES2 211

Figure 6. 3 : Évolution de la température à la profondeur de 0,25 m, à la surface du sol et dans l'atmosphère pendant la période de battement de la nappe lors de SCERES2 212

Figure 6. 4 : Préleveur multi-niveaux d'air atmosphérique 213

Figure 6. 5 : Différentes chambre à flux des partenaires du projet FLUXOBAT (LHYGES, INERIS, BURGEAP) 217

Figure 6. 6 : Principe de mesure de la chambre à flux lors de la montée du toit de la nappe 221

Figure 6. 7 : Flux calculés à partir de la méthode semi- analytique entre les profondeurs 0 m et 0,2 et flux mesurés avec la chambre à flux au point GA1 m lors de SCERES2 224

Figure 6. 8 : Flux calculés par la méthode semi- analytique entre les profondeurs 0,2 m et 0,4 m et flux mesurés avec la chambre à flux au point GA1 lors de SCERES2 225

Figure 6. 9 : Flux diffusif de vapeurs de TCE mesurés sur la dalle1 pendant SCERES1 et sur la dalle2 pendant SCERES2 227

Figure 6. 10 : Flux mesurés au moyen de la chambre à flux sur la dalle1 et flux calculés à partir de la méthode semi- analytique avec un coefficient de diffusion effective de la dalle1 égale 1/25ème et 1/100ème de celui d'un sable moyen lors de SCERES1 228

Figure 6. 11 : Flux calculés à partir de la méthode semi- analytique et flux mesurés au moyen de la chambre à flux sur la dalle2 lors de SCERES2 230

Figure 6. 12 : Concentrations mesurées dans la cloche normalisées à la concentration mesurée sous la dalle pendant les dépressions de 5, 10 et 20 Pa pour un débit d'extraction de 2m^3/h lors de SCERES1 234

Figure 6. 13 : Concentrations mesurées dans la cloche normalisées à la concentration finale obtenue pour le niveau de dépression de 5 Pa pour les débits d'extraction de l'air de 0.5, 1 et 2m^3/h lors de SCERES1 235

Figure 6. 14 : Concentration moyenne C_{infini} obtenue à t_{infini} 236

Figure 6. 15 : Flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ en fonction de la perte de charge dP_g2 à travers la dalle1 pour le débit d'extraction Q=2m^3/h lors de SCERES1 239

Figure 6. 16 : Flux massique normalisé par la concentration mesurée sous la dalle et le débit d'extraction d'air en fonction de la perte de charge pour la dalle 1 (SCERES1) et dalle 2 (SCERES2) 240

Figure 6. 17 : Essai de la mise en dépression de la cloche 246

Figure 6. 18 : Le domaine SDC {SCERES, Dalle, Cloche} 247

Figure 6. 19 : Pression motrice de l'air du sol calculée sous une dalle de béton de perméabilité 10^{-12} m² lors d'une dépression appliquée à la surface de la dalle de béton : i) profil vertical de la pression motrice de l'air du sol au centre de la dalle pour une dépression de 10 et 100 Pa, ii) Coupe longitudinale de la pression motrice de l'air du sol pour une dépression de 100 Pa.....248

Figure 6. 20 : Géométrie et maillage du système SDC en 3D 249

Figure 6. 21 : Les différents domaines dans SDC 251

Figure 6. 22 : Limite du domaine SDC 251

Figure 6. 23 : Exemple des problèmes rencontrés au niveau des vitesses verticales à la sortie de la cloche quand la tolérance absolue du solveur est relativement grande (de l'ordre de 10^{-3}) 254

Figure 6. 24 : Exemple de vitesse verticale à la sortie de la cloche obtenue pour 1B-1 avec une tolérance absolue de solveur égale à $5\ 10^{-6}$ 254

Figure 6. 25 : Bilan de masse dans la cloche 255

Figure 6. 26 : Champ de pression dans le domaine SDC pendant 1B-1 : Coupe verticale y-z pour x = 0 256

Figure 6. 27 : Lignes de courant dans le domaine SDC pendant 1B-1 257

Figure 6. 28 : Lignes de courant dans la cloche pendant l'expérience 1B-1 258

Figure 6. 29 : Vitesses de l'air dans la cloche suivant la verticale z pendant 1B-1 259

Figure 6. 30 : Lignes de courant dans la dalle et au-dessous dans le milieu poreux : coupe verticale yz, à x=0 m.....259

Figure 6. 31 : Champ de pression calculé dans le domaine SDC pendant 1B-2 : coupe verticale yz, à x= 0 m 260

Figure 6. 32 : Lignes de courant qui entrent dans la cloche à travers la dalle de béton 261

Figure 6. 33 : Champ de concentration de vapeur de TCE calculé dans la cloche en fonction du temps pendant la mise en dépression pour l'essai 1B-1 263

Figure 6. 34 : Concentration de vapeurs de TCE mesurée et calculée à la sortie d'extraction de la cloche lors de 1B-2.....263

Figure 6. 35 : Concentration de vapeurs de TCE mesurée et calculée en fonction du temps à la sortie d'extraction de la cloche pendant 1B-2 à partir d'un coefficient de diffusion effective D_{eg} de la dalle égale à $1.9\ 10^{-8}$ m²/s et D_{eg}×10 264

Figure 6. 36 : Distribution de concentration de vapeurs de TCE calculée dans la dalle 1 pendant 1B-1 265

Figure 6. 37 : Distribution de concentration de vapeurs de TCE calculée dans la dalle 1 pendant 1B-1en utilisant un coefficient de diffusion effective D_{eg1} égal à 1.9 10^{-7} m²/s dans la dalle.....265

Figure 6. 38 : Concentration de vapeurs de TCE calculées dans la dalle et dans le gravier après 3 heures de dépression : coupe verticale xz (y=0) lors de 1B-1 266

Figure 6. 39 : Evolution de la concentration de vapeurs mesurée et calculées à partir des essais 1, 2, 3 à la sortie d'extraction de la cloche pendant 1B-1 268

Figure 6. 40 : Zoom sur l'évolution de la concentration de vapeurs de TCE calculée à la sortie d'extraction de la cloche pour l'ESSAI 3.....269

Figure 6. 41 : Evolution de la concentration de vapeurs mesurée et calculée à partir des essais 1 et 5 à la sortie d'extraction de la cloche pendant 1B-1.....272

Figure 6. 42 : Distribution de la concentration de vapeurs de TCE dans la cloche pour l'essai 5, au régime stationnaire, pour un coefficient de diffusion à l'air libre D_0 égal à 7,8 10^{-6} m².s^{-1} et D_{01} égal à D_0×10 lors de 1B-1 274

Figure 6. 43 : Evolution de concentration de vapeurs de TCE à l'extraction de la cloche pour deux coefficients de diffusion à l'air 274

Figure 6. 44 : Evolution de la concentration de vapeurs à la sortie d'extraction de la cloche pendant 1B-2.....275

Figure 6. 45 : Concentration de vapeurs de TCE calculées dans la dalle et gravier à t=3 h 30 min dans le plan vertical xz (y=0m) lors de 1B-2 276

Figure 6. 46 : Distribution de la concentration de vapeurs de TCE , au régime stationnaire, dans la cloche pour deux coefficients de diffusion à l'air libre lors de 1B-2.....277

Figure 6. 47 : Evolution de la concentration de vapeurs de TCE mesurée et calculées à partir de deux coefficients de diffusion à l'air libre 277

Tableaux

Tableau 1. 1 : Solvants chlorés les plus utilisés dans l'industrie....30

Tableau 2. 1 : Composition chimique du sable H2F (Jellali, 2000) 47

Tableau 2. 2 : Propriétés du milieu des sables H1F et H2F (Dridi, 2006) 47

Tableau 2. 3 : Composition chimique du sable H2F (Rasakarisoa et al, 2006) 48

Tableau 2. 4 : Propriétés physico-chimiques de TCE 48

Tableau 2. 5 : Composition des deux dalles de béton 53

Tableau 3. 1 : Description des processus de transport à l'échelle microscopique et macroscopique...84

Tableau 3. 2 : Différentes relations empiriques de la tortuosité....87

Table 4. 1 : Properties of the sand....114

Table 4. 2 : Physical and chemical properties of trichloroethylene at 20°C....115

Table 4. 3 : Upstream boundary conditions selected for the different runs....118

Tableau 5. 1 : Perméabilité de la dalle 1 et dalle 2....152

Tableau 5. 2 : Les pressions relatives dans la cloche, sous la dalle et à travers la dalle de béton pour les différents essais de mise en dépression....169

Tableau 5. 3 : Paramètres de van Genuchten pour les sables moyen et fin....183

Tableau 5. 4 : Paramètres utilisés pour la modélisation numérique....184

Tableau 5. 5 : Concentrations en TCE mesurées et calculées directement sous la dalle 1 au bout de 20 jours après l'injection de TCE lors de SCERES1....195

Tableau 5. 6: Concentrations en TCE mesurées et calculées sous la dalle au bout de 24 jours après l'injection de TCE lors de SCERES2....199

Tableau 6. 1 : Comparaison entre les flux de vapeurs de TCE mesurés à l'interface sol/atmosphère et les flux de vapeurs de TCE mesurés dans l'atmosphère lors de SCERES2....215

Tableau 6. 2 : Flux de vapeurs de TCE mesurés à l'interface sol/atmosphère à l'aide des différentes chambres à flux....218

Tableau 6. 3 : Flux de vapeurs de TCE calculés avec la méthode semi- analytique entre la profondeur 0,2 m et la surface du sol et flux mesurés avec la chambre à flux lors de SCERES1....220

Tableau 6. 4 : Flux de vapeurs de TCE calculés avec la méthode semi- analytique entre les profondeurs 0,2 m et 0,4 m et les flux de vapeurs de TCE mesurés utilisant la chambre à flux lors de SCERES1....223

Tableau 6. 5 : Les concentrations de vapeurs de TCE dans la cloche pendant les mises en dépression en présence de la dalle1 pour différents débits d'extraction d'air lors de SCERES1....232

Tableau 6. 6 : Evolution de la concentration de vapeurs de TCE dans la cloche pendant les mises en dépression en présence de la dalle2 pour un débit d'extraction d'air de 1m3/h lors de SCERES2....233

Tableau 6. 7 : Flux massiques en vapeurs de TCE calculés à travers la dalle 1 et dalle 2 pendant les mises en dépression lors de SCERES1 et SCERES2.....238

Tableau 6. 8 : Flux massiques calculés au moyen de SIMUSCOPP à travers la dalle 1 et dalle 2 (A=1.5 m²) pendant les mises en dépression de SCERES1 et SCERES2.....240

Tableau 6. 9 : Flux massiques diffusifs, convectifs et totaux à travers la dalle 1 et dalle 2 pendant SCERES1 et SCERES2.....242

Tableau 6. 10 : Perméabilités de la dalle 1 et dalle 2 calculées par approche inverse.....244

Tableau 6. 11 : Perméabilité de la dalle 1 et dalle 2.....245

Tableau 6. 12 : Conditions initiales choisies dans le domaine SDC pour l'expérience 1B-1_ESSAI1....250

Tableau 6. 13:Conditions initiales choisies dans le domaine SDC pour l'expérience 1B-2.....250

Tableau 6. 14 : Conditions aux limites imposées aux limites du domaine SDC pour l'expérience 1B-1_ESSAI1.....252

Tableau 6. 15 : Conditions aux limites imposées aux limites du domaine SDC pour l'expérience 1B-2.....252

Tableau 6. 16 : Paramètres utilisés.....253

Tableau 6. 17 : Débit d'air et erreur relative du bilan de masse dans la cloche pendant l'expérience 1B-1.....256

Tableau 6. 18 : Comparaison entre les pertes de charges motrices mesurée et calculées à travers la dalle1 pendant 1B-1.....257

Tableau 6. 19 : Débit d'air et erreur relative du bilan de masse dans la cloche pendant l'expérience 1B-2.....260

Tableau 6. 20 : Pertes de charges motrices mesurées et calculées à travers la dalle2 pendant l'expérience 1B-2.....261

Tableau 6. 21 : Concentrations de vapeurs de TCE mesurée et calculée dans le gravier avant et après la mise en dépression 1B-1.....266

Tableau 6. 22 : Conditions initiales de concentration en vapeurs de TCE choisies dans la dalle1 lors des essais 2, 3 et 4 pour 1B-1.....267

Tableau 6. 23 : Concentrations de vapeurs de TCE calculée au régime stationnaire pour la mise en dépression 1B-1.....271

Tableau 6. 24 : Concentrations de vapeurs de TCE mesurée et calculée dans le gravier avant et après la mise en dépression 1B-2.....276

Introduction

Contexte

Actuellement de nombreuses études ont révélé la contamination de nombreux sites dans le monde, en terme de concentrations dans l'air du sol de la zone non saturée (ZNS), dans l'atmosphère ou à l'intérieur des bâtiments par des composés organo-volatils (COV) tels que le trichloréthylène (TCE), le perchloréthylène (PER) et le Chlorure de méthylène (DCM) qui ont été couramment utilisés durant les deux dernières décennies dans l'industrie.

Les COV caractérisés par leurs faibles viscosités et leurs densités élevées (Schwille, 1988) font partie de la famille des DNAPL (Dense Non Aqueous Phase Liquids). Ils ont tendance à migrer rapidement dans le sol, et vu leurs fortes volatilités, la majeure partie de ces polluants passe rapidement sous forme vapeur (Falta et al., 1989) et se propage par convection et par diffusion dans la zone non saturée formant ainsi un panache de pollution qui peut se déplacer depuis la ZNS vers l'atmosphère et l'air à l'intérieur des bâtiments.

La Direction Régionale de Santé Publique de Québec (DSPQ) a publié en 2007 (DSPQ, 2007) une étude qui a permis de fixer la concentration critique pour le trichloréthylène à 5 $\mu g/m^3$. Au delà de cette valeur, une grave exposition à ces vapeurs peut causer des malformations cardiaques chez les nouveaux nés ainsi qu'un grand risque de cancer.

L'origine de la pollution des sols et des sous-sols par les COV est principalement l'industrie. Il peut s'agir de fuites issues de réservoirs de stockage souterrain, de déchets industriels enfouis dans le sous-sol (Schoeller, 1975) ou bien de déversements accidentels (Figure 1).

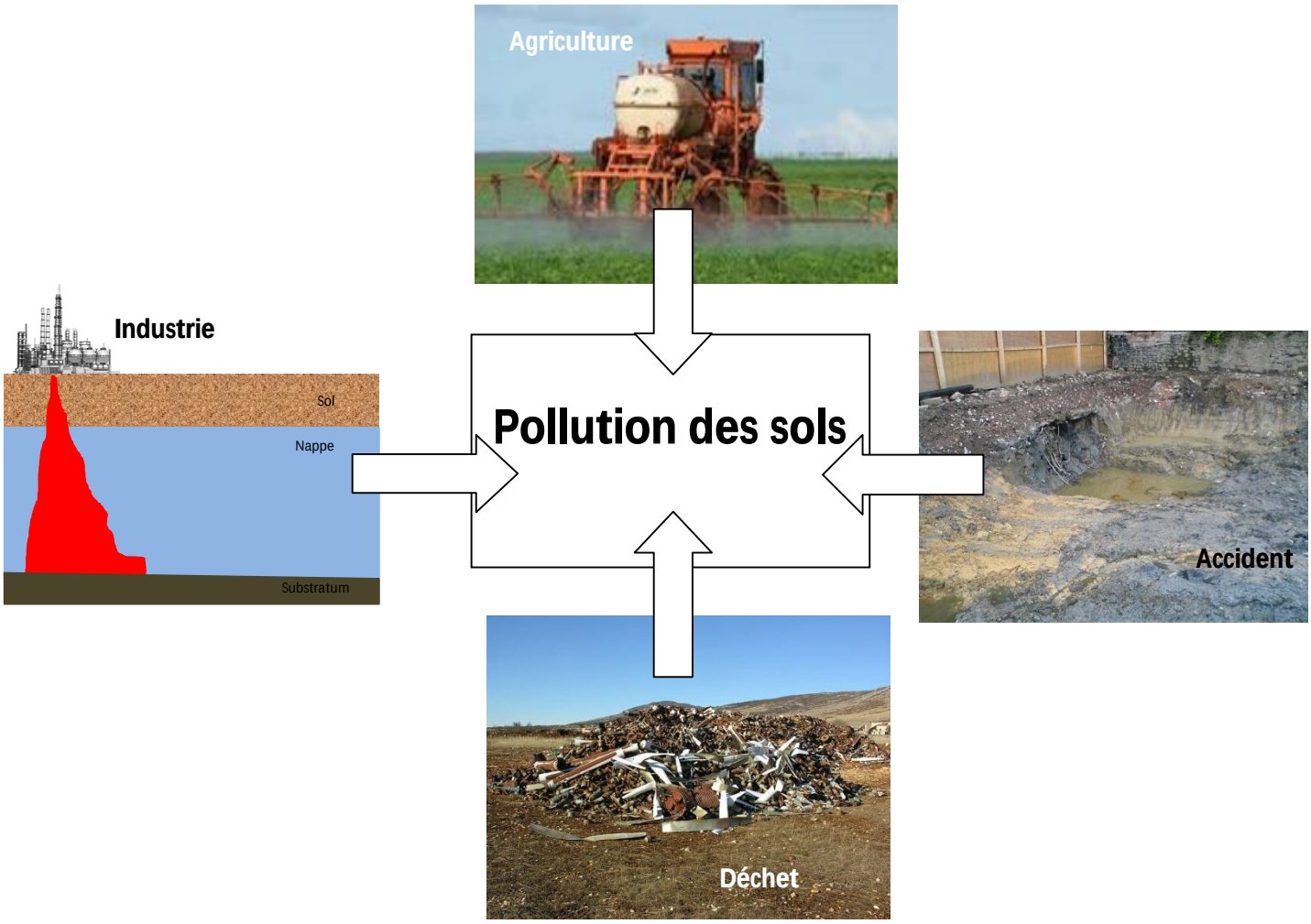


Figure 1 : Principales sources de pollution des sols

À cause de ces nombreuses sources de pollution, telles que les retombées aériennes diffuses de l'industrie, les déchets de l'industrie et du chauffage, les transports et l'agriculture, aucun sol européen ne peut être considéré comme exempt de pollution même si celle-ci est uniquement présente à l'état de trace. La Figure 2 présente le nombre des sites dépollués, pollués, probablement pollués ou abritant une activité polluante, et leur statut en 2006 (EEB, 2010).

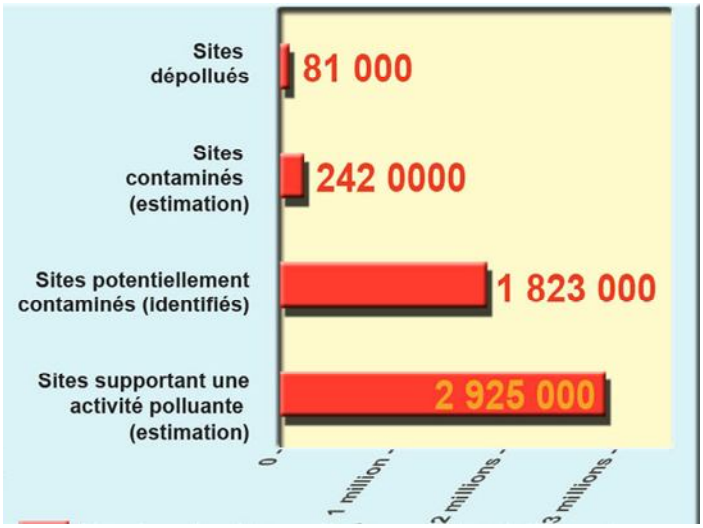


Figure 2: Nombre de sites pollués ou potentiellement pollués en Europe en 2006 (EEB, 2011)

D'après ces statistiques, seulement 2,7% des sites ont été dépollués dans toute l'Europe. Ce pourcentage a incité le gouvernement français à mettre en place des projets R&D afin de développer une méthodologie servant à évaluer l'état de pollution d'un site et ainsi pouvoir procéder à un traitement des sites pollués. L'un des principaux défis pour la gestion de ces sites pollués par des COV est de prévoir l'évolution de la source de pollution et le devenir du panache de vapeurs dans le sous-sol. Ces évaluations sont basées soit sur des mesures effectuées sur des sites pollués ou contrôlés, soit sur des estimations basées sur des calculs et des modélisations effectuées à l'aide des outils numériques.

Ces mesures et estimations peuvent conduire à des incertitudes pouvant influencer la prise de décision, en termes de coût ou de temps, concernant d'éventuels travaux de dépollution sur ces sites. Ces incertitudes sont reliées à des méconnaissances au niveau de :

- la nature des milieux poreux constitutifs du sous-sol (composition du milieu, hétérogénéité…) ;
- la nature de la zone source de pollution et son évolution en fonction de temps dans le sol ;
- les flux de vapeurs à l'interface sol/atmosphère et sol/air intérieur des bâtiments ;
- l'impact de la non prise en compte des effets du gradient de densité des vapeurs et du gradient de pression motrice sur le transport des vapeurs dans le sol et à l'interface sol/air ;

- la ventilation dans les bâtiments (création d'une dépression) et son impact sur le flux de vapeurs provenant du sous sol ;
- les propriétés d'un dallage : l'influence de sa fissuration, perméabilité, tortuosité…. sur le flux de vapeurs à travers la dalle ;
- l'impact de la variation de la pression atmosphérique et de la température sur le flux de vapeurs au sein du milieu poreux et à l'interface sol/air.

Mes travaux s'inscrivent dans le cadre du projet ANR « FLUXOBAT », Programme Ecotechnologies et Développement Durable 2008 (PRECODD), qui a démarré en janvier 2009 pour une durée de 4 ans, visant à développer des outils optimisés pour l'évaluation des transferts de COV depuis une source de pollution dans le sol vers l'air atmosphérique et vers l'air intérieur des bâtiments. Des moyens expérimentaux ont été mis en œuvre à trois échelles de mesure (laboratoire, site pilote SCERES, site industriel), visant une meilleure compréhension des mécanismes en jeu et l'amélioration des protocoles de mesure et des méthodologies de modélisation. Les partenaires du projet sont : BURGEAP (bureau d'études spécialisé en environnement); CSTB (centre scientifique et technique du bâtiment); LHyGeS (laboratoire d'hydrologie et de géochimie de Strasbourg); IMFT (institut des mécaniques des fluides de Toulouse); TERA Environnement un laboratoire d'analyse ; INERIS (institut national de l'environnement industriel et des risques) et la Communauté Urbaine grand Lyon.

Le site pilote SCERES (Site Contrôlé Expérimental de Recherche pour la réhabilitation des Eaux et des Sols) situé à Strasbourg campus de Cronenbourg, a déjà fait l'objet de diverses expérimentations à grande échelle. De 1993 à 1997, notre laboratoire s'est penché sur l'étude des hydrocarbures, notamment le gazole. A partir de 1997, les recherches se sont orientées sur le comportement d'un solvant chloré fréquemment répandu dans le sous-sol et les nappes, le trichloréthylène (TCE). En 1997, 8,9 litres de TCE ont été infiltrés dans SCERES, en 1998 infiltration de 5,3 litres puis en 1999 infiltration de 3 litres de TCE en zone non saturée de SCERES. En 2000, un travail exploratoire sur l'applicabilité de la méthode du traceur bisoluble a été mené. À partir de l'année 2001, les études se sont tournées vers la caractérisation des zones sources composées d'un mélange de solvants chlorés, à savoir du TCE et du PCE. En 2001, ont ainsi été injectés 6,7 litres d'un mélange TCE/PCE en zone saturée et en 2002, 1,66 litres du même mélange ont été infiltrés en zone non saturée.

Objectifs scientifiques de la thèse

Les travaux de thèse ont pour objectifs de :

- ✓ évaluer les concentrations et les flux de vapeurs de TCE respectivement dans l'air du sol et l'air atmosphérique proche surface (au dessus des interfaces sol/air et dalle de béton/air) à partir des données expérimentales,
- ✓ identifier les différents mécanismes et méthodes permettant de mener de façon plus fiable les évaluations de transfert des polluants volatils depuis le sol vers l'atmosphère et vers l'air intérieur des bâtiments,
- ✓ étudier de façon détaillée les rôles respectifs de la convection (effet du gradient de pression motrice et effet de la densité des vapeurs) et de la diffusion sur le transfert des vapeurs, et déterminer les erreurs relatives commises lors de l'évaluation de ce transfert à l'aide des approches semi analytiques,
- ✓ évaluer la capacité de certains codes numériques (SIMUSCOPP, COMSOL) et des solutions analytiques pour prédire les flux de vapeurs dans le milieu poreux et à l'interface milieu poreux/dalle béton.

Pour ce faire, des moyens expérimentaux ont été mis en œuvre sur la plate forme expérimentale SCERES. L'expérimentation a porté sur le transfert de polluant depuis la zone non saturée d'un aquifère poreux vers l'atmosphère et vers l'air intérieur des bâtiments à travers une dalle de béton fissurée.

Structure du mémoire

Le corps de ce mémoire s'articule autour de sept chapitres.

Le premier chapitre donne une vue d'ensemble sur la problématique des solvants chlorés, leurs propriétés physico-chimiques et le devenir de ces produits dans le milieu souterrain. Il porte aussi sur une analyse bibliographique concernant les mécanismes de transfert régissant la propagation de la pollution dans la zone non saturée et le transfert des vapeurs vers l'atmosphère et l'air intérieur des bâtiments.

Le deuxième chapitre décrit les différents dispositifs utilisés pour réaliser les expérimentations sur SCERES. Nous y présentons le bassin expérimental SCERES, la création de la zone source de pollution de TCE, le matériel de suivi et de mesures ainsi que les méthodes expérimentales d'analyse utilisées.

Dans le troisième chapitre nous décrivons les différents outils numériques et méthodes analytiques utilisés pour la simulation du panache de vapeurs de TCE dans la zone non saturée du bassin SCERES et la quantification de flux de vapeurs de TCE à

sa surface.

Le quatrième chapitre est dédié à l'étude détaillée de l'effet de la prise en compte du gradient de densité des vapeurs ainsi que la convection induite par l'effet du gradient de pression motrice sur la quantification des flux de vapeurs de TCE à la surface du sol. Il porte aussi sur une analyse des erreurs relatives introduites par le choix de la solution analytique utilisée pour l'estimation des flux de TCE à la surface du sol en utilisant une base de données générée par une simulation numérique du transport 1D.

Le cinquième chapitre porte sur l'étude de l'évolution du panache de vapeurs provenant de la source de pollution créée dans la zone non saturée du site SCERES lors de la mise en dépression du bâtiment « modèle » (représenté par un caisson) installé au dessus d'une dalle de béton fissurée et lors du battement de la nappe. Il porte aussi sur une étude comparative entre les concentrations mesurées et celles obtenues à partir des simulations numériques utilisant le modèle multiphasique SIMUSCOPP.

Enfin, le sixième chapitre comporte l'étude fine du transfert des vapeurs de TCE à l'interface sol/atmosphère et à l'interface dalle de béton/air intérieur à l'échelle de la plateforme expérimentale SCERES. Nous étudions l'influence d'une mise en dépression du bâtiment « modèle » ainsi que l'influence du battement de la nappe sur le flux de vapeurs à la surface du sol de SCERES. Les résultats expérimentaux sont confrontés à des simulations numériques effectuées au moyen du modèle multiphysique COMSOL, du modèle multiphasique SIMUSCOPP et de méthodes analytiques. Les simulations effectuées à l'aide du modèle COMSOL permettent aussi de quantifier les concentrations de vapeurs dans l'air intérieur des bâtiments pendant la mise en dépression à différents débits d'extraction.

Le chapitre 7 résume les conclusions et les perspectives de cette recherche expérimentale et numérique.

Chapitre 1 : Généralités sur les solvants chlorés, leur devenir dans le milieu poreux et leur transfert depuis le sol vers l'extérieur

SOMMAIRE

1.1 Solvants chlorés 29

1.2 Comportement du DNAPL dans le milieu poreux 31

1.3 Mécanismes de transport des COV dans le milieu poreux.....33

1.4 Intrusion des vapeurs de COV dans l'air intérieur des bâtiments 35

1.5 Que va-t-on modéliser et comment ?.....38

1.1 Solvants chlorés

1.1.1 Définition

Il s'agit de composés organo-chlorés de la famille des organo-halogénés. Ils sont utilisés dans différents domaines : agricole, industriel, médical et domestique. Les solvants chlorés ont été utilisés dès 1920 pour leurs propriétés décapantes. Ils ont connu un développement spectaculaire dans le domaine du dégraissage grâce à leur ininflammabilité. La consommation des solvants chlorés est en nette diminution depuis les années soixante-dix suite à de nouvelles réglementations visant à préserver l'environnement et la santé (directive de 2004/42/CE).

1.1.2 Utilisation dans l'industrie

Parmi les applications des solvants chlorés, nous trouvons la fabrication des équipements médicaux, les systèmes de freinage des voitures, les polymères techniques, les tests de fissibilité, les microprocesseurs, les systèmes hydrauliques des avions, et les instruments de précision. Ce sont les meilleurs solvants pour toutes sortes d'huiles et de graisses, notamment pour le nettoyage des conteneurs en vrac et des navires. Le Tableau 1. 1 récapitule les solvants chlorés les plus utilisés dans l'industrie et leurs différentes utilisations.

Tableau 1. 1 : Solvants chlorés les plus utilisés dans l'industrie

Produit	Utilisation
Perchloréthylène (PER)	Nettoyage à sec Intermédiaire chimique Nettoyage des métaux
Trichloréthylène (TCE)	Intermédiaire chimique Colle Nettoyage des métaux
Chlorure de méthylène	Liquide d'extraction Solvant, décapant, agent gonflant pour mousse synthétique, colle, nettoyage des métaux

1.1.3. Menace pour l'écosystème

Les composés organo-chlorés font partie des COV (composés organiques volatils) et sont impliqués dans la destruction de la couche d'ozone stratosphérique et contribueraient également à l'effet de serre. Ils peuvent atteindre les nappes phréatiques après infiltration dans le sol lors d'un déversement accidentel à la surface du sol. Les eaux souterraines contaminées par des solvants chlorés posent de sérieux problèmes pour la santé humaine et l'environnement, ils sont souvent très toxiques, voir cancérogènes. Ils peuvent causer, en cas d'une exposition massive, l'anesthésie, la somnolence et même le coma ainsi que des risques de malformations cardiaques chez les nouveaux nés.

1.1.4. Propriétés physico-chimiques des solvants chlorés

Le comportement d'une substance dans son environnement est déterminé par ses caractéristiques physiques et chimiques.

La formule brute des solvants chlorés est la suivante :

$$C_xH_yCl_z$$

Les solvants chlorés sont des fluides non miscibles à l'eau et plus denses que l'eau. Ils font donc partie de la famille des DNAPLs (Dense Non Aqueous Phase Liquid).

Leur migration dans le milieu souterrain et la pollution des nappes souterraines est favorisée par leurs propriétés physico-chimiques (Cohen et Mercer, 1993 ; Pankow et Cherry, 1996). Les solvants chlorés sont caractérisés par :

◊ une densité plus grande que celle de l'eau qui se traduit par une pénétration rapide du DNAPL jusqu'à la base de la nappe d'eau souterraine et une faible rétention dans le milieu poreux si le volume déversé est suffisant. Leur migration est souvent accompagnée par la formation de digitations causées par la nature instable de l'infiltration verticale de ces produits (Nsir, 2009 ; Lovoll et al., 2004; Ferer et al., 2004) ;

◊une forte volatilité qui conduit souvent à la création d'un panache de vapeurs étendu dans la zone non saturée ;

◊une faible viscosité qui facilite la migration du DNAPL dans le milieu poreux;

◊une faible tension inter-faciale (DNAPL/eau) qui facilite la pénétration de DNAPL dans les petites fractures et les pores du milieu poreux ;

◊une faible solubilité qui se traduit par une durée de vie importante des flaques de DNAPL dans la zone saturée. Même si leur solubilité est relativement faible (par rapport à d'autres produits organiques), elle est environ 100 fois supérieure aux seuils de potabilité ce qui peut engendrer un danger pour la santé humaine et les écosystèmes.

1.2 Comportement du DNAPL dans le milieu poreux

1.2.1 Infiltration du DNAPL dans le sol

Le déversement du DNAPL dans le sol se fait sous plusieurs formes :

- accidentellement (renversement d'un camion citerne) ;

- Une source de pollution permanente (fuites d'une cuve de stockage souterrain).

Dans ces deux cas, la zone source de pollution se situe fréquemment à proximité de la surface du sol. Une fois déversé, le DNAPL s'infiltre dans le milieu souterrain en fonction de plusieurs facteurs, entre autres la quantité et la durée du déversement et la géologie du milieu poreux. Sous l'influence de la gravité, le polluant s'infiltre rapidement vers les niveaux inférieurs de l'aquifère (Schwille, 1988; Lemière et al., 2001). Dans notre travail nous nous intéressons à une zone source de pollution située exclusivement en zone non saturée.

1.2.2 Devenir du DNAPL dans le sous sol

Suite à leur déversement dans le sol et vu de leur faible viscosité et de leur densité élevée, les DNAPL migrent rapidement et verticalement dans le sous sol non saturé en eau sous l'effet de la force de gravité et des forces capillaires (Schwille, 1988 ; Cohen et Mercer, 1993). L'extension latérale de la phase liquide est généralement faible. Ces polluants sont aussi caractérisés par une forte volatilité ce qui conduit à la création d'un panache important de vapeurs dans la zone non saturée (Falta et al., 1989). Ces panaches de vapeurs peuvent migrer verticalement, par diffusion et advection, dans la zone non saturée (Mendoza et McAlary, 1990; Jones et al., 1978; Jellali et al., 2003; Cotel et al., 2011). Ils peuvent aussi migrer depuis la zone non saturée vers l'atmosphère et l'air intérieur des bâtiments (Hodgson et al 1988; Johnson et Ettinger 1991; Morisson et al., 2006; Yu et al., 2009). La présence de couches imperméables (sol en béton) ou peu perméables (végétation) à la surface du sol limite le transfert des vapeurs depuis le sous sol vers la surface et favorise le déplacement des vapeurs dans le sous sol. En plus, et suite à une infiltration d'eau de pluie, le polluant présent dans le sous sol sous forme de vapeurs se dissout dans l'eau du sol et est transporté vers la nappe par l'eau (Mendoza et Mc Alary, 1990 ; Jellali, 2000).

Une partie du DNAPL continue son trajet vers la zone saturée et pénètre dans la nappe si la pression exercée par la quantité de polluant en phase organique est supérieure à la pression d'entrée dans la nappe (Pankow et Cherry, 1996). Etant plus lourd que l'eau, le DNAPL s'infiltre verticalement dans la nappe jusqu'au substratum. Au cours de son chemin, le DNAPL peut rencontrer un milieu poreux complexe constitué de plusieurs formes d'hétérogénéité, ce qui va engendrer une configuration

complexe de la zone source de polluant (Figure 1. 1).

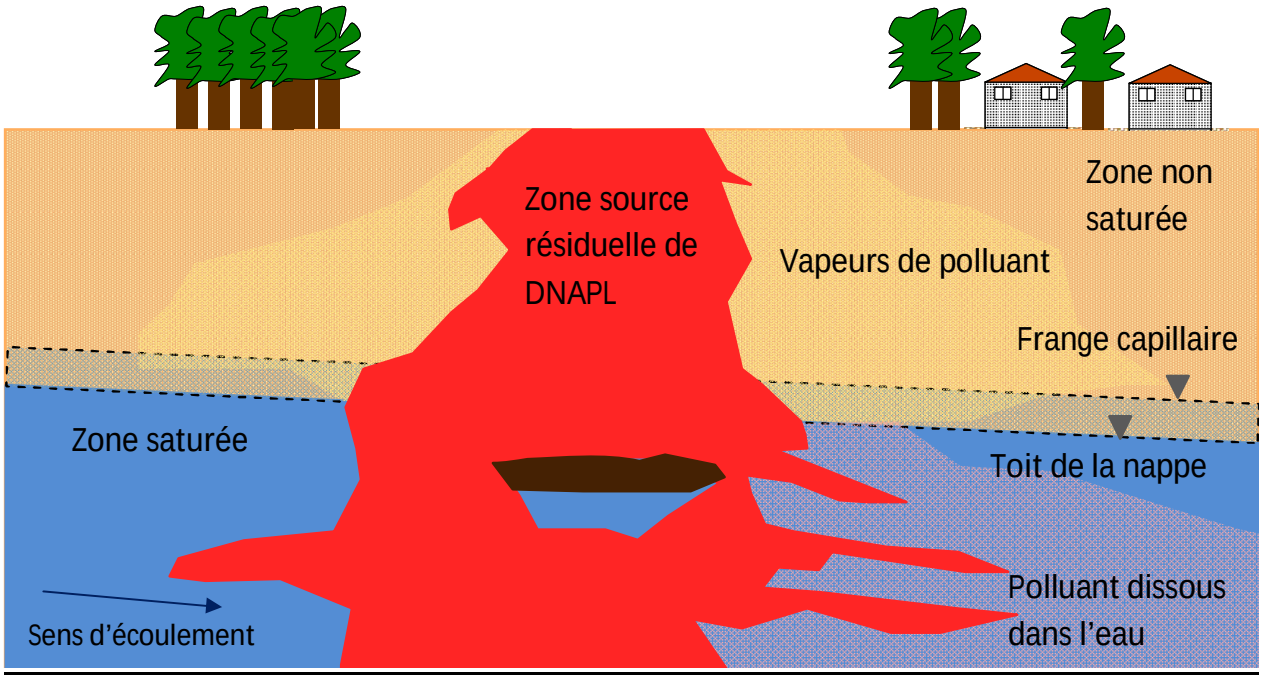


Figure 1. 1 : Coupe longitudinale d'un sol pollué par un DNAPL

1.3 Mécanismes de transport des COV dans le milieu poreux

1.3.1 Transport par diffusion

Le déplacement d'un panache de vapeurs de COV dans la zone insaturée est généralement régi par la diffusion, la convection et la dispersion. Dans la plupart des études relatives à l'estimation des flux de vapeurs à l'interface sol-atmosphère, la diffusion est considérée comme le mécanisme de transport le plus prédominant. En effet, quand deux milieux ayant des concentrations en polluants différentes, les polluants vont se déplacer par diffusion moléculaire de manière à tendre vers une concentration homogène des deux milieux. La diffusion est souvent évaluée à l'aide de la première loi de Fick, et la convection et la dispersion sont souvent négligées (Renault et Sierra, 1994 ; Pankow et Cherry, 1996; Choi et al., 2002 ; Webb et Pruess, 2002; Jellali et al., 2003; Bohy et al., 2006; Sleep et Sykes, 1989 ; Peterson et al.,

1994 ; Grathwohl, 1998).

Cependant, sur sites réels, le transport convectif des vapeurs de COV pourrait être significatif.

1.3.2 Transport par convection

Par la suite, nous nous intéressons aux impacts de la convection (entraînement des particules dans le mouvement du fluide qui se déplace) sur le flux de vapeurs à la surface du sol. Ce mécanisme de transport peut être généré par les gradients de densité des COV présents dans un panache de vapeurs ou entre ceux-ci et l'air (on parle alors de transport convectif induit par l'effet de la densité des vapeurs) ou par les gradients de pression motrice dans la phase gazeuse (on parle alors de transport convectif induit par les gradients de pressions motrices).

1.3.2.1 Convection induite par l'effet de densité des vapeurs

Numériquement, le transport convectif induit par l'effet de la densité des vapeurs a été évoqué dans plusieurs études (Sleep et Sykes, 1989; Falta et al., 1989; Mendoza et Frind 1990 a et b; Mendoza et McAlary 1990; Lenhard et al., 1995; Mastrocicco et al., 2011). Ces études ont démontré que la convection induite par la densité des vapeurs peut être un mécanisme de transport important qui dépend principalement de la perméabilité du milieu, de l'épaisseur de la zone non saturée et de la température du sol. Seulement peu d'expériences ont été menées pour étudier l'effet de la densité de DNAPL en phase gazeuse (Schwille, 1988; Lenhard 1995; Altevogt et al., 2003; Jang et d'Aral, 2007; Cotel et al., 2011).

Toutefois, les principaux outils utilisés pour quantifier le flux de vapeur sur le terrain sont des solutions semi-analytiques généralement uniquement basées sur le transport diffusif (Jury et al., 1990; Jellali et al., 2003; Bohy et al., 2006; Dridi et Schäfer, 2006) sans tenir compte de l'influence de la densité des vapeurs de DNAPL et du gradient de pression du gaz du sol. Seuls quelques modèles, comme VOLASOIL (Waitz et al., 1996) et Johnson et Ettinger (Jonhson et Ettinger, 1991), sont actuellement utilisés par les bureaux d'études comme outils permettant de quantifier les flux de masse depuis le sous-sol vers l'atmosphère en tenant compte à la fois du transport diffusif et du transport convectif des vapeurs de DNAPL. Cependant, ces modèles ne font pas explicitement distinction entre la convection induite par l'effet de la densité et la convection induite par l'effet de gradient de pression. Cette

déficience pourrait conduire à de grandes incertitudes dans l'estimation des flux de vapeur.

1.3.2.2 Convection induite par l'effet de gradient de pression

Les gradients de pression des vapeurs de DNAPL dans le sol peuvent provoquer un fort champ de pression motrice, et ainsi entraîner un mouvement des vapeurs vers la surface du sol ou vers la nappe d'eau souterraine. Dans la zone non saturée, le panache de polluant peut être plus étendu qu'en zone saturée. En effet, le transport convectif des vapeurs s'ajoute au transport purement diffusif augmentant aussi la zone impactée par la pollution. Ces gradients de pression sont habituellement générés par des variations de pression atmosphérique, une vaporisation de DNAPL à partir d'une zone source de pollution, des variations de la pression dans les bâtiments (ventilation) et par un battement du niveau d'eau dans le sous-sol (Barber et al., 1990; Mendoza et Frind, 1990 ; Parker, 2003; Williams et al., 1999; Altevogt et al., 2003; Rivett et al., 2011).

1.4 Intrusion des vapeurs de COV dans l'air intérieur des bâtiments

L'air du sol chargé en polluant gazeux s'introduit dans l'air intérieur des bâtiments via la dalle de béton (Figure 1. 2), plus particulièrement au travers de tous les types de défaut d'étanchéité qui peuvent y exister. Ces défauts dépendent essentiellement de la construction du bâtiment, de la nature des matériaux constructifs, du vieillissement du dallage en béton …

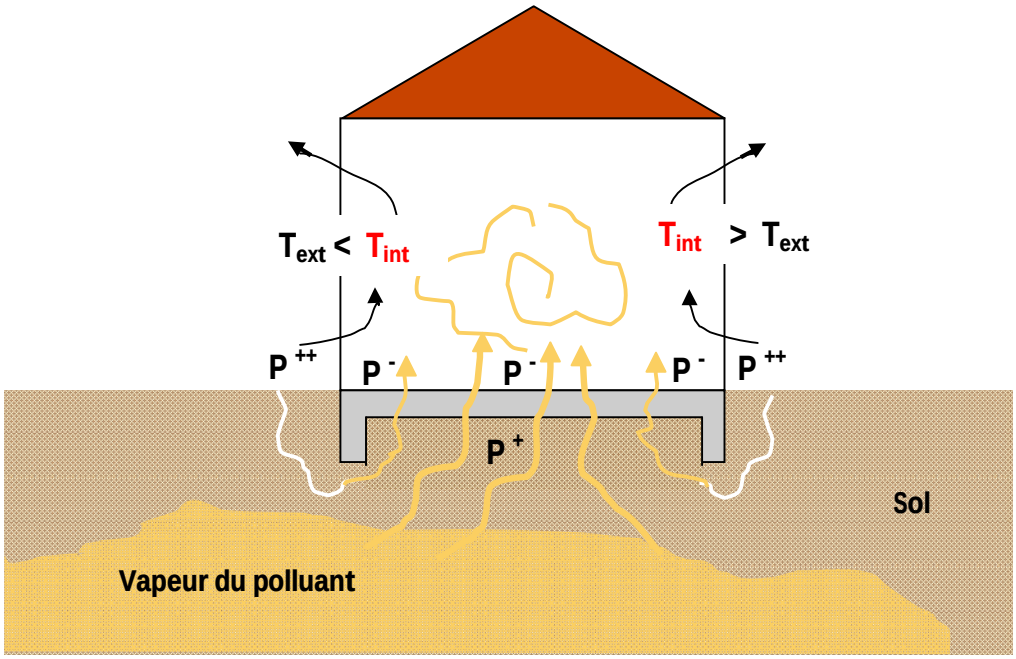


Figure 1. 2 : Intrusion des vapeurs de DNAPL dans l'air intérieur des bâtiments

1.4.1 Fuites possibles à travers une dalle de béton

Le vieillissement de la dalle en béton est la cause d'un des défauts les plus fréquemment rencontrés dans les bâtiments : une fissuration du dallage qui forme des chemins préférentiels pour les vapeurs de polluant.

D'autres chemins qui peuvent, dans certains cas, devenir des voies prépondérantes de transfert entre le sol et le bâtiment sont les portes intérieures de caves ou de sous-sol, les trappes et l'ensemble des réseaux VRD (Voiries, Réseaux, Divers) lorsqu'ils traversent l'interface sol/bâtiment. Ces voies de transfert sont souvent évoquées dans la littérature car leur impact peut être significatif en fonction de la typologie rencontrée (DOH, 2006). C'est pourquoi une caractérisation de la dalle de béton est nécessaire pour pouvoir estimer au plus près les flux de vapeurs traversant le dallage.

Le transfert des vapeurs à travers les fissures dépend principalement de la géométrie de la fissure. Les fissures les plus importantes sont naturellement les fissures traversantes. Les fissures non traversantes peuvent affecter la tenue d'un ouvrage, mais en ce qui concerne le transfert de polluant, elles causent uniquement une augmentation locale de la porosité et de la perméabilité équivalente de la dalle.

1.4.2 Mécanismes de transport à travers la dalle de béton

Plusieurs études se sont intéressées aux mécanismes de l'intrusion de l'air chargé en polluant dans l'air intérieur des bâtiments (Johnson et Ettinger, 1991 ; Arands et al., 1997 ; Choi et al., 2002 ; Nazarof, 1988).

L'air chargé en vapeur de polluant est majoritairement transporté vers l'air intérieur des bâtiments par convection. En effet, la différence de pression motrice qui existe entre le sol et l'intérieur de l'habitation entraine un mouvement d'air depuis le sol vers le bâtiment via les pores, les trous et les fissures (Figure 1. 2). Les polluants gazeux présents dans l'air du sol, sont alors aspirés dans le bâtiment sous l'effet du gradient de la pression motrice. La durée de séjour de ces polluants dans le bâtiment est fonction du taux de renouvellement d'air de ce dernier (Collignan and Millet; 1999).

Cette différence de pression motrice est due aux systèmes de ventilation, existant dans la plupart des bâtiments ainsi qu'au chauffage hivernal de ces derniers (Figure 1. 2). En effet, en période de chauffage, l'air intérieur d'un bâtiment est plus chaud que l'air extérieur (Figure 1. 2). Ceci entraîne un mouvement d'air dans les pièces générant une légère dépression au niveau du sol vis-à-vis de son environnement extérieur et notamment du sous-sol. La ventilation génère une mise en dépression globale du bâtiment. En hiver, la dépression peut varier entre 3 et 10 Pa et donc générer des flux convectifs importants. En été et au printemps, les fenêtres et les portes étant fréquemment ouvertes, ces flux convectif peuvent souvent être négligés (Ferguson et al., 1995).

L'autre mécanisme de transport qui peut engendrer aussi l'intrusion des vapeurs de polluants dans les habitations est la diffusion à cause du gradient de concentration entre l'air intérieur de ceux-ci et le milieu sous adjacent de la dalle.

En conclusion, le transport des polluants gazeux du sol vers l'intérieur des bâtiments est dû à une combinaison des mécanismes de diffusion et de convection. Cependant, la convection est le processus de transport majoritaire dans les bâtiments dans le cas de l'existence d'un fort gradient de pression entre l'air extérieur et l'air intérieur des bâtiments (Nazaroff et al., 1985 ; Waitz et al., 1996 ; Bakker et al., 2008).

1.4.3 Caractéristiques du béton et influences sur le transfert diffusif et convectif

Le béton est l'un des matériaux de base de construction des bâtiments. La connaissance des caractéristiques du béton permet l'estimation de la part des polluants gazeux en provenance du sous sol se retrouvant dans l'air intérieur des bâtiments. Trois caractéristiques physiques du béton sont importantes lorsque l'on cherche à évaluer sa capacité à capter ou à laisser passer les polluants gazeux du sol : sa porosité, sa perméabilité et le coefficient de diffusion effective d'une substance transitant au travers du matériau. Ces caractéristiques sont étroitement reliées et suivent la même tendance (une augmentation de porosité s'accompagne d'une augmentation de coefficient de diffusion effective et de perméabilité) (Renken and Rosenberg, 1996).

La variation de la porosité du béton fournira plus ou moins d'espace d'air à l'intérieur du béton, par conséquence, elle affectera le temps de séjour des polluants gazeux lors de leur transport à travers la dalle. Le coefficient de diffusion du polluant gazeux à travers une dalle saine de béton quantifie la capacité de ce gaz à traverser ce matériau lorsque le gradient de concentration est la force conductrice (Renken and Rosenberg, 1996). Ces trois caractéristiques dépendent principalement des granulats utilisés, de la proportion eau/ciment et des conditions de séchage et de vieillissement (Cozmuta and van der Graaf, 2001; Daoud and Renken, 2001). Par exemple, le coefficient de diffusion d'un polluant à travers un béton âgé est deux fois plus grand que celui d'un polluant transitant au travers un béton nouvellement déversé (Cozmuta and van der Graaf, 2001).

1.5 Que va-t-on modéliser et comment ?

1.5.1 Panache de vapeurs dans le milieu poreux

Pour étudier le panache de vapeurs dans le milieu poreux spécifiquement dans la zone non saturée (chapitre 5), nous avons mené d'une part, des expérimentations sur la plate forme SCERES et d'autre part, un travail numérique avec le code multiphasique SIMUSCOPP. Beaucoup d'études ont utilisé SIMUSCOPP pour estimer en 3D et en fonction du temps le devenir de la zone source de pollution et étudier la

migration des vapeurs dans le milieu poreux (Benremita, 2002 ; Emonet, 2003 ; Bohy, 2004 ; Dridi, 2006).

1.5.2 Flux de vapeurs à l'interface sol/atmosphère

Dans ce travail, nous avons utilisé une solution semi analytique basée sur la combinaison de la loi de Fick et de la loi de Darcy (décrite dans le chapitre 3) pour déterminer le flux de vapeurs à travers l'interface sol/atmosphère. Cette solution semi analytique est basée sur des mesures effectuées sur le site expérimental SCERES. Les résultats de la solution semi-analytique seront comparés aux résultats expérimentaux.

1.5.3 Effet de la densité et du gradient de pression motrice des vapeurs

Pour pouvoir quantifier l'influence de la densité des vapeurs et du gradient de pression motrice sur le flux de vapeurs des COV vers la surface du sol, une étude numérique 1D a été menée. Deux approches semi-analytiques ont été testées et confrontées aux résultats numérique : la première est basée seulement sur la première loi de Fick, et la deuxième prend en compte la diffusion, la dispersion et la convection. Pour construire une base de données des profils verticaux de concentration et de pression de vapeurs pour la solution semi-analytique, le modèle numérique 1D se base sur un modèle de transport convectif-dispersif-diffusif couplé à un modèle d'écoulement d'air pour calculer les flux de vapeur à la surface du sol à partir d'une zone source de DNAPL située dans la zone non saturée (chapitre 4).

1.5.4 Flux de vapeurs de COV à travers l'interface sol/air intérieur des bâtiments

Pour étudier le transfert des vapeurs à travers l'interface sol/air intérieur des bâtiments (chapitre 6), une mise en dépression dans le bâtiment « modèle » a été réalisée pour créer un gradient de pression motrice générant un flux de vapeurs ascendant. Afin d'estimer ce flux de vapeurs à travers la dalle de béton et de modéliser la distribution des vapeurs dans l'air intérieur au bâtiment modèle, nous avons choisi de travailler avec le code multiphysiques COMSOL. COMSOL permet une simulation de l'écoulement d'air à l'interface dalle de béton/caisson.

Chapitre 2:

Matériels et méthodes expérimentales

SOMMAIRE

2.1 Site expérimental SCERES.....43

2.2 Dalle de béton fissurée.....51

2.3 Cloche en acier inoxydable.....54

2.4 Mesures effectuées lors de SCERES1 et 2.....56

2.5 Etudes des paramètres de la dalle de béton.....73

L'étude du transfert de vapeurs du COV depuis le sous sol vers l'atmosphère et l'air intérieur de bâtiment repose sur la quantification expérimentale et mathématique du flux de vapeurs à la surface du sol. D'autre part les modèles physiques réduits de laboratoire rendent difficilement accessibles les concepts et les outils techniques utilisés, d'où la nécessité de mener des études expérimentales sur le site contrôlé SCERES (Site Contrôlé Expérimental de Recherche pour la réhabilitation des Eaux et des Sols), qui se situe à l'échelle intermédiaire entre laboratoire et site réel. Ces expériences vont constituer une étape indispensable pour la validation et le développement des approches de quantification et des modèles de simulation numérique.

2.1 Site expérimental SCERES

Afin d'évaluer d'une part, le risque de contamination d'un aquifère poreux à partir des vapeurs de COV et leurs migrations vers l'atmosphère et/ou vers l'air intérieur des bâtiments, et d'autre part de valider les modèles numériques de transport développés à cet effet, le besoin d'études expérimentales sur des sites réels a été formulé par plusieurs auteurs (Falta et al., 1989 ; Mendoza et McAlary, 1990 et Rivett et al., 2011). Dans ce cadre, le LHYGES a mis en œuvre 1991 une plate forme expérimentale nommée SCERES (Figure 2. 1 et 2. 2) qui est destiné à l'étude de l'écoulement et du transport de fluides miscibles et non miscibles dans la zone saturée et non saturée d'un aquifère poreux.

Figure 2. 1 : Le site expérimental SCERES (photo prise en 2009)

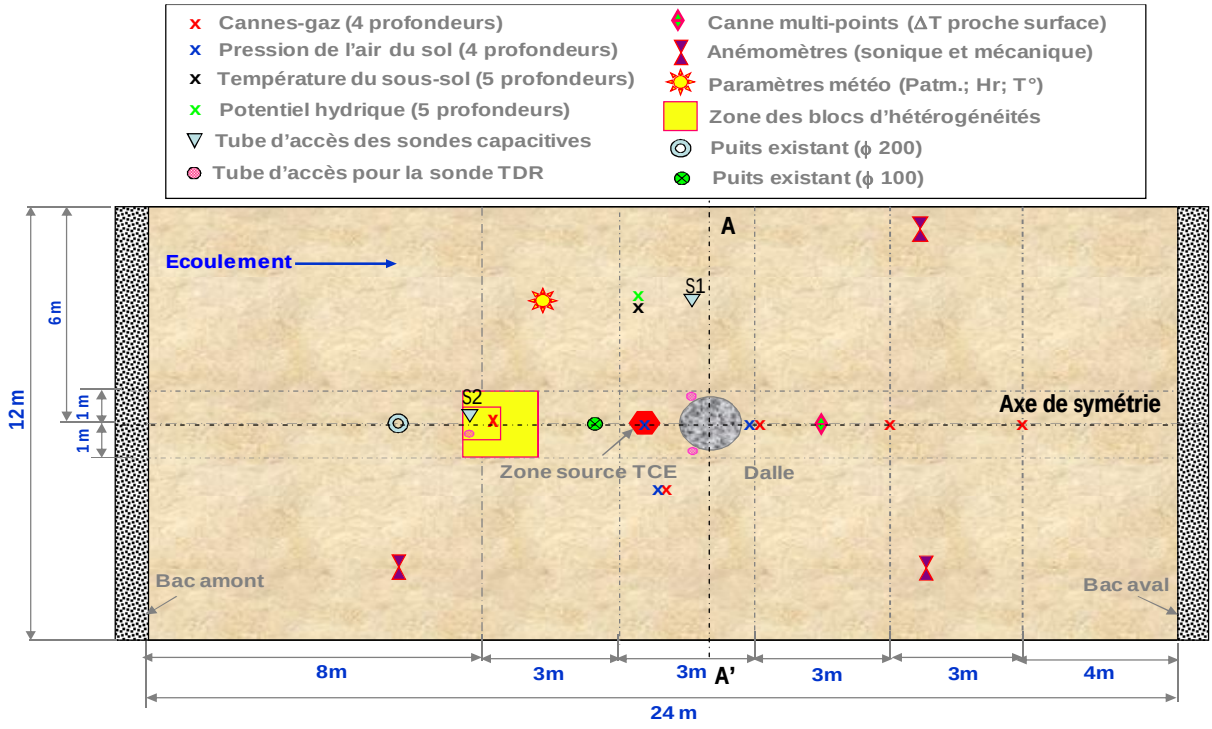


Figure 2. 2 : Vue de dessus du site SCERES et ses différents équipements lors du projet FLUXOBAT

2.1.1 Aquifère poreux et ses conditions aux limites

Le site expérimental SCERES représente un modèle d'un aquifère avec une nappe libre, reconstruit dans un bassin étanche en béton armé (Figure 2. 3). Les parois de ce bassin sont recouvertes d'un enduit d'étanchéité afin d'éviter toute fuite vers l'extérieur et il est enterré afin de maintenir une température stable dans le milieu. Il est instrumenté de différents capteurs d'eau et de gaz. L'aquifère poreux fait 25 m de long, 12 m de large et 3 m de profond, ce qui donne un volume total de plus de 900 m^3.

À la surface de l'aquifère, une grille est installée pour maintenir le milieu poreux en place contre le vent. À l'extrémité amont et aval du bassin sont situés les bacs amont et aval remplis de galets afin de limiter la déformation des grilles sous le poids du sable. Le site expérimental est couvert d'un toit. Ce toit protège le site des intempéries comme la pluie, la neige, le vent et le soleil afin de ne pas modifier les conditions hydrologiques à la surface du sol et de limiter le nombre de paramètres pouvant influencer le transfert de masse dans le bassin et vers l'atmosphère.

L'aquifère du bassin expérimental est constitué de trois types de sable : sable fin, sable moyen et sable grossier (Figure 2. 3 et 2. 4). La structure de l'aquifère a pour but de se rapprocher des conditions d'un site réel par la création d'hétérogénéité locale dans le milieu afin de tester ses influences sur le transfert du COHV en milieu souterrain. Cette hétérogénéité se présente sous forme de deux blocs de sable fin (H1F) installés dans le milieu principal formé du sable moyen (H2F). A la profondeur 0,78 m par rapport à la surface du bassin est installé le bloc1 (Figure 2. 3) et à 0,2 m en dessous est installé le bloc 2. Le bloc1 a pour dimension 1 m x 1 m x 0,5 m et il est placé dans la zone non saturée, tandis que le bloc inférieur, d'une dimension 2 m x 2 m x 0,8 m et il est possible qu'il soit effleuré par la frange capillaire ou même par la zone saturée.

Afin de représenter le cas d'un bâtiment, une cloche en acier inoxydable est installée sur une dalle de béton fissurée, qui est à son tour placée sur l'axe de symétrie du SCERES.

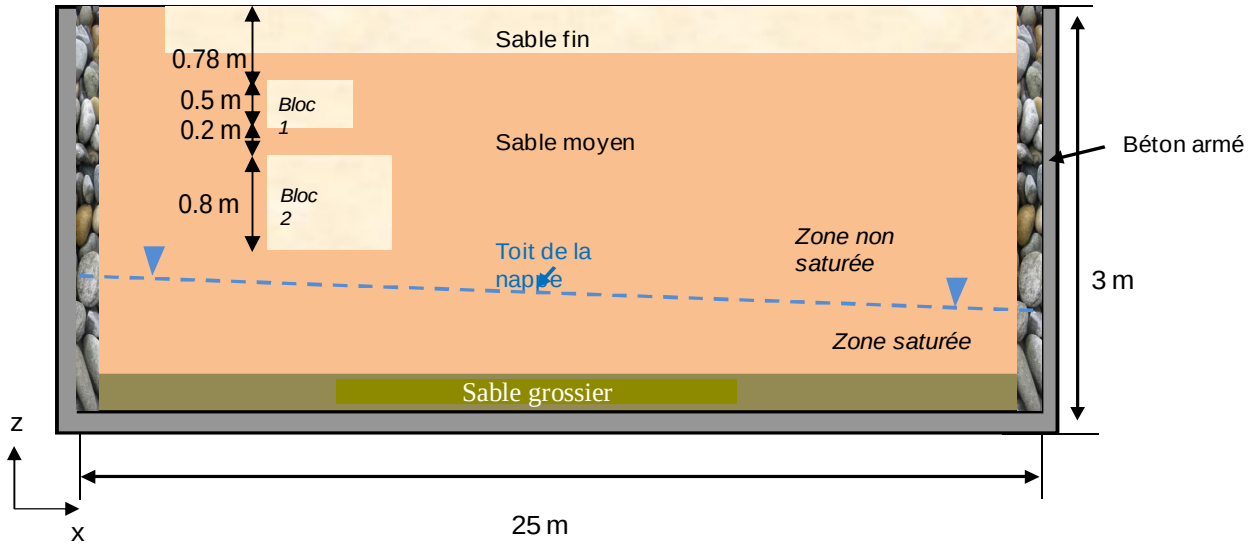


Figure 2. 3 : Coupe longitudinale du bassin SCERES

Figure 2. 4 : Vue de dessus du bassin SCERES

2.1.2 Composition de l'aquifère

2.1.2.1 Sable moyen

C'est un sable de dénomination commerciale H2F et fourni par la société FRIEDRICH ; il représente le milieu principal du bassin SCERES. Ses caractéristiques sont proches de celles de l'aquifère alsacien. Le diamètre moyen de ce sable est compris entre 0,4 et 0,5 mm. Il est principalement constitué de silice (Tableau 2. 1). Il

contient très peu de matières organiques et d'oxydes métalliques, ce qui implique une sorption négligeable de composés organiques (Cotel, 2009).

Tableau 2. 1 : Composition chimique du sable H2F (Jellali, 2000)

Composé	SiO_2	Al_2O_3	K_2O	Fe_2O_3	Na_2O	TiO_2	CaO	MgO
% en masse	97,5	1,28	0,90	0,07	0,07	0,04	0,01	0,01

Le coefficient d'uniformité $C_u = d_{60}/d_{10}$ est égal à 2.1 (Dridi, 2006), ce qui permet de considérer ce milieu comme uniforme. Ses propriétés hydrodynamiques (porosité, perméabilité et saturation irréductible en eau), déterminées en laboratoire, sont résumées dans le Tableau 2. 2.

Tableau 2. 2 : Propriétés du milieu des sables H1F et H2F (Dridi, 2006)

	Porosité ε	Perméabilité intrinsèque k m²	Saturation irréductible en eau S_{wr}
H1F	0,43	$6,3\ 10^{-12}$	0,17
H2F	0,40	$1,0\ 10^{-10}$	0,15

2.1.2.2. Sable fin

C'est un sable de quartz, nommé H1F et fourni par la société FRIEDRICH. Le diamètre de ses grains est compris entre 0,06 et 0,30 mm, et il représente la couche supérieure du bassin de 0,5 m de hauteur et deux blocs séparés installés l'un sous l'autre (Figure 2. 3). Le coefficient d'uniformité est égal à 2. Il est constitué principalement de silice. La composition chimique de ce sable est présentée dans le tableau 2.2. Les propriétés hydrodynamiques du sable H1F (porosité, perméabilité et saturation irréductible en eau) sont présentées dans le Tableau 2. 2.

Tableau 2. 3 : Composition chimique du sable H2F (Rasakarisoa et al, 2006)

Composé	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	Na_2O	K_2O
% en masse	93,4	3,3	0,43	0,12	1,79	1,12

2.1.2.3 Sable grossier

Nommé aussi K10, il est caractérisé par un diamètre moyen de grains égal à 1 mm et une conductivité hydraulique égale à 6.10^{-3}m/s (Jellali, 2000). Il constitue la couche drainante dans le bassin expérimental SCERES (Figure 2. 3).

2.1.3 DNAPL utilisé

Lors de nos expériences sur SCERES, le DNAPL (Dense Non Aqueous Phase Liquid) utilisé est le trichloréthylène (TCE). Le TCE est un composé organique de formule brute $\mathbf{C_2HCl_3}$ et de formule semi-développée $ClCH=CCl_2$. Le Tableau 2. 4 résume ses propriétés physico-chimiques.

Tableau 2. 4 : Principales propriétés physico-chimiques de TCE

		TCE
Viscosité dynamique	(Pa*s)	$1,78\ 10^{-5}$
Pression de vapeur à 9°C	(Pa)	4475
Masse moléculaire	(g/mol)	131,39
Masse volumique	(g/cm^3)	1,46
Constante d'Henry		0,229
Coefficient de diffusion moléculaire à l'air libre à 15°C (m^2/s)		$7,8\ 10^{-6}$

2.1.4 Zone source de TCE

2.1.4.1 Première étude expérimentale en Automne 2010 : expérience SCERES1

Rappelons que pendant les expériences sur SCERES, l'épaisseur moyenne de la zone saturée est de 1 m et que le gradient hydraulique est de 5‰.

a) Emplacement de la zone source de TCE

Pour l'expérience **SCERES1**, la zone source de pollution a été mise en place le 6 septembre 2010. SCERES1 a duré deux mois. La création de la zone source a consisté à injecter 3,5 L de TCE, soit à peu près 5,1 kg pendant une heure dans la zone non saturée. Le centre de la zone source est situé sur l'axe de symétrie de SCERES à une distance de 11,10 m des limites des bacs amont, à 0,95 m du bord amont de la dalle, à 6 m des parois latérales et à 60 cm de profondeur par rapport à la surface du sol ce qui signifie 10 cm sous la couche du sable fin (Figure 2. 5).

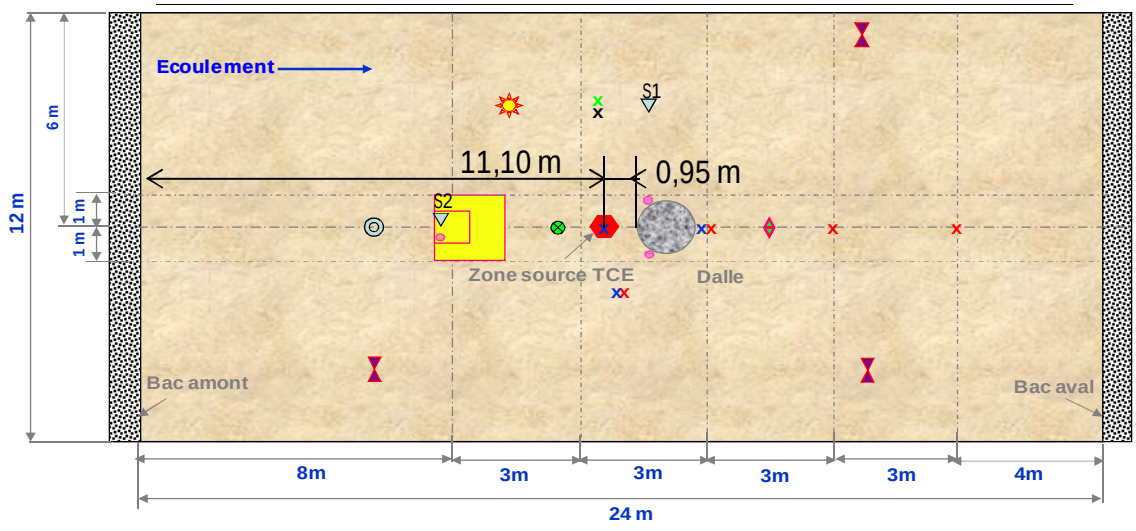


Figure 2. 5 : Position de la zone source de TCE sur SCERES

b) Création de la zone source de TCE

La création de la zone source de TCE dans le sable moyen a été réalisée à l'aide d'une quarantaine d'embouts d'injection crépines en laiton (diamètre = 20mm ; hauteur = 22mm ; trous de 1.5mm) (Figure 2. 6) avec membrane géotextile à la base et reliés chacun à des tuyaux en Téflon.

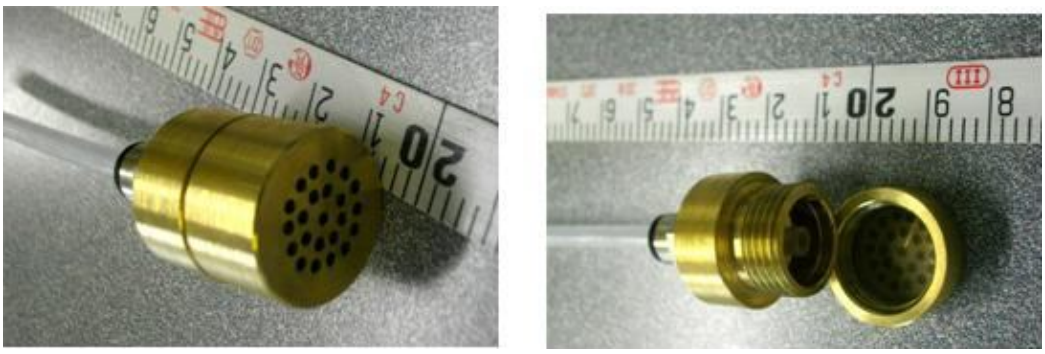


Figure 2. 6 : Embouts en laiton crépines servant à l'injection de TCE dans le sous sol

Les points d'injection dans la zone non saturée sont distants entre eux de 10 cm. La Figure 2. 7 représente la sortie des tuyaux reliant les embouts situés à 60 cm de profondeurs à la surface du sol. Pour éviter la perturbation du milieu après l'enfoncement de ces embouts à la profondeur voulue, un déplacement vertical de la zone saturée par imbibition-drainage a été effectué sur l'ensemble de SCERES au moins deux semaines avant l'injection du polluant afin d'assurer une redistribution naturelle et uniforme du milieu poreux. Ces embouts considérés comme pointes d'injection perdues restent en place dans le sous-sol après l'injection du TCE. L'implantation de la zone source a été effectuée à 1,4 m du toit de la nappe, cependant la zone source est supposée atteindre une hauteur moyenne de 0,70 m dans le sable moyen, et une taille approximative s'étalant sur une aire d'infiltration de 0,25 à 0,30 m^2. L'emplacement de la zone source a été choisi de telle sorte que le DNAPL n'atteigne pas la zone saturée.

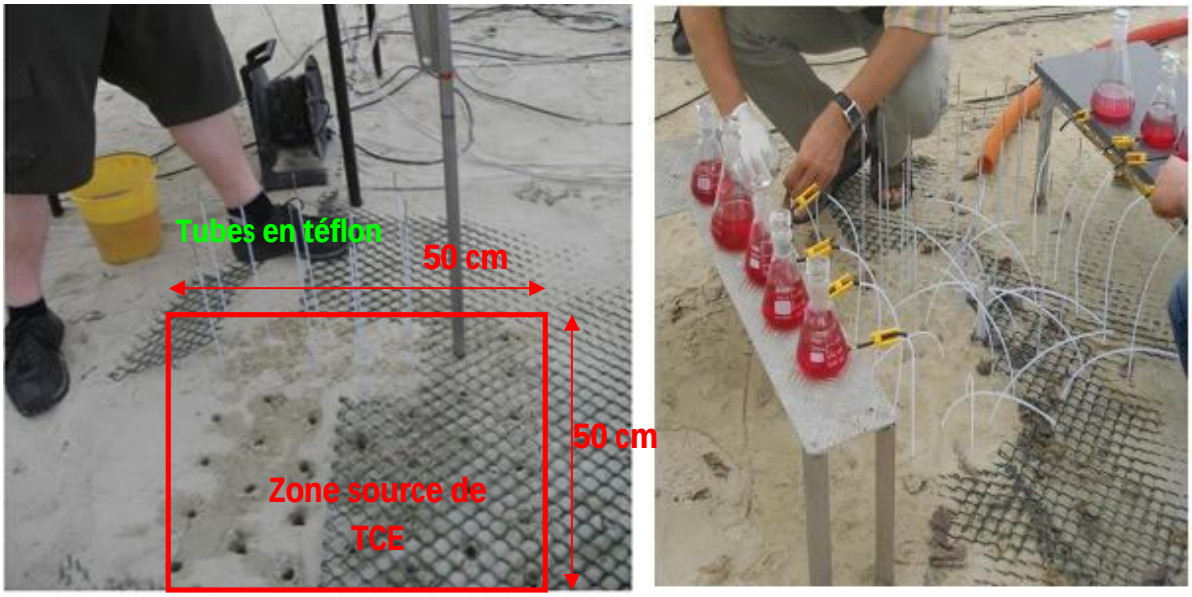


Figure 2. 7 : Tuyaux d'injection de la zone source à la surface du sol

2.1.4.2 Deuxième étude expérimentale au Printemps 2011 : expérience SCERES2

L'expérience **SCERES2**, s'est déroulée pendant plus de deux mois. La zone source a été mise en place le 15 avril 2011. Le volume injecté était égal à 3,86 l, ce qui correspond à 5,6 kg de TCE. L'emplacement de l'injection de la zone source était semblable à SCERES1.

Le suivi de concentration de vapeurs de TCE, des pressions de l'air de sol, de la pression atmosphérique, de la vitesse et direction des vents, de la température et des flux de vapeurs à la surface est assuré de façon continue durant les deux expérimentations sur SCERES.

2.2 Dalle de béton fissurée

Deux dalles de béton de perméabilités intrinsèques et taux de fissurations différents ont été utilisées de façon successive pendant nos expérimentations sur SCERES.

2.2.1. Caractéristiques de la dalle

La construction et le vieillissement de ces deux dalles ont été effectués par le partenaire CSTB. La création artificielle des fissures et microfissures dans les deux dalles (Figure 2. 8 et 2. 9) a été exécutée par une série de flexions par chargement central. Chaque dalle, de diamètre 1,6 m et d'épaisseur 0,1 m, pèse à peu près 700 kg.

Figure 2. 8 : Dalle 1 (suivant l'axe AA', cf. Figure 2. 2)

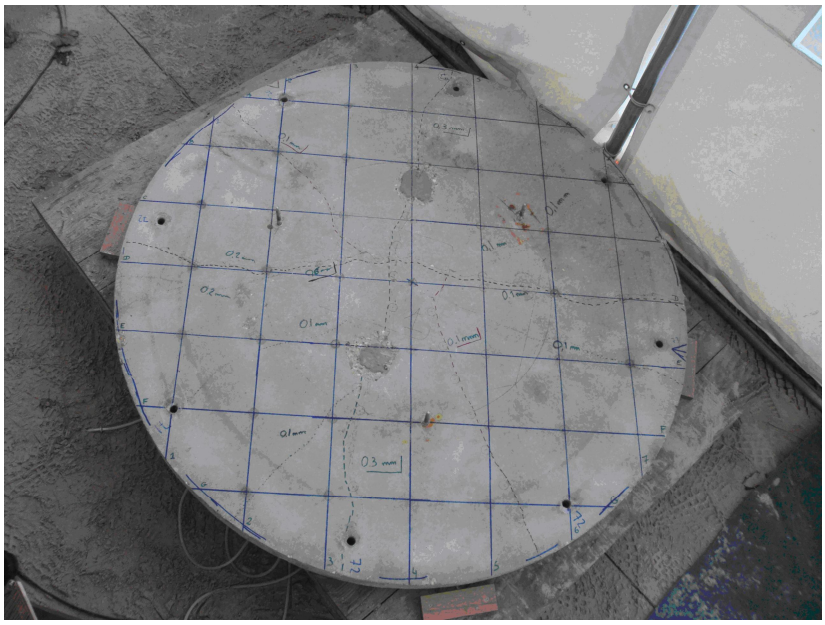


Figure 2. 9 : Dalle 2

Les fissures de la dalle 1 sont plus centrées et plus apparentes que celles de la dalle2 (Figure 2. 8 et Figure 2. 9). Les épaisseurs des fissures de la dalle2 mesurent de 4 µm jusqu'à 345 µm, tandis que les fissures de la dalle 1 font en moyenne 600 µm d'épaisseur. Le Tableau 2. 5 résume la composition des deux dalles de béton.

Tableau 2. 5 : Composition des deux dalles de béton

Composé	Ciment CEM II/A 32,5 CE CP2 NF	Sable 0/8 Bouaffle Recomposé	Gravillons 4/14 RC La Brosse	Superplastifiant Chrystoplast Oméga 132	Eau
Dosage ($kg.m^{-3}$)	350	982	814	2	196

2.2.2 Mise en place de la dalle :

La dalle de béton est placée au niveau de la surface du sol (correspondant à la cote z=0 m). Elle a été installée sur un lit de gravier de 13 cm d'épaisseur, creusé dans le sable fin (Figure 2. 10 i). Afin de protéger la dalle de béton de toute interaction latérale avec le milieu extérieur, une jupette en acier inoxydable construite par la CSTB a été installée sur SCERES. Cette jupette d'une épaisseur de 25 cm a été enfoncée de 15 cm dans le sol enveloppant ainsi la dalle, le lit de gravier et une partie du sable fin (Figure 2. 10 iv).

La dalle a été soulevée à l'aide d'un camion à grue pouvant soulever jusqu'à 900 kg (Figure 2. 10 iii). La fixation de la dalle sur la jupette (Figure 2. 10 iv), est assurée par des tiges filtrées fixées sur la jupette pour maintenir la dalle immobile. L'opération de soulèvement et mise en place de la dalle dans la jupette a duré entre 4 h et 5 h.

i) Etape 1

ii) Etape 2

iii) Etape 3

iv) Etape 4

Figure 2. 10 : Etapes de mise en place de la dalle de béton sur le site SCERES

2.3 Cloche en acier inoxydable

Dans le but de reproduire la structure d'un bâtiment et ce qui se passe à l'intérieur, une cloche (caisson) en acier inoxydable a été créée par la CSTB et posée sur la dalle de béton. La cloche représentant un « bâtiment modèle », fait 1,6 m de diamètre total, 1,4 m de diamètre effectif (Figure 2. 11) et 0,5 m de hauteur ce qui constitue un volume d'air intérieur total de 0,76 m^3. L'étanchéité entre la cloche et la dalle de béton est assurée par un joint d'une largeur de 0,1 m.

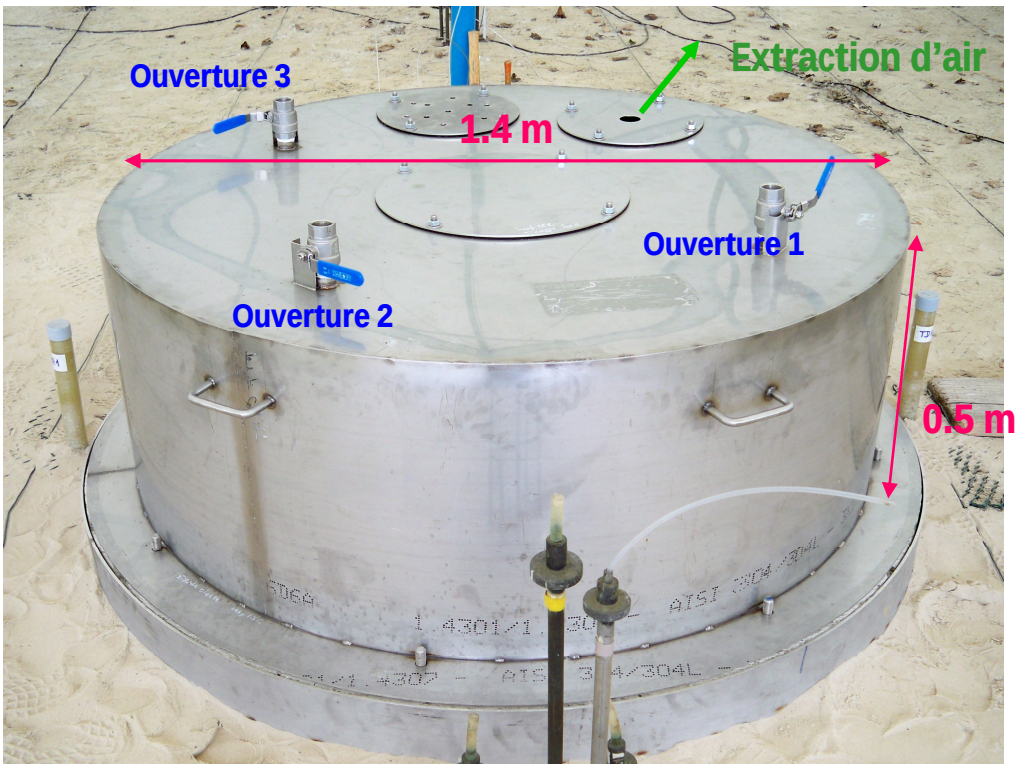


Figure 2. 11 : La cloche en acier inoxydable installée sur la dalle (suivant l'axe AA')

Mise en dépression dans la cloche

Afin de créer une dépression dans la cloche, quatre ouvertures de 2,5 cm de diamètre ont été créées sur la facette supérieure de la cloche. Une ouverture pour l'extraction de l'air et trois pour l'entrée d'air, le réglage et le contrôle de la dépression dans la cloche (Figure 2. 11). Pendant la mise en dépression dans la cloche, nous avons réalisé les mesures suivantes :

- La dépression dans la cloche ($\Delta P_1 = P_{cloche} - P_{atmosphèrique}$) ;
- La pression relative sous la dalle ($\Delta P_3 = P_{sous\ dalle} - P_{atmosphèrique}$) ;
- La perte de charge à travers la dalle ($\Delta P_2 = P_{sous\ dalle} - P_{cloche}$) ;
- Le débit d'extraction de l'air de la cloche ;
- Les concentrations de vapeurs de TCE dans la cloche. Vu la dépression créée lors de l'aspiration des vapeurs depuis le sous sol vers la cloche par rapport à celle créés par pompage de l'analyseur de gaz INNOVA, nous avons pu mesurer en continu les concentrations de vapeurs proche de la sortie d'extraction de l'air de la cloche pendant les mises en dépressions à l'aide de l'analyseur de gaz (Figure 2. 12).

- Les concentrations de vapeurs de TCE sous la dalle de béton avant et après chaque mise en dépression afin d'évaluer l'évolution des concentrations en TCE sous la dalle en fonction de la dépression.

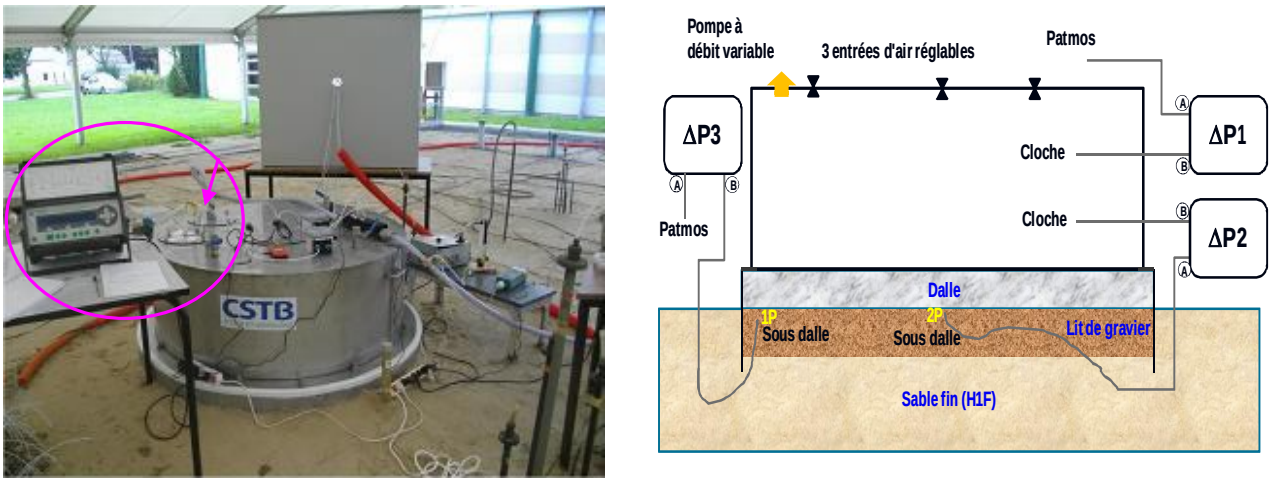


Figure 2. 12: Expérience de la mise en dépression dans la cloche

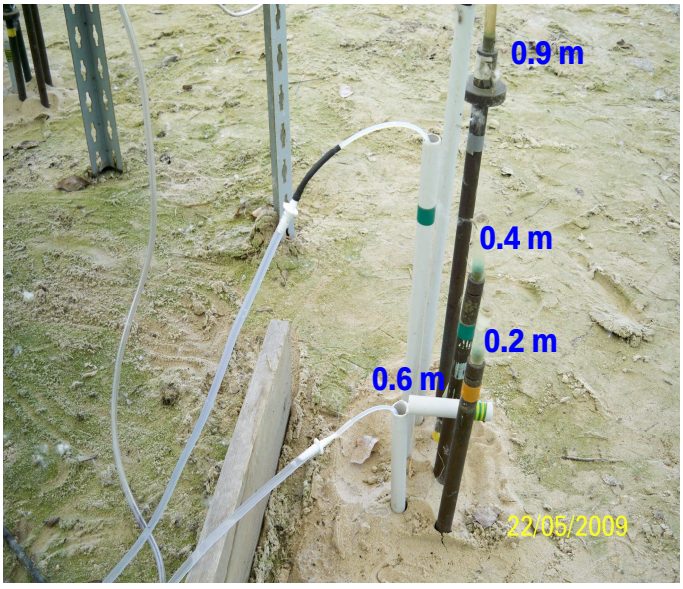
La solution analytique de l'équation différentielle ordinaire permet ensuite d'exprimer l'évolution des concentrations de vapeurs pendant la mise en dépression dans la cloche (Cf. Chapitre 3).

2.4 Mesures effectuées lors de SCERES1 et 2

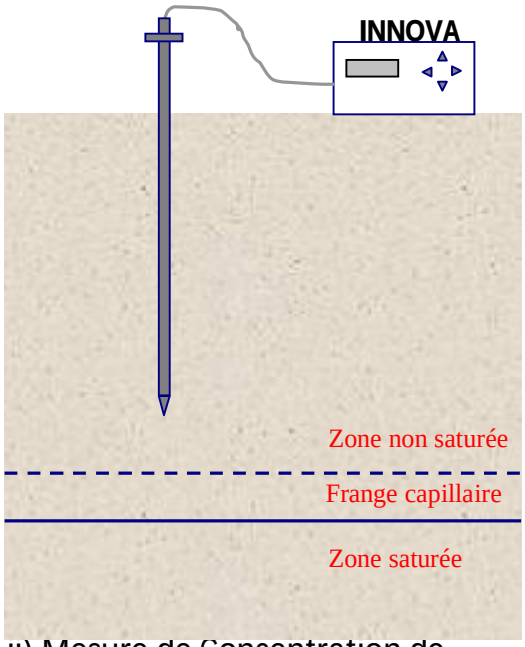
2.4.1 Concentrations de vapeurs de TCE dans la zone non saturée

SCERES est équipé de plusieurs points de cannes gaz afin d'assurer le suivi des concentrations en vapeurs de TCE dans la zone non saturée. Ces points sont disposés latéralement et transversalement au sens de l'écoulement de la nappe d'eau du bassin (Figure 2. 2). Sur chaque point, quatre profondeurs sont disponibles : deux dans la couche de sable fin à 0,2 m et 0,4 m de profondeur et deux autres dans le milieu principal à 0,6 m et 0,9 m de profondeur (Figure 2. 13 i). Ceci permet un suivi tridimensionnel du panache de vapeurs de TCE.

Les cannes de prélèvement de gaz sont constituées de tubes en laiton ou cuivre, d'un diamètre moyen de 2 cm, portant à leur extrémité enterrée une pointe crépine équipée d'un filtre géotextile inerte aux solvants, pour empêcher toute entrée de sable dans la canne. La mesure de la concentration est réalisée à partir de la surface à l'aide d'un prélèvement de gaz moyennant un analyseur de gaz (**INNOVA, 1312 Photoacoustic Multi-gas Mnitor**) (Figure 2. 13 ii), qui est équipé d'une pompe interne et à laquelle chaque canne est reliée par un tube en téflon (INNOVA est décrit plus en détail dans le paragraphe 2.4.5.2.). Ces cannes sont également fermées par des bouchons en plastique à leur extrémité non enterrée pour éviter toute fuite des vapeurs de TCE dans l'atmosphère.



i) Profondeurs des Cannes gaz



ii) Mesure de Concentration de vapeurs dans l'air du sol

Figure 2. 13 : Dispositif de prélèvement des vapeurs de TCE dans la zone non saturée

Pour l'expérience SCERES 1, la mesure de concentration a également été assurée sous la dalle de béton par trois points de mesures (tubes en inox) situés directement sous la dalle (Figure 2. 14). Pour l'expérience SCERES 2, nous avons ajouté deux autres points de mesures situés aux profondeurs de 0,2 m et de 0,4 m.

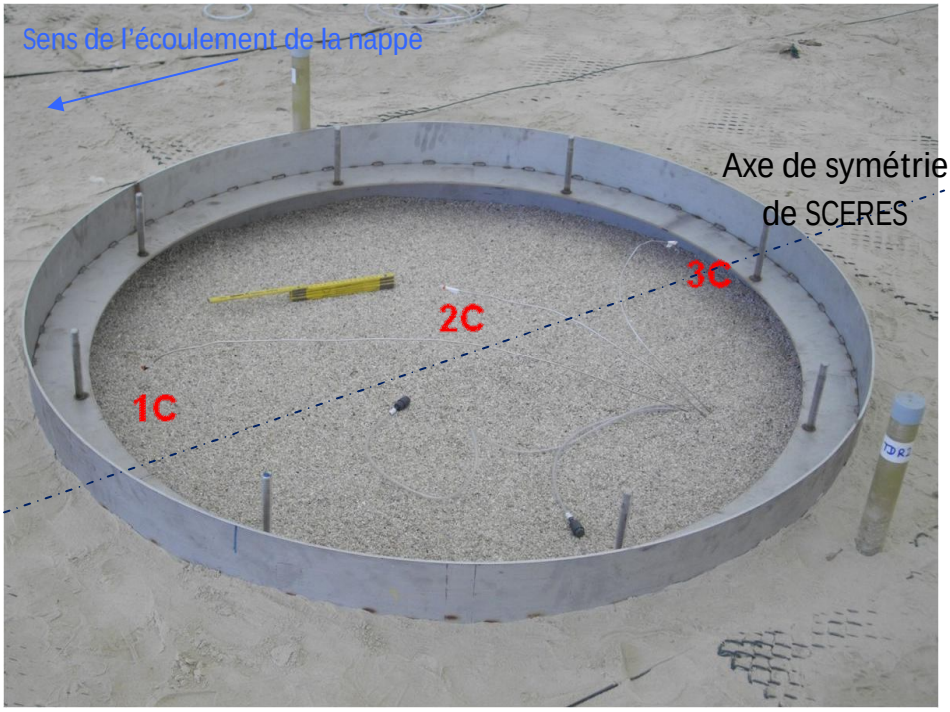


Figure 2. 14 : Points de mesure de concentration des vapeurs de TCE (1C, 2C, 3C) sous la dalle de béton

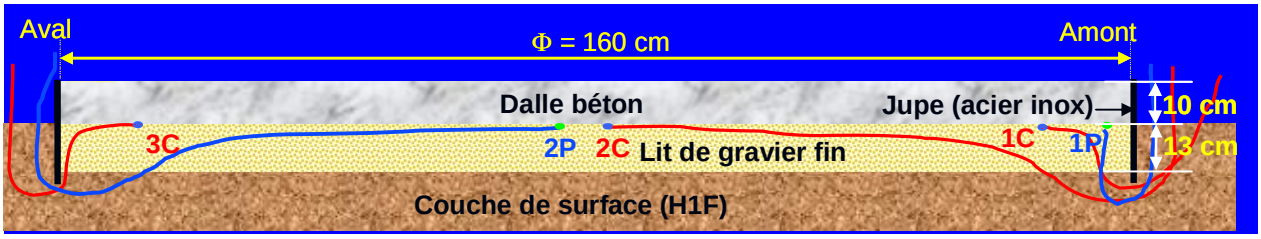


Figure 2. 15: Points de mesure de concentration des vapeurs de TCE (1C, 2C, 3C) et de pression de l'air du sol (1P,2P) sous la dalle de béton-coupe verticale

2.4.2 Pressions de l'air du sol

La mesure de pression relative (ou différentielle) de l'air du sol a été effectuée par l'intermédiaire des capteurs de pression **Greisinger** de haute sensibilité (gamme ± 250Pa) connectés à des tuyaux souples enfoncés dans le sol et placés à coté des cannes gaz (Figure 2. 16).

Figure 2. 16 : Profondeur de mesure de la pression de l'air du sol

Quatre emplacements de mesures de pressions de l'air du sol ont été installés dont trois sont répartis en quatre profondeurs (0,25 m, 0,45 m, 0,65 m et 1,25 m). Le premier emplacement se situe au niveau de la zone source (uniquement les profondeurs 0,25 m, 0,45 m), le deuxième à 2m en aval de la zone source et le troisième à 2 m latéralement par rapport à la zone source. Le quatrième emplacement est situé directement sous la dalle de béton.

Les capteurs de pressions différentielles Greisinger contiennent les branchements A et B (Figure 2. 17). Le point B est relié au tuyau souple pour mesurer la pression de l'air du sol ; le point A est placé à la surface du sol et ouvert à la pression atmosphérique. Les extrémités des tuyaux installées dans le sol sont équipées d'une membrane hydrophobe (**GORE^{TM} Protectrice Vents**) empêchant l'eau d'y entrer tant que la pression de l'eau est inférieure à 0,3 bar.

Le choix de décaler les extrémités des tuyaux de 5 cm suivant la verticale par rapport aux cannes gaz est motivé par la volonté de ne pas trop perturber la mesure de pression de l'air pendant la mesure des concentrations de vapeur de TCE dans le sol.

Figure 2. 17 : Capteur de pression différentielle d'air Greisinger

La mesure de pression a également été effectuée sous la dalle de béton afin de contrôler toute variation de pression due aux variations de pression dans l'air intérieur de la cloche. La mesure a été effectuée sur deux points situés directement sous la dalle (Figure 2. 18).

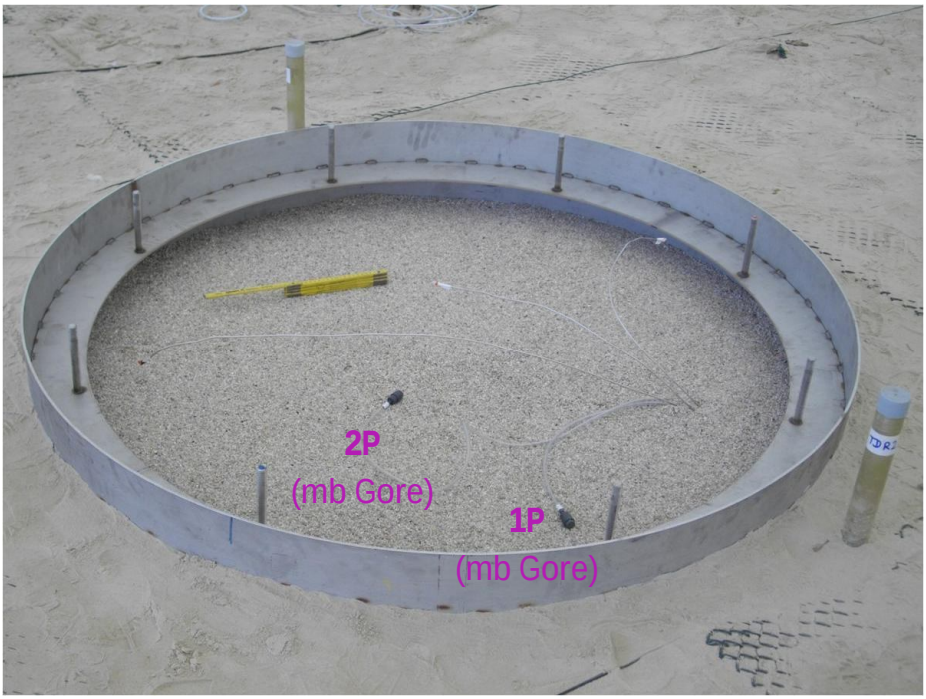


Figure 2. 18 : Capteurs de pression différentielle de l'air (1P, 2P) placés sous la dalle de béton, vue de dessus

La pression dans l'air du sol est mesurée par le capteur de pression relative Greisinger. Cependant, ce dernier affiche des pressions relatives (différentielles) dans

l'air du sol ΔP_r égales à :

$$\Delta P_r = P_M - P_{atm} \qquad \text{(Eq 2. 1)}$$

où P_M (Pa) est la pression du point M mesurée au plan horizontal de l'appareil de mesure (Figure 2. 19), et P_{atm} (Pa) est la pression atmosphérique au même plan horizontal.

La vraie pression de l'air du sol P_M^* au point M est en principe égale à la somme de la pression P_M et la colonne d'air Δz au dessus du point M:

$$P_M^* = P_M + \Delta z \rho_{air} g \qquad \text{(Eq 2. 2)}$$

où ρ_{air} (kg.m^{-3}) est la masse volumique du l'air et g (m.s^{-2}) est l'accélération de pesanteur. Donc la pression de l'air du sol au point M devient égale à :

$$P_M^* = \Delta P_r + P_{atm} + \Delta z \rho_{air} g \qquad \text{(Eq 2. 3)}$$

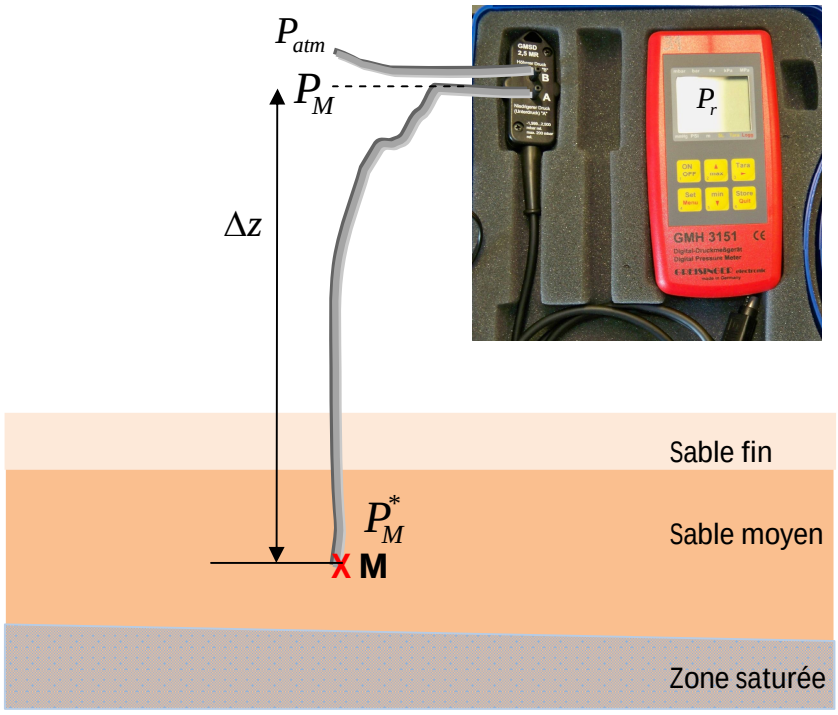


Figure 2. 19 : Pression dans l'air de sol en un point M

2.4.3 Profils hydriques

Les profils hydriques du sous sol ont été mesurés à partir des sondes capacitives et des sondes TDR installées dans l'aquifère du site SCERES.

2.4.3.1 Sondes capacitives

Deux sondes capacitives **EnviroSMART** S1 et S2 ont été installées chacune dans des tubes d'accès dans SCERES (Figure 2. 20 i). La mesure des teneurs en eau en profondeur est effectuée grâce au couplage des sondes à une centrale d'acquisition des données (**Campbell CR 800**). La sonde S1 contient 10 capteurs capacitifs Sentek placés entre la profondeur 6 cm et la profondeur 96 cm, et distants de 10 cm (Figure 2. 20 ii). La sonde capacitive S2 contient 15 capteurs capacitifs Sentek distribués verticalement entre la profondeur 6 cm et la profondeur 146 cm distant de 10 cm. Le milieu poreux où la sonde capacitive S2 est installée est caractérisé par la présence des deux blocs peu perméables (sable H1F) dans le sable moyen H2F (cf. bloc 1 et bloc 2 (Figure 2. 3)). La sonde capacitive S1 se situe hors blocs. Les données observées sont sous forme de fréquences en eau volumique.

i) Tube d'accès de sonde capacitive ii) Capteurs de la sonde capacitive

Figure 2. 20 : La sonde capacitive EnviroSMART

Une courbe d'étalonnage de la sonde capacitive a été réalisée afin de transformer les fréquences obtenues en saturations en eau. Pour cela, des échantillons de sol ont été prélevés sur SCERES et ont été pesés à deux reprises : une fois sur échantillon humide et l'autre sur échantillon sec après passage à l'étuve. Le prélèvement des échantillons de sol s'est effectué à plusieurs profondeurs : 0,25,

0,35, 0,45, 0,65 et 0,75 m ce qui a permis de déterminer la relation entre la fréquence obtenue par la sonde capacitive et la saturation en eau (Figure 2. 21):

$$S_w = 0.4508 \times fr^2 + 0.4042 \times fr \quad \text{(Eq 2. 4)}$$

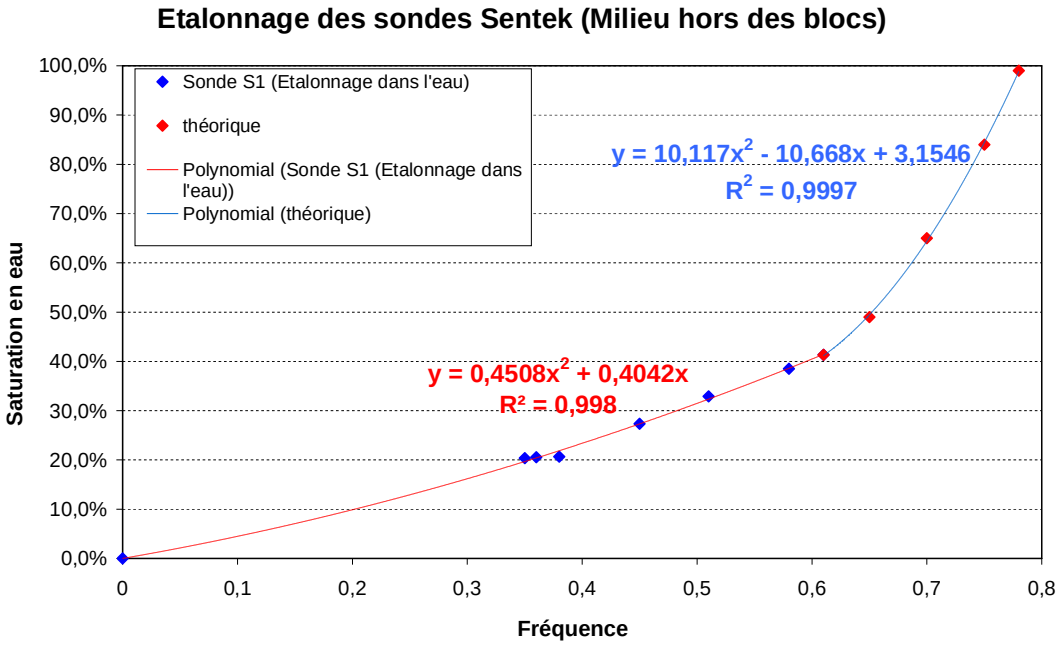


Figure 2. 21 : Etalonnage des sondes Sentek (Milieu hors des blocs)

2.4.3.2 Sondes TDR

La deuxième possibilité pour mesurer la teneur en eau sur le site SCERES est la sonde TDR. En effet, SCERES dispose de deux tubes d'accès pour la sonde TDR installés à 4,30 m de la sonde S1 suivant la largeur et juste à coté de la dalle de béton (Figure 2. 22). Les tubes d'accès sont destinés à des mesures de profil hydrique à l'aide de la sonde Time Domain Reflectometry TDR (IMKO, TRIME-FM). Le principe de cette mesure est basé sur la détermination du temps de propagation d'un pulse électromagnétique le long d'une tige de longueur 20 cm (Figure 2.23) introduite dans le tube d'accès. Les mesures ont été effectuées sur 23 profondeurs distantes de 10 et 5 cm, allant de 8 cm de profondeur jusqu'à 1,98 m. Les résultats obtenus de la sonde TDR sont des teneurs en eau volumique du milieu.

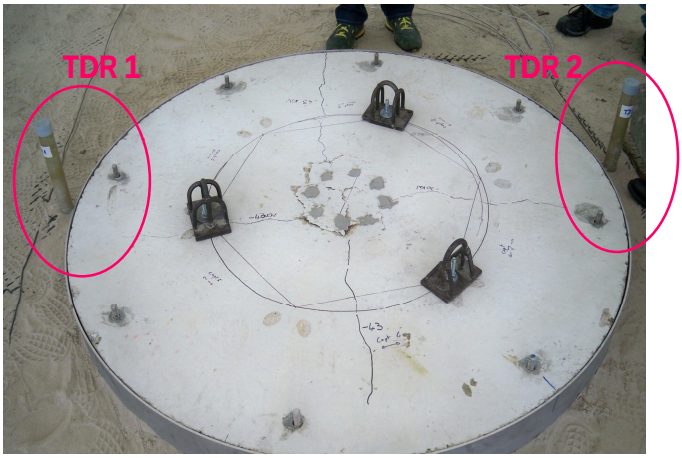


Figure 2. 22 : Emplacement des tubes d'accès pour la sonde TDR sur SCERES (suivant l'axe AA')

Figure 2. 23 : La sonde TDR

2.4.4. Déplacement vertical du toit de la nappe

2.4.4.1. Rôle des fosses techniques de SCERES

Afin de réguler et contrôler le mouvement du toit de la nappe de SCERES, deux fosses techniques se situent à l'extrémité amont et aval du bassin (Figure 2. 24). Ces deux fosses techniques sont équipées de déversoirs, de capteurs de prélèvement d'eau, de cuves en inox et de pompes. Pour contrôler le niveau du toit de la nappe, elles sont équipées des tubes de piézomètres (Figure 2. 25). L'alimentation du bassin en eau est assurée par la pompe (Pompant l'eau de la nappe phréatique située à 10 m en dessous du fond de bassin), à régulateur de pression dans la fosse amont. Les pompes installées en aval permettent l'évacuation de l'eau vers le réseau d'assainissement. Le débit et la vitesse d'écoulement dans le bassin sont évalués dans la fosse avale.

Figure 2. 24 : Fosse amont et aval du site SCERES

Figure 2. 25 : Tubes piézométriques

Dans le but d'évaluer l'effet du mouvement du toit de la nappe sur la migration de vapeurs de TCE depuis la zone non saturée vers l'atmosphère et l'air intérieur des bâtiments modèles (la cloche), un battement de la nappe a été effectué pendant les expérimentations sur SCERES. Il a consisté à faire monter (imbibition) et descendre (drainage) le toit de la nappe d'environ 50 cm.

Avant de commencer les études expérimentales sur SCERES, un cycle complet d'imbibition et de drainage a été mené afin d'une part, de tester le fonctionnement des capteurs de pression et des sondes capacitives installées sur SCERES, et d'autre part de remettre en place le milieu poreux après l'installation de tous les capteurs et sondes dans la zone non saturée du site SCERES. Pour cela, nous avons saturé le milieu poreux en eau puis nous l'avons drainé jusqu'à ce que la surface piézométrique se stabilise à une profondeur donnée. Ainsi, la hauteur de la zone non saturée s'est stabilisée à 2m.

2.4.4.2 Protocole expérimental du battement de nappe effectué lors de SCERES1 et SCERES2

Pendant les expériences SCERES1 et SCERES2, nous avons effectué un déplacement vertical du toit de la nappe de 50 cm dans le but de créer un fort gradient de pression induisant un mouvement vertical de l'air du sol. Ce déplacement a engendré un mouvement d'air chargé en vapeurs vers l'atmosphère dans le cas d'une imbibition, ou vers la zone saturée dans le cas d'un drainage.

L'imbibition a été réalisée par alimentation du bassin à l'aide d'une pompe dans la fosse amont, avec un débit égal à 4 $m^3.h^{-1}$. Au cours de cette expérience, nous avons relevé les niveaux piézométriques dans le bassin toutes les 10 min lors de la première heure, grâce à des tubes piézométriques situés dans les fosses amont et aval puis toutes les 30 min jusqu'à la fin de l'imbibition. De plus, les pressions de l'air du sol ont été mesurées toutes les 3 min à l'aide des capteurs de pressions Greisinger.

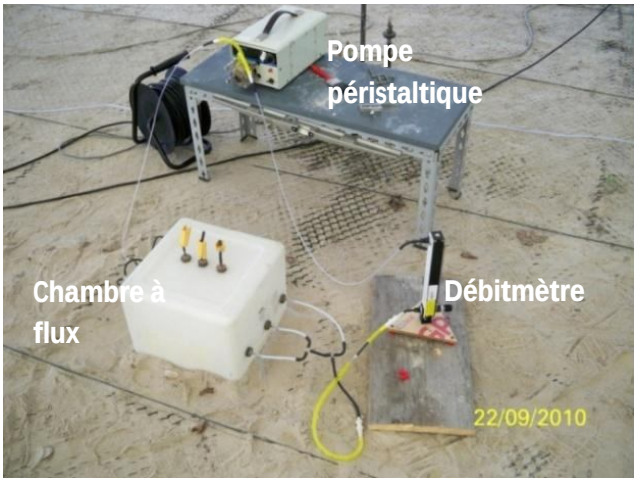
Le drainage gravitaire de l'aquifère est effectué en aval et à l'amont du bassin à l'aide des pompes permettant d'évacuer l'eau du bassin vers le réseau d'assainissement avec un débit de 3 $m^3.h^{-1}$. Au cours de cette expérience, l'eau sortie du bassin est évacuée par des déversoirs puis par des tubes vers des grandes cuves en inox. Compte tenu de la faible vitesse du drainage du milieu poreux, les mesures des niveaux piézométriques et de débit de drainage en amont et en aval du bassin ont été effectuées toutes les 30 min et les mesures des pressions de l'air toutes les 3 min. La phase de l'imbibition-drainage a duré 3 j.

2.4.5. Flux de vapeurs à l'interface sol/atmosphère et dalle de béton/atmosphère : Chambre à flux

Pour la quantification du flux de vapeur de TCE vers l'atmosphère, nous avons utilisé la chambre à flux du LHYGES (Jellali, 2000). Le dispositif expérimental comporte un caisson de 30 cm de côté en HDPE (Polyéthylène Haute Densité), matériau de faible interaction avec les vapeurs de solvants chlorés, un débitmètre, des tuyaux pour la recirculation, une pompe péristaltique et un tube à charbon actif (Figure 2. 26).

2.4.5.1. Protocole expérimental

À l'interface sol/atmosphère, le protocole expérimental consiste à enfoncer la chambre à flux dans le milieu poreux (Figure 2. 26). Dans le cas de la mesure du flux de vapeurs à l'interface dalle de béton/atmosphère, la chambre à flux a été posée sur la dalle de béton par l'intermédiaire d'un joint pour empêcher la fuite des vapeurs de TCE. Pour assurer l'étanchéité du système, une masse de lestage a été placée sur la chambre à flux.



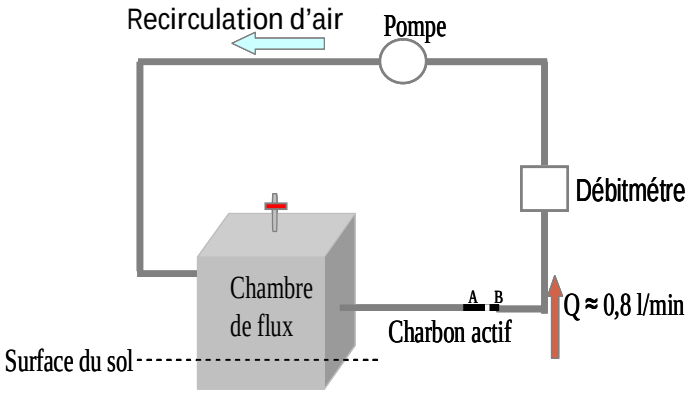


Figure 2. 26: Dispositif expérimental pour la mesure du flux de vapeurs de solvants chlorés à l'interface sol/atmosphère

La chambre à flux est montée en circuit fermé (Figure 2. 26), afin d'éviter toute perte de vapeurs. Les vapeurs de TCE sont absorbées sur un tube de **charbon actif (OrboTM)** monté à l'aval de la chambre à flux suivant le sens de recirculation. A l'aide de la pompe péristaltique on applique un débit d'extraction de 0.8 l/min contrôlé à l'aide d'un débitmètre. Le débit appliqué ne doit pas favoriser la création d'une dépression dans la chambre à flux ce qui peut provoquer une aspiration des vapeurs depuis la zone non saturée vers la chambre à flux. Pour cela la chambre à flux est équipée d'orifices supérieurs pour contrôler la pression à l'intérieur de la chambre.

Le tube de charbon actif, placé à la sortie du caisson, regroupe deux compartiments désignés par A et B (Figure 2. 27) et contiennent respectivement, 400 et 100 mg de charbon actif. La cartouche est orientée de façon à ce que la zone A soit du côté de la sortie du caisson. Le compartiment B permet de vérifier si les vapeurs traversant le compartiment A de la cartouche ont été totalement adsorbées ou pas. L'air sortant du tube est réinjecté dans le caisson pour éviter la création d'une dépression.

Sens de circulation des vapeurs

Figure 2. 27 : Tube de charbon actif (OrboTM)

À la fin de l'expérimentation, l'un des orifices supérieurs de la chambre est branché à l'analyseur de gaz INNOVA pour mesurer les concentrations des vapeurs accumulées dans la chambre.

2.4.5.2. Analyse des vapeurs de TCE : INNOVA

L'appareil utilisé pour analyser les concentrations en solvants dans les gaz du sol est un analyseur par spectrophotométrie acoustique 1312 appelé INNOVA (Figure 2. 28), dont le principe de fonctionnement repose sur la méthode photoacoustique de détection infrarouge. Il peut analyser tous les gaz qui absorbent l'infrarouge grâce à des filtres optiques spécifiques à chaque composé.

Figure 2. 28 : Analyseur de gaz INNOVA

Il est équipé d'une pompe interne permettant de ramener un échantillon gazeux à l'intérieur de l'analyseur dont le volume de purge est calculé automatiquement en tenant compte de la longueur du tube de prélèvement en téflon.

Les concentrations des vapeurs affichées sont exprimées par l'analyseur en ppmv (partie par million volumique) défini par :

$$ppmv = \frac{10^6 V'}{V} \qquad \text{Eq 2. 5}$$

où V' (m^3) est le volume propre du composé k qu'il occuperait seul à (P_t ,T), V (m^3) est le volume d'air prélevé par l'analyseur et P_t est la pression totale (Pa)

On considère que les vapeurs suivent la loi des gaz parfaits, qui s'écrit pour les n moles:

$$P_0 V = nRT \qquad \text{(Eq 2. 6)}$$

où P_0 est la pression de vapeur du composé pur (Pa), R est la constante des gaz parfaits ($J.mol^{-1}K^{-1}$), T est la température absolue (K) et V est le volume d'air (m^3).

La concentration de saturation en vapeur C ($kg.m^{-3}$) s'exprime ainsi pour chaque composé :

$$C_0 = \frac{m}{V} = \frac{(Mn)}{V} = P_0 \frac{M}{RT} \qquad \text{(Eq 2. 7)}$$

m est la masse du composé (kg) et M est la masse molaire de ce composé ($kg.mol^{-1}$).

D'où $$ppmv = \frac{m}{V} \times \frac{RT}{P_t M} 10^6 = C \times \frac{1}{\rho_{vi}} \qquad \text{(Eq 2. 8)}$$

Avec ρ_{vi} la masse volumique des vapeurs du constituant i à l'état pur qui dépend de la température T.

Pour le TCE à T = 15°C $\rho_{vi} \approx$ 5.55 mg/m^3

La masse accumulée dans la chambre $m_{caisson}$(g) est déterminée à partir des concentrations de vapeurs mesurées dans la chambre à flux, elle est déterminée par la relation suivante :

$$m_{caisson} = C \times V_{caisson} \times 10^{-3} \qquad \text{(Eq 2. 9)}$$

où $V_{caisson}$ (m^3) est le volume effectif de la chambre à flux qui est à 0,02144 m^3.

La précision indiquée par le constructeur est égale à 1 % de la valeur mesurée. La dérive du zéro au cours du temps est de 1 ppmv tous les 3 mois et la dérive de la mesure est estimée à ± 2,5 % tous les 3 mois. L'influence de la température est automatiquement prise en compte par l'appareil. Le seuil de détection donné par le fournisseur pour le TCE et le PCE est de 0,2 ppmv.

2.4.5.3. Analyse des échantillons de charbon actif

À la fin de la manipulation de mesure de flux, les charbons actifs ont été récupérés et les deux compartiments ont été extraits séparément dans de l'Hexane et analysés moyennant un appareil de chromatographie en phase gazeuse (GC FID). La partie B sert à vérifier s'il n'y avait pas de fuites provenant du la partie A. En effet, selon le constructeur, si la masse retenue dans la partie B représente plus du dixième de celle retenue dans la partie A, des pertes ont pu se produire.

Le protocole d'extraction et d'analyse retenu est le suivant :

- mise en contact du charbon actif du compartiment A avec un volume v de 3 ml de mélange d'hexane et du C_{12} dans un flacon de volume de 5 ml (pareil pour le compartiment B) ;

- agitation de l'ensemble pendant 3 minutes ;

- décantation pendant une durée minimale de 30 minutes ;

-prélèvement de 0,5 µl de l'échantillon au moyen d'une seringue après conditionnement de celle-ci ;

- analyse par chromatographie en phase gazeuse, en utilisant le **chromatographe en phase gazeuse CP 9001**;

- affichage de la concentration C (mg/l) de TCE absorbée sur le compartiment A du charbon actif à partir du chromatogramme.

La masse de vapeurs de TCE absorbée sur le compartiment A charbon actif est déterminée à partir de la relation suivante

$$m_{absorbée_A}(mg) = C \times v \qquad \text{(Eq 2. 10)}$$

Si la masse absorbée sur le compartiment B est non nulle, la masse absorbée sur le charbon actif devient égale à :

$$m_{absorbée} = m_{absorbée_A} + m_{absorbée_B} \qquad \text{(Eq 2. 11)}$$

2.4.5.4 Chromatographe

La chromatographie en phase gazeuse permet la séparation quantitative d'un

mélange de substances organiques. Le mélange à analyser est vaporisé à travers une flamme, puis il est guidé par un flux de gaz Chimiquement inerte (gaz vecteur : hélium) le long d'une phase stationnaire répartie uniformément en pellicule mince sur la paroi interne d'un solide inerte de grande surface spécifique (la colonne chromatographique : colonne capillaire dans notre cas).

Dans le cas de l'analyse de traces dissoutes de solvants, 3 composés pourront être distingués : l'hexane, le TCE, le n-dodécane C_{12} (étalon interne). Les composés du mélange interagissent avec les molécules de la phase stationnaire et sont plus ou moins retenus du fait de ces interactions de plusieurs types. Il en résulte une séparation sélective des composés du mélange en fonction de leur nature. Ils sortent de la colonne à différents temps appelés temps de rétention, spécifiques à chaque constituant du mélange (1 minute pour l'hexane, 2 pour le TCE et 5 pour le n-dodécane). La présence et la quantité de constituants élués sont enregistrées par un détecteur FID. Le logiciel d'exploitation **Maestro** pilotant l'appareil un chromatogramme (temps en abscisse et pico-ampères en ordonnées) où la sortie de chaque composé de la colonne apparaît sous forme d'un pic dont l'aire est proportionnelle à la quantité injectée.

Un système d'injection directe "on-column" est adopté. L'injection est réalisée à l'aide d'une microseringue de précision à travers un septum permettant de garantir une bonne étanchéité avec l'extérieur. Pour l'optimisation des analyses, le chromatographe en phase gazeuse CP 9001 de Chrompack est équipé d'une colonne capillaire **CP SIL 5 CB** pour la quantification des traces dissoutes de solvants chlorés et d'une colonne capillaire **CP WAX 57 CB** pour celle des traceurs alcools.

La présence d'un étalon interne dans l'échantillon injecté assure une grande fiabilité des mesures. En effet, la concentration de chaque constituant est déterminée par comparaison de son aire à celle correspondant à l'étalon. Celui-ci est injecté en concentration connue ; on peut donc établir une relation de proportionnalité entre l'aire observée et la concentration fixée. De ce fait, et dans le cas d'une fluctuation de réponse du détecteur ou d'une mauvaise injection, cette éventuelle variation affecte tous les constituants et les rapports de surface restent inchangés.

L'incertitude dans les mesures obtenues par la CPG dépend principalement de la précision de l'étalonnage effectué et de la qualité du prélèvement et de l'extraction. En effet, la précision du détecteur ainsi que la reproductibilité de l'appareil sont excellentes. La procédure d'étalonnage a montré une bonne répétitivité. Quant à l'incertitude sur le taux d'extraction, elle est estimée à +/- 3 %.

2.4.5.5 Détermination de flux expérimental

Le flux expérimental F_{exp} (g/m²s) est déterminé à partir de la masse de TCE adsorbée sur le charbon actif $m_{adsorbée}$ (g) et de la masse de TCE accumulée dans la chambre à flux $m_{caisson}$ (g) pendant la durée de pompage Δt (s), par la relation suivante :

$$F_{\exp} = \frac{(m_{caisson} + m_{adsorbée})}{A \times \Delta t} \qquad \text{(Eq 2. 12)}$$

où A est la surface effective du caisson (0.09 m²)

L'incertitude dans cette évaluation du flux par méthode expérimentale est estimée à 15% pour le TCE dans une gamme de flux inférieurs à 10 g/m².

2.4.6 Autres mesures effectuées pendant les expérimentations sur SCERES

La mesure de la température sous-sol a été effectuée à l'aide des sondes thermistance **107 Campbell Sc** couplées à la centrale d'acquisition, la tolérance de la thermistance est de ±0,18°C entre -25°C et +50°C. La mesure a été effectuée sur cinq profondeurs : 0,15m, 0,25m, 0,45m, 0,65m, 1,25m.

Les conditions météorologiques peuvent avoir une influence sur le transfert des vapeurs depuis la ZNS vers l'interface sol/air et dalle de béton/air. Pour cela une **station météorologique** a été installée sur SCERES, et couplée à une centrale d'acquisition pour mesurer les différents paramètres météorologiques à l'interface sol/air et à l'atmosphère comme la température, la pression atmosphérique et le vent. Les mesures de la température et l'humidité relative dans l'air ont été effectuées à l'aide du capteur **CS215 Campbell Sc.** qui est mis sous abri ventilé naturellement. Le gradient de températures est mesuré à l'aide d'une canne de 1,30m de longueur équipée de quatre points thermocouples type T. La pression atmosphérique est mesurée à l'aide du capteur **Young 61302L** avec port de pression barométrique et une précision de 20 Pa à 25°C. Trois anémomètres ont été utilisés pour déterminer la vitesse et la direction de vent sur SCERES. Le premier est l'anémomètre à **coupelles A100LK** de précision 1% ± 0,1m/s. Il permet seulement la mesure de la vitesse de vent. Les deux autres sont des **anémomètres soniques Gill 2D Windsonic** (Figure 2.) de précision ± 2%, qui permettent la détermination du champ de vitesses et la direction du vent.

Figure 2. 29: Mesures de vitesse et direction du vent sur SCERES

2.5 Etude des paramètres de la dalle de béton

Un béton vieilli, construit à partir d'une pâte de ciment et des granulats, est constitué principalement d'une matrice poreuse mais aussi des fissures traversantes ou pas. Dans le but de mieux quantifier le flux de vapeurs de TCE à travers nos dalles de béton artificiellement vieilli, une étude des paramètres des dalles a été effectuée après les expérimentations SCERES1 et SCRES2.

2.5.1 Perméabilité

Le constructeur des deux dalles de béton (CSTB) a donné une perméabilité de la dalle 1 égale à $2\ 10^{-14}$ m² et de la dalle 2 égale à 10^{-13} m². Ce qui signifie que la dalle1 est moins perméable que la dalle2. Or, en se basant sur nos résultats expérimentaux, nous avons constaté que la dalle 1 était plus perméable que la dalle 2. Pour mieux estimer le flux de vapeurs qui traverse la dalle de béton, nous avons mesuré la perméabilité des deux dalles à l'aide de trois méthodes différentes.

2.5.1.1 Perméamétre :

Le principe consiste à déterminer la perméabilité globale de la dalle de béton à

partir d'une expérience de convection appliquée dans la cloche.

a) Dispositif expérimental :

Le dispositif expérimental pour la mesure de perméabilité de la dalle est composé d'une cloche fermée et d'une dalle de béton (Figure 2. 30), l'étanchéité entre les deux est assurée par un joint en caoutchouc. La mesure de la pression et du débit est assurée respectivement par le capteur de pression Greisinger et un débitmètre numérique.

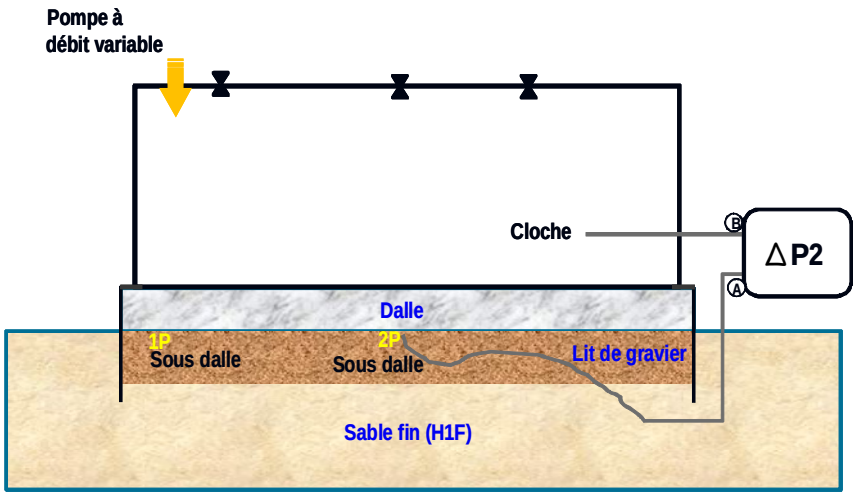


Figure 2. 30: Dispositif expérimental pour mesurer la perméabilité macroscopique de la dalle

b) Protocole de mesure

Le protocole consiste à appliquer plusieurs niveaux de débit d'air dans la cloche parfaitement fermée, et de mesurer pour chaque débit appliqué la perte de la charge ΔP_2 qu'il engendre dans la dalle de béton (Figure 2. 30).

À partir de la vitesse de Darcy (m.s^{-1}) :

$$v = \frac{k(\Delta P_2 - \rho g \Delta z)}{\mu e} \qquad \text{(Eq 2. 13)}$$

où k (m²) est la perméabilité intrinsèque de la dalle de béton, g (m.s^{-2}) est la constante gravitationnelle, μ (Pa.s) représente la viscosité dynamique, ρ (kg.m^{-3}) est la densité de l'air du sol propre, étant égale à 1.2 kg.m^{-3} et e (m) est l'épaisseur de la

dalle. Nous déterminons ainsi la perméabilité de la dalle (m²):

$$k = \frac{Q\, e\, \mu}{A(\Delta P_2 - \rho g \Delta z)} \qquad \text{(Eq 2. 14)}$$

avec Q ($m^3.s^{-1}$) le débit de l'air injecté dans la cloche et A (m²) la surface effective de la dalle.

2.5.1.2 Approche inverse

La deuxième méthode de quantification de la perméabilité de la dalle de béton est d'exploiter les résultats issus de l'expérience de mise en dépression dans la cloche. Son principe consiste à déterminer la perméabilité de la dalle à partir de flux massiques obtenus pendant la mise en dépression au régime permanent. En effet, en se basant sur l'équation de l'évolution de la concentration de vapeurs de TCE à l'extraction de la cloche (cf Eq 3. 38 dans le chapitre 3), et en prenant t = infini, nous obtenons la relation suivante :

$$C(t=\infty) = \frac{\dot{m}_{tot,z}}{Q} + C(t=0) \qquad \text{(Eq 2. 15)}$$

où C(t=0) ($kg.m^{-3}$) est la concentration des vapeurs mesurée dans la cloche avant la mise en dépression et C(t=∞) ($kg.m^{-3}$) est la concentration de vapeurs maximale mesurée dans la cloche au régime permanant. Le flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ ($mg.s^{-1}$) devient égal à :

$$\dot{m}_{tot,z} = \left(C(t=\infty) - C(t=0)\right) \times Q \qquad \text{(Eq 2. 16)}$$

D'autre part, le flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ est égal au débit de darcy Q_{Darcy} ($m^3.s^{-1}$) à travers la dalle multiplié par la concentration mesurée sous la dalle:

$$\dot{m}_{tot,z} = Q_{Darcy} \times C_{sous\,dalle} \qquad \text{(Eq 2. 17)}$$

Q_{Darcy} est obtenu à partir de la vitesse de Darcy (Eq 2. 13). La perméabilité de la dalle est égale au finale à :

$$k = \frac{\dot{m}_{tot,z} \times e}{C_{sous\,dalle} \times A \times \mu(\Delta P_2 - \rho g \Delta z)} \qquad \text{(Eq 2. 18)}$$

2.5.1.3 Dispositif TinyPerm

Le TinyPerm est un appareil portatif conçu pour caractériser la perméabilité locale des roches et des sols ainsi que les ouvertures effective des fissures apparentes. Utilisé depuis 1988 (David et al., 1988 ; Jensen et al., 1994 ; Huysmans et al.,2008), cet appareil utilise la loi de Darcy pour calculer la perméabilité locale.

Le principe de mesure de TinyPerm est le suivant :

En appuyant sur le piston (Figure 2. 31) contre l'échantillon de milieu poreux par l'intermédiaire d'un joint d'étanchéité, nous allons retirer de l'air de l'échantillon. Une fois que l'air est extrait de l'échantillon, une unité de microcontrôleur surveille simultanément le piston, le volume de vide et l'impulsion transitoire créée à la surface de l'échantillon. En utilisant des algorithmes de traitement de signal, le microcontrôleur calcule la fonction de réponse de l'échantillon. Les principales caractéristiques de cette réponse sont affichées sur son écran LCD. À partir de l'information affichée, nous déterminons la perméabilité à l'aide de la relation suivante :

$$T = -0.8206 \times \log_{10}(k) + 12.8737 \qquad \text{(Eq 2. 19)}$$

Où T est la valeur donnée par TinyPerm, k (darcy) est la perméabilité du milieu poreux. L'ouverture d'une fissure est déterminée à partir de l'équation suivante :

$$k = \frac{e^2}{12} \qquad \text{(Eq 2. 20)}$$

Où e (m) est l'épaisseur de l'ouverture d'une fissure.

Il existe une relation entre la fonction de réponse et la perméabilité. En effet, plus le temps de réponse est long moins l'échantillon est perméable.

Figure 2. 31: TinyPerm, appareil de mesure de perméabilité locale

2.5.2 Coefficient de la diffusion effective

Sans la connaissance de la teneur en gaz et de la porosité de nos dalles de béton, une quantification de coefficient de diffusion effectif s'avère compliquée. Afin de mieux quantifier le transfert de vapeurs à travers les deux dalles de bétons, nous avons eu recours à l'essai de traçage moyennant le dispositif cloche-dalle de béton pour déterminer expérimentalement le coefficient de diffusion effective D_{eg} de la dalle de béton 1 et 2. Pour ce faire, nous avons introduit trois récipients, déposés sur la dalle, à l'intérieur de la cloche, qui ensuite est restée complètement fermée durant les deux expérimentations (Figure 2. 32), contenant du TCE en phase liquide. Neuf ml de TCE en total ont été introduits en présence de la dalle 1 et 3 ml de TCE en présence de la dalle2. Nous avons mis aussi à l'intérieur de la cloche un petit ventilateur pour assurer l'homogénéisation de la concentration de vapeurs dans l'air intérieur de la cloche. Le suivi de l'évolution des concentrations de vapeurs de TCE a été assuré, durant les 5 semaines pour chacune des expérimentations, dans la cloche et au niveau des trois points de mesures de concentrations de vapeurs situés directement sous la dalle de béton (1C, 2C, 3C).

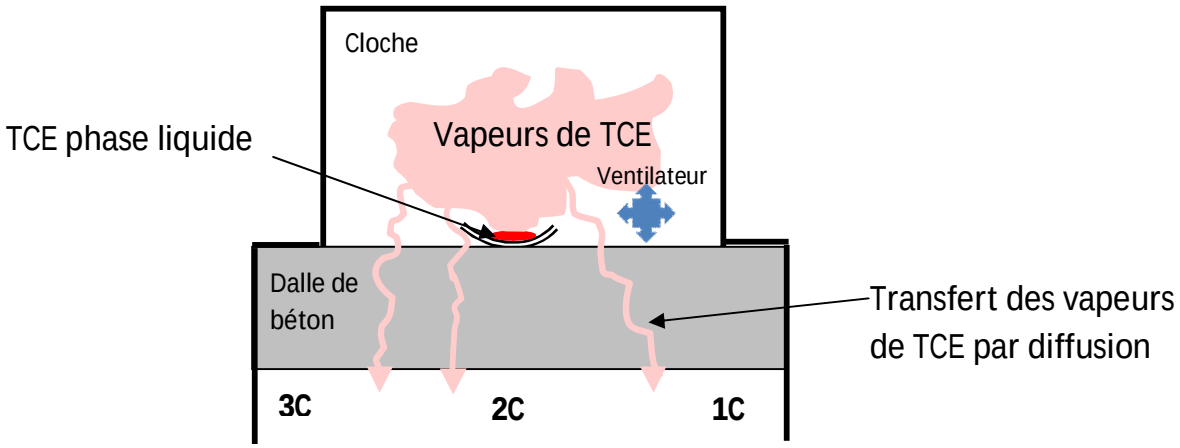


Figure 2. 32: Dispositif expérimental pour la quantification du coefficient de diffusion effective D_{eg} de la dalle de béton

Deux approches peuvent intervenir pour quantifier le coefficient de diffusion effective D_{eg} pour les deux dalles de béton à partir des résultats expérimentaux obtenus : i) l'approche « Cup method » et ii) la méthode par simulation numérique du transport diffusif moyennant le code monodimensionnel décrit dans le chapitre 3.

L'approche « Cup method » a été introduite par Haghighat et al., (2002) pour mesurer le coefficient de diffusion des COV à travers un béton. Son principe consiste à déterminer le coefficient de diffusion D_{eg} à partir du taux de perte de masse à l'état stationnaire en se basant sur la relation suivante :

$$D_{eg} = \frac{\dot{m} \times e}{A \times C} \qquad \text{(Eq 2. 21)}$$

Où $\dot{m}$ (mg.s^{-1}) est le flux de masse qui traverse la dalle, calculé à partir de la pente de la courbe de perte de masse dans la cloche, A (m²) est la surface effective de la dalle de béton (rayon effective=0.7m), e (m) est l'épaisseur de la dalle et C (mg.m^{-3}) est la concentration en TCE.

Cette approche s'applique seulement dans le cas de présence d'un seul polluant et non pas d'un mélange de COV. En plus, dans notre cas, le coefficient de diffusion effectif dépend du niveau de concentration, plus la concentration est élevée, plus D_{eg} est important, ce qui peut amener à la surestimation du coefficient de diffusion.

2.5.3. Porosité de la dalle de béton

Un autre paramètre intervenant dans le transfert des vapeurs de COV à travers la dalle est la porosité. Face à la méconnaissance de la porosité de nos dalles de béton, nous nous sommes basés sur la littérature pour déterminer une valeur moyenne de porosité d'une dalle de béton. Les études qui ont été menées pour quantifier ce paramètre, en utilisant certaines techniques telles que « la chambre jumelles » et « le two flow system » (Daoud et al., 1999 ; Meininghaus et al., 1998 ; Blondeau et al., 2003 ; Urosevic et al., 2003 ; Cavaleri, 2005), ont montré que la porosité d'un béton peut varier de 0,09 à 0,3 voire 0,35. Pour pouvoir conduire nos estimations de flux de vapeurs de TCE à travers nos deux dalles de béton, nous avons pris une valeur intermédiaire de porosité de l'ordre de 0,20 pour les deux dalles de béton. Une porosité de 0,185 d'un échantillon d'une dalle de béton semblable à notre dalle 1, qui a été exposé au TCE, a été déterminé par Musielak, (2012) (Partenaire : IMFT).

2.5.4. Tortuosité de la dalle de béton

Pour la tortuosité de nos dalles de béton nous avons utilisé la valeur communiquée par le partenaire du projet FLUXOBAT (IMFT : Musielak, 2012) de l'ordre de 0,06. Cette valeur a été donnée à partir des mesures de tortuosité d'un échantillon (de 15 cm de diamètre) d'une dalle de béton, semblable à la notre, par l'étude de diffusion avec des gaz neutre (appareil de mesures « two-bulb »).

À partir de la valeur de la tortuosité et la porosité donnée par les partenaires sur un échantillon d'une dalle de béton semblable à la dalle 1, nous obtenons un coefficient de la diffusion effective D_{eg} pour la dalle 1 de l'ordre de $1/25^{ème}$ du coefficient de diffusion effective du sable moyen. Cette valeur va être attribuée aussi à la dalle 2.

Afin de mieux estimer et quantifier les différents paramètres contribuant à l'évaluation de flux de vapeurs de TCE à la surface du sol, les résultats observés sur SCERES seront confrontés à des résultats calculés moyennant différents outils numériques.

Chapitre 3 : Approches de calcul et outils numériques

SOMMAIRE

3.1 Positionnement de notre étude 83
3.2 Solution semi –analytique du transport 1D convectif-diffusif-dispersif 84
3.3 SIMUSCOPP.....90
3.4 COMSOL.....96
3.5 Solution analytique d'un système type mélangeur.....99
3.6 Code numérique 1D 101

Dans ce chapitre, nous présentons les différentes approches de calcul et outils numériques servant d'une part à la comparaison avec les résultats expérimentaux obtenus sur SCERES et d'autre part à la quantification du panache de vapeurs dans le sous sol et l'évaluation de flux de vapeurs à la surface du sol.

3.1 Positionnement de notre étude

Avant de choisir nos méthodes de calculs, nous avons défini notre domaine d'étude pour les modélisations du transfert de vapeur de TCE en zone non saturée. Le tableau 3.1 permet de définir les processus de transport et d'écoulement à l'échelle microscopique et macroscopique en fonction du rapport entre le rayon de pore moyen λ_r et la longueur moyenne de parcours libre λ_f donnée par (Helmig, 1997) :

$$\lambda_f = \frac{kT}{\sqrt{2}\sigma p_g} \qquad \text{(Eq 3. 1)}$$

où p_g (Pa) est la pression de l'air, T (K) est la température absolue, σ (m^2) est la surface efficace totale de la collision et k est la constante de Boltzmann ($Pa.m^3.K^{-1}$).

Si le diamètre de pore est suffisamment large, le mouvement des molécules d'air dans les pores peut être considéré libre, sans contrainte imposée par les parois de pore. Ainsi, on peut considérer les pores comme un continuum où les deux processus de transport (la convection et la diffusion) peuvent se produire simultanément (Cas 1 voir Tableau 3.1). Dans le Cas 3, la collision des molécules d'air avec les parois des pores devient importante. Dans ce cas, le mouvement des molécules d'air est alors décrit par l'écoulement de Knudsen ; on ne peut plus différencier la diffusion et la convection des molécules. Le cas 2 correspond à un état intermédiaire.

Tableau 3. 1 : Description des processus de transport à l'échelle microscopique et macroscopique adapté de Helmig (1997)

	Processus de transport	Echelle microscopique	Echelle macroscopique
Cas 1 : $\lambda_f << \lambda_r$	Convection Diffusion (Fick)	Navier Stokes D	Darcy $D_{porous\ media}$
Cas 2 : zone de transition $\frac{\lambda_f}{\lambda_r} \approx 1$	Mélange de la diffusion de Fick et la diffusion de Knudsen Mélange de la convection et la diffusion	$\frac{1}{D_{eff}} = \frac{1}{D} + \frac{1}{D_{Knud}}$ Slipflow	$D_{eff\text{-}porous\ media}$ Effet de Klinkenberg Darcy équivalent
Cas 3 : $\lambda_f >> \lambda_r$	diffusion de Knudsen	D_{knud}	$D_{knud\text{-}porous\ media}$

Les sables sont généralement considérés comme appartenant au cas 1. En vertu des quantifications effectuées par Musielak (2012) relatives aux cas d'échantillons de béton sain, nos dalles de béton se situeraient à 75% des pores du béton sain dans le cas 2 ; seulement 25 % des pores sont beaucoup plus petits que la longueur moyenne de parcours libre. La description macroscopique de l'écoulement et du transport gazeux se basant sur loi de Fick et la loi de Darcy semble être justifiée.

3.2 Solution semi –analytique du transport 1D convectif-diffusif-dispersif

L'utilisation d'une approche semi-analytique était envisagée dans le but d'évaluer le flux de vapeur à la surface du sol en se basant sur des concentrations de vapeur et des pressions de l'air du sol mesurées sur SCERES, ou calculées à l'aide des

codes numériques.

Le modèle mathématique se base sur la loi de Fick et la loi de Darcy. En régime permanent, le flux total 1D vertical des vapeurs à la surface du sol $F_{tot,z}$ (kg.m^{-2}.s^{-1}) est égal à la somme du flux diffusif $F_{diff,z}$ (kg.m^{-2}.s^{-1}), flux dispersif $F_{disp,z}$ (kg.m^{-2}.s^{-1}) et le flux convectif $F_{adv,z}$ (kg.m^{-2}.s^{-1}):

$$F_{tot,z} = F_{diff,z} + F_{Disp,z} + F_{Adv,z} \qquad \text{(Eq 3. 2)}$$

3.2.1.1 Flux diffusif

$F_{diff,z}$ est exprimé par la première loi de Fick et décrit le flux de diffusion des vapeurs suivant la verticale z par unité de surface $F_{diff,z}$ (kg.m^{-2}.s^{-1}) :

$$F_{diff,z} = -D_{eg} \frac{\partial C_a}{\partial z} \qquad \text{(Eq 3. 3)}$$

où C_a (kg.m^{-3}) est la concentration de vapeurs à une profondeur donnée. D_{eg} (m^2.s^{-1}) désigne le coefficient effectif de la diffusion.

La dérivée spatiale de C dans l'équation Eq 3. 3 est remplacée par une formulation en différences finies :

$$F_{diff,z} = -\tilde{D}_{eg} \frac{\Delta C_a}{\Delta \bar{z}} \qquad \text{(Eq 3. 4)}$$

La relation de D_{eg} est obtenue à partir de l'équation suivante (Grathwohl 1998; Wang et al. 2003):

$$D_{eg} = \theta_g \tau D_g \qquad \text{(Eq 3. 5)}$$

où τ (-) représente la tortuosité des milieux poreux. D_g (m^2.s^{-1}) est le coefficient de la diffusion à l'air libre. θ_g(-) est la teneur en gaz dans le milieu poreux.

Afin de se rapprocher du flux de vapeurs à la surface du SCERES et à la surface de la dalle de béton et compte tenu de l'importance de la diffusion dans le transfert de ces flux vers l'extérieur du bassin, une quantification de coefficient de diffusion effective est nécessaire. En vertu de l'équation Eq 3. 5 le coefficient de diffusion effective D_{eg} dépend de la teneur en gaz du bassin θ_g, du coefficient de la diffusion à

l'air libre D_g et de la tortuosité τ.

a) Teneur en gaz

La teneur en gaz est déterminée à partir des mesures de la teneur en eau dans le bassin (θ_g=1- θ_w).

b) Coefficient de diffusion à l'air libre

Le coefficient de diffusion à l'air libre D_g ($cm^2.s^{-1}$), se quantifie à partir de l'équation suivante (cf. Grathwohl, 1998):

$$D_g = \frac{10^{-3} T^{1.75} \sqrt{(1/M_{air} + 1/M_{TCE}}}{P(V_{air}^{1/3} + V_{TCE}^{1/3})^2} \qquad \text{(Eq 3. 6)}$$

D_g dépend de la masse et du volume molaire de l'air (M_{air} = 28.7 $g.mol^{-1}$ et V_{air}= 20.1 $cm^3.mol^{-1}$), de la masse et du volume molaire du TCE (M_{TCE} = 131.7 $g.mol^{-1}$ et V_{TCE}= 93.5 $cm^3.mol^{-1}$), de la température T (K) et de la pression ambiante P (Pa).

Pour une température de 15°C et une pression atmosphérique, le coefficient de diffusion à l'air libre D_g du TCE est égal à 7.8 10^{-6} $m^2.s^{-1}$.

c) Tortuosité

En ce qui concerne la tortuosité du milieu poreux τ, elle est définie comme étant le carré du rapport de la longueur de la ligne droite d'un tube tortueux l (m) et la longueur réelle L (m).

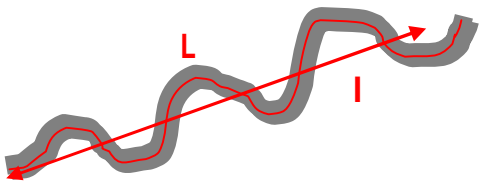


Figure 3. 1 : Tube tortueux

$$\tau = \left(\frac{l}{L}\right)^2 \prec 1 \qquad \text{(Eq 3. 7)}$$

Grathwohl (1998) a défini le facteur de tortuosité comme l'inverse de la tortuosité. Il existe plusieurs modèles de tortuosité dans la littérature. Les modèles

les plus utilisés sont listés dans le Tableau 3. 2.

Tableau 3. 2 : Différentes relations empiriques de tortuosité

Modèles	Relation pour la tortuosité
Penman (1940)	$\tau = 0,66$
Millington (1959)	$\tau = \theta_g{}^{1/3}$
Marshall (1959)	$\tau = \theta_g{}^{1/2}$
Curie (1960)	$\tau = \frac{\theta_g}{\varepsilon^{5/2}}$
Millington et Quirk (1961)	$\tau = \frac{\theta_g{}^{7/3}}{\varepsilon^2}$
Penman Millington Quirk (Moldrup et al., 1997)	$\tau = 0,66\frac{\theta_g}{\varepsilon}$

Le modèle retenu dans notre étude est celui de Millington et Quirk (1961). Ce modèle, couramment utilisé (Falta et al., 1989 ; Jury et al., 1990 ; Mendoza et Frind, 1990 ; Batterman et al., 1995 ; Conant et al., 1996 ; Sleep, 1989 et 1998 ; Bohy et al., 2006), donne des tortuosités qui se situent à l'intermédiaire par rapport aux autres modèles ce qui est présenté dans la Figure 3. 2 pour une porosité égale 0,4.

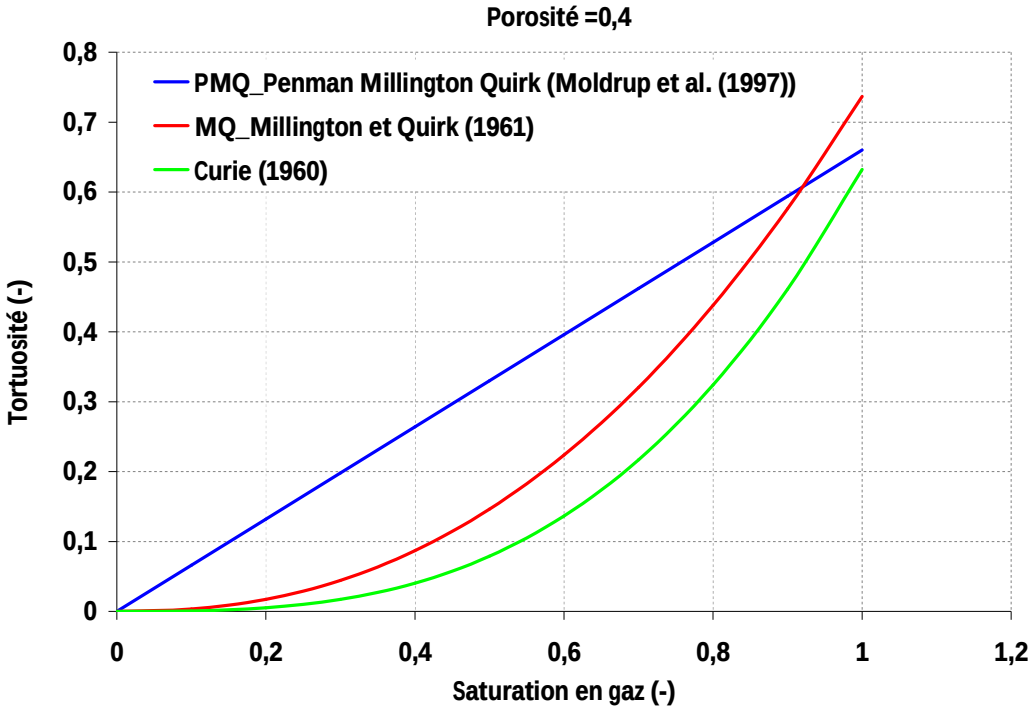


Figure 3. 2 : Comparaison entre les modèles de tortuosité : Penman Millington Quirk, Millington Quirk et Curie

3.2.1.2 Flux convectif

Le flux convectif dans la direction z est donnée par :

$$F_{adv,z} = v_{f,z} C_a \quad . \qquad \text{(Eq 3. 8)}$$

où $V_{f,z}$ ($m.s^{-1}$) représente la vitesse de pore suivant la direction verticale z. Elle est donnée par la loi de Darcy :

$$v_{f,z} = -\frac{k\rho g}{\mu_a}\frac{\partial h}{\partial z} \qquad \text{(Eq 3. 9)}$$

où h (m) est la charge pneumatique. En appliquant l'expression de la charge pneumatique équivalente introduite par Lusczynski (1960), h (m) peut être exprimé comme suit:

$$h \equiv \frac{p_g}{\rho_{air} g} = \frac{p_a}{\rho_{air} g} + z \qquad \text{(Eq 3. 10)}$$

La vitesse de Darcy suivant la direction z peut ainsi être exprimée par :

$$v_{f,z} = \frac{-k_{ra} k^* \rho_{air} g}{\mu_a} \left(\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\rho_a - \rho_{air}}{\rho_{air}} \right) \quad \text{(Eq 3. 11)}$$

où p_g (Pa) est la pression motrice, p_a (Pa) est la pression du mélange de gaz (air du sol/vapeurs de TCE) à une cote z, g ($m.s^{-2}$) est la constante gravitationnelle, μ_a (Pa.s) représente la viscosité dynamique, k_{ra} (-) représente la perméabilité relative de l'air dans un système diphasique eau/air, ρ_{air} ($kg.m^{-3}$) est la densité de l'air du sol propre étant égale à 1,2 kg/m^3, et ρ_a ($kg.m^{-3}$) est la densité du mélange du gaz (air du sol/vapeurs de TCE)

La masse volumique du mélange gazeux est donnée par :

$$\rho_a = C_a \left(1 - \frac{M_{air}}{M_{DNAPL}} \right) + \rho_{air} \quad \text{(Eq 3. 12)}$$

M_{air} ($g.mol^{-1}$) est la masse molaire de l'air du sol étant égale à 28,9 $g.mol^{-1}$, M_{TCE} ($g.mol^{-1}$) la masse molaire de TCE qui est égale à 131,39 $g.mol^{-1}$.

3.2.1.3 Flux dispersif

En utilisant une approche analogue à la loi de Fick pour exprimer le flux dispersif $F_{disp,z}$ ($kg.m^{-3}$), il s'exprime par :

$$F_{adv,z} = -\alpha_L \left| v_{f,z} \right| \frac{\partial C_a}{\partial z} \quad \text{(Eq 3. 13)}$$

où α_L (m) est la dispersivité longitudinale du milieu poreux.

Le flux de vapeur total peut donc être quantifié par :

$$F_{tot,z} = \left\{ -D_{eg} - \alpha_L \left| \left(-\frac{k_{ra} k^* \rho_{air} g}{\mu_a} \left[\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\rho_a - \rho_{air}}{\rho_{air}} \right] \right) \right| \right\} \frac{\partial C_a}{\partial z} + \left(-\frac{k_{ra} k^* \rho_{air} g}{\mu_a} \left[\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\rho_a - \rho_{air}}{\rho_{air}} \right] \right) C_a$$

(Eq 3. 14)

Les dérivées spatiales de C_a et h sont remplacées par une formulation en différences finies, l'approche semi-analytique qui présente le flux de vapeurs vertical à la surface du sol est obtenue comme suit:

$$F_{tot,z} = \left\{ -\tilde{D}_{eg} - \tilde{\alpha}_L \left| \left(-\frac{\tilde{k}_{ra}\tilde{k}^*\rho_{air}g}{\mu_a}\left[\frac{\Delta h}{\Delta \bar{z}} + \frac{\tilde{\rho}_a - \rho_{air}}{\rho_{air}}\right]\right)\right| \right\} \frac{\Delta C_a}{\Delta \bar{z}} + \left(-\frac{\tilde{k}_{ra}\tilde{k}^*\rho_{air}g}{\mu_a}\left[\frac{\Delta h}{\Delta \bar{z}} + \frac{\tilde{\rho}_a - \rho_{air}}{\rho_{air}}\right]\right)\tilde{C}_a$$

(Eq 3. 15)

où $\tilde{C}_a$, $\tilde{k}^*$, $\tilde{k}_{ra}$, $\tilde{D}_{eg}$, ρ_{air}, $\tilde{\rho}_a$ et $\tilde{\alpha}_L$ représentent des moyennes arithmétiques entre les deux points de mesure séparés par $\Delta\bar{z}$ (m) et placés sur la même verticale.

Les paramètres C_a, p_a, S_w, et θ_g, τ, k_{ra}, h sont obtenus directement et évalués à partir les mesures sur SCERES ou à partir des résultats numériques (SIMUSCOPP, code numérique 1D).

3.3 SIMUSCOPP

Nous avons choisi SIMUSCOPP pour étudier le panache de vapeurs dans la zone non saturée et évaluer les concentrations et les pressions de vapeurs de TCE dans le milieu poreux.

3.3.1 Description du code de calcul SIMUSCOPP

Le code de calcul SIMUSCOPP (SIMUlation des Sites Contaminés par des Produits Pétroliers) est un modèle numérique qui permet la simulation du transport multi-composant d'un système multiphasique en milieu poreux saturé et non saturé avec ou sans transfert de masse entre phases en condition isotherme à l'équilibre thermodynamique. Ce modèle, co-développé par l'IFP, BURGEAP et ENI est considéré comme un outil d'aide à la décision en ce qui concerne l'analyse et l'évaluation des risques.

Le modèle prend en compte trois phases fluides : une phases aqueuse (w), une phase gazeuse (g) et la phase organique ou huile (o).

Les mécanismes de transport intégrés dans SIMUSCOPP sont la convection, la dispersion, la diffusion et la biodégradation. Les équations dans ce code de calcul sont basées sur le principe de conservation de masse dans le volume élémentaire représentatif VER et sur l'hypothèse de la validité de l'équation de Darcy généralisée.

Dans le cas d'écoulement multiphasique, la loi de Darcy peut être écrite sous la forme suivante:

$$U_\phi = -\frac{\overline{\overline{k}} k_{r\phi}}{\mu_\phi}(\overrightarrow{grad}\, p_\phi - \rho_\phi g) \qquad \text{(Eq 3. 16)}$$

où $\overline{\overline{k}}$ (m^2) est le tenseur de perméabilité intrinsèque, $k_{r\phi}$ (-) est la perméabilité relative pour la phaseϕ, μ_ϕ ($kg.m^{-1}.s^{-1}$) est la viscosité dynamique, p_ϕ ($kg.s^{-2}.m^{-1}$) est la pression moyenne de la phaseϕ, g ($m.s^{-2}$) est le vecteur de l'accélération gravitationnelle.

L'équation de conservation de la masse qui décrit le transport de polluant en système multiphasique dans un volume élémentaire VER pour un constituant β dans la phase ϕ est donnée par la relation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho_\phi \varepsilon_\phi \omega_{\phi\beta}\right] + div\left[\rho_\phi \varepsilon_\phi \omega_{\phi\beta} U_\phi\right] - div\left[\rho_\phi \varepsilon_\phi \overline{\overline{D}}_{\phi\beta}\, \overrightarrow{grad}\, \omega_{\phi\beta}\right] - Q_{\phi\beta} - R_{\phi\beta} = 0 \qquad \text{(Eq 3. 17)}$$

où ε_ϕ est la fraction volumique d'espace poral occupée par la phase ϕ, $\omega_{\phi\beta}$ est la fraction massique du constituant β dans la phaseϕ, ρ_ϕ ($kg.m^{-3}$) est la masse volumique de la phase ϕ, U_ϕ ($m.s^{-1}$) est la vitesse moyenne intrinsèque de la phase ϕ, $\overline{\overline{D}}_{\phi\beta}$ est le tenseur de dispersion, $Q_{\phi\beta}$ ($kg.m^3.s^{-1}$) représente le terme puits/source du constituant β et $R_{\phi\beta}$ ($kg.m^3.s^{-1}$) est le terme de réaction biochimique du constituant β dans la phase ϕ.

L'équation Eq 3. 17 est soumise aux contraintes suivantes :

La somme des fractions massiques des constituants β dans la phase ϕ est égale à 1 :

$$\sum_\beta \omega_{\phi\beta} = 1 \qquad \text{(Eq 3. 18)}$$

L a somme des saturations des phases est égale à 1 :

$$\sum_\phi S_\phi = 1 \quad \text{avec} \quad S_\phi = \frac{\varepsilon_\phi}{n} \qquad \text{(Eq 3. 19)}$$

où S_ϕ (-) est le degré de saturation de la phase et *n* (-) correspond à la porosité du milieu.

3.3.2 Relations constitutives

Les relations constitutives (pressions capillaires, perméabilité relatives) complètent le système d'équations ; elles décrivent les interactions des phases fluides à l'échelle du VER. Plusieurs approches ont été proposées pour décrire ces relations constitutives, entre autre l'approche de Mualem-Van Genuchten. Nous allons nous baser sur cette approche pour définir les relations pc-S-Kr. Les courbes pc=(S) qui relient la saturation à la pression capillaire sont déterminées pour les trois interfaces des phases : gaz/eau, huile/eau et gaz/huile. Quant à celles qui représentent la perméabilité relative en fonction de la saturation *Kr=(S*), elles sont nécessaires uniquement pour les systèmes gaz/huile et eau/huile.

La pression capillaire est définie de la manière suivante:

$p_g - p_w = pc_{gw}(S_{we})$ pour un système eau/gaz (Eq 3. 20)

Où p_g ($kg.s^{-2}.s^{-1}$) est la pression de gaz, p_w ($kg.s^{-2}.s^{-1}$) est la pression de l'eau, pc_{gw} ($kg.s^{-2}.s^{-1}$) est la pression capillaire entre l'air et l'eau (fluides non mouillant (air) et fluides mouillant (eau)), elle est une fonction de la saturation effective en eau S_{we}(-). S_{we} est donnée par la relation suivante :

$$S_{we} = \frac{S_w - S_{wi}}{S_m - S_{wi}} \quad \text{(Eq 3. 21)}$$

où S_{wi} (-) est la saturation irréductible en eau, S_w (-) est la saturation en eau et S_m (-) est la saturation maximale en eau.

Dans le cas d'un système diphasique eau-air, la relation qui relie la pression capillaire à la saturation effective en eau est la suivante :

$$p_{cgw} = \frac{1}{\alpha}\left[(S_{we})^{-\frac{1}{m}} - 1 \right]^{1-m} \quad \text{où } m = 1 - \frac{1}{n} \quad \text{(Eq 3. 22)}$$

Avec α (Pa^{-1}) et n(-) sont les paramètres de Van-Genuchten, m (-) est un paramètre qui détermine la courbure de la fonction p_{cgw} - S_{we} et α contrôle l'élévation de la courbe de la pression capillaire.

Pour les systèmes diphasiques huile/eau et gaz/huile, les pressions capillaires sont calculées en fonction de la pression capillaire eau/gaz. Parker et al (1987) a

établit les relations de la perméabilité relative et les pressions capillaires comme suit :

$$p_{cow}(S_{we}) = \frac{1}{\beta_{ow}} p_{cgw}(S_{we}) \quad \text{système eau/huile} \qquad \text{(Eq 3. 23)}$$

$$p_{cgo}(S_{we}) = \frac{1}{\beta_{go}} p_{cgw}(S_{we}) \quad \text{système gaz/huile} \qquad \text{(Eq 3. 24)}$$

$\beta_{ow} = \sigma_{gw}{}^{0} / \sigma_{ow}$ et $\beta_{go} = \sigma_{gw}{}^{0} / \sigma_{go}$ sont les facteurs de similitude pour les systèmes fluides huile/eau et gaz/huile, $\sigma_{gw}{}^{0}$, σ_{ow} et σ_{go} sont les tensions interfaciales gaz/eau, huile/eau et gaz/huile.

En ce qui concerne la perméabilité relative Kr, Van-Genuchten a proposé de coupler son approche de capillarité au modèle de Mualem (Mualem, 1976) pour obtenir enfin une formule de la perméabilité relative à l'eau en fonction de la saturation effective en eau (l'approche de Mualem Van-Genuchten). Pour le système diphasique eau/huile, les perméabilités relatives s'écrivent ainsi :

$$K_{rw} = S_{we}{}^{1/2}\left[1 - \left(1 - S_{we}{}^{1/m}\right)^{m}\right]^{2} \qquad \text{(Eq 3. 25)}$$

$$K_{row} = \left(1 - S_{we}\right)^{1/2}\left[1 - S_{we}{}^{1/m}\right]^{2m} \qquad \text{(Eq 3. 26)}$$

où K_{rw} [-] est la perméabilité relative de l'eau et K_{row} [-] est la perméabilité relative de la phase huile en système diphasique huile/eau.

Et pour le système diphasique air/huile, les perméabilités relatives sont régies par les équations suivantes:

$$K_{rg} = \left(1 - S_t\right)^{1/2}\left(1 - S_t{}^{(1/m)}\right)^{2m} \qquad \text{(Eq 3. 27)}$$

$$K_{rog} = S_t{}^{1/2}\left(1 - \left(1 - S_t{}^{1/m}\right)^{m}\right)^{2} \qquad \text{(Eq 3. 28)}$$

où K_{rg} [-] est la perméabilité relative de la phase gazeuse et K_{rog} [-] est la perméabilité relative de la phase huile en système diphasique huile/air.

avec S_t [-] la saturation effective en huile et qui est définie par:

$$S_t = \frac{S_o - S_{orw}}{1 - S_{orw}} \qquad \text{(Eq 3. 29)}$$

S_o [-] étant la saturation de la phase huile et S_{orw} [-] la saturation résiduelle de la phase huile en système diphasique huile/eau.

Les perméabilités relatives de l'air et de l'eau ont été déterminées à partir de chaque système diphasique présenté ci-dessus. Comme la perméabilité relative de l'huile est une combinaison de celle des deux systèmes, le code de calcul SIMUSCOPP offre trois possibilités pour la calculer : une méthode géométrique, un premier modèle de STONE (Stone 1970) et un second modèle de STONE (Stone, 1973).

Dans notre étude, la méthode géométrique ci-dessous a été utilisée :

$$K_{ro}(S_w, S_g) = K_{row} + (K_{rog} - K_{row})\frac{S_g}{\overline{S_g}} \qquad \text{(Eq 3. 30)}$$

où K_{ro} [-] est la perméabilité relative de la phase huile en système triphasique (air, huile, eau); S_g [-] est la saturation de la phase gazeuse et $\overline{S_g}$ [-] est la saturation effective de la phase gazeuse.

avec

$$\overline{S_g} = S_g + (S_w - S_{wr})\frac{1 - S_{wr} - S_{org}}{1 - S_{wr} - S_{orw}} \qquad \text{(Eq 3. 31)}$$

où S_{org} [-] est la saturation résiduelle en huile en système diphasique air/huile.

3.3.3 Discrétisation spatiale utilisée

Le maillage dans SIMUSCOPP peut être régulier ou irrégulier, dans un repère cartésien ou cylindrique, dans une, deux ou trois dimensions, avec possibilité d'introduire un sous maillage dans le maillage principale afin d'affiner la résolution.

Pour notre étude, nous avons choisi la discrétisation suivante :

Nous supposons que le domaine est symétrique par rapport à y, l'axe de milieu est le point 0 de y. Pour cela nous avons choisi de modéliser la moitié du bassin SCERES et la moitié de la dalle de béton tout en respectant la surface réelle de cette dernière. Nous avons choisi pour cela un maillage cartésien tridimensionnel qui est

composé d'un maillage principal et de trois sous-maillages pour affiner la zone des blocs et de la zone source de TCE afin de réduire la diffusion numérique et avoir des résultats plus précis (Figure 3. 4)

Le maillage horizontal de base (noir) est composé de 150 mailles de dimensions 1 m $\times$ 1 m, le deuxième (bleu) est formé de 264 mailles de 0,5 m $\times$ 0,5 m, le troisième (orange) de 476 mailles de 0,25 m $\times$ 0,25 m et le quatrième (vert) de 48 mailles de 0,125 m $\times$ 0,125 m.

Le maillage de base comporte 32 couches suivant z dont 6 couches pour modéliser l'atmosphère. La première, en bas du bassin, a une épaisseur de 0.5 m et représente la couche drainante. Le reste du bassin est discrétisé en 25 couches de 0.1 m d'épaisseur (Figure 3. 4). Les 6 couches supérieures qui représentent l'atmosphère ont une épaisseur respectivement du bas vers le haut de 0,1 m, 0,3 m, 0,5 m, 1 m, 10 m et 100 m. Leur rôle est de favoriser le drainage et l'évacuation des vapeurs vers l'atmosphère (14).

La discrétisation verticale des trois sous-maillages est la même que celle adoptée pour le maillage de base. Le modèle ainsi utilisé est composé de 24736 mailles y compris la couche atmosphérique.

Le choix de représenter la dalle de béton sous forme rectangulaire, dans la réalité cylindrique, était relié à la forme du maillage quadratique du SCERES. Une autre difficulté causée par le maillage est celle de la représentation de la jupette (en noire dans la Figure 3. 3). Cette dernière mesure dans la réalité moins de 1 cm de largeur, ce qui est loin d'être représenté par notre maillage de 25 cm de largeur. Vu le nombre total de mailles de SCERES, un quatrième sous maillage au niveau de la jupette était difficilement réalisable ce qui peut certainement influencer les résultats au niveau de la dalle de béton.

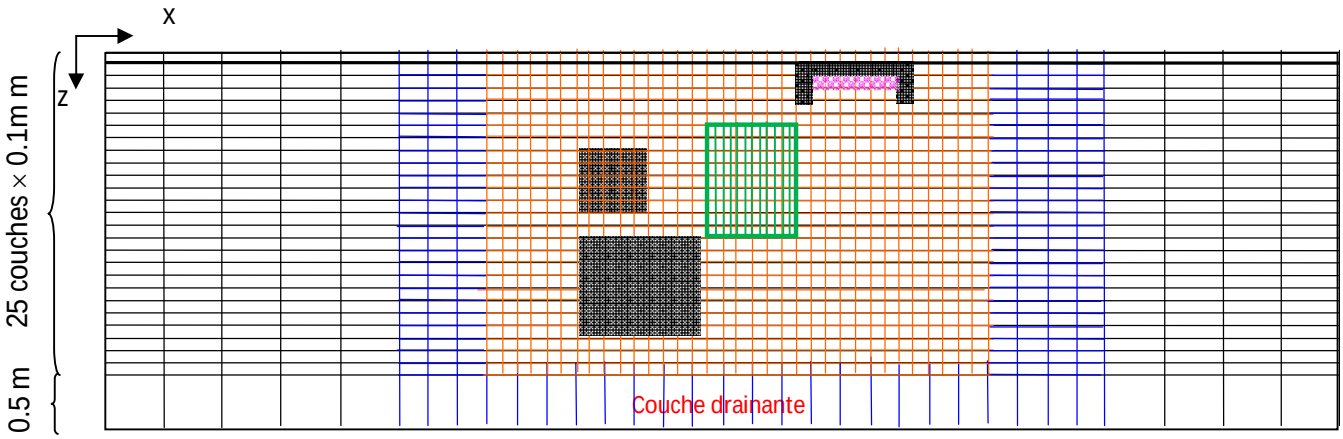


Figure 3. 3 : Discrétisation spatiale suivant le plan vertical (x, z)

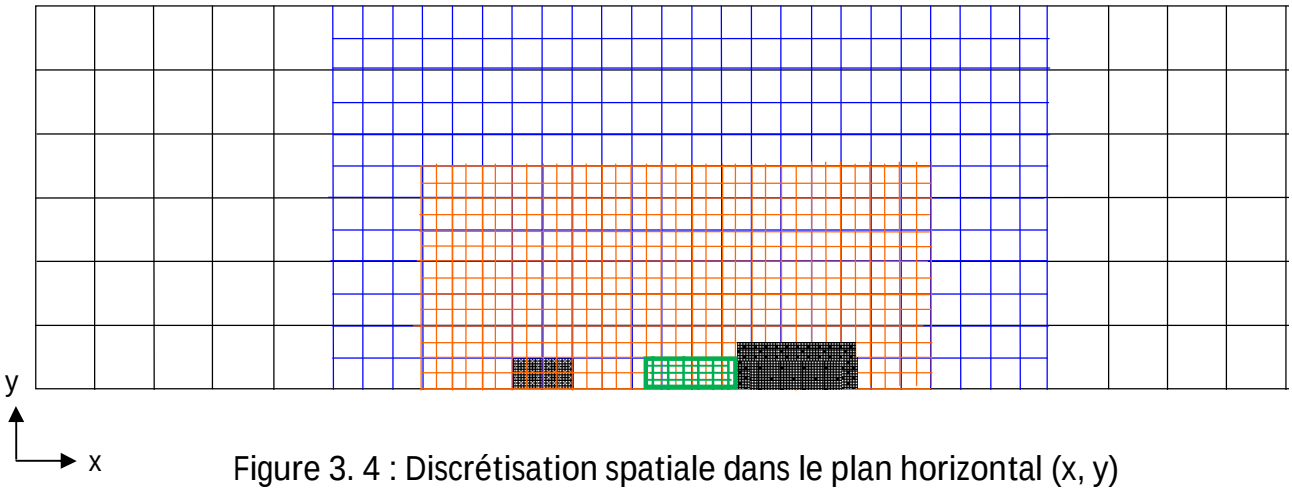


Figure 3. 4 : Discrétisation spatiale dans le plan horizontal (x, y)

3.4 COMSOL

Nous avons choisi COMSOL pour étudier la mise en dépression dans la cloche et son effet sur le milieu poreux et pour évaluer le flux de vapeurs de TCE qui traverse la dalle de béton pendant la mise en dépression de la cloche.

3.4.1 Description du COMSOL

Comsol est un outil de simulation multiphysique en trois dimensions permettant de résoudre, de façon couplée, des équations aux dérivées partielles par la méthode des éléments finis. Il dispose d'une base de données d'équations permettant de modéliser différents phénomènes physiques comme électromagnétisme, l'électronique, l'écoulement de fluides ou encore la déformation des matériaux. Le module utilisé dans notre étude est celui des sciences de la terre dans lequel nous avons choisi l'équation de l'écoulement libre et milieu poreux (**fp**) pour l'écoulement et l'équation de la convection et diffusion (**chds**) pour le transport dans le milieu poreux.

Les étapes de la modélisation sont comme suit :

- définition de la géométrie,

- choix des équations et des propriétés physiques des différents matériaux,

- détermination des conditions aux limites et de l'état initial,

- maillage du domaine,

- résolution du problème par le solveur et post-traitements.

3.4.2 Équations utilisées pour la modélisation du problème

3.4.2.1 Équation de l'écoulement de l'air du sol (module **fp**)

L'équation de l'écoulement est définie par COMSOL comme l'équation de l'écoulement libre et milieu poreux **(fp).** C'est une combinaison de l'interface équation de Navier-Stokes et l'interface **équation de Brinkman**. Elle fournit les équations, conditions aux limites et les forces de volume pour modéliser à la fois un écoulement libre et un écoulement dans les milieux poreux.

En se basant sur l'équation de Brinkman qui décrit le déplacement des fluides dans les milieux poreux à l'aide de la vitesse du fluide, la pression et la densité de la substance, l'équation **fp** est formée par deux équations qui gouvernent l'écoulement dans les milieux poreux, l'équation de continuité (Eq 3. 32) et l'équation de la quantité de mouvement (Eq 3. 33). En considérant que le fluide est incompressible

($\rho = cst$), les équations de **fp** deviennent égales à :

$$\rho \nabla .(u) = Q \qquad \text{(Eq 3. 32)}$$

$$\frac{\rho}{\varepsilon}\left[\frac{\partial u}{\partial t} + (u.\nabla)\frac{u}{\varepsilon}\right] = \nabla .\left[-pI + \frac{\mu}{\varepsilon}(\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2\mu}{3\varepsilon}(\nabla .u)I\right] - \left[\frac{\mu}{K} + \beta|u| + Q\right]u + F \qquad \text{(Eq 3. 33)}$$

μ désigne la viscosité dynamique des fluides ($kg.(m.s)^{-1}$), u est le vecteur vitesse ($m.s^{-1}$), ρ est la densité du fluide ($kg.m^{-3}$), p est la pression (Pa), ε est la porosité du milieu poreux, K est la perméabilité du milieu poreux (m^2), et Q est une source de masse ($kg.m^{-3}.s^{-1}$). L'influence de la gravité et les forces de volume sont représentées par l'intermédiaire du terme de force F ($kg.(m^{-2}s^{-2})$).

3.4.2.2 Equation de transport (**chds**)

COMSOL définit les équations de transport par l'équation de transport des espèces diluées (**chds**), elle est définie par le bilan de masse suivant :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u\nabla c = \nabla(D\nabla c) + R \qquad \text{(Eq 3. 34)}$$

Avec c ($mol.m^{-3}$) est la concentration du polluant, D ($m^2.s^{-1}$) désigne le coefficient de la diffusion effective, R ($mol.m^{-3}.s^{-1}$) est la vitesse de réaction du polluant et u ($m.s^{-1}$) est le vecteur vitesse.

Le premier terme du côté gauche de l'Eq 3.34 correspond à l'accumulation du polluant. Le second terme désigne le transport convectif dû au champ de vitesse u. Ce champ est obtenu à partir de l'interface de couplage physique à l'équation **fp** qui décrit l'écoulement du fluide.

Dans le côté droit de l'équation du bilan de masse, le premier terme désigne le transport par diffusion et le terme R représente le terme source/puits, généralement du à une réaction chimique.

3.5 Solution analytique d'un système type mélangeur

La mise en dépression dans la cloche est schématisée par la Figure 3. 5. Le flux de vapeurs de TCE extrait depuis le volume de la cloche V (Q×C(t)) entraîne une entrée de l'air propre depuis l'extérieur (flux nul) et une entrée d'un flux massique provenant de la dalle de béton $\dot{m}_{tot,z}$ (mg.s^{-1}). La concentration de vapeurs de TCE à la sortie de la cloche, provenant principalement du sous dalle, évolue en fonction du temps jusqu'à atteindre le régime stationnaire.

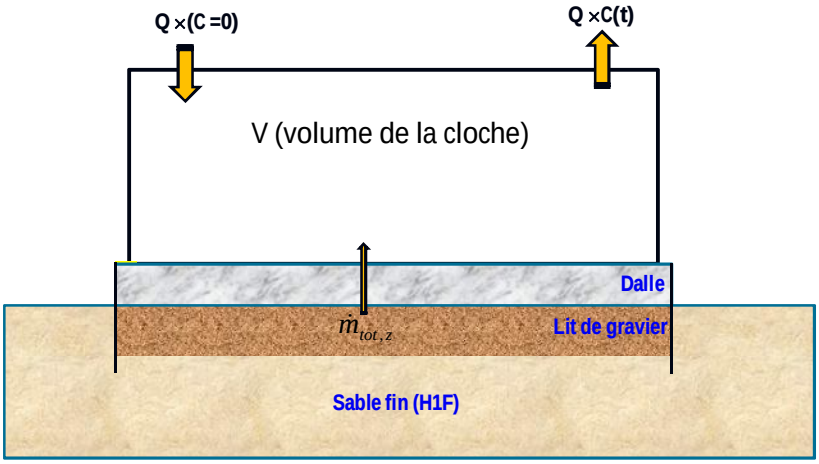


Figure 3. 5 : Flux de masse dans un système de type mélangeur (dalle/cloche)

Pour exprimer l'évolution des concentrations de vapeurs pendant la mise en dépression à l'extraction de la cloche nous avons utilisé l'équation différentielle

$$\frac{dC}{dt} + \frac{Q}{V}t - \frac{\dot{m}}{V} = 0 \qquad \text{(Eq 3. 35)}$$

Où C (mg.m^{-3}) est la concentration des vapeurs à l'extraction de la cloche, Q (m^3.s^{-1}) est le débit d'extraction du volume V (m^3) de la cloche en fonction du temps t (s).

Pour un flux massique constant à travers la dalle en fonction du temps $\dot{m}_{tot,z} \neq f(t)$, la solution de l'Eq 3.35 (avec Q/V est constant en fonction du temps) s'écrit de la façon suivante:

$$C = e^{-\frac{Q}{V}t}\left[C' + \frac{\dot{m}}{V}\int e^{\frac{Q}{V}t}dt\right] \qquad \text{(Eq 3. 36)}$$

En tenant compte des conditions initiales, $C(t=0)=C_0$, la constante C' se détermine telle que :

$$C' = C_0 - \frac{\dot{m}}{Q} \qquad \text{(Eq 3. 37)}$$

La solution pour la concentration de vapeur au niveau de l'extraction s'exprime alors de la façon suivante :

$$C(t) = \frac{\dot{m}}{Q}\left(1 - e^{-\frac{Q}{V}t}\right) + C_0 e^{-\frac{Q}{V}t} \qquad \text{(Eq 3. 38)}$$

Si $\dot{m}_{tot,z}$ évolue en fonction de temps ($\dot{m} = f(t)$), $\dot{m}_{tot,z}$ sera décrit, par exemple, par une fonction de distribution de type gaussien :

$$\dot{m}(t) = \frac{\dot{m}_0}{2}\left[1 + erf\left(\frac{t-\bar{t}}{\sqrt{2}\sigma}\right)\right] \qquad \text{(Eq 3. 39)}$$

La concentration de vapeurs C à l'extraction de la cloche peut alors s'écrire de la façon suivante :

$$\mathrm{C(t)} = e^{-\frac{Q}{V}t}\left[C_1 + \frac{\dot{m}_0}{2}\int e^{\frac{Q}{V}t}dt + \frac{\dot{m}_0}{2}\int erf\left(\frac{t-\bar{t}}{\sqrt{2}\sigma}\right)e^{\frac{Q}{V}t}dt\right] \qquad \text{(Eq 3. 40)}$$

3.6 Code numérique 1D

Dans le but d'étudier le flux vertical des vapeurs (suivant la direction verticale z) dans la zone non saturée d'un aquifère poreux et d'évaluer le flux convectif induit par l'effet de densité des vapeurs et celui induit par la variation de pression, nous avons choisi d'utiliser un modèle numérique 1D.

Ce modèle 1D a été développé dans notre laboratoire LHyGeS et est basé sur le couplage de deux modules : l'écoulement de l'air du sol (basé sur l'équation de conservation de la masse) et le transport convectif-diffusif de vapeurs des TCE (basé sur le couplage entre loi de Fick et la loi de Darcy) (cf Chapite 4). Le domaine modélisé est une colonne de milieu poreux de 1 m de longueur avec une zone source de pollution à la limite inférieure de la colonne. Afin d'étudier l'effet de densité de vapeur et le gradient de pression sur le flux de vapeurs à la surface de la colonne nous avons varié la concentration et la pression de vapeur de la zone source.

Compte tenu de la structure de l'aquifère poreux du site SCERES, nous avons adopté trois configurations de la colonne qui peuvent se trouver dans le site. La première est une configuration hétérogène notée configuration A où la colonne sera formée d'une couche inférieure de sable moyen sur une épaisseur de 50 cm, et d'une couche supérieure de sable fin sur le reste de la colonne. La deuxième est une configuration homogène constituée du sable moyen sur toute la colonne, cette configuration est notée la configuration B. La troisième est la configuration C, elle représente l'inverse de la colonne A.

La méthode utilisée pour la résolution des équations mathématiques du modèle est la méthode de volumes finis, qui est basée sur des approximations d'intégrales pour les équations de conservation. La colonne est discrétisée en N mailles. La zone source de pollution est imposée au premier nœud (Nœud 1) de la colonne (Figure 3. 6).

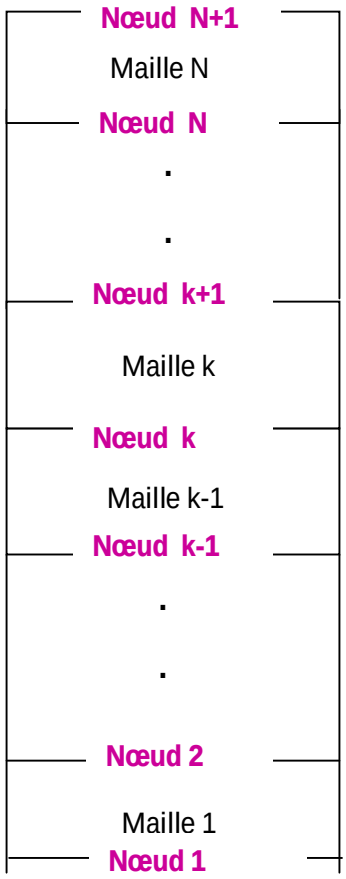


Figure 3. 6 : Schéma de la colonne divisée en N maille

Le chapitre 4, qui fait l'objet d'un article accepté, décrit en détail le modèle mathématique relatif à l'écoulement et au transport choisi pour étudier l'effet de la prise en compte de la densité de vapeurs et le gradient de pressions motrices sur le transfert de vapeurs vers la surface du sol. Une étude des erreurs relatives a été menée entre les flux de vapeurs donné par le code numérique 1D à la surface de la colonne du sable et ceux quantifiés à partir de la méthode semi-analytique.

Chapitre 4: Prediction of vertical DNAPL vapour fluxes in soils using quasi-analytical approaches: bias related to density-driven and pressure-gradient-induced advection

SOMMAIRE

4.1 Introduction 106

4.2 Mathematical tool 108

4.3 Case studies 113

4.4 Detailed error analysis 127

4.5 Conclusions 137

Ce chapitre a été consacré à l'étude numérique monodimensionnelle du transport de vapeurs de TCE dans une colonne de sable partiellement saturé en eau. Il propose une étude détaillée des erreurs relatives effectuées lors de la quantification des flux de vapeur de COV à la surface de la colonne. Ces flux sont calculés à partir d'un code numérique 1D basé sur le couplage écoulement-transport. La quantification des vapeurs est effectuée à l'aide de la méthode semi-analytique. L'objectif de cette étude est focalisé à réduire l'erreur relative lors de la quantification des flux de vapeurs à la surface du sol. Pour cela nous avons pris en compte dans la solution semi-analytique, non seulement le flux diffusif mais aussi, la convection induite par l'effet de la densité des vapeurs ainsi que la convection induite par le gradient de pression motrice engendrée par la volatilisation de la zone source.

Ce chapitre est présenté sous forme d'un article publié dans la revue *Water, Air & Soil Pollution* (Marzougui et al., 2012)

4.1 Introduction

Spills and leaks of so-called dense nonaqueous-phase liquids (DNAPLs), such as trichloroethylene (TCE), commonly used for many years in the industry have severely impacted the quality of subsurface water supplies (Kueper and Frind 1989; Birovljev et al., 1991; Fayers et al., 1996; Bettahar et al., 1999; Benremita and Schäfer 2003; Bohy et al., 2004; Dridi et al., 2009). In the subsurface, DNAPLs migrate vertically depending upon gravity and capillary forces through the unsaturated zone. Because of their high volatility, a large vapour plume appears to form a plume of pollution (Falta et al., 1989). These vapours can migrate by advection-diffusion from the unsaturated zone to the groundwater (Mendoza and McAlary 1990; Jones et al., 1978; Jellali et al., 2003; Cotel et al., 2011) or can be transferred from the soil surface to the atmosphere and indoor air of buildings (Hodgson et al., 1988; Johnson and Ettinger 1991; Morisson et al., 2006; Yu et al., 2009).

Today, one of the key challenges in the remediation of contaminated sites is accurately predicting the environmental impact of organic pollution caused by DNAPL in terms of vapour concentrations in the soil gas of the vadose zone, in the atmosphere close to the soil surface and in the indoor air of overlaying buildings. To better understand the behaviour of volatile organic compound (VOC) vapours in the soil gas, a study of the source zone is necessary. Several studies have investigated different aspects of this issue. A large number of numerical studies have been conducted in the past (e.g. Sleep and Skyes 1989; Thomson et al., 1997; Jang and Aral 2007; White et al., 2008; Coppola et al., 2009; Molins et al., 2010) to quantify the attenuation of the source zone of pollution being caused by phase partitioning, biodegradation of VOCs and change of soil air pressure and/or temperature change. Only a few controlled laboratory experiments investigated the attenuation of the source zone (Jones et al., 1978; Sililo and Tellam 2000). Kram et al., (2001) described screening methods and approaches used to detect and delineate DNAPL contaminant source zones. Mass partitioning between the different fluid phases (DNAPL, water, gas) and the solid matrix has been discussed in many studies. For example, Mendoza and Frind (1990), Jellali et al., (2003), Bohy et al., (2006) and Cotel et al., (2011) assessed the liquid-gas partioning using Henry's law in their experimental studies. However, the most important transport mechanisms of DNAPL in unsaturated porous media are diffusion and advection.

Diffusion is considered as the predominant transport mechanism for vapours in the unsaturated zone and is often assessed using Fick's first law (Pankow and Cherry 1996; Choi et al., 2002; Webb and Pruess 2002; Jellali et al., 2003; Bohy et al., 2006; Cotel 2008). However, in natural soils, advective transport of DNAPL vapours might become significant; this transport can be generated by density gradients that exist within and along the fringe of the vapour plume or by pressure gradients in the gas

phase. The effects of density-induced transport have been investigated in a large number of numerical modelling studies (e.g. Sleep and Sykes 1989; Falta et al., 1989; Mendoza and Frind 1990a,b; Mendoza and McAlary 1990; Lenhard et al., 1995; Mastrocicco et al., 2011). These studies demonstrate that density-induced advection can be a significant transport mechanism and mainly depends on the permeability of the medium, the thickness of the unsaturated zone and the temperature of the soil. Only a few experiments have been conducted to study the VOC vapour density effect (e.g. Schwille, 1988; Lenhard 1995; Altevogt et al., 2003; Jang and Aral 2007; Cotel et al., 2011).

Pressure gradients in the soil gas may provoke a driving pressure field, resulting in pressure-induced advection of the vapour concentrations. For an isotropic porous medium, vapour migration along the given pressure gradient may therefore be more spatially extended in the unsaturated zone than by the effect of diffusive transport alone. Pressure gradients are usually driven by barometric pressure variations, by vaporisation of the DNAPL at the source zone and ventilated buildings or by the movement of water in the unsaturated zone (Barber et al., 1990; Parker 2003; Williams et al., 1999; Altevogt et al., 2003; Mendoza and Frind 1990, Rivett et al., 2011).

As subsurface pollution by VOCs represents a serious environmental problem in many industrial areas (DRSP 2007), mathematical vapour transport models are employed to evaluate the health risk caused by the inhalation of polluted vapours at contaminated sites. However, the main tools actually used in field applications are quasi-analytical solutions and are commonly based on diffusive vapour transport (Jellali et al., 2003; Bohy et al., 2006; Dridi and Schäfer 2006) without taking into account the influence of the density of the DNAPL vapours and the pressure gradient in the soil gas. Only few models, such as the VOLASOIL model (Weitz et al., 1996) and the Johnson and Ettinger model (Johnson and Ettinger 1991), currently used by engineering companies as tools for quantifying mass fluxes from the subsurface to the atmosphere account for both the diffusive and advective transport of DNAPL vapours. However, these models do not explicitly distinguish between density-driven advection and pressure-gradient-induced advection. Indeed, this deficiency can lead to high uncertainties in the prediction of vapour fluxes that renders an appropriate estimation of the health risk difficult.

This study focuses on a detailed error analysis when evaluating DNAPL vapour fluxes at the soil surface using quasi-analytical solutions. Two modelling approaches are used: the first one is based only on Fick's first law of diffusion, and the second takes into account diffusion, dispersion and advection of DNAPL vapour fluxes. To build up a solid database of vertical profiles of vapour concentration and soil pressure, we used a coupled one-dimensional (1D) numerical flow and transport model to calculate vapour fluxes from a DNAPL source zone located in the vadose

zone towards the atmosphere. In three case studies, the modelling area comprises an unsaturated soil column of 1-m height with different soil texture at different water contents. The lower boundary condition represents the source zone and is defined by a prescribed vapour pressure and concentration.

Under steady-state transport conditions, we compare the vapour fluxes calculated at the upper boundary of the soil column with the 1D numerical model to the vapour fluxes quantified between two depths of the soil column, where one of them is located at the soil/atmosphere interface using two quasi-analytical approaches. The first approach is based on Fick's 1st law of diffusion; it estimates the vertical mass flux per unit surface towards the atmosphere using the numerically calculated concentration data at a given time. Three input terms are required in this approach: the measured concentration difference between two measuring points, their vertical distance and the average effective diffusion coefficient between the two depths.

The second approach takes into account the vapour density term and the effect of pressure gradients, is based on both Fick's law and Darcy's law and quantifies the total vertical (advective, diffusive and dispersive) mass flux per unit surface towards the soil surface. This approach depends on the effective coefficient of gas diffusion, the DNAPL vapour density as a function of the measured vapour concentration, and the monitored vapour pressure and concentration at two different depths.

To analyse in detail the bias introduced by each of the two quasi-analytical approaches, a relative error is defined between the vapour flux obtained from the quasi-analytical approaches and the numerically calculated flux at the upper boundary of the soil column.

4.2 Mathematical tool

To model the 1D vapour transport in a soil column, a mathematical approach was used that is based on a coupled flow and transport model for the gas phase in the given three-phase (water-gas-porous medium) system.

4.2.1 Flow model

Considering the DNAPL vapour as a gas mixture of the uncontaminated soil gas and the vaporised DNAPL, the gas flow in the vertical z-direction in a partially saturated porous medium is described by the mass conservation equation:

$$-\frac{\partial}{\partial z}(\rho v)=\frac{\partial(\theta_g \rho)}{\partial t} \qquad \text{(Eq 4. 1)}$$

where ρ (kg.m^{-3}) is the vapour or gas density, v (m.s^{-1}) is Darcy's velocity in the z-direction or the specific discharge of the gas-phase and θ_g (-) is the gas content of the porous medium.

Assuming the ideal gas law, the gas density can be expressed as follows:

$$\rho(p,T)=\frac{pM}{RT} \qquad \text{(Eq 4. 2)}$$

where M (kg.mol^{-1}) is the molecular weight of the gas, *p* (Pa) is the gas pressure, R (8.314 Pa.m^{-3}.mol^{-1}.K^{-1}) is the universal ideal gas constant and T (K) is the absolute temperature.

The generalised Darcy's Law (Bear, 1972) expresses the specific discharge of the gas phase

$$v=-\frac{k}{\mu}\frac{\partial}{\partial z}(\rho g z+p) \qquad \text{(Eq 4. 3)}$$

where *k* (m²) is the gas permeability, g (m.s^{-2}) is the gravity acceleration, μ(kg.m^{-1}.s^{-1}) is the dynamic viscosity of fluid and z (m) is the elevation.

In the given flow model, the gas permeability of the porous medium is given by

$$k=k^{*}k_{ra}=k^{*}\left(\frac{S_g}{1-S_{wr}}\right)^3 \qquad \text{(Eq 4. 4)}$$

where k^{*}(m²) is the intrinsic permeability and k_{ra} (-) is the relative permeability function of the gas saturation S_g(-) and the irreducible water saturation S_{wr} (-).

Introdusing Eq 4.2 and Eq 4.3 into Eq 4.4 and after some development (see appendix A4.A), the mass conservation equation can be written as

$$\frac{\theta_g M}{RT}\frac{\partial p}{\partial t}=\frac{M^2 g}{\mu R^2 T^2}\frac{\partial}{\partial z}(kp^2)+\frac{M}{2\mu RT}\frac{\partial}{\partial z}\left(k\frac{\partial p^2}{\partial z}\right) \qquad \text{(Eq 4. 5)}$$

Eq 4.5 can be linearised by rewriting p² in the storage term as

$$\frac{\partial p^2}{\partial t}=\frac{\partial(pp)}{\partial t}=p\frac{\partial p}{\partial t}+p\frac{\partial p}{\partial t}=2p\frac{\partial p}{\partial t} \qquad \text{(Eq 4. 6)}$$

Replacing $\frac{\partial p}{\partial t}$ with $\frac{1}{2p}\frac{\partial p^2}{\partial t}$ leads to

$$\frac{\partial p^2}{\partial t} = \frac{p_0}{\mu\theta_g}\frac{\partial}{\partial z}(k\frac{\partial p^2}{\partial z}) + 2\frac{M\times g\times p_0}{\mu RT\theta_g}\frac{\partial}{\partial z}(kp^2) \quad \text{(Eq 4. 7)}$$

The final linearised flow equation is obtained by replacing p^2 by *P:*

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \beta\frac{\partial}{\partial z}(k\frac{\partial P}{\partial z}) + 2\gamma\frac{\partial}{\partial z}(kP) \quad \text{(Eq 4. 8)}$$

where

$$\beta = \frac{p_0}{\mu\theta_g} \; ; \; \gamma = \frac{M\times g\times p_0}{\mu RT\theta_g}$$

and P_0 represents the initial pressure.

The molecular weight of the vapour *M* (kg.mol^{-1}) depends on the vapour concentration C (kg.m^{-3}) in the gas mixture and is calculated by the model using the following equation (Thomson et al., 1997):

$$M = C\frac{RT}{p}(1-\frac{M_{air}}{M_{DNAPL}}) + M_{air} \quad \text{(Eq 4. 9)}$$

where M_{air} (kg.mol^{-1}) and M_{DNAPL} (kg.mol^{-1}) represent the molecular weights of the uncontaminated soil air and the DNAPL, respectively.

4.2.2 Transport model

Let us consider vapour transport in a partially saturated porous medium. The transport equation in the vertical z-direction can be written using the classical advection-diffusion-dispersion equation commonly employed in unsaturated porous media:

$$\alpha\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\left(D_{eg} + \alpha_L|v|\right)\frac{\partial C}{\partial z}\right) - \frac{\partial}{\partial z}(vC) \quad \text{(Eq 4. 10)}$$

where C (kg.m^{-3}) denotes the vapour concentration, D_{eg} (m^2.s^{-1}) denotes the effective diffusion coefficient of the gas phase, and α_L (m) denotes the longitudinal dispersivity of the porous medium. α represents the capacity factor of the porous medium and is expressed by

$$\alpha = \theta_g + \frac{\theta_w}{H} \quad \text{(Eq 4. 11)}$$

where θ_g (-) denotes the gas content in the soil air, θ_w (-) is the water content and *H* (-) is the Henry constant.

D_{eg} is assumed to be time invariant. The mathematical formulation of the effective diffusion coefficient is given by (Grathwohl 1998; Wang et al., 2003)

$$D_{eg} = \theta_g \tau D_g \quad \text{(Eq 4. 12)}$$

where τ (-) represents the tortuosity of the porous medium and is based on the Penman-Millington Quirk model (Moldrup et al., 1997):

$$\tau = 0.66 \frac{\theta_g}{n} \quad \text{(Eq 4. 13)}$$

where D_g ($m^2.s^{-1}$) is the free air diffusion coefficient and n (-) is the porosity of the porous medium.

The vapour velocity *v* is given by Darcy's law (see Eq 4.3)

4.2.3 Numerical flow and transport model

The method used to numerically solve Eq 4.8 and Eq 4. 10 is the finite volume method. The study area is a 1D domain discretised into N cells, where k represents the centre of the cell, k - ½ is the upstream cell edge and k + ½ is the downstream cell edge. The integral of the linearised flow equation (Eq 4. 8) and transport equation (Eq 4. 10) are described in detail in Appendix A4.B.

The parameters C, α, α_L, β, γ, and P are defined in the centre of the cell, whereas *v*, the gas permeability k and θ_g are defined at the cell edges.

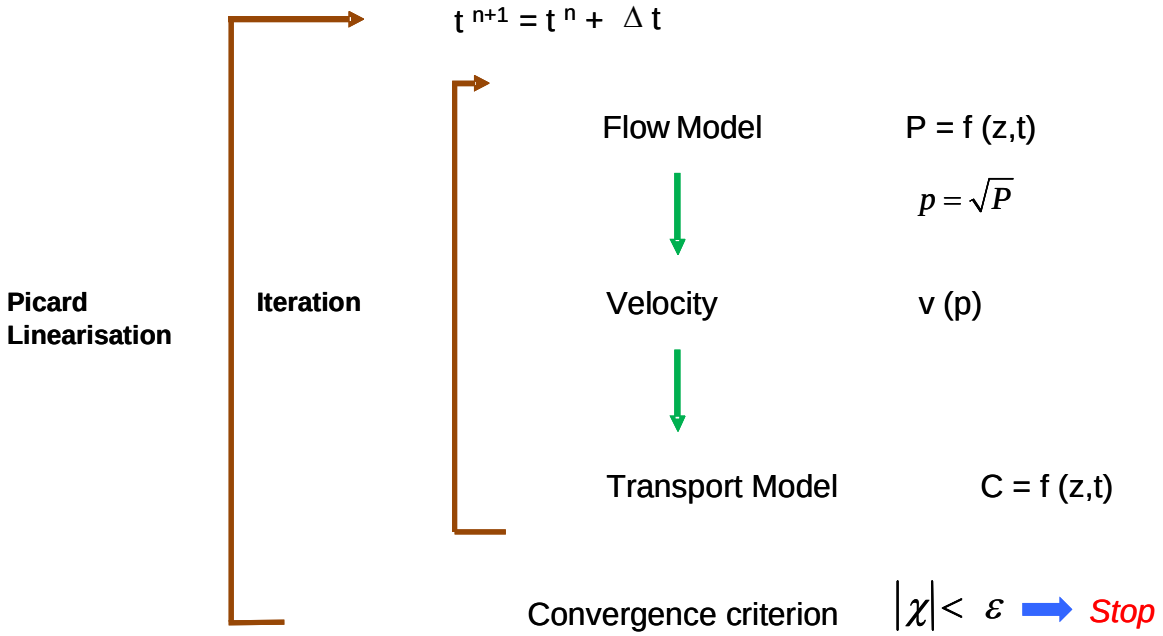


Figure 4. 1 : Progress of computation

To solve the coupled system of equations, a Picard linearization is used. The 1D model uses a data set containing constants and parameters necessary to solve the equations, such as the number of cells and edges, time step, intrinsic permeability, β, γ, M, θ_g, S_{wr}, and the initial conditions of the vapour concentrations and pressures.

First, the model calculates the pressure from the flow model in which it uses the β, γ and M given in the data file. Once the pressure is determined, it will be used to calculate Darcy's velocity *v*. This velocity will be used in the transport model to compute the vapour concentration in the centre of each cell.

Before starting the next time step, the model calculates the new χ (new beta β_{new}, new gamma γ_{new} and a new molecular weight M_{new}) to calculate the pressure. These new entries χ should not deviate significantly from the old values β_{old}, γ_{old} and M_{old}. Therefore, a convergence condition is used: the absolute value of the relative differences $\left|\frac{\chi_{new} - \chi_{old}}{\chi_{old}}\right|$ should not exceed the convergence criterion of 10^{-11}. If this criterion is not achieved, the model recalculates these entries in a further loop called L_{iter} (Figure 4. 1) until this criterion is met. The numerical model then proceeds with the next time step. For each time step, the outputs of the numerical model are

vapour concentration C, velocity v, pressure p, vapour fluxes, and the effective diffusion coefficient D_{eg}.

4.3 Case studies

4.3.1 Characteristics of porous media

Three different structures are used for the studied soil columns to qualitatively represent configurations of soil columns that are typically observed on real sites. Two sands are used: a fine sand (sand 1) and a medium-sized sand (sand 2). In the first case study A, the soil column is divided into two 50-cm thick layers in the vertical z-direction: the lower layer is formed by sand 2, the upper one is composed of sand 1. The second case study uses a homogeneous configuration formed by sand 2 denoted as case study B. The soil structure of case study C is the inverse of case A (Figure 4. 2). The properties of the sands used are provided in Table 1. The DNAPL used in the case studies is Trichloroethylene (TCE). Table 2 summarises the physical and chemical properties of TCE at 20°C.

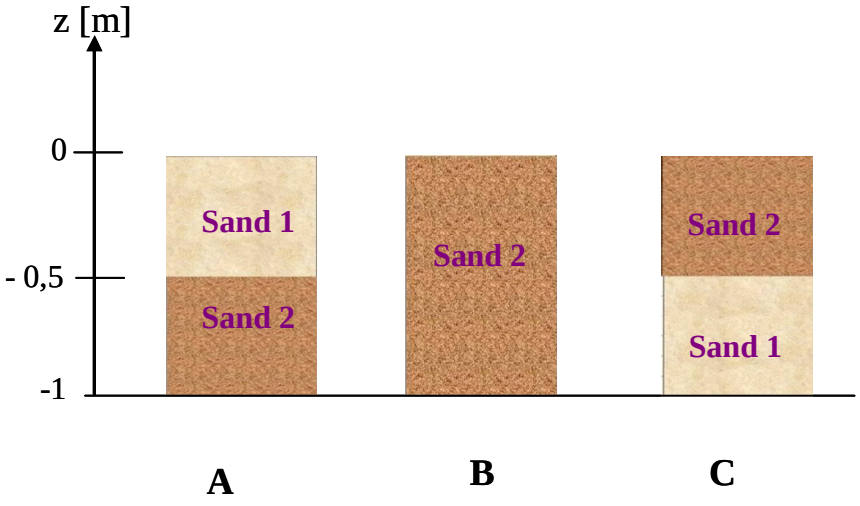


Figure 4. 2 : Schematic representation of the three case studies

Table 4. 1 : Properties of the sand

Properties	Fine sand (Sand 1)	Medium sized sand (Sand 2)
Porosity n (-)	0,43	0,40
Irreducible water saturation S_r (-)	0,17	0,15
Van Genuchten parameters α_{vg} (m^{-1}) n_{vg} (-)	 0,0101 13	 0,145 2,68
Intrinsic permeability k^* (m^2)	$5,1\ 10^{-12}$	$8,2\ 10^{-11}$
Longitudinal dispersivity α_L (m)	$0,5\ 10^{-3}$	$1,0\ 10^{-3}$ (Benremita 2002)

Table 4. 2 : Physical and chemical properties of trichloroethylene at 20°C

Molecular diffusion coefficient in free air D_g ($m^2.s^{-1}$)	$7{,}4\ 10^{-6}$ (Perry and Green 1984)
Henry constant H (-)	0,229 (Nordstrom and Munoz 1985)
Molecular weight ($g.mol^{-1}$)	131,39
Vapour pressure at saturation pv (Pa)	4475
Vapour concentration at saturation C_{sat} ($kg.m^{-3}$)	0,25

Numerical flow and transport modelling of TCE vapour is performed on a 1-m high column, equally discretised in the vertical z-direction into 200 grid-cells of Δz = 0,005 m. The boundary conditions and the water content in the unsaturated soils are discussed in the following section.

4.3.2 Water content and effective diffusion coefficient

The various studies are performed using the 1D coupled numerical flow and transport model to produce the database of vertical profiles of DNAPL pressure and concentration in partially water-saturated porous media. Figure 4. 3 presents the steady-state water content profiles of the different case studies obtained from Dridi and Schäfer (2006) using the multiphase flow simulator SIMUSCOPP (Thiez and Ducreux 1994). Case B is characterised by a constant water content of 0,06, whereas in case A, a perched water table is observed. In case C, a high jump in water content is observed at the discontinuity between the two layers of sand. Using Eq 4. 12, the effective gas diffusion coefficients are obtained from the given water content profiles (Figure 4. 3 b).

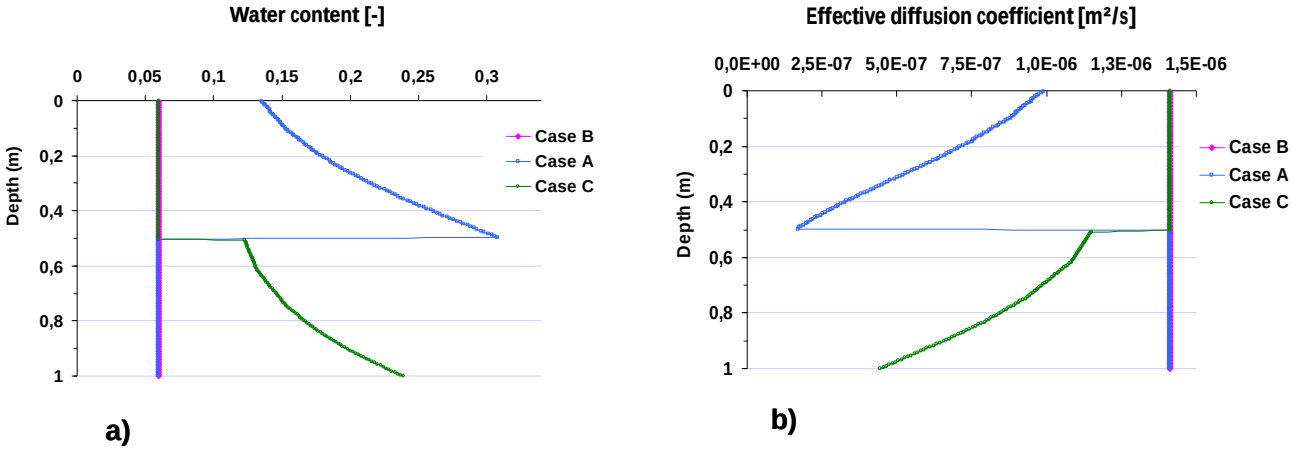


Figure 4. 3 : Water content and effective diffusion coefficient as a function of depth used in the three case studies (Dridi and Schäfer 2006)

4.3.3 Initial and boundary conditions

The initial conditions and boundary conditions selected in the numerical case studies are provided in Figure 4. 4. Initially, the soil gas within the entire soil column is assumed to be uncontaminated (C=0), and its pressure increases with depth, corresponding to an ideal gas at static equilibrium expressed by an exponential law. At the upper boundary of the soil column (z=0 m) corresponding to the soil surface, the pressure and concentration of the TCE vapours are prescribed and fixed at a constant value. In all studies, the gas pressure is equal to an atmospheric pressure of 1 atm, and the vapour concentration (denoted $C_{downstream}$) is assumed to be zero. At the upstream boundary corresponding to the lower end of the soil column (z=-1 m), the vapour concentration and gas pressure are defined for the different runs of each case study (Table 4. 3).

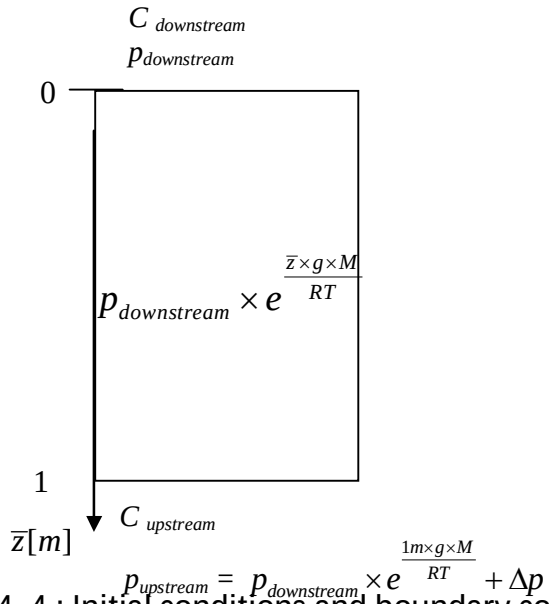


Figure 4. 4 : Initial conditions and boundary conditions

Three modes of transport of TCE vapours are simulated in the soil columns: (1) purely diffusive transport (Run 3), (2) transport of vapours with density effect (Run 1), and (3) transport of vapours under the combined effect of vapour density and pressure gradients (Runs 4, 6, 7, 9 and 11). The case of purely diffusive transport has been studied in the paper of Dridi and Schäfer (2006), where they demonstrated that in the case of purely diffusive transport, steady-state conditions are reached after 5 days, and the heterogeneity of the porous medium has a significant effect on vapour transport in the soil column. For example in case B, the steady-state TCE vapour concentration was characterised by a linear profile due to the constant effective diffusion coefficient. However, in case A, the concentrations were lower at the top of the soil column than for the homogeneous medium, caused by the effect of the low effective gas diffusion coefficients of the upper layer formed by sand 1. Therefore, the TCE vapour concentrations in sand 2 were higher than the vapour concentration for the homogeneous media because of the diffusion barrier generated by sand 1. While for case C, the vapour flux from the source to the atmosphere was lower than in case B, it was higher than in case A. Indeed, this result arose from the high water content in the lower layer.

In our study, we focus on the case of transport under the influence of vapour density and driving pressure p_g (Pa), defined as $p_g=p+\rho gz$.

In the upstream boundary, the TCE vapour concentration of the source zone is assumed to be time invariant. The maximum vapour concentration of the TCE is $C_{upstream}$ = 0,25 kg.m^{-3}, and its maximum vapour pressure of p_v is equal to 4475 Pa.

Different levels of TCE vapour concentration and pressure are applied at the upstream boundary (at z=-1 m) (Table 4. 3). The numerical flow and transport model (see section 2) was used to calculate the transport of a volatile organic compound from the lower boundary of the unsaturated soil column (with a fixed concentration in the gas phase $C_{upstream}$ and a fixed gas pressure) to the soil surface. In the following, the soil depth $\bar{z}\,(\bar{z}=-z)$ is used instead of elevation z.

Table 4. 3 : Upstream boundary conditions selected for the different runs

		$C_{upstream}$			
		C_{sat}	C_{sat} *0.1	C_{sat} *0.01	C_{sat} *0.001
Δp	0	**Run 1** [a]	**Run 2** [a]	**Run 3** [a]	
	p_v*0.001	**Run 4** [a]	Run 5		**Run 6** [a]
	p_v *0.01	**Run 7** [a]	Run 8	**Run 9** [a]	
	p_v *01	Run 10	**Run 11** [a]		
	p_v	Run 12			

[a] Data correspond to the runs discussed in detail in the text

4.3.4 Calculated DNAPL vapour concentration and pressure profiles and vapour fluxes

4.3.4.1. Influence of density driven advection

Figure 4. 5 presents the vapour concentrations calculated in the soil column under transient and steady-state conditions for Run 1. For a homogeneous porous medium (case B), steady-state transport conditions are already achieved after 1.5 days. At this point, the vapour plume stagnates at the bottom of the soil column. This accumulation is mainly due to the effect of vapour density on vertical flow components, resulting in gravity driven movement of the vapour. Indeed, as the concentrations at the lower part of the soil column are high, the density of the gas mixture is increased, achieving a maximum vapour density of approximately 1,34 kg/m^3 at the bottom of the column.

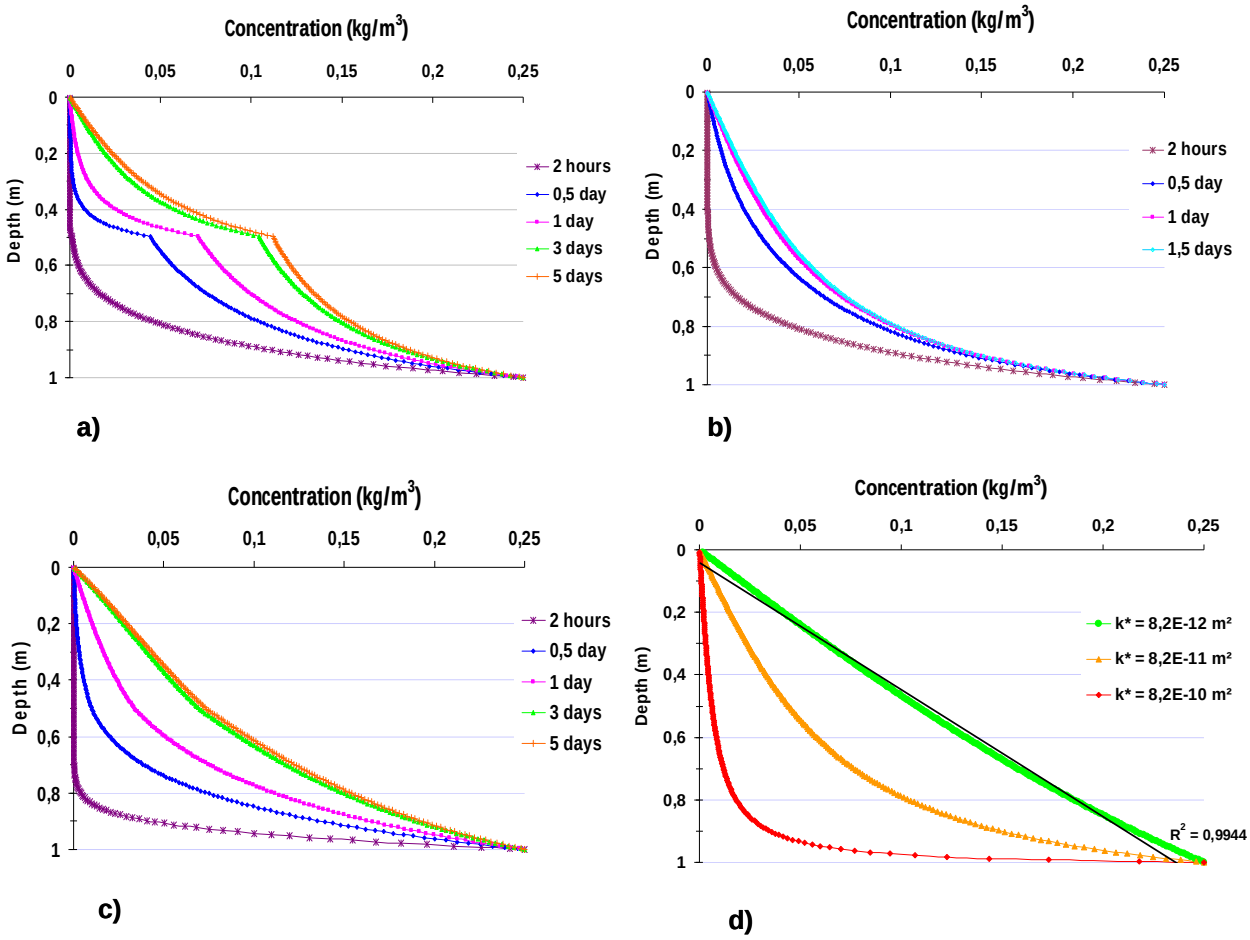


Figure 4. 5 : Influence of vapour density on TCE vapour concentrations (Run 1) transient concentration profiles in the soil columns for cases a) A, b) B and c) C and d) concentration profile at steady state obtained for case B compared with those of two homogeneous media with different intrinsic permeabilities

The hydraulic conductivity of the porous medium may have a significant influence on density-driven advection of vapour, expressed by the dimensionless Rayleigh number (Cotel et al., 2011). The higher the intrinsic permeability, the higher the Rayleigh number and the density effect will be. In case A, the upper layer formed by fine sand 1 is less permeable than sand 2 located below.

In this case, the vapour concentrations in the upper layer are higher than in the homogeneous case (case B). To study the influence of the dimensionless Rayleigh number on the vertical concentration profile of TCE vapours, we varied the intrinsic permeability of the homogeneous medium on the steady-state concentration profile by dividing the initial value by ten and one-tenth (Figure 4. 5 d). When decreasing the intrinsic permeability to 8,2 10^{-12} m², the vapour concentration profile has a linear

form (R^2=0,994), which implies that the transport of the vapour plume is dominated by molecular diffusion (Dridi and Schäfer 2006). In this case, advective mass fluxes induced by the vapour density are negligibly small. However, for an increased intrinsic permeability of 8,2 10^{-10} m², the vapour plume stagnates at the lower part (the first 10 cm) of the soil column.

For the heterogeneous porous medium of case C (Figure 4. 5 c), the low permeability of the lower layer of the soil column causes a lower density-induced advective flux compared with case A (Figure 4. 5 a and Figure 4. 5 c). The diffusive, dispersive, advective and total vertical vapour fluxes obtained are plotted in Figure 4.6. Note that the absolute values of the dispersive fluxes are very small compared with those of the diffusive and advective fluxes.

In case study C, the advective flux becomes positive in the upper part of the soil column (Figure 4.6 c). Hence, the vapours are dominated by an upward movement towards the soil surface caused by a decreasing driving pressure with increasing elevation z in medium-sized sand 2 (Figure 4.6 d). Compared with case study B, where the driving pressure gradient near the soil surface is almost zero, the density-driven advective fluxes are very low near the soil surface. The effect of vapour density becomes negligible when approaching the soil surface of case study B (Figure 4.6 b). As in the lower part of the homogeneous sand filling (case B), the vapour density effect is the predominant transport parameter and the downwards orientated advective vapour flux is the highest calculated vapour flux.

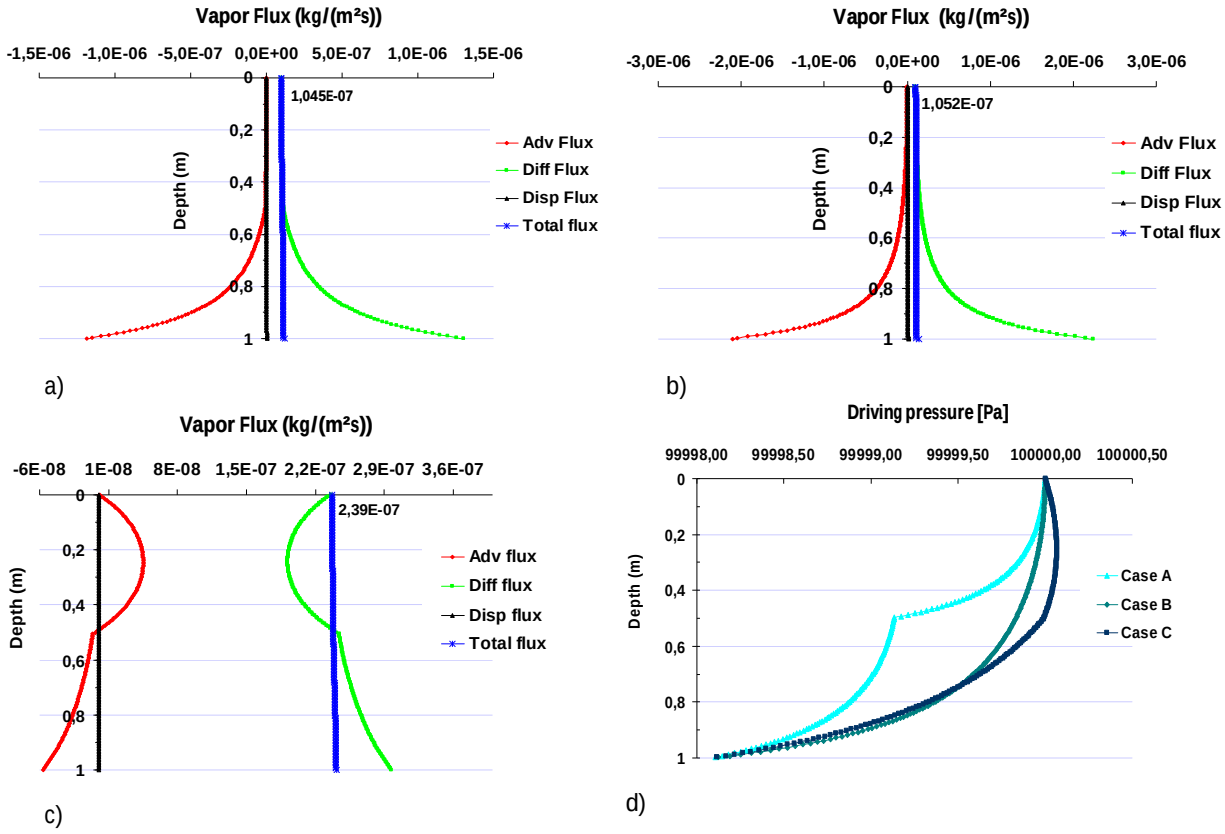


Figure 4. 6 : Diffusive, dispersive, convective and total fluxes in z-direction calculated in Run 1 at steady state for cases a) A, b) B and c) C, and d) driving pressure calculated at steady state in Run 1 for cases A, B and C

However, as the vapour density effect of case study C is less significant, molecular gas diffusion becomes the dominant transport mechanism. Therefore, the total vapour flux calculated in case study C is higher than those of cases A and B (Figure 4. 6 c).

Although the influence of vapour density on advective vapour flux strongly depends on the soil texture, it also depends on the prescribed upstream concentration boundary conditions. Figure 4. 7 represents the normalised steady-state vapour concentration calculated for Runs 1, 2 and 3 as a function of depth; $C_{upstream}$ corresponds to the TCE concentration prescribed at the upstream boundary of the soil column. Significantly reducing the prescribed vapour concentration may correspond to the field case where the source of pollution is far away from the considered location. Vapour fluxes resulting from density-driven advection become negligible, and the vapour plume is mainly governed by diffusive mass transport. In this case, the vertical concentration profiles correspond to those determined by Dridi and Schäfer (2006).

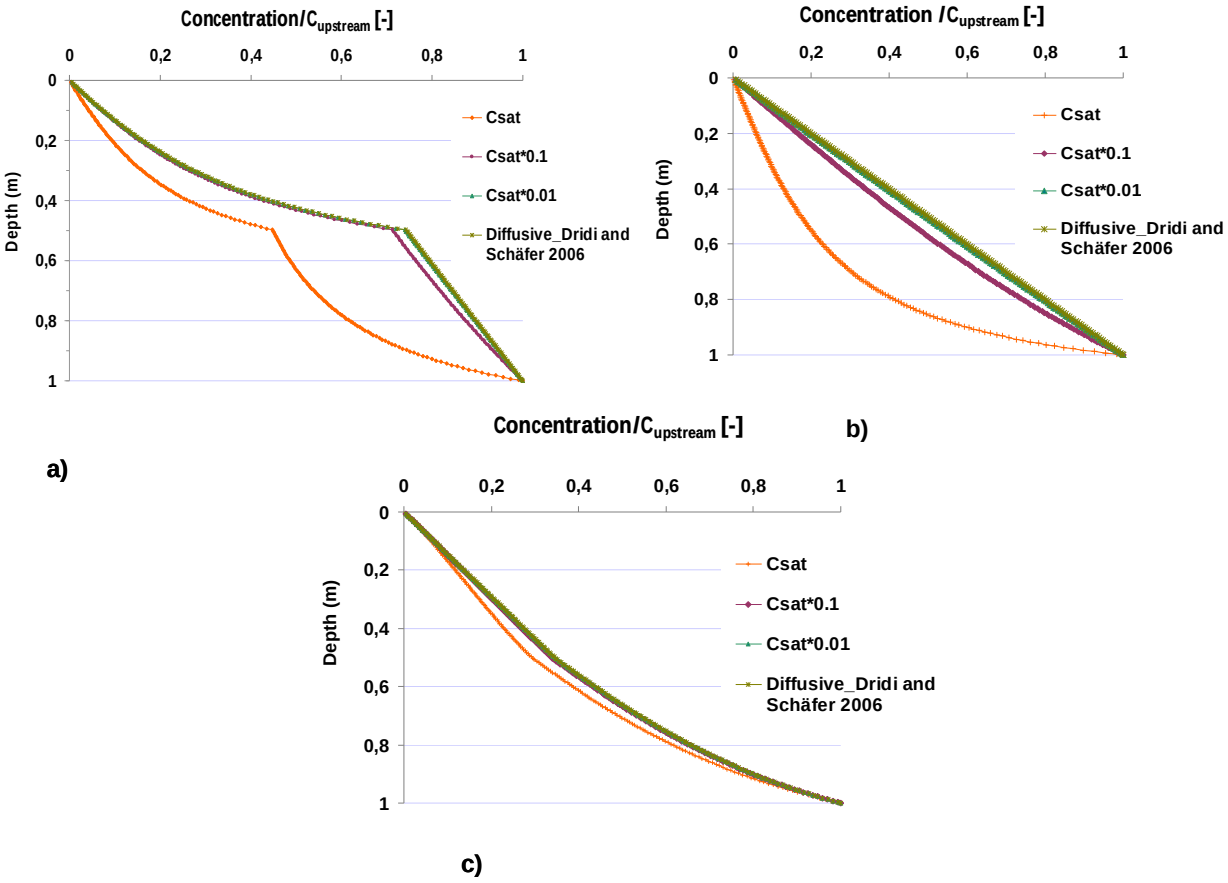


Figure 4. 7 : Normalised TCE vapour concentration in the column calculated at steady state in Runs 1, 2 and 3 for different prescribed upstream boundary concentrations for cases a) A, b) B and c) C

4.3.4.2 Combined influence of density-driven and pressure-gradient-induced advection

Compared with Run 1, a slight overpressure $\Delta p = p_v \times 0.001$ is added in Run 4, representing a configuration where the observation point is located closely above the source zone. Vaporisation of the present DNAPL causes both an overpressure in the gas mixture and high vapour concentrations in the neighbourhood of the source zone. This phenomenon may result in advective vapour fluxes caused by both the gradient of driving pressure and density effects. In the following section, the combined influence of the prescribed concentration and pressure condition at the upstream boundary on the vertical vapour flux is studied. The results of Run 4 are plotted in Figure 4. 8. At the steady-state transport conditions of case study B, nearly 90% of the total height of the soil column contains more than 50% of the vapour concentration prescribed at the upstream boundary of the soil column after only 2 days (Figure 4. 8 b). Compared with Figure 4. 5, where the normalised vapour

concentration of 0,5 does not exceed 10 cm of height, this may clearly be attributed to the pressure-gradient-induced advective flux that dominates the density-driven advective and diffusive fluxes. The diffusive, dispersive, advective and total vertical vapour fluxes obtained are plotted in Figure 4. 9. Note that the absolute values of the dispersive fluxes are very small compared with those of the diffusive and advection fluxes. The vapour pressure prescribed at the lower boundary of the soil column generates an ascendant movement of the TCE vapours, enhancing the saturation of the soil column with TCE vapours. This fact is underlined by the calculated vertical advective fluxes, which are positive and higher than the diffusive fluxes up to a depth of 10 cm (Figure 4. 9 b). The corresponding driving pressure profile (Figure 4. 9 d) confirms that an ascendant movement occurs over almost the entire column. Only for depths lower than 10 cm are the diffusive fluxes higher than the advective fluxes. The calculated total vapour flux is approximately 28 times higher than that of Run 1, where only the vapour density effect was taken into account.

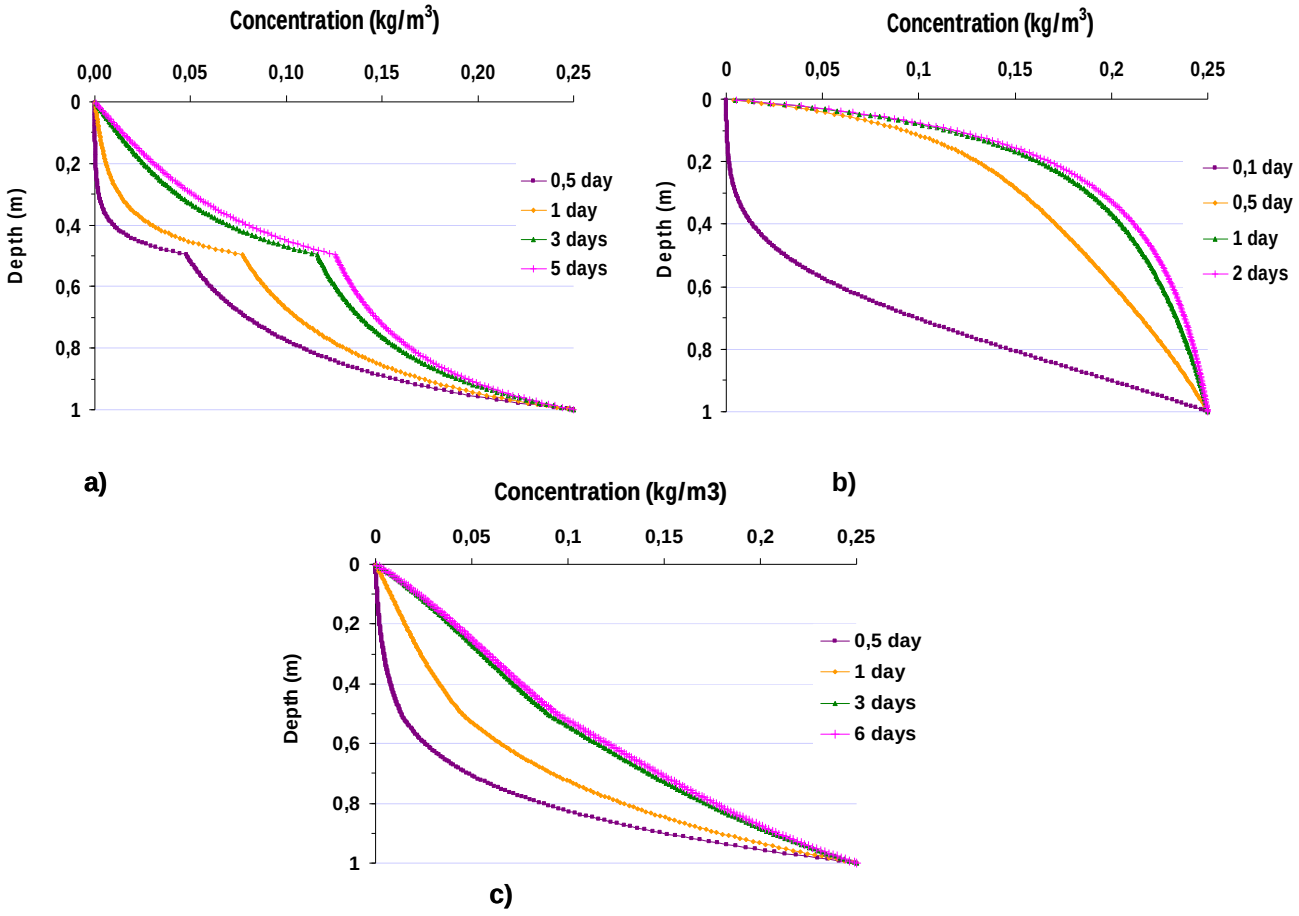


Figure 4. 8 : TCE vapour concentration calculated in Run 4 for ca

ses a) A, b) B and c) C

The heterogeneity of the porous medium significantly affects the time to reach steady-state transport conditions (Figure 4. 8 a and Figure 4. 8 c). It exceeds 6 days for case study C, corresponding to 3 times the time required in the studied homogeneous medium (case B). The steady-state transport conditions are achieved in case A after 5 days. In case B, the total vapour flux is approximately 10 times higher than that of case C and 20 times higher than that of case A (Figure 4. 9)

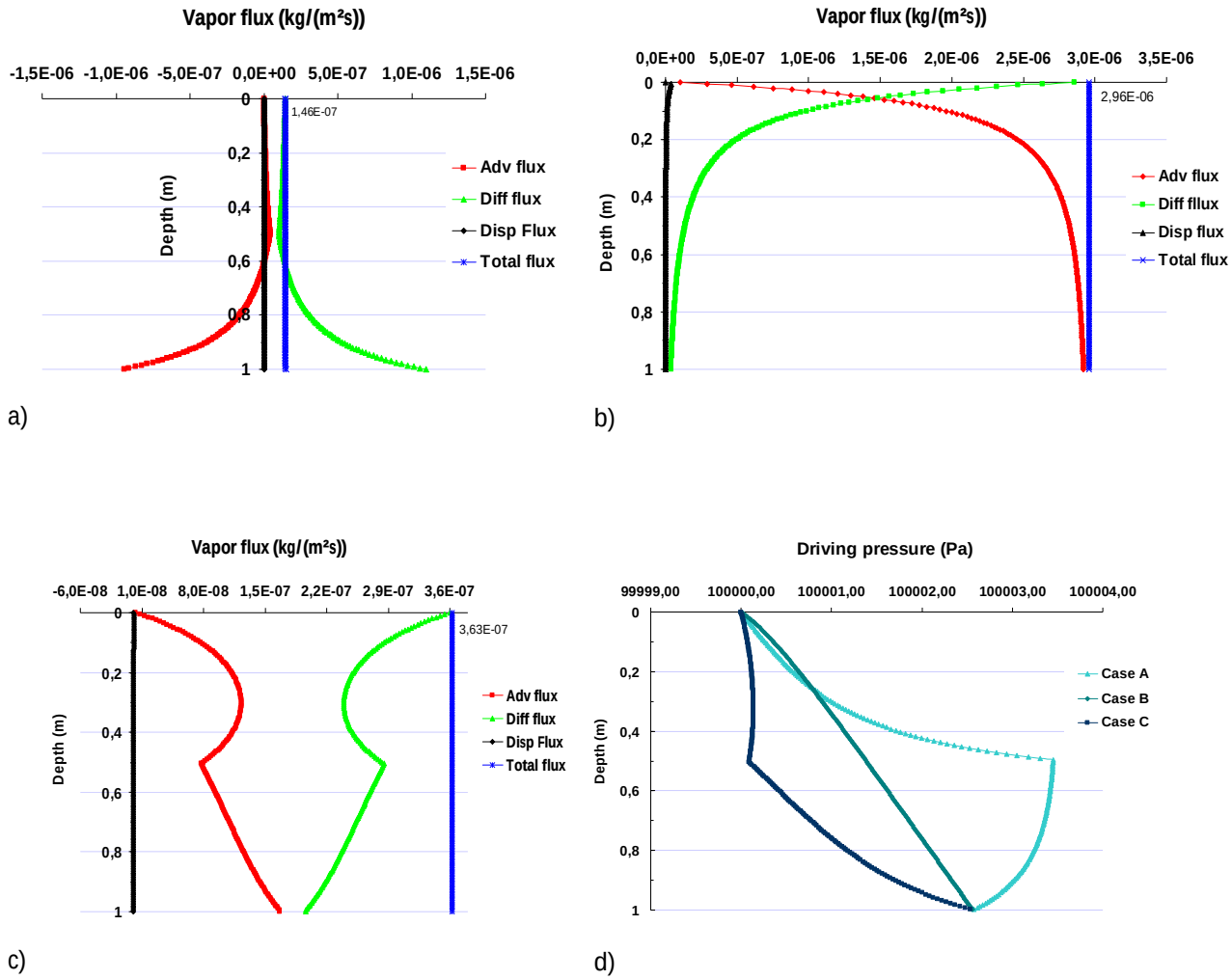


Figure 4. 9 : Diffusive, dispersive, convective and total fluxes calculated in the z-direction for Run 4 at steady state for cases a) A, b) B, and c) C, and d) driving pressure calculated at steady state for Run 4 for cases A, B and C

The vapour concentration profiles calculated in case study A are similar to those obtained in the case of pure vapour density-induced advection (see Run 1). The selected slight overpressure at the upstream boundary does not have a significant influence on the vapour transport in the vertical direction. This fact is underlined by the calculated advective fluxes caused by both the vapour density effect and the vapour pressure gradient, which are in total negative up to a height of 40 cm (Figure 4. 9 a). At smaller depths, they become positive but remain small. Compared with the case of the purely density-driven advective transport (Run 1), the calculated total flux is now 38% higher.

For the results of Run 4 in case study C, the advective vapour fluxes are positive throughout the entire column. In this case, the effect of vapour density is negligible. Furthermore, the calculated total vapour flux is 50% higher than the total flux in the case of Run 1, which implies that advective vapour transport in the vertical direction due to vapour pressure gradients is overcoming that caused by the density differences in the soil gas.

As observed in Table 4. 3, different cases of concentration and pressure boundary conditions were studied. Fig. 4. 10 presents the results of Runs 4, 6, 7, 9 and 11 at steady-state transport conditions in comparison with the results of Runs 1 and 3 to analyse the effect of overpressure at the upstream boundary of the soil column.

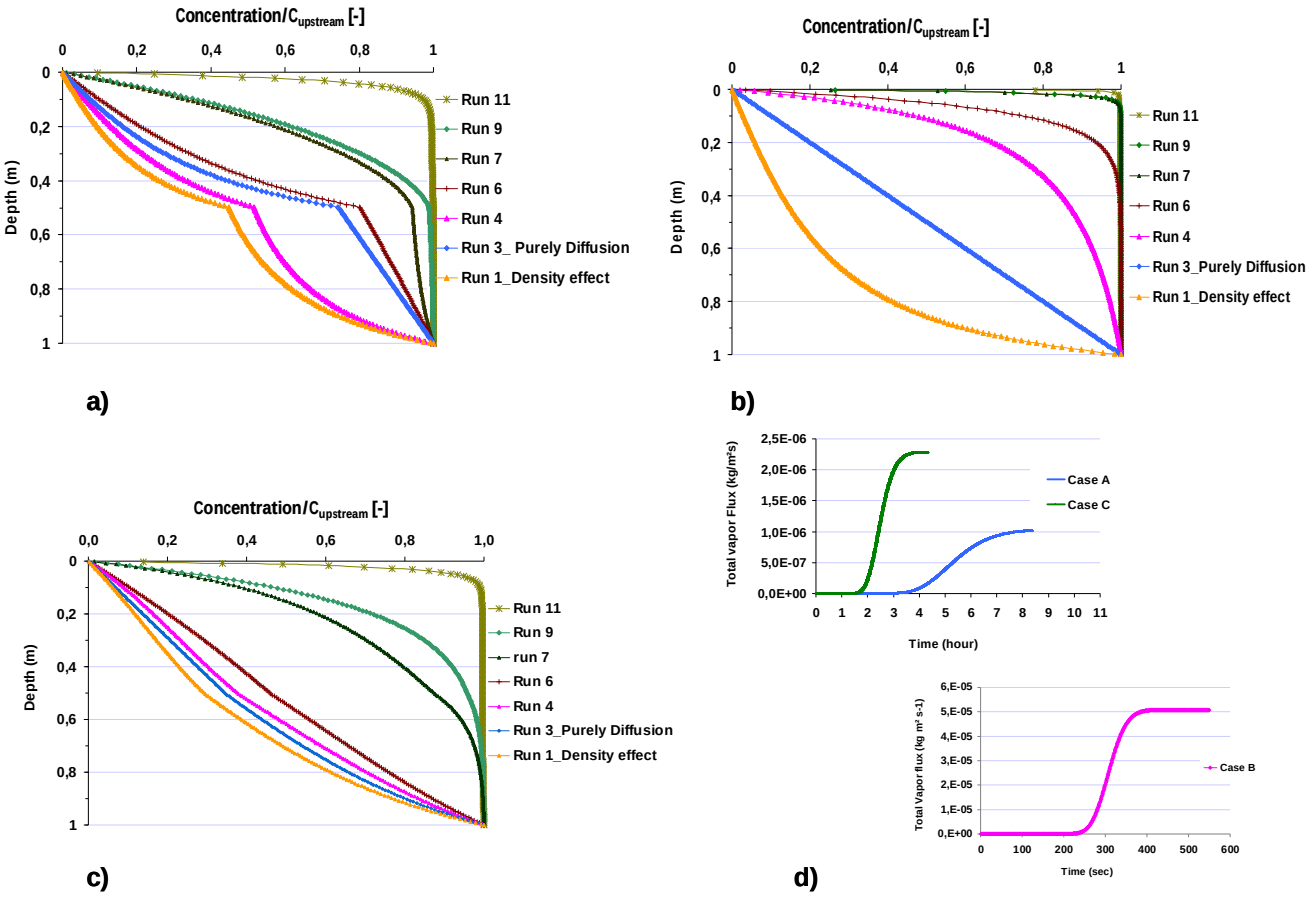


Figure 4. 10 : Normalised vapour concentration calculated at steady state for Runs 1, 3, 4, 6, 7, 9 and 11 for cases a) A, b) B and c) C, and d) the total vapour fluxes calculated at the soil surface in Run 11 for cases A, B and C

Run 11 corresponds to the highest vapour pressure and vapour concentration prescribed at the lower boundary of the soil column (see Table 4. 3). The transient vapour flux calculated at the soil surface is plotted in Figure 4. 10 d for the case studies. The total flux calculated for case study B is approximately 20 times and 50 times higher than that determined for case studies C and A, respectively. To reach steady-state transport conditions, the time required is significantly shorter for case study B than for the two other case studies, as soil heterogeneity has a strong effect on vapour migration in case studies A and C.

Run 11 leads to the highest vapour concentration in the different soil configurations (Figure 4. 10 a, Figure 4. 10 b and Figure 4. 10 c). Due to the high vapour pressure prescribed at the upstream boundary, vapour transport is dominated by advection, and thus, after a short time, the entire soil column is saturated with the upstream vapour concentration

It is worthwhile to note that, for the different runs, the vapour concentration at a given depth evolves proportionally with the overpressure prescribed at the upstream boundary of the soil column. The lower the overpressure, the lower the calculated vapour concentration will be.

4.4 Detailed error analysis

To quantify the total vapour flux leaving the soil column at the soil/atmosphere interface, a quasi-analytical approach is used. Using the database of the three case studies, two types of quasi-analytical approach are employed to predict the vapour flux at the soil surface and to quantify the error associated with these approaches.

4.4.1 Diffusion-based quasi-analytical approach (approach 1)

The first approach is based on Fick's first law and describes the steady state diffusive flux of vapour in the vertical z-direction per surface unit $F_{diff,z}$ (kg.m^{-2}.s^{-1}) at a given point by

$$F_{diff,z} = -D_{eg} \frac{\partial C_a}{\partial z} \qquad \text{(Eq 4. 14)}$$

where D_{eg} (m^2.s^{-1}) denotes the effective diffusion coefficient and C_a (kg.m^{-3}) is the DNAPL vapour concentration at a given elevation. The mathematical formulation of Deg is obtained from Eq 4.12 and Eq 4.13 :

$$D_{eg} = 0.66 \frac{\theta_g^2}{n} D_g \qquad \text{(Eq 4. 15)}$$

Approaching the vertical concentration gradient in Eq 4.14 by a finite difference formulation, the first quasi-analytical approach is obtained (Jellali et al., 2003; Dridi and Schäfer 2006), which predicts the vertical vapour flux at the soil surface to the atmosphere

$$F_{diff,z} = -\tilde{D}_{eg} \frac{\Delta C_a}{\Delta \bar{z}} \equiv F_{loc,z} \qquad \text{(Eq 4. 16)}$$

where ΔC_a (kg.m^{-3}), defined as $\Delta C_a = C_a(z_2) - C_a(z_1)$ is the concentration difference between two points located at a vertical distance $\Delta \bar{z}$ (m), defined as $\Delta \bar{z} = z_2 - z_1$. In our study, one of the two selected points is placed on the soil surface (z=0). $\tilde{D}_{eg}$ (m².s^{-1}) represents the average of the effective diffusion coefficient calculated using the arithmetic mean of the two effective diffusion coefficients determined at the two depths.

4.4.2 Diffusion-dispersion-advection-based quasi-analytical approach (approach 2)

The second approach is mainly based on Fick's Law and Darcy's Law. At steady-state transport conditions, the total vertical flux $F_{tot,z}$ (kg.m-².s^{-1}) in the unsaturated soil column is equal to the sum of the diffusive flux $F_{diff,z}$ (kg.m-².s^{-1}), the dispersive flux $F_{disp,z}$ (kg m-² s-1) and the advective flux $F_{adv,z}$ (kg.m-².s^{-1}) in the vertical z-direction:

$$F_{tot,z} = F_{diff,z} + F_{disp,z} + F_{adv,z} \quad \text{(Eq 4. 17)}$$

The diffusive flux $F_{diff,z}$ is expressed by Eq 4. 14.

Using a Fickian-based approach, the dispersive flux $F_{disp,z}$ (kg.m^{-3}) is given by

$$F_{dis,z} = -\alpha_L \left| v_{f,z} \right| \frac{\partial C_a}{\partial z} \quad \text{(Eq 4. 18)}$$

where α_L (m) is the longitudinal dispersivity of the porous medium, C_a(kg.m^{-3}) is the DNAPL vapour concentration at a given depth and $v_{f,z}$ (m.s^{-1}) represents the specific discharge of the gaseous phase in the vertical direction, expressed by Darcy's Law:

$$v_{f,z} = -\frac{k\rho g}{\mu}\frac{\partial h}{\partial z} \quad \text{(Eq 4. 19)}$$

where h (m) is the pneumatic head. Applying the expression of the equivalent water pressure head introduced by Lusczynski, 1960 to the pneumatic head (Cotel et al., 2011), it can be expressed as follows:

$$h \equiv \frac{p_g}{\rho_{air} g} = \frac{p_a}{\rho_{air} g} + z \quad \text{(Eq 4. 20)}$$

The Darcy velocity in the z direction can thus be expressed by

$$v_{f,z} = \frac{-k_{ra} k^* \rho_{air} g}{\mu_a}\left(\frac{\partial h}{\partial z} + \frac{\rho_a - \rho_{air}}{\rho_{air}}\right) \quad \text{(Eq 4. 21)}$$

where p_g (Pa) is the driving pressure, p_a (Pa) is the pressure of the gas mixture (soil air / DNAPL vapour) at elevation z, g (m.s^{-2}) is the gravitational constant, μ_a (Pa.s) represents the dynamic viscosity, k_{ra} (-) is the relative gas permeability in

biphasic system water/gas, ρ_{air} (kg.m^{-3}) is the density of the uncontaminated soil air, and ρ_a (kg.m^{-3}) is the density of the gas mixture (soil air / DNAPL vapour).

The density of the gas mixture is given by:

$$\rho_a = C_a\left(1-\frac{M_{air}}{M_{DNAPL}}\right)+\rho_{air} \qquad \text{(Eq 4. 22)}$$

M_{air} (g.mol^{-1}) is the molar mass of soil air and is equal to 28,9 g .mol^{-1}, M_{DNAPL} (g.mol^{-1}) is the molar mass of the DNAPL, and C_a (kg.m^{-3}) is the vapour concentration.

The advective flux in the vertical direction is given by

$$F_{adv,z} = v_{f,z}C_a \qquad \text{(Eq 4. 23)}$$

The total vapour flux can thus be quantified by

$$F_{tot,z} = (-D_{eg}-\alpha_L\left|\left(-\frac{k_{ra}k^*\rho_{air}g}{\mu_a}\left[\frac{\partial h}{\partial z}+\frac{\rho_a-\rho_{air}}{\rho_{air}}\right]\right)\right|)\frac{\partial C_a}{\partial z}+\left(-\frac{k_{ra}k^*\rho_{air}g}{\mu_a}\left[\frac{\partial h}{\partial z}+\frac{\rho_a-\rho_{air}}{\rho_{air}}\right]\right)C_a$$

(Eq 4. 24)

Replacing the spatial derivatives by a finite difference formulation, the second quasi-analytical method is obtained:

$$F_{tot,z} \equiv F_{loc,z} = (-\tilde{D}_{eg}-\tilde{\alpha}_L\left|\left(-\frac{\tilde{k}_{ra}\tilde{k}^*\rho_{air}g}{\mu_a}\left[\frac{\Delta h}{\Delta \bar{z}}+\frac{\tilde{\rho}_a-\rho_{air}}{\rho_{air}}\right]\right)\right|)\frac{\Delta C_a}{\Delta \bar{z}}+\left(-\frac{\tilde{k}_{ra}\tilde{k}^*\rho_{air}g}{\mu_a}\left[\frac{\Delta h}{\Delta \bar{z}}+\frac{\tilde{\rho}_a-\rho_{air}}{\rho_{air}}\right]\right)\tilde{C}_a$$

(Eq 4. 25)

where $\tilde{C}$, $\tilde{k}^*$, $\tilde{k}_{ra}$, $\tilde{\rho}_a$ and $\tilde{\alpha}_L$ represent the arithmetic averages between the two measuring points separated by $\Delta\bar{z}$ (m) and located on the same vertical direction and Δh (m), defined as $\Delta h = h(z_2)\text{-}h(z_1)$, is the pneumatic head difference. The selection of this type of mean is justified from the measuring conditions of real sites. Indeed, the concentration and pressure measurements might be available only at two points located near the soil surface.

4.4.3 Relative errors

To analyse in detail the bias introduced by both the diffusion-based quasi-analytical approach and the diffusion-dispersion-advection-based quasi-analytical approach, we used the definition of the relative error between the local vapour flux,

$F_{loc,z}$, calculated from the quasi-analytical approaches and the numerically calculated surface flux at the upper boundary of the soil column, $F_{surf,z}$, between the first two cells near the soil surface, considered as the reference value:

$$\delta = \frac{F_{loc,z} - F_{surf,z}}{F_{surf,z}} \qquad \text{(Eq 4. 26)}$$

The errors obtained using the diffusion-based quasi-analytical approach (see Eq 4. 16) are termed δ_{diff}, those obtained from the diffusion-dispersion-advection-based quasi-analytical approach (see Eq 4. 25) are termed $\delta_{diff-adv}$.

4.4.4 Predicted vapour fluxes under steady-state conditions

4.4.4.1 Influence of density-driven advection

In the following section, the concentration and pressure data of Run 1 at steady-state transport conditions are used to analyse the relative errors introduced by the two quasi-analytical approaches. Figure 4. 11 plots the quantified relative error as a function of the distance between the two points considered $\Delta\bar{z}$, for case studies A, B and C.

a) Case A

For short vertical distances between the two measuring points, the relative errors calculated by both approaches are very small at approximately 0,003 because density effects are negligibly small up to a depth of 50 cm; near the soil surface, the total vertical vapour fluxes can thus be predicted using the diffusive flux.

By neglecting the effect of density in approach 1, the error δ_{diff} increases when $\Delta\bar{z}$ increases. The real vapour flux is overestimated by a factor of 1,2 when $\Delta\bar{z}$ is higher than 50 cm. Indeed, this result is directly linked to the given high vapour concentrations in the lower layer of case study A. Using only vertical concentration gradients without taking into account the negative advective flux induced by the density of the vapours will thus lead to a high overestimation of the real vapour fluxes at the soil surface at steady-state conditions.

Assuming that vapour diffusion is the only transport mechanism, an apparent effective diffusion coefficient D'_{eg} can be quantified (Eq 4. 12) by applying Fick's law (Eq 4. 14). To obtain the same low vapour flux at the soil surface as given in the

database, D'_{eg} must be three times lower than the effective diffusion coefficient $\tilde{D}_{eg}$ used in approach 1.

However, using approach 2, the maximum error does not exceed 30% (Figure 4. 11 a). Moreover, once the maximum is reached at $\Delta\bar{z}$ = 0,5 m, the error decreases considerably. As expected, approach 2 allows an appropriate prediction of the vapour flux at the soil surface.

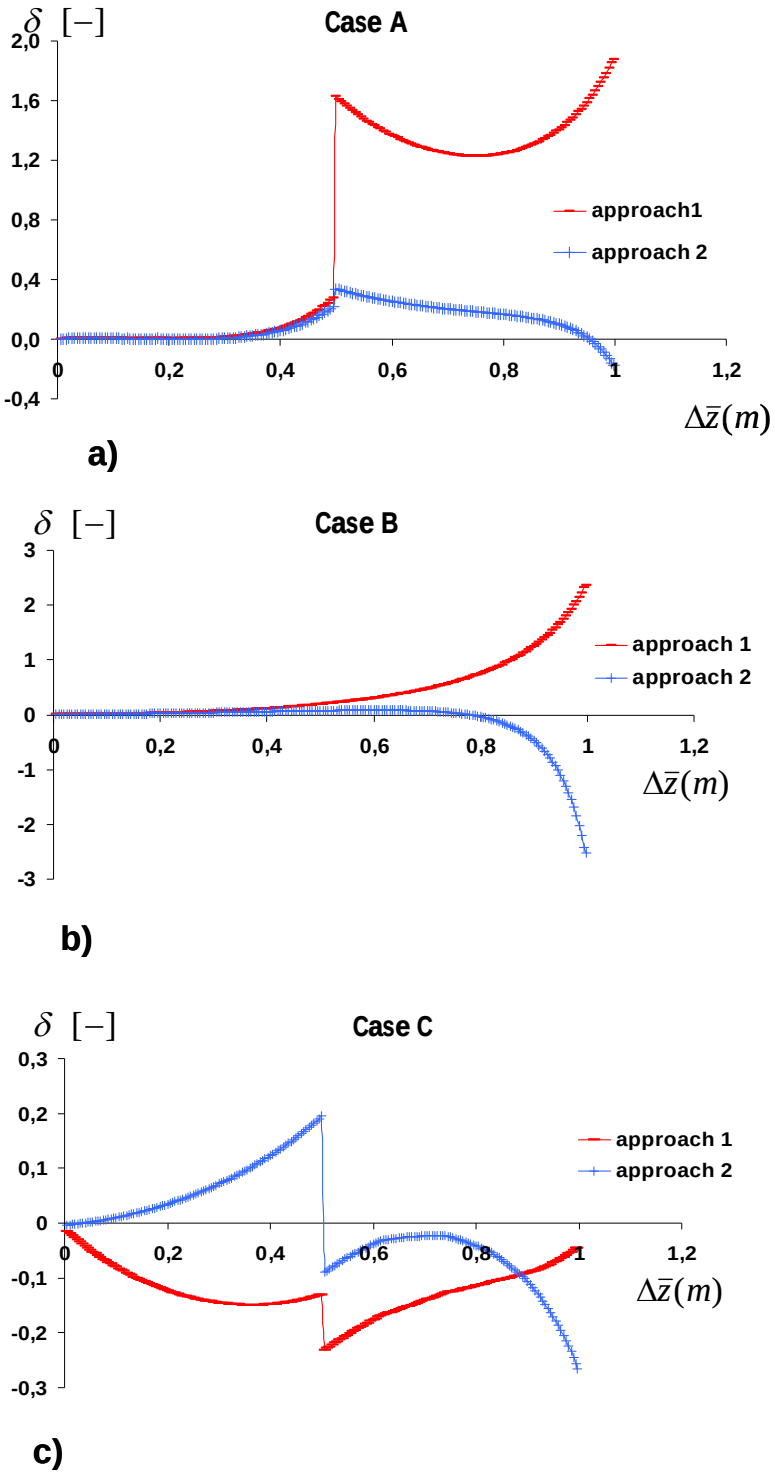


Figure 4. 11 : Relative error as a function of the distance between the two points Δz for vapour density-driven induced advection (Run 1) at steady-state transport conditions for: cases studies a) A, b) B and c) C

b) Case B

In the case of a homogeneous medium, approaches 1 and 2 accurately predict the vapour flux at the soil surface when the vertical measuring distance is small. As in case A, the density effect of vapour concentration is negligibly small as the high vapour concentrations are accumulated at the lower boundary of the soil column. Therefore, the apparent effective diffusion coefficient D'_{eg} using approach 1 is quite close to the effective diffusion coefficient $\tilde{D}_{eg}$, and the quantified relative error ε is low (see Figure 4. 12 b).

When $\Delta\bar{z}$ increases, the errors of the two approaches increase as the density effect is more significant in the lower part of the soil column. The relative error ε_{diff} increases up to 70%, corresponding to a D'_{eg} that must be 3 times lower than $\tilde{D}_{eg}$ (see Figure 4. 12 b).

For approach 2, the quantified error $\delta_{diff-adv}$ is negligible for vertical distances of up to 80 cm. When measuring point 2 is located at a depth of 80 cm or more, the vapour flux calculated using Eq 4. 25 underestimates the vapour flux at the soil surface given in the database by a factor of 2. This result is mainly due to the average vapour density between the two measuring points, which is based on an arithmetic mean that strongly overestimates the effect of the concentration field at the deeply located measuring point 2 when $\Delta\bar{z}$ increases.

c) Case C

The steady-state vapour flux of case C given at the soil surface is better predicted by approach 2 than by approach 1. When measuring point 2 is placed near the soil surface, the quantified relative error δ of approach 2 is approximately 0,003, compared with 0,01 obtained using approach 1. Up to a vertical distance of 15 cm, the error $\delta_{diff-adv}$ of approach 2 does not exceed 2%, whereas δ_{diff} reaches 10% in approach 1. For vertical distances higher than 15 cm, the quantified relative errors increase due to the heterogeneous concentration and pressure field and may be positive or negative. At the layer interface, a discontinuity of errors δ_{diff} and $\delta_{diff-adv}$ appears of approximately -23% and 19%, respectively (Figure 4. 11 c). As expected, approach 2 provides better estimates of the total vapour fluxes at the soil surface than approach 1.

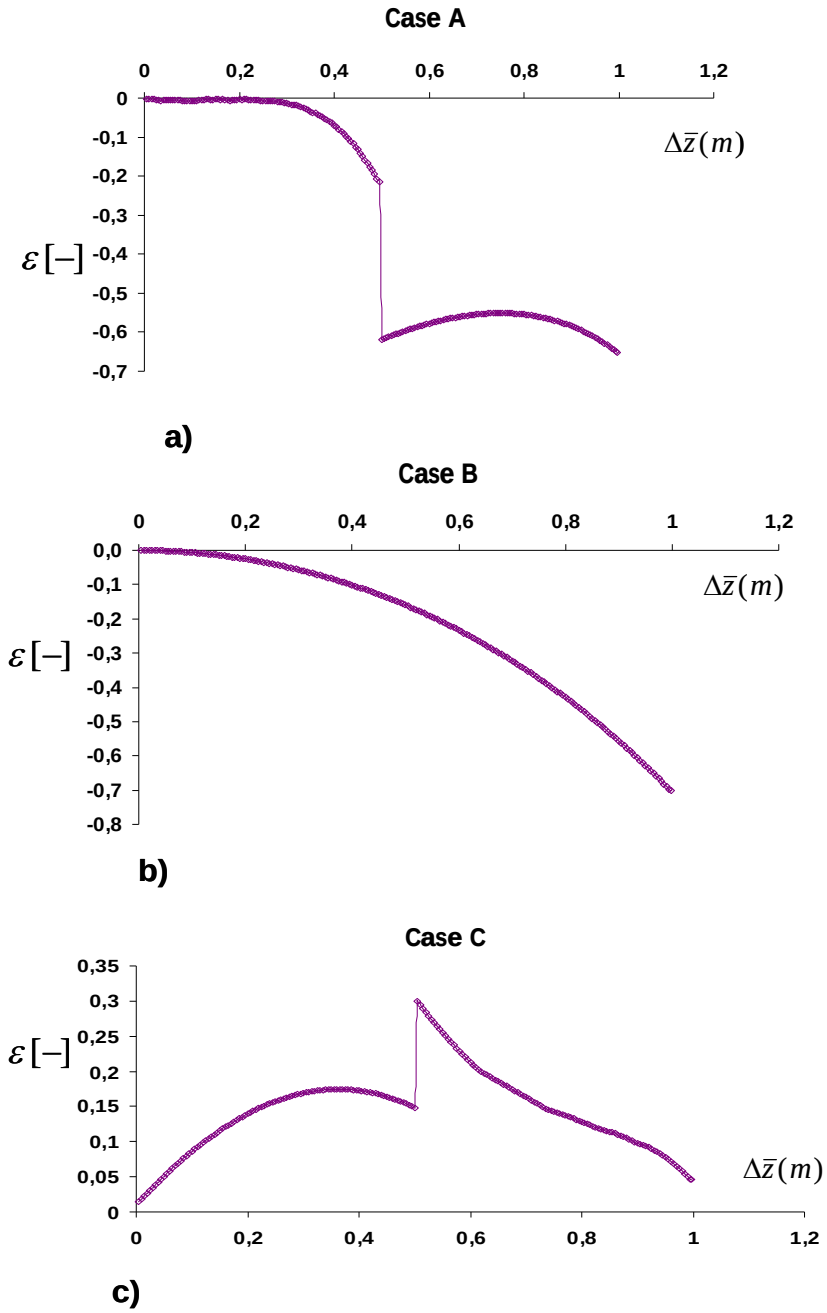


Figure 4. 12 : Relative error of the effective diffusion coefficient determined from approach 1, $\varepsilon = (D'_{eg} - \tilde{D}_{eg})/\tilde{D}_{eg}$, as a function of the distance between the two points Δz based on the database of Run 1 at steady-state transport conditions for case studies A (a), B (b) and C

4.4.4.2 Combined influence of density-driven advection and pressure-gradient-induced advection

In the following section, the concentration and pressure data of Run 4 at steady-state transport conditions are used to analyse the relative errors introduced by the two quasi-analytical approaches. Figure 4. 13 plots the quantified relative error as a function of the distance between the two points considered $\Delta\bar{z}$ for case studies A, B and C.

As already described in section 3.4.2, the slight overpressure added in Run 4 generated advective vapour fluxes caused by the gradient of driving pressure that dominate the mass fluxes caused by the vapour density in the studied homogenous soil (case B). However, in the layered soils (cases A and C), the overpressure selected at the upstream boundary does not have a predominant influence on the vertical mass flux of vapour. In these cases, vapour transport is affected by both the density vapour and the gradient of the driving pressure.

Without taking into account the advective flux induced by the overpressure in the quasi-analytical approach, the relative error δ_{diff} (see Figure 4. 13) is negative, indicating an underestimate of the vapour flux at the soil surface in cases B and C. In case study B, the maximum relative error δ_{diff} reaches 88% when $\Delta\bar{z}$ increases, as the diffusive vapour flux is negligible compared with the advective vapour flux caused by the vertical vapour pressure-gradient.

Applying the quasi-analytical approach 2 to the database of case studies A and C, the error $\delta_{diff-adv}$ does not exceed 0,5% as long as measuring point 2 is placed near the soil surface. Up to a depth of 50 cm, the error $\delta_{diff-adv}$ remains constant and does not exceed 8% for cases A and C or 30% for case B. Approach 2 provides significantly better estimates of total vapour fluxes at the soil surface than approach 1.

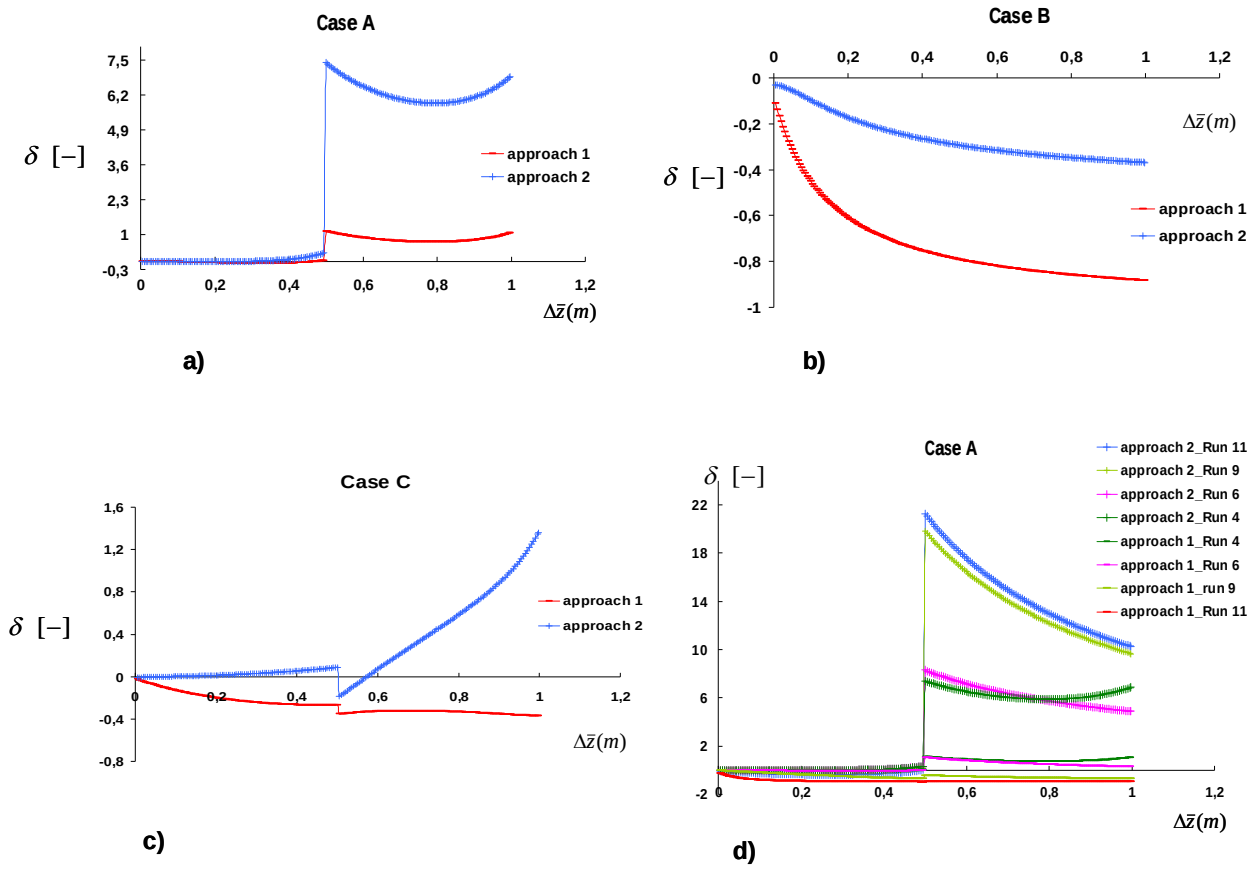


Figure 4. 13 : Relative error as a function of the distance between the two points Δz in the case of combined influence of densitydriven advection and pressure-gradient advection (Run 4) at steady-state transport conditions for cases studies a) A, b) B, and c) C, and d) relative errors at steady state for case A for Runs 4, 6, 9 and 11

However, once measuring point 2 is placed at a depth deeper than the layer discontinuity, the relative error increases significantly with increasing $\Delta\bar{z}$. The maximum error is 750% and 150% in soil column A and soil column C, respectively. However, in the homogeneous soil column (case B), the relative error remains nearly constant along the column. Let us analyse in more detail these relative errors of columns A and C for vertical distances of $\Delta\bar{z}$ higher than 50 cm. With increasing vapour pressure prescribed at the upstream boundary of the soil column (Runs 6, 9, and 11), the relative error $\delta_{diff-adv}$ increases (see Figure 4. 13 d). This result is caused by both the averaging process of the transport parameters of the quasi-analytical approach, which are taken as the mean values between the two different soil textures, and the vapour pressure gradient. This explains why the highest relative errors are obtained in Run 11 when measuring point 2 is located at a depth of 50 cm

or more.

It is worthwhile to note that the relative error δ_{diff} calculated for Run 6 is the smallest one. This result can be explained by the fact that the vertical TCE vapour profile at steady state is very close to that generated in Run 3, which represents the case of purely diffusive vapour transport (see Figure 4. 10 a).

4.5 Conclusions

The transport mechanisms of TCE vapours in partially water-saturated soil columns were studied under various flow and transport boundary conditions. The concentration and pressure database used was created for three different soil textures using a coupled numerical flow and transport model.

The obtained results confirm the findings of Cotel et al., (2011) that density-driven advection of TCE vapours may be a significant transport mechanism in natural soils. Indeed, when the soil column was subjected to high vapour concentrations without significantly increased vapour pressures, the dominant transport mechanism was advection caused by the vapour density effect. In this case characterised by a uniform water content profile, the TCE vapour concentration is accumulated at the bottom of the homogeneous soil column after 1.5 days. However, in a layered soil structure with highly non-uniform water content, DNAPL vapours may migrate more significantly towards the soil surface. The intrinsic permeability is an important parameter that significantly influences the vertical vapour concentration profile. The lower the intrinsic permeability, the lower the dimensionless Rayleigh number and density effect will be. This result is consisted with the findings of Cotel et al., (2011). However, the position of the fine sand layer greatly affects the total vapour flux leaving the soil column at the soil surface, strongly reducing the diffusive vapour mass flux when the effective gas diffusion coefficients are low due to the high water content. In general, for vapour concentrations lower than one-tenth of the DNAPL saturation concentration, the effect of vapour density may be neglected, and the vapour concentration profile is dominated by molecular diffusion.

The results of the conducted studies indicate that small driving pressure gradients resulting from local overpressure in the soil gas may create a significant ascendant vapour movement towards the soil surface. For the homogeneous soil column, the steady-state vapour concentration profile was characterised by normalised concentrations higher than 0.5 occupying 90% of the soil column height. Steady-state transport conditions were reached in the homogeneous medium-sized sand in only few minutes, whereas the presence of layer discontinuities significantly

increased the time required to reach steady state.

A detailed analysis was performed to quantify the errors introduced from two quasi-analytical approaches to evaluate the steady-state flux of vapours at the soil surface when the concentration profiles are strongly influenced by density-driven and pressure gradient-induced advection.

The relative errors associated with the quantification of the vapour fluxes at the soil surface were observed to depend on the dominant transport mechanisms, the evaluation of the vapour concentration and pressure in the porous medium and the selected quasi-analytical approach. Dridi and Schäfer (2006) revealed that the relative error can also depend on the transport regime and the average value of the dimensionless Henry constant.

For predominantly density-driven advective transport, the local mass flux calculated by the quasi-analytical approach 1 (based on Fick's first Law) is quite close to the given surface flux of cases A and B. This approach only slightly overestimates the real fluxes within the order of several percentages when the vertical distance between the two measurement points is less than 50 cm. Above this limit, the error increases significantly when increasing the vertical distance. Without taking into account the density effect, the apparent effective gaseous diffusion coefficient derived at the bottom of the soil column must be three times lower than the real effective diffusion coefficient to fit the mass flux given at the soil surface. Conversely, using the quasi-analytical approach 2 (based on Fick's first Law and Darcy's Law), the error becomes very small for almost all vertical distances. When driving pressure gradients become significant, the vapour fluxes calculated using the second approach are rather close to the vapour flux given at the soil surface when the vertical distance between the two measuring points is lower than 50 cm. Beyond the layer discontinuity, this approach systematically overestimates the vapour flux at the soil surface in cases A and C. This result is mainly caused by the heterogeneity of the soil and overpressure selected at the upstream boundary. The higher the vapour overpressure, the higher the relative errors calculated by approach 2.

In all of the studied cases with driving pressure gradients in the soil gas, the influence of longitudinal dispersion on the total vertical vapour flux was negligibly small compared with that of molecular diffusion. Neglecting the dispersive mass flux in quasi-analytical approach 2 is thus justified and simplifies its application in field cases. It is worthwhile to note that in field cases, density-driven advection and pressure-gradient-induced advection may simultaneously appear and represent dominant transport mechanisms. In this case, the quasi-analytical approach 2 permits the prediction of steady-state vapour fluxes at the soil surface with only a small bias.

Chapitre 5 : Etude expérimentale du panache de vapeurs de TCE dans SCERES et simulations numériques associées (SCERES1 et SCERES2)

SOMMAIRE

5.1 Expériences sur SCERES 141

5.2 Evolution du profil hydrique et de la température pendant les expériences 146

5.3 Caractérisation de la dalle 1 et la dalle 2 149

5.4 Pression de l'air du sol et concentration de vapeurs de TCE lors de SCERES1 et SCERES2 161

5.5 Simulation numérique de SCERES1 et SCERES2 181

Bilan du chapitre 204

Ce chapitre est consacré à l'étude de l'évolution du panache de vapeurs de TCE provenant de la zone source de pollution qui a été créée dans la zone non saturée de l'aquifère SCERES. En outre, nous avons étudié l'effet du battement de la nappe de l'aquifère SCERES et aussi l'effet de la mise en dépression dans le bâtiment « modèle » sur les concentrations et les pressions de vapeurs dans l'air du sol. Les caractéristiques des deux dalles de béton sont aussi décrites au début de ce chapitre. Nous allons ensuite analyser les résultats d'une étude comparative entre les concentrations de vapeurs mesurées et celles obtenues à partir des simulations numériques en utilisant le code multiphasique multiconstituant SIMUSCOPP.

5.1. Expériences sur SCERES

5.1.1 Déroulement de SCERES1

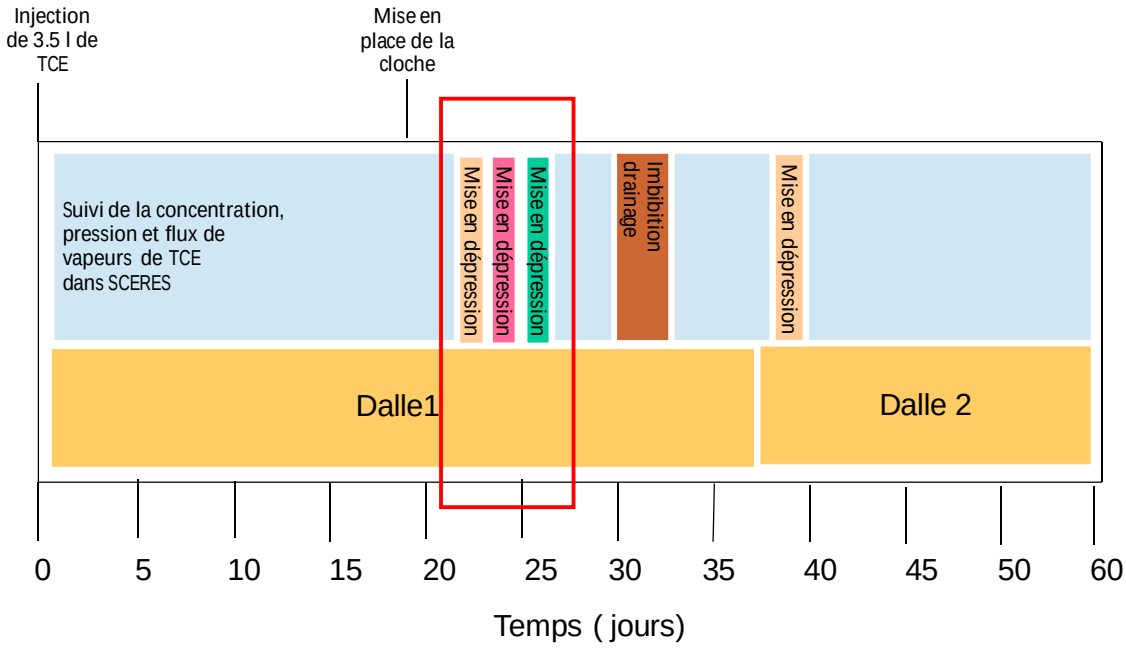


Figure 5. 1: Frise chronologique de l'expérience SCERES1

A t=0 jour, qui correspond au 06/09/2010, nous avons injecté 5,11 kg (3,5 l) de TCE en phase liquide dans le milieu poreux de SCERES, en présence de la dalle 1. La température, la pression atmosphérique, l'humidité relative, la vitesse et direction du vent, les pressions de l'air du sol, les concentrations et les flux de vapeurs de TCE ont été mesurés durant l'expérimentation, qui a duré environ 60 jours.

Le niveau de dépression qu'on peut obtenir couramment dans les bâtiments est en moyenne de l'ordre de 5 Pa. Dans nos expérimentations, nous avons appliqué trois niveaux de dépression de l'ordre de 5, 10 et 20 Pa pour trois différents niveaux de débit d'extraction de l'air de la cloche. La zone encadrée en rouge (Figure 5. 1) présente la période de mise en dépression en présence de la dalle 1 ; elle est plus détaillée dans la Figure 5. 2. En effet, du jour 22 au jour 23 après l'injection, nous avons appliqué un débit d'extraction dans la cloche de l'ordre de Q =1 $m^3.h^{-1}$. Nous avons réglé les ouvertures des trois vannes en haut de la cloche, conduisant à une perte de charge singulière plus ou moins prononcée, pour obtenir le niveau de dépression souhaité. Les mises en dépression pour ce débit d'extraction, 1B-1, 1A-1 et 1C-1 ont duré respectivement 2 heures 30 min, 3heures 45 min et 2 heures pour atteindre le régime permanent de transport dans la cloche (caractérisé par un palier de concentration maximale). Entre chaque mise en dépression, nous avons aéré la cloche pour revenir à un niveau de concentration en vapeurs de TCE proche de zéro.

Le débit 2 $m^3.h^{-1}$ a été appliqué à t=24 j avec les différents niveaux de dépression : 5 Pa qui a duré 2 h, et 10 et 20 Pa qui ont duré chacun 1 h et 50 min. A t=25 jours nous avons appliqué un débit d'extraction de l'ordre de 0.5 $m^3.h^{-1}$ pour un seul niveau de dépression de 5 Pa. Cette expérience a duré 4 h pour atteindre le régime permanent dans la cloche.

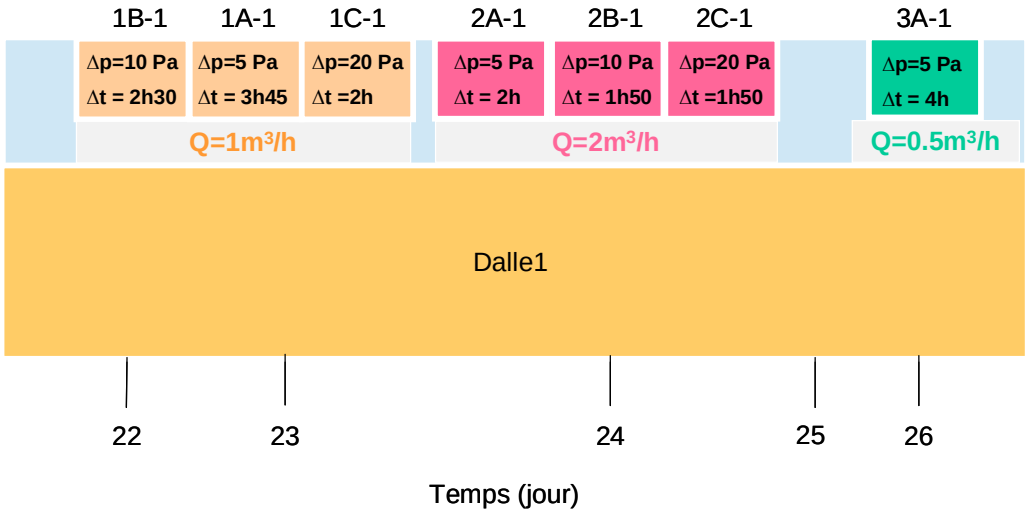


Figure 5. 2 : Zoom sur le déroulement de la mise en dépression pendant SCERES1 en présence de la dalle 1

Le battement de la nappe a été effectué au 30ème jour par la montée du toit de la nappe de 50 cm puis la descente du toit de la nappe de 50 cm deux jours après.

Afin de tester l'effet de la perméabilité de la dalle de béton sur le panache et le transfert de vapeurs de TCE dans zone non saturée de SCERES, la dalle 1 a été remplacée par la dalle 2 après 37 jours. Entre le 38ème et 39ème jour, nous avons appliqué successivement les mises en dépression de 10, 20 et 5 Pa dans la cloche (posée sur la dalle 2) avec un débit d'extraction Q = 1 $m^3.h^{-1}$.

5.1.2 Déroulement de SCERES2

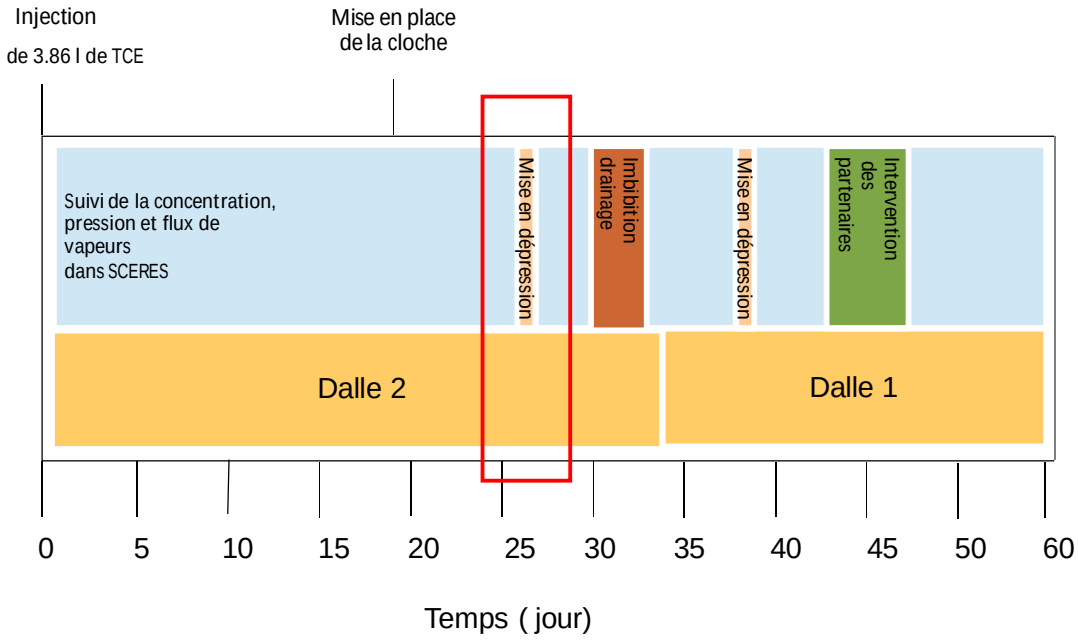


Figure 5. 3 : Frise chronologique de l'expérience SCERES2

Une injection de 5.64 kg (3.86 l) de TCE dans le milieu poreux de SCERES a été faite, en présence cette fois ci de la dalle 2, le 15/04/2011 qui correspond à la date du début de l'expérience SCERES2. Comme lors de SCERES1, le suivi des paramètres a été assuré durant toute l'expérimentation SCERES2. Après avoir installé la cloche sur la dalle 2 à t =19 jours, nous avons choisi d'appliquer un seul niveau de débit d'extraction de l'ordre de 1 $m^3.h^{-1}$.

La première mise en dépression dans la cloche a été effectuée en présence de la dalle 2 le 27ème jour (cf. cadre rouge de la Figure 5. 3). Les niveaux de mise en dépression appliqués dans la cloche étaient : 10 Pa, 5 Pa et 20 Pa. Ils ont duré respectivement 3 heures, 3heures 20 min et 3 heures 30min (Figure 5. 4). Entre chaque mise en dépression nous avons aéré la cloche.

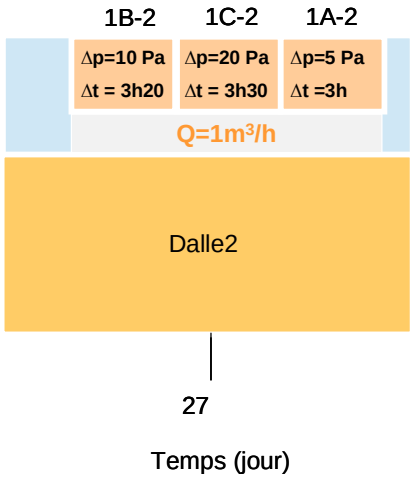


Figure 5. 4 : Déroulement de la mise en dépression pendant SCERES2 en présence de la dalle 2

Le battement de la nappe a commencé le 31ème jour par la montée du toit de la nappe de 50 cm, suivie de la descente du toit de la nappe de 50 cm deux jours après.

Le changement de la dalle a eu lieu le 34ème jour. À t= 37 jours, et après avoir remis la cloche sur la nouvelle dalle (dalle 1), des dépressions de 10, 5 et 20 Pa ont été appliquées dans la cloche. À nouveau, des mesures de concentrations de vapeurs ont été effectuées dans la cloche pendant la mise en dépression et directement sous la dalle avant et après chaque mise en dépression.

5.1.3 Réseau de mesures choisi

Le suivi de l'évolution d'une part des concentrations de vapeurs de TCE et de pressions de l'air du sol dans la zone non saturée et d'autre part les flux de vapeurs de TCE à la surface du sol et à la surface de la dalle de béton a été assuré par le réseau de points de prélèvement situés à différents emplacements et profondeurs de la zone non saturée de SCERES. Pour cela nous avons effectué des prélèvements spatio-temporels concentrés dans le périmètre proche de la dalle de béton (Figure 5. 5).

Au niveau de la dalle de béton pendant SCERES1, des mesures de concentration et de pressions de vapeurs ont été effectuées sous la dalle à z=0 m. Quant à la mesure de flux de vapeurs, elle a été effectuée sur la dalle (à z= 0,1 m) (Figure 5. 6). Pendant l'expérimentation SCERES2, nous avons gardé les mêmes points de mesures

de pression et de concentrations de vapeurs de TCE sous la dalle (à z=0 m) et nous avons ajouté deux autres profondeurs de mesures de concentrations de vapeurs de TCE à la profondeur 0,2 m et 0,4 m (Figure 5. 7). Les mesures de flux de vapeurs de TCE ont été effectuées sur la dalle tout en gardant la cloche ouverte.

Dans les chapitres suivants nous allons nous intéresser aux résultats expérimentaux et numériques obtenus aux points GA1 (distincts du centre de la zone source de X=2,95 m), H(X=1 m), GM1 (X=3,4 m), GL (X=2,1 m) et au point central de la dalle (X= 1,75 m) (Figure 5. 5).

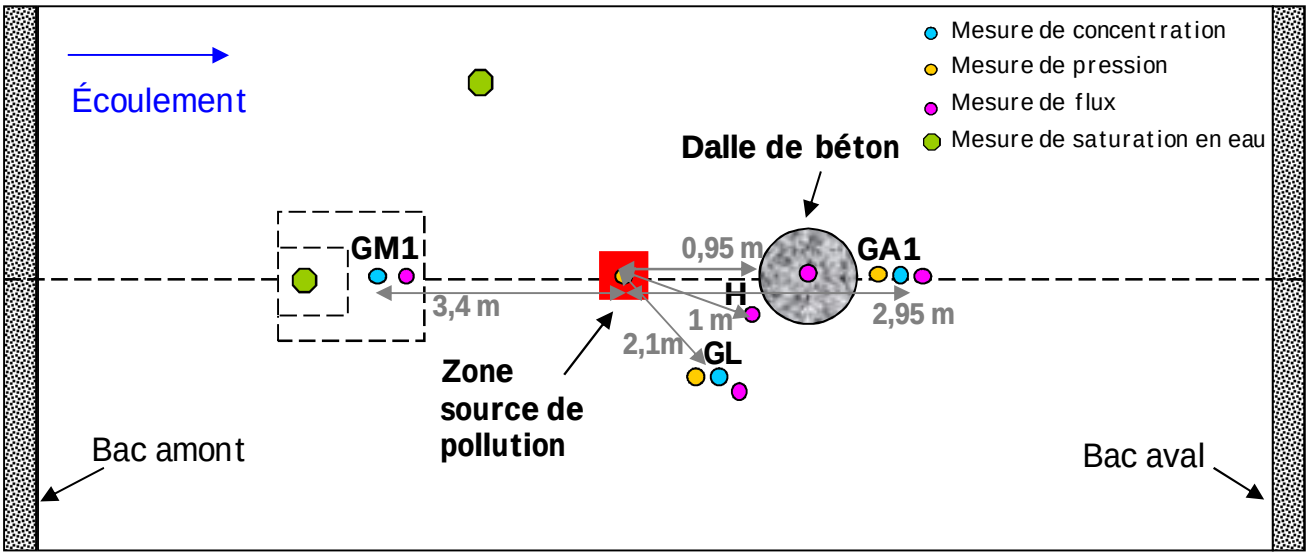


Figure 5. 5 : Réseau de mesures sur SCERES

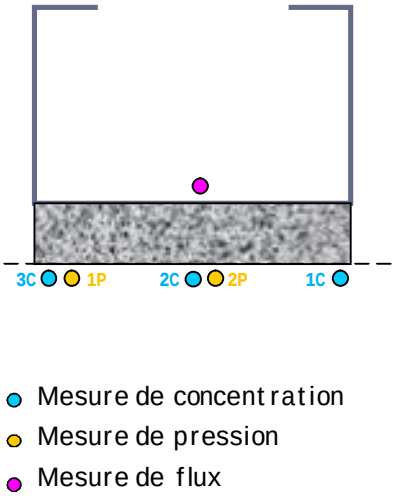


Figure 5. 6: Coupe longitudinale le long de la dalle: mesures effectuées pendant SCERES1

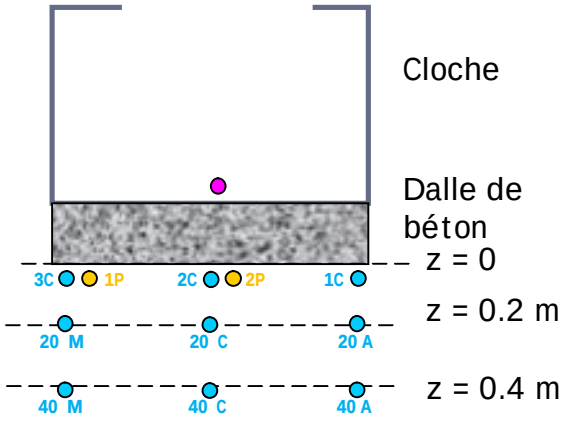


Figure 5. 7: Coupe longitudinale le long de la dalle : mesures effectuées pendant SCERES2

5.2 Evolution du profil hydrique et de la température pendant les expériences

5.2.1 Profil hydrique

La Figure 5. 8 présente les profils hydriques mesurés sur SCERES par la sonde S1, située hors blocs de sable fin, avant et pendant les deux expériences sur SCERES. Les courbes rouges et bleues correspondent aux profils hydriques mesurés respectivement avant et pendant SCERES1. Quant aux courbes vertes, jaunes et noires, elles présentent celles mesurées avant et pendant SCERES2.

Le profil hydrique est caractérisé par une zone de forte saturation en eau (Figure 5. 8). En effet, les capteurs installés à l'interface sable fin /sable moyen (à 50 cm de profondeur) indiquent des saturations plus élevées que les capteurs dans le sable moyen. Cela est du à la forte rétention d'eau qui caractérise le sable fin à cause de la différence de courbes de pressions capillaires qui se traduit par un saut de saturations à l'interface entre ces deux milieux.

En plus, à partir de la comparaison des profils hydriques entre l'expérience SCERES1 et SCERES2, nous remarquons que les saturations en eau mesurées pendant SCERES2 sont légèrement supérieures à celles mesurées pendant SCERES1. Cela revient au fait que l'expérience SCERES1 a été menée après la période estivale. Quant à SCERES2, elle a été menée après la période hivernale (période pluvieuse).

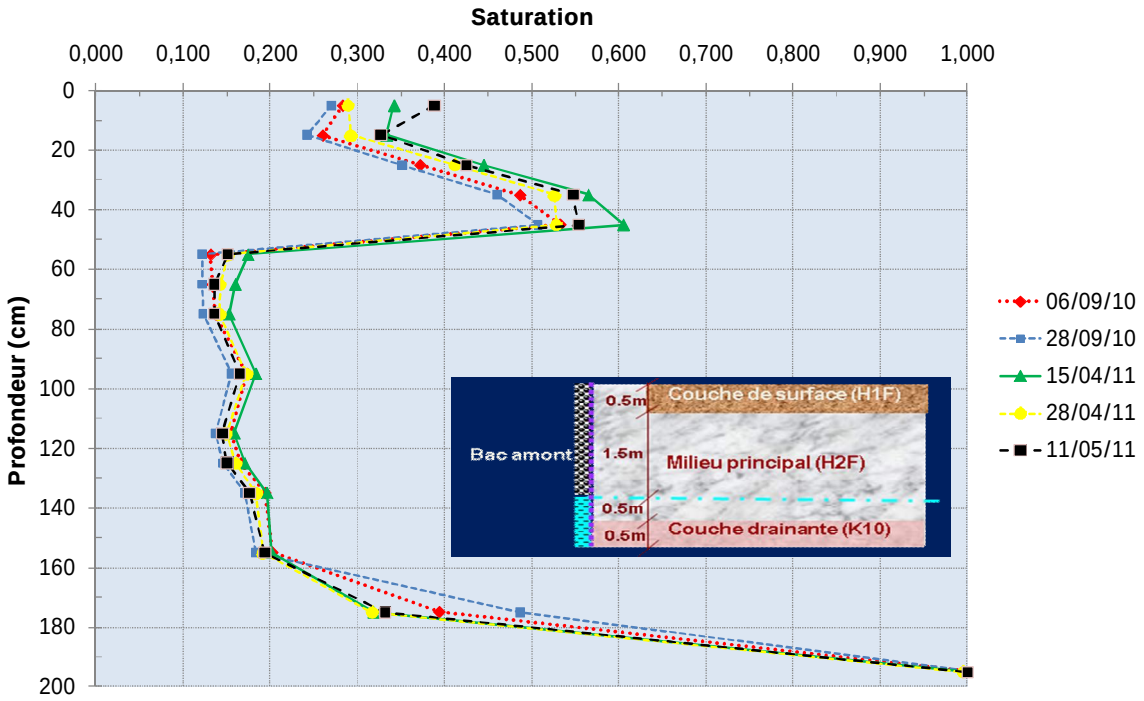


Figure 5. 8 : profils hydriques relevés au tube d'accès S1

Avant les expériences SCERES 1 et SCERES2, nous avons saturé le bassin SCERES en eau et nous avons ensuite drainé jusqu'à atteindre la profondeur moyenne du toit de la nappe de 2m par rapport à la surface du sol. Afin de créer un écoulement d'eau dans le bassin de SCERES, le toit de la nappe a été incliné de 12 cm, ce qui correspondait à un gradient hydraulique de 5‰. Au bac amont du bassin expérimental, la zone saturée se trouve à la profondeur 1,94 m et au bac aval à 2,06 m par rapport à la surface du sol (Figure 5. 9). Les pressions de l'air à ces deux endroits correspondent à la pression atmosphérique plus la colonne d'air au dessus du toit de la nappe. Ce qui fait que le toit de la nappe est soumis à une pression atmosphérique à la limite amont et aval légèrement différente : P_{amont}= 100023,28 Pa et P_{aval}=100024,72 Pa.

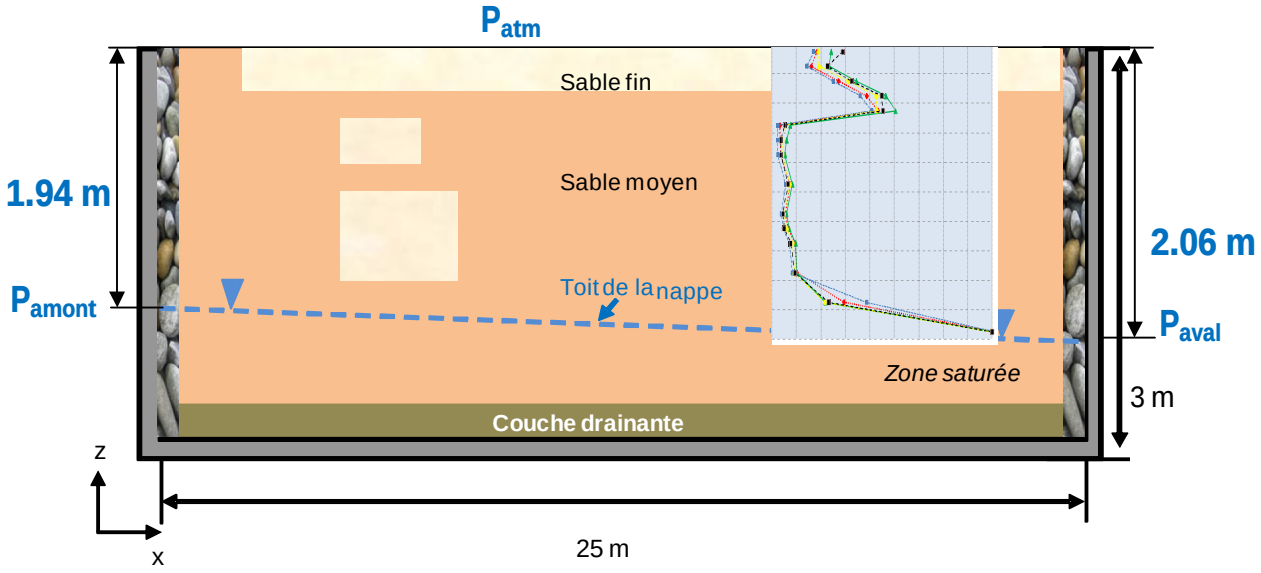


Figure 5. 9 : Conditions aux limites du bassin SCERES

5.2.2 Température

Vu l'importance de l'effet de la température du sol, sur la volatilisation de la phase liquide de la zone source de pollution et sur le flux diffusif des vapeurs de TCE en milieu poreux non saturé, des thermocouples ont été installés à plusieurs profondeurs dans la zone non saturée de SCERES. Dans la Figure 5. 10, nous avons choisi de présenter les températures mesurées dans la zone non saturée pendant SCERES1 et SCERES2 à la profondeur 0,45 m, 0,65 m et 1,25 m sur une période de 3 semaines.

Pour la période choisie, la variation de la température a été de l'ordre de 2,3°C pendant SCERES1 et de plus de 5°C pendant SCERES2. En ce qui concerne l'écart entre les températures de SCERES1 et SCERES2, il varie entre 0 et un maximum de 4°C enregistré à la profondeur 0,45 m à t=15 jours.

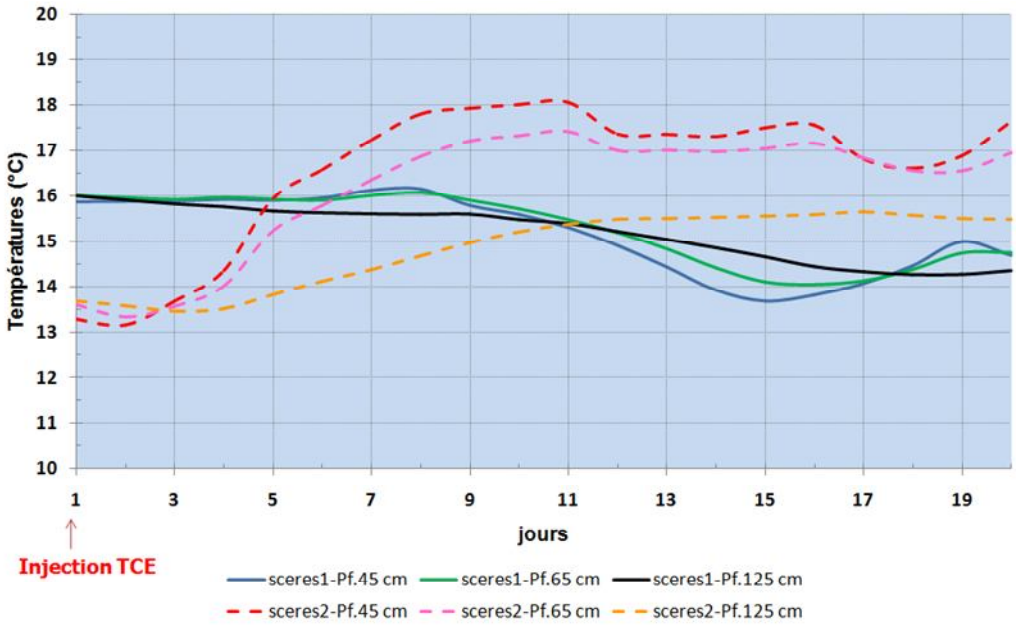


Figure 5. 10: Température mesurée aux profondeurs 0,45, 0,65 et 1,25 m lors de SCERES1 et SCERES2

Pour la simulation numérique du transport de vapeur de TCE, lors de SCERES1 et 2, nous allons considérer une température moyenne sur toute la période d'enregistrement. Lors de SCERES1, la température moyenne du sol a été de l'ordre de 15 °C, tandis que pendant SCERES2 le sol avait une température moyenne de 16 °C.

5.3 Caractérisation des dalles 1 et 2

5.3.1 Perméabilité

La détermination de la perméabilité de la dalle est importante pour pouvoir quantifier le débit d'air qui traverse la dalle de béton en cas d'une convection induite par le gradient de pression motrice.

Afin de mieux quantifier le débit d'air qui traverse la dalle 1 et la dalle 2, des essais de perméabilité sur les deux dalles de béton ont été effectués en utilisant les différentes méthodes décrites dans le chapitre 2(Cf. paragraphe 2.5.1).

5.3.1.1 Perméamètre

Grâce au dispositif de mesure de perméabilité (le « perméamètre ») nous avons pu tracer les courbes de la perte de charge motrice ΔP_{2g} à travers la dalle de béton en fonction de la variation du débit d'injection de l'air dans la cloche pour la dalle 1 et la dalle 2.

a) Perméabilité globale de la dalle 1

La Figure 5. 11 illustre les pertes de charge motrice mesurées à travers la dalle 1 ΔP_{2g} en fonction du débit d'injection Q. A partir de l'équation Eq 2.14 (cf. chapitre 2) et en tenant compte des dimensions géométriques de la dalle, nous avons déterminé la perméabilité de la dalle 1 pour chaque couple de mesure (ΔP_{2g}, Q). Les courbes de pertes de charge motrice ΔP_{2g} sont une fonction linéaire du débit d'injection, soulignant que dans la gamme de pression étudiée le fluide peut être considéré comme fluide incompressible et le régime d'écoulement satisfait au régime de Darcy. Ainsi, la perméabilité intrinsèque moyenne de la dalle 1 a pu être déduite de l'ordre de 5,3 10^{-12} m².

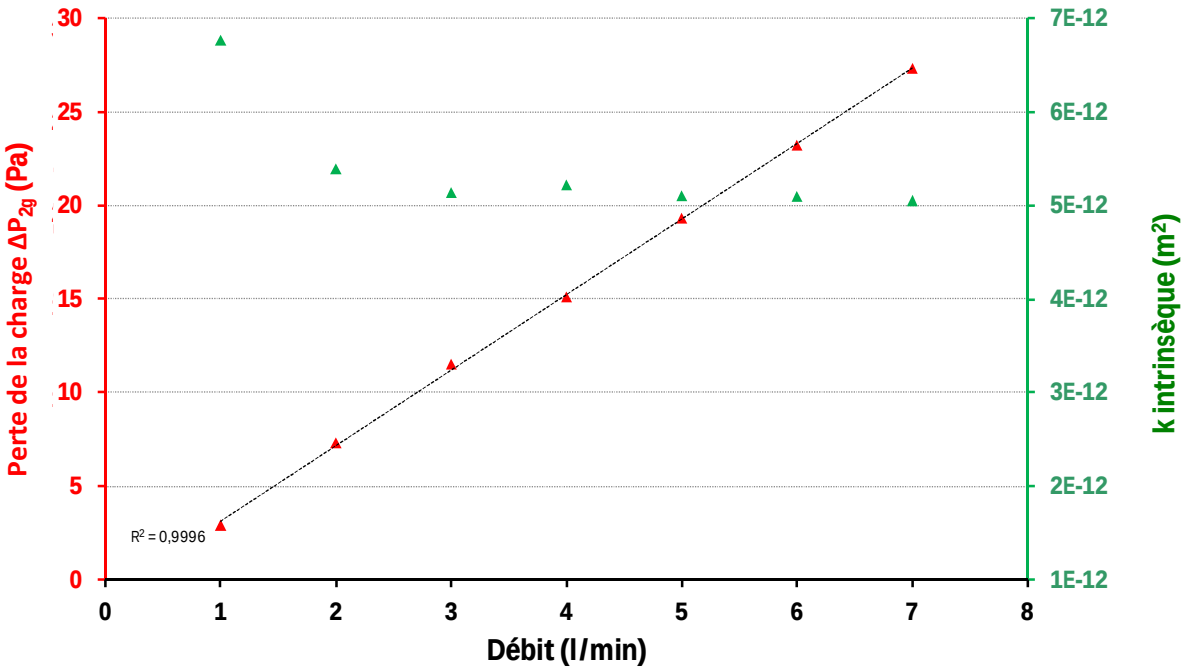


Figure 5. 11 : Essai de perméabilité globale de la dalle 1

b) Perméabilité de la Dalle 2

La Figure 5. 12 montre les pertes de charge motrice mesurées à travers la dalle 2 ΔP_{2g} en fonction du débit d'injection Q. A partir de ces résultats nous avons pu déterminer la perméabilité globale (macroscopique) de la dalle 2 ; elle a été quantifiée à environ 2,0 10^{-12} m². Les résultats obtenus montrent que la dalle 1 est plus perméable que la dalle 2.

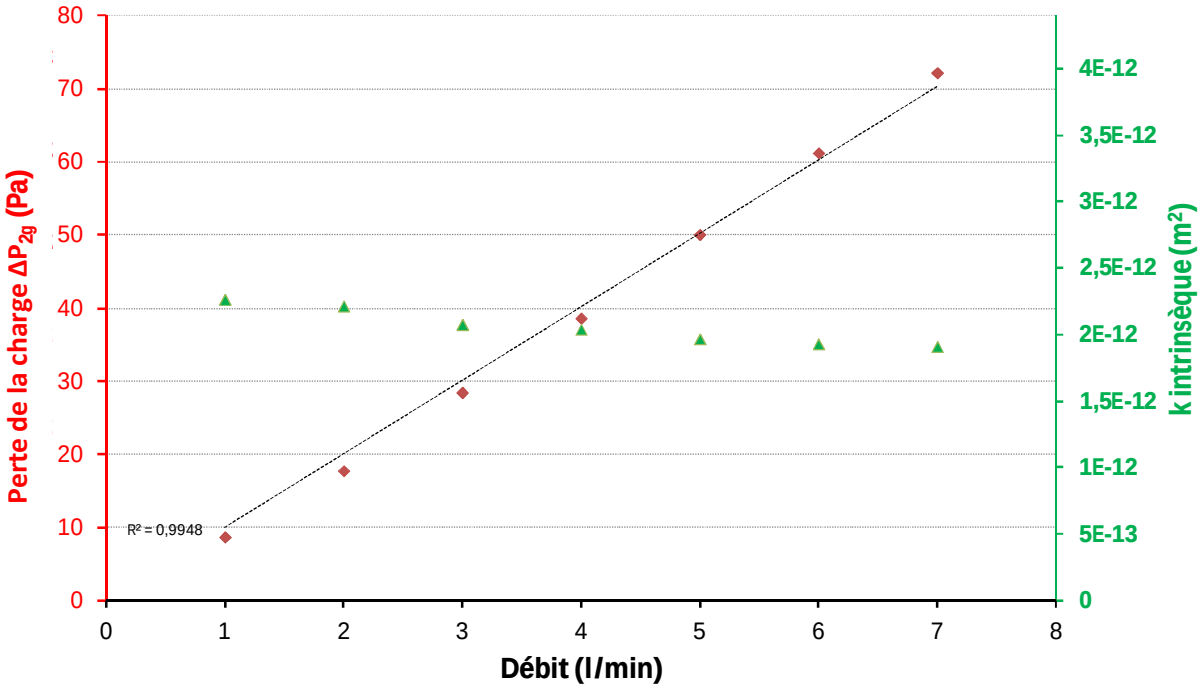


Figure 5. 12 : Essais de perméabilité globale de la dalle 2

5.3.1.2 Perméabilité locale obtenue à partir de TinyPerm

Les mesures de perméabilité locale au moyen de TinyPerm ont été effectuées seulement sur la dalle 2. Vu la taille des fissures de la dalle 1, l'utilisation de TinyPerm n'a pas abouti à des résultats pertinents.

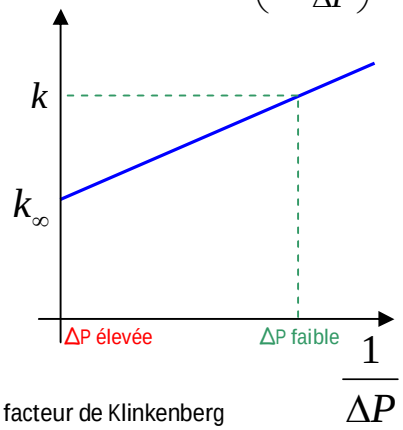
Les mesures effectuées sur la dalle 2 moyennant l'outil TinyPerm ont donné une perméabilité locale moyenne de la dalle 2 de l'ordre de 7,6 10^{-13} m².

5.3.1.3 Bilan des mesures de la perméabilité

Les différents résultats de la perméabilité obtenus sur la dalle 1 et 2 par

l'intermédiaire du perméamètre et du TinyPerm ainsi que les perméabilités données par le constructeur des deux dalles (le CSTB) au début des expérimentations sont résumées dans le Tableau 5. 1.

Tableau 5. 1 : Perméabilité de la dalle 1 et dalle 2

	Perméabilité de la Dalle 1 k (m²)	**Perméabilité de la Dalle 2 k (m²)**	**Courbe de la perméabilité k en fonction de la perte de charge ΔP**
CSTB	$2\ 10^{-14}$	$1\ 10^{-13}$	$k = k_\infty \left(1 + \frac{C_k}{\Delta P}\right)$  C_k : facteur de Klinkenberg
Perméamètre	$5{,}3\ 10^{-12}$	$2{,}0\ 10^{-12}$	
Tiny perm	_____	$7{,}6\ 10^{-13}$	

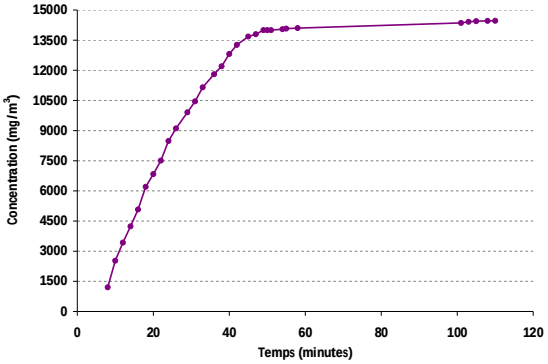
Les perméabilités données par notre partenaire CSTB ont été obtenues en appliquant une forte surpression sur les dalles allant jusqu'à 150 mbar. Ainsi les perméabilités k (m²) de des dalles représentent les k_∞ (k-apparente) pour des pertes de charges **ΔP** très importantes (Cf. Figure dans le Tableau 5. 1). Tandis que nos perméabilités k ont été mesurées en appliquant des faibles surpressions où la perte de charge **ΔP** à travers la dalle ne dépasse pas 70 Pa, d'où la différence entre les deux niveaux de perméabilités (Cf. Figure dans le Tableau 5. 1).

Les perméabilités obtenues à partir de notre perméamètre seront utilisées pour la modélisation numérique et le calcul semi-analytique du transfert des vapeurs de TCE à travers les deux dalles de bétons, car elles ont été quantifiées « in situ ». De plus, dans le cas de la dalle 2, les mesures expérimentales sur SCERES sont en accord avec les résultats obtenus avec le Tinyperm. Dans la suite de notre étude, les dalles de béton « macro et micro-fissurées » seront considérées comme étant des milieux homogènes équivalents.

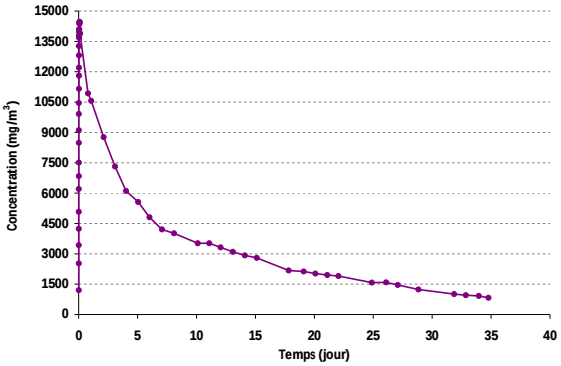
5.3.2 Coefficient de diffusion effectif

5.3.2.1 Coefficient de diffusion effectif dalle 1

Afin de déterminer le coefficient de diffusion effectif D_{eg1} de la dalle 1, nous avons introduit 9 ml de TCE en phase liquide à l'intérieur de la cloche ce qui correspond à une concentration de vapeur de TCE saturante C_{sat} égale à 3425 ppmv. La Figure 5. 13 montre l'évolution de la concentration de vapeur de TCE à l'intérieur de la cloche. Après la mise en place de TCE dans la cloche, la concentration de vapeur de TCE a mis à peu près une heure pour atteindre le régime permanent avec une concentration maximale C_{max} égale à 2700 ppmv (78% de C_{sat}) (cf Figure 5. 13 a). Ce palier est maintenu pendant 1 heure. Dès que la masse totale du TCE en phase liquide est nulle, les concentrations de vapeurs de TCE commencent à diminuer en fonction de temps (Figure 5. 13 b). Cette perte de masse s'expliquerait par la diffusion des vapeurs de TCE depuis la cloche à travers la dalle de béton. L'enregistrement des concentrations de vapeurs de TCE sous la dalle, initialement propre en TCE, a montré que, en moyenne, le pic de concentrations de vapeurs de TCE est observé au bout de 3 jours après le début de l'expérience (Figure 5. 14). Ceci dit, ce pic, qui correspond au régime permanent, varie en fonction du point sous la dalle. Par exemple, il est atteint au bout d'une demi-journée au point 1C et au bout de 5 jours au point 2C. Le régime permanent est suivi d'une diminution de la concentration de vapeurs de TCE sous la dalle à cause de l'appauvrissement de la concentration des vapeurs de TCE dans la cloche. Le niveau de concentration de vapeurs de TCE sous la dalle varie aussi en fonction du point de mesure. Nous remarquons que les concentrations de vapeurs de TCE sont plus élevées au point 1C. Les plus faibles valeurs ont été mesurées au niveau du point 3C. Cela nous amène à constater que le point 1C se situe probablement sous une partie de la dalle 1 comportant un taux de fissuration élevé. Au point 2C le taux de fissuration est moins important et il est beaucoup plus faible au niveau du point 3C. Ces interprétations sont en accord avec les observations visuelles d'une distribution de fissures non-uniformes discutées dans le chapitre 2 (cf Figure 2.9).



a) évolution au début de l'expérience



b) évolution sur la durée totale de l'expérience

Figure 5. 13 : Concentration de vapeurs de TCE dans la cloche_Dalle 1

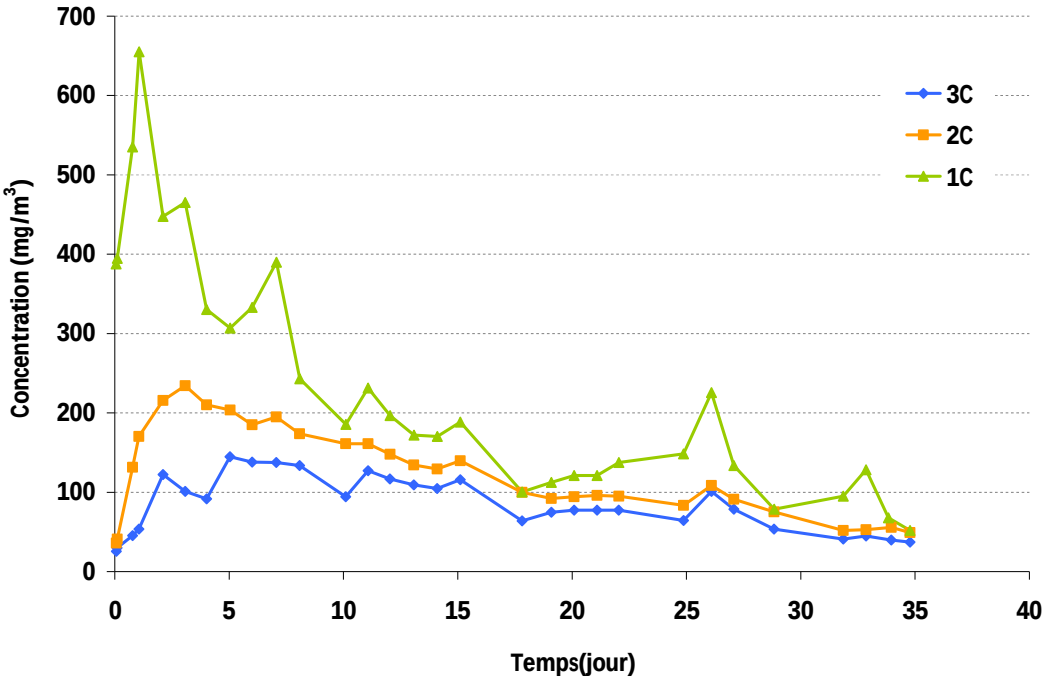


Figure 5. 14 : Concentrations de vapeurs de TCE mesurées en fonction du temps sous la dalle aux points de mesures 1C, 2C et 3C _Dalle 1

Pour déterminer le coefficient de diffusion effectif de la dalle 1 nous avons eu recours à deux méthodes.

a) Cup method

À partir de la perte de masse dans la cloche, traduit par le transfert des vapeurs de TCE par diffusion vers le sous-dalle, nous pouvons déterminer le coefficient de diffusion effectif de la dalle 1 D_{eg1}. Au moyen de « cup method » (cf. Eq 2. 21 chapitre2) nous avons obtenu, à l'état stationnaire, un coefficient de diffusion effective D_{eg1} égale à 1,9 10^{-8} m²/s.

b) Méthode par simulation numérique du transport diffusif

Cette partie est consacrée à la détermination du coefficient de diffusion effective D_{eg} de la dalle 1 par simulation au moyen du code numérique 1D déjà utilisé dans le chapitre 4 sur la colonne de milieu poreux, de 200 mailles. Les conditions aux limites et initiales définies au chapitre 4 ont été adaptè pour le notre cas. La colonne comportera deux milieux poreux : la dalle 1 sur 10 premiers centimètres proche de la surface de la colonne, et le sable moyen sur le reste de la colonne (90 cm) pour représenter un milieu poreux très diffusif (Figure 5. 15). Le signal d'entrée (C_{INJ}) a été défini à la surface de la colonne qui représente l'interface dalle/cloche (Figure 5. 15).

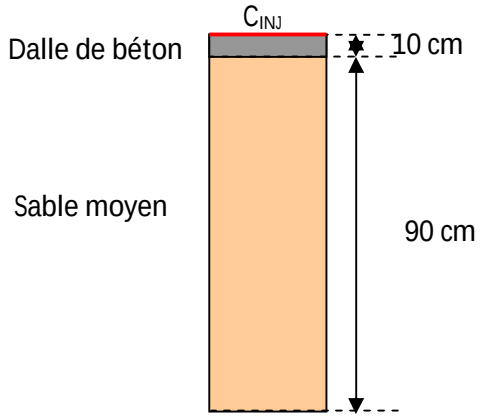


Figure 5. 15 : Colonne du milieu poreux

C_{INJ} n'est que la concentration de vapeurs de TCE mesurée dans la cloche quand celle-ci commence à diminuer, après l'atteinte de la concentration C_{max} au bout de 2 heures (Figure 5. 16).

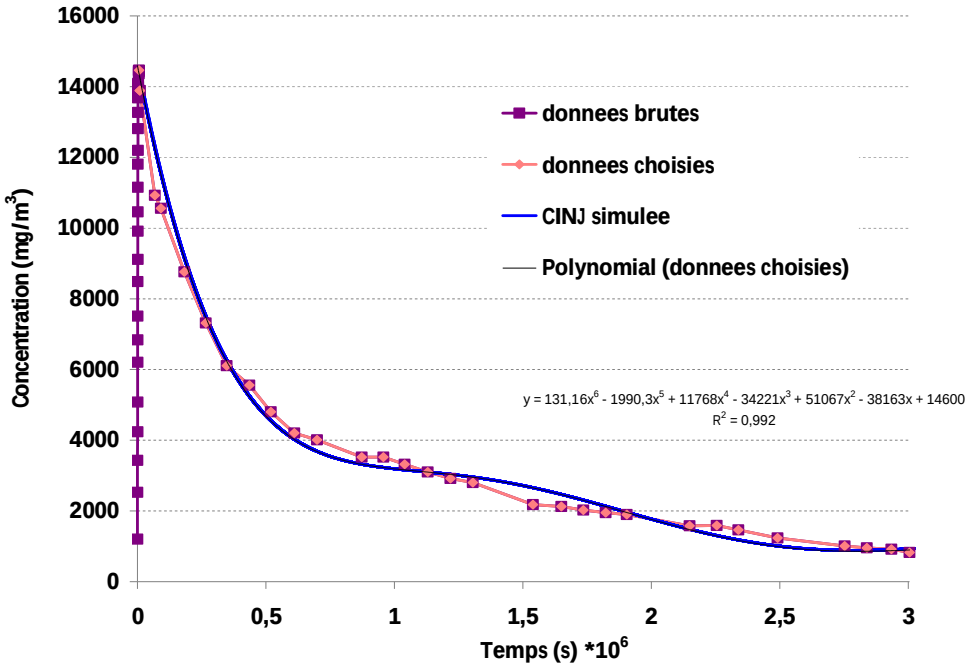


Figure 5. 16 : Evolution de concentration de vapeurs de TCE mesurée dans la cloche et approchée par une courbe de tendance

Pour pouvoir introduire ce signal dans le code numérique nous l'avons approché par une courbe de tendance polynomiale d'ordre 6 (Figure 5. 16). La description de la concentration injectée C_{INJ} ($mg.m^{-3}$) à l'interface dalle/cloche est décrite sur les deux phases de l'évolution de la concentration de vapeurs dans la cloche (avant et après l'atteinte du palier à 6000 s) :

Pour $0 < t \leq 6000$ s : $C_{INJ} = C_{max} = 14600\ mg/m^3$

Pour $t > 6000$ s :

$$C_{INJ} = C(t) = 131{,}16 \times t^6 - 1990{,}3 \times t^5 + 11768 \times t^4 - 34221 \times t^3 + 51067 \times t^2 - 38163 \times t + 14600$$

(Eq 5. 1)

L'Eq 5.1 a été appliquée jusqu'au 35ème jour de l'expérience.

Différents cas ont été simulés en faisant varier la tortuosité de la dalle 1 afin de rapprocher le plus possible les concentrations de vapeurs de TCE simulées à la sortie de la dalle à la concentration moyenne mesurées expérimentalement sous la dalle. Le coefficient de diffusion effective de la dalle 1 est ainsi déterminé à partir de celui du sable moyen qui est égale à $1{,}41\ 10^{-6}\ m^2s^{-1}$.

Les résultats montrent que, en calculant la différence de l'aire ΔA ($mg.m^{-3}.s$) entre la courbe expérimentale et les courbes de concentrations simulées sous la dalle, la concentration simulée à partir d'un coefficient de diffusion effective global de la dalle 1 de l'ordre 1/200ème de celui du sable moyen ($0.005*D_{eg-sb}$) est la proche de la concentration moyenne mesurée sous la dalle (Figure 5. 17). Les concentrations de vapeurs simulées à partir d'un coefficient de diffusion effective global de la dalle 1 de l'ordre 1/100ème et 1/150ème de celui du sable moyen (respectivement $0.01*D_{eg-sb}$ et $0.0066*D_{eg-sb}$) surestiment la concentration de vapeurs moyenne mesurée sous la dalle pendant l'essai de diffusion, tandis que celle simulée à partir d'un coefficient de diffusion effective global de la dalle 1 de l'ordre 1/300ème la sousestime.

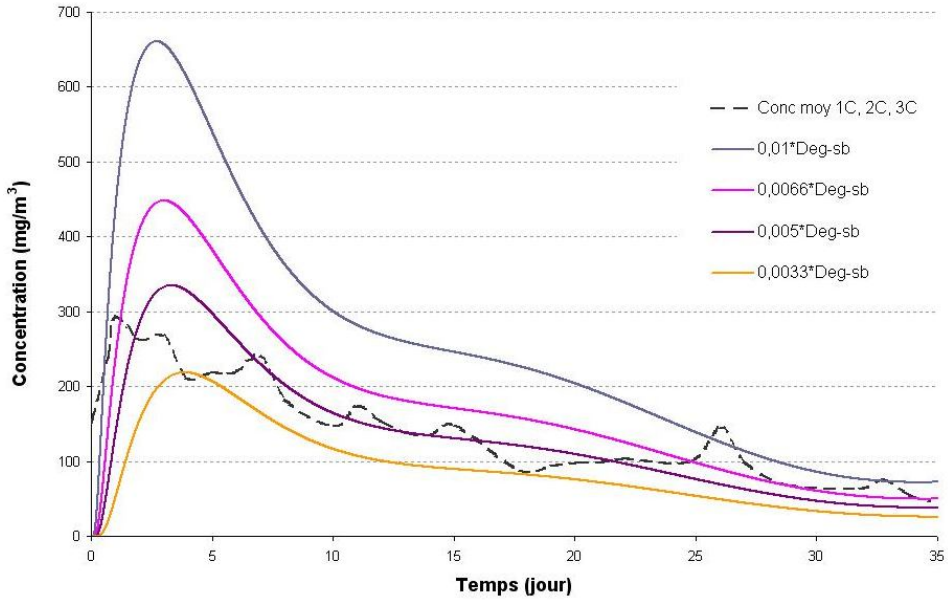


Figure 5. 17 : Courbes de concentration moyenne de vapeurs de TCE calculée et mesurées sous la dalle

La Figure 5. 18 présente les concentrations de vapeurs mesurées ponctuellement sous la dalle 1 au point 1C, 2C et 3C et celles simulées à l'aide du modèle d'écoulement et transport 1D. Nous remarquons, après le calcul de l'aire ΔA, que le coefficient de diffusion effective de la dalle 1 au niveau du point 1C est de l'ordre de 1/90ème de celui du sable moyen ($0.011*D_{eg-sb}$). Il est de l'ordre de 1/230ème de celui du sable moyen ($0.0043*D_{eg-sb}$) au niveau du point 2C et de l'ordre de 1/300ème de celui du sable moyen ($0.0033*D_{eg-sb}$) au niveau du point 3C. Ceci confirme la non homogénéité de la dalle 1 qui entraîne un niveau de concentration et temps d'arrivée variable en fonction de la position sous la dalle 1.

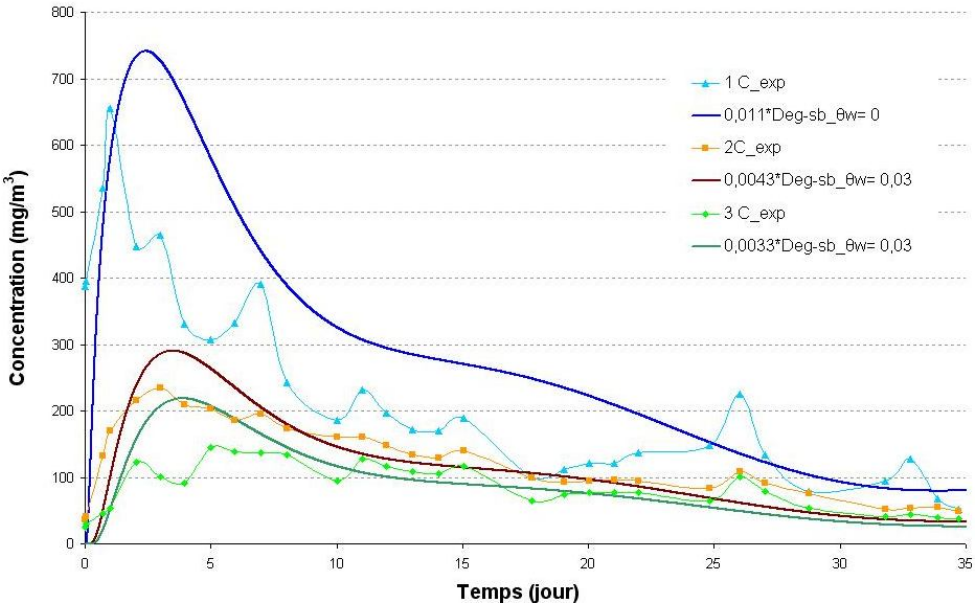


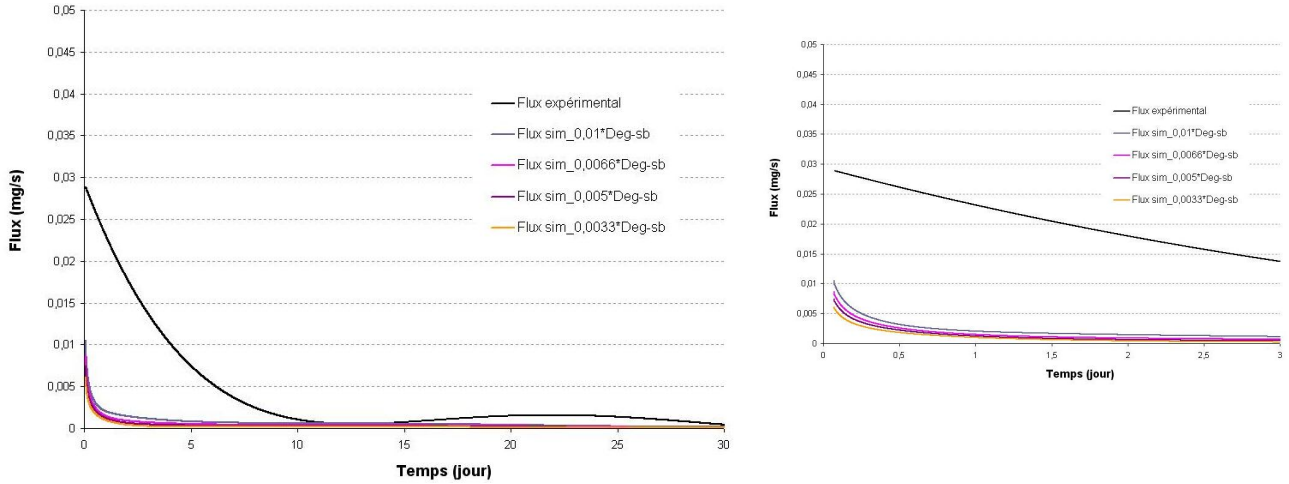
Figure 5. 18 : Courbes de sortie des concentrations de vapeurs de TCE calculées et mesurées sous la dalle

Dans la suite nous présentons les flux de vapeurs simulées à l'entrée de la dalle qui correspondent aux coefficients de diffusion effective déterminés dans le cas de la concentration moyenne mesurées sous la dalle 1.

La Figure 5. 19 a) présente les flux de vapeurs expérimental et simulées à l'entrée de la dalle qui correspondent aux coefficients de diffusion effective déterminés dans le cas de la concentration moyenne mesurées sous la dalle 1 (Figure 5. 18). Le flux de vapeurs de TCE expérimental est obtenu à partir de la dérivée par rapport au temps de la masse de vapeurs de TCE dans la cloche obtenues à partir de la concentration C_{INJ} multipliée par le volume de la cloche. Nous remarquons que pour la gamme de coefficient de diffusion effective choisie (Figure 5.18), qui avec laquelle nous avons pu estimer la concentration moyenne de TCE mesurée sous la dalle, les flux de vapeurs de TCE simulés à l'interface cloche/dalle sous-estimes le flux de vapeurs de TCE expérimental qui s'introduit dans la dalle. Par exemple à t= 1j, le flux simulé à partir d'un coefficient de diffusion effective de 1/200ème de celui de sable moyen ($0.005*D_{eg-sb}$) est 19 fois plus faible que le flux expérimental. Cependant, ce rapport diminue au cours de temps et atteint son minimum 0 au bout de 13 jours.

Il pourrait y avoir plusieurs raisons qui expliquent ces différences entre le flux expérimental et les flux numériques :i) l'effet de densité de vapeurs qui n'était pris en compte dans nos simulations, ii) une surpression instantanée du à l'injection du volume de TCE dans la cloche qui peut être traduit par une extension de volume de la

cloche vers la dalle et iii) un possible défaut d'étanchéité entre la cloche et l'extérieur pendant l'expérience de diffusion qui pouvait être suivi d'une perte de masse depuis la cloche vers l'extérieur. Ceci peut être traduit par une surestimation de flux de vapeurs expérimental qui s'introduit dans la dalle.

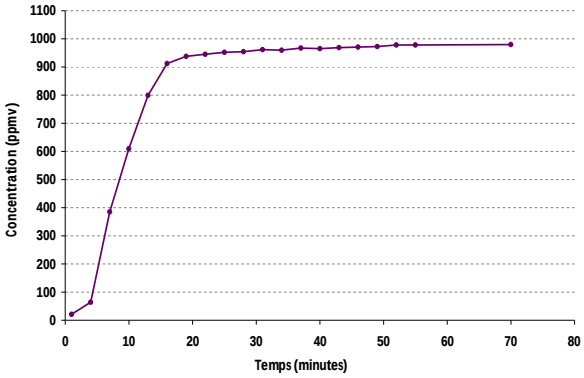


a) b)

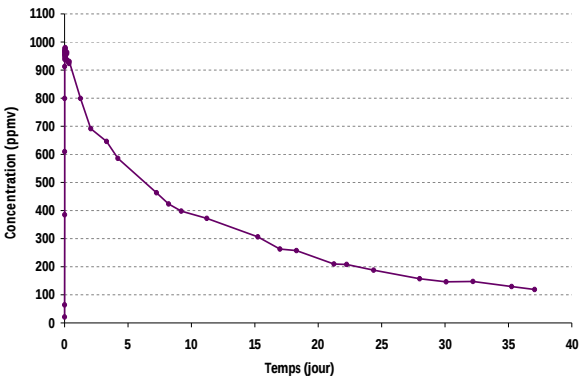
Figure 5. 19 : Evolution des flux de vapeurs de TCE diffusifs simulés et expérimental à partir du code numérique monodimensionnel pour le cas de la dalle 1 a)pendant 30 jours et b) pendant les 3 premiers jours

5.3.2.2 Coefficient de diffusion effectif dalle 2

Pour déterminer le coefficient de diffusion effectif D_{eg2} de la dalle 2, nous avons introduit 3 ml de TCE en phase liquide à l'intérieur de la cloche ce qui correspond à une concentration de vapeur de TCE saturante C_{sat} égale à 1141 ppmv. Après la mise en place de TCE dans la cloche, la concentration de vapeur de TCE a mis 1 heure pour atteindre le régime stationnaire qui correspond à la concentration maximale C_{max} 970 ppmv (85% de C_{sat}) (cf Figure 5. 20 a). Comme pour la dalle 1, la diminution de la concentration des vapeurs dans la cloche s'explique par le flux de masse vertical de vapeur de TCE par diffusion à travers la dalle (Figure 5. 21). Nous avons remarqué pendant l'expérience que la distribution de vapeurs de TCE sous la dalle, en provenance de la cloche, est homogène, les concentrations de vapeurs mesurées sous la dalle 2 sont quasiment les mêmes aux point 1C, 2C et 3C. On peut en déduire que la dalle 2 est plutôt homogène d'un point de vue du taux de fissuration.



a) évolution au début de l'expérience



b) évolution sur la durée totale de l'expérience

Figure 5. 20 : concentration de vapeurs de TCE dans la cloche_Dalle 2

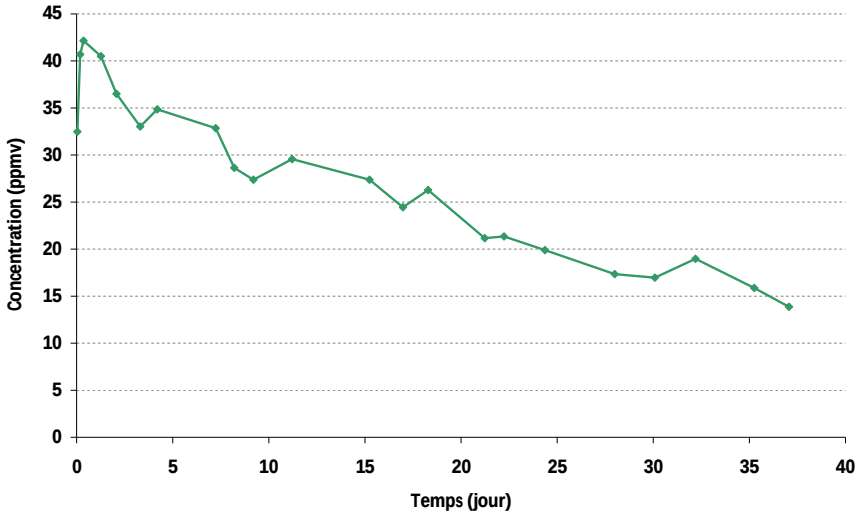


Figure 5. 21 : Concentrations de vapeurs de TCE en fonction du temps sous la dalle aux points de mesures 1C, 2C et 3C _Dalle 2

En utilisant la « cup method » le coefficient de diffusion effectif de la dalle 2 D_{eg2} a été estimé à environ 1,3 10^{-8} $m^2.s^{-1}$.

5.4. Pression de l'air du sol et concentration de vapeurs de TCE lors de SCERES1 et SCERES2

5.4.1. Champ de pression dans l'air du sol

Le panache de vapeurs dans le bassin de SCERES dépend de plusieurs paramètres : de la température, du profil hydrique du bassin, et essentiellement du champ de pressions de l'air du sol. Toute perturbation dans le champ de pression initialement à l'équilibre « statique » peut provoquer un changement de la distribution de vapeurs dans la zone non saturée de SCERES. À cet effet, le battement de la nappe avait pour objet d'étudier l'influence de la convection forcée sur le panache de vapeur. Dans la suite nous traitons les effets de la volatilisation de la zone source, du battement de la nappe ainsi que la mise en dépression, effectuée dans la cloche, pendant les expériences SCERES1 et SCERES2 sur le champ de pression dans la zone non saturée du site expérimental.

5.4.1.1. Effet de volatilisation de la zone source

La mise en place de la zone source de TCE a engendré une perturbation locale du champ de pression de l'air du sol. En effet, la Figure 5. 22 montre l'évolution de la pression relative de l'air ΔP_{air} à la profondeur 0,25 m et 0,45 m au dessus de la zone source de TCE pendant l'expérimentation SCERES2. Les résultats de l'expérimentation SCERES1 ne sont pas exploitables, car nos capteurs ne permettent pas un enregistrement des pressions différentielles supérieures à 250 Pa. Par contre SCERES2 a permis de mettre en relief l'augmentation de la pression de l'air du sol suite à l'infiltration du TCE en tant que phase (Figure 5. 22). Tout d'abord nous remarquons que les $\Delta P_{air,}$ que ce soit à 0,25 m de profondeur ou à 0,45 m de profondeur, enregistrent une nette augmentation qui atteint 3,4 Pa à la profondeur 0,45 et 3,8 à la profondeur 0,25 m à t=0j. Cette augmentation a été enregistrée suite à l'injection de TCE dans le milieu poreux. La volatilisation du TCE se traduisant par la pression de vapeur saturante au droit de la zone source est à l'origine de cette surpression instantanée. Elle a été ensuite amortie jusqu'à la fin de l'injection de TCE. D'après les résultats du chapitre 4, une surpression due à la présence de TCE peut avoir un impact sur le transfert de flux de vapeurs vers la surface du sol, et engendrer un flux convectif de vapeurs de TCE important en zone non saturée et vers la surface du sol.

En plus, nous remarquons que l'évolution des ΔP_{air} du sol aux profondeurs 0,25 m et 0,45 m sont semblables. Ces fluctuations suivent une périodicité régulière : diurne et nocturne, une augmentation des ΔP_{air} le jour (jusquà 1,5 Pa) et une diminution la nuit (jusqu'à -1,5). Cette périodicité de ΔP_{air} est liée à la périodicité journalière de la température du sol. En effet, la figure 5. 35 montre que les températures du sol à 0,25 m, par exemple, diminuent le soir et commencent à augmenter en pleine journée.

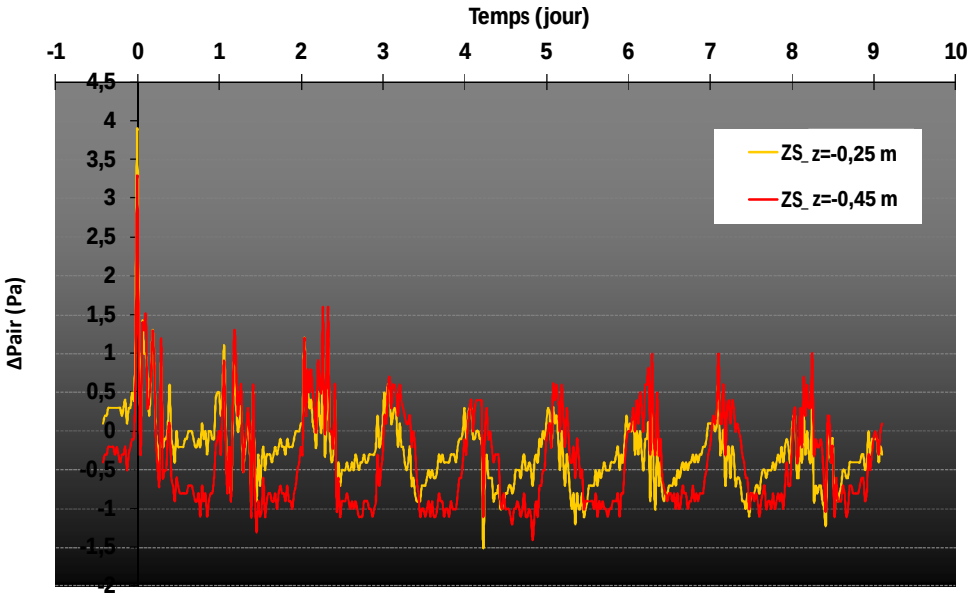


Figure 5. 22 : Pressions relatives de l'air de sol à la profondeur 0,25 m et 0,45 m au niveau de la zone source_SCERES2 en fonction du temps

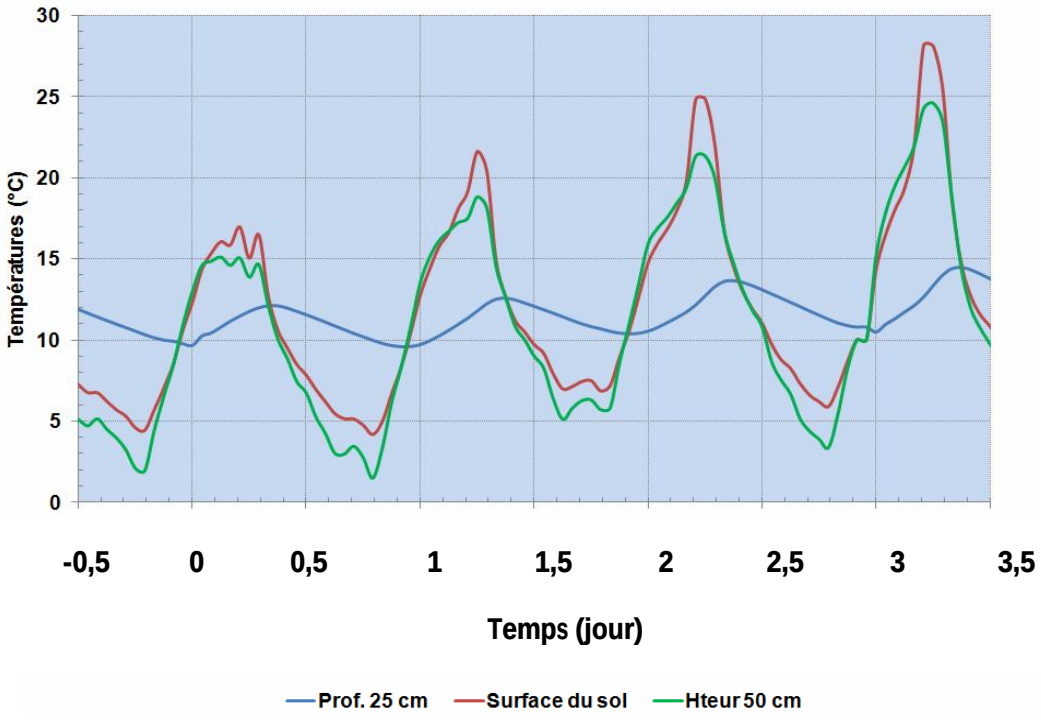


Figure 5. 23 : Température du sol mesurée à la profondeur de 0,25 m, température à la surface du sol et température de l'air extérieur à la hauteur 0,5 m pendant les 4 premiers jours de SCERES2 en fonction du temps

5.4.1.2 Effet du battement de la nappe

Nous rappelons que le battement de la nappe a été effectué sur deux étapes : la première a consisté à faire monter le toit de la nappe de 50 cm (par imbibition); la deuxième a consisté à faire descendre le toit de la nappe à sa position initiale à 2 m de profondeur (drainage). La figure 5.24 montre que la montée du toit de la nappe est suivie de l'augmentation progressive de la saturation en eau jusqu'à la profondeur 1,5 m.

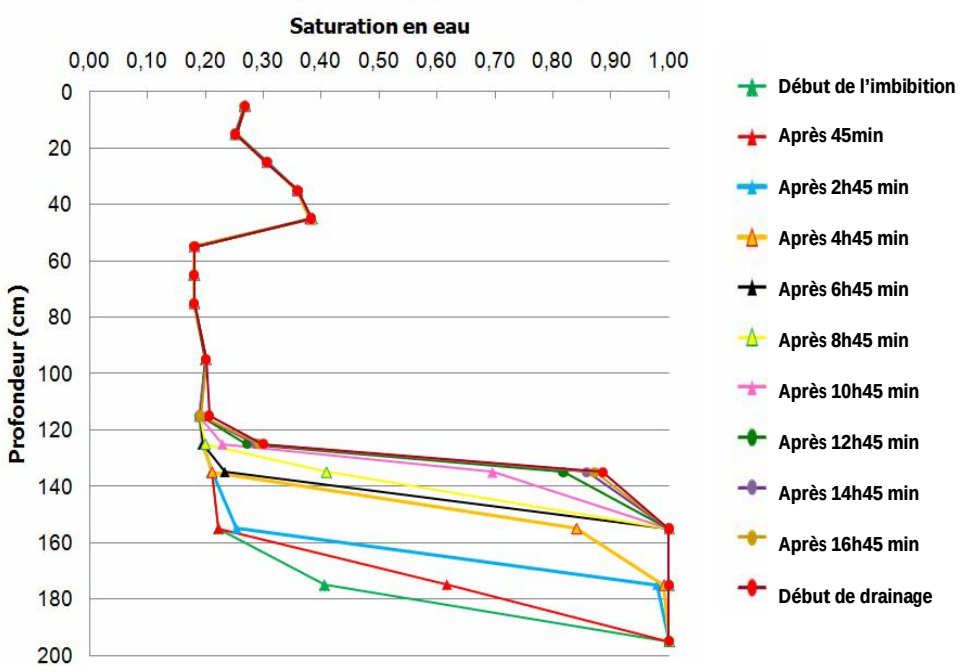


Figure 5. 24 : Profil de saturation en eau pendant la montée du toit de la nappe_au niveau du tube d'accès S1

L'air dans le sol a été déplacé par le front d'eau vers la surface du sol favorisant d'une part, l'augmentation de la pression de l'air et d'autre part le déplacement des vapeurs de TCE vers l'interface sol/atmosphère. Tandis que pendant le drainage la descente de l'eau est suivi d'un mouvement descendant de l'air du sol ce qui va créer une sorte d'aspiration de l'air atmosphérique depuis la surface du sol.

Ces mouvements ascendants et descendants de l'air du sol se sont traduits par des variations de pression en fonction du temps (Figure 5. 25). Nous avons choisi de présenter les pressions de l'air de sol à différentes profondeurs et des différents emplacements pour SCERES1 et à une même profondeur pour SCERES2. La Figure 5. 25 illustre clairement que pendant la phase d'imbibition la pression relative de l'air

du sol augmente au fur et à mesure que le front d'eau avance vers les capteurs de pressions. La pression atteint son maximum à la fin de l'imbibition, jusqu'à 8 Pa au point GA1 à la profondeur 65 cm. La stabilisation du toit de la nappe est suivi d'une diminution de la pression relative jusqu'à ce quelle se stabilise aux alentours de 0 Pa. Pendant le drainage, défini par le mouvement descendant de l'air du sol, les capteurs de pressions ont enregistré des pressions relatives négatives, jusqu'à -19 Pa au point GA1 à 65 cm de profondeur. Il apparaît également dans la Figure 5. 25 que les capteurs de pressions placés à des positions plus basses détectent des variations de pressions élevées grâce à leur proximité de la zone d'influence du front d'eau, contrairement aux capteurs localisés proche surface.

La Figure 5. 26 montre des pressions relatives relevées pendant les phases d'imbibition et de drainage lors de SCERES2. Nous remarquons que sur une même profondeur les pressions relatives les plus élevées ont été enregistrées au niveau de la zone source de pollution. Lors de la descente du toit de la nappe, les pressions relatives enregistrées sont plus élevées que celles lors de la montée. Ceci est du à la vitesse de drainage qui a été plus élevée de celle de l'imbibition.

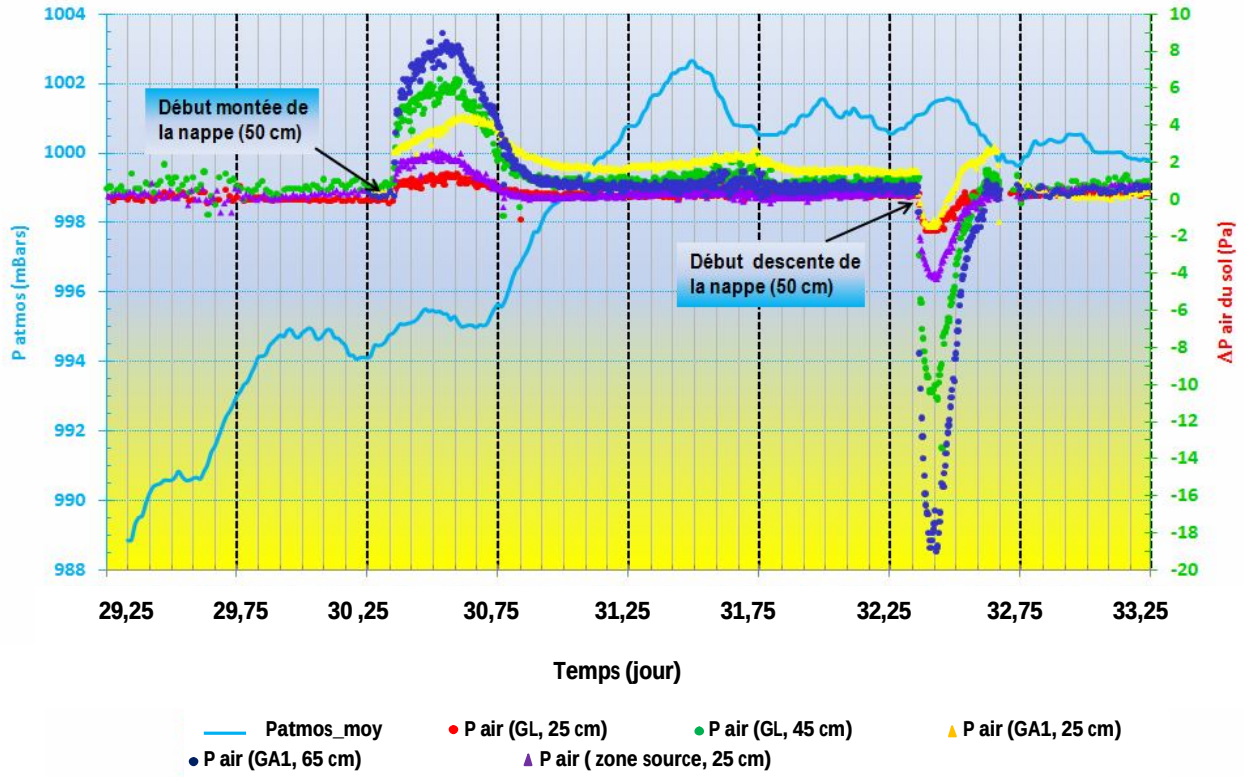


Figure 5. 25 : Pression de l'air de sol pendant le battement de la nappe_SCERES1

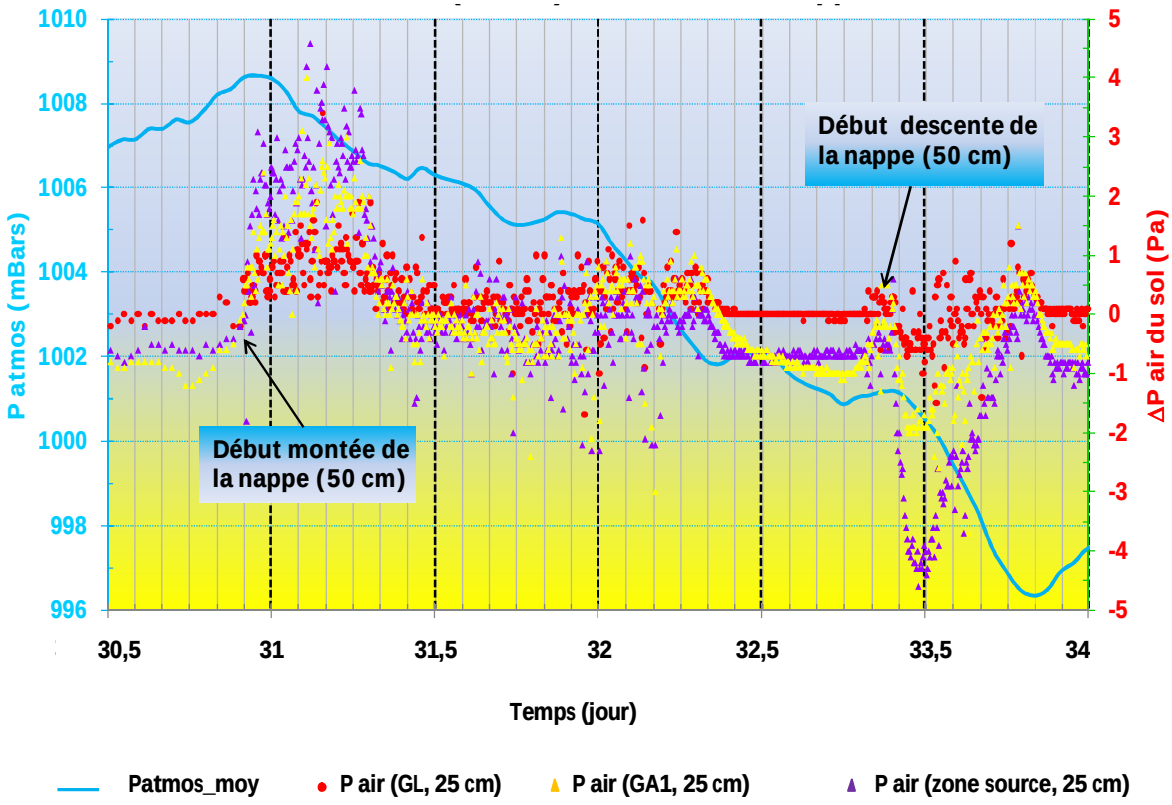


Figure 5. 26 : Pression de l'air de sol pendant le battement de la nappe_SCERES2

5.4.1.3 Effet de la mise en dépression dans la cloche

Nous rappelons que la mise en dépression dans la cloche avait pour objet l'étude du transfert de vapeurs de TCE à travers la dalle de béton du à la ventilation dans un vide sanitaire d'un bâtiment. Les Figure 5. 27 et 5. 28 montrent la pression atmosphérique et la pression relative mesurées sous la dalle en fonction de temps (courbe rouge). Nous remarquons que la mise en dépression dans la cloche cause des pressions relatives négatives (« dépressions ») sous la dalle. Comme attendu, plus la dépression dans la cloche est grande plus la dépression sous la dalle est prononcée. Par ailleurs, les fluctuations des pressions relatives enregistrées sous la dalle (Figure 5. 28) sont directement corrélées aux variations instantanées des pressions atmosphériques.

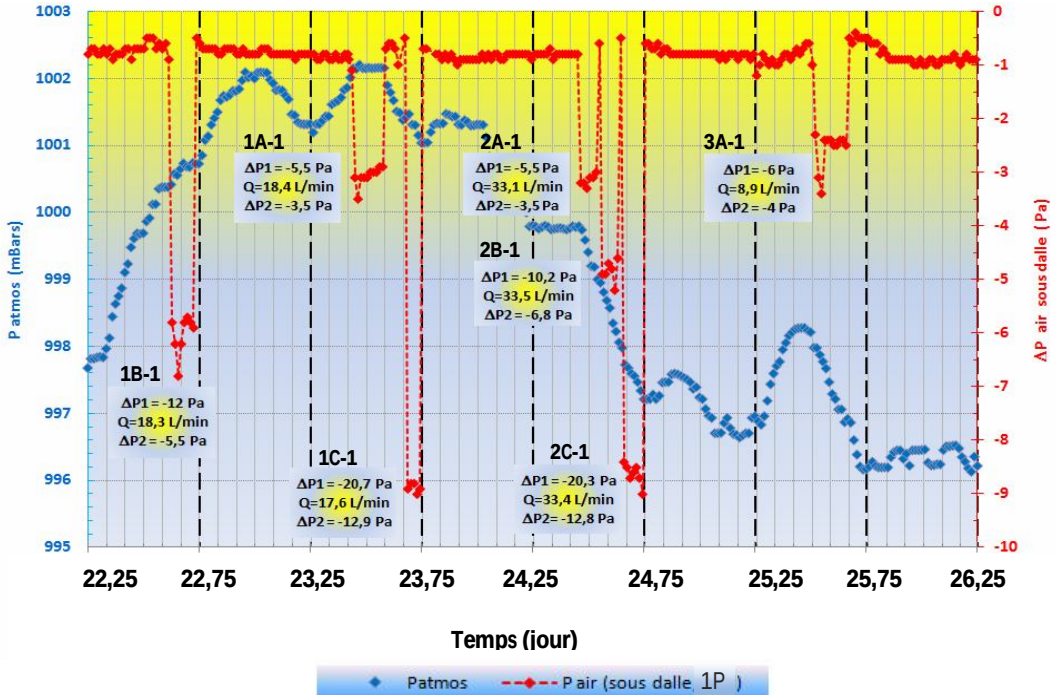


Figure 5. 27 : Pressions relatives sous la dalle résultant de la mise en dépression de l'air dans la cloche lors deSCERES1, avec la dalle 1

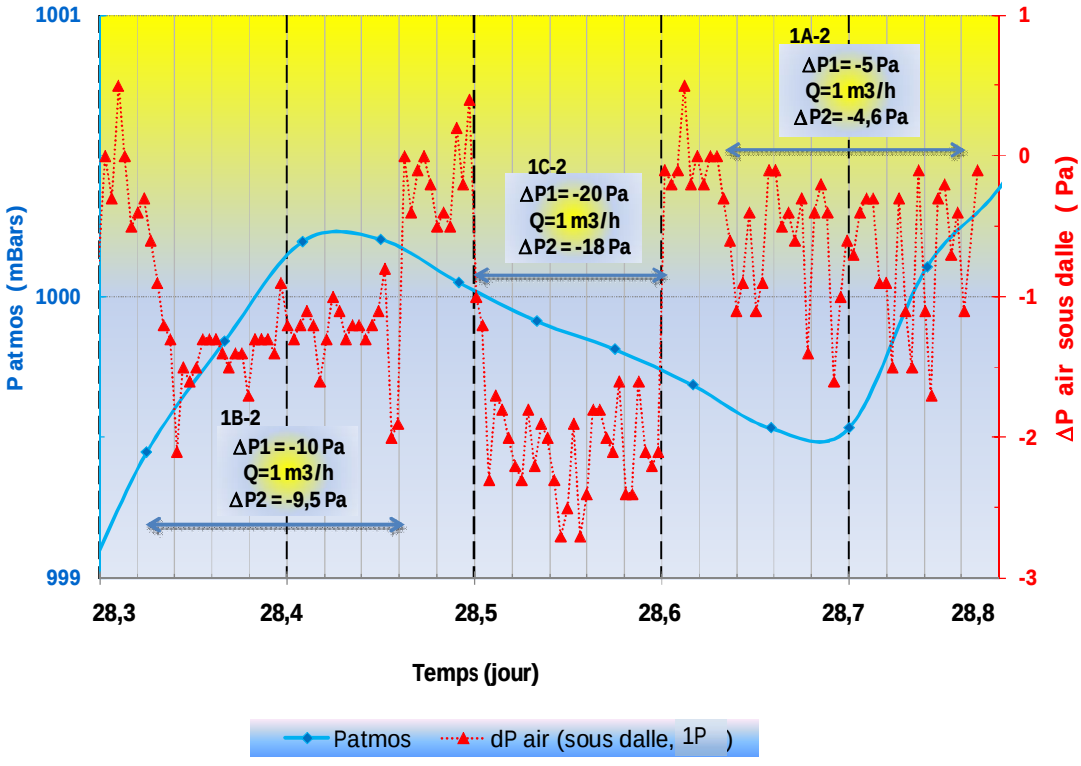


Figure 5. 28 : Pressions relatives sous la dalle causées par la mise en dépression de l'air dans la cloche lors de SCERES2, avec la dalle 2

Le Tableau 5. 2 résume les différentes pertes de charge ΔP2 ($\Delta P2=P_{cloche} - P_{sous\ dalle}$) entre l'interface dalle/gravier et l'interface dalle/cloche. Il présente aussi les pressions motrices relatives $\Delta P2_g$ (Pa) calculées à partir de différentes ΔP2 (Pa) :

$$\Delta P_{2g} = \Delta P_2 + \rho g \Delta z \qquad \text{(Eq 5. 2)}$$

où Δz (m) représente l'épaisseur de la dalle Δz = 0,1 m

À partir de ce tableau, nous pouvons constater que les pertes de pression motrice $\Delta P2_g$ à travers la dalle 2 sont beaucoup plus élevées que celles à travers la dalle 1. Cela revient au fait que la dalle 1 est plus perméable que la dalle 2 confirmant ainsi directement les perméabilités quantifiées lors des essais spécifiques.

Tableau 5. 2 : Les pressions relatives dans la cloche, sous la dalle et à travers la dalle de béton pour les différents essais de mise en dépression

SCERES1-Dalle 1									
Niveau de dépression (Pa)	5			10			20		
Q=1 m^3/h (2,78 10^{-4} m^3/s)	**1A-1**	ΔP_2	ΔP_{2g}	**1B-1**	ΔP_2	ΔP_{2g}	**1C-1**	ΔP_2	ΔP_{2g}
		-3,5	-2,33		-5,5	-4,33		-12,9	-11,73
Q=2 m^3/h (5,56 10^{-4} m^3/s)	**2A-1**	ΔP_2	ΔP_{2g}	**2B-1**	ΔP_2	ΔP_{2g}	**2C-1**	ΔP_2	ΔP_{2g}
		-3,5	-2,33		-6,8	-5,63		-12,8	-11,63
Q=0.5 m^3/h (1,39 $10^{-4}m^3/s$)	**3A-1**	ΔP_2	ΔP_{2g}	-			-		
		-4	-2,83						
SCERES2-Dalle 2									
Q=1m^3/h (2,78 10^{-4} m^3/s)	**1A-2**	ΔP_2	ΔP_{2g}	**1B-2**	ΔP_2	ΔP_{2g}	**1C-2**	ΔP_2	ΔP_{2g}
		-4,6	-3,43		-9,5	-8,33		-18	-16,83

A part que la pression de l'air du sol dans la zone non saturée, la concentration de vapeurs de TCE a aussi évolué en fonction du temps et de l'espace au cours des deux expériences SCERES1 et SCERES2.

5.4.2. Champ de concentration de vapeurs de TCE

Après l'injection de la phase liquide de TCE à 0,55 cm de profondeur, le TCE se volatilise et les vapeurs de TCE sont soumises à un transfert de masse depuis la zone source. Même si la convection induite par la volatilisation du TCE en phase et par l'effet de densité de vapeur (cf. chapitre 4) est un mécanisme de transport important lors de la première phase du développement du panache de vapeurs de TCE, c'est la diffusion moléculaire qui est considérée comme était le principal mécanisme de transport. Le flux diffusif est causé par le gradient de concentration élevé entre la zone source et la zone non saturée du bassin SCERES. La mesure de concentrations de vapeurs de TCE à différents points de SCERES a permis d'étudier le panache de vapeurs de TCE dans le sol en fonction du temps et de la distance par rapport à la zone source.

5.4.2.1 Transfert de vapeurs de TCE dans la zone non saturée

Les Figures 5. 29 et 5. 30 présentent l'évolution de la concentration des vapeurs de TCE pendant SCERES1 aux points GA1 et GL distants de la zone source respectivement de 2,95 m et 2,1 m (Figure 5. 5). Le régime permanent du transport, traduit par un palier de concentration, est atteint environ trois semaines après l'injection du TCE.

L'évolution des concentrations enregistrées, quelque soit leur profondeur, peut être classée en 3 phases distinctes :i) phase d'augmentation des concentrations en TCE jusqu'à l'atteinte du régime permanent, ii) phase de la mise en dépression dans la cloche (la cloche est distante de 0,4 m du point GA1 et 1 m du point GL) et iii) phase du battement de la nappe.

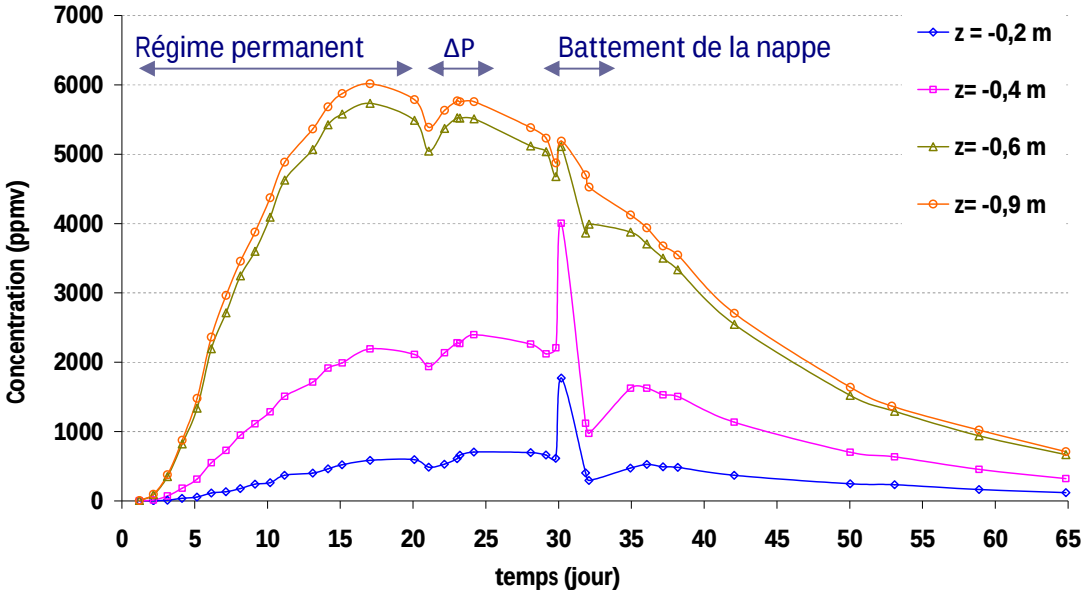


Figure 5. 29 : Evolution de la concentration en vapeurs de TCE au point GA1 à différentes profondeurs lors de SCERES1

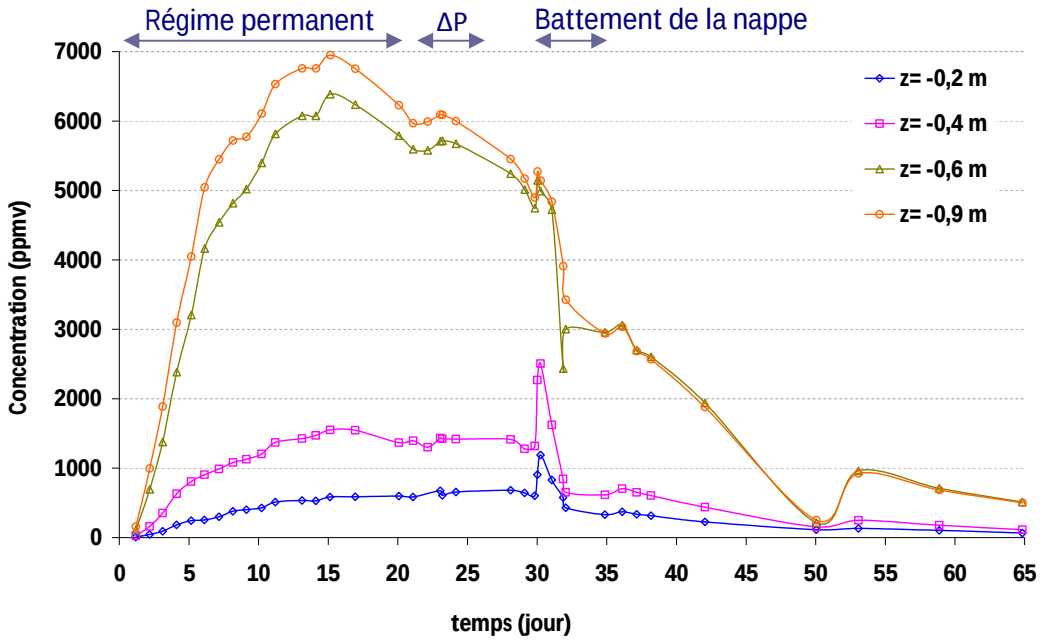


Figure 5. 30 : Evolution de la concentration en vapeurs de TCE au point GL à différentes profondeurs lors de SCERES1

Les vapeurs de TCE ont mis 3 semaines pour atteindre la concentration maximale (régime stationnaire) avant de commencer à diminuer (Figure 5. 29 et Figure 5. 30). Ensuite, la mise en dépression dans la cloche a causé une modification des concentrations. En effet, suite à l'aspiration des vapeurs vers la cloche, les

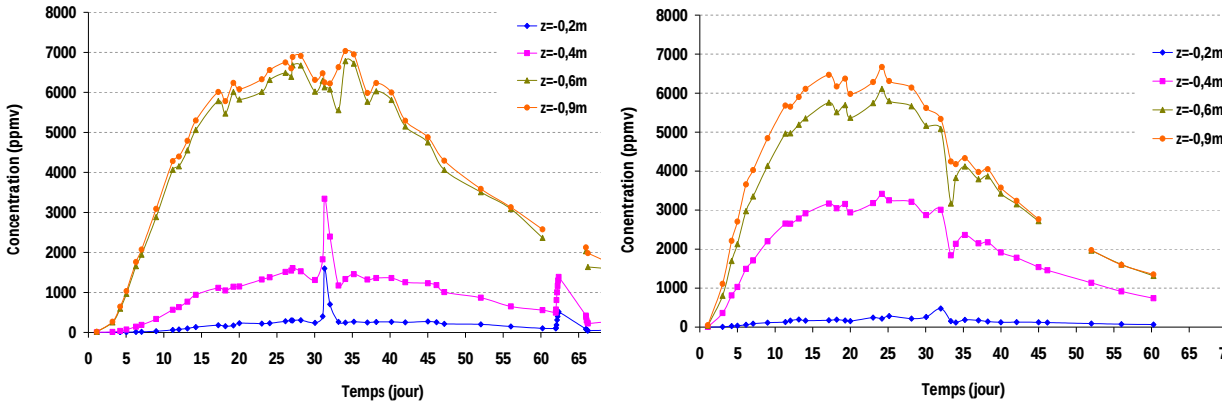
vapeurs de TCE en concentrations élevées provenant de la profondeur, vont migrer vers la dalle conduisant ainsi à une augmentation des concentrations de TCE. À titre d'exemple, cet effet est visible au point GA1 particulièrement à la profondeur 0,2 et 0,4 m. Cependant, l'effet de la mise en dépression a été beaucoup moins ressenti au niveau du point GL puisqu'il est plus éloigné de la dalle.

Le troisième comportement documenté dans les Figure 5. 29 et Figure 5. 30 est celui pendant le battement de la nappe. En effet, la montée du toit de la nappe de 50 cm le 30ème jour a provoqué une importante augmentation des concentrations de vapeurs dans les cannes gaz quelles que soient leurs profondeurs, jusqu'à deux fois à la profondeur 0,4 m. Cela peut s'expliquer par le fait que la montée du toit de la nappe, de la profondeur 2 m à la profondeur 1,5 m a poussé les vapeurs de TCE des profondeurs plus chargées en vapeurs de TCE vers des zones moins chargées. Ceci a conduit à une forte augmentation de la concentration aux profondeurs 0,2 m et 0,4 m. La phase de drainage, quant à elle, a causé une forte diminution de concentrations en vapeurs de TCE due à la descente du toit de la nappe. En d'autres termes, le mouvement descendant de l'eau a entraîné avec lui d'une part un mouvement descendant des vapeurs de TCE et d'autre part une augmentation de volume de pores occupé par la phase gazeuse.

Par ailleurs, nous pouvons distinguer deux groupes de mesures :i) les mesures prises dans le sable fin (à 0,2 m et 0,4 m de profondeur) et ii) les mesures effectuées dans le sable moyen (à 0,6 m et 0,9 m de profondeur). En effet, il s'avère que le gradient de concentration est élevé entre ces deux groupes ; les concentrations mesurées dans le sable fin sont trois fois plus faibles que dans le sable moyen. En plus, l'évolution des concentrations de vapeurs est semblable au sein du même groupe. Nous remarquons aussi que l'écart entre les concentrations de vapeurs à 0,6 m et 0,9 m est négligeable. Nous pouvons expliquer ce résultat par le fait que dans le sable fin la teneur en eau est plus élevée que dans le sable moyen, se traduisant par un coefficient de diffusion effective faible dans le sable fin. Les vapeurs se trouvent alors partiellement bloquées dans le sable moyen. En conséquence, le panache de vapeurs tend à migrer plus en latéral, ce qui va engendrer une sorte d'homogénéisation de concentration dans le sable moyen. Ceci n'est pas le cas pour les profondeurs de 0,2 m et 0,4 m où la variation verticale de concentration est très prononcée car la teneur en eau y varie beaucoup.

Les mêmes constats peuvent être faits pour l'évolution de concentration de vapeurs de TCE pour SCERES2 (Figure 5. 31), pendant la mise en dépression et le

battement de la nappe. Cependant, nous remarquons que les concentrations de vapeurs en proche surface, par exemple à la profondeur 0,2 m, sont beaucoup plus faibles que celles mesurées pendant SCERES1. Cela peut être expliqué par la saturation en eau qui est plus élevée à cette profondeur pendant la deuxième compagne de mesure (SCERES2) (cf. Figure 5. 8).



a) point GA1 b) point GL

Figure 5. 31 : Evolution de la concentration en vapeurs de TCE à différentes profondeurs aux point GA1 et GL lors de SCERES2

L'évolution de la concentration de vapeurs à la profondeur 0,2 m à différents points de SCERES est fonction de la distance du point de mesure de la zone source (Figure 5. 32). En effet, en comparant les concentrations mesurées au point GL à celles mesurées au point GA1 avant le battement de la nappe, nous constatons que plus on est proche de la zone source plus les concentrations sont élevées. Il convient aussi de noter que, contrairement à ce que nous attendions, au point GM1, le point le plus éloigné de la zone source, les concentrations de vapeurs sont les plus élevées. Cela est dû à son emplacement à proximité des blocs d'hétérogénéité. En effet, ces blocs, constitués du sable fin, fortement saturés en eau et situés en aval de la zone source, ont formé une barrière diffusive due à leurs fortes saturations en eau. Ils ont bloqué la migration du panache de vapeur de TCE conduisant ainsi à une accumulation des vapeurs de TCE au niveau du point GM1.

La montée du toit de la nappe a provoqué une augmentation des concentrations dans les cannes gaz. A la profondeur 0,2 m par exemple (Figure 5. 32), la plus grande augmentation a été détectée au niveau du point GA1. Situé à proximité immédiate de la dalle, ce point a plus reçu les vapeurs qui s'échappaient du dessous

de la dalle lors de l'imbibition, à cause de la faible perméabilité du béton qui a bloqué le passage des vapeurs à travers la dalle. Quant au point GM1, la nature du milieu poreux sous-jacent, une rétention très forte d'eau dans les blocs a limité le passage des vapeurs vers l'atmosphère.

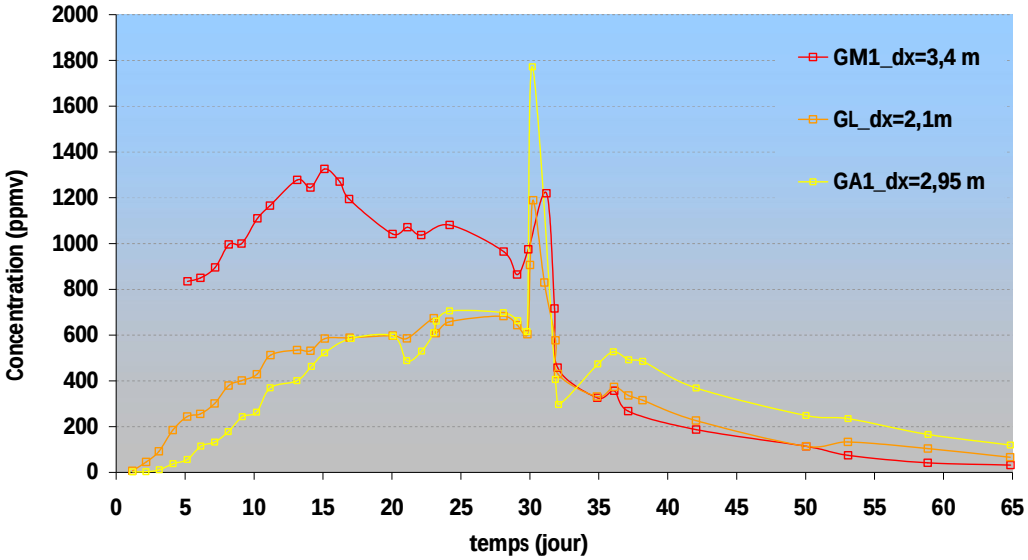


Figure 5. 32 : Evolution des concentrations de vapeur de TCE mesurées à la profondeur de 0,2 m aux points GM1, GI, GA1 lors deSCERES1

Profil vertical des concentrations de vapeurs de TCE

Les Figure 5. 33 et Figure 5. 34 montrent l'évolution des profils verticaux de concentrations de vapeurs au point GA1 après la mise en place de la zone source de pollution pendant SCERES1 et SCERES2. Les profils de concentration sont caractérisés par un fort gradient de concentrations qui existent entre le sable fin et le sable moyen. En effet, les concentrations mesurées dans le sable moyen sont trois à six fois plus élevées que celles observées dans le sable fin. De plus, Pour SCERES1 comme SCERES2, le gradient de concentration entre 0,6 m et 0,9 m est négligeable, ce qui rejoigne l'hypothèse de l'homogénéité de concentrations de vapeurs dans le sable moyen en profondeur. En revanche, le passage vers la couche peu perméable engendre une augmentation de gradient de concentration à l'interface sable fin et sable moyen caractérisé par la forte rétention d'eau (une nappe perchée). En revanche, le gradient de concentration diminue entre la profondeur 0,4 m et 0,2 m à cause de l'augmentation du coefficient de diffusion effective entre ces deux profondeurs.

Les concentrations de vapeurs mesurées aux profondeurs 0,6 m et 0,9 m lors de SCERES2 (Figure 5. 34) sont légèrement supérieures à celles mesurées en SCERES1 (Figure 5. 33). Ceci peut être expliqué par le fait que le volume de TCE injecté en SCERES2 était 13% supérieur au volume injecté en SCERES1. Contrairement aux concentrations mesurées lors de SCERES 2 aux profondeurs 0,2 m et 0,4 m qui sont moins élevées en SCERES2 que celles observées en SCERES1 à cause des saturations en eau observées dans SCERES2 qui étaient plus élevées que celles en SCERES1.

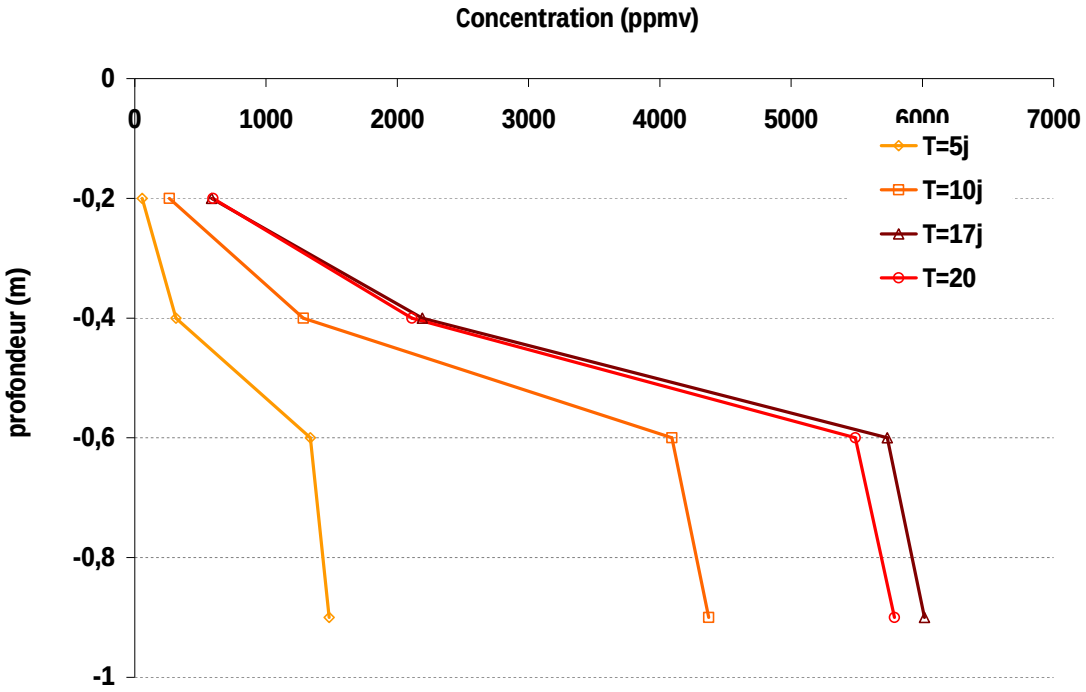


Figure 5. 33 : Profil vertical des concentrations en TCE mesurées au point GA1 à 5, 10, 17 et 20 jours après l'injection de la zone source lors de SCERES1

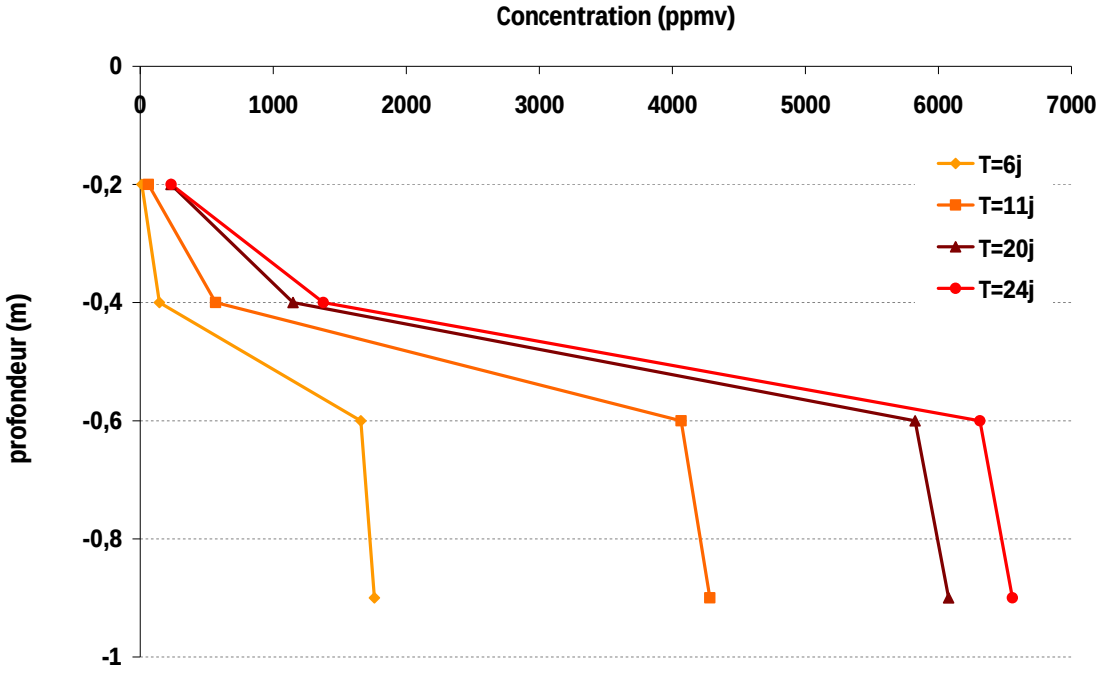


Figure 5. 34 : Profil vertical des concentrations en TCE mesurées au point GA1 à 6, 11, 20 et 24 jours après l'injection de la zone source lors de SCERES2

Ces profils verticaux vont servir dans le chapitre 6 pour quantifier le flux de vapeurs de TCE vers l'atmosphère.

5.4.2.2 Transfert de vapeurs de TCE au niveau de la dalle

Par rapport aux études précédentes sur la plateforme expérimentale SCERES, la présence de la dalle de béton, un milieu moins perméable que le reste de l'aquifère, a généré une nouvelle distribution du panache de vapeur notamment en proche surface. La Figure 5. 35 met en évidence le rôle de la présence de la dalle de béton sur la propagation des vapeurs de TCE vers la surface. Elle présente les concentrations de vapeurs de TCE mesurées au régime stationnaire, sur l'axe de symétrie de SCERES, aux points GM1 et GA1 à la profondeur 0,2m et les concentrations de vapeurs de TCE mesurées directement sous dalle (z=0 m). Le profil longitudinal des concentrations indique que les concentrations enregistrées sous la dalle sont plus élevées que de part et d'autre de la dalle. En effet la tortuosité de la dalle joue un rôle dominant dans le transfert diffusif de vapeurs à travers la dalle. La composition de la dalle (pâte de ciment, granulats) fait que la tortuosité est beaucoup plus faible que le milieu adjacent (le sable fin). La présence des fissures fait

augmenter le coefficient de diffusion effective à l'échelle de la fissure, mais ceci reste insuffisant pour évacuer par diffusion de façon significative les vapeurs à travers la dalle. Ceci se traduit par une accumulation des vapeurs sous la dalle.

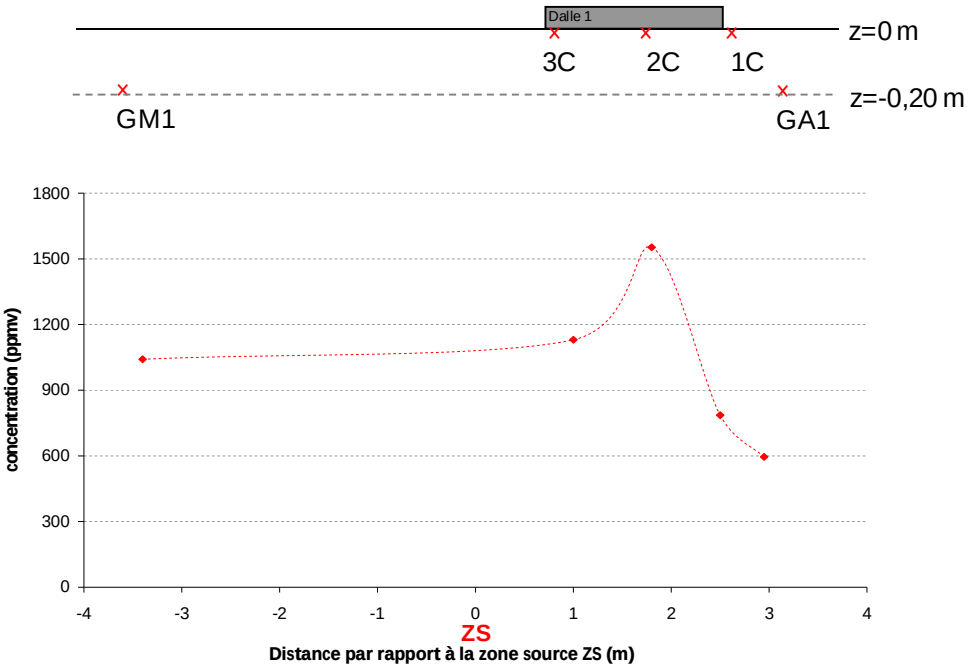


Figure 5. 35 : Concentrations de vapeurs de TCE proche de la surface du sol sur l'axe de symétrie de SCERES au régime permanent_SCERES1

Pendant SCERES1, les mesures sous la dalle ont été effectuées en trois points situés directement sous la dalle (profondeur z=0 m). Quant au SCERES2, les concentrations de vapeurs de TCE ont été mesurées à trois profondeurs (z=0 m, z=-0,2 m et z=-0,4 m).

La Figure 5. 36 montre l'évolution des concentrations de vapeurs sous la dalle pendant SCERES1 aux points amont, centre et aval selon le sens de l'écoulement. Nous rappelons ici que la première partie de SCERES1 a été menée avec la dalle 1. Le changement de la dalle a été effectué 37 jours après l'injection du TCE dans la zone non saturée de l'aquifère. L'évolution des concentrations sous la dalle peut être classée en trois phases distinctes : (1) phase d'augmentation jusqu'à atteindre le régime permanent, (2) phase de la mise en dépression et (3) phase du battement de la nappe.

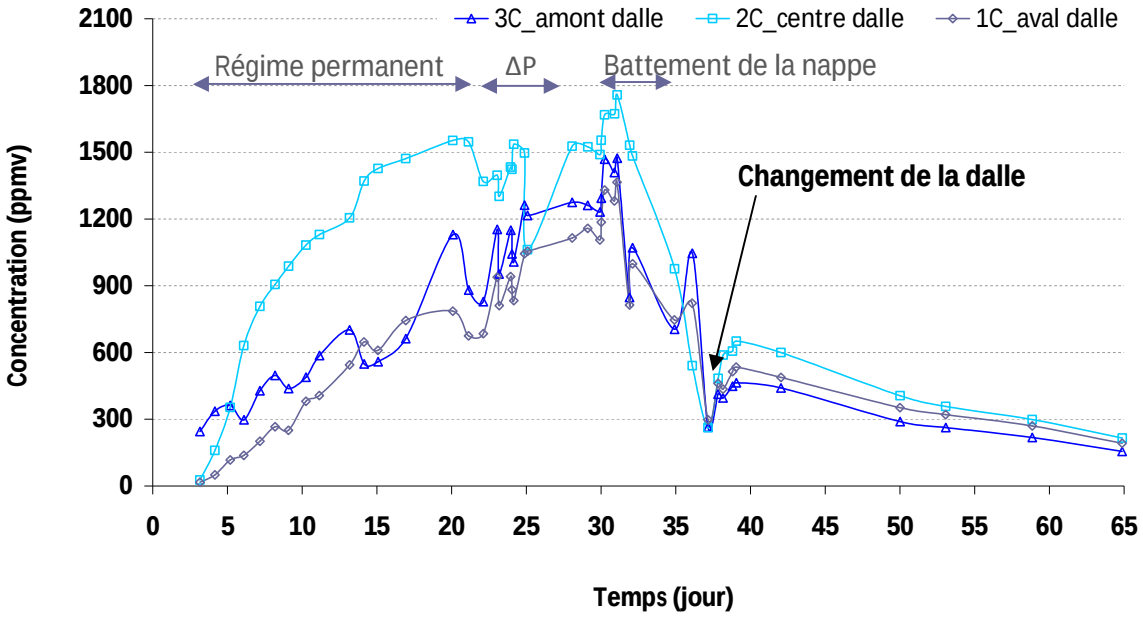
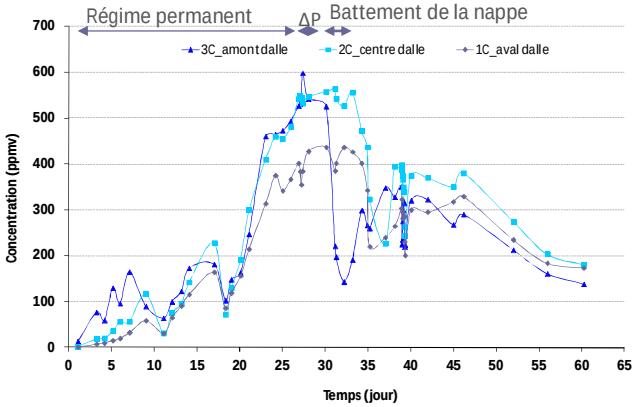
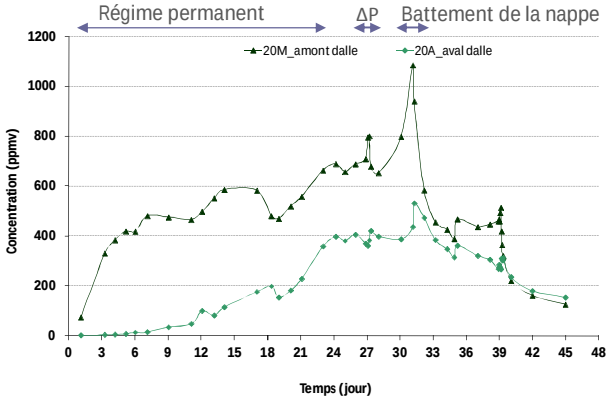


Figure 5. 36 : Evolution de la concentration en vapeurs de TCE directement sous la dalle lors de SCERES1

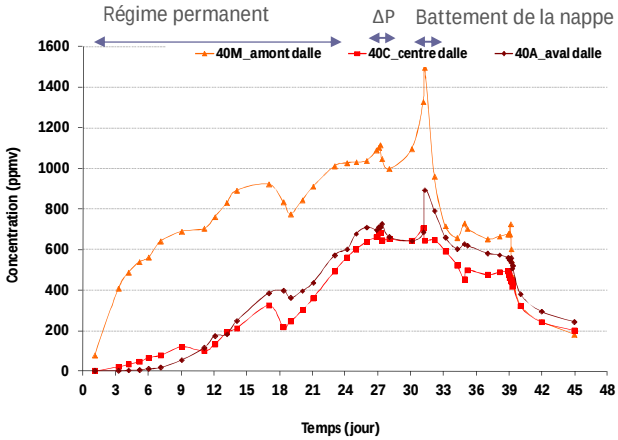
En présence de la dalle 1, les concentrations au point 3C (Figure 5. 36), plus proche de la zone source de TCE, sont plus élevées qu'au point 1C (situé plus en aval). Cependant les concentrations de vapeurs mesurées sous le centre de la dalle, au point 2C, sont les plus élevées. En effet la dalle 1 est caractérisée par un taux de fissurations important assemblé au centre de la dalle (cf. Figure2. 8 dans chapitre 2). Ce qui implique que le coefficient de diffusion effective au niveau de ces fissures est plus grand que celui de la matrice poreuse conduisant à des concentrations de vapeurs de TCE, juste en dessous, plus élevées. Contrairement à SCERES2, avec la dalle 2 en place, les concentrations de vapeurs de TCE sous la dalle 2 (Figure 5. 37 a) diminuent en allant du point 3C au point 1C pendant les trois premières semaines. La dalle 2 est caractérisée par des petites fissures reparties sur toute la surface de la dalle, ce qui rend les concentrations de vapeurs plus homogènes sous celle-ci.



a) à z= 0 m



b) à z=-0,2m



c) à z=-0,4m

Figure 5. 37 : Evolution de la concentration en vapeurs de TCE sous la dalle à différentes profondeurs lors de SCERES2

L'ajout de point de mesures en profondeurs sous la dalle avait pour objet d'obtenir plus d'information sur l'évolution des concentrations de vapeurs sous la dalle. La Figure 5. 38 montre les profils verticaux de concentrations de vapeurs sous le point 3C obtenus 6, 12, 21 et 26 jours après l'injection du TCE. Nous remarquons que quelques jours après l'injection du TCE, la variation des concentrations de vapeurs de TCE entre la profondeur 0,4 m et 0,2 m est plus faible que celle entre la profondeur 0,2 m et 0m.

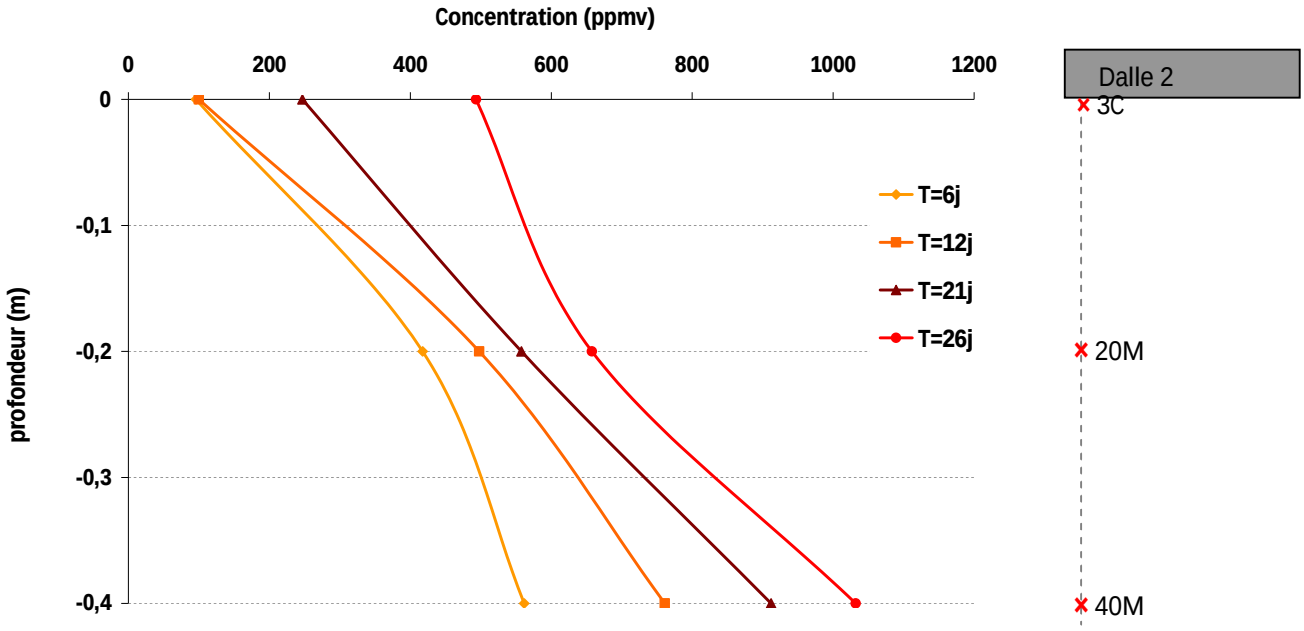


Figure 5. 38 : Profils verticaux des concentrations en TCE en amont de la dalle (au point 3C) mesurés à 6, 12, 21 et 26 jours après l'injection de la zone source lors de SCERES2

Pendant la mise en dépression dans la cloche, les concentrations de vapeurs de TCE mesurées sous la dalle de béton augmentent. En effet, la convection induite par le gradient de pression motrice à travers la dalle (Figure 5. 27 et Figure 5. 28), a favorisé le transfert de vapeur vers la cloche. Ce transfert a généré une migration massive des vapeurs de TCE vers la dalle de béton. La mise en dépression de l'air dans la cloche a ainsi conduit à une augmentation des concentrations de vapeurs sous la dalle, observée aussi bien à la profondeur 0,2 m qu'à la profondeur de 0,4 m.

En ce qui concerne le battement de la nappe, il a été légèrement ressenti sous la dalle pendant SCERES1 où une augmentation maximale de 15% des concentrations de TCE a été observée sous la dalle 1. Quant au SCERES2, le battement de la nappe n'a laissé aucun effet sur les concentrations de vapeurs sous la dalle, le niveau de concentrations de vapeurs est resté quasi-stable. Ceci est expliqué par le fait que le flux de vapeurs vers l'atmosphère, exercé par le battement de la nappe, va s'échapper de part et d'autre en se trouvant devant un milieu peu perméable comme la dalle de béton, aussi bien pour la dalle 1 que pour la dalle 2. Contrairement aux profondeurs 0,2 m et 0,4 m sous la dalle où les concentrations de vapeurs ont enregistrées une hausse allant jusqu'à 100% pendant le battement de la nappe.

5.5. Simulation numérique de SCERES1 et SCERES2

Étant donné, d'une part, que le suivi de concentrations et de pressions de vapeurs dans la zone non saturée était local et d'autre part le manque de données de concentrations au niveau de la zone source de TCE, la simulation numérique de l'expérience SCERES1 et SCERES2 peut apporter des compléments d'information. Par exemple, une analyse plus détaillée de l'évolution de concentration de vapeurs dans l'ensemble de la zone non saturée après la mise en place de la zone source et lors de la mise en place de phases de dépression et du battement de la nappe. Pour cela nous avons utilisé le code multiphasique multiconstituant SIMUSCOPP.

Les simulations numériques précédentes (Bohy, 2004 ; Dridi, 2006) ont montré que la migration des vapeurs se faisait de manière symétrique par rapport à l'axe longitudinal de SCERES. Ainsi la simulation numérique de la distribution et le transfert de vapeurs moyennant SIMUSCOPP est faite sur la moitié du bassin SCERES tout en tenant compte de cette simplification dans l'évaluation du bilan de masse.

5.5.1. Maillage de la zone source

La création de la zone source de TCE a consisté à introduire un débit d'injection dans le modèle. Travaillant sur la moitié du domaine, le volume de TCE injecté dans le modèle a été divisé par 2. Pour SCERES1, le volume $v_{1/2}$ injecté dans le modèle a été fixé à 1,75 l pendant une durée d'injection Δt égale à 60 minutes correspondant à un débit de 4,8 10^{-7} $m^3.s^{-1}$. Quant à SCERES2, le volume $v_{1/2}$ injecté dans le modèle a été fixé à 1,93 l pendant une durée d'injection Δt égale à 85 minutes correspondant à un débit de 3,8 10^{-7} $m^3.s^{-1}$. La zone source est représentée, sous forme uniforme, par 8 mailles dans le quatrième sous maillage du domaine modélisé. En respectant l'aire réelle de l'injection du TCE, la surface modélisée correspondait à 25×50 cm² (Figure 5. 39)

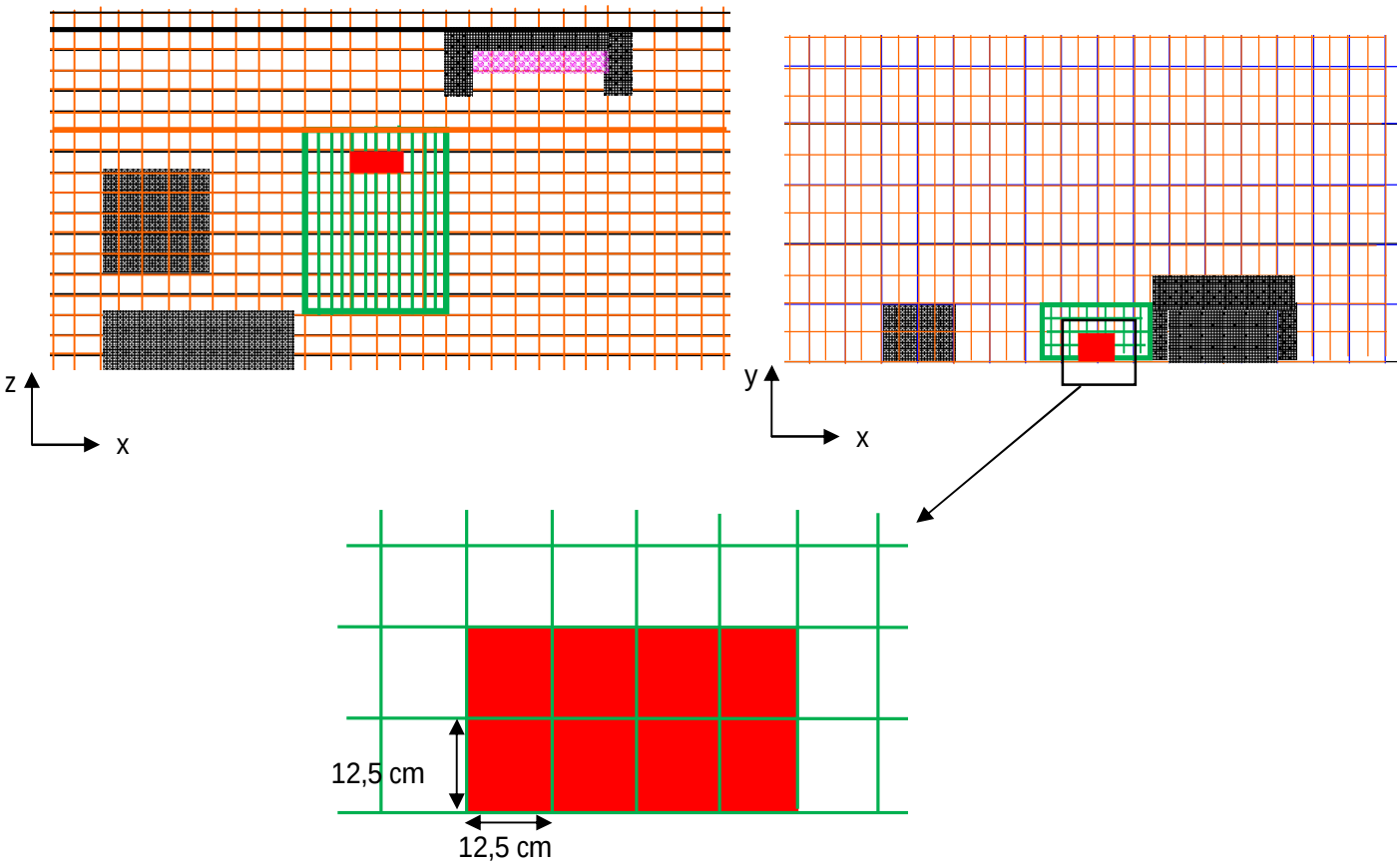


Figure 5. 39 : Extrait du maillage du domaine modélisé en coupes verticale et longitudinale et maillage de la zone source du TCE

5.5.2 Courbes de pression capillaires et de perméabilité relatives

Pour reproduire au mieux l'évolution du panache de vapeurs dans l'aquifère poreux du site expérimental SCERES, la détermination de la courbe de pression capillaire et la courbe de perméabilités relatives en fonction de la saturation en eau sont indispensables. Les courbes de pressions capillaires p_c et la perméabilité relative k_r reposent sur les équations définies au paragraphe 3.3.2 où p_c et k_r sont fonctions d'une part de la saturation effective en eau et d'autre part des paramètres de van Genuchten α et n.

L'estimation des paramètres α et n pour le sable moyen a été effectuée dans le cadre des travaux menés précédemment par Benremita (2002) et Bohy (2003). Celles du sable fin ont été déterminées par Dridi (2006) par calage du modèle de van

Genuchten avec la courbe pc(S) déterminée à partir des profils hydriques mesurés sur SCERES Tableau 5. 3.

Tableau 5. 3 : Paramètres de van Genuchten pour les sables moyen et fin

	Sable moyen	**Sable fin**
α **(-)**	0,145	0,0101
n (-)	2,68	13

Les Figures 5. 40 et 5. 41 montrent les courbes de pressions capillaires maximales pour le sable fin et le sable moyen dans le système air/eau. Pour atteindre la saturation irréductible en eau dans le sable fin, les pressions capillaires sont très supérieures à celles du sable moyen. Ceci explique la forte rétention d'eau caractérisant le sable fin. Les autres courbes de pression capillaires en systèmes diphasiques (eau/TCE, air/TCE) et les courbes de perméabilité relatives de l'eau, de l'air et du TCE sont documentées dans l'annexe A1.

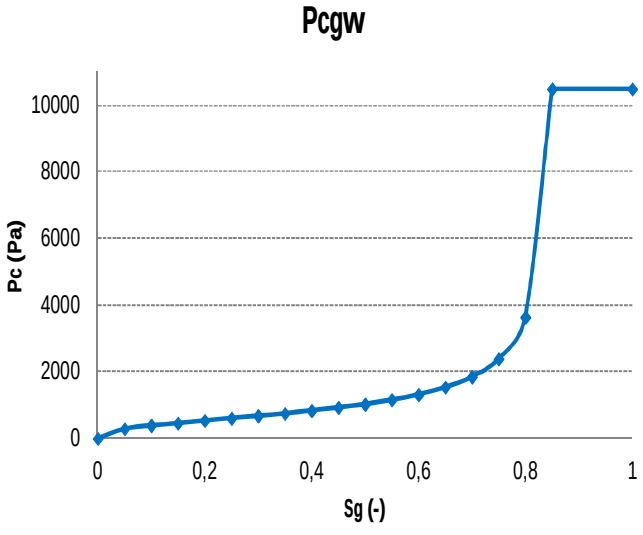


Figure 5. 40 : Pression capillaire pour le sable moyen dans le système diphasique eau/air

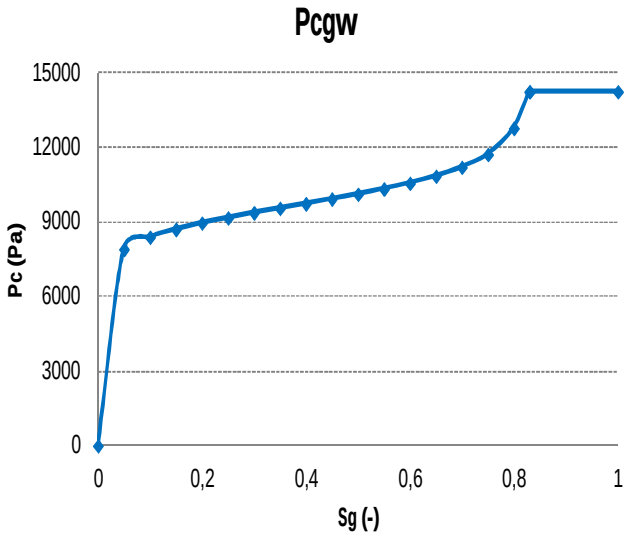


Figure 5. 41: Pression capillaire pour le sable fin dans le système diphasique eau/air

5.5.3 Paramètres choisis dans les simulations

Les simulations de l'expérience SCERES1 et SCERES2 avec l'outil numérique SIMUSCOPP se sont limitées à la première phase de chaque expérience, c'est-à-dire à la phase d'expérimentation avant le changement de la dalle. En effet, le soulèvement de la dalle a créé une perturbation de la distribution des vapeurs dans le milieu poreux sous la dalle. Ainsi pour SCERES 1, nous avons modélisé le transfert des vapeurs en présence de la dalle 1. Le transfert à travers la dalle 2 a été modélisé pendant SCERES2.

Le Tableau 5. 4 résume les différents paramètres utilisés pour la modélisation numérique de SCERES1 et SCERES2.

Tableau 5. 4 : Paramètres utilisés pour la modélisation numérique

Propriétés du milieu poreux	Valeurs
Conductivité hydraulique du sable grossier ($m.s^{-1}$)	$8,0\ 10^{-3}$
Conductivité hydraulique du sable gravier G1 ($m.s^{-1}$)	$2,5\ 10^{-2}$
Conductivité hydraulique du sable gravier G2 ($m.s^{-1}$)	$1,66\ 10^{-2}$
Conductivité hydraulique du sable moyen ($m.s^{-1}$)	$8,0\ 10^{-4}$
Conductivité hydraulique du sable fin ($m.s^{-1}$)	$5,0\ 10^{-5}$
Conductivité hydraulique de la dalle 1 ($m.s^{-1}$)	$3,81\ 10^{-5}$
Conductivité hydraulique de la dalle 2 ($m.s^{-1}$)	$1,66\ 10^{-5}$
Porosité du sable grossier	0,38
Porosité du gravier G1	0,35
Porosité du gravier G2	0,38
Porosité du sable moyen	0,40
Porosité du sable fin	0,43
Porosité de la dalle 1	0,20
Porosité de la dalle 2	0,20
Saturation Irréductible en eau dans le sable moyen Swr	0,15
Saturation Irréductible en eau dans le sable fin Swr	0,17
Saturation résiduelle en TCE du sable moyen en ZNS	0,04
Saturation résiduelle en TCE du sable fin en ZNS	0,08
Saturation résiduelle en TCE du sable moyen en ZS	0,10
Saturation résiduelle en TCE du sable fin en ZS	0,12

Les coefficients de diffusion effectifs ont été définis pour les milieux poreux, par SIMUSCOPP, sur la base de l'Eq 3.5 (cf. chapitre 3). Celui de la dalle de béton est de l'ordre de 1/25ème du coefficient de diffusion effectif du sable moyen, en se basant sur une tortuosité de la dalle de l'ordre de 0,06.

Avant la phase d'injection du TCE en zone non saturée, les conditions initiales de pression en gaz (et de l'eau) et les saturations en eau associées ont été obtenues à partir d'un drainage effectué de l'aquifère complètement saturé en eau. Lors du drainage, des pressions de l'air du sol ont été imposées au niveau des limites amont et aval du milieu poreux modélisé : P_{amont} et P_{aval} (Figure 5. 9). Dans le modèle numérique, la phase de drainage du milieu poreux a été simulée pendant 10 jours afin d'obtenir un profil hydrique à l'équilibre statique. La pression de référence de gaz à la surface du sol a été fixée à 1 atm. Quant à la tortuosité τ du milieu poreux (sable moyen, sable fin, gravier, sable grossier), elle a été calculée à partir du modèle de Millington-Quirk (1961). La simulation du transfert de masse au moyen de SIMUSCOPP étant basée sur des conditions isothermes, les températures moyennes mesurées de 15 et 16 °C pour SCERES1 respectivement SCERES2 ont été choisies comme températures constantes dans le milieu poreux.

Pour assurer la continuité du milieu poreux et pour simplifier le transfert entre les mailles qui représentent la dalle de béton et les mailles adjacentes, nous avons représenté la dalle sous la surface du sol (Figure 5. 42). Sous la dalle de béton, le lit de gravier est composé de deux lits de graviers différents dont les perméabilités et porosités sont résumées dans le Tableau 5. 4. Le lit est composé de 9,5 cm de gravier G1, situé directement sous la dalle, et de 3,5 cm de gravier G2. Dans le modèle numérique, les deux lits de graviers sont représentés par deux couches de 10 cm de hauteur chacune. En plus, sous la contrainte du maillage, nous avons présenté l'épaisseur de la jupette de 5 mm par une maille de 25 cm, ce qui peut avoir un impact local non négligeable sur le panache de vapeurs de TCE au niveau de la dalle de béton et son entourage.

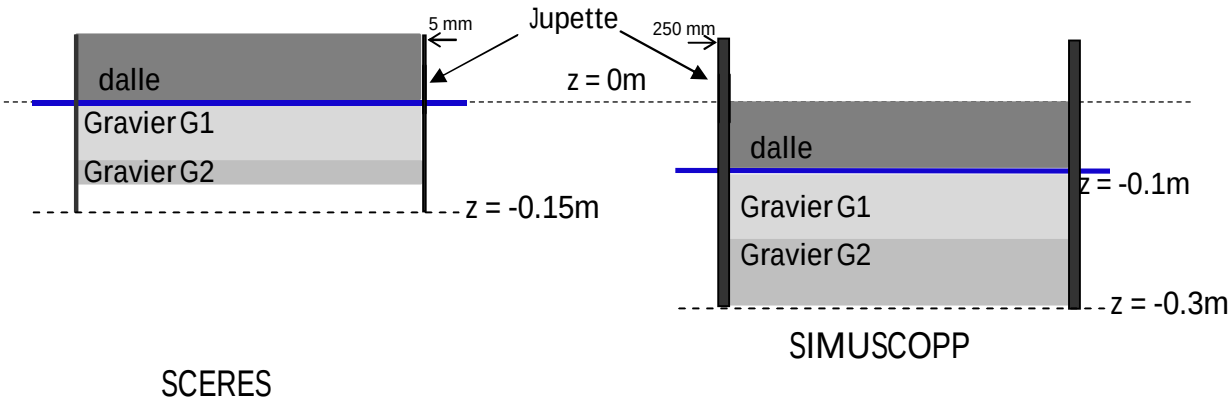


Figure 5. 42 : Schématisation choisie de la dalle de béton et du gravier dans le modèle numérique SIMUSCOPP

5.5.4. Panache de vapeurs de TCE simulé

5.5.4.1 Distribution des vapeurs de TCE dans la zone non saturée

La figure 5. 43 montre une coupe longitudinale de la distribution calculée des concentrations de vapeurs de TCE dans la zone non saturée de SCERES 5 h, 5 j, 10 j et 17 j après le début de l'injection du TCE lors de SCERES1. Cinq heures après le début de l'injection, la zone source commence à s'étaler latéralement et verticalement sachant que le TCE en phase est encore une phase fluide mobile. Dès le début de l'injection, la volatilisation du TCE prend naissance, et les vapeurs de TCE commencent à se propager aussi bien latéralement que verticalement dans le milieu poreux (Figure 5. 44). Après 5 jours, la zone source a continué à s'étaler surtout suivant la verticale et les vapeurs de TCE ont propagé beaucoup plus dans le sol dans toutes les directions. Il est à noter que le transport des vapeurs dans le sol est plus prononcé dans le sens de la pente du toit de la nappe. À gauche de la zone source, les vapeurs sont bloquées à cause de la présence des blocs de sable fin. Les concentrations de vapeurs en TCE sous la dalle de béton sont comprises entre 125 et 500 ppmv. Ce résultat de simulation est en accord avec les observations faites (cf. Figure 5. 36).

Dix jours après l'injection, une grande partie de la zone source s'est propagée dans le milieu poreux ce qui a conduit d'une part à l'augmentation des concentrations en TCE dans la zone non saturée et d'autre part à l'appauvrissement

de la zone source.

17 jours après l'injection, les vapeurs de TCE couvrent la plupart de la zone non saturée de SCERES. Les concentrations de vapeur de TCE sont encore plus élevées dans la zone non saturée et le volume de la zone source est devenu plus petit.

Quant aux concentrations de vapeurs de TCE simulées dans la zone non saturée de l'expérience SCERES2, elles présentent, globalement, une évolution spatio-temporelle similaire de SCERES1 (cf annexes A2).

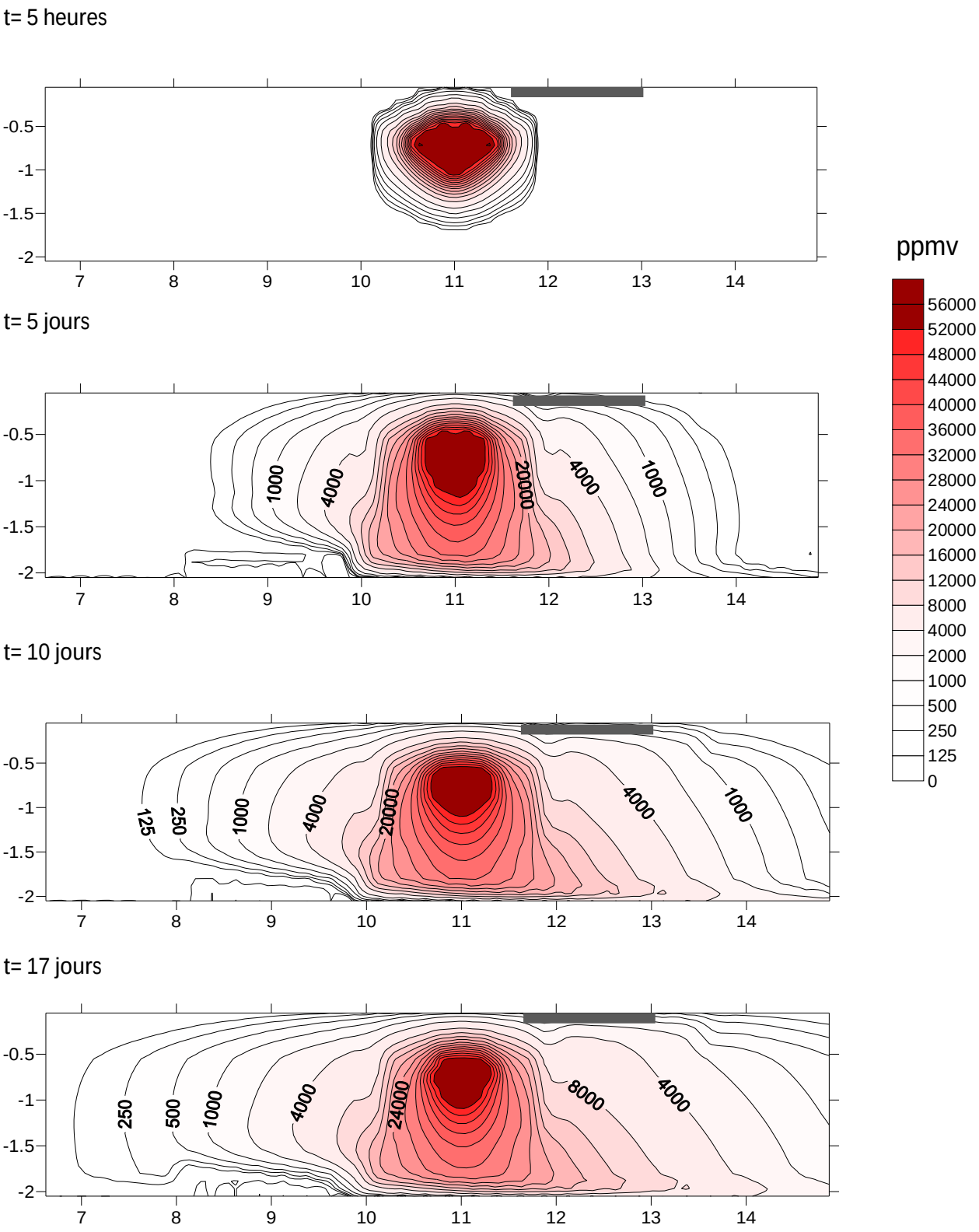


Figure 5. 43 : Coupe longitudinale de la distribution simulée des concentrations de vapeurs de TCE (ppmv) à 5heures, 5, 10 et 17 jours après l'injection lors de SCERES1

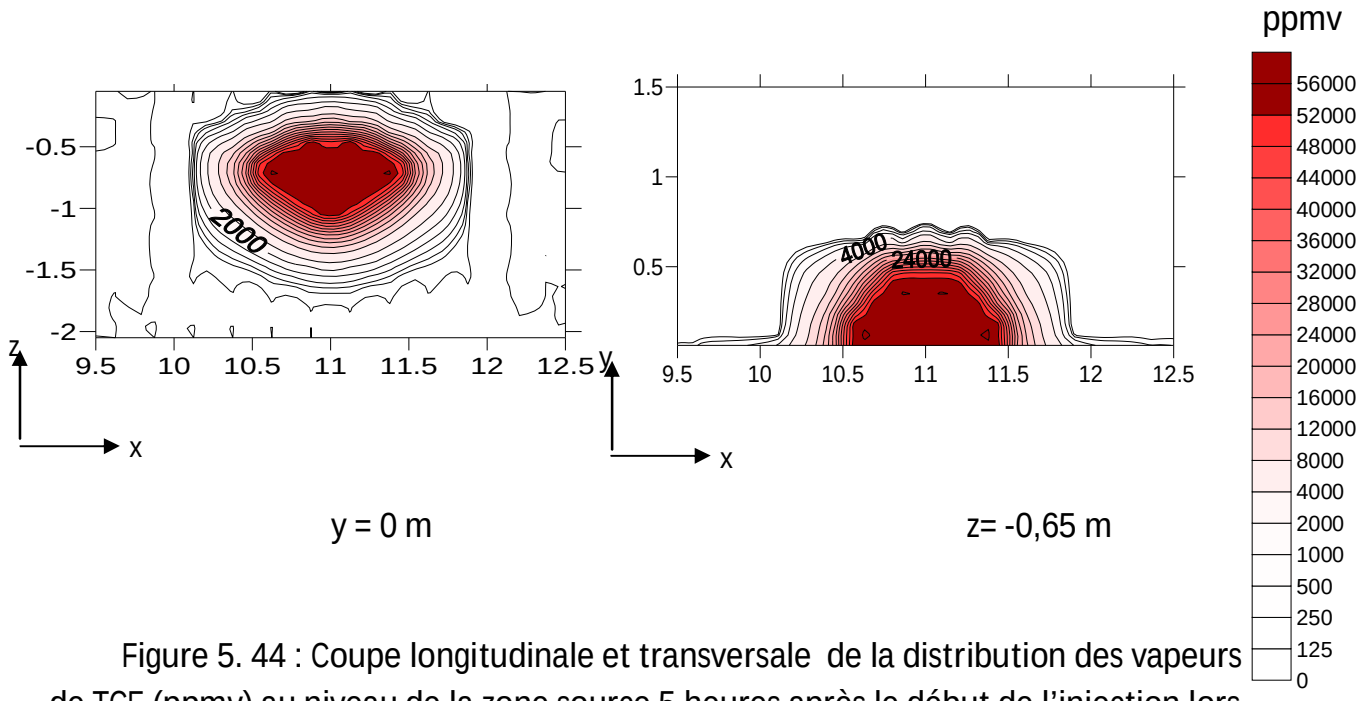


Figure 5. 44 : Coupe longitudinale et transversale de la distribution des vapeurs de TCE (ppmv) au niveau de la zone source 5 heures après le début de l'injection lors de SCERES1

a) Distribution des vapeurs de TCE au niveau de la zone source de TCE

La Figure 5. 45 présente le profil vertical de la saturation en TCE au centre de la zone source juste après la fin de l'injection du volume de TCE pendant SCERES1. À la fin de l'injection (t=1 h), la saturation en TCE calculée avec SIMUSCOPP atteint un maximum de 0,1 à la profondeur d'injection 0,65 m ; à cet instant la hauteur de la zone de pollution est de 60 cm. Au bout de 5 heures, la saturation maximale en TCE a diminué jusqu'à la moitié et s'est étalée suivant la verticale. Ainsi la zone source a atteint la profondeur de 1 m (Figure 5. 44 et Figure 5. 45). La Figure 5. 44 montre que la zone source s'est également étalée en direction latérale (suivant x et y) jusqu'à atteindre une surface de 0,5× 1 m², au lieu de 0,25×0,5 m² au moment de l'injection. L'étalement latéral est du à l'effet combiné de la diffusion numérique (liée à la taille de maille) et de la capillarité du milieu poreux. Cinq jours après l'injection, la saturation en TCE s'est stabilisée à la valeur de la saturation résiduelle en TCE fixée à 0.04 en ZNS, sur toute la hauteur de la zone source. À cet instant les vapeurs ont atteint la profondeur de 1,17 m. A partir de 10ème jour la zone source commence à s'appauvrir de la périphérie; la hauteur de la zone source est de l'ordre de 30 cm.

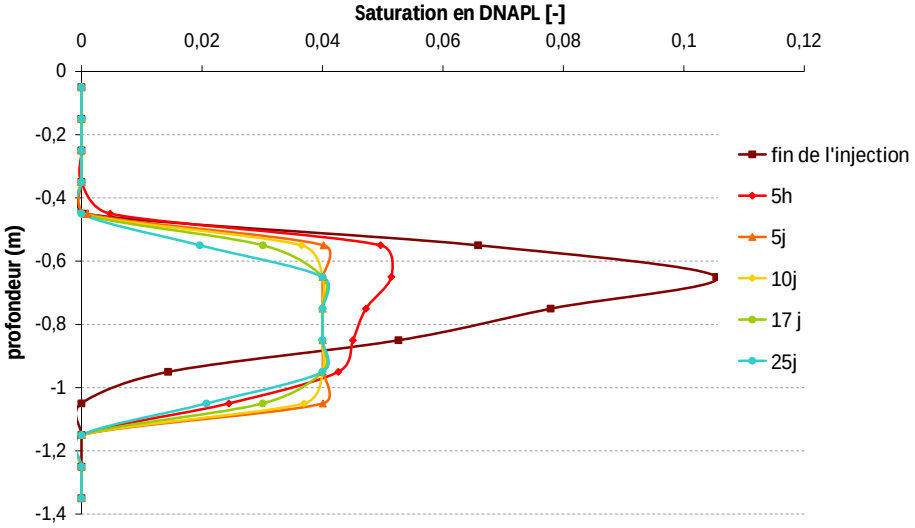


Figure 5. 45 : Evolution du profil vertical de la saturation en TCE calculée au centre de la zone source après l'injection du TCE lors de SCERES1

Une évolution de la saturation en TCE dans la zone source de TCE a été simulée lors de SCERES2 (Figure 5. 46). La seule « grande » différence est que le niveau de saturation en TCE au moment de la fin de l'injection a atteint une valeur plus élevée, de l'ordre de 0,14. Cette augmentation de la saturation maximale en TCE calculée pour SCERES2 peut être expliquée par le fait que le volume du TCE injecté dans le milieu poreux a été légèrement augmenté lors de SCERES2. Cette augmentation de volume a également augmenté la hauteur totale de la zone source lors de SCERES2, atteignant ainsi une profondeur de 1,25 m (Figure 5. 46)

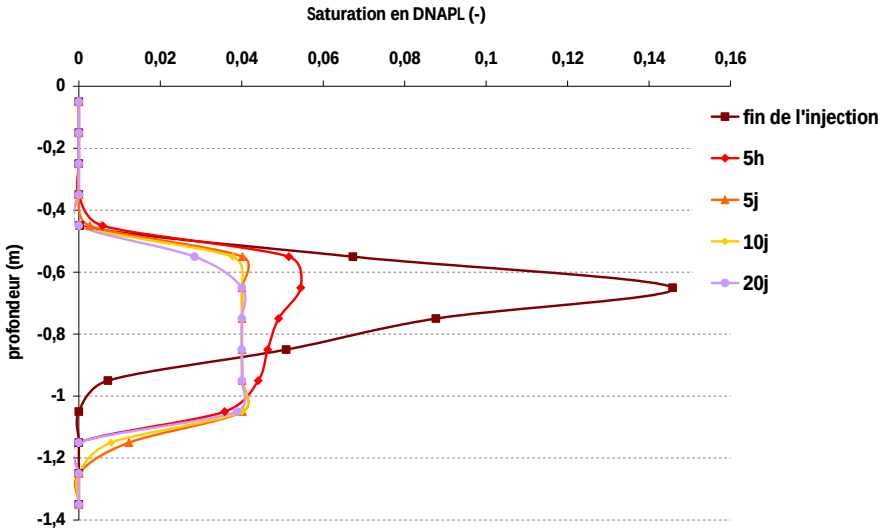


Figure 5. 46 : Evolution du profil vertical de la saturation en TCE calculée au centre de la zone source après l'injection du TCE lors de SCERES2

La Figure 5. 47 montre les concentrations de vapeurs de TCE à différents emplacements au niveau de la zone source de TCE pendant SCERES1. Nous remarquons qu'au centre de la zone source les concentrations sont constantes indépendantes des conditions expérimentales choisies (dépression sur la dalle, battement de la nappe). La concentration au centre de la zone source atteint 54000 ppmv. Contrairement au point qui se situe à 43,75 cm du centre de la zone source, où les concentrations diminuent progressivement en fonction du temps de 54000 jusqu'à atteindre 24000 ppmv juste avant le battement de la nappe. Pendant l'imbibition les concentrations de vapeurs de TCE calculées en ce point indiquent une légère augmentation de 3000 ppmv. Quant au point qui se situe à 68,75 cm, la concentration de vapeurs de TCE calculée est faible au début de l'injection puis elle augmente jusqu'à atteindre son régime permanent au bout de 5jours avec un maximum de concentration égale à 21000 ppmv. Quinze jours après l'injection, les concentrations calculées en ce point commencent à chuter jusqu'au battement de la nappe, où une augmentation de 3000 ppmv est observée. En revanche, les simulations ont montré que les concentrations retrouvent leur niveau de concentration « initiale» après la fin de la descente du toit de la nappe.

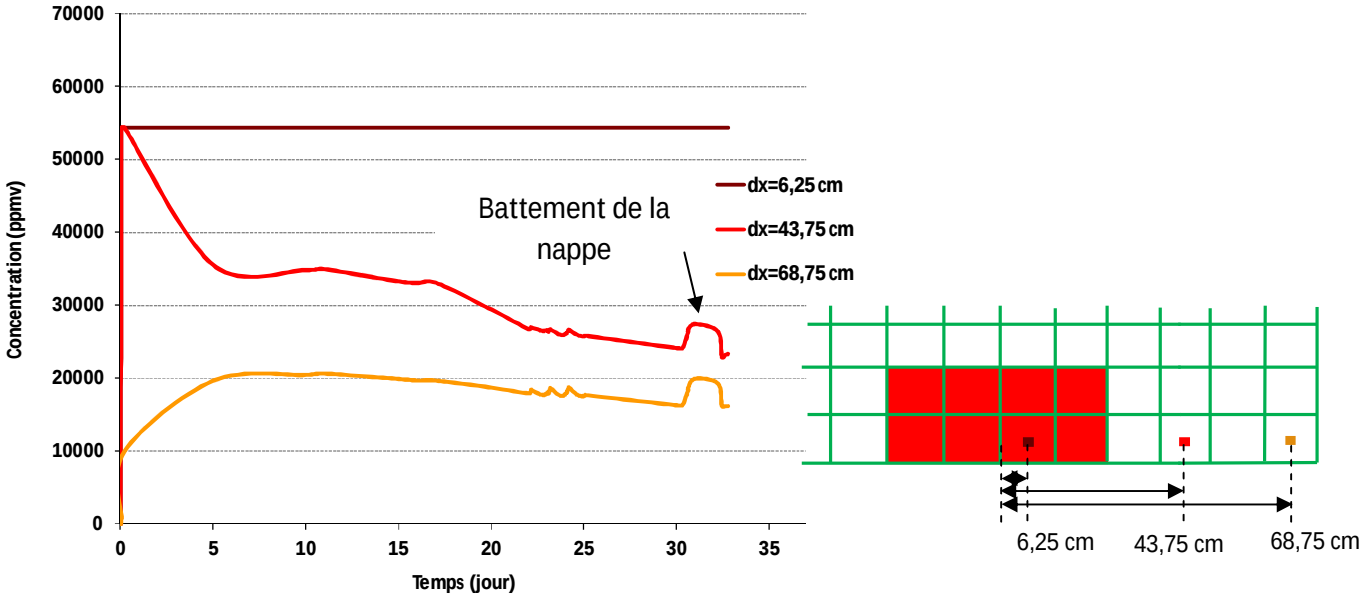


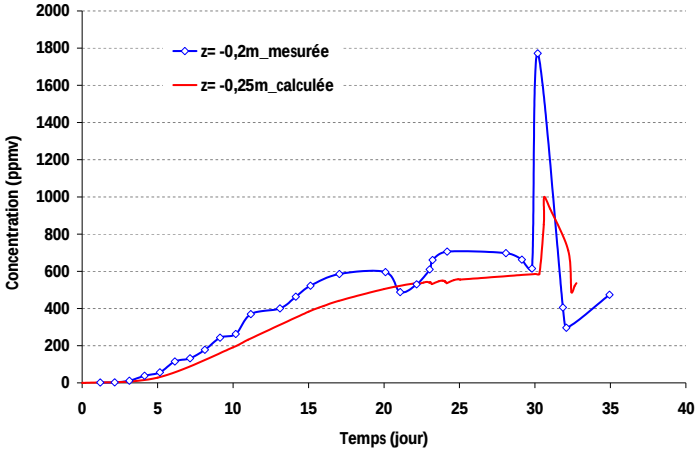
Figure 5. 47 : Concentration de TCE calculées lors de SCERES1 au niveau de la zone source en fonction du temps pour trois points de mesure localisés à 6,25 cm, 43,75 cm et 68,75 cm du centre de la zone source

b) Distribution des vapeurs de TCE dans la zone non saturée

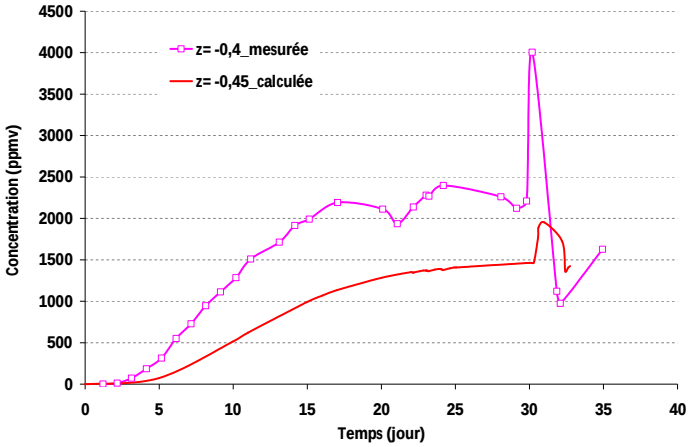
Pour la discussion des résultats obtenus avec SIMUSCOPP concernant les concentrations de vapeurs de TCE dans la zone non saturée du SCERES pendant SCERES1, nous avons pris l'exemple du point GA1 présenté dans la Figure 5. 48.

La Figure 5. 48 montre les concentrations de vapeurs de TCE calculées avec SIMUSCOPP pour SCERES1 au niveau du point GA1 à la profondeur 0,25 m et 0,45 m en les comparant aux concentrations mesurées pendant l'expérimentation. Nous remarquons que les concentrations simulées sous-estiment celles mesurées ce qui est particulièrement significatif à la profondeur 0,4 m (Figure 5. 48 b). Ceci peut être dû au fait que SIMUSCOPP est basé sur un équilibre thermodynamique entre les phases gazeuse et aqueuse par l'intermédiaire de la constante d'Henry. Ce qui impliquerait qu'à l'interface sable fin/sable moyen (profondeur 0,5 m), la présence d'une saturation en eau élevée à cause de la nappe perchée. Nous avons obtenu au moyen de SIMUSCOPP des concentrations de vapeurs de TCE moins élevées que celles mesurées car une grande quantité des vapeurs va se dissoudre dans l'eau présente à cette interface. Or, sur SCERES cette hypothèse ne peut pas être appliquée pour une saturation en eau élevée (Dridi, 2006). Il est aussi à noter que la modélisation de la jupette avec SIMUSCOPP peut avoir un impact sur la propagation des vapeurs proche surface au niveau du point GA1 puisque la jupette est enfoncée jusqu'à la profondeur 0,30 m, contre 0,15 m dans SCERES (Figure 5. 42).

Notons également que la volatilisation des vapeurs de TCE est fonction de la température. Or SIMUSCOPP ne prend pas en compte la variation de la température du sous sol. Dans nos simulations nous avons choisi comme entrée fixe dans le modèle numérique une température de 15 °C qui correspond à la moyenne de la température mesurée entre la profondeur 0,45 m et 1,25 m pendant l'expérimentation SCERES1. Cette valeur de température sous estime de 1 °C la température mesurée réellement sous sol pendant les 11 premiers jours de SCERES1 (Figure 5. 10). Ce qui a pu limiter la volatilisation de vapeurs de TCE dans la zone source et accentuer l'écart entre les concentrations mesurées et calculées.



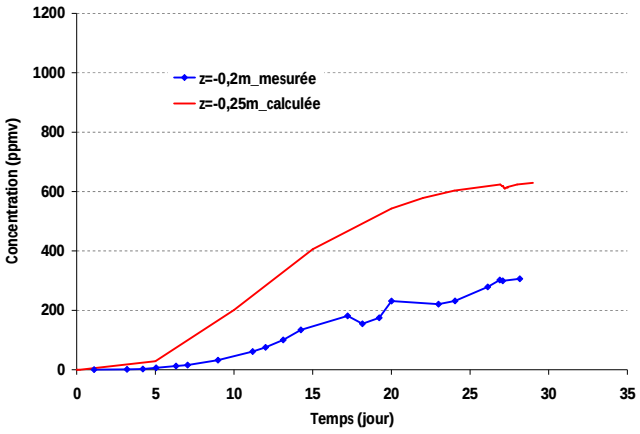
a) z= -0,2 m



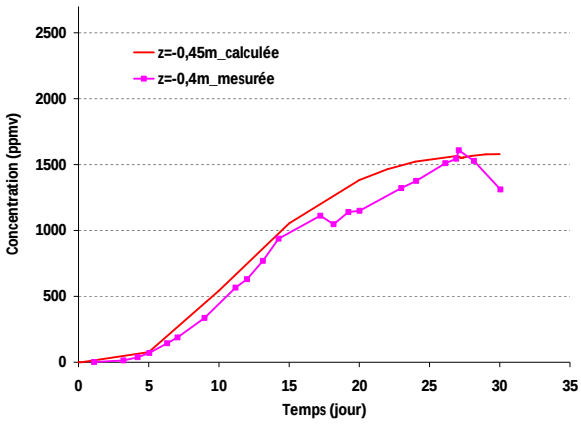
b) z= -0,4 m

Figure 5. 48 : Concentrations de vapeurs de TCE mesurés et simulées au point GA1 aux profondeurs 0,25 m et 0,45 m lors de SCERES1

Contrairement au cas de SCERES2, la température moyenne imposée dans SIMUSCOPP est de 16°C. Cette valeur de température surestime de 3 °C la température réellement mesurée dans le sous sol pendant les 5 premiers jours de SCERES2 (Figure 5. 10). Ceci va favoriser la volatilisation des vapeurs de TCE dans la zone non saturée. C'est pour cela que nous avons obtenu à la profondeur 0,45 m une concentration calculée proche de la concentration mesurée (Figure 5. 49 b). Par contre la concentration calculée est supérieure à celle mesurée proche de la surface du sol (Figure 5. 49 a).



a) z= -0,2 m



b) z = -0,4 m

Figure 5. 49 : Concentrations de vapeurs de TCE mesurés et simulées au point GA1 aux profondeurs 0,25 m et 0,45 m lors de SCERES2

5.5.4.2 Distribution des vapeurs de TCE au niveau de la dalle de béton

a) Distribution des vapeurs de TCE au niveau de la dalle 1

La Figure 5. 50 montre la distribution calculée des vapeurs de TCE sous la dalle 1 jusqu'à la profondeur 0,25 m 20 jours après l'injection du TCE dans SCERES ; rappelons ici qu'au bout de 20 jours, les concentrations de vapeurs de TCE mesurées sous la dalle ont atteint un palier de concentration. Les concentrations de vapeurs de TCE simulées sous la dalle 1 en régime permanent varient entre 1000 et 2000 ppmv coté amont et centre de la dalle et entre 500 et 1000 ppmv coté aval.

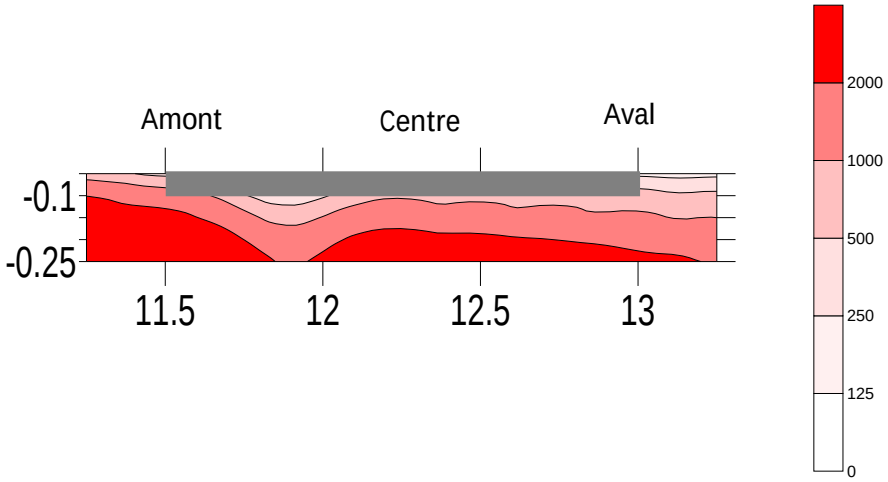


Figure 5. 50 : Coupe longitudinale de la distribution calculée des concentrations de vapeurs de TCE sous la dalle 1 au bout de 20 jours après l'injection du TCE lors de SCERES1

Le résume les concentrations en TCE mesurées ponctuellement sous la dalle et la distribution de concentrations en TCE calculées avec SIMUSCOPP. Nous remarquons que, à l'exception du point 3C, les concentrations mesurées se situent dans les intervalles des concentrations calculées sous la dalle avec une tendance de surestimation. Ceci peut s'expliquer par le fait que le coefficient de diffusion effective utilisé dans les simulations numériques tend à sous-estimer le flux diffusif à travers la dalle pour les forts gradients de concentrations conduisant ainsi à une accumulation des vapeurs de TCE sous la dalle.

Tableau 5. 5 résume les concentrations en TCE mesurées ponctuellement sous la dalle et la distribution de concentrations en TCE calculées avec SIMUSCOPP. Nous remarquons que, à l'exception du point 3C, les concentrations mesurées se situent dans les intervalles des concentrations calculées sous la dalle avec une tendance de surestimation. Ceci peut s'expliquer par le fait que le coefficient de diffusion effective utilisé dans les simulations numériques tend à sous-estimer le flux diffusif à travers la dalle pour les forts gradients de concentrations conduisant ainsi à une accumulation des vapeurs de TCE sous la dalle.

Tableau 5. 5 : Concentrations en TCE mesurées et calculées directement sous la dalle 1 au bout de 20 jours après l'injection de TCE lors de SCERES1

	Concentration mesurée (ppmv)	Concentration calculée (ppmv)
Amont dalle _3C	825	1000-2000
Centre dalle_2C	1370	1000-2000
Aval dalle_1C	685	500-1000

Une autre explication pour la différence entre les concentrations de vapeurs de TCE mesurées et calculées avec SIMUSCOPP est la position modélisée de la dalle dans SIMUSCOPP. En effet, nous avons vu (Figure 5. 42), que pour des raisons techniques la dalle de béton a du être placée sous la surface du sol. Donc la profondeur 0 m où nous avons mesuré les concentrations de vapeurs sous la dalle correspond à la profondeur 0,1 m dans le domaine modélisé.

La Figure 5. 51 résume les profondeurs prises pour les calculs de concentrations de vapeurs de TCE avec SIMUSCOPP par rapport au modèle physique SCERES. En effet, le modèle numérique calcule les différentes inconnues (concentration, pression, saturation en eau…) au centre de chaque maille. En revanche, pendant les expériences, les concentrations de vapeur de TCE ont été prélevées directement sous

la dalle (cote z = 0 m) ce qui correspond, moyennant SIMUSCOPP, à la profondeur 0,1 m. Or les concentrations sont calculées à la profondeur 0,05m (dans la dalle) et à la profondeur 0,15 m (dans le gravier), donc les concentrations de vapeurs de TCE mesurées sous la dalle doivent être comprises entre celles calculées à 0,05 m et à 0,15 m.

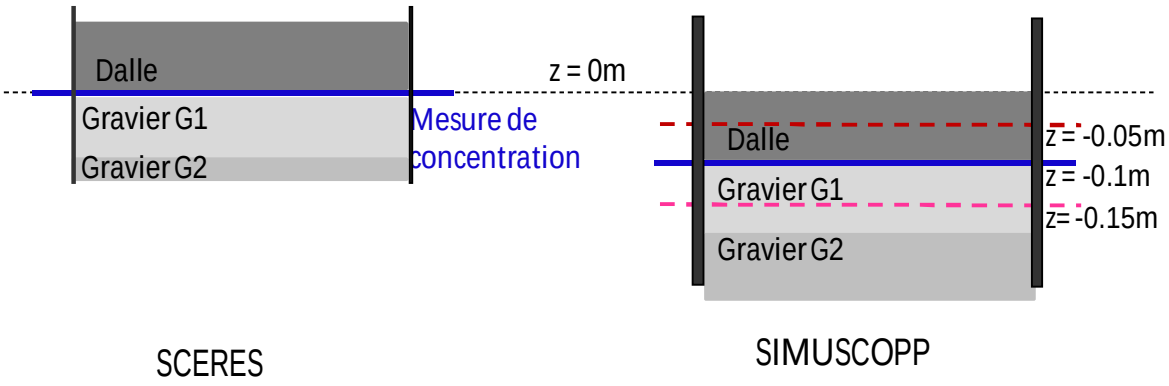


Figure 5. 51 : Profondeurs prises pour le calcul des concentrations de vapeurs de TCE au niveau de la dalle

Pour la suite nous avons pris l'exemple du point 3C pour comparer les concentrations mesurées à celles calculées au moyen de SIMUSCOPP. En effet, la Figure 5. 52 montre l'évolution des concentrations de vapeurs de TCE mesurées pendant SCERES1 au point 3C (coté amont de la dalle) et l'évolution des concentrations de vapeurs de TCE calculées par SIMUSCOPP dans la dalle et dans le gravier G1. Nous constatons que les concentrations mesurées sont bien comprises entre les concentrations calculées dans la dalle et les concentrations calculées dans le gravier G1.

La Figure 5. 52 permet aussi d'analyser l'effet que génère la mise en dépression de l'air de la cloche sur les concentrations calculées par SIMUSCOPP. En effet, nous apercevons que pendant la mise en dépression de la dalle, sous l'effet de l'aspiration de l'air du sol, les concentrations calculées dans la dalle et même dans le gravier augmentent. À la fin de chaque essai de mise en dépression de la dalle, les concentrations diminuent. Cette partie sera bien détaillée dans le cas de la mise en dépression pendant SCERES2 (cf le paragraphe suivant b).

Pendant la phase de l'imbibition, mise en œuvre à t=30jours, nous remarquons que les concentrations calculées présentent une augmentation de concentration dans la dalle et dans le gravier G1 plus élevée que celle mesurée, dans le cas de la dalle de l'ordre de 10 fois.

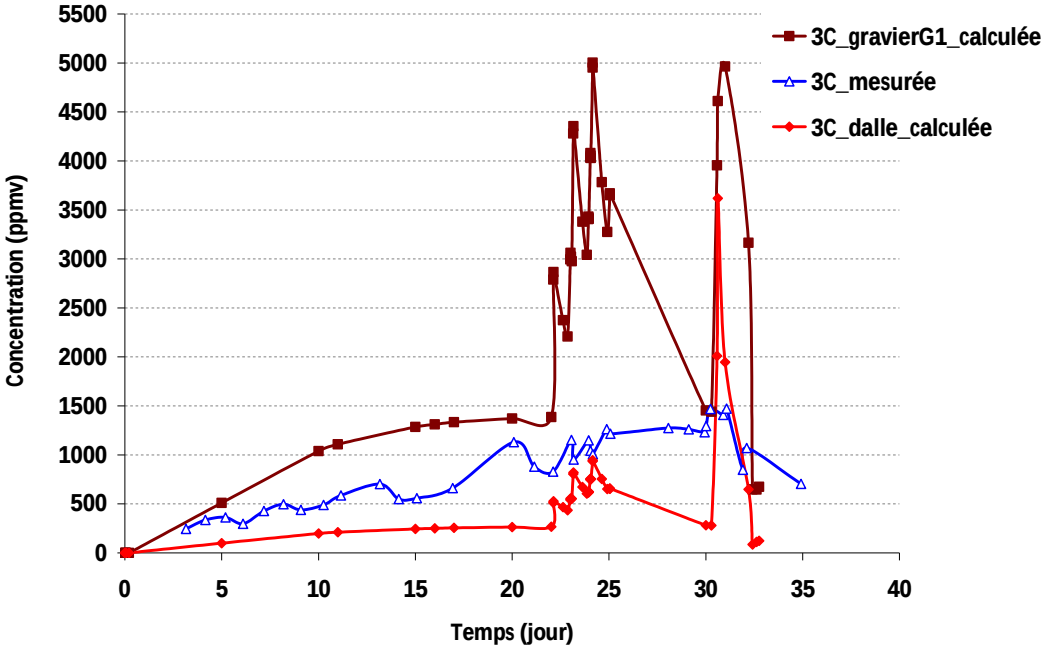


Figure 5. 52 : Concentrations de vapeurs de TCE mesurés sous la dalle au point 3C et celles calculées dans la dalle et dans le gravier G1 lors de SCERES1

b) Distribution des vapeurs de TCE au niveau de la dalle 2

La Figure 5. 53 montre la distribution des vapeurs de TCE calculée sous la dalle 2 jusqu'à la profondeur 0,4 m au 24ème jour après l'injection du TCE ; le 24ème jour correspond au régime de stabilisation des concentrations observé lors de l'expérimentation. Nous constatons que les concentrations de vapeur de TCE calculées sous la dalle 2 (à z=-0,1 m) varient entre 500 et 2000 ppmv.

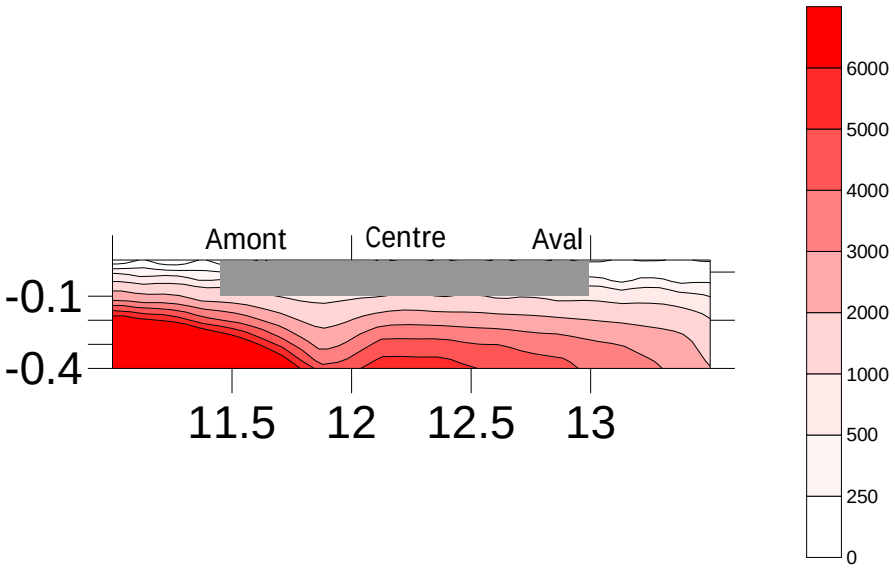


Figure 5. 53 : Coupe longitudinale de la distribution des vapeurs de TCE calculée sous la dalle 2 au bout de 24 jours après l'injection de TCE lors de SCERES2

Le Tableau 5. 6 résume les différentes concentrations de vapeurs de TCE mesurées ponctuellement sous la dalle et les concentrations de vapeurs de TCE calculées par SIMUSCOPP. Nous remarquons que les concentrations mesurées sous la dalle sont surestimées par SIMUSCOPP. Cette surestimation peut à nouveau être expliquée par la sous-estimation de la diffusion de vapeurs à travers la dalle 2, moyennant le coefficient de diffusion effective utilisé dans le modèle numérique favorisant une accumulation des vapeurs de TCE sous la dalle 2.

Tableau 5. 6: Concentrations en TCE mesurées et calculées sous la dalle au bout de 24 jours après l'injection de TCE lors de SCERES2

	Concentration mesurée (ppmv)	Concentration calculée (ppmv)
Amont dalle _3C	450	1000-2000
Centre dalle_2C	450	1000-2000
Aval dalle_1C	380	500-1000
Amont dalle _20M	700	2000-3000
Aval dalle_20A	400	2000-3000
Amont dalle _40M	1050	5000-6000
Centre dalle_40C	580	5000-6000
Aval dalle_40A	600	3000-4000

La Figure 5. 54 montre l'évolution des concentrations de vapeurs de TCE mesurées pendant SCERES2 au point 3C (coté amont de la dalle) et calculées par SIMUSCOPP, au niveau du point 3C, dans la dalle et dans le gravier G1. Nous constatons que les concentrations mesurées sous la dalle sont surestimées, pour une grande période de SCERES2, par les concentrations calculées dans la dalle. Par ailleurs, les concentrations mesurées dans le gravier G1 sont fortement surestimées par les concentrations calculées. Cependant, pendant les 7 premiers jours de SCERES2, les concentrations calculées dans la dalle ont été en bon accord avec celles mesurées sous la dalle au point 3C.

La Figure 5. 54 permet aussi d'analyser l'effet de la mise en dépression de l'air de la cloche sur les concentrations mesurées et calculées. En effet, nous remarquons que la mise en dépression dans la cloche a fait augmenter les concentrations de vapeurs mesurées sous la dalle. Le modèle numérique a également traduit cet effet, car les concentrations calculées, que ce soit dans la dalle ou dans le gravier G1 ont augmenté. Pour voir en détail l'effet de la mise en dépression sur la distribution de vapeurs sous la dalle, nous avons effectué un zoom sur l'évolution des concentrations de vapeurs de TCE calculées dans le gravier G1 pendant la période de mise en dépression (Figure 5. 55). Il s'avère que, suite à chaque essai de mise en dépression, les concentrations calculées dans le gravier augmentent à cause de l'aspiration de

l'air du sol générant la convection des vapeurs de TCE vers la dalle. Une fois la mise en dépression arrêtée, le flux convectif devient négligeable ou nul, l'apport de vapeurs s'arrête et la redistribution des vapeurs de TCE sous la dalle par diffusion a lieu. Sans apport significatif des vapeurs de TCE, les concentrations de vapeurs de TCE sous la dalle vont diminuer à cause du flux diffusif vers l'interface dalle/atmosphère (Figure 5. 55).

À cause des problèmes de résolution rencontrés avec le code SIMUSCOPP lors de la simulation du battement de la nappe, nous n'allons pas aborder la partie de l'imbibition-drainage pour l'expérience SCERES2.

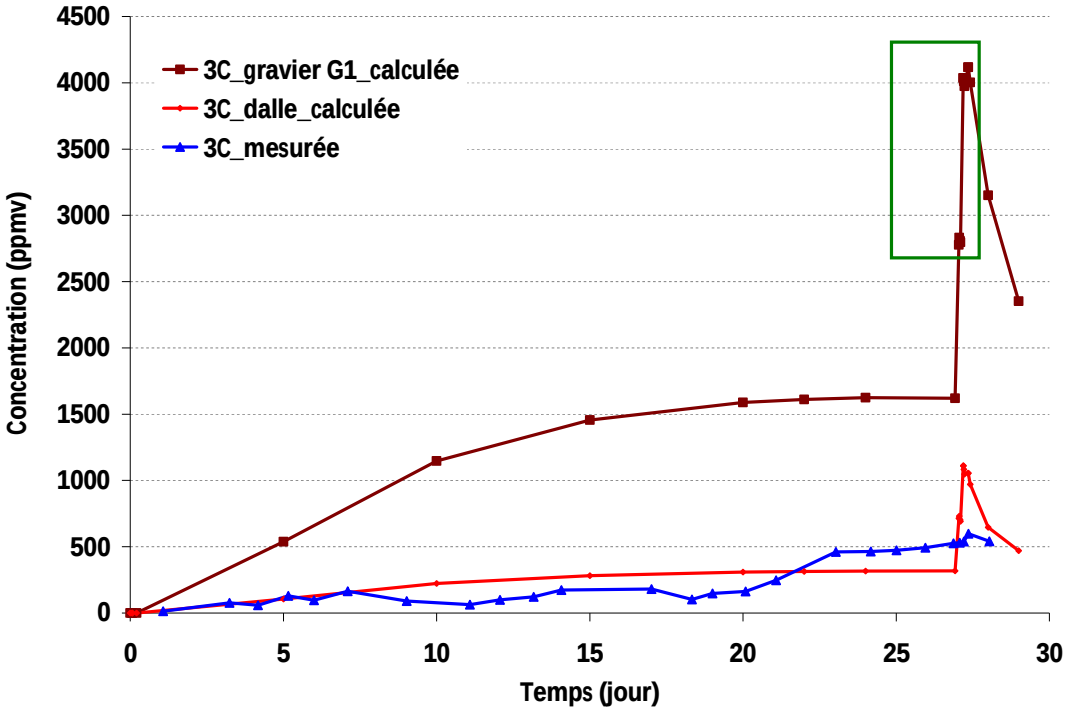


Figure 5. 54 : Concentrations de vapeurs de TCE de TCE mesurées sous la dalle au point 3C et celles calculées dans la dalle et dans le gravier G1 lors de SCERES2

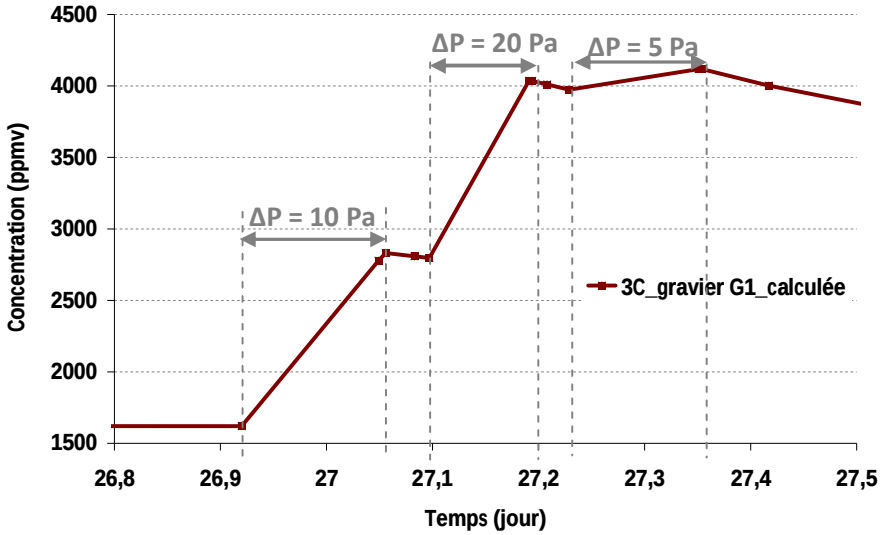


Figure 5. 55 : Evolution des concentrations de vapeurs de TCE calculées dans le gravier pendant la période de la mise en dépression lors de SCERES2

5.5.5. Etude de sensibilité

Les résultats numériques obtenus sont relativement proches des résultats expérimentaux. Cependant, plusieurs simulations et études complémentaires ont été effectuées pour étudier la sensibilité de certains paramètres du modèle et leur effet sur les concentrations de vapeur de TCE et les pressions de l'air du sol calculés.

5.5.5.1. Effet du modèle de tortuosité

La tortuosité du milieu poreux est un facteur prépondérant pour la détermination de coefficient de diffusion effectif. Dans les résultats présentés précédemment la tortuosité a été basée sur le modèle Millinghton Quirk (MQ) (1961). Pour étudier l'effet du choix du modèle de la tortuosité sur les concentrations des vapeurs dans la zone non saturée nous avons effectué une simulation moyennant SIMUSCOPP, basée sur les tortuosités déterminées à partir du modèle de Penman-Millington Quirk PMQ (1997). Ensuite, nous avons comparé les concentrations de vapeurs issues des deux modèles de tortuosité aux concentrations mesurées. Pour cela nous avons pris l'exemple du profil vertical mesuré au point GA1 20jours après l'injection du TCE lors de SCERES1.

La Figure 5. 56 montre le profil vertical de concentration calculé sur la base des deux modèles de tortuosité et celui mesuré au point GA1. Nous constatons que les concentrations de vapeurs obtenues au point GA1 avec le modèle PMQ sont supérieures à celles calculées avec le modèle MQ. Ceci est dû au coefficient de diffusion effectif qui est plus grand avec le modèle PMQ. Nous remarquons aussi que dans le sable moyen les concentrations de vapeurs de TCE calculées avec le modèle PMQ sont plus proches de celles qui ont été mesurées. Inversement, dans le sable fin (entre la surface du sol et la profondeur de 0.5m), les concentrations issues du modèle MQ sont plus proches de celles mesurées. Pour optimiser nos concentrations calculées, une approche « croisée » pourrait approcher les concentrations calculées à celles mesurées. Cette approche consisterait à affecter au sable moyen le modèle PMQ et au sable fin le modèle MQ.

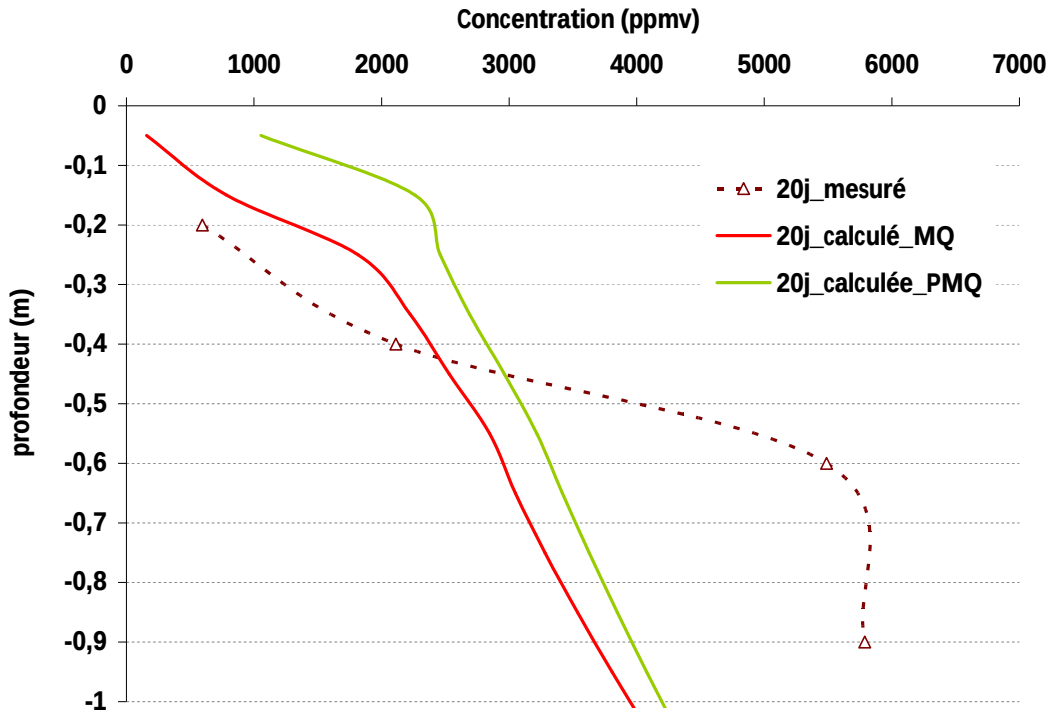


Figure 5. 56 : Profil vertical des concentrations mesurées et simulées au point GA1 au 20ème jour après l'injection de TCE

5.5.5.2. Effet de la variation de la pression atmosphérique

Toutes les simulations avec SIMUSCOPP ont été effectuées en supposant que la pression atmosphérique est constante à la surface du sol. Ce choix a été pris suite à

des difficultés techniques rencontrées avec le code SIMUSCOPP, lors de la simulation des expériences sur SCERES en prenant en compte la variation de la pression atmosphérique. Cependant, une étude préliminaire avec une discrétisation spatiale de la zone non saturée moins fine que celle présentée dans le chapitre 5.5.1 a été effectuée au début de la thèse. Elle a tenu compte de la variation de la pression atmosphérique dans le but d'étudier son l'influence sur le champ de pression de l'air du sol.

Pour cela nous avons effectué deux simulations. Dans la première simulation (Sim1) nous avons imposé à la surface du sol de SCERES une pression atmosphérique constante et dans la deuxième (Sim2), nous avons pris en compte la variation temporelle de la pression atmosphérique en se basant sur les mesures effectuées sur SCERES. La Figure 5. 57 montre les pressions de l'air de sol calculées issus de Sim1 (courbe rose) et les pressions de l'air du sol calculées issus de Sim2 (courbe bleue), les pressions de l'air du sol mesurées au même jour comme les pressions atmosphériques. Pour effectuer la comparaison, nous avons pris les pressions de l'air du sol à la profondeur 0,4 m.

L'écart maximal entre les pressions calculées lors de Sim1 et les pressions mesurées est important (de l'ordre de 600 Pa). Cependant, les pressions calculées à 0,4 m en utilisant la variation temporelle de la pression atmosphérique (Sim2) se rapprochent des pressions mesurées à la même profondeur. Nous remarquons aussi que ces pressions calculées évoluent de la même manière que les pressions mesurées. En effet, cela est relié à la fluctuation de la pression atmosphérique pendant la période de mesure, où nous avons enregistré une diminution maximale d'environ 6 mbar (600 Pa), ce qui a engendré une fluctuation de pression dans l'air du sol. Nous pouvons ainsi conclure que les pressions de l'air du sol sont sensibles à toute variation de la pression de l'atmosphère, d'où l'importance de prise en compte de cette variation dans la détermination du champ de pression ainsi la concentration des vapeurs de TCE dans l'air du sol.

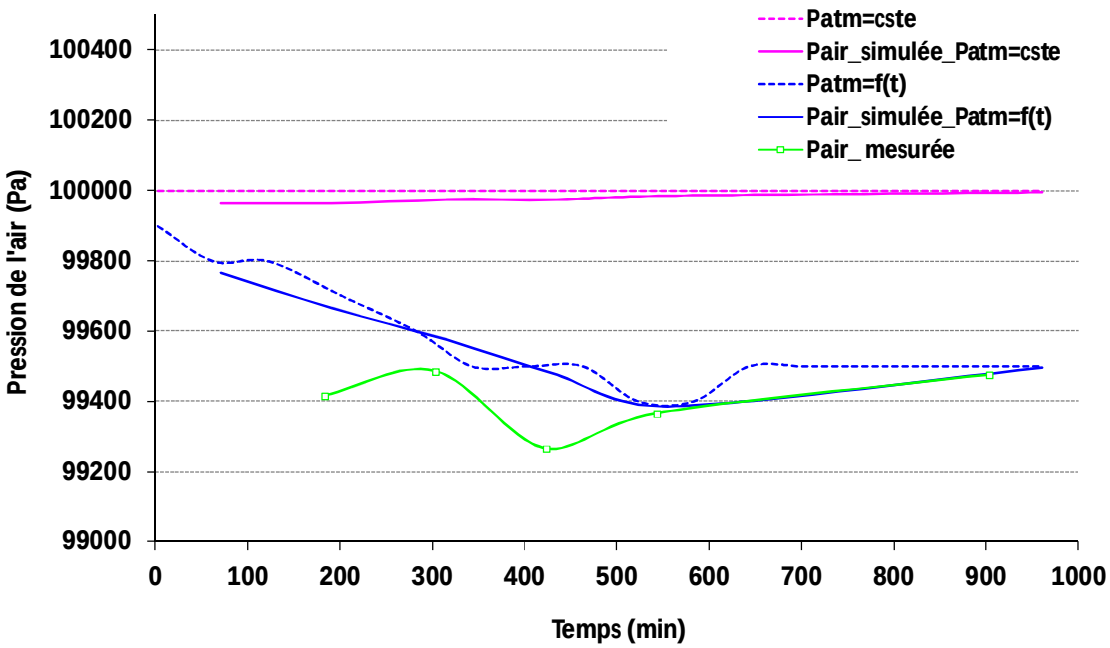


Figure 5. 57: Effet de la prise en compte de la variation de pression atmosphérique sur les pressions de l'air du sol à 0,4 m de profondeur

Bilan du chapitre

Dans ce chapitre nous nous sommes intéressés à la distribution des vapeurs de TCE dans la zone non saturée, provenant de la volatilisation de la zone source de pollution de TCE située dans la zone non saturée de SCERES. Nous avons constaté que l'évolution du panache de vapeurs de TCE dans la zone non saturée a dépendu essentiellement de l'emplacement du point par rapport à la zone source mais aussi des conditions météorologiques, comme la température du sol et la pression atmosphérique à la surface du sol. Nous avons aussi analysé l'influence du battement de la nappe sur la redistribution des vapeurs de TCE dans la zone non saturée. Ce qui va influencer par la suite, le flux de vapeurs à l'interface sol/atmosphère.

Par ailleurs, nous avons constaté que la présence sur SCERES d'un milieu peu perméable et peu diffusif, sous forme d'une dalle de béton, a constitué une « barrière » vis-à-vis du transfert de vapeurs de TCE vers l'interface dalle/atmosphère. Nous avons vu aussi comment l'effet de la mise en dépression dans la cloche, installée sur la dalle, a pu contribuer à l'augmentation des concentrations de vapeurs de TCE sous la dalle. Par ailleurs, nous ne pouvons omettre le rôle des caractéristiques des deux dalles, comme la perméabilité et le

coefficient de diffusion effectif, dans la quantification du niveau de concentration de vapeurs de TCE sous les deux dalles. De plus, leur rôle est nécessaire dans la quantification de flux de vapeurs sur l'interface dalle/atmosphère et dalle/air intérieur de la cloche.

Dans le chapitre suivant, nous abordons les flux de vapeurs mesurés à l'interface sol/atmosphère et dalle/atmosphère et les analysons en mettant en œuvre différentes approches et outils mathématiques. Nous abordons aussi, l'influence de la mise en dépression dans l'air de la cloche sur, cette fois ci, l'évolution des concentrations de vapeurs de TCE dans l'air intérieur de la cloche. Nous verrons dans quelle mesure les caractéristiques de la dalle de béton ainsi que le niveau de contamination dans celle-ci, peuvent influencer les flux massiques à travers les deux dalles.

Chapitre 6 : Etude du transfert de vapeurs de TCE aux interfaces sol/atmosphère et dalle de béton/air intérieur (SCERES1 et SCERES2)

SOMMAIRE

6.1 Flux de vapeurs de TCE à l'interface sol/atmosphère 209

6.1.1 Flux de vapeurs de TCE mesurés 209

6.1.2 Flux de vapeurs de TCE calculés à l'interface sol/atmosphère 219

6.2 Flux de vapeurs de TCE à l'interface dalle de béton/air intérieur de la cloche 226

6.2.1 Transfert des vapeurs de TCE à travers la dalle de béton sans mise en dépression 226

6.2.2 Transfert des vapeurs de TCE à travers la dalle de béton induit par la mise en dépression de la cloche 231

6.2.3 Modélisation en 3D de la mise en dépression de la cloche (COMSOL) 245

Bilan du chapitre 278

Ce chapitre s'intéresse à l'un des objectifs principaux de notre recherche qui est d'évaluer, expérimentalement et numériquement, le flux des vapeurs de TCE à l'interface sol/atmosphère et dalle de béton/air intérieur du bâtiment modèle (la cloche). Nous allons notamment étudier le transport des vapeurs de TCE, à travers la dalle de béton, induit par un gradient de pression créé entre celle-ci et la cloche.

6.1 Flux de vapeurs de TCE à l'interface sol/atmosphère

Dans cette partie, nous nous intéressons à la quantification des flux de vapeurs de TCE à l'interface sol/atmosphère durant les expérimentations SCERES1 et SCERES2.

6.1.1 Flux de vapeurs de TCE mesurés

6.1.1.1 Flux de vapeurs de TCE mesurés pendant SCERES1

Les flux de vapeurs de TCE ont été mesurés, à l'aide de la chambre à flux du LHYGES, à plusieurs endroits au niveau de l'interface SCERES/atmosphère. La Figure 6. 1 met en relief les flux de vapeurs de TCE mesurés aux points : H, GA1, GL et GM1 pendant la première expérimentation SCERES1. Les flux de vapeurs de TCE, depuis la zone non saturée vers l'atmosphère, varient à la fois, en fonction de la distance par rapport à la zone source et en fonction du temps.

Le flux mesuré au point H est plus élevé que ceux mesurés aux points GA1 et GL. Ceci est tout à fait logique car le point H est le plus proche de la zone source de pollution. Cependant, le flux observé au point GA1 est plus élevé qu'au point GL (Figure 6. 1), or le point GA1 est plus éloigné de la zone source que le point GL. Ceci s'expliquerait par la présence de la dalle de béton qui représente une « barrière diffusive » au transfert des vapeurs de TCE vers l'atmosphère faisant augmenter les concentrations en vapeur de TCE sous la dalle. Cette augmentation des concentrations génère un champ de concentration avec des gradients de concentration élevés à la périphérie de la dalle induisant ainsi des grands flux diffusifs. Etant situé proche de la dalle, le point GA1 va ainsi recueillir plus de vapeurs de TCE que le point GL. D'ailleurs dans le chapitre 5 nous avons constaté que les concentrations de vapeurs de TCE à la profondeur 0,2 m étaient plus élevées au point GA1 qu'au point GL.

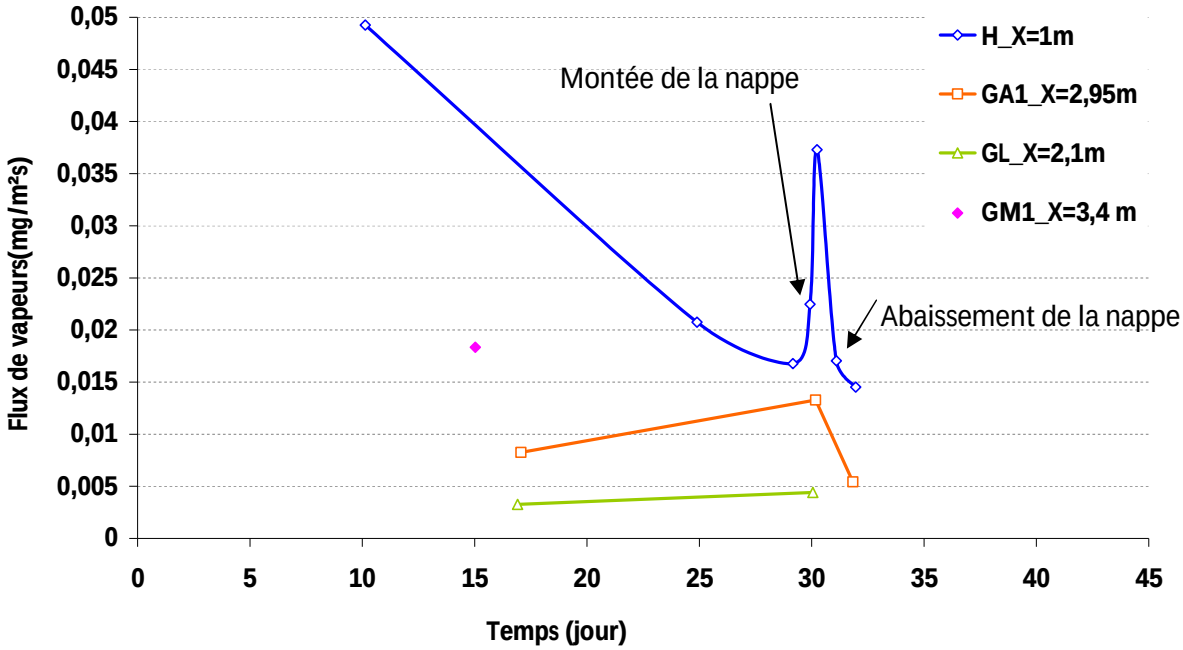


Figure 6. 1 : Flux de vapeurs de TCE mesurés aux points H, GA1 et GL lors de SCERES1

Les flux de vapeurs de TCE illustrés sur la Figure 6. 1 montrent aussi une différence de comportement : avant et pendant le battement de la nappe. En effet, la montée de la nappe, à t=30 j, a engendré une différence de pression très importante entre la pression de sous sol et la pression atmosphérique (Figure 5. 25 dans chapitre 5). Ce gradient de pression élevé a causé un déplacement de l'air du sol vers la surface favorisant ainsi le cheminement des vapeurs de TCE vers l'atmosphère. Les mesures de flux de vapeur de TCE au cours de l'imbibition au point H, GA1 et GL montrent une forte augmentation du flux par rapport aux mesures effectuées avant cette date (Figure 6. 1). À titre d'exemple du point H, le flux augmente de 130% pour atteindre un flux de 0,037 $mgm^{-2}s^{-1}$. Quant aux points GA1 et GL, nous avons mesuré respectivement pendant la montée de la nappe un flux de vapeurs de 0,013 et 0,004 $mgm^{-2}s^{-1}$. En ce qui concerne le drainage effectué deux jours après l'imbibition, à t=32 j, il a engendré un mouvement d'air descendant faisant diminuer la quantité de vapeurs de TCE sortant de la zone saturée.

Pendant SCERES1 le nombre de mesures de flux effectués n'était pas suffisamment grand pour pouvoir étudier finement l'évolution du flux de vapeurs à la surface du sol depuis l'injection de la zone source jusqu'à la période du battement de la nappe. Pour cette raison, nous avons intensifié pendant SCERES2 le suivi des flux de vapeurs de (47 mesures pendant SCERES2 contre 13 mesures pendant SCERES1).

6.1.1.2 Flux de vapeurs de TCE mesurés pendant SCERES2

a) Flux de vapeurs de TCE mesurés avec la chambre à flux du LHYGES

La Figure 6. 2, présente les flux de vapeurs de TCE mesurés aux points H, GA1 et GL en fonction du temps pendant l'expérimentation SCERES2. Nous remarquons que le flux de vapeurs augmente progressivement pendant la période qui précède le battement de la nappe jusqu'à atteindre un régime stationnaire au bout de 3 à 4 semaines.

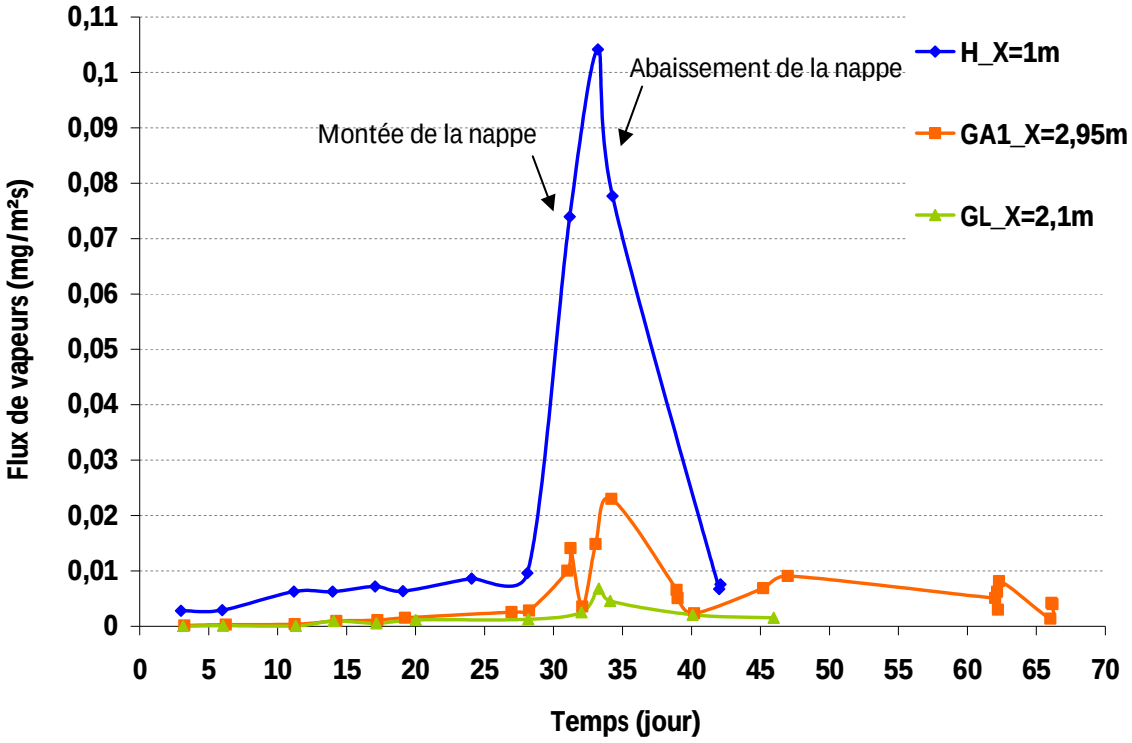


Figure 6. 2 : Flux de vapeurs de TCE mesurés aux points H, GA1 et GL pendant l'expérience SCERES2

En ce qui concerne le battement de la nappe, les mesures de flux de vapeurs ont seulement été réalisées sur les points GA1 et H. Nous aboutissons aux mêmes résultats attendus que lors des mesures réalisées pendant SCERES1. La convection induite par le fort gradient de pression motrice, résultant de la montée du toit de la nappe, a fait augmenter le flux de vapeurs vers l'atmosphère.

D'autre part, il apparaît que le flux de vapeurs mesuré à la surface du sol pendant l'imbibition, à t= 31 j, était plus élevé durant SCERES2 que pendant SCERES1. Par exemple, le flux de vapeurs mesuré au point H, pendant SCERES2, est 2 fois plus

grand que pendant SCERES1. Quant au flux mesuré au point GA1, pendant SCERES2, il est égal à 0,015 $mgm^{-2}s^{-1}$ et légèrement supérieur au flux mesuré pendant SCERES1.

En revanche, il est important de noter que nous avons enregistré une augmentation des flux de vapeurs mesurés le jour de drainage, à t=33j, aux points H, GA1 et GL. Ces résultats inattendus pourraient être dus à une variation temporelle des conditions météorologiques comme la pression atmosphérique et/ou la température extérieure pendant cette journée. En effet, la température à la surface du sol le jour de l'imbibition (t=31j) était égale à 19°C, quant au jour du drainage (t=33j) nous avons mesuré une température maximale de l'ordre de 33°C (Figure 6. 3).

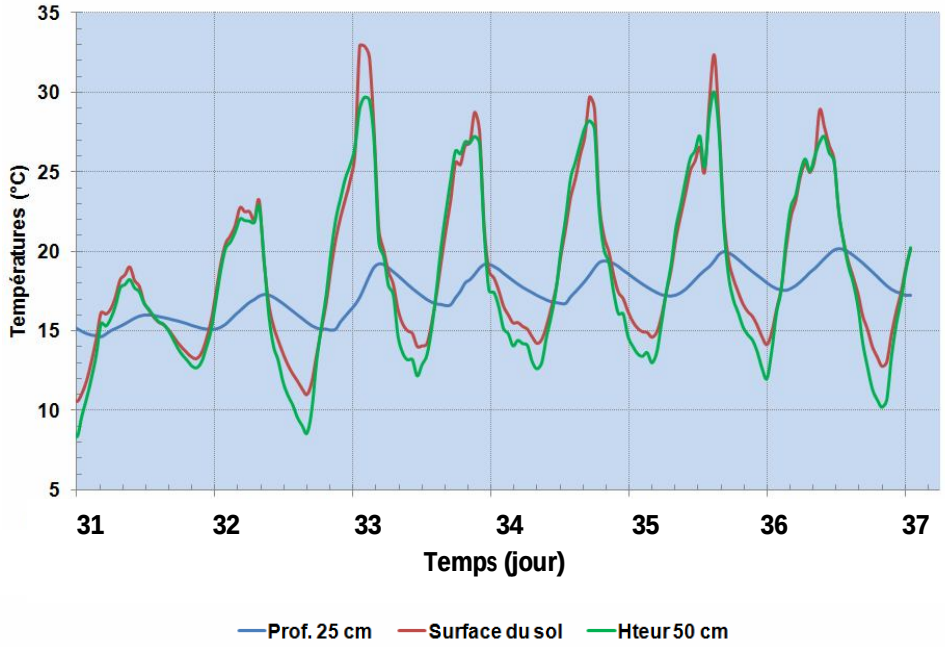


Figure 6. 3 : Evolution de la température à la profondeur de 0,25 m, à la surface du sol et dans l'atmosphère pendant la période de battement de la nappe lors de SCERES2

b) Comparaison des flux de vapeurs de TCE mesurés avec la chambre à flux avec ceux quantifiés dans l'air atmosphérique proche surface du sol

Une campagne de mesure de flux de vapeurs de TCE dans l'air atmosphérique, proche de la surface du sol, a été effectuée pendant SCERES2 dans le cadre du stage de master M1 (Nagel, 2011 ; Cotel et al., 2012). Le dispositif utilisé pour évaluer les flux de vapeurs de TCE a été un préleveur multi-niveaux (Figure 6. 4). Il a été développé par le Laboratoire des Matériaux, Surfaces et Procédés pour la Catalyse de

Strasbourg dans le but de quantifier les flux de pesticides au-dessus de surfaces agricoles traitées. Il permet le prélèvement d'air en quatre points répartis verticalement selon un profil logarithmique. Sur chacun de ces points est placé le tube rempli de charbon actif (Orbo32) permettant d'accumuler le polluant qui a transité dans le tube durant le prélèvement. Deux pompes reliées à quatre compteurs de débit assurent le prélèvement tout en connaissant le volume effectivement pompé en chaque point.

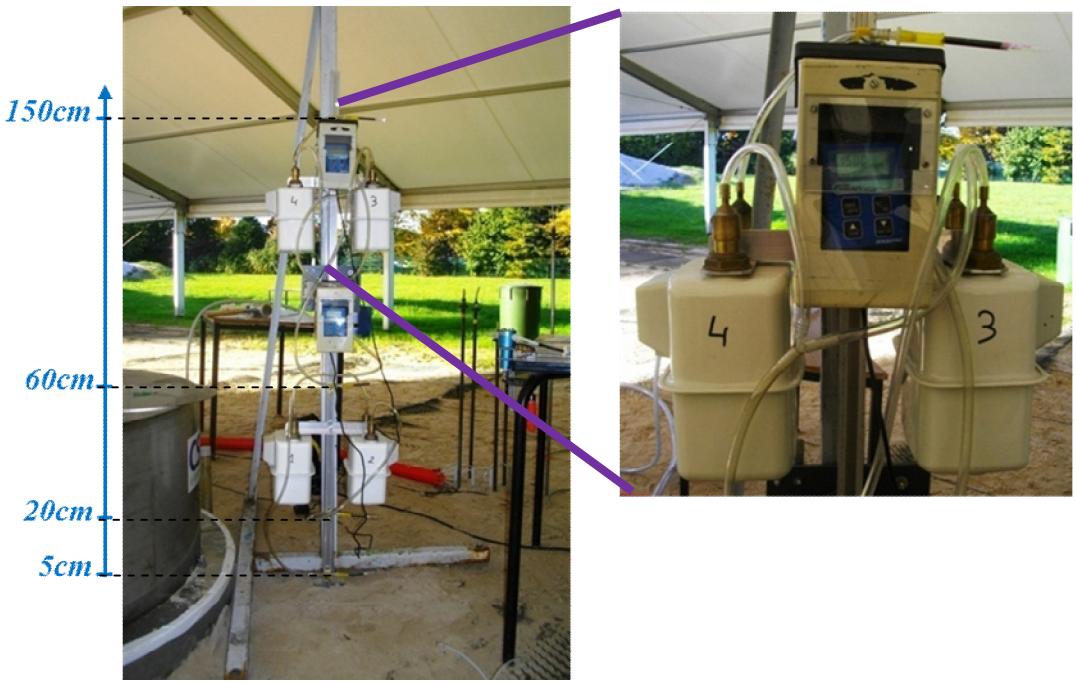


Figure 6. 4 : préleveur multi-niveaux d'air atmosphérique

Les charbons actifs sont analysés en chromatographie en phase gazeuse avec un détecteur à capture d'électrons. Ce type de détecteur est tout à fait adapté pour mesurer les faibles teneurs en polluants volatils dans l'air atmosphérique proche de la surface.

La méthode choisie pour évaluer les flux atmosphériques proche de la surface est la méthode aérodynamique (Parmele et al., 1972 ; Majewski et al., 1989 ; Van Wesenbeek et al. 2007 ; Yates et al., 2008 ; Cotel et al., 2012). Permettant d'évaluer les flux turbulents, cette méthode est basée sur l'équation de Thornthwaite-Holzman (Thornthwaite and Holzman, 1939) modifiée afin de pouvoir être utilisée dans des conditions atmosphériques non adiabatiques. Des coefficients Φm et Φp ont ainsi été ajoutés au dénominateur de la formule originelle de calcul des flux par la méthode

aérodynamique (Eq 6. 1). Cette formule permet d'évaluer le flux en un point dont l'altitude est la moyenne géométrique de l'altitude des 2 points notés 1 et 2, qui correspond ici à 39 cm au dessus de la surface du sol.

$$Flux(z_m) = -\frac{k^2.(C_2 - C_1).(u_2 - u_1)}{\phi_m.\phi_p.\left(\ln\left(\frac{z_2}{z_1}\right)\right)^2} \qquad \text{(Eq 6. 1)}$$

où k (-) est la constante de Von Karman, C (µg.m-3) est la concentration en polluant, u ($m.s^{-1}$) est la vitesse horizontale du vent à l'altitude z (m), Φm et Φp (-) présentent respectivement le gradient adimensionnel de quantité de mouvement et le gradient adimensionnel de concentration. Cette formule fait également intervenir un autre paramètre permettant d'évaluer la stabilité atmosphérique, le nombre de Richardson Ri dont la formule est la suivante :

$$Ri \equiv \frac{g.(T_2 - T_1).(z_2 - z_1)}{T_m.(u_2 - u_1)^2} \qquad \text{(Eq 6. 2)}$$

De nombreuses relations empiriques permettent d'expliciter les gradients adimensionnels de quantité de mouvement et de concentration. Parce qu'elles ont été calées sur un grand nombre de données expérimentales, celles déterminées par Dyer (1974) ont été utilisées dans cette étude.

Si Ri < 0 $\quad \phi_p = \phi_m{}^2 = (1-16Ri)^{-0,5}$ $\qquad$ Si Ri>0 $\quad \phi_p = \phi_m = 1 + \frac{5Ri}{1-5Ri}$

Une hypothèse forte de cette méthode est que la source de pollution provenant du sol doit être très étendue dans le plan xy autrement dit la concentration doit être constante dans chaque plan xy (concentration variable selon z). Il en va de même pour les vitesses horizontales de vent dont le profil doit être établi.

Afin d'évaluer expérimentalement les flux atmosphériques proche de la surface via la méthode aérodynamique, des mesures du gradient de concentration de vapeurs de TCE dans les milieux poreux, du gradient de vitesse horizontale de vent et du gradient de température sont obligatoires. Les flux de vapeurs de TCE mesurés dans l'atmosphère, utilisables pour la confrontation avec les flux mesurées en moyen de la chambre à flux à l'interface sol/atmosphère, sont résumés dans le Tableau 6. 1.

Tableau 6. 1 : Comparaison entre les flux de vapeurs de TCE mesurés à l'interface sol/atmosphère et les flux de vapeurs de TCE mesurés dans l'atmosphère lors de SCERES2

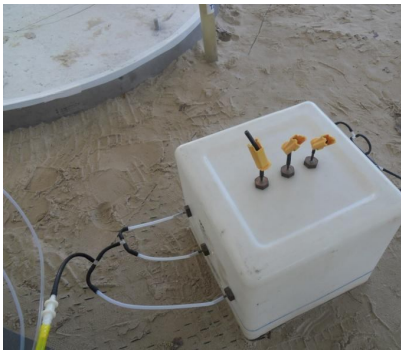
Points de mesures	Date des mesures (jour)	Flux de vapeurs de TCE atmosphériques mesurés ($\mu g.m^{-2}.s^{-1}$)	Flux de vapeurs de TCE mesurés à l'interface sol/atmosphère ($\mu g.m^{-2}.s^{-1}$)	$\frac{Flux_{atmosphèrique}}{Flux_{interfacesol/atmosphère}}$ (%)
GL	20	0,22	1,10	20
	33 (drainage)	1,30	6,80	20
GM1	6	5,20	5,20	100
	33 (drainage)	2,80	27,7	10
H	31 (imbibition)	40,0	74,0	55
	42	5,30	7,60	70

Les flux atmosphériques quantifiés sont toujours du même ordre de grandeur que les flux mesurés à l'interface sol/atmosphère au moyen de la chambre à flux. Cependant, il y a des différences : les flux atmosphériques sont toujours inférieurs ou égaux aux flux mesurés à l'interface. La plus grande différence entre ces 2 types de flux a existé le 33ème jour après injection en GM1 : les flux atmosphériques estimés ne représentaient alors que 10% des flux mesurés à l'interface sol/air. À l'inverse, le 6éme jour après injection toujours en GM1, ces 2 types de flux étaient égaux. Cette infériorité des flux atmosphériques évalués vis-à-vis des flux mesurés à l'interface s'explique par une « dilution » des vapeurs de TCE dès qu'elles pénètrent dans l'atmosphère. En effet, les flux atmosphériques turbulents ne sont pas uniquement dus aux flux de polluant provenant du sous-sol mais également aux profils de concentration véhiculés par le vent. L'air circulant au-dessus de la surface du sol de SCERES étant peu chargé en polluant (et donc très loin d'un air à l'équilibre avec les flux de polluant émanant du sous-sol), les flux de TCE mesurés à l'interface sol/air se retrouvent fortement diminués.

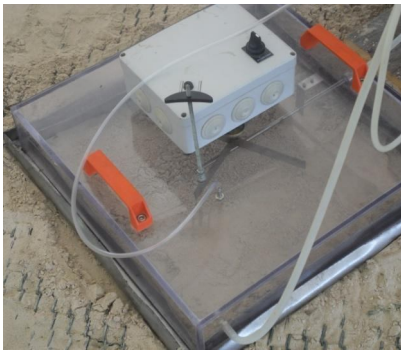
Cependant, l'importance de la différence entre le flux atmosphériques évalués et le flux mesurés à l'interface sol/atmosphère est difficilement explicable. En effet, la configuration de la pollution en vapeurs de TCE sur SCERES n'est pas adaptée à la méthode de calcul des flux atmosphériques choisie. Il s'agit sur SCERES, d'une source de pollution relativement ponctuelle alors que la méthode aérodynamique a été développée pour des sources de pollution diffuses. Les valeurs relativement proches des flux atmosphériques et des flux mesurés à l'interface sol/atmosphère au point H semblent confirmer cette hypothèse car c'est le seul point situé au niveau du centre du panache de vapeurs de TCE dans le sous-sol. De plus, les conditions atmosphériques changeantes (direction, sens, vitesse du vent) ainsi que les nombreux obstacles présents sur SCERES (dalle-cloche, instrument de mesures) n'ont pas permis d'obtenir un profil de vitesse de vent constant et établi sur l'ensemble de la surface du sol. Une deuxième campagne de mesure a été menée en juin 2012 utilisant une veine expérimentale spécialement conçue pour pallier ces problèmes expérimentaux. La configuration expérimentale et les résultats obtenus dans l'étude de la couche limite de concentration sont documentés dans (Nagel, 2012 ; Cotel et al., 2012).

c) Comparaison des flux de vapeurs de TCE mesurés avec ceux quantifiés par les partenaires du projet FLUXOBAT

Une confrontation des flux de vapeurs de TCE mesurés à la surface du sol moyennant les différentes chambres à flux des partenaires du projet FLUXOBAT (Figure 6.5) a été effectuée pendant SCERES2 afin de valider nos mesures du flux de vapeurs de TCE.

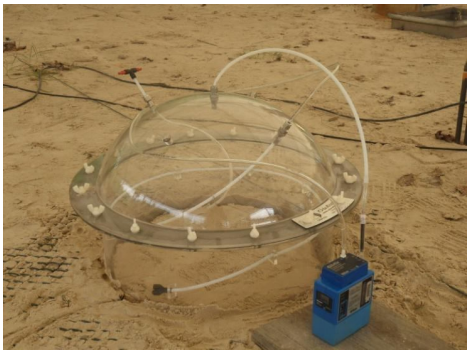


i) LHYGES



ii) INERIS

iii) BURGEAP



iv) BURGEAP (ODOFLUX)

v) BURGEAP (TAIRES)

Figure 6. 5 : Différentes chambre à flux des partenaires du projet FLUXOBAT (LHYGES, INERIS, BURGEAP)

Le Tableau 6. 2 résume les différents flux de vapeurs de TCE mesurés à l'interface sol/atmosphère aux point GA1, GL et GM1, le 45ème jour depuis l'injection de TCE moyennant les dispositifs de mesures des partenaires : la chambre à flux de l'INERIS, les chambres à flux « TAIRES » et « BURGEAP » développées par BURGEAP, la chambre à flux « ODOFLUX » mise en œuvre par BURGEAP et la chambre à flux du LHYGES.

Tableau 6. 2 : Flux de vapeurs de TCE mesurés à l'interface sol/atmosphère à l'aide des différentes chambres à flux

Flux de vapeurs (mg/m^2s)	GA1	GL	GM1
TAIRES	$1,1\ 10^{-3}$	$1,9\ 10^{-4}$	$1,8\ 10^{-3}$
BURGEAP	$3,0\ 10^{-3}$	$2,1\ 10^{-3}$	$5,6\ 10^{-3}$
ODOFLUX	$2,7\ 10^{-3}$	$1,2\ 10^{-3}$	-
INERIS	-	-	-
LHYGES	$6,9\ 10^{-3}$	$1,5\ 10^{-3}$	$7,4\ 10^{-2}$
TAIRES fin	-	$2,1\ 10^{-4}$	$1,6\ 10^{-3}$

Nous constatons que les mesures effectuées à l'aide de notre chambre à flux sont du même ordre de grandeur que les autres mesures effectuées avec les autres chambres à flux à l'exception du point GM1, où nous observons un flux de vapeurs de TCE 40 fois plus grand que le flux mesuré par BURGEAP (TAIRES) par exemple. Il est à noter que le principe de mesure de flux n'est pas le même pour les différentes chambre à flux. La plupart des chambres à flux des partenaires fonctionnent selon un principe d'accumulation des vapeurs de TCE. Ceci peut expliquer les différences relevées entre les flux de vapeurs de TCE obtenus.

Les flux mesurés par les partenaires étant proches de nos flux obtenus, nous avons pu ainsi valider l'ensemble de nos mesures.

6.1.2 Flux de vapeurs de TCE calculés à l'interface sol/atmosphère

6.1.2.1 Flux de vapeurs de TCE calculés par l'approche semi-analytique

a) Flux de vapeurs de TCE calculés pendant SCERES1

Le calcul du flux total à l'interface sol/atmosphère a été effectué au niveau des points GL, GA1 et GM1. Il n'a pas été possible d'effectuer le calcul au point H car il n'y a pas de cannes gaz à proximité de ce point. Le calcul est effectué en se basant sur la méthode semi analytique 1D décrite dans le chapitre 3 (Eq 3. 15) aux dates à lesquelles les mesures avec la chambre à flux ont été réalisées.

Pour évaluer le flux de vapeurs de TCE à la surface du sol, nous avons calculé les flux de vapeurs de TCE entre la profondeur 0,2 m et la surface du sol. Pour cela, nous avons utilisé les mesures de concentrations effectuées au niveau des cannes gaz à la profondeur -0,2 m, et les concentrations de vapeurs de TCE à la surface du sol de SCERES supposées négligeables devant la concentration du sol. Nous avons aussi utilisé les mesures de pression relative de l'air du sol effectuées à la profondeur -0,25 m et celles de pression atmosphérique enregistrées à la surface du sol.

Le Tableau 6. 3 résume les flux de vapeurs de TCE totaux calculés entre la profondeur 0,2 m et la surface du sol en les comparant avec les flux mesurés à l'aide de la chambre à flux pendant SCERES1 à la surface du sol. Notons au passage, que le flux dispersif est négligeable devant les flux convectif et diffusif.

Tableau 6. 3 : Flux de vapeurs de TCE calculés avec la méthode semi- analytique entre la profondeur 0,2 m et la surface du sol et flux mesurés avec la chambre à flux lors de SCERES1

		Flux de vapeurs de TCE calculés entre une profondeur de 0 et -0.2 m (mg/m²s)				Flux mesurés à la surface du sol (mg/m²s)	$\frac{Flux\ total\ calculé}{Flux\ mesuré}$
Points de mesures	Date des mesures (jour)	Flux diffusif	Flux convectif		Flux total		
			Effet de la pression motrice	Effet de la densité			
GL	17	$1,8\ 10^{-02}$	$5,4\ 10^{-03}$	$-2,0\ 10^{-05}$	$2,35\ 10^{-02}$	$3,2\ 10^{-03}$	7,19
	30 (imbibition)	$2,8\ 10^{-02}$	$1,1\ 10^{-02}$	$-4,5\ 10^{-05}$	$3,9\ 10^{-02}$	$4,4\ 10^{-03}$	8,97
GM1	15	$4,1\ 10^{-02}$	$4,9\ 10^{-03}$	$-9,5\ 10^{-05}$	$4,6\ 10^{-02}$	$1,8\ 10^{-02}$	2,52
GA1	17	$1,8\ 10^{-02}$	$3\ 10^{-03}$	$-1,9\ 10^{-05}$	$2,1\ 10^{-02}$	$8,2\ 10^{-03}$	2,54
	30 (imbibition)	$5,4\ 10^{-02}$	$5,2\ 10^{-02}$	$-1,8\ 10^{-04}$	$1,07\ 10^{-01}$	$1,3\ 10^{-02}$	8,2
	32 (drainage)	$1,26\ 10^{-02}$	$-2,9\ 10^{-04}$	$-9,6\ 10^{-06}$	$1,23\ 10^{-02}$	$5,4\ 10^{-03}$	2,27

Nous remarquons que le flux convectif induit par le gradient de pression est positif ce qui indique que le flux de masse est ascendant vers l'atmosphère, sauf pendant le drainage. Quant au flux induit par l'effet de densité calculé, nous constatons qu'il est toujours dirigé vers le bas ce qui confirme que le flux engendré par la densité des vapeurs est descendant. Ces résultats corroborent ce que nous avons obtenu dans le chapitre 4.

Quant aux ratios entre les flux totaux calculés et les flux mesurés, ils sont très différents et s'étalent entre 2,27 et 8,97. Nous avons deux cas de figure différents : ratio ≈ 2, ratio > 3.

Les ratios de l'ordre de 2 sont obtenus au 17ème et 15ème jour de l'expérimentation lorsque le régime stationnaire est quasiment établi et que la montée du toit de la nappe n'a pas encore eu lieu. Dans cette phase expérimentale, la part du flux convectif calculée est négligeable devant la part du flux diffusif, ainsi

les flux de vapeurs sont essentiellement régis par la diffusion. Cependant, le rapport des deux flux au point GL au 17ème jour depuis l'injection TCE est supérieur à 2 et de l'ordre de 7,19. Ceci est peut être dû à une erreur expérimentale lors de la mesure de flux en cette date.

Pendant l'imbibition, nous remarquons que les ratios sont les plus élevés, allant jusqu'à 8,97 au point GL, les flux mesurés ont tendance à sous-estimer le flux de vapeurs à la surface du sol. Cela peut s'expliquer par le fait que la chambre à flux utilisée pour la mesure des flux à la surface du sol de SCERES est montée en circuit fermé (extraction/injection du même flux d'air) bloquant ainsi en grande partie le flux convectif provenant du sous-sol. Les flux convectifs apparaissant à la surface du sol lors de la remontée de la nappe vont en très grande partie être évacués de part et d'autre de la chambre à flux (même s'il a y lieu un petit apport de flux via une (re)circulation possible de l'air dans la chambre). Sachant que les vitesses de l'air dans la chambre (zone où l'air peut circuler librement) sont négligeables devant les vitesses de l'air du sol contournant la chambre à flux, les mesures de flux utilisant la chambre à flux peuvent ainsi être considérées comme étant purement diffusif. Or, le flux total calculé prend compte du flux convectif engendré par la poussée de l'air vers la surface. Ceci se traduit par un flux total calculé beaucoup plus important que le flux de vapeurs mesuré à la surface du sol.

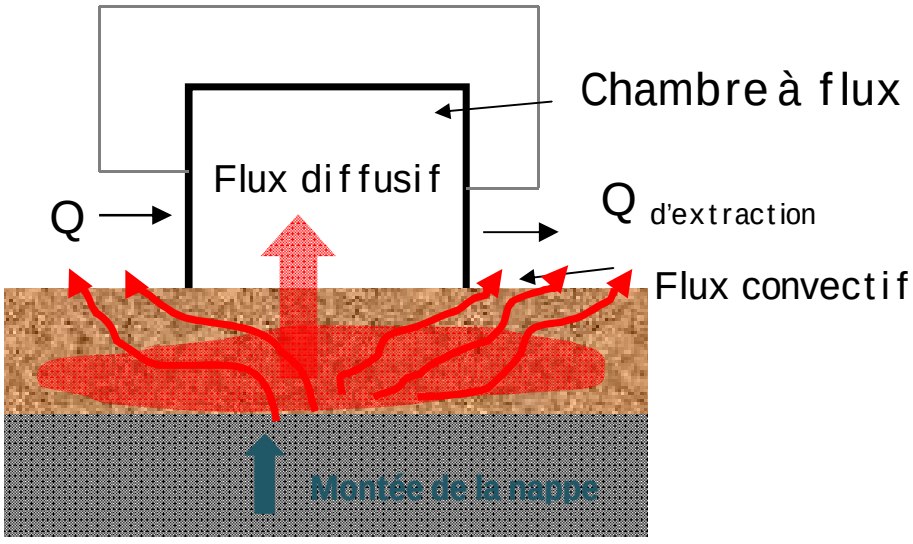


Figure 6. 6 : Principe de mesure de la chambre à flux lors de la montée du toit de la nappe

Le ratio le plus petit de l'ordre de 2,27 est rencontré lors de la phase de drainage. En effet, contrairement à l'imbibition, le drainage provoque un mouvement d'air descendant, qui s'est traduit par un flux convectif induit par le gradient de pression négatif. Les flux de vapeurs mesurés à la surface ont donc tendance à surestimer le flux total de TCE vers l'atmosphère.

Il est à noter aussi, que l'approche semi-analytique utilisée est basée sur l'hypothèse de la stationnarité de l'écoulement et du transport de vapeurs. Or, pendant l'imbibition et le drainage, nous avons un régime instable à cause du mouvement de la nappe. Ce qui fait que les rapports entre les flux totaux calculés et les flux mesurés deviennent plus remarquable surtout pendant l'imbibition.

Le choix des profondeurs pour le calcul de flux est très important, il peut influencer l'estimation des flux à la surface du sol. La méthode semi-analytique étant basée sur l'évaluation des gradients de concentrations et de pressions motrices, nous avons vu dans le chapitre 4 que plus le deuxième point est proche de la surface du sol où se situe le premier point, meilleure est l'estimation de flux de vapeurs à la surface du sol. En effet, le Tableau 6. 4 donne les flux de vapeurs mesurés à la surface, les différents flux de vapeurs calculés entre les profondeurs 0,2m et 0,4m et les ratios entre les deux flux. Pour le calcul des flux de vapeurs de TCE, nous avons utilisé les mesures de concentration et de pression de vapeurs effectuées au niveau des cannes gaz à la profondeur 0,2 m et 0,4 m ainsi que la pression atmosphérique enregistrée à la surface du sol.

Nous constatons que les flux de vapeurs de TCE calculés par rapport au flux mesurés sont plus élevés que ceux donnés entre la profondeur 0,2m et la surface du sol (Tableau 6. 3). Nous remarquons que le flux convectif calculé entre 0,2 m et 0,4 m est très élevé dans le cas du point GM1 et GA1. Ces résultats surprenants sont dus à la pression différentielle mesurée à la profondeur 0,4 m. L'enregistrement des pressions différentielles à cette profondeur a montré qu'elles étaient supérieures à 50 Pa au point GA1 et GM1 et ont dépassé 250 Pa pendant l'imbibition. Ceci a contribué à l'augmentation des rapports entre les flux totaux calculés et les flux mesurés jusqu'à un rapport de 664 pendant l'imbibition au point GA1. Ces rapports donnent une estimation inexacte car les flux calculés surestiment les flux de vapeurs à la surface du sol. Ceci corrobore les conclusions de Dridi et Schäfer (2006) qui attribuent notamment ce biais à l'évaluation approchée du gradient de concentration et du coefficient de diffusion effectif.

Tableau 6. 4 : Flux de vapeurs de TCE calculés avec la méthode semi- analytique entre les profondeurs 0,2 m et 0,4 m et les flux de vapeurs de TCE mesurés utilisant la chambre à flux lors de SCERES1

		Flux calculés entre une profondeur de 0,2 et 0,4 m (mg/m²s)				Flux mesurés à la surface du sol (mg/m²s)	$\frac{Flux\ total\ calculé}{Flux\ mesuré}$
Points de mesures	Date des mesures (jour)	Flux diffusif	Flux convectif		Flux total		
			Effet de la pression motrice	Effet de la densité			
GL	17	$2,6\ 10^{-02}$	$1,6\ 10^{-02}$	$-4,9\ 10^{-05}$	$1,6\ 10^{-02}$	$3,2\ 10^{-03}$	13
	30 (imbibition)	$3,7\ 10^{-02}$	$7,1\ 10^{-02}$	$-1,2\ 10^{-04}$	$1,08\ 10^{-01}$	$4,4\ 10^{-03}$	24
GM1	15	$3,1\ 10^{-02}$	2,93	$-1,7\ 10^{-04}$	2,96	$1,8\ 10^{-02}$	164
GA1	17	$4,3\ 10^{-02}$	2,18	$-9,5\ 10^{-05}$	2,23	$8,2\ 10^{-03}$	270
	30 (imbibition)	$6,1\ 10^{-02}$	4,6	$-4,1\ 10^{-04}$	4,67	$1,3\ 10^{-02}$	359
	32 (drainage)	$1,9\ 10^{-02}$	0,31	$-2,9\ 10^{-05}$	0,33	$5,4\ 10^{-03}$	61

6.1.2.2 Flux de vapeurs de TCE calculés pendant SCERES2

Vu le grand nombre de mesures de flux effectué pendant SCERES2, nous allons présenter uniquement les résultats du calcul des flux de vapeurs sous forme de graphiques.

La Figure 6. 7 montre les flux mesurés avec la chambre à flux au point GA1 et les flux calculés par la méthode semi- analytique 1D entre les profondeurs 0 m et 0,2 m ainsi que le rapport entre les deux flux. Nous remarquons que les ratios varient de 0,4 à 7,7. Nous avons uniquement trois dates pour lesquelles les flux calculés sous-estiment les flux mesurés à la surface. Ces dates correspondent bien évidemment à la période du drainage mais aussi au début de l'expérimentation, 3 jours seulement après l'injection du TCE. Une autre exception a été observée 11 jours après l'injection : le rapport des deux flux y est de l'ordre de 6,9, bien que nous ne soyons pas en phase d'imbibition. Ceci peut être expliqué par le fait qu'après 11 jours de

l'injection, nous n'atteignons pas encore le régime permanent de vapeurs de TCE dans SCERES. Vu que l'approche semi-analytique utilisée est basée sur l'hypothèse de la stationnarité de l'écoulement et du transport de vapeurs. Cela peut expliquer les rapports surprenants pendant le 3ème et le 11ème jour de l'expérience. Rappelons ici que pour SCERES2 l'imbibition a eu lieu 31 jours après l'injection du TCE. Avant cette date, les vapeurs sont supposées se transférer essentiellement par diffusion.

Au 6ème jour depuis l'injection, une estimation presque parfaite de flux à la surface du sol est obtenue.

Pendant L'imbibition nous avons effectué trois mesures de flux : au début de l'imbibition (t=31,46j), pendant l'imbibition (t=31,71j) et après imbibition (t=32j). Nous observons que les rapports entre flux calculé et flux mesuré augmentent en fonction de l'avancement de l'imbibition et donc de l'augmentation du gradient de pression motrice. Plus la convection vers la surface est importante, plus le flux calculé sur estime le flux de vapeur à la surface du sol.

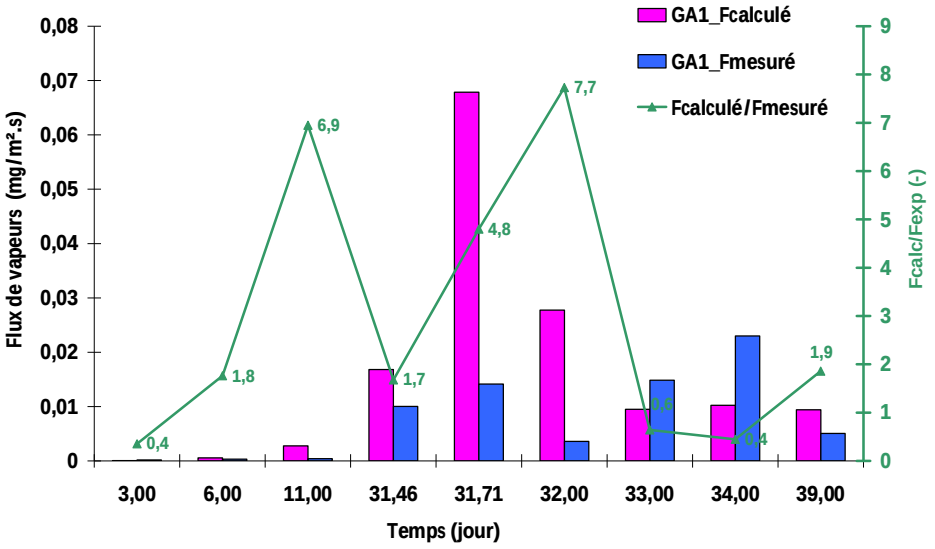


Figure 6. 7 : flux calculés à partir de la méthode semi- analytique entre les profondeurs 0 m et 0,2 et flux mesurés avec la chambre à flux au point GA1 m lors de SCERES2

La Figure 6. 8 résume les flux de vapeurs mesurés à la surface du sol au point GA1 et les flux de vapeurs calculés entre les profondeurs 0,2 m et 0,4 m ainsi que les rapports entre ces deux flux. Même constatations que pour le Tableau 6. 4 : le calcul de flux entre 0,2 et 0,4 m fait augmenter le biais sur l'estimation du flux de vapeurs à la surface du sol. En effet, les rapports entre les flux de vapeurs calculés et ceux

mesurés sont plus élevés que ceux obtenus entre les profondeurs 0,2 m et la surface (Figure 6. 7).

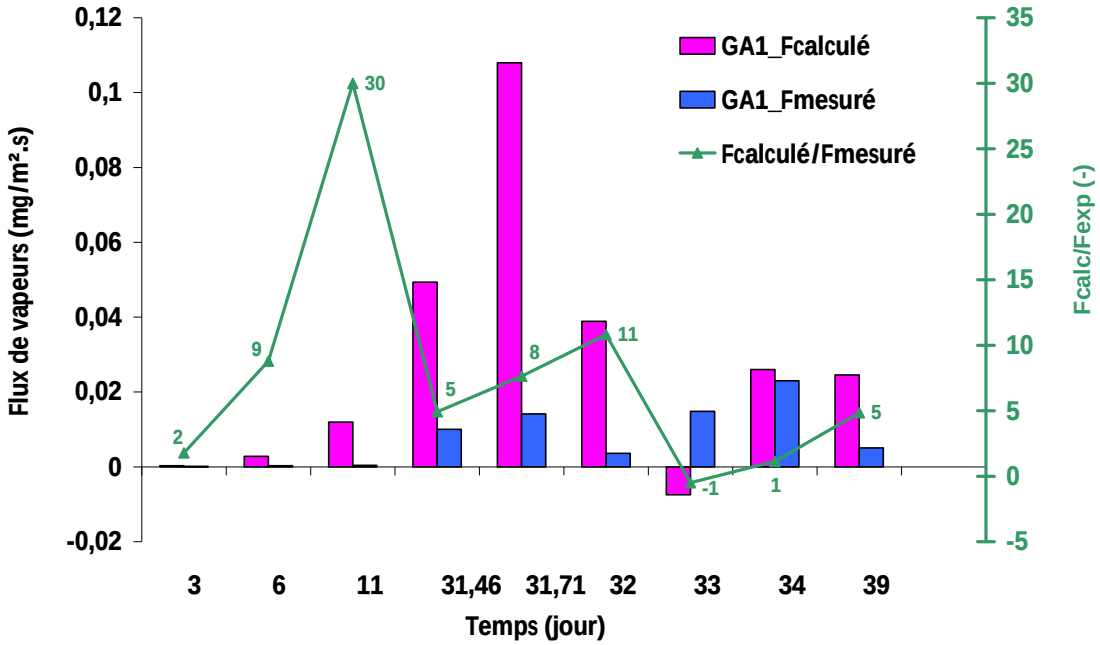


Figure 6. 8 : Flux calculés par la méthode semi- analytique entre les profondeurs 0,2 m et 0,4 m et flux mesurés avec la chambre à flux au point GA1 lors de SCERES2

6.2 Flux de vapeurs de TCE à l'interface dalle de béton/air intérieur de la cloche

Cette partie s'intéresse à l'étude du transport des vapeurs de TCE à travers la dalle de béton. Nous y identifions la part de la diffusion et de la convection dans le transfert des vapeurs. Dans un premier temps, nous allons étudier le transfert diffusif et convectif (induit par le battement de nappe) des vapeurs à travers la dalle, puis nous aborderons de façon détaillée le transfert convectif des vapeurs de TCE induit par la mise en dépression dans l'air intérieur de la cloche.

6.2.1 Transfert des vapeurs de TCE à travers la dalle de béton sans mise en dépression

6.2.1.1 Flux de vapeurs de TCE mesurés à travers la dalle de béton

Les flux de vapeurs de TCE ont été mesurés, au centre des deux dalles, à l'aide de la chambre à flux du LHyGeS que nous avons adapté pour les mesures sur la dalle en ajoutant un joint entre la chambre et la dalle de béton et en plaçant une masse au-dessus de la chambre pour assurer l'étanchéité du dispositif. La Figure 6. 9 montre les flux de vapeurs mesurés sur la dalle 1 pendant SCERES1 et la dalle 2 pendant SCERES2 avant changement de la dalle. Nous remarquons que les flux de vapeurs mesurés sur la dalle 1 pendant SCERES1 sont jusqu'à deux fois plus important que ceux mesurés sur la dalle 2. En effet, la différence entre les deux flux de vapeurs peut s'expliquer d'une part, par les valeurs de coefficient de diffusion effectif qui ont montré que le coefficient de diffusion effectif « global » de la dalle 1 est plus grand que celui de la dalle 2 (cf. paragraphe 5.3.2 dans le chapitre 5) et d'autre part par le niveau de concentrations sous la dalle 1 qui était plus élevé que celui sous la dalle 2.

Contrairement aux flux de vapeurs mesurés à la surface du sol, nous remarquons qu'aux jours de l'imbibition, à t=30 jours pour SCERES1 et à t=31 jours pour SCERES2, les flux de vapeurs mesurés sur les deux dalles ont diminué. Ceci pourrait s'expliquer par le fait que le flux d'air, induit par le gradient de pression motrice engendré par la montée du toit de la nappe, entraîne le déplacement latéral (de part et d'autre de la dalle) des vapeurs de TCE localisées initialement sous la dalle.

En plus, dans le cas de SCERES2, les concentrations de vapeurs de TCE sous la dalle 2 diminuent pendant la montée de la nappe (cf. Figure 5. 37 dans chapitre 5). Cette diminution a été traduite par la diminution de flux de vapeurs sur la dalle. Quant à la dalle 1, contrairement à la dalle 2, les concentrations de vapeurs de TCE augmentent pendant l'imbibition. Cependant le flux de vapeurs mesurés sur la dalle a diminué pendant cette phase. En effet, nous pouvons expliquer cela par la présence importante des fissures au centre de la dalle 2. Ces fissures vont intervenir, pendant la mesure du flux, dans l'évacuation des vapeurs de TCE provenant de sous la dalle 2 par l'intermédiaire du flux convectif induit de la montée de la nappe, de part et d'autre de la chambre à flux. Ceci va diminuer la concentration de vapeurs proche de l'interface de mesure de flux sur la dalle.

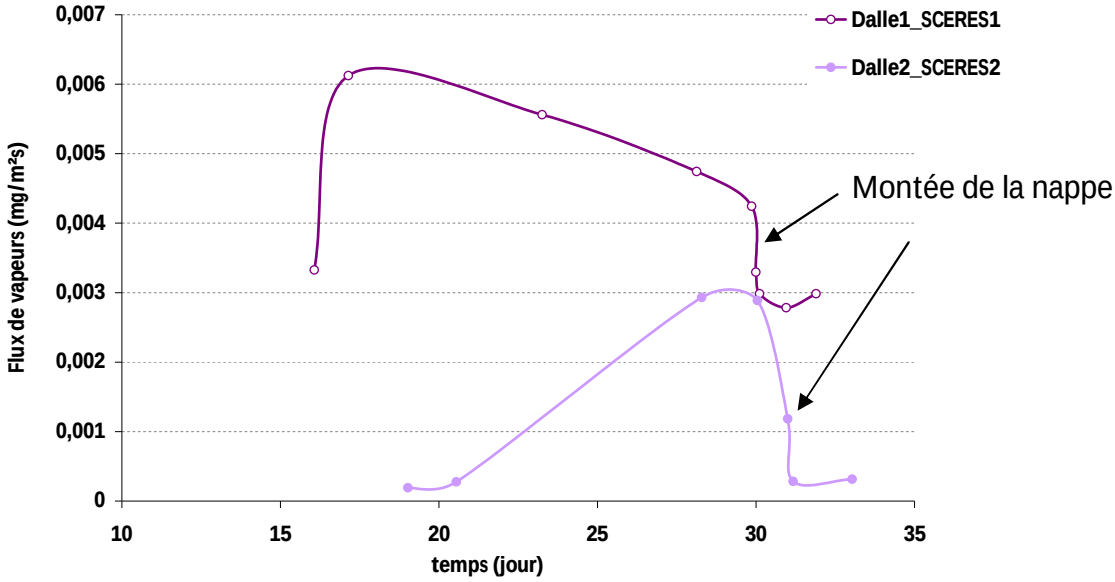


Figure 6. 9 : Flux diffusif de vapeurs de TCE mesurés sur la dalle 1 pendant SCERES1 et sur la dalle 2 pendant SCERES2

Ces mesures vont être confrontées aux flux calculés à travers la dalle, entre z = 0 m (sous la dalle) et z=0,1 m (au-dessus de la dalle) à l'aide de l'approche semi-analytique.

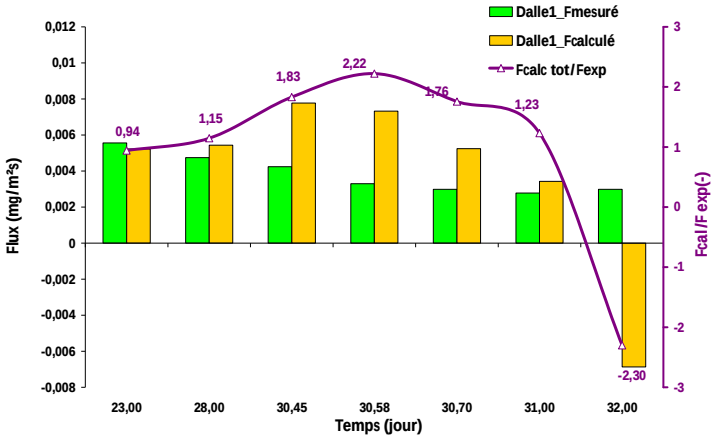
6.2.1.2 Flux de vapeurs de TCE estimés à travers la dalle de béton

a) Flux de vapeurs de TCE calculés au niveau de la dalle 1

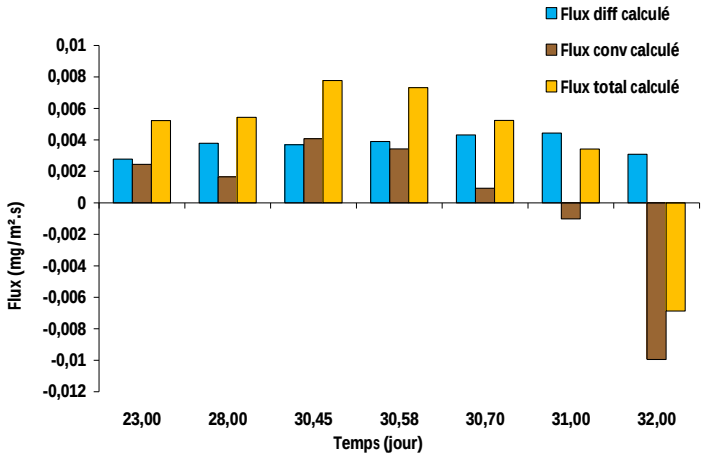
La Figure 6. 10 montre les flux de vapeurs de TCE calculés sur la dalle 1 pendant SCERES1, en introduisant un coefficient de diffusion effectif de la dalle 1 de l'ordre de 1/25ème et 1/100ème du celui d'un sable moyen. Nous remarquons que les flux de vapeurs de TCE calculés à travers la dalle 1 sont positifs à l'exception du jour du drainage. En effet, le flux convectif induit par le gradient de pression, pendant la descente de la nappe, est négatif et plus grand que le flux diffusif (Figure 6. 10 a et c). Les rapports entre les flux totaux calculés et les flux mesurés augmentent pendant l'imbibition car le flux convectif calculé devient plus important pendant cette phase (Figure 6. 10 b et d). Nous remarquons aussi que le transport par diffusion domine le transport convectif dans la dalle (Figure 6. 10 b et d).

La Figure 6. 10 met en évidence l'influence du choix de coefficient de diffusion effectif des deux dalles sur l'estimation de flux de vapeurs qui traverse la dalle. En effet, les flux totaux calculés pour un coefficient de diffusion effectif de la dalle 1 de

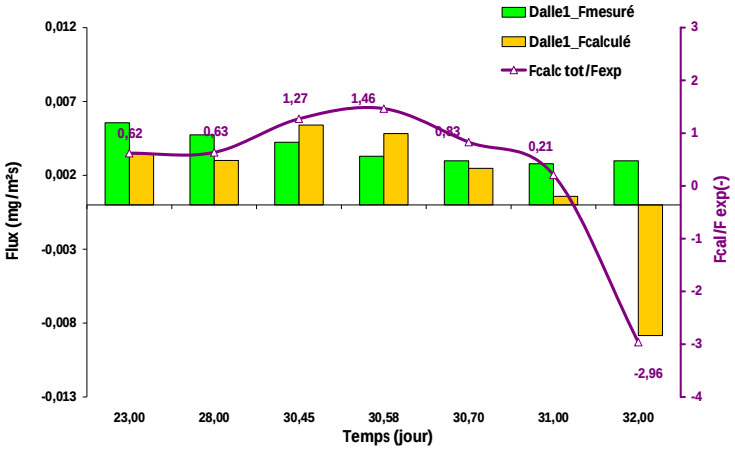
l'ordre de 1/25ème de celui d'un sable moyen estiment mieux les flux mesurés à la surface de la dalle 1 que ceux calculés à partir d'un coefficient de diffusion effectif égal à 1/100ème de celui d'un sable moyen (Figure 6. 10 a et c). Ces résultats rejoignent ce que nous avons trouvé dans le paragraphe 5.3.2.1 (cf. chapitre 5).



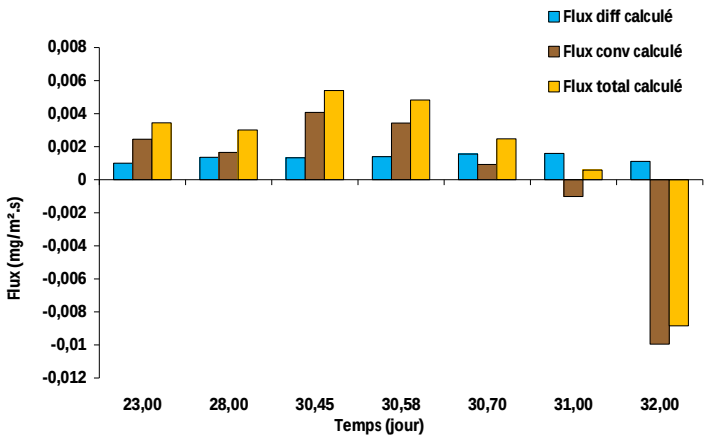
a) Flux totaux calculés/flux mesurés avec un coefficient de diffusion effectif de la dalle 1 de l'ordre de 1/25ème de celui d'un sable moyen



b) Flux calculés avec un coefficient de diffusion effectif de la dalle 1 de l'ordre de 1/25ème de celui d'un sable moyen



c) Flux totaux calculés/flux mesurés avec un coefficient de diffusion effectif de la dalle 1 de l'ordre de 1/100ème de celui d'un sable moyen

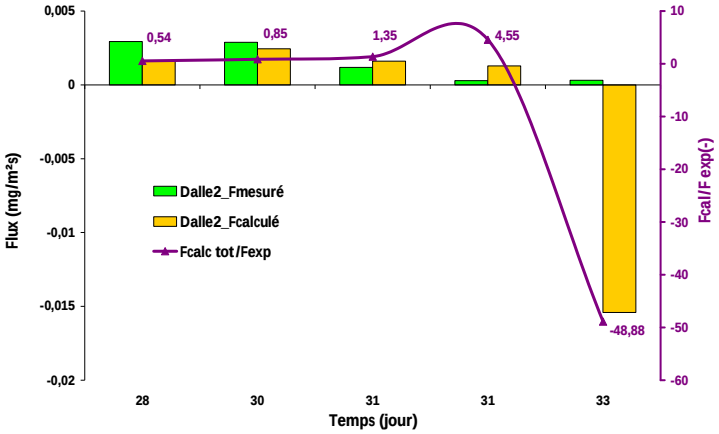


d) Flux calculés avec un coefficient de diffusion effectif de la dalle 1 de l'ordre de 1/100ème de celui d'un sable moyen

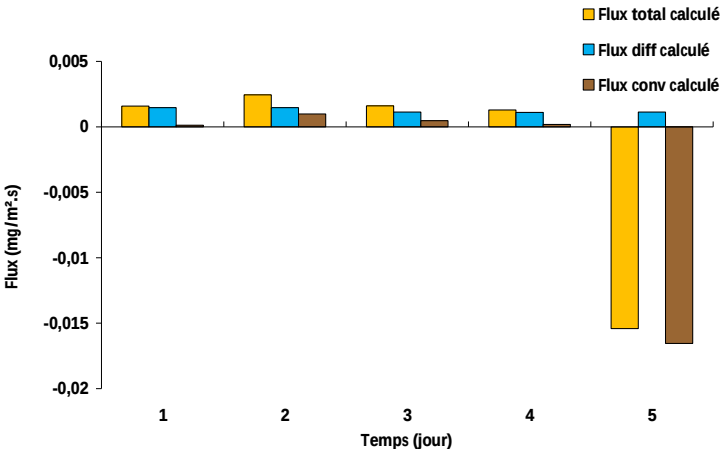
Figure 6. 10 : flux mesurés au moyen de la chambre à flux sur la dalle 1 et flux calculés à partir de la méthode semi- analytique avec un coefficient de diffusion effectif de la dalle 1 égale 1/25ème et 1/100ème de celui d'un sable moyen lors de SCERES1

b) Flux de vapeurs de TCE calculés au niveau de la dalle 2

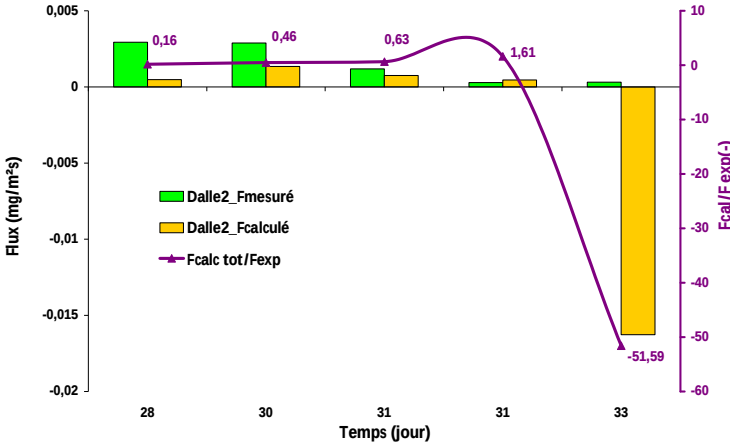
La Figure 6. 11 montre les flux de vapeurs de TCE calculés sur la dalle 2 pendant SCERES2 à l'aide de la méthode semi analytique 1D en se utilisant deux coefficients de diffusion effectif différents, de l'ordre de 1/28ème et 1/115ème de celui d'un sable moyen. Nous remarquons que, avec un coefficient de diffusion effectif de la dalle 2 de l'ordre de 1/28ème, les flux totaux calculés dans la dalle 2 sous estiment les flux de vapeurs de TCE mesurés sur la surface de celle-ci, à l'exception de la phase d'imbibition où le flux total calculé sur estime le flux mesuré (Figure 6. 11 a). De plus, nous remarquons que l'acheminement des vapeurs de TCE à travers la dalle se fait principalement par la diffusion qui domine le transfert de vapeurs de TCE vers l'interface supérieure de la dalle 2 (Figure 6. 11b). En diminuant le coefficient de diffusion effectif, le flux diffusif calculé devient plus faible (Figure 6. 11 d). Ainsi, les rapports entre les flux totaux calculés et les flux mesurés deviennent eux aussi plus faibles (Figure 6. 11 c).



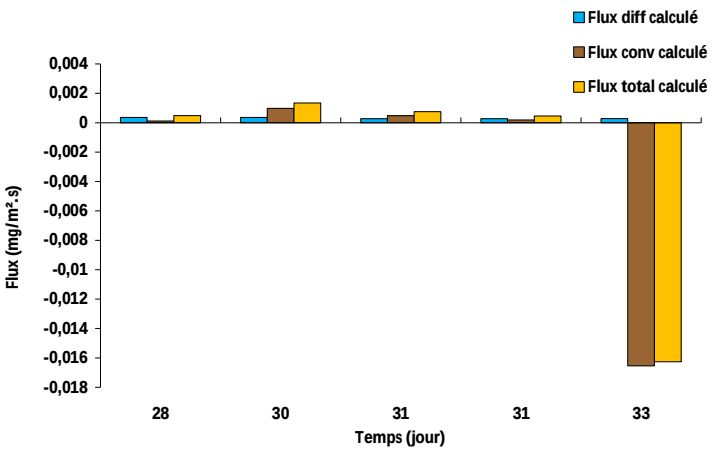
a) Flux totaux calculés/flux mesurés avec un coefficient de diffusion effectif de la dalle 2 égale 1/28ème de celui d'un sable moyen



b) Flux calculés avec un coefficient de diffusion effectif de la dalle 2 égale 1/28ème de celui d'un sable moyen



c) Flux totaux calculés/flux mesurés avec un coefficient de diffusion effectif de la dalle 1 égal 1/115ème de celui d'un sable moyen



d) Flux calculés avec un coefficient de diffusion effectif de la dalle 2 égal 1/115ème de celui d'un sable moyen

Figure 6. 11 : Flux calculés à partir de la méthode semi- analytique et flux mesurés au moyen de la chambre à flux sur la dalle 2 lors de SCERES2

Pour répondre à la question d'intrusion des vapeurs dans le bâtiment et du rôle de la convection dans le transfert des vapeurs à travers la dalle, nous avons étudié le transfert de vapeurs par convection en mettant en dépression l'air intérieur de la cloche installée sur la dalle de béton. La partie qui suit présente les résultats issus de ces expériences ainsi que des modélisations pour quantifier le flux de masse qui traverse la dalle pendant la mise en dépression.

6.2.2 Transfert des vapeurs de TCE à travers la dalle de béton induit par la mise en dépression de la cloche

Dans le contexte des risques sanitaires dans les habitations, le transfert de vapeurs de polluants volatils vers les volumes intérieurs d'un bâtiment est principalement causé par la convection qui se fait à travers les défauts d'étanchéité pouvant exister à l'interface sol/bâtiment entre autre les fissures du dallage (cf. chapitre 1). Généré par le renouvellement d'air effectué dans le bâtiment, il s'établit un gradient de pression motrice entre le bâtiment et l'air du sol en-dessous de la dalle de fondation. Cette différence de pression motrice, « moteur de la convection », va entraîner un mouvement d'air vertical depuis le sous-sol vers l'air intérieur du bâtiment apportant la contamination à l'air intérieur. Dans cette partie du mémoire nous nous intéressons au taux de contamination de l'air intérieur de la cloche et au flux massique à travers la dalle engendrés par la mise en dépression de l'air intérieur de la cloche.

6.2.2.1 Concentration en vapeur de TCE de l'air intérieur de la cloche

La mise en dépression appliquée dans la cloche a engendré un flux de vapeur depuis le sous-sol, à travers la dalle, vers l'intérieur de la cloche. Ce flux est traduit par une augmentation de concentration de vapeurs de TCE dans la cloche pendant la période de mise en dépression. En effet, les Tableau 6. 5 et Tableau 6. 6 résument les différents essais de mise en dépressions effectués pendant SCERES1 et SCERES2 en présence respective des dalles 1 et 2. Ils présentent les concentrations de vapeurs de TCE mesurées dans la cloche pendant les mises en dépression et les concentrations calculées à partir de l'équation semi analytique Eq 3. 38 (chapitre 3). Celle-ci reproduit l'évolution exponentielle des concentrations de vapeurs de TCE pendant la mise en dépression dans la cloche.

Tableau 6. 5 : Les concentrations de vapeurs de TCE dans la cloche pendant les mises en dépression en présence de la dalle 1 pour différents débits d'extraction d'air lors de SCERES1

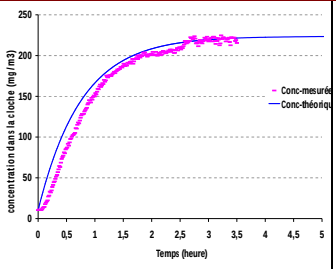
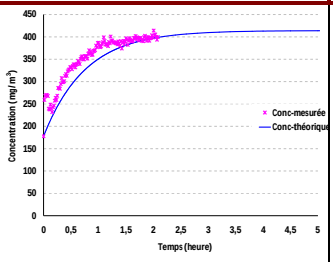
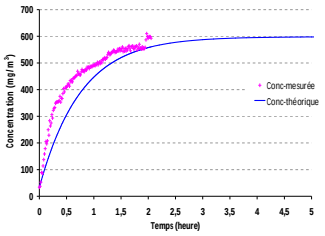
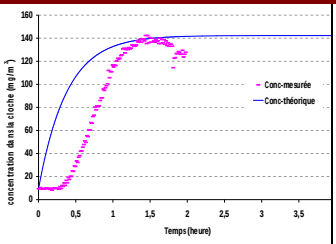
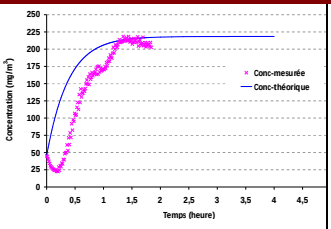
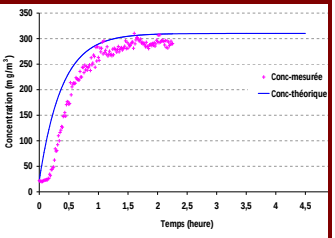
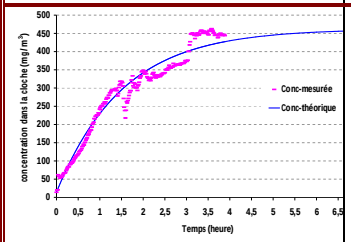
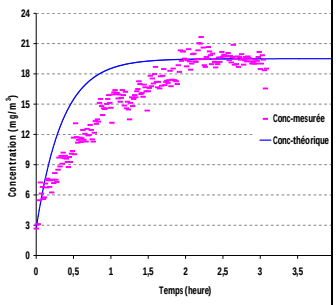
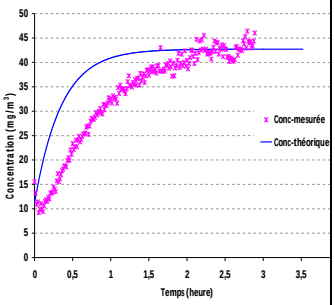
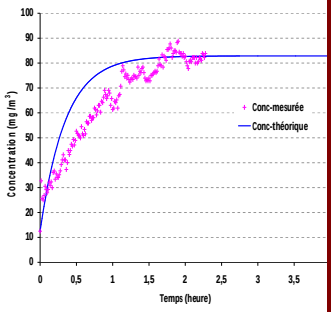
Niveau de dépression (Pa)	5	10	20
Q=1 $m^3.h^{-1}$	 1A-1	 1B-1	 1C-1
Q=2 $m^3.h^{-1}$	 2A-1	 2B-1	 2C-1
Q=0.5 $m^3.h^{-1}$	 3A-1		

Tableau 6. 6 : Evolution de la concentration de vapeurs de TCE dans la cloche pendant les mises en dépression en présence de la dalle 2 pour un débit d'extraction d'air de 1 $m^3.h^{-1}$ lors de SCERES2

Niveau de dépression (Pa)	5	10	20
Q=1 $m^3.h^{-1}$	 1A-2	 1B-2	 1C-2

Pour un débit d'extraction donné, la concentration maximale atteinte en régime permanent dans la cloche augmente en fonction du niveau de la mise en dépression. Ceci est tout à fait conforme avec l'approche théorique du « mélangeur » (cf. Eq 3. 38). Analysons plus en détail la Figure 6. 12 qui présente les concentrations de vapeurs mesurées (rendues adimensionnelles) dans la cloche pendant les mises en dépression de niveau 5, 10 et 20 Pa pour un débit d'extraction de 2 $m^3.h^{-1}$ pendant SCERES1. Les concentrations sont normalisées à la concentration moyenne mesurée sous la dalle de béton avant le début de chaque essai de dépression. Nous constatons que lorsque le niveau de dépression dans la cloche augmente, le pourcentage de vapeurs transféré vers la cloche augmente aussi. Dans le cas présenté, la concentration maximale dans la cloche a pu atteindre jusqu'à 5% de la concentration mesurée sous la dalle avec une dépression dans la cloche de 20 Pa ; elle est de l'ordre de 2,5% pour une dépression de 5 Pa.

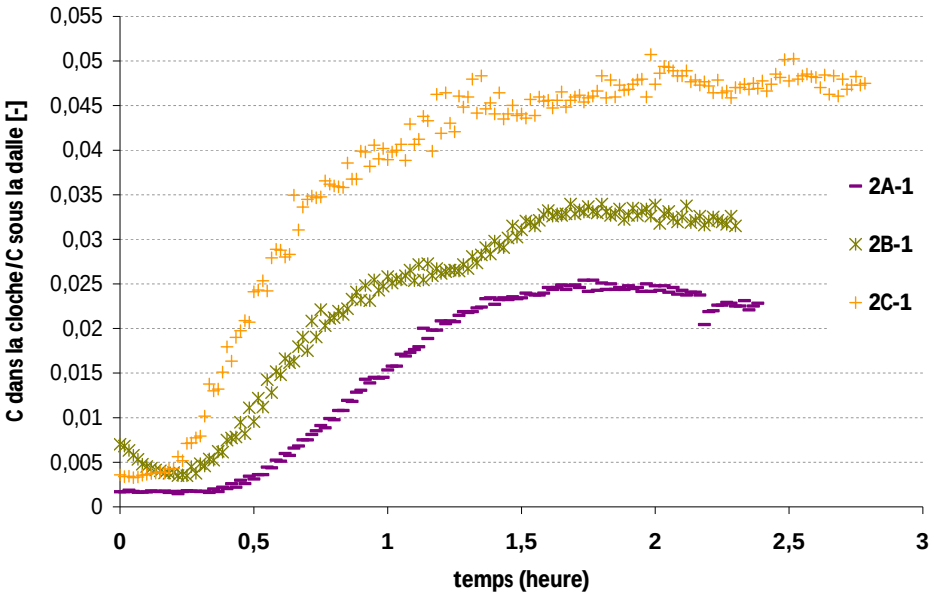


Figure 6. 12 : Concentrations mesurées dans la cloche normalisées à la concentration mesurée sous la dalle pendant les dépressions de 5, 10 et 20 Pa pour un débit d'extraction de 2 $m^3.h^{-1}$ lors de SCERES1

Par ailleurs, conformément à la solution analytique, pour un niveau de dépression donnée, lorsque le débit d'extraction du volume de la cloche augmente, le temps mis pour atteindre la concentration finale moyenne, C_{infini} = C (t=infini), diminue. Ceci est illustré sur la Figure 6. 13 qui montre les concentrations mesurées pendant la mise en dépression de 5 Pa pour les débits d'extraction de 0,5, 1 et 2 $m^3.h^{-1}$ pendant SCERES1. Ces concentrations sont normalisées sur la concentration C_{infini} obtenu pour chaque débit.

À partir de ces résultats, nous remarquons que plus le débit d'extraction d'air Q est faible (autrement le renouvellement d'air N (s^{-1})=QV est faible) dans la cloche, plus les concentrations dans la cloche mettent de temps pour atteindre la concentration finale. Ainsi les vapeurs de TCE séjournent plus longtemps dans la cloche.

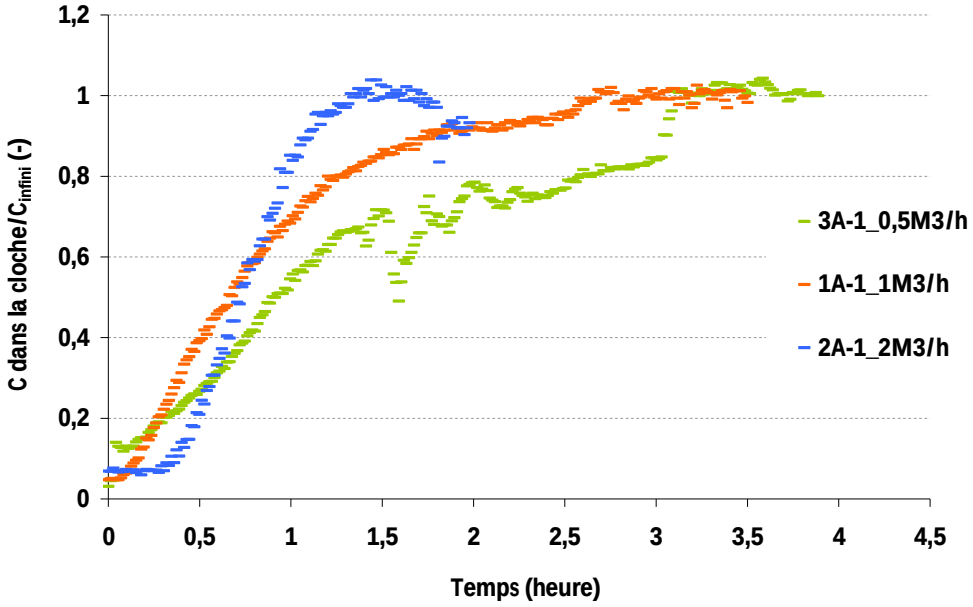


Figure 6. 13 : Concentrations mesurées dans la cloche normalisées à la concentration finale obtenue pour le niveau de dépression de 5 Pa pour les débits d'extraction de l'air de 0.5, 1 et 2 $m^3.h^{-1}$ lors de SCERES1

Pour un débit d'extraction d'air de 1 $m^3.h^{-1}$ nous pouvons comparer les différentes concentrations obtenues pendant SCERES1 (Tableau 6. 5 ligne 2) et SCERES2 (Tableau 6. 6). On constate que le niveau de concentrations dans la cloche pendant SCERES1 est plus important que SCERES2. Cela est relié à deux causes. La première est l'effet de la perméabilité de la dalle qui joue un rôle déterminant dans le cheminement des vapeurs vers l'air intérieur de la cloche. En effet la perméabilité de la dalle 1 est plus grande que celle de la dalle 2 ce qui va favoriser un flux d'air (et à son tour un flux massique par convection) à travers la dalle 1 plus grand que celui à travers la dalle 2. Ceci va conduire à des concentrations de vapeurs en TCE dans la cloche plus élevées pendant SCERES1 que pendant SCERES2.

La deuxième cause est l'état initial des concentrations de TCE sous la dalle, avant la mise en dépression. En effet, dans le chapitre 5.4.2.2., nous avons vu que le niveau de concentrations de vapeurs en TCE mesuré sous la dalle pendant SCERES1 est plus élevé que celui pendant SCERES2.

Un autre résultat intéressant peut être mis en avant. Dans la plupart des essais, les vapeurs de TCE ont un certain temps pour traverser la dalle (cf. Tableau 6. 5 et Tableau 6. 6). Autrement dit, le transfert de masse vers la cloche met un certain temps, en fonction du débit et du niveau de dépression, pour atteindre son régime stationnaire. Cela est peut être expliqué par le fait que les flux massiques à travers la

dalle ne sont pas constants en fonction du temps ni répartis de façon uniforme sur l'aire de la dalle de béton (Eq 3. 40 chapitre 3). Ce qui explique la différence entre la courbe théorique (en bleu) et la courbe mesurée (en rose).

Cependant dans la solution analytique (Eq 6.3) le flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ (mg.s^{-1}) est considéré constant. En régime stationnaire, à t tend vers l'infini, le flux massique transféré vers la cloche est égal au flux massique extrait par la pompe d'extraction (cf. paragraphe 3.5 dans chapitre 3). Par ailleurs, l'évolution de concentration dans la cloche est décrite par l'équation suivante :

$$C(t) = \frac{\dot{m}_{tot,z}}{Q}(1-\exp(-Nt)) + C(t=0)\exp(-Nt) \qquad \text{(Eq 6. 3)}$$

A t= +∞ (Figure 6. 14):

$$C(+\infty) = \frac{\dot{m}_{tot,z}}{Q} + C(t=0) \qquad \text{(Eq 6. 4)}$$

Ce qui donne le flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ (mg.s^{-1}) à travers la dalle de béton au régime stationnaire (t=+∞) :

$$\dot{m}_{tot,z} = \left(C(+\infty) - C(t=0)\right)Q \qquad \text{(Eq 6. 5)}$$

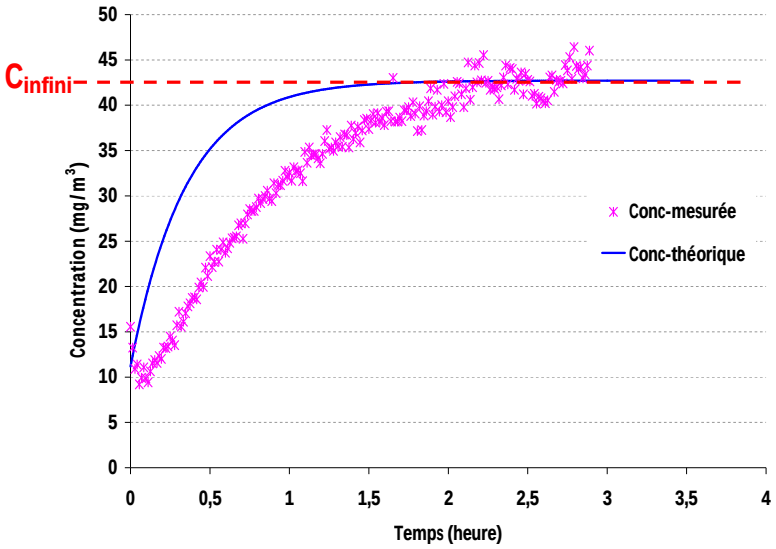


Figure 6. 14 : Concentration moyenne C_{infini} obtenue à t_{infini}

Le Tableau 6.7 résume les flux massiques déterminés à partir de l'Eq 6. 5 à travers la dalle 1 et la dalle 2

6.2.2.2 Flux massique à travers la dalle de béton (comparaison dalle 1 et dalle 2)

Le flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ ($mg.s^{-1}$) est donné à partir du débit d'extraction d'air Q ($m^3.s^{-1}$) et la concentration C_{infini} ($mg.m^{-3}$). Le Tableau 6. 7 résume les différents flux massique calculés, pour SCERES1 et SCERES2. Il présente aussi les différentes pertes de charge motrice $dP2_g$ à travers la dalle de béton, que ce soit la dalle 1 ou la dalle 2, qui correspondent à chaque expérience de mise en dépression. Plusieurs conclusions peuvent être tirées de ce tableau.

Il est à noter que la mise en dépression de la cloche a augmenté en moyenne de 10 fois le flux de vapeurs de TCE à travers les dalles de béton par rapport au flux de vapeurs de TCE mesurés sans la mise en dépression de la cloche, que ce soit pour la dalle 1 ou la dalle 2.

Nous remarquons aussi que pour un niveau de dépression donné, pour SCERES1 par exemple, le flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ est de même ordre de grandeur pour les différents débits d'extraction.

Tableau 6. 7 : Flux massiques en vapeurs de TCE calculés à travers la dalle 1 et dalle 2 pendant les mises en dépression lors de SCERES1 et SCERES2

SCERES1-Dalle 1			
Niveau de dépression (Pa)	5	10	20
	$\dot{m}_{tot,z}$ **(mg.s^{-1})**		
Q=1 m^3/h (2,78 10^{-4} m^3/s)	6,9 10^{-2} dP2$_g$= -2,33 Pa **1A-1**	11,5 10^{-2} dP2$_g$=-4,33 Pa **1B-1**	17 10^{-2} dP2$_g$=-11,73 Pa **1C-1**
Q=2 m^3/h (5,56 10^{-4} m^3/s)	7,6 10^{-2} dP2$_g$ =-2,33 Pa **2A-1**	11,9 10^{-2} dP2$_g$ =5,63 Pa **2B-1**	16,3 10^{-2} dP2$_g$ =-11,63 Pa **2C-1**
Q=0.5 m^3/h (1,39 10^{-4}m^3/s)	6,1 10^{-2} dP2$_g$ =2,83 Pa **3A-1**	-	-
SCERES2-Dalle 2			
Q=1m^3/h (2,78 10^{-4} m^3/s)	6,01 10^{-3} dP2$_g$ =-3,43 Pa **1A-2**	1,36 10^{-2} dP2$_g$ =-8,33 Pa **1B-2**	2,55 10^{-2} dP2$_g$ =-16,33 Pa **1C-2**

Peu surprenant est que pour un débit d'extraction donné, le flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ augmente quand la perte de charge à travers la dalle de béton augmente. En effet, la Figure 6. 15 montre le flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ en fonction de la perte de charge motrice à travers la dalle 1 pour le cas d'un débit d'extraction de 2 m^3.h^{-1}. Nous constatons que plus le gradient de pression à travers la dalle est important plus la convection et plus le flux massique à travers la dalle sont importants. Ce dernier augmente quasi-linéairement avec la perte de charge. Donc, la part de flux diffusif

est « négligeable ».

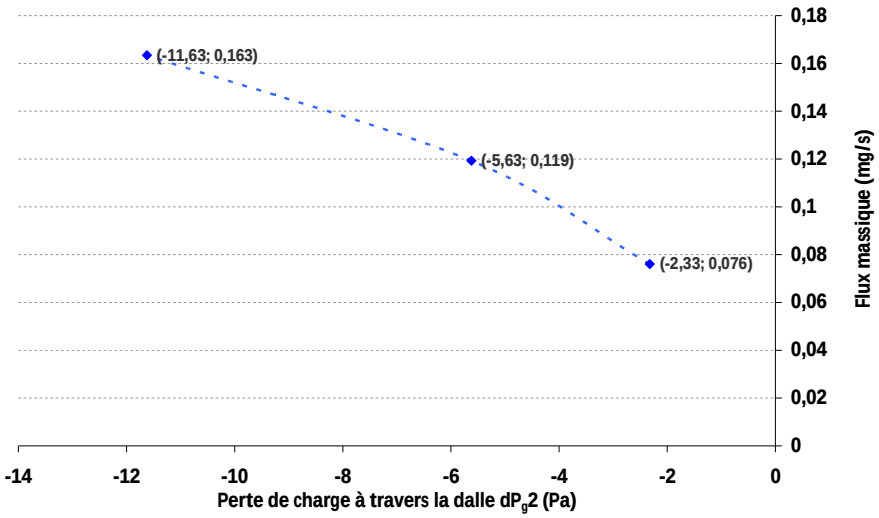


Figure 6. 15 : Flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ en fonction de la perte de charge dP_g2 à travers la dalle 1 pour le débit d'extraction Q=2m^3.h^{-1} lors de SCERES1

Finalement, pour un débit d'extraction et un niveau de dépressions donné, il y a une grande différence entre le flux massique à travers la dalle 1 et le flux massique à travers la dalle 2. Pour pouvoir les comparer nous avons tracé les flux massiques normalisés par le produit de la concentration mesurée sous la dalle avant la mise en dépression et le débit d'extraction de l'air de la cloche (Figure 6. 16). Dans le cas de SCERES2 nous avons remarqué que les pertes de charges à travers la dalle 2 sont beaucoup plus élevées que celles pendant SCERES1 (Tableau 6. 7). En d'autres termes et en vertu de l'équation de Darcy, cela revient à dire que la dalle 2 (SCERES2) est moins perméable que la dalle 1 (SCERES1). Le débit volumique Q_D (m^3.s^{-1}) à travers une dalle de béton est égale à :

$$Q_D = v_D \times A \qquad \text{(Eq 6. 6)}$$

où v_D (m.s^{-1}) est la vitesse de Darcy à travers la dalle de béton et A (m²) est l'aire de la dalle de béton.

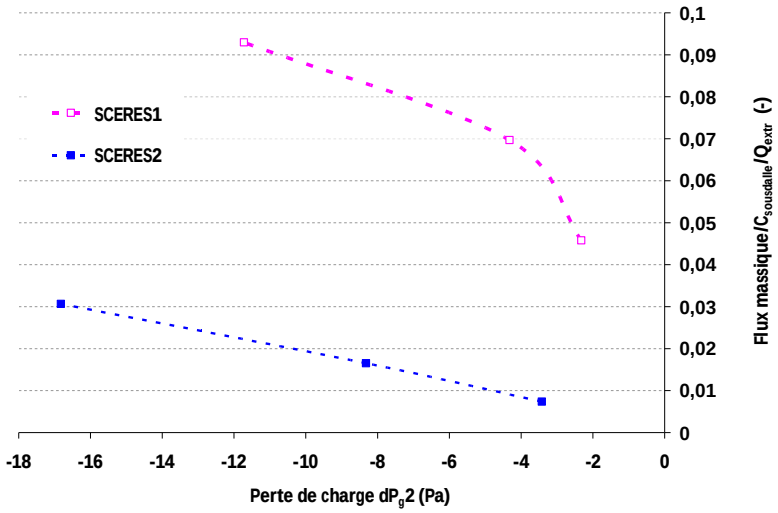


Figure 6. 16 : Flux massique normalisé par la concentration mesurée sous la dalle et le débit d'extraction d'air en fonction de la perte de charge pour la dalle 1 (SCERES1) et dalle 2 (SCERES2)

Le Tableau 6. 8 résume les flux massiques calculés avec SIMUSCOPP après chaque mise en dépression à travers la dalle 1 et la dalle 2. Nous remarquons que les flux massiques calculés se rapprochent des flux massiques déterminés à partir des résultats expérimentaux (cf. Tableau 6. 7) notamment pour la dalle 1. Cependant ils surestiment les flux massiques à travers la dalle 2.

Tableau 6. 8 : Flux massiques calculés au moyen de SIMUSCOPP à travers la dalle 1 et dalle 2 (A=1.5 m²) pendant les mises en dépression de SCERES1 et SCERES2

SCERES1-Dalle 1			
Niveau de dépression (Pa)	5	10	20
	$\dot{m}_{tot,z,SIMUSCOPP}$ **(mg.s^{-1})**		
Q=1 m^3/h (2,78 10^{-4} m^3/s)	5,8 10^{-2} **1A-1**	11,1 10^{-2} **1B-1**	29,4 10^{-2} **1C-1**
Q=2 m^3/h (5,56 10^{-4} m^3/s)	6,13 10^{-2} **2A-1**	14,8 10^{-2} **2B-1**	33,7 10^{-2} **2C-1**
Q=0.5 m^3/h (1,39 10^{-4}m^3/s)	5,2 10^{-2} **3A-1**	-	-
SCERES2-Dalle 2			
Q=1m^3/h (2,78 10^{-4} m^3/s)	4 10^{-2} **1A-2**	6,4 10^{-2} **1B-2**	19,2 10^{-2} **1C-2**

Le flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ (mg.s^{-1}) présente le flux total qui traverse la dalle de béton pendant la mise en dépression. Or, le transport de vapeurs à travers la dalle de béton est régi par la diffusion et la convection. Ainsi $\dot{m}_{tot,z}$ est la somme du flux massique diffusif et flux massique convectif (Tableau 6. 9)

Le flux massique diffusif F_{diff} (mg.s^{-1}) est calculé à partir de la 1ère loi de Fick :

$$F_{diff} = -D_{eg} gradC \qquad \text{(Eq 6. 7)}$$

où gradC (mg.m^{-2}) est le gradient de concentration à travers la dalle de béton et D_{eg} (m².s^{-1}) est le coefficient de diffusion effectif de la dalle de béton. D_{eg} est exprimé par :

$$D_{eg} = \theta_g \tau_{dalle} D_0 \qquad \text{(Eq 6. 8)}$$

où θ_g (-) est la teneur en gaz de la dalle et τ_{dalle} (-) est la tortuosité de la dalle de béton. Nous avons évalué dans le chapitre 5 (paragraphe 5.3.2) le produit $\theta_g \times \tau_{dalle}$ de l'ordre de 1/25ème de celui du sable moyen. Le coefficient de diffusion à l'air libre D_0 est égal à 7,8 10^{-6} m².s^{-1}. Ainsi Le D_{eg} de la dalle 1 est de l'ordre de 5,2 10^{-8} m².s^{-1}.

Le flux massique convectif F_{conv} (mg.s^{-1}) est obtenu par soustraction entre le flux massique total calculé à partir des mesures effectuées pendant les mises en dépression et le flux massique par diffusion (Tableau 6. 9).

Au vu des résultats présentés dans le Tableau 6. 9, nous pouvons confirmer que le transport dominant du transfert de vapeurs à travers la dalle de béton est la convection induite par la différence de pression à travers la dalle et que le flux diffusif est négligeable devant le flux convectif. En d'autres termes, le flux massique total $\dot{m}_{tot,z}$ peut être supposé égal au flux convectif F_{conv}.

Tableau 6. 9 : Flux massiques diffusifs, convectifs et totaux à travers la dalle 1 et dalle 2 pendant SCERES1 et SCERES2

SCERES1-Dalle 1									
Niveau de dépression (Pa)	5			10			20		
	Flux massiques (mg/s) $\times 10^{-2}$								
Q=1 m^3/h (2,78 10^{-4} m^3/s)	FD	FC	$\dot{m}_{tot,z}$	FD	FC	$\dot{m}_{tot,z}$	FD	FC	$\dot{m}_{tot,z}$
	0,4	6,5	6,9	0,42	11,0	11,5	0,47	16,5	17,0
	1A-1			1B-1			1C-1		
Q=2 m^3/h (5,56 10^{-4} m^3/s)	FD	FC	$\dot{m}_{tot,z}$	FD	FC	$\dot{m}_{tot,z}$	FD	FC	$\dot{m}_{tot,z}$
	0,51	7,1	7,6	0,48	11,4	11,9	0,49	15,8	16,3
	2A-1			2B-1			2C-1		
Q=0.5 m^3/h (1,39 10^{-4} m^3/s)	FD	FC	$\dot{m}_{tot,z}$	-			-		
	0,52	5,6	6,1						
	3A-1								
SCERES2-Dalle 2									
Q=1m^3/h (2,78 10^{-4} m^3/s)	FD	FC	$\dot{m}_{tot,z}$	FD	FC	$\dot{m}_{tot,z}$	FD	FC	$\dot{m}_{tot,z}$
	0,21	0,38	0,60	0,21	1,15	1,36	0,21	2,34	2,55
	1A-2			1B-2			1C-2		

6.2.2.3 Perméabilité des dalles de béton (approche inverse)

À partir du Tableau 6. 7, et en considérant que la diffusion est négligeable par rapport la convection, nous pouvons déterminer par approche inverse la perméabilité k (m^2) des deux dalles de béton.

En négligeant la compressibilité de l'air, v_D est égale à :

$$v_D = -\frac{k^* k_r}{\mu}\frac{dP_g}{e} \qquad \text{(Eq 6. 9)}$$

où k^*(m²) est la perméabilité intrinsèque de la dalle de béton, k_r (m²) représente la perméabilité relative à l'air de la dalle, dP_g (Pa) est la perte de pression motrice à travers la dalle de béton est e (m) est l'épaisseur de la dalle (e=0,1 m). Dans notre cas nous ne connaissons pas la perméabilité relative à l'air k_r de la dalle de béton. Ainsi nous allons déterminer la perméabilité k (m²) qui égale à $k^* \times k_r$. À partir de l'Eq 6. 9, la perméabilité k (m²) est égale à :

$$k = \frac{v_D}{dP_g} \times \mu \times e \qquad \text{(Eq 6. 10)}$$

D'autre part le débit de Darcy Q_D ($m^3.s^{-1}$) à travers la dalle est calculé à partir du flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ ($mg.s^{-1}$) et de la concentration mesurée sous la dalle $C_{sous\ la\ dalle}$ ($mg.m^{-3}$) avant la mise en dépression :

$$Q_D = \frac{\dot{m}_{tot,z}}{C_{sousdalle}} \qquad \text{(Eq 6. 11)}$$

À partir de l'Eq 6. 11, nous avons obtenu un débit d'air Q_D qui traverse la dalle 1 de l'ordre de 1,7 10^{-5} m^3/s. Ce débit présente **6%** du débit extrait de la cloche $Q_{extraction}$. Quant au débit Q_D qui traverse la dalle 2 il est de l'ordre de 5,6 10^{-6} $m^3.s^{-1}$ et présente **1,8 %** de débit d'extraction.

Revenant à la perméabilité k des dalles de béton qui devient égale alors à :

$$k = \frac{\dot{m}_{tot,z}}{C_{sousdalle} \times dP_g} \times \frac{\mu \times e}{A} \qquad \text{(Eq 6. 12)}$$

Il apparait clairement, à travers le Tableau 6. 10, que la perméabilité de la dalle 1 est plus élevée que la perméabilité de la dalle 2. La perméabilité de la dalle 1 est en moyenne égale à 4,2 10^{-12} m². Quant à la perméabilité de la dalle 2, elle est égale en moyenne à 6,79 10^{-13} m².

Tableau 6. 10 : Perméabilités de la dalle 1 et dalle 2 calculées par approche inverse

SCERES1-Dalle 1			
Niveau de dépression (Pa)	5	10	20
	Perméabilité k (m²) $\times 10^{-12}$		
Q=1 m^3/h (2,78 10^{-4} m^3/s)	6,32 1A-1	5,17 1B-1	2,51 1C-1
Q=2 m^3/h (5,56 10^{-4} m^3/s)	5,62 2A-1	3,83 2B-1	2,52 2C-1
Q=0.5 m^3/h (1,39 $10^{-4}m^3$/s)	3,47 3A-1	-	-
SCERES2-Dalle 2			
Q=1m^3/h (2,78 10^{-4} m^3/s)	0,73 1A-2	0,67 1B-2	0,62 1C-2

Ainsi le Tableau 5.1, présenté dans le chapitre 5, qui résume les perméabilités de la dalle 1 et dalle 2 déterminées par des essais expérimentaux peut être complété par les perméabilités obtenues à l'aide du calcul par approche inverse (Tableau 6. 11). Ceci nous a permis de vérifier les perméabilités des deux dalles que nous avons utilisées pour la simulation numérique. Au regard du Tableau 6. 11, nous pouvons constater que la perméabilité de la dalle 1 donnée par le dispositif expérimental du « perméamètre » est proche de celle obtenue par approche inverse. En revanche, la perméabilité de la dalle 2 obtenue au moyen du « perméamètre » est 3 fois plus grande que celle obtenue par approche inverse.

Tableau 6. 11 : Perméabilité de la dalle 1 et dalle 2

	Perméabilité de la Dalle 1 k (m²)	Perméabilité de la Dalle 2 k (m²)
CSTB	$2,0\ 10^{-14}$	$1,0\ 10^{-13}$
Perméamètre	$5,3\ 10^{-12}$	$2,0\ 10^{-12}$
Tiny perm	_____	$7,6\ 10^{-13}$
Approche inverse	$4,2\ 10^{-12}$	$6,79\ 10^{-13}$

6.2.3 Modélisation en 3D de la mise en dépression de la cloche (COMSOL)

Pour modéliser la mise en dépression dans la cloche, le bâtiment modèle, nous avons utilisé l'outil numérique COMSOL multiphysics. Afin de tester les fonctionnalités (écoulement, transport) dans un cas dégradé, nous avons réalisé une étude préliminaire en 2D moyennant la version 3.5 du modèle COMSOL (cf. Annexe A3). Nous avons ensuite mené des simulations en 3D au moyen de la version 4.2 pour étudier de façon qualitative la durée pour atteindre le régime stationnaire et voir si la concentration maximale calculée est comparable à celle mesurée.

Dans cette partie nous avons adopté les perméabilités des deux dalles déterminées insitu au moyen du « perméamètre ». Nous avons modélisé les essais de la mise en dépression de -10 Pa avec un débit de Q=1 $m^{-3}.h^{-1}$qui correspond à la manip 1B-1 dans SCERES1 et 1B-2 dans SCERES2.

Rappelons que l'essai de la mise en dépression dans la cloche a été réalisé en extrayant l'air de la cloche par pompage. Le diamètre de l'ouverture de l'extraction est égal à 2,5 cm (Figure 6. 17). La dépression ΔP souhaitée a été ensuite obtenue en réglant les ouvertures des trois orifices d'entrée d'air de 2,5 cm de diamètre.

Pour reproduire ce fonctionnement avec COMSOL multiphysics, nous avons appliqué d'une part une condition de Neumann avec un flux imposé et dont la vitesse d'entrée d'air $v_{entrée}$ ($m.s^{-1}$) sur les trois orifices d'entrée d'air correspondait à :

$$v_{entrée} = \frac{Q_{extraction}}{3 \times A} \qquad \text{(Eq 6. 13)}$$

où $Q_{extraction}$ ($m^3.s^{-1}$) est le débit d'extraction appliqué sur l'orifice d'extraction, A (m^2) est l'aire de l'extraction. Pour un débit $Q_{extraction}$ =1 $m^3.h\text{-}1$ = 2,77 $m^3.s^{-1}$, nous avons obtenu une vitesse d'entrée d'air sur un orifice d'entrée égale à 0,188 $m.s^{-1}$.

Et d'autre part, nous avons appliqué une pression de l'air P_{air} (Pa) au niveau de l'orifice de l'extraction afin de modéliser la dépression imposée dans la cloche. Ce qui correspondant à :

$$P_{air} = P_{atm} + \Delta P - \rho g \Delta z \qquad \text{(Eq 6. 14)}$$

où P_{atm} (Pa) est la pression atmosphérique supposée égale à 10^5 Pa, ΔP (Pa) est la dépression mesurée au centre de la cloche à z = 0,35 m pendant l'expérimentation de 1B-1 (ΔP= -12 Pa) et 1B-2 (ΔP=-10 Pa) , ρ ($kg.m^{-3}$) est la densité de l'air, g ($m.s^{-2}$) est l'accélération de pesanteur et z est la cote du point de mesure de la ΔP dans la cloche par rapport à la surface du sol. Pour 1B-1 et 1B-2, la pression P_{air} a été imposée à l'extraction de la cloche et égale respectivement à 99983,88 Pa et 99985,88 Pa.

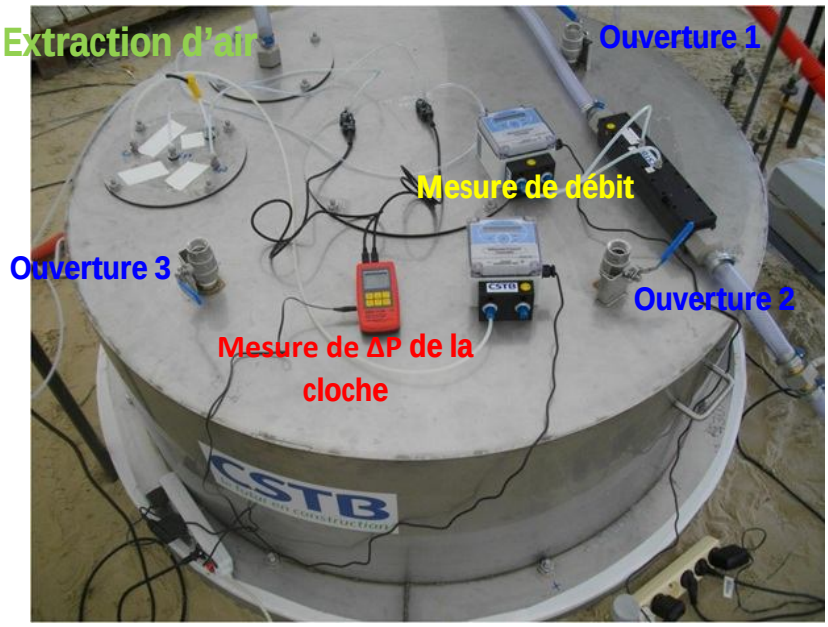


Figure 6. 17 : Essai de la mise en dépression de la cloche

6.2.3.1 Géométrie et maillage

Le domaine modélisé ne comporte qu'une partie de SCERES. Il contient la dalle de béton, la cloche et le panache de vapeur de TCE et a des dimensions de 3 m de large, 3 m de long et 1,6 m de haut (Figure 6. 18). Le système SCERES, dalle, cloche est nommé par la suite SDC.

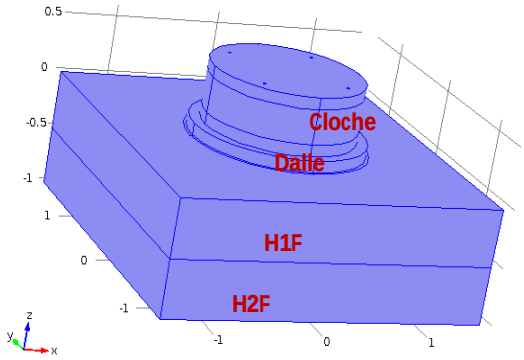
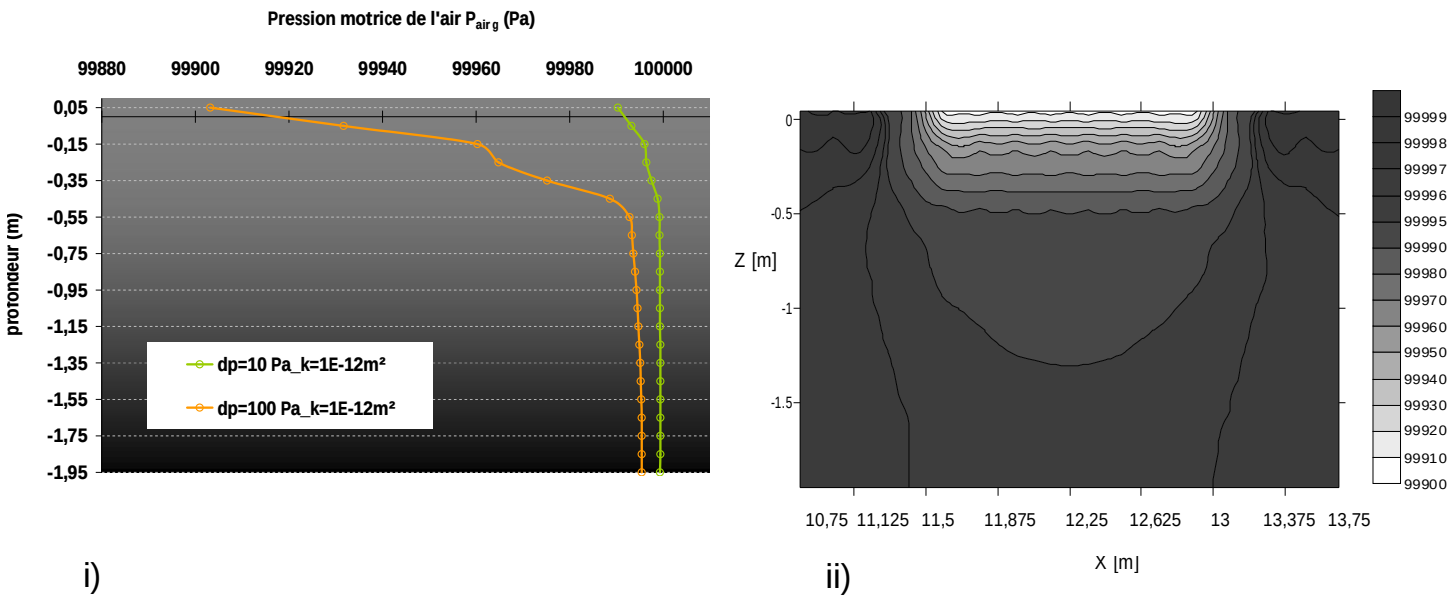


Figure 6. 18 : Le domaine SDC {SCERES, Dalle, Cloche}

Le choix de modéliser seulement 1 m de profondeur pour le milieu poreux vient des études de prédimensionnement effectuées avec SIMUSCOPP. Les résultats de ces études sont présentés dans la Figure 6. 19. Ils montrent l'effet de la mise en dépression appliqué au-dessus de la dalle, de perméabilité intrinsèque égale à 10^{-12} m², sur le champ de pression motrice de l'air du sol. L'effet de la mise en dépression ΔP de -10 Pa ou même de -100 Pa se propage jusqu'à la profondeur -0,55 m, au-delà de cette profondeur l'effet de la mise en dépression au-dessus de la dalle de béton n'a pas été détecté (Figure 6. 19 i). Pour cette raison nous avons choisi de modéliser seulement 1 m de milieu poreux pour pouvoir tenir compte d'une part de l'effet de la mise en dépression et d'autre part de l'hétérogénéité du milieu par la présence de deux types de sable, sable fin (de z=0 à z=-0,5 m) et sable moyen (z=-0,5 à z=-1m).

Il a été également montré qu'une perte de charge a été calculée à travers la dalle de 4,88 Pa dans le cas d'une dépression ΔP de -10 Pa. Par ailleurs, l'effet de la mise en dépression s'étale aussi latéralement de façon négligeable. En effet nous remarquons une zone de dépression près de la périphérie de la dalle (jusqu'à 40 cm dans le cas d'une ΔP= -100 Pa) ce qui va engendrer une intrusion de l'air depuis la surface du sol vers la dalle.



i) ii)

Figure 6. 19 : Pression motrice de l'air du sol calculée sous une dalle de béton de perméabilité 10^{-12} m² lors d'une dépression appliquée à la surface de la dalle de béton : i) profil vertical de la pression motrice de l'air du sol au centre de la dalle pour une dépression de 10 et 100 Pa, ii) Coupe longitudinale de la pression motrice de l'air du sol pour une dépression de 100 Pa

Pour réaliser le maillage de notre domaine 3D (Figure 6. 20), nous avons ciblé l'affinement du maillage au niveau de la dalle et la cloche et particulièrement au niveau des ouvertures de la cloche. Pour le milieu poreux nous avons choisi un maillage grossier prédéfini dans le modèle.

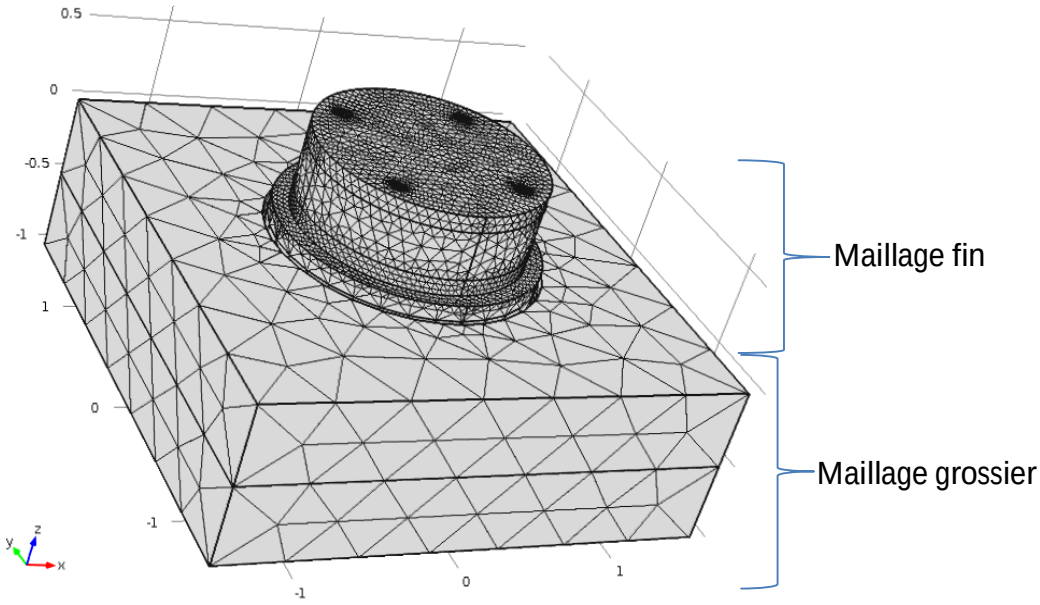


Figure 6. 20 : Géométrie et maillage du système SDC en 3D

6.2.3.2. Conditions initiales

Les Tableau 6. 12 et Tableau 6. 13 résument les conditions initiales choisies pour le domaine SDC afin de simuler les essais 1B-1 et 1B-2.

Pour les deux mises en dépression, nous avons imposé comme conditions initiales pour l'équation de l'écoulement, le profil hydrostatique et des vitesses d'écoulement nulles dans tout le domaine SDC (Figure 6. 21). Les conditions initiales imposées pour l'équation de transport de vapeurs de TCE dans le domaine SDC sont déterminées à partir des mesures effectuées sur SCERES avant la mise en dépression 1B-1 et 1B-2. Les concentrations imposées dans le sable H1F et H2F sont les moyennes de concentrations mesurées entre GA1 et GL aux profondeurs respectives 0,2 m et 0,4 m. Dans le gravier, nous avons imposé la concentration moyenne mesurée sous la dalle sur les trois points de mesures des concentrations de vapeurs de TCE: 1C, 2C et 3C. Les concentrations choisies dans le sable fin sont inférieures à celles dans le gravier. Cette sous-estimation des concentrations de vapeurs de TCE dans le sable fin peut amener à des sous estimations de la concentration de vapeur de TCE dans la cloche. Quant à la dalle de béton, nous avons imposé comme concentration initiale $C_{initiale\text{-}1}$ une fonction d'interpolation suivant la verticale entre la concentration imposée dans le gravier à z = 0 m et celle mesurée dans la cloche avant la mise en dépression à z = 0,1 m.

(1 mol.m^{-3}= $\frac{M_{TCE}}{1000}$ mg.m^{-3} où M_{TCE} est la masse molaire de TCE = 131.39 g.mol^{-1})

Tableau 6. 12 : Conditions initiales choisies dans le domaine SDC pour l'expérience 1B-1_ESSAI1

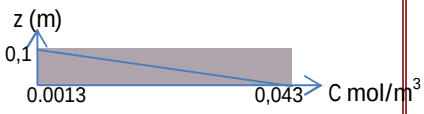
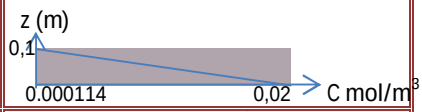
	Ecoulement	Transport
Cloche	- $P_{cloche} = P_{atm} - \rho gz$ - vitesse U(x,y,z)=0	C_{cloche} = 0,0013 mol/m^3
Dalle	- $P_{dalle} = P_{atm} - \rho gz$ - vitesse U(x,y,z)=0	$C_{initiale-1}$ = f(z) 
Gravier	- $P_{gravier} = P_{atm} - \rho gz$ - vitesse U(x,y,z)=0	$C_{gravier}$ =0,0431 mol/m^3
Sable fin	- $P_{H1F} = P_{atm} - \rho gz$ - vitesse U(x,y,z)=0	C_{H1F} =0,023 mol/m^3
Sable moyen	- $P_{H2F} = P_{atm} - \rho gz$ - vitesse U(x,y,z)=0	C_{H2F} =0,067 mol/m^3

Tableau 6. 13:Conditions initiales choisies dans le domaine SDC pour l'expérience 1B-2

	Ecoulement	Transport
Cloche	- $P_{cloche} = P_{atm} - \rho gz$ - vitesse U(x,y,z)=0	C_{cloche} = 0,000114 mol/m^3
Dalle	- $P_{dalle} = P_{atm} - \rho gz$ - vitesse U(x,y,z)=0	$C_{initiale-1}$ = f(z) 
Gravier	- $P_{gravier} = P_{atm} - \rho gz$ - vitesse U(x,y,z)=0	$C_{gravier}$ =0,02 mol/m^3
Sable fin	- $P_{H1F} = P_{atm} - \rho gz$ - vitesse U(x,y,z)=0	C_{H1F} =0,012 mol/m^3
Sable moyen	- $P_{H2F} = P_{atm} - \rho gz$ - vitesse U(x,y,z)=0	C_{H2F} = 0,1 mol/m^3

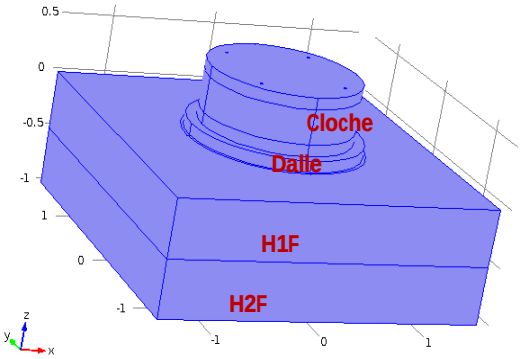


Figure 6. 21 : Différents domaines dans SDC

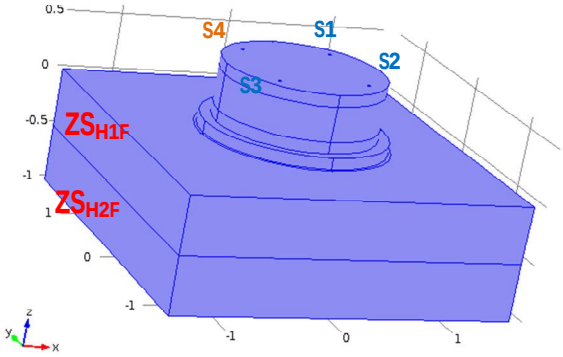


Figure 6. 22 : Limite du domaine SDC

6.2.3.3 Conditions aux limites

Les Tableaux 6. 14 et 6. 15 résument les conditions aux limites appliquées sur les limites du domaine SDC pour les essais 1B-1 et 1B-2.

Pour les deux essais de la mise en dépression, nous avons défini les limites latérales du domaine SDC, pour l'équation de l'écoulement, comme une surface d'entrée et nous y avons imposé une pression correspondant au profil d'équilibre statique. Au niveau de l'entrée d'air dans la cloche, nous avons assujetti la vitesse d'entrée $v_{entrée}$ et une pression correspondant à la dépression dans la cloche au niveau de l'extraction. Les conditions aux limites choisies pour l'équation du transport de vapeurs de TCE sur les limites du domaine SDC concordent avec le flux entrant imposé au niveau des entrées de la cloche et un flux sortant imposé à l'extraction. Au niveau de la limite proche de la zone source, ZS_{H2F} et ZS_{H1F} (Figure 6. 22), nous avons décidé d'une concentration moyenne calculée par SIMUSCOPP pour chacune de deux limites.

Tableau 6. 14 : Conditions aux limites imposées aux limites du domaine SDC pour l'expérience 1B-1_ESSAI1

	Ecoulement	Transport
Ouvertures d'entrée (S_1, S_2, S_3)	$v_{entrée}$ =-0,188 m/s	Flux entrant
Ouverture d'extraction (S_4)	ΔP = 99983,88	Flux sortant
Zone source ZS_{H1F}	Entrée ($P_{atm} - \rho gz$)	C_{zsH1F} =0,625 mol/m^3
Zone source ZS_{H2F}	Entrée ($P_{atm} - \rho gz$)	C_{ZSH2F} =2,085 mol/m^3
Façades latérales	Entrée ($P_{atm} - \rho gz$)	Flux entrant
Surface du sol	P_{atm}=10^5 Pa	Flux entrant
Parois de la cloche + Jupette	Paroi	Flux nul
Surface inférieur du SDC	Paroi	Frontière ouverte

Tableau 6. 15 : Conditions aux limites imposées aux limites du domaine SDC pour l'expérience 1B-2

	Ecoulement	Transport
Ouvertures d'entrée (S_1, S_2, S_3)	$v_{entrée}$ =-0,188 m/s	Flux entrant
Ouverture d'extraction (S_4)	ΔP = 99985,88	Flux sortant
Zone source ZS_{H1F}	Entrée ($P_{atm} - \rho gz$)	C_{zsH1F} =0,75 mol/m^3
Zone source ZS_{H2F}	Entrée ($P_{atm} - \rho gz$)	C_{ZSH2F} =2,25 mol/m^3
Façades latérales	Entrée ($P_{atm} - \rho gz$)	Flux entrant
Surface du sol	P_{atm}=10^5 Pa	Flux entrant
Parois de la cloche + Jupette	Paroi	No flux
Surface inférieur du SDC	Paroi	Frontière ouverte

6.2.3.4 Paramètres utilisés

Pour modéliser la mise en dépression 1B-1 et 1B-2 avec COMSOL, nous avons employé, dans chaque domaine du SDC, les paramètres résumés dans le Tableau 6. 16.

Tableau 6. 16 : Paramètres utilisés

Paramètres	valeurs
Coefficient de diffusion à l'air libre D_0 (m^2s^{-1})	$7,8\ 10^{-6}$
Coefficient de diffusion effectif D_{eg} (m^2s^{-1})	
-Sable moyen	$1,5\ 10^{-6}$
-Sable fin	$1,2\ 10^{-6}$
-Gravier	$2,0\ 10^{-6}$
-Dalle 1	$1,9\ 10^{-8}$
-Dalle 2	$1,3\ 10^{-8}$
Porosité (-)	
-Sable moyen	0,40
-Sable fin	0,43
-Gravier	0,38
-Dalle 1	0,20
-Dalle 2	0,20
Perméabilité (m^2)	
-Sable moyen	$1,0\ 10^{-10}$
-Sable fin	$6,0\ 10^{-12}$
-Gravier	$1,0\ 10^{-9}$
-Dalle 1	$5,3\ 10^{-12}$
-Dalle 2	$2,0\ 10^{-12}$

L'écoulement de l'air dans le domaine SDC a été modélisé à l'aide de l'équation de Navier Stokes et Darcy. Quant au transport de vapeurs de TCE, il a été modélisé à l'aide de l'équation de transport convectif-diffusif (cf. paragraphe 3.4.2. chapitre 3).

6.2.3.5 Ecoulement de vapeurs de TCE

L'essai 1B-1 est caractérisé par la présence de la dalle 1 de perméabilité égale à $5,3\ 10^{-12}$ m². Quant à l'essai 1B-2 il a été mené en présence de la dalle 2 de perméabilité $2\ 10^{-12}$ m². Ceci peut différencier les deux dalles du point de vue débit d'air pouvant traverser les dalles de béton, ce qui va directement influencer le niveau

de concentration de vapeurs dans la cloche.

Dans cette partie, nous modélisons seulement l'équation de l'écoulement dans le but de vérifier le bilan de masse dans la cloche ($Q_{extraction}$-$Q_{entrée}$ =0) car nous avons remarqué que les vitesses verticales à la sortie de la cloche sont faibles et varient fortement en fonction du temps (Figure 6. 23) ce qui ne permet pas de vérifier le bilan de masse dans la cloche. Pour cela nous avons lancé une série de modélisation en modifiant à chaque fois la tolérance absolue du solveur. Les plus faibles variations, autour de la moyenne, de la vitesse verticale à la sortie de la cloche ont été obtenues pour une tolérance absolue égale à 5 10^{-6}. Vu cette valeur faible de la tolérance nous avons choisi de simuler pour 5 s l'équation de l'écoulement sachant que ces simulations ont duré près de 10 h (Figure 6. 24).

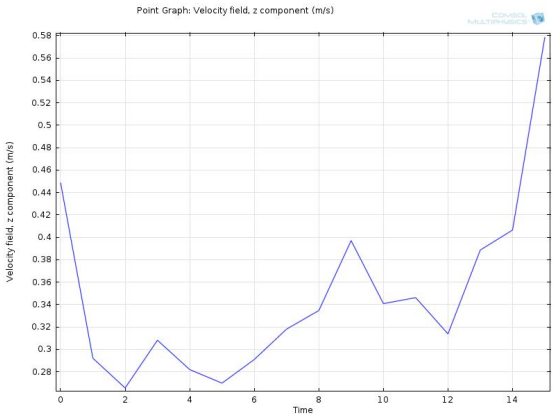


Figure 6. 23 : Exemple des problèmes rencontrés au niveau des vitesses verticales à la sortie de la cloche quand la tolérance absolue du solveur est relativement grande (de l'ordre de 10^{-3})

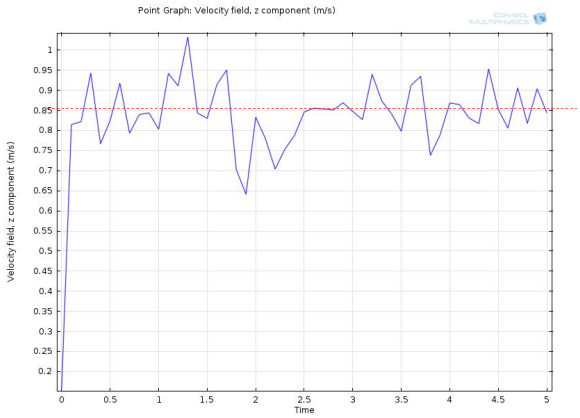


Figure 6. 24 : Exemple de vitesse verticale à la sortie de la cloche obtenue pour 1B-1 avec une tolérance absolue de solveur égale à 5 10^{-6}

a) Expérience de la mise en dépression 1B-1

La Figure 6. 24 montre la variation calculée de la vitesse verticale à la sortie de la cloche pour une durée totale de simulation de 5 s. Nous avons ensuite choisi la vitesse verticale w = 0,92 $m.s^{-1}$ à t=3,6 s qui correspond au bilan de masse le plus proche de 0.

Bilan de masse

En supposant que l'air est incompressible (ρ=cst), le bilan de masse pour la cloche, doit satisfaire l'équation suivante :

$$\oint \vec{U} \bullet \vec{n} ds = 0 \qquad \text{(Eq 6. 15)}$$

où $\vec{U}$ (m.s^{-1}) est le vecteur vitesse de l'écoulement et $\vec{n}$ est le vecteur normal à la surface élémentaire ds (m²). Ce qui veut dire que les débits d'air qui entrent dans la cloche $Q_{entrée}$ (m^3.s^{-1}) doivent être égaux au débit d'air à la sortie de la cloche Q_{sortie} (m^3.s^{-1}):

$$Q_{extraction} - Q_{entrée} = 0 \qquad \text{(Eq 6. 16)}$$

Numériquement, cela n'est pas possible. Afin d'évaluer la qualité du champ de vitesse calculé, nous avons introduit l'erreur relative δ définie par

$$\delta = \frac{Q_{extraction} - Q_{entrée}}{Q_{extraction}} \qquad \text{(Eq 6. 17)}$$

Les débits d'entrée sont au nombre de 4 : les trois débits entrant au niveau des ouvertures d'entrée de la cloche S1, S2 et S3 et le débit d'air à l'interface dalle de béton/cloche (Figure 6. 25) provenant de la dalle.

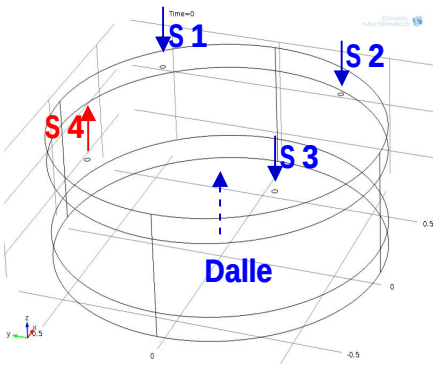


Figure 6. 25 : Bilan de masse dans la cloche

Le bilan de masse devient égale à :

$$Q_{S4} - (Q_{S1} + Q_{S2} + Q_{S3} + Q_D) = 0 \qquad \text{(Eq 6. 18)}$$

Les valeurs de débit d'air dans la cloche pour une vitesse égale à 0,92 m.s^{-1} à t=3,6 s sont résumées dans le Tableau 6. 17. Ces débits d'air sont obtenus par une intégration de la vitesse verticale sur la surface concernée. L'erreur relative δ_{1B-1} entre les débits sortant et entrant dans la cloche est de l'ordre de **1‰**. Nous remarquons que le débit d'air qui entre par la dalle 1 dans la cloche (Q_{D1}) présente **5,8 %** du débit de l'extraction $Q_{exraction}$ ce qui confirme ce que nous avons trouvé (6%) dans le paragraphe 6.2.2.3.

Tableau 6. 17 : Débit d'air et erreur relative du bilan de masse dans la cloche pendant l'expérience 1B-1

Débit d'air	Valeur (m^3/s)
$Q_{S1}+Q_{S2}+Q_{S3}$	1,75 10^{-4}
Q_{D1}	1,1 10^{-5}
$Q_{extraction}=Q_{S4}$	1,86 10^{-4}
Erreur relative $\delta_{1B-1}=\frac{Q_{S4}-(Q_{S1}+Q_{S2}+Q_{S3}+Q_{D1})}{Q_{S4}}$	1 ‰

Pression de l'air dans SDC

La Figure 6. 26 montre les pressions de l'air dans le domaine SDC. Elles varient entre la pression de l'air imposée à l'extraction de la cloche (99983,88 Pa) et la pression atmosphérique + 1 m de colonne d'air.

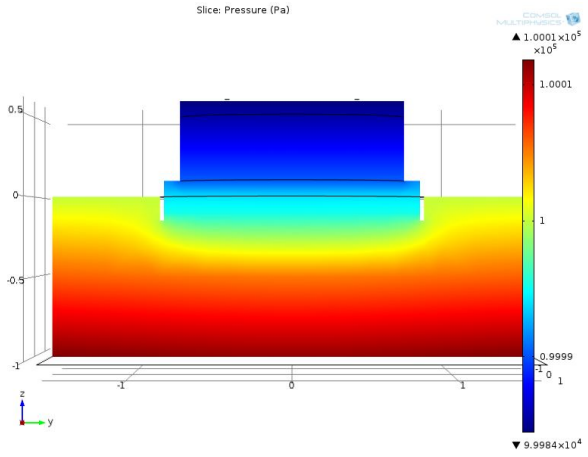


Figure 6. 26 : Champ de pression dans le domaine SDC pendant 1B-1 : Coupe verticale y-z pour x = 0

La pression de l'air calculée sous la dalle est égale à 99994 Pa. Le Tableau 6. 18 résume les dépressions motrice ΔPg mesurées pendant l'expérience de la mise en dépression 1B-1 et celles calculées à l'aide de COMSOL. Nous remarquons que la perte de charge mesurée à travers la dalle 1 pendant 1B-1 est plus élevée que celle calculée. La perméabilité de la dalle étant la même, les vitesses d'air calculées à travers la dalle de béton sont ainsi plus petites que celles de l'expérience. Par conséquent, les concentrations en vapeurs de TCE simulées dans la cloche pendant 1B-1 devraient être plus faibles que celles observées.

Tableau 6. 18 : Comparaison entre les pertes de charges motrices mesurées et calculées à travers la dalle 1 pendant 1B-1

ΔP_g mesurée (Pa)	ΔP_g_COMSOL (Pa)	ΔP_g_SIMuSCOPP (Pa)
-4,33	-2,43	-2,62

Lignes du courant

La Figure 6. 27 montre les lignes de courant hydriques calculées sur la base du champ de vitesse (obtenu à t=3,6 s) dans le domaine SDC pendant 1B-1. Nous remarquons que pendant la mise en dépression dans la cloche l'air provient à la fois des façades latérales du domaine SDC mais aussi de l'intrusion depuis la surface du sol.

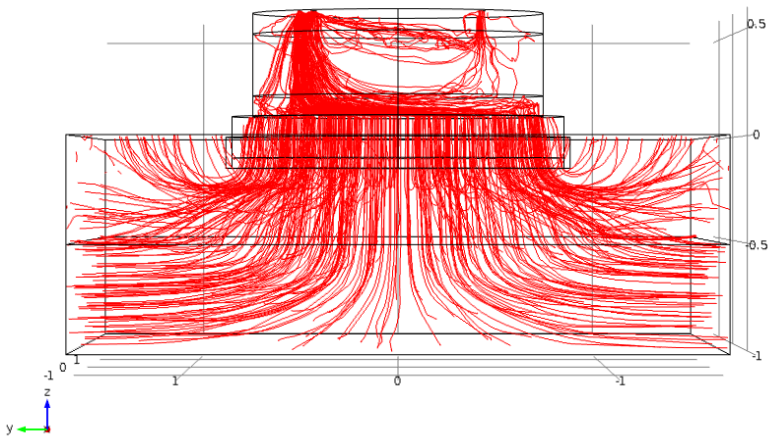
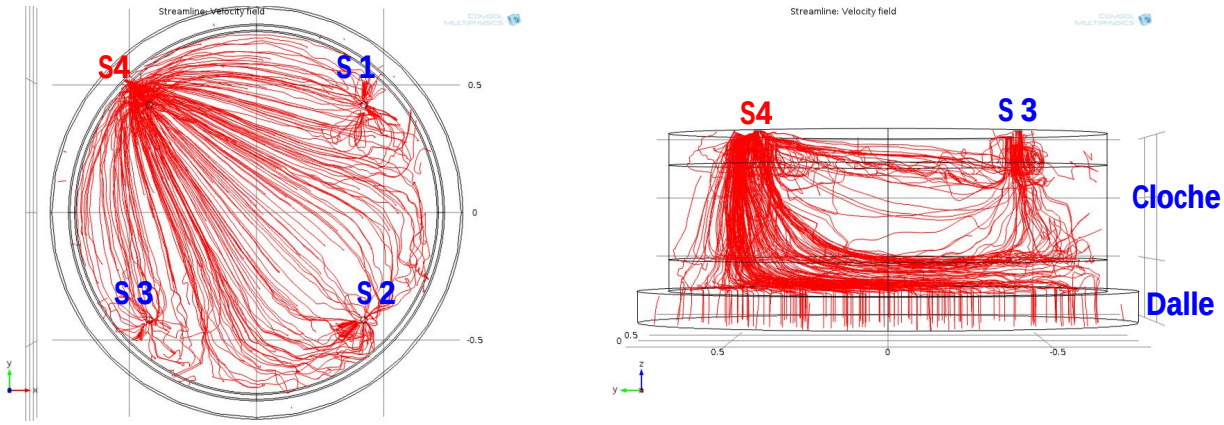


Figure 6. 27 : Lignes de courant dans le domaine SDC pendant 1B-1

Regardons de plus près ce qui se passe dans la cloche pendant la mise en dépression. L'air qui sort de la cloche au niveau de l'extraction provient principalement des entrées d'air (S1, S2 et S3) (Figure 6. 28 i) et aussi de la dalle (Figure 6. 28 ii). Nous remarquons aussi qu'il y a une sorte de « turbulence » dans le volume de la cloche, traduit par des lignes ondulées, qui s'accentue au niveau des entrées d'air à cause des vitesses imposées sur les ouvertures d'entrées.

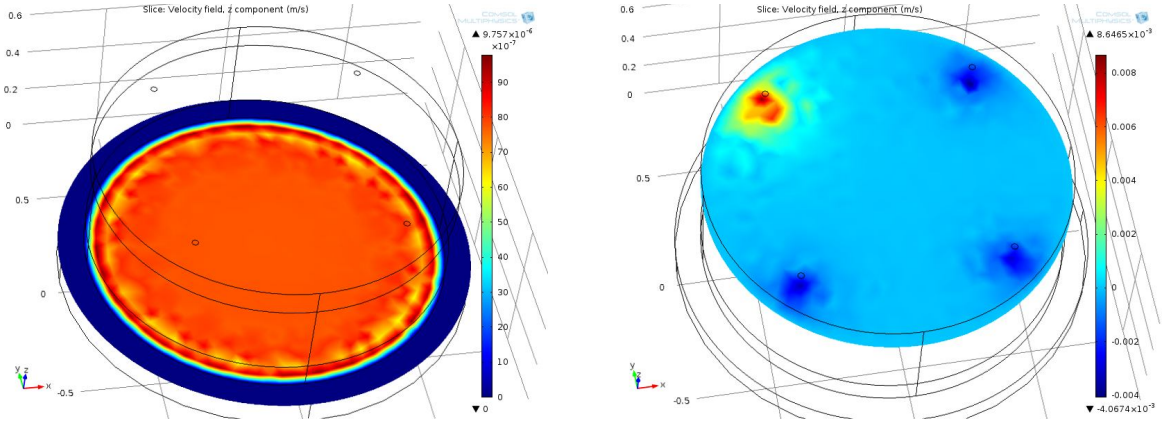


i) Vue de dessus ii) Vue de coté

Figure 6. 28 : Lignes de courant dans la cloche pendant l'expérience 1B-1

Vitesses verticales

La Figure 6. 29 montre la composante verticale (w) du champ de vitesses de l'air calculées dans la cloche, à l'interface dalle 1/cloche (à z=0,1 m) (Figure 6. 29 i) et à 10 cm en dessous de la paroi supérieure de la cloche (Figure 6. 29 ii). Nous observons des vitesses négatives au-dessous des entrées S1, S2 et S3 et positives au niveau de la sortie S4. À l'interface dalle 1/cloche nous remarquons que les vitesses verticales sont positives et que le champ de vitesse est quasi homogène sur cette interface à l'exception de l'entourage de la paroi latérale de la cloche. En effet dans cette zone les vitesses verticales sont faibles à cause de l'extrémité de la cloche qui repose sur la dalle (l'anneau bleu sur la Figure 6. 29 i). Ceci va réduire l'entrée d'air verticale à travers la dalle de béton (Figure 6. 30).



i) z=0,1 m (interface dalle 1 /cloche) ii) z = 0,5 m

Figure 6. 29 : Vitesses de l'air dans la cloche suivant la verticale z pendant 1B-1

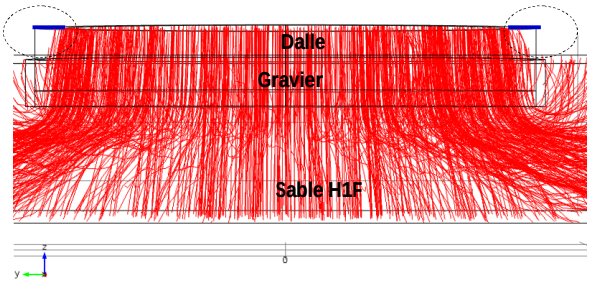


Figure 6. 30 : Lignes de courant dans la dalle et au-dessous dans le milieu poreux : coupe verticale yz, à x=0 m

b) Expérience de la mise en dépression 1B-2

Quant à la mise en dépression 1B-2, le bilan de masse a été établi pour la composante verticale du vecteur vitesse calculée à 0,89 m.s^{-1} à t=0,2 s (Tableau 6. 19). L'erreur relative δ_{1B-2} entre le débit sortant et entrant dans la cloche est de l'ordre de **1,4%**.

Nous remarquons que le débit d'air qui entre dans la cloche pendant 1B-2 par l'intermédiaire de la dalle 2 (Q_{D2}) présente la moitié du débit d'air qui traverse la dalle 1 pendant la mise en dépression 1B-1(Q_{D1}). Ceci est lié à la différence de perméabilité entre la dalle 1 (5,3 10^{-12} m²) et la dalle 2 (2,0 10^{-12} m²).

Nous remarquons aussi que le débit Q_{D2} présente **3,2 %** du débit de l'extraction

$Q_{exraction}$ ce qui constitue à peu près le double de ce que nous avons trouvé par approche inverse (cf. paragraphe 6.2.2.3). Ceci est expliqué aussi par la proportionnalité entre le débit d'air qui traverse la dalle et la perméabilité de celle-ci. En effet, pour modéliser la dalle 2 nous avons utilisé la perméabilité obtenue par le dispositif expérimental « perméamètre ». Celle-ci révèle à peu près le double de ce que nous avons trouvé par approche inverse (Tableau 6. 10).

Tableau 6. 19 : Débit d'air et erreur relative du bilan de masse dans la cloche pendant l'expérience 1B-2

Débit d'air	Valeur (m^3/s)
$Q_{S1}+Q_{S2}+Q_{S3}$	$1{,}75\ 10^{-4}$
Q_{D2}	$5{,}72\ 10^{-6}$
$Q_{extraction}=Q_{S4}$	$1{,}78\ 10^{-4}$
Erreur relative $\delta_{1B-2}=\frac{Q_{S4}-(Q_{S1}+Q_{S2}+Q_{S3}+Q_{D2})}{Q_{S4}}$	1,4 %

Pression de l'air dans SDC

Le champ de pression de l'air pendant 1B-2 varie entre la pression de l'air imposée à l'extraction de la cloche (99985,88 Pa) et la pression atmosphérique plus 1m de colonne d'air (Figure 6. 31).

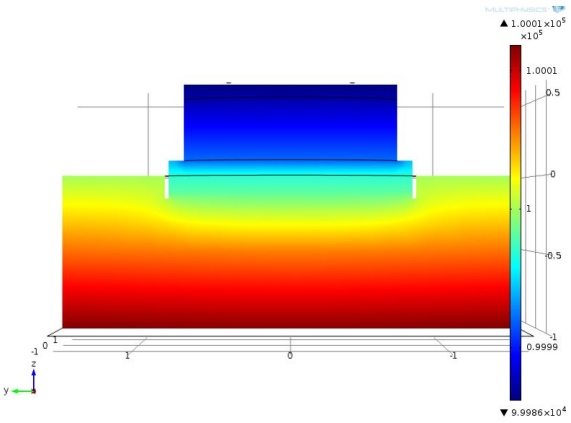


Figure 6. 31 : Champ de pression calculé dans le domaine SDC pendant 1B-2 : coupe verticale yz, à x= 0 m

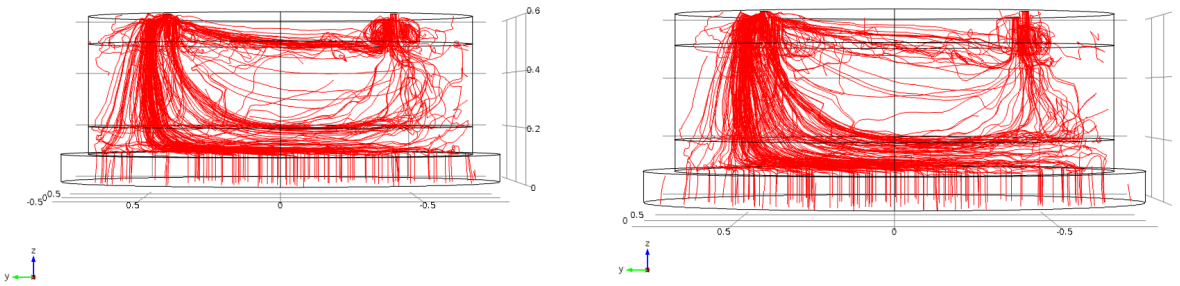
Le Tableau 6. 20 résume les dépressions motrice ΔPg mesurées pendant l'expérience de la mise en dépression 1B-2 et calculée à l'aide de COMSOL. Comme dans le cas 1B-1, la perte de charge à travers la dalle 2 pendant 1B-2 est plus élevée que celles calculée par COMSOL.

Tableau 6. 20 : Pertes de charges motrices mesurées et calculées à travers la dalle 2 pendant l'expérience 1B-2

	ΔP_g mesurée (Pa)	ΔP_g_COMSOL (Pa)
Perte de charge	-8,33	-6,17

Lignes de courant et champ de vitesse

Les lignes de courant et la distribution du champ de vitesse dans le domaine SDC pendant 1B-2 sont semblables à celles dans SDC pendant 1B-1. Cependant il y a une différence entre 1B-1 et 1B-2 au niveau des lignes de courant et des vitesses d'entrée vers la cloche par les deux dalles. Les lignes du courant provenant de la dalle 2 sont moins nombreuses (Figures 6. 32) car la part de débit traversant la dalle 2 aux débits entrant dans la cloche est plus faible que celle de la dalle 1. Ceci est du à la différence de perméabilité entre la dalle 1 et la dalle 2.



i)1B-2 ii) 1B-1

Figure 6. 32 : Lignes de courant qui entre dans la cloche à travers la dalle de béton

Une fois le bilan de masse vérifié et la vitesse verticale à l'extraction de la cloche choisie, nous avons pu modéliser, à partir du champ de vitesse obtenu, le transport

convectif-diffusif des vapeurs de TCE dans le domaine SDC.

6.2.3.6 Transport de vapeurs de TCE dans SDC

a) La mise en dépression 1B-1

Concentration de vapeurs de TCE (ESSAI1)

Pendant la mise en dépression dans la cloche, les vapeurs de TCE aspirées depuis l'interface dalle/cloche migrent vers la vanne d'extraction de la cloche (Figure 6. 33).

La Figure 6. 34 montre l'évolution de la concentration de vapeurs de TCE calculée à la surface d'extraction de la cloche. Contrairement à ce qui était obtenu par la modélisation numérique du SDC en 2D (Annexes A3), Le temps mis pour atteindre la concentration maximale calculée $C_{infini\text{-}calculée}$ est de 3 h, ce qui est plus proche du temps mis pour atteindre la concentration maximale C_{infini} mesurée pendant 1B-1 (2 h et 15 min).

Cependant, C_{infini} calculée est égale à 0,00146 mol.m^{-3} (35 ppmv) ce qui correspond seulement à 50 % de celle mesurée pendant 1B-1 correspondant à 0.003 mol.m^{-3} (70 ppmv). Ceci peut être expliqué par le fait que le flux massique calculé à travers la dalle est plus faible que celui observé lors de l'essai 1B-1. En effet, en se basant sur le débit d'air calculé à travers la dalle pendant 1B-1 Q_{D1} (Tableau 6. 17) qui correspond bien au débit observé à travers la dalle 1, et sur la concentration initiale choisie sous la dalle, sachant que dans le sable H1F (c= 0,023 mol.m^{-3}), le flux massique calculé $\dot{m}_{tot,z,calculé}$ est égal à **6,1 10^{-2} mg.s^{-1}**. Ce dernier présente seulement **54 %** du flux massique $\dot{m}_{tot,z}$ déterminé à partir des données expérimentales lors de 1B-1 (cf. Tableau 6. 7). Sachant que, en se basant sur la vitesse moyenne de pore, le temps de transfert à travers les 10 cm de la dalle, 10 cm gravier et 10 cm du sable H1F est de l'ordre de 3h. Donc, globalement, la concentration maximale atteinte à la sortie d'extraction après 2 voir 3 heures, provient en grande partie des vapeurs de TCE présentes dans le gravier et dans le sable fin (H1F). Les concentrations imposées comme état initial dans le sable fin sont plus faibles que celles du gravier, cela peut expliquer la différence du simple au double entre les concentrations calculées et celles mesurées. Nous avons probablement sous estimé les concentrations dans le sable fin d'un facteur de 2.

Il est donc à noter que le champ de concentration de vapeurs en TCE « choisi » sous la dalle est le paramètre clé pour la simulation de la courbe de sortie au niveau de la sortie d'extraction de la cloche. En plus, un autre paramètre est incertain. Pour la modélisation de la diffusion dans la dalle nous avons pris le coefficient de diffusion effectif D_{eg} déterminé pour la dalle 1 à partir de « cup methode » égale à 1,9 10^{-8} $m^2.s^{-1}$. Si nous augmentons de 10 fois le coefficient de diffusion effectif dans la dalle 1, la concentration maximale et le temps pour atteindre le régime stationnaire se rapprochent de ceux mesurés (Figure 6. 35).

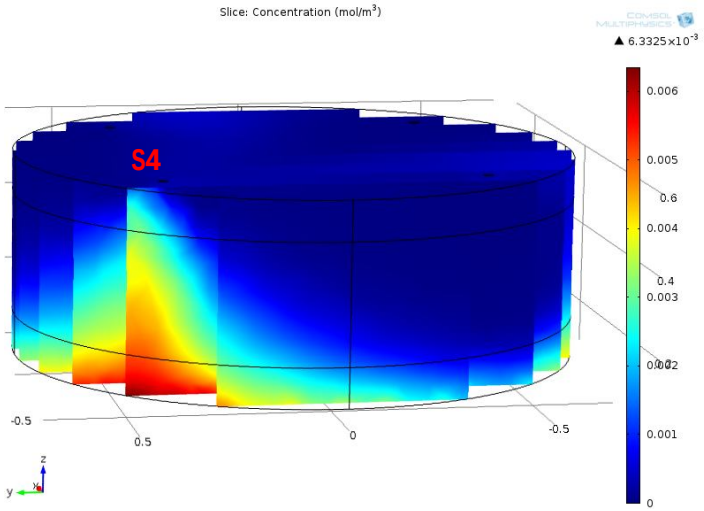


Figure 6. 33 : Champ de concentration de vapeur de TCE calculé dans la cloche en fonction du temps pendant la mise en dépression pour l'essai 1B-1

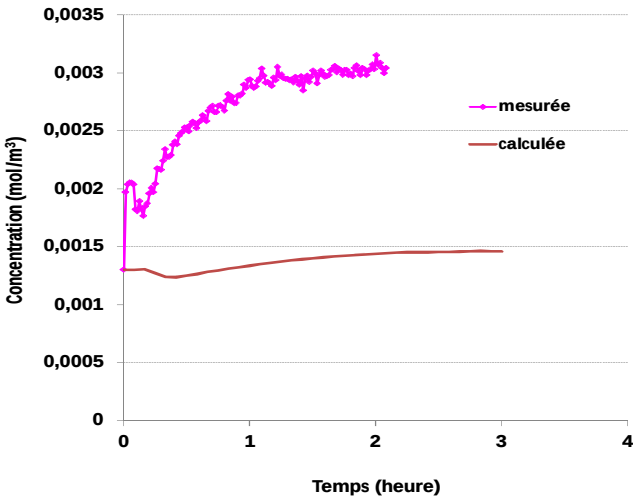


Figure 6. 34 : Concentration de vapeurs de TCE mesurée et calculée à la sortie d'extraction de la cloche lors de 1B-1

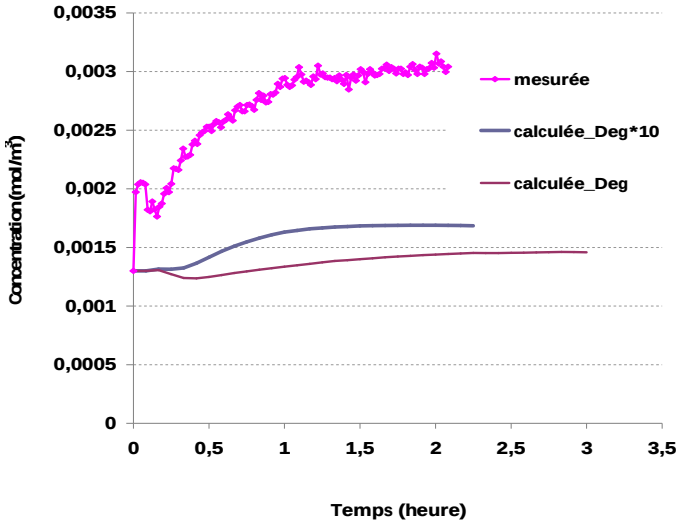
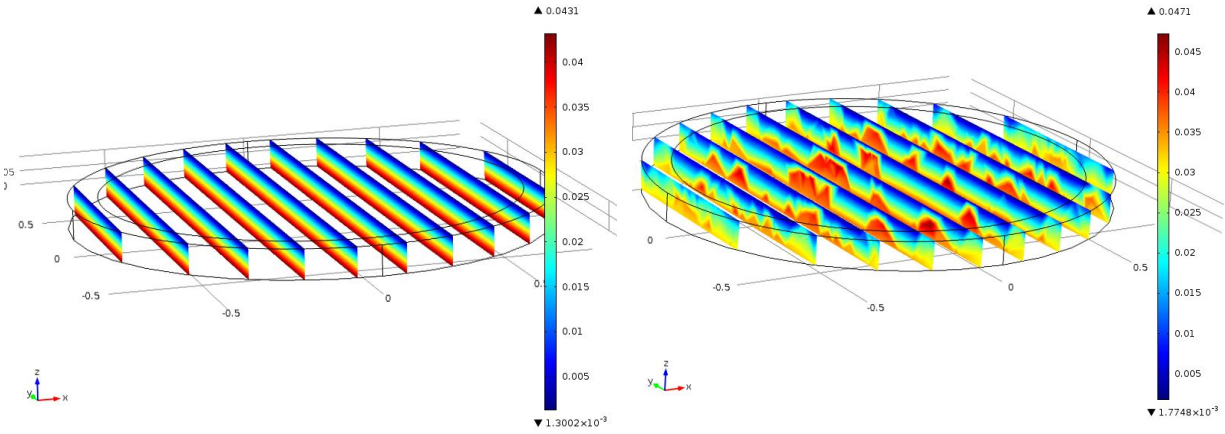


Figure 6. 35 : Concentration de vapeurs de TCE mesurée et calculée en fonction du temps à la sortie d'extraction de la cloche pendant 1B-1 à partir d'un coefficient de diffusion effectif D_{eg} de la dalle égale à 1,9 10^{-8} $m^2.s^{-1}$ et D_{eg}×10

La Figure 6. 36 montre la distribution des concentrations de vapeurs de TCE dans la dalle, suivant les plans (yz), choisie comme état initial (t = 0) (Figure 6. 36 i) et au régime stationnaire à t = 3 h (Figure 6. 36 ii). Nous remarquons qu'au bout de 3 h, les vapeurs de TCE ont avancé, au cours de temps, d'une façon non uniforme de l'interface dalle 1/gravier vers l'interface dalle 1/cloche. Cette non uniformité est due aux concentrations de vapeurs dans la dalle 1 qui sont plus élevées du coté de l'extraction de la cloche. Dans le cas d'un coefficient de diffusion effectif de la dalle 1 10 fois plus grand, la répartition de la concentration des vapeurs dans la dalle est plus uniforme, particulièrement au niveau de l'interface dalle 1/gravier (Figure 6. 37).



i) à t=0 ii) à t= 3 heures

Figure 6. 36 : Distribution de concentration de vapeurs de TCE calculée dans la dalle 1 pendant 1B-1

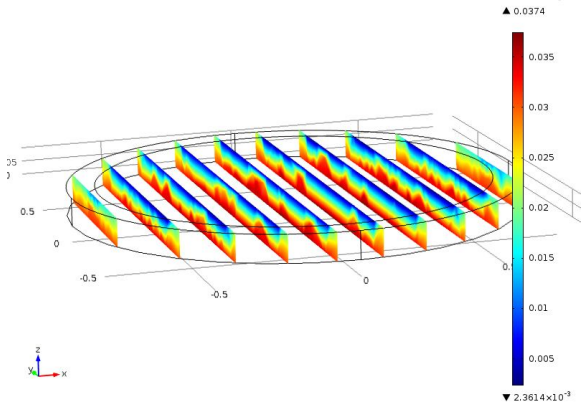


Figure 6. 37 : Distribution de concentration de vapeurs de TCE calculée dans la dalle 1 pendant 1B-1en utilisant un coefficient de diffusion effectif D_{eg1} égal à 1,9 10-7 $m^2.s^{-1}$ dans la dalle

À la fin de la mise en dépression, les champs de concentration de vapeurs dans la dalle et le gravier ont évolué par rapport à celui imposé comme condition initiale. En comparant la concentration de vapeurs de TCE moyenne calculée dans le gravier pour D_{eg} égale à $1{,}910^{-8}$ $m^2.s^{-1}$ (Figure 6. 38), et la concentration moyenne mesurée sous la dalle (dans le gravier), nous constatons après la mise en dépression une diminution des concentrations en vapeurs de TCE. Elle est particulièrement prononcée au milieu du gravier causée par l'effet de l'aspiration locale des vapeurs de la cloche. Il en résulte que les concentrations calculées dans le gravier ont diminué

de 18% contre une diminution mesurée de 7% (Tableau 6. 21).

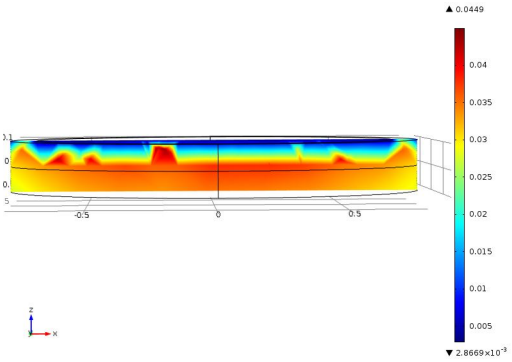


Figure 6. 38 : Concentration de vapeurs de TCE calculées dans la dalle et dans le gravier après 3 heures de dépression : coupe verticale xz (y=0) lors de 1B-1

Concentration de vapeurs de TCE **moyenne** dans le gravier	Mesurée (mol/m^3)	Calculée (mol/m^3)
Avant 1B-1	0.0431	0.0431
Après 1B-1	0.04	0.035

Tableau 6. 21 : Concentrations de vapeurs de TCE mesurée et calculée dans le gravier avant et après la mise en dépression 1B-1

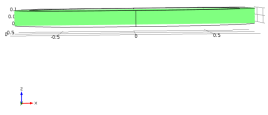
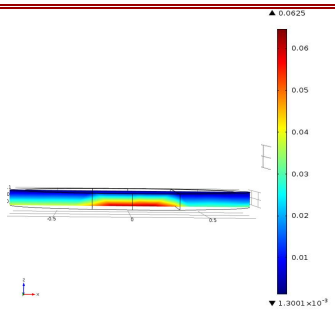
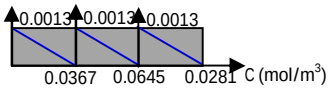
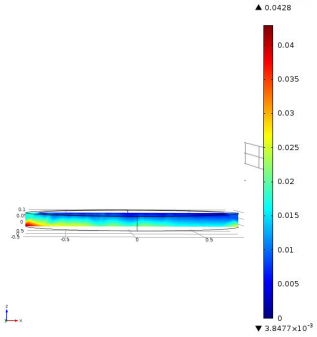
Il apparaît clairement que l'évolution de la concentration C_{infini} à l'extraction de la cloche dépend directement de la distribution de la concentration de vapeurs dans la dalle. Pour vérifier cet impact, nous avons effectué une série d'essais en modifiant à chaque fois les concentrations initiales choisies dans la dalle 1.

Concentration de vapeurs de TCE (ESSAI 2, 3 et 4)

Le Tableau 6. 22 résume les différentes distributions de concentration choisies comme conditions initiales dans la dalle 1. Dans l'essai 2, nous avons fixé une concentration constante dans la dalle 1 qui correspond à la concentration moyenne entre la concentration mesurée sous la dalle et la concentration dans la cloche avant la mise en dépression. Dans l'essai 3, nous avons partagé la dalle 1 en trois sous domaines (compartiments). Dans chacun de ces compartiments, présentant l'amont le centre et l'aval de la dalle 1, une fonction d'interpolation a été adoptée entre les concentrations mesurées localement au point 3C, 2C et 1C à z = 0 et la concentration 0,0013 $mol.m^{-3}$ mesurée dans la cloche avant la mise en dépression (Tableau 6. 22). Quant à l'essai4, les concentrations de vapeurs de TCE calculées avec l'outil numérique SIMUSCOPP à t= 20 j (avant la mise en dépression 1B-1) ont été choisies

comme état initial dans l'ensemble du domaine SDC.

Tableau 6. 22 : Conditions initiales de concentration en vapeurs de TCE choisies dans la dalle 1 lors des essais 2, 3 et 4 pour 1B-1

	ESSAI2	ESSAI 3	ESSAI 4
Concentration dans la dalle suivant le plan (xz)	 $C_{initiale-2}$=0.0222 mol/m^3	 $C_{initiale-3}$=f(x,z) 	 $C_{initiale-4}$=f(x,y,z)

➢ *Concentration de vapeurs de TCE à la sortie d'extraction de la cloche*

La Figure 6. 39 montre l'évolution de la concentration de vapeurs de TCE à la sortie d'extraction de la cloche pour les différents essais effectués. Nous constatons que pour l'essai 2, la montée de la concentration calculée est similaire à celle observée jusqu'à 15 min après le début de l'extraction. Ensuite, les concentrations en vapeurs de TCE calculées diminuent fortement. Notons également que la concentration maximale est égale à 0,0022 mol.m^{-3}, donc plus élevée que celle calculée lors de l'essai 1. Ceci s'explique par le fait que la concentration initiale dans la dalle est uniformément répartie. En effet, en supposant que la dalle est initialement chargée en vapeurs de concentration égale à 0,0222 mol.m^{-3}, a accéléré le transfert des vapeurs vers la cloche.

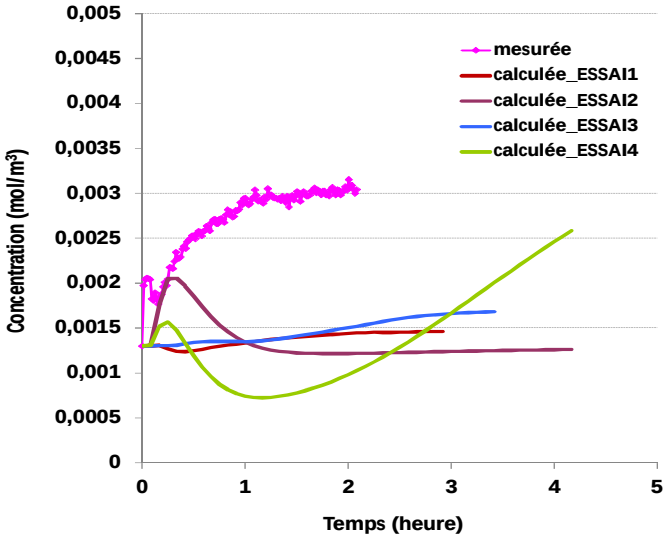


Figure 6. 39 : Evolution de la concentration de vapeurs mesurée et calculée à partir des essais 1, 2, 3 à la sortie d'extraction de la cloche pendant 1B-1

En ce qui concerne l'essai 3 (Figure 6. 39), en imposant les concentrations mesurées localement sous la dalle 1 dans les trois sous domaines de la dalle 1, nous obtenons une concentration maximale à la sortie d'extraction de la cloche égale à 0,00167 mol.m^{-3}. Par contre le temps pour atteindre un palier de concentration est très long, de l'ordre de 3,5 h. Par ailleurs, on note que l'évolution de la concentration de vapeurs de TCE à la sortie d'extraction de la cloche est passée par un petit dôme au bout de 30 min de pompage (Figure 6. 40). Puis, la concentration continue à augmenter jusqu'à atteindre la concentration maximale. En effet, c'est la distribution spatiale de la concentration de vapeurs choisie comme état initial dans la dalle qui génère deux arrivées de front de vapeurs dans la cloche. Le premier front est lié à la concentration initiale fixée au centre de la dalle qui présente des concentrations en vapeurs de TCE les plus fortes. Le deuxième résulte de l'arrivée des vapeurs depuis le gravier au cours de la période de la mise en dépression.

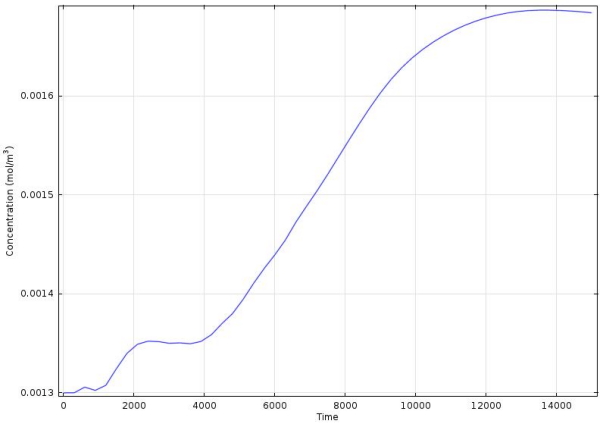


Figure 6. 40 : Zoom sur l'évolution de la concentration de vapeurs de TCE calculée à la sortie d'extraction de la cloche pour l'ESSAI 3

Cet aspect a été accentué dans l'essai 4 où la concentration de vapeurs à la sortie d'extraction de la cloche augmente dans un premier temps jusqu'à atteindre un premier pic et ce, au bout de 10 min seulement. Ensuite, une deuxième augmentation de concentration est calculée pour atteindre un palier de concentration. Ceci peut être expliqué par deux aspects : d'une part, par la non uniformité de la concentration dans la dalle suivant les directions x, y et z se traduisant par un flux massique spatio-temporel des vapeurs à l'interface dalle/cloche non-uniforme. D'autre part, par le fait que les concentrations calculées dans le gravier par SIMUSCOPP surestiment celles mesurées directement sous la dalle 1 (cf. Figure 5. 52 dans le chapitre 5). Les deux aspects combinés causent cette augmentation particulière des concentrations de vapeur de TCE à la sortie d'extraction de la cloche pendant la mise en dépression.

- *Concentration de vapeurs de TCE dans la dalle et le gravier*

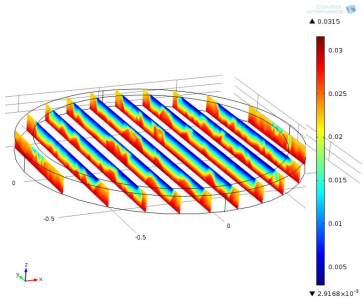
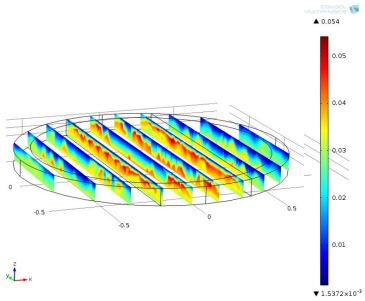
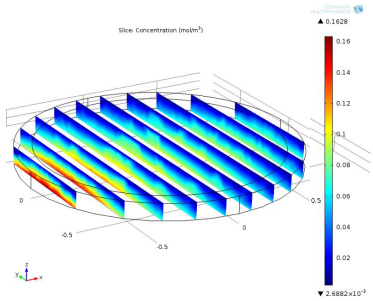
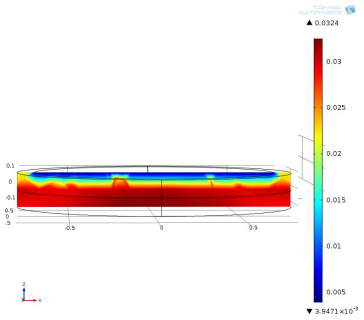
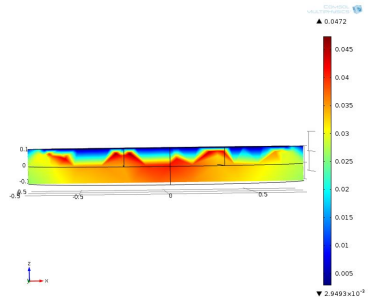
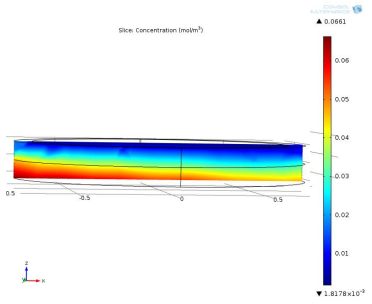
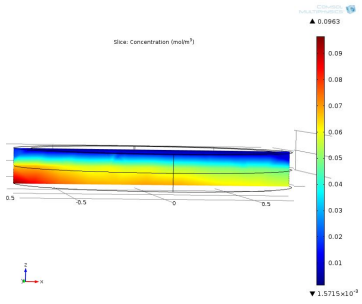
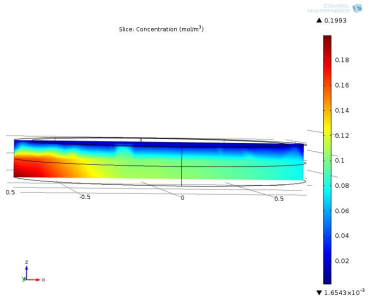
Le Tableau 6. 23 résume les répartitions des concentrations de vapeurs de TCE calculées, au régime stationnaire du transport de la cloche, dans la dalle et dans le gravier pour les essais 2, 3 et 4. Dans l'essai 2, nous constatons qu'au régime stationnaire les vapeurs de TCE ont avancé, sous l'effet de l'aspiration, de l'interface dalle/gravier vers l'interface dalle 1/cloche d'une façon non uniforme. Ceci a créé un gradient de concentration entre l'interface dalle 1/gravier où la concentration de vapeurs est égale à 31,5 10^{-3} mol.m^{-3} (provenant essentiellement du sable fin) et l'interface dalle 1/cloche où la concentration de vapeurs est égale à 2,9 10^{-3} mol.m^{-3}. Par ailleurs les parois de la cloche présentes en périphérie de la dalle limitent ainsi

l'effet de l'aspiration exercé depuis l'extraction de la cloche. Par conséquent, les concentrations de vapeurs sont restées proches de celles initialement choisies.

Dans l'essai3, les concentrations calculées dans la dalle montrent que les vapeurs ont migré verticalement vers l'interface dalle 1/cloche, tout en gardant les gradients de concentration selon la direction x. En effet, les plus grandes valeurs de concentration sont calculées au centre de la dalle, là où nous avons imposé comme condition initiale la concentration la plus élevée ($C_{initiale}$ = 0,0645 mol.m^{-3}) par rapport aux autres compartiments de la dalle. En régime stationnaire, les concentrations calculées dans la dalle 1 sont comprises entre 54 10^{-3} mol.m^{-3} au centre de la dalle et 1,5 10^{-3} mol.m^{-3}calculées dans le compartiment aval à l'interface dalle 1/cloche.

La distribution de concentration calculée lors de l'essai 4 est très différente. Nous avons pu constater que la concentration de vapeurs dans la dalle continue à augmenter, même après 4h de mise en dépression de la cloche. En effet, le champ de concentration de vapeurs calculé dans la dalle et le gravier indique clairement que les concentrations continuent à augmenter dans le gravier et dans la dalle particulièrement du côté amont (proche de la zone source) jusqu'à atteindre une concentration à l'interface dalle/gravier de l'ordre de 0,1993 mol.m^{-3} à t=4 h. Situé directement au-dessous de la sortie d'extraction de la cloche, cette augmentation à l'amont de la dalle va influencer incontinent la concentration de vapeurs à l'extraction de la cloche, ce qui va entraîner une très forte augmentation de celle-ci après le premier pic.

Tableau 6. 23 : Concentrations de vapeurs de TCE calculées au régime stationnaire pour la mise en dépression 1B-1

	ESSAI 2	ESSAI 3	ESSAI 4
Concentration dans la dalle suivant le plan (yz)	 À t =15 minutes	 À t =3 heures 30 minutes	 À t=10 minutes
Concentration dans la dalle et le gravier suivant le plan (xz)	 À t =15 minutes	 À t =3 heures 30 minutes	 À t=10 minutes  À t=1 heures 10minutes  À t= 4 heures

Nous constatons donc que l'évolution de la concentration de vapeurs de TCE à la sortie d'extraction de la cloche dépend directement de l'historique de concentration de vapeurs dans la dalle (et aussi du milieu poreux sous-jacent), c'est-à-dire du flux massique à travers la dalle. D'autre part, nous avons vu que la meilleure approche pour évaluer la concentration à l'extraction de la cloche pendant 1B-1 est d'imposer comme conditions initiales dans la dalle les valeurs mesurées localement sous la dalle avant la mise en dépression 1B-1 (ESSAI3). Les simulations ont également mis en relief que la distribution de concentration choisie comme conditions initiales dans le sable fin sous-estimait très probablement les concentrations d'un facteur de 2. Cela expliquerait en grande partie pourquoi la concentration maximale de vapeur de TCE calculée à la sortie d'extraction représente uniquement la moitié de celle mesurée.

- *Essai 5*

Afin d'améliorer la courbe de concentration à la sortie de la cloche (Figure 6. 39), sachant que les débit d'air Q_D expérimental et numérique à travers la dalle sont comparables et de l'ordre de 6% par rapport au débit de l'extraction de la cloche, nous avons augmenté la concentration de vapeurs choisie comme concentration initiales sous la dalle ($C_{gravier}$ =0,086 mol/m^3). La figure 6. 41 montre qu'en doublant la concentration de vapeurs sous la dalle nous avons obtenu une concentration simulée à l'extraction de la cloche qui se rapproche de la concentration mesurée à la sortie de la cloche en terme de niveau de concentration maximale et le temps mis pour l'atteindre.

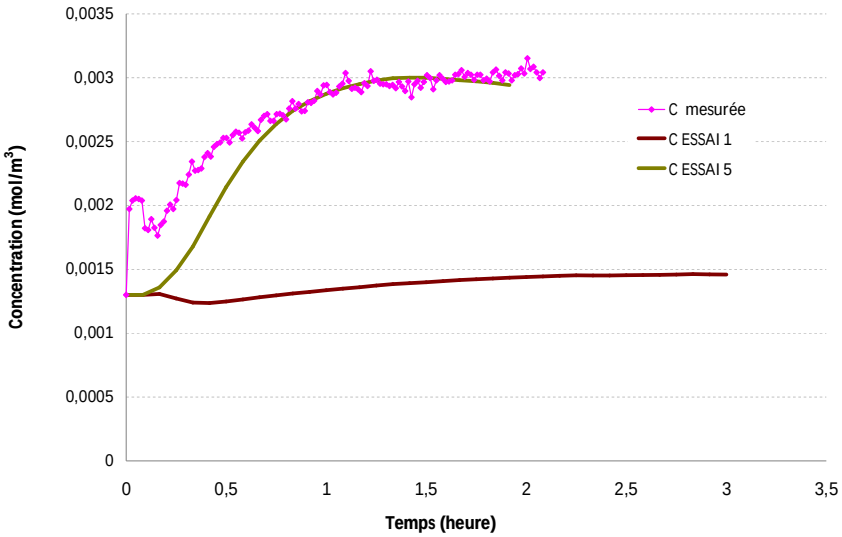
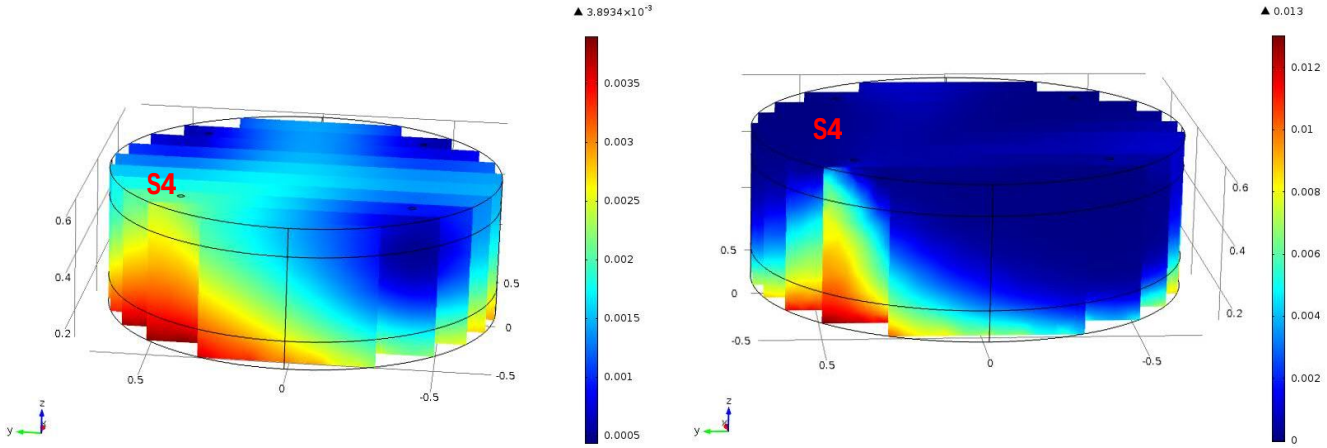


Figure 6. 41: Evolution de la concentration de vapeurs mesurée et calculée à partir des essais 1 et 5 à la sortie d'extraction de la cloche pendant 1B-1

Homogénéisation de la distribution de la concentration de vapeurs de TCE dans la cloche

Un autre aspect intéressant est la distribution de vapeurs de TCE dans la cloche. Lors de l'essai 1, la distribution de la concentration de vapeurs dans la cloche n'est pas uniforme (la Figure 6. 33). Cependant, théoriquement, l'entrée de l'air propre dans la cloche, suite à l'extraction de l'air de celle-ci, y va entraîner une sorte de turbulence. Malheureusement avec notre licence de COMSOL, le module de turbulence n'étant pas implémenté, nous ne pouvons pas modéliser réellement l'effet de la turbulence sur la distribution des concentrations dans cloche.

Pour mimer l'effet d'un transfert de masse par « turbulence » entre les différentes particules de fluide en mouvement, nous avons introduit dans la cloche un coefficient de diffusion « turbulent » représenté par un coefficient de diffusion à l'air libre D_{01} dix fois plus grand que le coefficient de la diffusion à l'air libre ordinaire D_0 (D_{01}= 7,8 10^{-5} $m^2.s^{-1}$). Pour le test, nous avons pris l'exemple de l'essai 5. La Figure 6. 42 montre la distribution de la concentration de vapeurs de TCE dans la cloche calculée avec le coefficient de diffusion à l'air libre D_{01} et celle obtenue numériquement avec D_0. Evidemment la distribution de la concentration de vapeurs de TCE dans la cloche calculée avec un coefficient de diffusion à l'air libre plus grand est très homogène. Cependant, le coefficient de la diffusion « turbulente » D_{01} a engendré une dilution des vapeurs de TCE dans la cloche qui a été traduit par des concentrations maximale plus faible (de l'ordre de 2,2 10^{-3} $mol.m^{-3}$) (Figure 6. 43) que dans le cas d'un D_0 ordinaire (de l'ordre de 3 10^{-3} $mol.m^{-3}$) (Figure 6. 43). Le temps pour atteindre la concentration maximale à l'extraction de la cloche devient également plus court, moins d'une heure.



i) $D_{01} = D_0 \times 10$ ii) $D_0 = 7{,}8\ 10^{-6}\ m.s^{-1}$

Figure 6. 412 : Distribution de la concentration de vapeurs de TCE dans la cloche pour l'essai 5, au régime stationnaire, pour un coefficient de diffusion à l'air libre D_0 égal à $7{,}8\ 10^{-6}\ m^2.s^{-1}$ et D_{01} égal à $D_0 \times 10$ lors de 1B-1

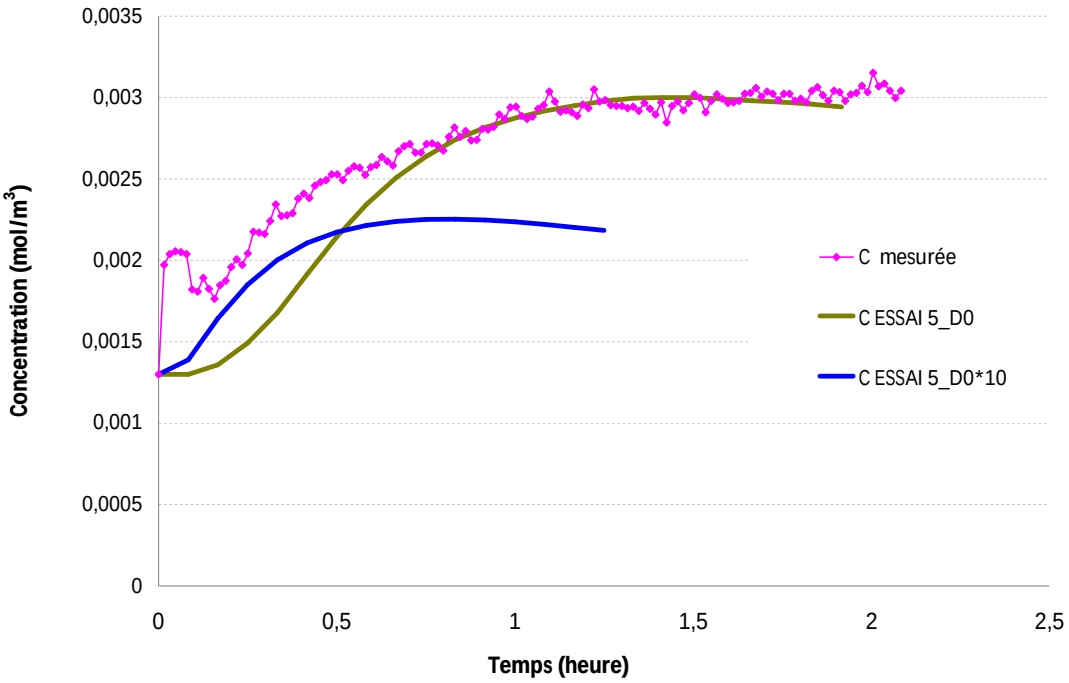


Figure 6. 43 : Evolution de concentration de vapeurs de TCE à l'extraction de la cloche pour deux coefficients de diffusion à l'air

b) La mise en dépression 1B-2

Les résultats numériques de la mise en dépression 1B-2 en présence de la dalle 2 sont montrés dans la Figure 6. 44. Il apparaît clairement que la concentration de vapeurs de TCE calculée reproduit en grande partie la concentration mesurée pendant la mise en dépression 1B-2. La concentration calculée au régime stationnaire est atteinte au bout de 3heures et 30 min ; elle correspond à 2,84 10^{-4} mol.m^{-3}et est 11% plus faible que celle mesurée au régime stationnaire (atteinte au bout de 3h). En plus, en se basant sur le débit d'air qui traverse la dalle 2 calculé par COMSOL et la concentration imposée sous la dalle, nous obtenons un flux massique qui traverse la dalle 2 pendant 1B-2 de l'ordre de 1,5 10^{-2} mg.s^{-1}. En le comparant avec le flux déterminé dans le Tableau 6. 7 pour 1B-2 qui est égale à 1,36 10^{-2} mg.s^{-1}, nous remarquons que les deux flux massiques sont comparables. Mais le débit calculé traversant la dalle 2 est deux fois plus grand que celui observé. Cela veut dire que les concentrations choisies sous la dalle dans les simulations, y compris les concentrations choisies pour le sable fin, correspondent à la moitié de celles observées.

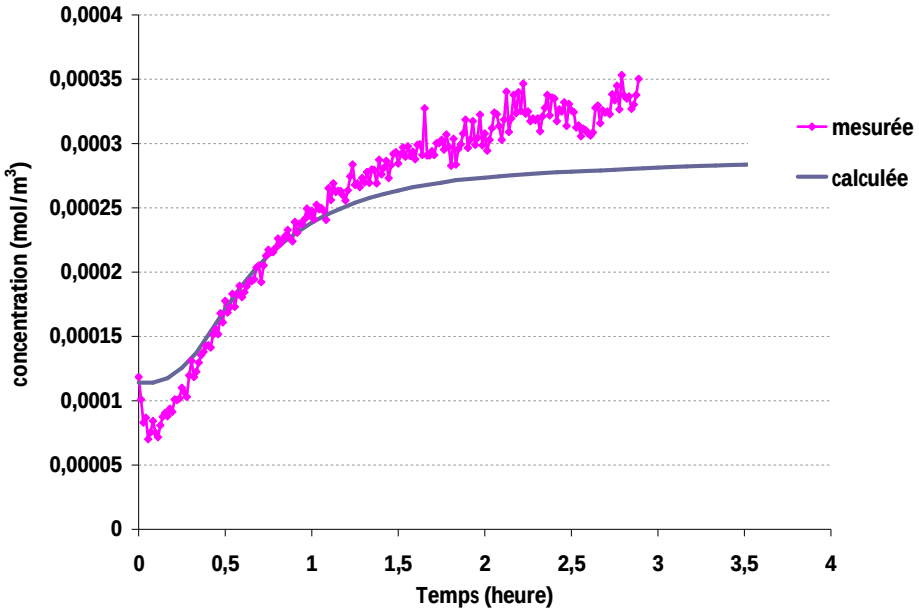


Figure 6. 44 : Evolution de la concentration de vapeurs à la sortie d'extraction de la cloche pendant 1B-2

La Figure 6. 45 montre la concentration de vapeurs de TCE calculée au régime stationnaire dans la dalle 2 et le gravier suivant le plan vertical xz (pour y=0m). Nous constatons que la diminution de la concentration de vapeurs moyenne calculée dans

le gravier est de l'ordre de 10%, tandis qu'expérimentalement nous avons enregistré une diminution inférieure à 1% (Tableau 6. 24).

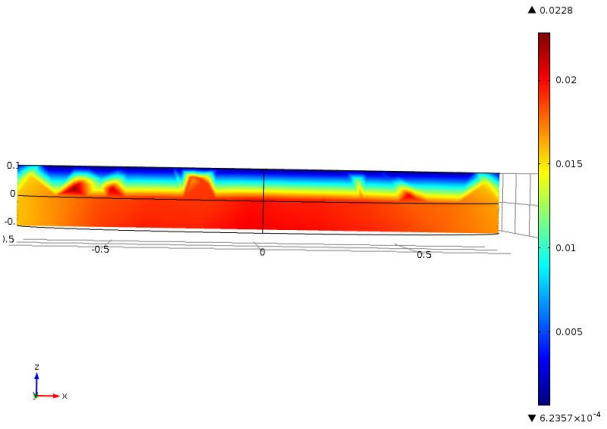
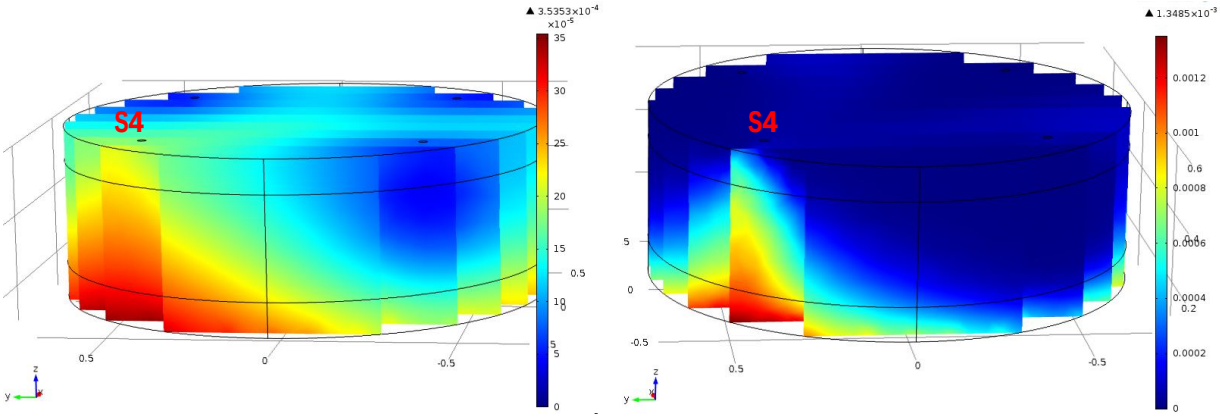


Figure 6. 45 : Concentration de vapeurs de TCE calculées dans la dalle et gravier à t=3 h 30 min dans le plan vertical xz (y=0m) lors de 1B-2

Concentration de vapeurs de TCE moyenne dans le gravier	Mesurée (mol/m^3)	Calculée (mol/m^3)
Avant 1B-2	0,02	0,02
Après 1B-2	0,02	0,018

Tableau 6. 24 : Concentrations de vapeurs de TCE mesurée et calculée dans le gravier avant et après la mise en dépression 1B-2

En utilisant un coefficient de diffusion à l'air libre D_{01} égale à 7,8 10^{-5} m².s^{-1} (10 fois la valeur physique) la distribution de concentration de vapeurs calculée dans la cloche devient plus homogène (Figure 6. 46). Comme déjà constaté lors de l'essai 1B-1, la modélisation d'une diffusion turbulente dans la cloche diminue la concentration de vapeurs de TCE dans la cloche. Ainsi, la concentration maximale de vapeurs de TCE calculée à la sortie d'extraction de la cloche est diminuée (Figure 6. 47).



i) $D_{01} = D_0 \times 10$ ii) $D_0 = 7{,}8\ 10^{-6}\ m^2.s^{-1}$

Figure 6. 46 : Distribution de la concentration de vapeurs de TCE, au régime stationnaire, dans la cloche pour deux coefficients de diffusion à l'air libre lors de 1B-2

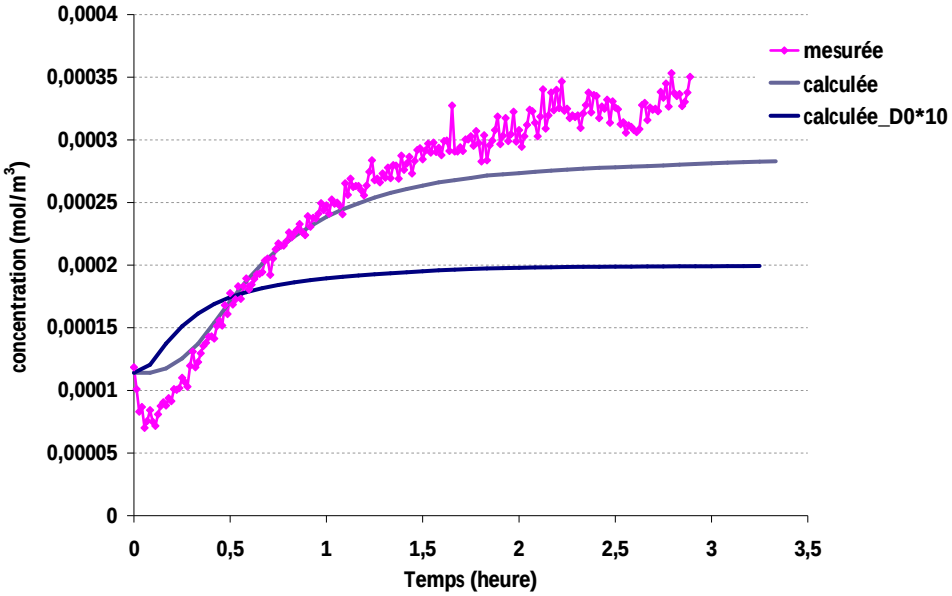


Figure 6. 47 : Evolution de la concentration de vapeurs de TCE mesurée et calculées à partir de deux coefficients de diffusion à l'air libre

Bilan du chapitre

Ce chapitre a porté sur l'étude du flux de vapeurs de TCE à la surface de la plate-forme expérimentale SCERES. Nous avons vu que le flux de vapeurs à l'interface sol/atmosphère dépendait certes des conditions météorologiques comme la température extérieure et la pression atmosphérique mais surtout de l'emplacement par rapport à la zone source. Nous avons constaté à travers cette étude qu'une perturbation du champ de pressions motrice de l'air du sol, causée par le battement de la nappe ou le gradient de pression à travers la dalle, pouvait influencer de façon significative le flux de vapeurs à la surface du sol. La quantification de ces flux de vapeurs à l'interface sol/atmosphère a confirmé les résultats du chapitre 4 sur l'importance de la prise en compte de la convection, induite par le gradient de densité des vapeurs et le gradient de la pression motrice de l'air du sol. Les calculs ont montré que le flux convectif était non négligeable et il devient très important pendant la montée et la descente de la nappe.

Ce chapitre a permis aussi d'étudier finement le transfert de vapeurs à travers la dalle de béton. En se basant sur la caractérisation de nos dalles de béton, effectuée in situ sur SCERES et/ou communiquée par les partenaires du projet FLUXOBAT, nous avons quantifié par mesure et par approche semi-expérimentale le flux de vapeurs traversant les dalles de béton sans que celle-ci soit mise en dépression. Nous avons trouvé que les flux totaux calculés approchaient mieux les flux mesurés sur la dalle en prenant un coefficient de diffusion effectif de la dalle de l'ordre de 1/25ème de celui d'un sable fin.

La mise en dépression de la cloche a crée un flux convectif significatif à travers la dalle. La modélisation de cet effet a révélé que le niveau de concentration en polluants volatils dans l'air intérieur des bâtiments dépendait directement des caractéristiques de la dalle de béton comme la perméabilité et le coefficient de diffusion effectif, mais était fortement dépendant, via le flux massique traversant la dalle, du niveau de concentration de vapeurs de TCE sous la dalle de béton.

Chapitre 7 : Conclusions générales et perspectives

7.1 Conclusions générales

Ce travail s'inscrivant dans le cadre du projet FLUXOBAT a eu pour objectif principal d'étudier le transfert des vapeurs de TCE depuis la zone non saturée d'un aquifère vers l'atmosphère et l'air intérieur des bâtiments, à travers un milieu poreux ou/et un dallage. Pour cela, deux expérimentations SCERES1 et SCERES2 ont été menées sur le bassin expérimental SCERES. Les acquis scientifiques issus de cette recherche peuvent se résumer en quatre volets : (i) acquisition des profils de concentration et pression de vapeurs de TCE dans la zone non saturée de SCERES et sous la dalle de béton, (ii) caractérisation de la dalle de béton, (iii) mesure des flux de vapeurs de TCE, et simulation numérique et approche de calcul analytique pour le transfert de vapeurs de TCE dans la zone non saturée et vers l'interface sol/atmosphère et (iv) simulation numérique de l'intrusion des vapeurs de TCE dans l'air intérieur du bâtiment modèle avec et sans mise en dépression.

Acquisition des profils de concentration et pression de vapeurs de TCE

Afin de quantifier le flux de vapeurs de TCE à la surface du sol, nous nous sommes intéressés à la distribution des vapeurs de TCE dans la zone non saturée. Ces vapeurs proviennent de la volatilisation de la zone source de pollution de TCE située dans la zone non saturée du bassin SCERES. Nous avons constaté que l'évolution du panache de vapeurs de TCE dans la zone non saturée dépend essentiellement de l'emplacement du point par rapport à la zone source et aussi des conditions météorologiques, comme la température du sol et la pression atmosphérique à la surface du sol. Nous avons mis en relief que la mise en place de la source de TCE dans la zone non saturée de SCERES a engendré une augmentation instantanée de la pression de l'air du sol à la volatilisation du DNAPL. Les vapeurs de TCE ont été ensuite soumises à la diffusion moléculaire depuis la zone source de TCE vers le reste du bassin.

Les résultats obtenus ont également montré, que ce soit pour SCERES1 ou SCERES2, que les concentrations de vapeurs de TCE ont atteint leurs régimes permanents à proximité de la dalle de béton au bout de 3 semaines après l'injection de TCE. Nous avons aussi remarqué que dans le sable fin, situé dans les 50 premiers centimètres proche surface du SCERES, les concentrations de vapeurs de TCE ont été nettement plus faibles que celles dans le sable moyen, qui constitue 70% de la

composition du bassin SCERES. Cela peut être attribué à la capacité de la rétention d'eau dans le sable fin qui a fortement diminué la diffusion des vapeurs de TCE dans ce sable.

Ce travail a aussi mis en évidence l'influence de la variation du gradient de pression motrice de l'air du sol, suite au battement de la nappe, sur le panache des vapeurs de TCE dans la zone saturée. Les résultats de l'expérience SCERES1 et SCERES2 ont montré que pendant la montée de la nappe de 50 cm, mouvement ascendant du front d'eau, les pressions motrices relatives de l'air dans la zone non saturée augmentent au fur et à mesure que le front d'eau avance vers les capteurs de pressions. Ceci a induit une poussée des vapeurs de TCE des profondeurs plus chargées en vapeurs de TCE vers les zones les moins chargées en vapeurs de TCE. Ce qui a provoqué une augmentation jusqu'à 100% des concentrations de vapeurs de TCE au niveau des cannes gaz (équipement pour mesurer les concentrations de vapeurs de TCE in-situ).

Par ailleurs, les résultats ont montré que la présence sur SCERES d'un milieu peu perméable et peu diffusif par rapport aux sables qui constituent le bassin, sous forme d'une dalle de béton, a constitué une « barrière » en vue du transfert de vapeurs de TCE vers l'interface dalle/atmosphère. Nous avons remarqué que les concentrations de vapeurs mesurées sous la dalle de béton située à la surface du sol, sont plus élevées que celles mesurées proche surface dans le reste du bassin, par exemple aux points GA1, GL et GM1.

Une étude de l'effet de la mise en dépression dans le bâtiment modèle « cloche », installée sur la dalle, a été menée dans le cadre d'une étude de l'intrusion des vapeurs de TCE vers l'air intérieur des bâtiments au travers d'un dallage. Nous avons pu mettre en relief que, pendant l'aspiration des vapeurs depuis la cloche, la concentration de vapeurs de TCE sous la dalle augmente. Pour les niveaux de dépressions et débit d'extraction d'air étudiés, en moyenne 3% seulement de cette concentration a été enregistrée dans la cloche. La cause principale est la faible perméabilité globale de deux dalles étudiées qui sont formées en grande partie par la pâte de ciment et quelques microfissures. La caractérisation de leur perméabilité et de leur coefficient de diffusion effective ont été des aspects clefs de notre étude pour pouvoir mieux quantifier les flux massiques de vapeurs de TCE qui les traversent.

Caractérisation de la dalle de béton

Dans le but de quantifier le niveau de concentration de vapeurs de TCE sous les deux dalles et le flux de vapeurs à l'interface dalle/atmosphère et dalle/air intérieur de la cloche, nous ne pouvons omettre le rôle des caractéristiques des deux dalles, comme la perméabilité et le coefficient de diffusion effective. Toute une partie du chapitre 5 a été dédiée à la caractérisation des deux dalles de béton moyennant des approches expérimentales et numériques.

Les résultats ont clairement mis en relief que la dalle1 est plus perméable, macroscopiquement, que la dalle2 à cause d'une présence moins importante des fissures dans cette dernière. Le coefficient de diffusion effective pour la dalle1 obtenu (par approche simplifiée « cup method ») lors d'une expérience de diffusion depuis la cloche vers la dalle a par ailleurs montré, qu'il est plus élevé que celui de la dalle2. Une étude numérique détaillée moyennant un code numérique 1D a permis d'affiner cette analyse. Les résultats obtenus ont montré que pour estimer au mieux le flux diffusif réel traversant la dalle1, le coefficient de diffusion effectif « global » de la dalle doit être choisi entre 1/25ème et 1/100ème du coefficient de diffusion effective du sable moyen H2F. Quant à la porosité et la tortuosité des deux dalles de béton, nous n'avons pas pu mener des études spécifiques. Nous nous sommes appuyés sur les données issues de la littérature et quantifiées par les partenaires du projet sur des échantillons (de 15 cm de diamètre) d'une dalle de béton semblable à la dalle1 du point de vue fissuration. Etant donné que la tortuosité est un paramètre très important dans la détermination de flux diffusif, cette incertitude dans la valeur de la tortuosité est à prendre en considération dans les estimations de flux de vapeurs total traversant la dalle de béton.

Simulation numérique et méthode analytique pour transfert de vapeurs de TCE dans la zone non saturée et vers l'interface sol/atmosphère

- **<u>Simulation du transport multiphasiques multiconstituants moyennant SIMUSCOPP</u>**

Des simulations numériques du panache de vapeurs de TCE ont été menées pour les expériences SCERES1 et SCERES2 moyennant le code SIMUSCOPP. Les concentrations calculées corroborent de façon satisfaisante celles relevées sur le site expérimental. De façon quantitative, les résultats de ces simulations ont montré que

le modèle numérique sous-estime les concentrations de vapeurs de TCE dans la zone non saturée pendant SCERES1 et surestime très légèrement pendant SCERES2. À partir de ces résultats, confirmant les conclusions de Bohy et al. (2004) et Dridi (2006), nous pouvons aussi souligner que la prise en compte de la variation spatiale de la température du sol est sans doute un aspect clef pour améliorer les résultats numériques. Cependant, ceci nécessiterait l'ajout d'une fonctionnalité « minimale » dans le code de calcul SIMUSCOPP : variation de la pression de vapeur saturante du DNAPL et du coefficient de diffusion effective de l'air du sol avec le profil vertical de température dans la zone non saturée.

L'étude numérique de la distribution de vapeurs de TCE sous la dalle de béton a nécessité un certain nombre de simplifications pour pouvoir représenter le domaine physique réel. Par exemple, pour pourvoir modéliser la dalle de béton nous avons choisi une surface rectangulaire (au lieu de circulaire), un emplacement à z=-0,1 m (au lieu de z=0 m), une profondeur de la jupette allant jusqu'à la profondeur 0,3 m (au lieu de 0,15 m). Toutes ces simplifications peuvent en grande partie expliquer les surestimations des concentrations de vapeurs de TCE mesurées sous la dalle, que ce soit pour la dalle1 ou la dalle2. Par ailleurs, les pressions calculées ont mis en exergue que la mise en dépression appliquée sur la dalle de béton peut se propager à travers la dalle vers le milieu poreux sous-adjacent jusqu'à une profondeur de 50 cm. Elle génère notamment un gradient de pression motrice négatif (de l'air atmosphérique vers la zone non saturée) en périphérie de la dalle, jusqu'à une distance latérale de 40 cm. Ceci cause à son tour une intrusion de l'air depuis la surface du sol vers la dalle en passant par le milieu poreux.

De plus, l'étude de sensibilité a permis de montrer que la variation de pression atmosphérique devrait être prise en compte dans un modèle numérique « amélioré » car une variation du champ de pression motrice de l'air du sol en résulte se traduisant par une modification non négligeable du panache de vapeurs de TCE dans la zone non saturée.

- **Simulation numérique du transport vertical 1D de vapeurs de TCE**

Afin de pouvoir quantifier plus finement l'influence du gradient de pression motrice de l'air du sol et de l'effet de densité de vapeur sur le transfert des vapeurs de TCE dans le milieu poreux vers la surface du sol, nous avons mené une étude numérique spécifique (Marzougui et al., 2012). Pour ce faire, nous avons réalisé une

analyse détaillée des erreurs relatives effectuées lors de l'évaluation de flux de vapeurs de TCE à la surface du sol moyennant une solution semi-analytique basée sur le couplage de la loi de Fick et Darcy. Cette étude a été réalisée sur une colonne « synthétique » de milieu poreux, soumis à différents profils hydriques, au moyen d'un code numérique monodimensionnel basé sur le couplage des modules : écoulement et transport des vapeurs de TCE. Ces résultats obtenus ont notamment confirmé les conclusions de Cotel et al. (2011) relatives à l'importance de la prise en compte des gradients de densité de vapeurs dans le transfert vertical des vapeurs de TCE. Dans le cas où l'effet de densité est significatif, en se basant sur une quantification de flux de vapeurs à l'aide de la loi de Fick seulement, l'erreur relative entre le flux de vapeur « réel » et celui calculé devient très grande. Cependant, en utilisant une solution analytique basée sur le couplage de la loi de Fick et la loi de Darcy, tout en tenant compte de l'effet de la densité des vapeurs et l'effet de gradient de pression, cela réduit de façon significative les erreurs relatives commises pendant l'estimation des flux de vapeurs. Il a été aussi montré que l'effet de l'hétérogénéité du milieu sur l'estimation de flux de vapeurs est à prendre en compte : plus le milieu est perméable plus l'influence de la densité de vapeur sur le flux convectif induit est grand. Nos résultats confirment ainsi que la convection induite par l'effet de la densité des vapeurs peut être un mécanisme de transport important dans les sols naturels.

Les résultats de ces simulations ont aussi mis en évidence la convection induite par le gradient de pression motrice comme mécanisme de transport dominant. Rappelons que des gradients de pression motrice peuvent apparaître dans un sol naturel à cause de la variation de la pression atmosphérique, de la volatilisation du DNAPL au niveau de la zone source de pollution, de la variation de la pression dans les bâtiments (ventilation) et du mouvement vertical du toit de la nappe.

- **Mesures de flux de vapeurs et méthode semi-analytique**

Les mesures de flux de vapeurs à l'interface sol/atmosphère ont permis une corrélation forte avec le panache de vapeur de TCE en zone non saturée. Ceci confirme les conclusions des études antérieures (par exemple, Jellali (2000), Jellali et al. (2000)) soulignant que les mesures de flux de vapeurs à la surface du sol sont un moyen d'identification de la « zone source de pollution ». Notre étude a aussi montré que les flux de vapeurs à l'interface sol/atmosphère dépendent des conditions météorologiques comme la température extérieure et la pression atmosphérique, et

des conditions hydrologiques. La perturbation du champ de pressions motrice de l'air du sol causée par le battement de nappe, a notamment augmenté de façon significative les flux de vapeurs de TCE au point h (situé près de la zone source) d'un facteur de 4 pendant SCERES2. Une étude comparative entre les flux de vapeurs mesurés à l'interface sol/atmosphère de SCERES et les flux calculés, au moyen d'une méthode semi-analytique basé sur le couplage loi de Fick et Darcy, a confirmé les conclusions du chapitre 4 sur l'importance de la prise en compte de la convection, induite par le gradient de densité des vapeurs et le gradient de la pression motrice de l'air du sol. Les résultats obtenus ont mis en relief que le flux convectif est non négligeable et il devient très important pendant la montée et la descente de la nappe. En revanche, la chambre à flux utilisée pour les mesures de flux de vapeurs à l'interface sol/atmosphère ne permet que la mesure des flux diffusifs Les mesures sous-estiment ainsi les flux de vapeurs réels

Simulation numérique de l'intrusion des vapeurs de TCE dans l'air intérieur du bâtiment modèle à travers de la dalle de béton avec et sans mise en dépression

➢ Mesures de flux de vapeurs et méthode semi-analytique

Cette étude nous a permis d'étudier finement le transfert de vapeurs de TCE à travers la dalle de béton, avec et sans mise en dépression dans la cloche. En se basant sur la caractérisation de nos dalles de béton, effectuée in situ sur SCERES et/ou communiquée par les partenaires du projet FLUXOBAT, nous avons trouvé que, dans le cas sans mise en dépression, les flux diffusifs de vapeurs de TCE mesurés sur la dalle1 et la dalle2 ont été faibles et ont diminué pendant la montée de la nappe. Dans le cas de la dalle2, ceci a pu être expliqué par les concentrations de vapeurs de TCE relevées sous la dalle2, qui ont diminué pendant l'imbibition lors de SCERES2. La comparaison des flux mesurés sur les deux dalles de béton avec les flux totaux calculés par approche semi analytique basé sur le couplage de la loi de Fick et la loi de Darcy a clairement mis en évidence que les flux diffusifs mesurés peuvent être quantifiés en prenant un coefficient de diffusion effective de l'ordre de 1/25ème de celui d'un sable moyen.

La mise en dépression de l'air intérieur de la cloche, a créé un flux convectif significatif à travers la dalle de béton. Le flux massique traversant la dalle a

augmenté d'à peu près 10 fois par rapport au flux mesuré sur la dalle de béton sans mise en dépression, que ce se soit pour la dalle1 ou la dalle2. Les résultats obtenus ont montré aussi que le niveau de concentration dans l'air intérieur de la cloche dépend (i) du niveau de dépression, ii) du niveau de concentration sous la dalle et iii) et de la perméabilité et du coefficient de diffusion effective de la dalle. Quant au séjour des vapeurs de TCE dans l'air intérieur de bâtiment modèle, il dépend conformément à la solution analytique du « mélangeur » à la fois du débit d'extraction de l'air de la cloche et du débit massique provenant de la dalle.

- **Simulation moyennant COMSOL multiphysics**

Se basant sur les perméabilités globales quantifiées pour la dalle1 et la dalle2, le débit d'air calculé traversant la dalle1 et la dalle 2 a été respectivement de l'ordre de 5,8 % et de 3,2% de celui de l'extraction.

La modélisation a confirmé aussi que le niveau de concentration des vapeurs de TCE dans l'air intérieur des bâtiments, à la fin de la mise en dépression, dépend directement des caractéristiques de la dalle de béton, et aussi du niveau de concentration de vapeurs de TCE sous la dalle de béton. Nous avons constaté que les concentrations mesurées à l'intérieur de la cloche dépendent directement de la variation spatio-temporelle du flux massique à travers la dalle. Or dans les équations analytiques nous avons considéré le flux massique comme étant une constante en fonction de temps et de l'espace. De plus, il s'est avéré que l'état initial du champ de concentration sous la dalle avait une influence significative sur la concentration dans la cloche.

7.2 Perspectives

Comme perspectives de ce travail, nous pouvons proposer une étude complémentaire pour quantifier les coefficients de diffusion effective de la dalle 1 et 2 en tenant compte des hypothèses suivantes : i) effet de densité de vapeurs à travers la dalle, ii) une surpression instantanée engendrée par l'injection du volume de TCE dans la cloche qui peut être traduit par l'extension de volume de la cloche vers la dalle et iii) un possible défaut d'étanchéité entre la cloche et l'extérieur qui pouvait être traduit par une surestimation de flux de vapeurs expérimental qui s'introduit dans la dalle.

Autres études numériques peuvent être proposées sur le transport multiphasique avec SIMUSCOPP portant sur la prise en compte de la variation de la pression atmosphérique. Des simulations qui peuvent être proposées avec SIMUSCOPP concernent une « approche croisée » du modèle de tortuosité Millington Quirk au sable fin et Penman Millington Quirk au sable moyen pour modéliser le transport diffusif en zone non saturée.

Pour étudier plus finement ce qui se passe au niveau de la chambre à flux lors de la mesure de flux de vapeurs de TCE, que ce se soit à l'interface sol/atmosphère et dalle de béton/atmosphère, nous proposons de réaliser des simulations numériques à l'aide de COMSOL multiphysics, de l'écoulement et transport de vapeurs de TCE au niveau de la chambre à flux.

Un autre aspect concerne la dépendance du niveau de concentration dans la cloche à l'historique de concentration dans la dalle et sous dalle. Des simulations complémentaires avec l'outil multiphysique COMSOL de la mise en dépression de la cloche pourraient être envisagées pour étudier plus en détail l'influence de la variation spatio-temporelle du panache de vapeurs de concentration sous la dalle. Cette étude pourrait être étendue à la simulation « complète » de la succession des mises en dépression (effectuée sur SCERES 2) pour un niveau de débit d'extraction donné de 1 $m^3.h^{-1}$.

Enfin, vu le rôle de fissures des dalles dans l'acheminement des vapeurs avec ou sans mise en dépressions de la cloche, des simulations avec des dalles de béton définies comme des milieux poreux à double porosité (modélisation de la fissure et de la matrice poreuse) pourraient être intéressantes, permettant de compléter notre analyse des flux de vapeurs à travers la dalle1 et la dalle2.

Bibliographie

Altevogt, A.S., Rolston, D.E., & Venterea, R.T. (2003). Density and pressure effects on the transport of gas phase chemicals in unsaturated porous media. Water Resour Res, 39(3), 1061.

Arands, R., Lam, T., Berler, D.H., Muzzio, F.J. et Kosson, D.S. (1997). Modeling and experimental validation of volatile organic contaminant diffusion through an unsaturated soil, Water Resour Res, 33 (4): 599-609.

Bakker J., Lijzen J.P.A., van Wijnen H.J., (2008). Site-specific human risk assessment of soil contamination with volatile compounds. RIVM (National Institute of Public Health and the Environment Bilthoven, the Netherlands) report no. 711701049, 140 p.

Barber, C., Davis, G.B., Briegel, D., & Ward J.K. (1990). Factors controlling the concentration of methane and other volatiles in groundwater and soil gas around a waste site. J. Contam. Hydrol, 5, 155–169.

Batterman S., Kulshrestha A. et Cheng H. Y. (1995). Hydrocarbon vapor transport in low moisture soils, Environ.SCI. Technol, 29, 171-180.

Bear, J. (1972). Dynamics of Fluids in Porous Media, Elsevier, New York. 764 p

Benremita, H. (2002). Approche expérimentale et simulation numérique du transfert de solvants chlorés en aquifère alluvial contrôlé. Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur, Strasbourg. France.

Benremita, H., & Schäfer, G. (2003). Quantification du transfert de trichloroéthylène en milieu poreux à partir d'un panache de vapeurs vers la nappe d'eau souterraine. C.R. Mécanique, 331(12), 835-842.

Bettahar, B., Ducreux, J., Schäfer, G., & Van Dorpe, V. (1999). Surfactant Enhanced In Situ Remediation of LNAPL Contaminated Aquifers: Large Scale Studies on a Controlled Experimental Site. Transp in Porous Media, 37, 276–186.

Birovljev, A., Furuberg, L., Feder, J., Jøssang, T., Måløy, K.J., & Aharony, A. (1991). Gravity invasion percolation in 2 dimensions-experiment and simulation. Physical Review Letters, 5, 584–587.

Blondeau, P., Tiffonnet, A.L., Damian, A., Amiri, O. et Molina, J.L. (2003). Assessment of contaminant diffusivities in building materials from porosimetry tests, *Indoor Air 13*: 302-310.

Bohy, M., Schäfer, G., & Razakarisoa, O. (2004). Caractérisation de zones sources de DNAPL à l'aide de traceurs bisolubles : mise en évidence d'une cinétique de partage. C.R. Géoscience 336, 799-806.

Bohy, M., Dridi, L., Schäfer, G., & Razakarisoa, O. (2006). Transport of mixture of chlorinated solvent vapours in the vadoses zone of a sandy aquifer. Vadose Zone J, 5,539-553.

Cavaleri, N. (2005). Etude des transferts de vapeurs de trichloroéthylène à travers des bétons insaturés représentatifs de chape béton d'habitations ou d'ateliers industriels. *Rapport de DEA BURGEAP,* 76 p.

Choi, J.W., Tillman, F.D., & Smith, J.A. (2002). Relative importance of gas phase diffusive and advective trichloroethylene fluxes in the unsaturated zone under narural conditions. Environ.SCI. Technol, 36, 3157-3164.

Cohen R. M. et Mercer J. W. (1993). DNAPL site evaluation, Ouvrage, C.K. Smoley Editors, CRC Press Florida USA, 200p.

Conant, B.H., Gillham, R.W. et Mendoza, C.A. (1996). Vapor transport of trichloroethylene in the unsaturated zone: field and numerical modeling investingations, Water Resour Res, 32 (1): 9-22.

Coppola, A., Kutilek, M., & Frind, E.O. (2009). Transport in preferential flow domains of the soil porpous system: measurement, interpretation, modelling and upscaling. J. Contam. Hydrol, 104, 1–3.

Cotel 2008: Cotel, S. (2008). Etude des transferts sol/nappe/atmosphère/bâtiments; Application aux sols pollués par des Composés Organiques Volatils. Ph.D. thesis. University of Joseph Fourier. Grenoble. France.

Cotel, S., Schäfer, G., Barthes, V., & Baussand, P. (2011). Effect of density-driven advection on trichloroethylene vapour diffusion in a porous medium.Vadose zone Journal, 10, 565-581.

Cotel, S., Nagel V., Schafer G., Marzougui S., Razakarisoa O., Millet M. (2012). Evaluation des ux de vapeur de Trichloréthylène à partir de mesures dans l'air atmosphérique proche surface et à l'interface sol/air. Journée d'étude sur les milieux poreux, Marseille 2012.

Cozmuta and van der Graaf, (2001). Methods for measuring diffusion coefficients of radon in building materials Science of The Total Environment, Volume 272, Issues 1–3, 14 May 2001, Pages 323-335

Curie J. A. (1960). Gaseous diffusion in porous media. Part 1 : A non-steady state method. Part2: Dry granular materials. Brit. J. Appl. Physics, 11, p. 314-324.

Daoud, W.Z. et Renken, K.J. (1999). Laboratory measurements of the radon gas diffusion coefficient for a fractured concrete sample and radon gas barrier system, International Radon Symposium.

David, J., Richard, L., Thrashe and Larry W. Lake (1988). A theoretical and Experimental Analysis of Minipermeameter Response including gas slippage and high velocity flow effects. In Situ, 12(1&2), 79-116.

Direction Régionale de Santé Publique (DRSP) (2007). Etude sur l'intrusion potentielle de vapeurs de trichloréthylène dans l'air intérieur des bâtiments du secteur Valcartier, Québec.http://www.dspq.qc.ca/documents/1_021007_AVIS_TCE_000.pdf. Accessed May 2009

DOH (Octobre 2006). "Guidance for Evaluating Soil Vapor Intrusion in the State of New York." New York State Department Of Health.

Dridi L. (2006). Transfert d'un mélange de solvants chlorés en aquifère poreux hétérogène: expérimentations sur site contrôlé et simulations numériques. Thèse de doctorat de l'Université Louis Pasteur de Strasbourg, 236p.

Dridi, L., & Schäfer, G. (2006). Quantification du flux de vapeurs de solvants chlorés depuis une source en aquifère poreux vers l'atmosphère : Biais relatifs à la non uniformité de la teneur en eau et à la non stationnarité du transfert. C. R. Mecanique, 334, 611–620.

Dridi, L., Pollet, I., Razakarisoa, O., & Schäfer, G. (2009). Characterisation of a DNAPL source zone in a porous aquifer using the Partitioning Interwell Tracer Test and an inverse modelling approach. Journal of Contaminant Hydrology, 107, 22–44, doi: 0.1016/j.jconhyd.2009.03.003.

Dyer A. J. (1974). A review of flux-profile relationships, boundary-layer meteorology 7, p. 363-372

European Environmental Bureau (EEB). (2011). Soil: worth standing your ground for Arguments for the soil framework directives.

Emonet, A. (2003). Etude expérimentale et numérique de la migration d'un polluant organique dans un milieu poreux homogène à saturation variable en eau, Thèse de doctorat de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, 171 p.

Falta, R. W., Javandel, I., Pruess, K. & Witherspoon, P. A. (1989). Density-driven flow of gas in the unsaturated zone due to the evaporation of volatile organic compounds, Water Resour. Res, 25, 2159– 2169.

Fayers, F.J., & Zhou, D. (1996). On the importance of gravity and three-phase flow in gas displacement processes. Jour. of Petrol. Sci. and Engineering, 15, 321-341.

Ferer M., Ji C., Bromhal G.S., Cook J., Ahmadi G., & Smith D.R., (2004). Crossover from capillary fingering to viscous fingering for immiscible unstable flow:experimental and modeling. Physicalreview E, 70:016303.

Ferguson, C.C., Ktylov, V.V. et McGrath, P.T. (1995). Contamination of Indoor Air by Toxic Soil Vapours: A screening risk assessment model, Building Environement 30:375-383.

Grathwohl P. (1998). Diffusion in natural porous media : contaminant transport, sorption/desorption and dissolution kinetics. Kluwer Academic Publishers, 207 p.

Haghighat, F, Lee, C.S. et Ghaly, W.S. (2002). Measurement of diffusion coefficient of VOCs for building materials: review and development of calculation procedure, Indoor Air 12: 81-91.

Helmig, R. (1997). Multipase flow and transport processes in te subsurface. 120-130p

Hodgson, A.T., Garbesi, K., Sextro, R.G., & Daisy, J.M. (1992). Soil-gas contamination and entry of volatile organic compounds into a house near a landfill. J. Air Waste Manage. Assoc, 42, 277-283.

Huysmans M., Peeters L., Moermans G. and Dassargues A. (2008). Relating small-scale sedimentary structures and permeability in a cross-bedded aquifer, Jour. of Hyd., 361(1–2),41-51

Jang, W.Y., & Aral, M.M. (2007). Density-driven transport of volatile organic

compounds and its impact on contaminated groundwater plume evolution. Transp. Porous Med, 67(3), 353–374.

Jellali S. (2000). Pollution d'un aquifère poreux par les solvants chlorés. Mécanismes de transport avec échanges entre phases. Expérimentations sur site contrôlé avec le trichloroéthylène. Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur, Strasbourg. 217 pages.

Jellali S., Benremita H., Bohy M., Baruthio M., Razakarisoa O., Schäfer G., Merheb F., Muntzer P. (2000). Etude du comprtement des solvants chlorés dans le milieu souterrain- Premier rapport intermédiaire, Convention de Recherche IFARE-Agence de l'Eau Rhin-Meuse- Agence de l'Eau Seine-Normandie n°99/928/07/589. 135 pages.

Jellali, S., Benremita, H., Muntzer, P., Razakarisoa, O., & Schäfer, G. (2003). A large-scale experiment on mass transfer of trichloroethylene from the unsatured zone of a sandy aquifer to its interfaces. Jour. of Cont. Hyd., 60, 31–53.

Jensen J.L., Glasbey, C.A., Corbett P.W.M. (1994). On the interaction of geology, measurement, and statistical analysis of small-scale permeability measurements. Terra Nova, 6, 397-403.

Johnson et Ettinger, 1991 : Jonhson, P.C., & Ettinger, R.A. (1991). Heuristic for predicting the intrusion rate of contaminant vapours into buldings. Environ. Sci. Technol., 25, 1445-1452.

Jones, C.J., Hudson, B.C., McGugan, P.J., & Smith, A.J. (1978). The leaching of some halogenated organic compounds from domestic waste. J. Hazard. Mater., 2(3), 227–233.

Jury et al 1990 : Jury, W.A., Russo, D., Streile, G. et Abd, H.E. (1990). Evaluation of volatilization by organic chemicals residing below the soil surface, Water Resour. Res., 26, 13-20.

Kram, M.L., Keller, A.A., Rossabi, J., & Everett, L.G. (2001). DNAPL Characterization Methods and Approaches, Part 1: Performance Comparisons, GWMR,109-123.

Kueper, B.H., & Frind, E.O. (1989). An overview of immiscible fingering in porous media. Jour. of cont. Hyd., 2, 95-110.

Lemière B., Seguin J. J., Le Guern C., Guyonnet D. et Baranger P. H. (2001). Guide sur le comportement des polluants dans les sols et dans les nappes, BRGM éditions 300, 132p.

Lena Q. Ma, Willie Hanis, Jerry Sartain (2000). Environmental Impacts of Lead Pellets at Shooting Ranges & Arsenical Herbicides On Golf Courses in Florida [archive], Florida Center for Solid and Hazardous Waste Management ; University of Florida ; Report #OO-03, fait sous assurance qualité, juin 2000, 62 pages

Lenhard, R.J., Oostrom, M., Simmons, C.S., & White, M.D. (1995). Investigation of density-dependent gas advection of trichloroethylene: Experiment and a model validation exercise. Jour. Contam. Hyd., 19, 47–67.

Lovoll G., Toussaint R., Méheust Y, Maloy K. & Schmittbuhl J.S. (2004). Growth activity during fingering in a porous Hele-Shaw cell. Phys.Rev.70

Lusczynski, N.J (1960). Head and flow of ground water of variable density. J. Geophys. Res. 66, 4247-4256.

Majewski M.S., Glotfelty D.E. (1989). Seiber J.N., A comparison of the aerodynamic and the theoretical-pro_le-shape methods for measuring pesticide evaporation from soil, Atmospheric Environment 23(5), 929-938.

Marshall T. J. (1959). The diffusion of gases through porous media. Journal Soil Science, 10, p. 79-82.

Marzougui, S., Schäfer, G., Dridi, L. (2012). Prediction of Vertical DNAPL Vapour Fluxes in Soils Using Quasi-Analytical Approaches: Bias Related to Density-Driven and Pressure-Gradient-Induced Advection. Water, Air, & Soil Pol., 223, 5817-5840.

Mastrocicco, M., Colombani, N., & Petitta, M. (2011). Modelling the density contrast effect on a chlorinated hydrocarbon plume reaching the shore Line. Water, Air, & Soil Pollution, 220(1-4), 387-398.

Meininghaus, R., Knudsen, H.N. and Gunnarsen,L. (1998). Diffusion and sorption of volatile organic compounds in indoor surface materials, EPIC ‘98, Proceedings of the of the Second European Conference on Energy Performance and Indoor Climate in Buildings and the Third International Conference on Indoor Air Quality, Ventilation and Energy Conservation, Lyon, France, Vol. 1, pp. 33–38.

Mendoza, C. A., & Frind, E. O. (1990b). Advective-dispersive transport of dense organic vapours in the unsaturated zone, 1, Model development, Water Resour. Res., 26, 379–387.

Mendoza, C.A., & McArly, T.A. (1990). Modeling of groundwater contamination caused by organic solvents vapours. Ground Water, 28, 199-206.

Millington R. J. (1959). Gas diffusion in porous media. Science 130, 100-102.

Millington R. J., Quirk J. .P. (1961). Permeability of porous solids. Trans. Faraday Soc., 57, p. 1200–1207.

Moldrup, P., Olesen, T., Rolston, D. E., & Yamaguchi, T. (1997). Modeling diffusion and reaction in soil:VII. Predicting gas and ion diffusivity in unsaturated and sieved soil. Soil Science, 162, 632-640.

Molins, S., Mayer, K.U., Amos, R.T., & Bekins, B.A. (2010). Vadose zone attenuation of organic compounds at a crude oil spill site interactions between biogeochemical reactions and multicomponent gas transport. J. Contam. Hydrol. 112(1–4), 15–29.

Morrison, G., Zhao, P., & Kasthuri, L. (2006). Spatial considerations in the transport of pollutants to indoor surfaces. Atmospheric Environment, 40(20), 3677-3685.

Mualem, Y. (1976). A new model for predicting the hydraulic condictivity of unsaturated porous media. Water Ressour. Res., 12, p 513-522

Musielak, M. (2012). Etude numérique et Expérimentale des transferts de Composés Organiques Volatils du sol à l'air ambiant, en passant au travers du béton. Thèse de doctorat de l'Université de Toulouse, 345p

Nagel V. (2012). Étude expérimentale de la couche limite de concentration sur la plateforme SCERES, Rapport de stage de Master 2 Sciences de la Terre, de l'Univers et de l'Environnement de Strasbourg, 38p.

Nagel, V. (2011). Mesure des vapeurs de Trichloréthylène dans l'air proche surface du sol, Rapport de stage de Master I Sciences de la Terre, de l'Univers et de l'Environnement de Strasbourg, 17p.

Nazaroff, W.W. (1988). Predicting the rate of radon entry from soil into the basement of a dwelling due to pressure-driven air flow, Radiation Protection Dosimetry 24, 199-202, 1988.

Nazaroff, W.W., Feustel, H., Nero, A.V. et al. (1985). Radon Transport into a Detached One-story House with a Basement, Atmospheric Environment 19 (1) : 31-46.

Nordstrom, D.K., & Munoz, J.L. (1985). Geochemical thermodynamics. The Benjamin/Cummings Publishing Co., Inc., Menlo Park, CA.

Nsir, K. (2009). Etude expérimentale et numérique de la migration de polluants non miscibles dans un milieu poreux saturé à l'échelle de Darcy. Thèse de doctorat de l'Université de Strasbourg, 189 p.

Pan F., Ye, M., Zhu, J., Wu, Y.S., Hu, B.X., & Yu, Z. (2009). Incorporating layer- and local-scale heterogeneities in numerical simulation of unsaturated flow and tracer transport. J. Contam. Hydrol., 103, 194–205.

Pankow, J.F., & Cherry, J.A. (1996). Dense chlorinated solvents and other DNAPLs in groundwater: History, behaviour and remediation. Waterloo Press, Ontario, Canada.

Parker, J.C. (2003). Physical processes affecting natural depletion of volatile chemicals in soil and groundwater. Vadose Zone J., 2, 222–230.

Parmele L.H., Lemon E.R. & Taylor A.W. (1972). Micrometeorological measurement of pesticide vapor flux from bare soil and corn under field conditions, Water, Air, Pollution I, p. 433-451

Penman H. L. (1940). Gas and vapor movements in the soil. I. The diffusion of vapors through porous solids. J. Agric. SCI. 30, 437-462.

Perry, R.H., & Green, D.W. (1984). Perry's chemical Engineer's Handbook. Mac Graw Hill, 6ème édition, New York. 2336 pages.

Petersen L. W., Rolston D. E., Moldrup P., Yamaguchi T. (1994). Volatile organic vapor diffusion and adsorption in soils. Journal of Environmental Quality, 23, p. 799-805.

Razakarisoa O., Bohy M., Jellali S., Pollet I., Dridi L., Muntzer P., Schäfer G., Benremita H, Barczewski B., Mehreb F. (2004). Etude du comportement des solvants

chlorés dans le milieu souterrain. Rapport Final de la Convention inter Agences de l'Eau N° 99/928/07/589, ULP-AERM, Juillet 2004, 245pages.

Razakarisoa O., Dridi L., Pollet I., Schäfer G., Côme J. M., Mouton C., Quintard M., Ropars M. (2005). Large-scale controlled experiment to the characterization of TCE source zone in alluvial aquifer. In proceeding of the 9th International conference on soil-water systems, LeS B2, ConSoil; Bordeaux, France. 2005, p. 232-241.

Renault P., Sierra J. (1994). Modelling oxygen diffusion in aggregated soils. II. Anaerobiosis in topsoil layers. Soil Science Society of America Journal, 58, p. 1023-1030.

Renken, K. J. and T. Rosenberg (1996). Laboratory measurements of the transport of radon gas through concrete samples." Health Physics 68(6): 800-808.

Rivett, M.O., Wealthall, G.P., Dearden, R.A., & McAlary, T.A. (2011). Review of unsaturated-zone transport and attenuation of volatile organic compound (VOC) plumes leached from shallow source zones. Journal of Contaminant Hydrology, 123, 130–156.

Schery, S.D., Gaeddert, D.H., & Wilkening, M.H. (1984). Factors affecting exhalation of radon from a gravelly sandy loam, J. Geophys. Res., 89, 7299–7300.

Schoeller, H.J. (1975). La pollution des eaux souterraines, Groundwater Pollution-Symposium-Pollution des Eaux. Souterraines (Proceedings of the Moscow Symposium, August 1971; Actes du Colloque de Moscou, Août 1971): IAHS-AISH Publ. No. 103.

Schwille, F. (1988). Dense chlorinated solvents in porous and fractured media model experiments. Transcrit par Pankow J. F., English Language Edition, Lewis publishers, Chelsea, Michigan.

Sililo, O.T.N., & Tellam, J.H. (2000). Fingering in unsaturated zone flow: a qualitative review with laboratory experiments on heterogeneous systems. Ground, Water., 38(6), 864–871.

Sleep, B.E., & Sykes, J.F. (1989). Modeling the transport of volatile organics in variably saturated media. Water Resour. Res., 25, 81-92.

Stone H.L. (1970). Probability model for estimating three-phase relative permeability. J. Pet. Tech. 22, p. 214-218.

Stone H.L. (1973). Estimation of three-phase relative permeability and residual oil data. J. Can. Pet. Tech, 12 (4), p. 53-61.

Thiez, A., & Ducreux, J. (1994). A 3-D numerical model for analysing hydrocarbon migration into soils and aquifers. In: Siriwardane & Zaman (Eds.), Computer Methods and Advances in Geomechanics, Balkema, Rotterdam, 1165-1170.

Thomson, N.R., Sykes, J.F., & Van Vliet, D. (1997). A numerical investigation into factors affecting gas and aqueous phase plumes in the subsurface. J. Contam. Hydrol., 28(1–2), 39–70.

Thornthwaite, C.W., and Holzman B. (1939). The determination of evaporation from land and water surfaces, Mon. Weather Rev. 67, p. 4-11

Urosevic, V et Nikezic, D. (2003). Radon transport through concrete and determination of its diffusion coefficient, *Radiation Protection Dosimetry 104* (1): 65–70. Nuclear Technology Publishing

Van Genuchten, M.Th. (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Science Society American Journal, 44, 892-898.

Van Wesenbeeck I.J., Knuteson J.A., Barnekow D.E., and Phillips A.M. (2007). Measuring flux of soil fumigants using the aerodynamic and dynamic flux chamber methods, J. Environ. Qual. 36., p. 613-620

Waitz, M.F.W., Freijer, J.I., Kreule, P., & Swartjes, F.A. (1996). The VOLASOIL risk assessment model based on CSOIL for soils contaminated with volatile compounds. RIVM report no. 715810014, National Institute of Public Health and the Environment (RIVM), Bilthoven, The Netherlands.

Wang, G., Reckhorn, S.B.F., & Grathwohl, P. (2003). Volatilization of VOC from multicomponent mixtures in unsaturated porous media. Vadose Zone Journal, 2, 692-701.

Webb, S.W., & Pruess, K. (2003). The use of Fick's law for Modeling trace gas diffusion in porous media. Transport in Porous Media. 51, 327-341.

White, M.D., Oostrom, M., Rockhold, M.L., & Rosing, M. (2008a). Scalable modeling of carbon tetrachloride migration at the Hanford Site using the STOMP simulator. Vadose Zone J., 7(2), 654–666.

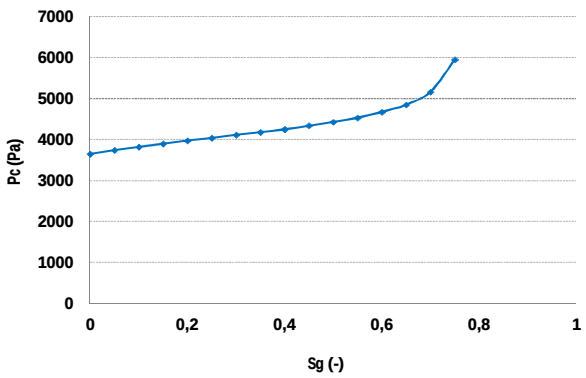
Williams, G.M., Ward, R.S., & Noy, D.J. (1999). Dynamics of landfill gas migration in unconsolidated sands. Waste Manage. Res., 17, 1–16.

Yates S.R., Knuteson J., Ernst F.F., Zheng W., and Wang Q. (2008). Effect of sequential surface irrigations on field-scale emissions of 1,3-Dichloropropene, Environ. Sci. Technol. 42 (23), p. 8753-8758

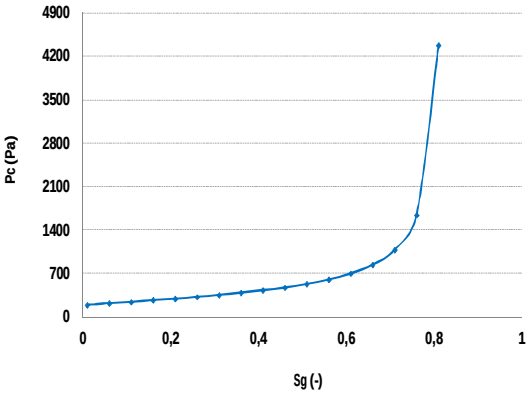
Yu, S., Unger, A.J.A, & Parker, B. (2009). Simulating the fate and transport of TCE from groundwater to indoor air. Jour of Cont Hyd, 107, 140-161.

ANNEXES

ANNEXE 1 : Courbes de pressions capillaires et perméabilités relatives des sables fin et moyen

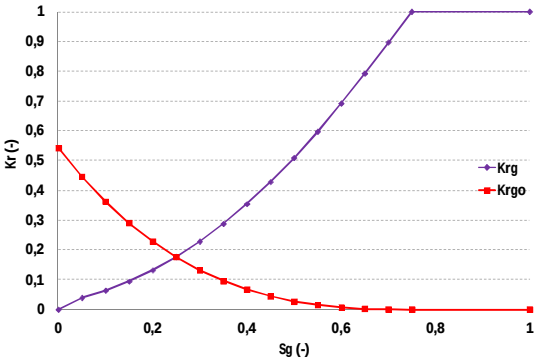


a) Sable fin

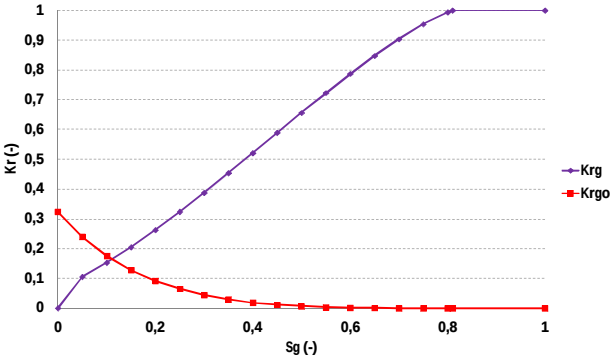


b) Sable moyen

Figure A1. 1 : Courbes des pressions capillaires en système biphasique air/huile

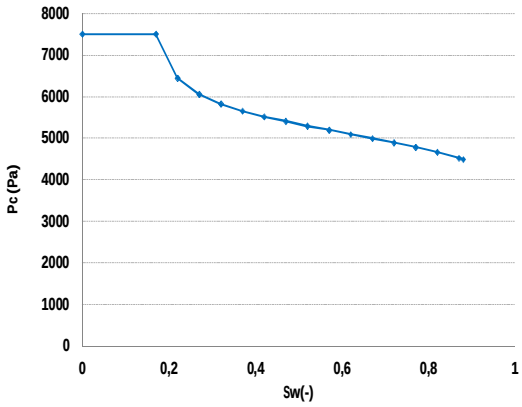


a) Sable fin

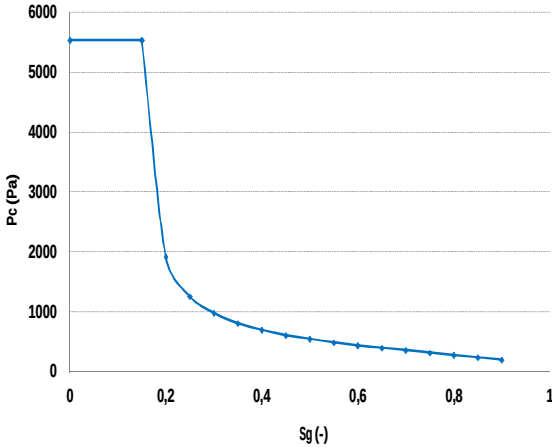


b) Sable moyen

Figure A1. 2 : Courbes de perméabilité relative en système biphasique air/huile

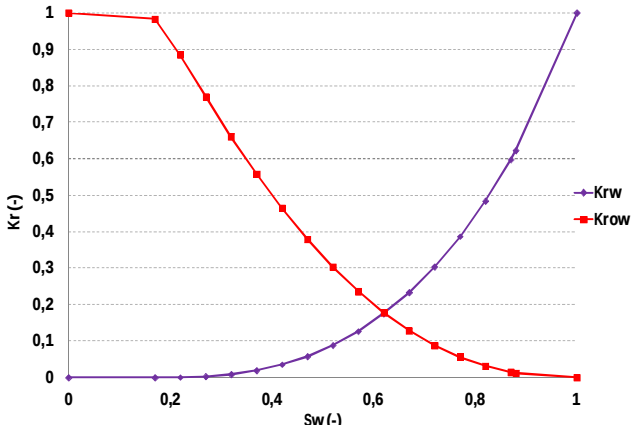


a) Sable fin

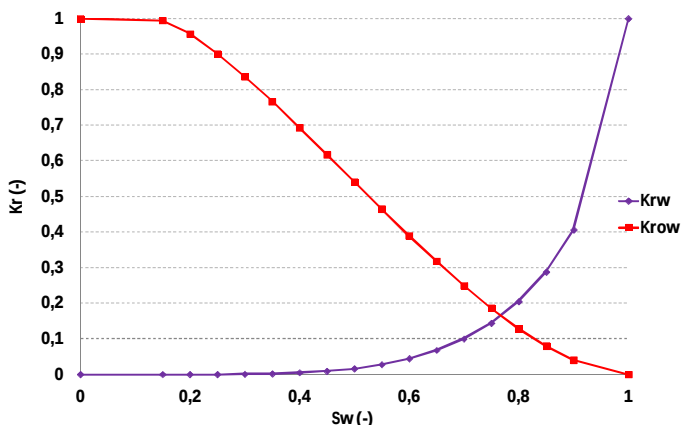


b) Sable moyen

Figure A1. 3 : Courbes des pressions capillaires en système biphasique huile/eau



a) Sable fin

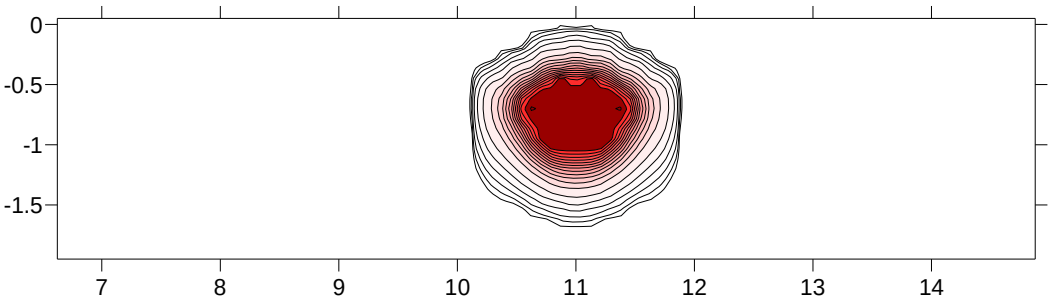


b) Sable moyen

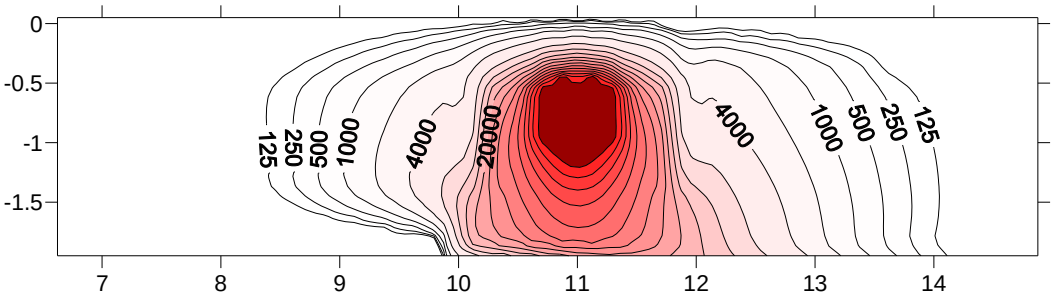
Figure A1. 4: Courbes de perméabilité relative en système biphasique huile/eau

ANNEXE 2 : Concentrations de vapeurs de TCE dans SCERES lors de SCERES2

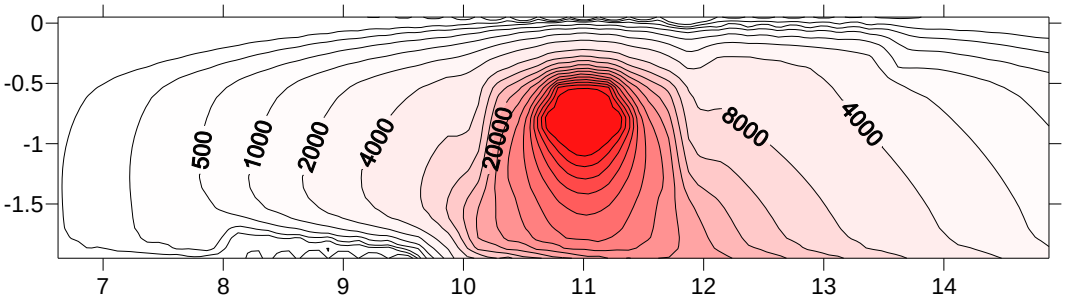
Après 5 heures de l'injection

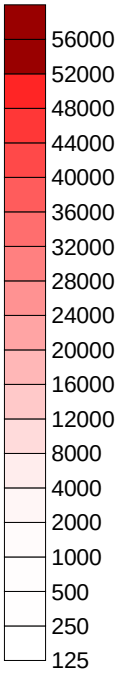


Après 5 jours



Après 10 jours





Après 20 jours

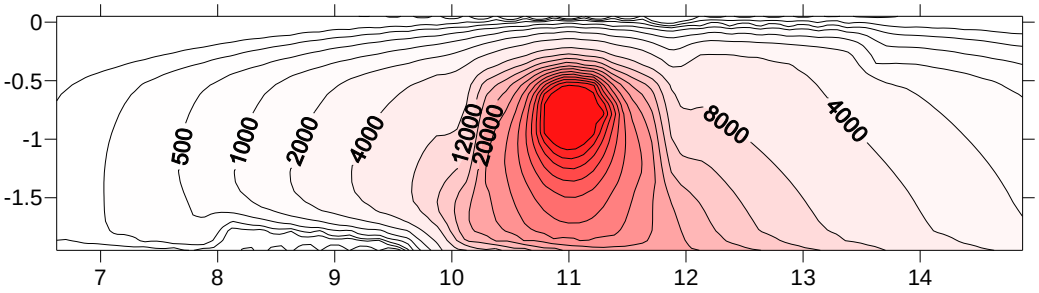


Figure A2. 1 : Coupe longitudinale de la distribution simulée des concentrations de vapeurs de TCE (ppmv) à 5heures, 5, 10 et 20 jours après l'injection lors de SCERES2

ANNEXE 3 : Modélisation en 2D de la mise en dépression de la cloche (COMSOL)

Dans cette étude préliminaire en 2D, nous avons modélisé l'expérience 2B-1. L'entrée et l'extraction de l'air, dans ce cas, étaient imposées dans deux cotés différents (Figure A3. 1). Le maillage était fonction de la nature du milieu et des conditions aux limites imposées.

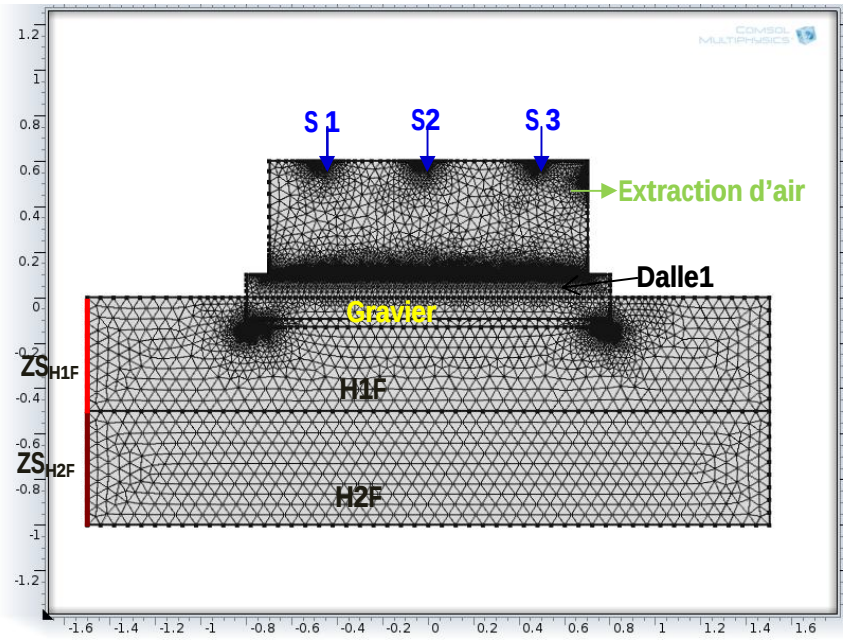


Figure A3. 1 : Géométrie et maillage du système SDC en 2D

Dans le modèle numérique 2D, la vitesse d'entrée d'air a été fixée à partir du débit d'extraction de 2 $m^3.h^{-1}$ distribué sur la longueur du segment de l'ouverture de 5 cm, tout en supposant que la 3ème dimension est la largeur unitaire. La vitesse d'entrée d'air $v_{entrée}$ en 2D devient égale à 0,0037 $m.s^{-1}$.

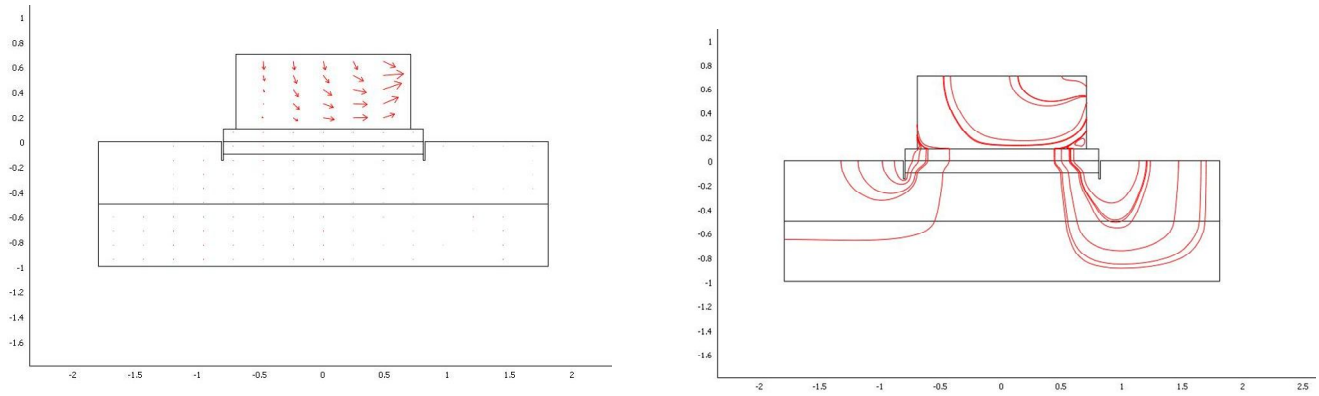
Comme conditions initiales nous avons choisi entre autre la concentration de vapeur de TCE dans le gravier égale à la concentration moyenne mesurée sous la dalle sur les trois points de mesures de 0,0426 $mol.m^{-3}$. La concentration initiale dans la dalle a été fixée 0,01 $mol.m^{-3}$.

Les concentrations initiales dans les sables H1F et H2F ont été supposées être uniformément réparties dans chaque couche de 50 cm, elles sont respectivement égales à 0,023 $mol.m^{-3}$ et 0,067 $mol.m^{-3}$.

Quant aux conditions aux limites du milieu poreux, des conditions de Dirichlet et de Neumann ont été imposées. En effet, comme conditions de Dirichlet nous avons imposé aux limites de SDC le profil d'équilibre statique. La concentration de vapeurs de TCE au niveau de la zone source ZS_{H2F} est égale à C =0,25 mol.m^{-3}. Au-dessus de la zone source ZS_{H1F} nous avons imposé la concentration de vapeurs de TCE C = 0,22 mol/m^3 (1 mol.m^{-3}= $\frac{M_{TCE}}{1000}$ mg.m^{-3}où M_{TCE} est la masse molaire de TCE = 131,39 g.mol^{-1}). Comme conditions de Neumann, nous avons imposé des flux entrant au niveau des entrées d'air et un flux sortant au niveau de l'extraction.

L'écoulement de l'air dans le domaine SDC a été modélisé à l'aide des équations de Navier Stokes et Darcy. Quant au transport de vapeurs de TCE, il a été modélisé à l'aide de l'équation de transport convectif-diffusif (cf. paragraphe 3.4.2. chapitre 3).

La simulation 2D de l'écoulement nous a permis de confirmer que l'air dans la cloche circule depuis les entrées d'air vers le segment d'extraction (Figure A3. 2 i) et l'air extrait provient en petite partie de l'air atmosphérique (Figure A3. 2 ii) se traduisant par des concentrations de vapeurs de TCE très faible voire nulles au niveau de la zone d'intrusion de l'air atmosphérique (Figure A3. 3).



i) **ii)**

Figure A3. 2 : Ecoulement d'air calculé en 2D : i) Champ de vitesse ii) ligne de courant

La Figure A3. 4 montre l'évolution de la concentration de vapeurs de TCE calculée au niveau de l'extraction de l'air de la cloche. La concentration maximale calculée en 2D au niveau de l'extraction d'air est très différente de celle mesurée lors de l'essai 2B-1 : elle a atteint la concentration C_{infini} au bout d'une journée. En effet,

pendant l'essai 2B-1, nous avons observé que la concentration de vapeurs de TCE à l'extraction de la cloche atteint la concentration maximale C_{infini} au bout de 2 heures seulement (**Erreur ! Source du renvoi introuvable.**chapitre 6). Cette différence très notable s'explique logiquement par la 3ème dimension manquante de notre modèle numérique.

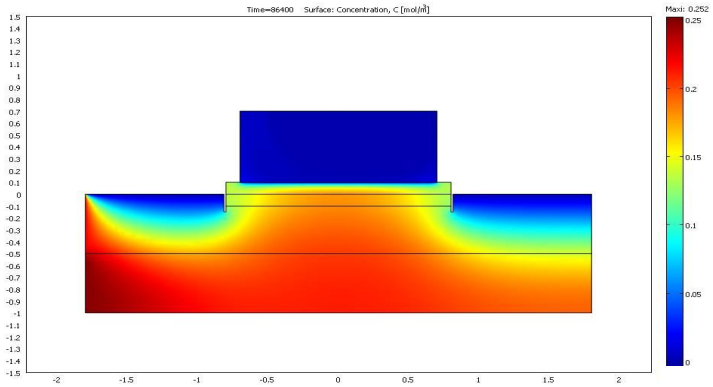


Figure A3. 3 : Concentration de vapeurs de TCE dans le domaine SDC après 1 jour de simulation de la mise en dépression

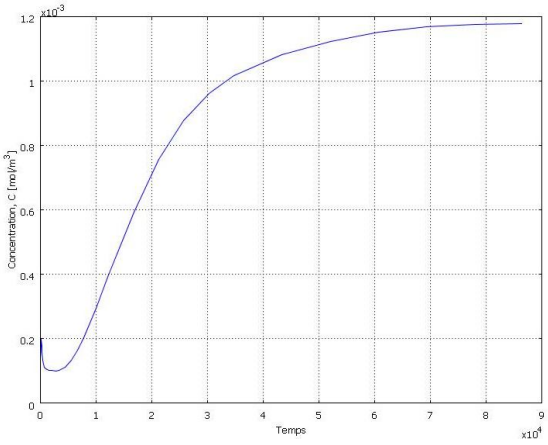


Figure A3. 4: Concentration de vapeurs de TCE à la sortie de la cloche

ANNEXE 4: Développement mathématique de l'équation de conservation de masse (Partie A) et de l'équation de transport (Partie B)

Partie A

The flow of soil air is given by the mass conservation equation, which contains mass flux divergence and variation of storage terms as a function of time:

$$-\nabla(\rho v) = \frac{\partial(n\rho)}{\partial t} \qquad \text{(A1)}$$

where ρ [kg m^{-3}] is the vapour density, *v* [m s^{-1}] is the Darcy's velocity and *n* [-] the porosity of the porous media.

The storage term can be explained as follows:

$$\frac{\partial(n\rho)}{\partial t} = n\frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho\frac{\partial n}{\partial t} \qquad \text{(A2)}$$

Many assumptions are considered to express the flow equation. The first one is to assume that if the compressibility of the medium $\frac{\partial n}{\partial t}$ is negligible compared with the gas compressibility $\frac{\partial\rho}{\partial t}$, the storage term will be simplified and defined as follows:

$$\frac{\partial(n\rho)}{\partial t} = n\frac{\partial\rho}{\partial t} \qquad \text{(A3)}$$

Introducing the ideal gas state equation $\rho(p,T) = \frac{pM}{RT}$ into Eq. (A3), the term of storage variation becomes equal to

$$n\frac{\partial}{\partial t}(\rho) = \frac{nM}{RT}\frac{\partial p}{\partial t} \quad , \qquad \text{(A4)}$$

where M [kg mol^{-1}] is the molecular weight of the gas, *p* [Pa] is the pressure, R [8.314 Pa m^3 mol^{-1} K^{-1}] is the universal ideal gas constant and T [K] is the absolute temperature.

In the divergence term, the velocity of the TCE vapour *v* is given by Darcy's Law:

$$v = -\frac{k}{\mu}\nabla(\rho g z + p) \qquad \text{(A5)}$$

where k [m ²] is the gas permeability, g [m s^{-2}] is the gravity acceleration, μ[kg $m^{-1}s^{-1}$] is the dynamic viscosity of the fluid and z [L] is the elevation. The left-hand side term of Eq. (A4) can thus be rewritten as:

$$-\nabla(\rho v) = -\nabla(-\frac{k\rho}{\mu}\nabla(\rho g z + p)) \tag{A6}$$

$$-\nabla(\rho v) = \nabla(\frac{k\rho}{\mu} g z \nabla(\rho) + g\rho\nabla(z) + \nabla(p)) \tag{A7}$$

$$= \nabla(\frac{k\rho}{\mu} g z \nabla\rho) + \nabla(\frac{k\rho}{\mu} g\rho\nabla z) + \nabla(\frac{k\rho}{\mu}\nabla p) \tag{A8}$$

Assuming that variation of the vapour density ρ(p,T) with elevation z is negligible compared with the variation with pressure p or temperature T, one can neglect the first term of Eq. (A8). Using the ideal gas state equation, Eq. (A4) takes the following developed form:

$$-\nabla(\rho v) = \nabla(\frac{kM^2p^2}{\mu R^2T^2} g) + \nabla(\frac{kMp}{\mu RT}\nabla p) \tag{A9}$$

M, g, R, T being constants, Eq. (A9) can be rewritten:

$$-\nabla(\rho v) = \frac{M^2 g}{\mu R^2T^2}\nabla(kp^2) + \frac{M}{\mu RT}\nabla(kp\nabla p) \tag{A10}$$

The term $p\nabla p$ may be replaced by

$$(p\frac{\partial p}{\partial z}) = \frac{1}{2}(p\frac{\partial p}{\partial z} + p\frac{\partial p}{\partial z}) = \frac{1}{2}\frac{\partial(p.p)}{\partial z} = \frac{1}{2}\frac{\partial p^2}{\partial z} \tag{A11}$$

Using Eq. (A11) in Eq. (A10) leads to:

$$-\nabla(\rho v) = \frac{M^2 g}{\mu R^2T^2}\frac{\partial}{\partial z}(kp^2) + \frac{M}{2\mu RT}\frac{\partial}{\partial z}(k\frac{\partial p^2}{\partial z}) \tag{A12}$$

Based on Eqs (A4) and (A12), one can express the mass conservation equation (see Eq. (A1)) of 1D vertical gas flow in a porous medium based on pressure p:

$$\frac{nM}{RT}\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{M^2 g}{\mu R^2T^2}\frac{\partial}{\partial z}(kp^2) + \frac{M}{2\mu RT}\frac{\partial}{\partial z}(k\frac{\partial p^2}{\partial z}) \tag{A13}$$

To linearise Eq. (A13), the term p ² is replaced by p using the following expression:

$$\frac{\partial p^2}{\partial t} = \frac{\partial (p.p)}{\partial t} = p.\frac{\partial p}{\partial t} + p\frac{\partial p}{\partial t} = 2p.\frac{\partial p}{\partial t} \qquad \text{(A14)}$$

Replacing $\frac{\partial p}{\partial t}$ by $\frac{1\partial p^2}{2\ p\ \partial t}$ in Eq. (A13), one obtains

$$\frac{\partial p^2}{\partial t} = 2\frac{Mp}{n\mu RT} g \frac{\partial}{\partial z}(kp^2) + \frac{p}{n\mu}\frac{\partial}{\partial z}(k\frac{\partial}{\partial z}p^2) \qquad \text{(A15)}$$

As soil gas may occupy only a part of the given pore volume, one must replace porosity *n* by the gas content ϑ_g, leading to the following equation:

$$\frac{\partial p^2}{\partial t} = \frac{p}{\mu\theta_g}\frac{\partial}{\partial z}(k\frac{\partial p^2}{\partial z}) + 2\frac{Mgp}{\mu RT\theta_g}\frac{\partial}{\partial z}(kp^2) \qquad \text{(A16)}$$

To simplify the notation of Eq. (A16), one sets $P = p^2$ and finally obtains:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \beta\frac{\partial}{\partial z}(k\frac{\partial P}{\partial z}) + 2\gamma\frac{\partial}{\partial z}(kP) \qquad \text{(A17)}$$

where $\beta = \frac{p_0}{\mu\theta_g}$, $\gamma = \frac{Mgp_0}{\mu RT\theta_g}$

and p_0 represents the initial pressure in the soil gas.

Partie B

The integrals of the linearised flow equation (Eq. 4. 8 chapitre 4) are defined as follows:

$$\int_{k-1/2}^{k+1/2} \frac{\partial P}{\partial t} dz = \int_{k-1/2}^{k+1/2} \beta \frac{\partial}{\partial z}(k \frac{\partial P}{\partial z}) dz + \int_{k-1/2}^{k+1/2} 2\gamma \frac{\partial}{\partial z}(kP) dz \qquad \text{(B1)}$$

Using an implicit time scheme (discretisation at time t +1), the integrals for cell k can be expressed as:

$$P_{k-1}^{t+1} GP\,(k) + P_k^{t+1} EP\,(k) + P_{k+1}^{t+1} FP\,(k) = P_k^{t} \qquad \text{(B2)}$$

where

$$EP(k) = \left[1 + \beta^k \frac{\Delta t}{\Delta z^2} k^{k-1/2} + \beta^k \frac{\Delta t}{\Delta z^2} k^{k+1/2} - \gamma^k \frac{\Delta t}{\Delta z} k^{k+1/2} + \gamma^k \frac{\Delta t}{\Delta z} k^{k-1/2} \right] \qquad \text{(B3)}$$

$$FP(k) = \left[-\beta^k \frac{\Delta t}{\Delta z^2} k^{k+1/2} - \gamma^k \frac{\Delta t}{\Delta z} k^{k+1/2} \right] \qquad \text{(B4)}$$

$$GP(k) = \left[-\beta^k \frac{\Delta t}{\Delta z^2} k^{k-1/2} + \gamma^k \frac{\Delta t}{\Delta z} k^{k-1/2} \right] \qquad \text{(B5)}$$

GP(k) is the factor accounting for the mass flux in the upstream cell k-1, *EP(k)* is a factor representing the mass flux in cell k and *FP(k)* is mass flux in the downstream cell k+1.

Eq. (B2) is given in matrix form as follows:

$$\begin{pmatrix} EP(1) & FP(1) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ GP(2) & EP(2) & FP(2) & . & . & & & 0 & 0 & 0 \\ . & . & . & . & . & . & . & 0 & 0 & 0 \\ . & . & . & . & . & & & & 0 & \\ 0 & & & & & & & & & \\ . & . & . & . & . & . & & & 0 & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_1^{t+1} \\ P_2^{t+1} \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_1^t + GP(1) P_{upstream} \\ P_2^t \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix}$$

where

$$\text{EP (1)} = \left[1+2\beta^1\frac{\Delta t}{\Delta z^2}k^1+\beta^1\frac{\Delta t}{\Delta z^2}k^2-\gamma^1\frac{\Delta t}{\Delta z}k^2+\gamma^1\frac{\Delta t}{\Delta z}k^1\right] \quad \text{(B6)}$$

$$\text{FP(1)} = \left[-\beta^1\frac{\Delta t}{\Delta z^2}k^2-\gamma^1\frac{\Delta t}{\Delta z}k^2\right] \quad \text{(B7)}$$

$$\text{GP (1)} = \left[-2\beta^1\frac{\Delta t}{\Delta z^2}k^1+\gamma^1\frac{\Delta t}{\Delta z}k^1\right] \quad \text{(B8)}$$

and

EP(NCELL)=

$$\left[1+\beta^{\text{NCELL}}\frac{\Delta t}{\Delta z^2}k^{\text{NNODE-1}}+2\beta^{\text{NCELL}}\frac{\Delta t}{\Delta z^2}k^{\text{NNODE}}-\gamma^{\text{NCELL}}\frac{\Delta t}{\Delta z}k^{\text{NNODE}}+\gamma^{\text{NCELL}}\frac{\Delta t}{\Delta z}k^{\text{NNODE}}\right] \quad \text{(B9)}$$

$$\text{GP (NCELL)} = \left[-\beta^{\text{NCELL}}\frac{\Delta t}{\Delta z^2}k^{NNODE}+\gamma^{\text{NCELL}}\frac{\Delta t}{\Delta z}k^{NNODE}\right] \quad \text{(B10)}$$

The same approach was used to numerically solve the transport equation (Eq. 10):

$$\int_{k-1/2}^{k+1/2}\alpha\frac{\partial c}{\partial t}dz=\int_{k-1/2}^{k+1/2}\frac{\partial}{\partial z}[D_{eg}+\alpha_L|v|]\frac{\partial c}{\partial z}\,dz+\int_{k-1/2}^{k+1/2}-\frac{\partial}{\partial z}(vc)\,dz \quad \text{(B11)}$$

Using an implicit time scheme, one obtains:

$$c_{k-1}^{t+1}G(k)+c_k^{t+1}E(k)+c_{k+1}^{t+1}F(k)=c_k^t \quad \text{(B12)}$$

where

$$G(k)=\left[\frac{(D_{eg}^{k-1/2}+\alpha_L^k v^{k-1/2})\Delta t}{\alpha^k\Delta z^2}-\frac{v^{k-1/2}\Delta t}{\alpha^k\Delta z}\right] \quad \text{(B13)}$$

$$E(k)=\left[1+\frac{(D_{eg}^{k-1/2}+\alpha_L^k v^{k-1/2})\Delta t}{\alpha^k\Delta z^2}+\frac{(D_{eg}^{k+1/2}+\alpha_L^k v^{k+1/2})\Delta t}{\alpha^k\Delta z^2}+\frac{u^{k+1/2}\Delta t}{\alpha^k\Delta z}\right] \quad \text{(B14)}$$

$$F(k)=\left[-\frac{(D_{eg}^{k+1/2}+\alpha_L^k v^{k+1/2})\Delta t}{\alpha^k\Delta z^2}\right] \quad \text{(B15)}$$

Eq. (B13) can be written in matrix form as follows

$$\begin{pmatrix} E(1)\ F(1) & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ G(2)\ E(2)\ F(2) & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 0 & \\ \cdot & & & & & & \\ \cdot & & & & & & \\ \cdot & & & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{t+1} \\ c_2^{t+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ c_{NCELL}^{t+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1^t - c_{upstream} G(1) \\ c_2^t \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ c_{NCELL-1}^t \\ c_{NCELL}^t \end{pmatrix}$$

where

$$G(1) = \left[-2\frac{(D_{eg}^1 + \alpha_L^1 v^1)\Delta t}{\alpha^1 \Delta z^2} - \frac{v^1 \Delta t}{\alpha^1 \Delta z} \right] \quad \text{(B16)}$$

$$E(1) = \left[1 - 2\frac{(D_{eg}^1 + \alpha_L^1 v^1)\Delta t}{\alpha^1 \Delta z^2} - \frac{(D_{eg}^2 + \alpha_L^1 v^2)\Delta t}{\alpha^1 \Delta z^2} + \frac{v^2 \Delta t}{\alpha^1 \Delta z} \right] \quad \text{(B17)}$$

$$F(1) = \left[\frac{(D_{eg}^2 + \alpha_L^1 v^2)\Delta t}{\alpha^1 \Delta z^2} \right] \quad \text{(B18)}$$

and

$$G(NCELL) = \left[\frac{(D_{eg}^{NNODE} + \alpha_L^{NCELL} v^{NNODE})\Delta t}{\alpha^{NCELL} \Delta z^2} - \frac{v^{NNODE} \Delta t}{\alpha^{NCELL} \Delta z} \right] \quad \text{(B19)}$$

$$E(NCELL) = \left[1 - \frac{(D_{eg}^{NNODE} + \alpha_L^{NCELL} v^{NNODE})\Delta t}{\alpha^{NCELL} \Delta z^2} - 2\frac{(D_{eg}^{NNODE+1} + \alpha_L^{NCELL} v^{NNODE+1})\Delta t}{\alpha^{NCELL} \Delta z^2} + \frac{v^{NNODE+1} \Delta t}{\alpha^{NCELL} \Delta z} \right] \quad \text{(B20)}$$