



INSTITUT NATIONAL DE L'ENVIRONNEMENT INDUSTRIEL ET DES RISQUES

Evaluation des versions 6.0 et 6.1 de PHAST

Rapport de synthèse

Fond d'intervention INERIS

Direction des Risques Accidentels

Novembre 2002

Evaluation des versions 6.0 et 6.1 de PHAST

Rapport de synthèse

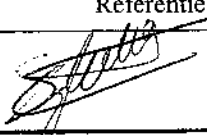
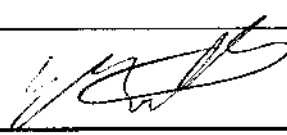
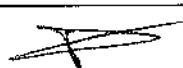
Fond d'intervention INERIS

NOVEMBRE 2002

Ce document comporte 36 pages (hors couverture et annexes).

PERSONNES AYANT PARTICIPE A L'ETUDE

Emmanuel BERNUCHON / Jean-Christophe COUILLET / Stéphane DUPLANTIER

	Rédaction	Vérification	Approbation
NOM	S. DUPLANTIER / J.C. COUILLET / E. BERNUCHON	Y. MOUILLEAU	D. GASTON
Qualité	Ingénieurs de l'unité Phénoménologie / Responsable Programme Référentiel	Responsable de l'unité Phénoménologie	Directeur Adjoint de la Direction des Risques Accidentels
Visa			

Synthèse de l'évaluation des versions 6.0 et 6.1 de PHAST

L'INERIS a procédé à l'évaluation des versions 6.0 et 6.1 de PHAST dans le cadre d'un fonds d'intervention. Cette évaluation a porté sur le calcul du terme source et sur la modélisation de la dispersion. Pour ce faire, l'INERIS s'est appuyé sur un ensemble de tests qui ont pour but d'analyser la cohérence des résultats obtenus lors de la variation des principaux paramètres influençant le calcul du terme source et la dispersion d'un polluant. Il est important de préciser que l'objectif de ces tests est prioritairement de vérifier qualitativement le comportement global de l'outil évalué et qu'il ne s'agit pas d'estimer quantitativement les résultats fournis. L'évaluation a été faite en deux temps du fait de la mise sur le marché de la version 6.1 juste avant la date initialement prévue l'édition du rapport d'évaluation de PHAST 6.0. Toutefois, seul le module de PHAST 6.1 relatif aux calculs de débit au travers d'une longue canalisation a fait l'objet d'une évaluation dans la mesure où, du point de vue de l'INERIS, il constitue l'une des principales modifications de cette nouvelle version.

Avant de donner les résultats des tests effectués, il est important de rappeler que des améliorations importantes ont été effectuées par rapport à la version précédente. Les différents modèles employés ont été revus de sorte que chacun d'entre eux s'appuie indépendamment des autres sur des essais ou des modèles développés par ailleurs, en particulier le modèle de rejet diphasique. En d'autres termes, ceci signifie qu'un effort important a été réalisé pour qu'il n'y ait plus de paramètre global d'ajustement. De plus, des efforts ont également été réalisés pour soigner la transition entre les différents modèles. Ces efforts ne sont pas anodins car ils permettent de s'affranchir des « sauts » de concentration qui pouvaient être observés avec les versions précédentes lors d'un changement de modèle.

Parmi les modifications notoires, les points suivants peuvent également être cités :

- L'influence de la densité des gaz est mieux prise en compte, notamment pour les gaz légers. Ce point constitue une amélioration essentielle par rapport aux versions précédentes. Pour ces versions, dès lors qu'un nuage touchait le sol, il n'en décollait plus.
- Il est maintenant possible de modéliser plusieurs phases de rejet et en particulier un débit variable au cours du temps, le débit est toutefois obligatoirement constant au cours de chaque phase.
- Les sorties, dans certaines conditions, peuvent être plus riches, en particulier, il est possible de réaliser des animations permettant de visualiser l'évolution du nuage au cours du temps. Toutefois, l'évaluation du logiciel a mis en évidence la difficulté pour exploiter de manière correcte les résultats, notamment au niveau des fichiers « Reports ».

Ainsi, si le logiciel PHAST 6.0 présente d'indéniables avantages par rapport à la version 4.2 en terme d'introduction de données, de maîtrise des paramètres d'entrée..., en revanche, l'exploitation des résultats a été rendue largement plus délicate.

Les tests effectués dans le cadre de l'évaluation du logiciel PHAST 6.0 ont mis en évidence les points suivants :

- **Concernant le terme source :**
 - Pour les rejets instantanés, les modèles proposés donnent des résultats cohérents ;
 - Pour les fuites en ras de paroi, qu'elles soient en phase gazeuse ou liquide, le modèle proposé donne des résultats également cohérents ;
 - Pour les fuites consécutives à la rupture d'une canalisation, le modèle proposé donne des résultats cohérents à condition toutefois qu'aucun changement de phase ne soit constaté. Dans le cas contraire, les résultats fournis doivent être considérés avec prudence. De plus, comme dans la version précédente, le modèle de fuite en ras de paroi et celui de fuite sur canalisation ne se raccorde pas et il est conseillé d'utiliser le modèle de fuite en ras de paroi lorsque les canalisations sont courtes.
 - Les difficultés rencontrées avec le module précédent sont en partie compensées par le module spécifique de PHAST 6.1 qui permet le calcul de débit de fuite au travers d'une longue canalisation. Ce module n'a pas été mis en défaut par les tests effectués.
 - Pour l'évaporation de nappe, les résultats fournis par le modèle proposé sont cohérents. La seule limitation de ce modèle concerne le cas d'un rejet sur l'eau où il est nécessaire de vérifier au préalable que le produit rejeté ne va pas couler du fait de sa plus grande densité. Ce test n'est pas réalisé automatiquement dans PHAST 6.0.
 - Pour la prise en compte dans le champ proche des rejets diphasiques, la nouvelle version de PHAST 6.0 comporte un modèle plus pertinent qui permet de mieux estimer les quantités recueillies au sol. Pour mémoire, cette quantité peut avoir une incidence notable sur les distances d'effet calculées.
- **Concernant la dispersion atmosphérique :**
 - Pour un rejet instantané
 - Les modèles proposés prennent bien en compte les conditions météorologiques ainsi que les conditions orographiques.
 - Deux modèles sont principalement utilisés, les résultats de ces deux modèles évoluent correctement au sein de leur domaine de validité. Toutefois, une discontinuité des résultats entre les deux modèles (gaz lourd, gaz neutre) a été observée dans le cas d'un rejet de gaz de même masse molaire que l'air dont la température initiale varie. Toutefois, cette discontinuité relève pour partie de la difficulté rencontrée pour estimer les concentrations au niveau du sol lorsque le nuage décolle, c'est-à-dire lorsque la masse volumique du polluant est inférieure à celle de l'air ambiant.
 - l'étude de l'influence de l'altitude de rejet pour les gaz denses sur les concentrations en aval a donné des résultats difficiles à exploiter dans la mesure où plusieurs paramètres évoluent en même temps. Les tests réalisés n'ont toutefois pas mis en évidence d'incohérence flagrante.
 - Pour un rejet continu horizontal ou vertical, les tendances observées sont globalement conformes à celles attendues.

De fait, du point de vue de l'INERIS, les versions 6.0 et 6.1 peuvent être utilisées pour réaliser des calculs de dispersion atmosphériques de substances toxiques ou inflammables en respectant bien entendu les limites de validité du logiciel.

TABLE DES MATIERES

1.	DÉMARCHE ET OBJECTIFS.....	6
1.1	CONTEXTE ET OBJECTIFS.....	6
1.2	DÉMARCHE	7
1.3	ORGANISATION DU DOCUMENT.....	7
2.	PRÉSENTATION GÉNÉRALE DE L'UDM	8
2.1	GÉNÉRALITÉS	8
2.2	PRINCIPE DE LA MODÉLISATION DE LA DISPERSION	8
2.3	DÉPLACEMENT DU NUAGE OU DU PANACHE.....	12
2.4	DILUTION DU NUAGE	13
2.5	CONDITIONS MÉTÉOROLOGIQUES.....	14
2.6	COEFFICIENTS D'AJUSTEMENT	14
2.7	PRINCIPALES MODIFICATIONS ENTRE LA VERSION 4.2 ET LA VERSION 6.0.....	14
2.8	PRINCIPALES MODIFICATIONS ENTRE LA VERSION 6.0 ET 6.1	15
3.	TERME SOURCE - SYNTHÈSE DE L'ÉVALUATION.....	16
3.1	MISE À L'ATMOSPHÈRE INSTANTANÉE	16
3.2	FUITE CONTINUE DE LIQUIDE À LA BRÈCHE ET À TRAVERS UNE CANALISATION	17
3.3	FUITE CONTINUE DE GAZ À LA BRÈCHE ET À TRAVERS UNE CANALISATION.....	18
3.4	ÉVAPORATION DE NAPPE.....	22
3.5	REJET DIPHASIQUE	22
3.6	FUITE AU TRAVERS DE LONGUES CANALISATIONS.....	23
3.7	CONCLUSIONS SUR LE CALCUL DU TERME SOURCE	24
4.	DISPERSION - SYNTHÈSE DE L'ÉVALUATION.....	25
4.1	ERGONOMIE DE PHAST 6.0.....	25
4.2	REJET INSTANTANÉ	27
4.3	REJET CONTINU	30
4.4	CONCLUSION SUR L'ÉVALUATION DE LA DISPERSION.....	36

1. DEMARCHE ET OBJECTIFS

1.1 CONTEXTE ET OBJECTIFS

Pour la modélisation de la dispersion atmosphérique de substances toxiques ou inflammables, l'INERIS s'appuie en grande partie sur le logiciel PHAST dans sa version 4.2 depuis plusieurs années. Dans ces dernières versions (5.2, 6.0 et 6.1), ce logiciel a été notablement modifié et l'INERIS n'est pas en mesure de se prononcer sur les nouvelles versions sans en effectuer l'évaluation. Dans ce cadre, l'évaluation de PHAST 6.0 et de PHAST 6.1 est incontournable principalement pour deux raisons :

- d'une part pour conserver notre niveau d'expertise, il est nécessaire de connaître les dernières versions des logiciels et de les utiliser si elles sont plus performantes,
- d'autre part, dans le cadre de tierces expertises, il est demandé de plus en plus souvent à l'INERIS de se prononcer sur des résultats de modélisations effectuées avec PHAST 6.0.

Le programme des travaux envisagés consiste à dégager un avis sur les versions 6.0 et 6.1 du logiciel PHAST en utilisant la méthode d'évaluation que l'INERIS a mise en œuvre par le passé pour évaluer plusieurs logiciels de dispersion atmosphérique. Pour mémoire, cette méthode est basée sur une série d'environ 160 tests répartis de façon à peu près égale entre les évaluations :

- du terme source,
- et de la dispersion atmosphérique.

D'autres tests sont envisageables pour traiter de la capacité du logiciel à modéliser des feux ou des explosions mais ces aspects sont jusqu'à nouvel ordre exclu du champ de la présente évaluation. En outre, cette liste de tests n'est pas exhaustive, en effet, en fonction des nouvelles possibilités offertes par la dernière version de PHAST, des tests complémentaires ont été effectués.

Il est important de noter que la dernière version de PHAST (6.1) a été mise sur le marché quelques temps avant l'édition de ce rapport. Dans la mesure où les modifications ne concernent pas l'UDM, il a été choisi d'estimer la pertinence de certaines modifications dans le cadre de l'évaluation de la version 6.0 de PHAST.

1.2 DEMARCHE

Il s'agit ici d'analyser la cohérence des résultats obtenus lors de la variation des paramètres dont l'influence est étudiée. Ces tests portent sur le terme source et sur la dispersion.

Pour le terme source, sont notamment abordés :

- les conditions de criticité en monophasique gazeux,
- la prise en compte des pertes de charge pour les fuites en phase liquide ou gazeuse,
- la problématique d'une nappe liquide au sol (rayon d'extension, évaporation depuis la nappe),
- les rejets diphasiques au travers de la formation d'aérosols et du flash adiabatique.

Quant à la dispersion, sont notamment abordés :

- la prise en compte des paramètres orographiques (stabilité atmosphérique, humidité, rugosité du sol, température ambiante, vitesse du vent, hauteur de la couche d'inversion...),
- la prise en compte des différentes configurations accidentelles (mise à l'atmosphère instantanée ou continue, au sol ou en altitude, horizontale ou verticale...),
- l'influence des conditions de mise à l'atmosphère (vitesse, température...),
- la prise en compte des caractéristiques physiques du produit et notamment de la problématique gaz lourd, gaz léger et neutre (de même masse volumique que l'air ambiant),
- la problématique des fuites diphasiques.

1.3 ORGANISATION DU DOCUMENT

Le document est organisé autour des chapitres suivants :

- Le premier chapitre fixe le contexte ainsi que les objectifs de l'étude ;
- Le deuxième chapitre est consacré à la présentation succincte du modèle de dispersion utilisé dans la version 6.0 de PHAST ;
- Les chapitres 3 et 4 sont consacrés respectivement à la synthèse de l'évaluation du calcul du terme source et à la synthèse de l'évaluation du calcul de la dispersion.
- Le chapitre 5 traite des modifications apportées à la version 6.0 dans la version suivante 6.1.

2. PRESENTATION GENERALE DE L'UDM

2.1 GENERALITES

L'U.D.M. ou "Unified Dispersion Model" concerne la dispersion de jets, de gaz denses, légers ou passifs incluant les phases de formation de flaque et de ré-évaporation.

La version originale de l'U.D.M. a été développée par J. COOK et J. L. WOODWARD dans les années 1990. La nouvelle version de l'UDM 6.0 représente une révision et une extension significative de toutes les parties de ce modèle.

Le code source de ce logiciel a été écrit par J. COOK, J. L. WOODWARD, N. FREEMAN, A. HOLT, et H. WITLOX. La vérification de ce code a été menée par A. HOLT.

Le rapport de DNV intitulé « Consequence Modelling Documentation » (UDM Version 6.0, janvier 2000) comprend un manuel théorique et présente les phases de vérification et de validation du code.

Seuls les principes généraux de fonctionnement de l'U.D.M. relativement à la dispersion atmosphérique sont rappelés dans ce document.

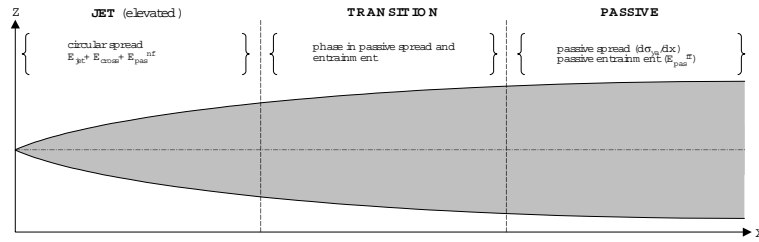
2.2 PRINCIPE DE LA MODELISATION DE LA DISPERSION

Les calculs de dispersion commencent :

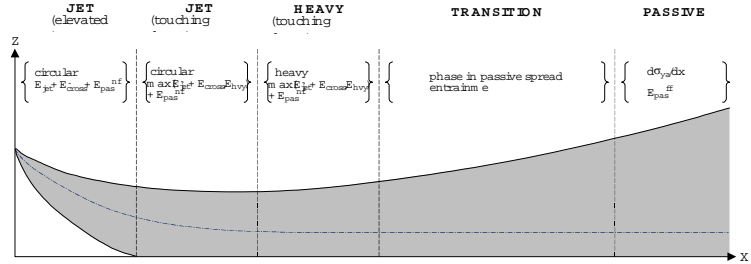
- juste après l'expansion du nuage et lorsque les gaz sont à la pression atmosphérique ;
- et avant la dilution du nuage avec de l'air.

Initialement, le nuage a une concentration de 100% en polluant et des propriétés uniformes.

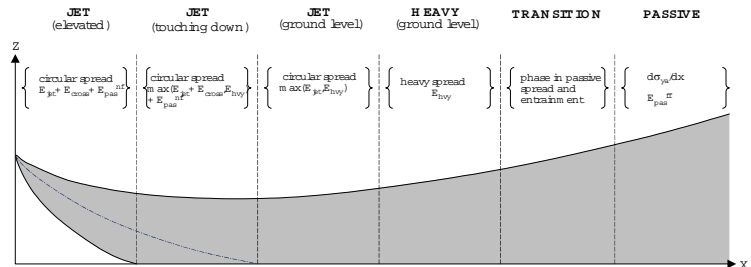
Globalement, les différents modèles présents dans l'UDM sont utilisés en fonction des scénarios considérés et plus particulièrement de critères spécifiques. Le schéma de principe des modélisations ainsi que l'enchaînement des différents modèles est représenté sur les figures suivantes pour plusieurs scénarios.



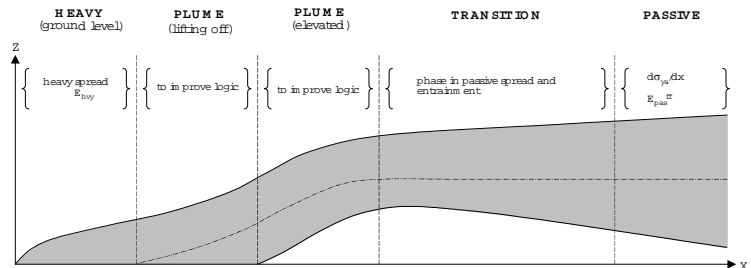
(a) elevated jet plume (no touching down, no capping)



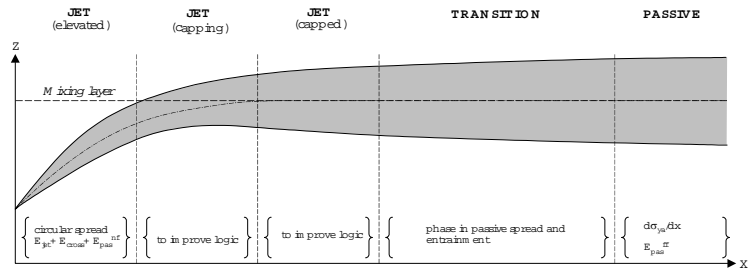
(b) jet plume becomes passive during touching



(c) jet plume becomes passive after touch down



(d) ground level plume lifts off



(e) jet plume in mixing layer

Figure 1 : Différentes phases de l'UDM pour plusieurs scénarios : (a) pas de contact avec le sol, (b) contact partiel avec le sol, (c) contact total avec le sol, (d) élévation du nuage, (e) panache

La figure précédente précise pour chaque phase quel est le type de modèle utilisé (jet, gaz dense, gaz léger ou dispersion passive) ainsi que le mécanisme d’entraînement d’air retenu.

2.2.1 Rejets instantanés

Pour la modélisation de la dispersion d’un rejet instantané, le modèle suit le nuage dans son ensemble.

Les résultats donnent la position et les propriétés au centre du nuage pour différents instants consécutifs. Le nuage est supposé sphérique, si le nuage est élevé et de forme elliptique tronquée, si le nuage touche le sol et s’effondre. Ceci est illustré sur la Figure 2.

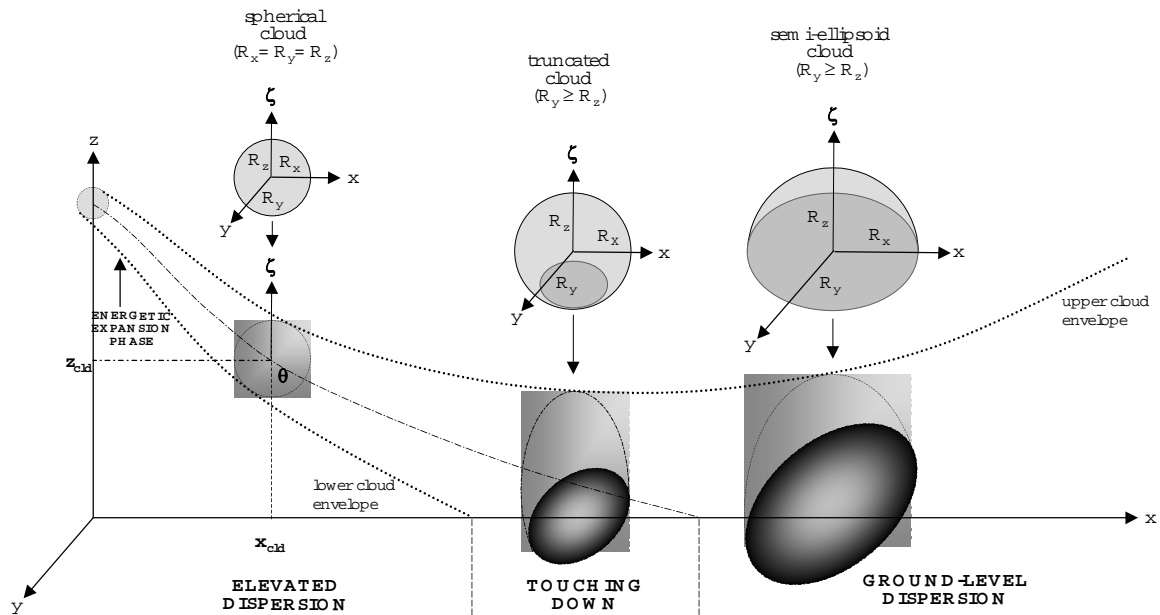


Figure 2 : Hypothèses retenues pour modéliser la dispersion d’un rejet instantané en altitude.

2.2.2 Rejets continus

Pour la modélisation de la dispersion d’un rejet continu, le modèle considère un panache totalement développé qui continue à être alimenté en polluant.

Les résultats donnent les caractéristiques des sections verticales perpendiculaires à l’axe de ce panache (dimensions, concentrations, temps nécessaire pour atteindre la section depuis le point de rejet...).

Ces sections sont circulaires si le panache est dispersé en altitude ou elliptique tronqué si le panache touche le sol et s’effondre (cf. Figure 3).

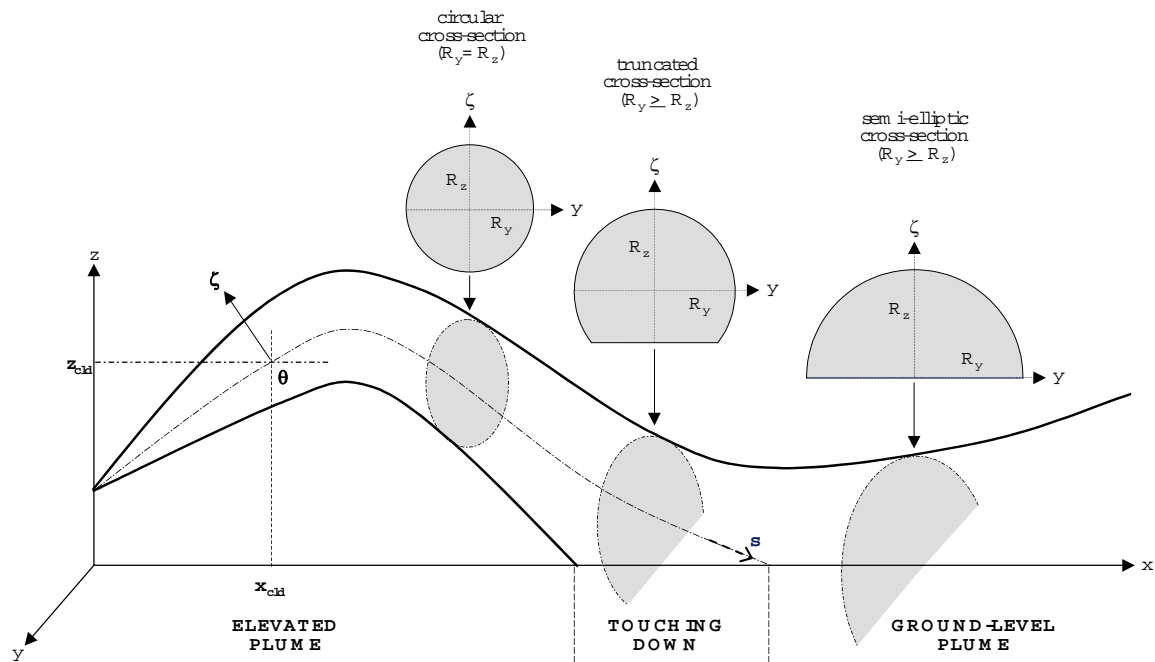


Figure 3 : Hypothèses retenues pour modéliser la dispersion d'un rejet continu

Il est à noter que la modélisation d'un rejet continu est valable seulement après que le panache se soit totalement développé. Si le rejet est relativement court devant la durée nécessaire à l'établissement d'un écoulement en régime permanent, le modèle considère alors le développement partiel du panache et ajuste les calculs de façon adéquate. Ce point est précisé par la suite.

2.2.3 Rejets de durée limitée

2.2.3.1 Approche quasi-instantanée

Sous certaines conditions, il est nécessaire de modéliser des rejets de durée limitée comme des rejets instantanés, c'est-à-dire comme une masse rejetée au lieu d'un débit de rejet.

Toutefois, il n'est pas possible de prévoir à partir des données d'entrée si le rejet continu va conduire ou pas à la formation d'un panache totalement développé. Aussi, le modèle commence toujours par une modélisation de rejet continu. Par la suite, à chaque pas de temps après l'arrêt du rejet, le ratio entre la largeur et la longueur du nuage est calculé. Si ce ratio est plus grand qu'une valeur limite, le nuage continu est alors remplacé par un nuage équivalent circulaire instantané. Cette approche est qualifiée de "quasi-instantanée".

2.2.3.2 Correction pour les rejets de durée finie

Les rejets continus et instantanés conduisent à des panaches ou nuages de forme très différente. Le passage par une approche quasi-instantanée peut conduire à des discontinuités dans les résultats. La concentration en un point donné peut, de ce fait, varier de façon abrupte lors de la transition entre les modèles. Il est malgré tout possible de pallier ce problème en utilisant des facteurs de correction pour modifier les résultats du modèle continu en prenant en compte la dispersion de la tête et de la queue du nuage. Cette modification donne des résultats plus réguliers et précis pour les concentrations sur l'axe du panache mais il est alors impossible de prévoir les concentrations hors de cet axe.

2.2.4 Dispersion des phases condensées et évaporation de flaques

L'UDM prend aussi en compte les effets de vaporisation de gouttelettes en utilisant un modèle dit "hors équilibre".

Si les gouttelettes ne s'évaporent pas avant d'atteindre le sol, elles sont supposées formées une flaque ("rain-out"). La formation et la localisation de la flaque vont dépendre de la taille, du nombre et de la trajectoire des gouttes, et du bilan enthalpique à l'intérieur du nuage.

Une fois la flaque formée, celle-ci va s'évaporer avec un débit variable dans le temps selon l'évolution de sa surface et de sa température.

Les vapeurs de polluant ainsi produites viennent s'ajouter au polluant contenu dans le nuage ou panache avec un débit qui peut varier dans le temps. En complément du modèle thermodynamique de goutte dit "hors équilibre", l'UDM dispose aussi d'un modèle supposant l'équilibre thermodynamique ainsi que d'un modèle spécifique pour l'HF (incluant les effets de la polymérisation).

2.3 DEPLACEMENT DU NUAGE OU DU PANACHE

Tout polluant est émis avec une certaine quantité de mouvement dépendant des conditions initiales de stockage avant rejet. Ainsi, plus la pression de stockage est grande, plus la quantité de mouvement initiale du nuage est importante.

Dans le cas d'un rejet continu horizontal, la quantité de mouvement va transporter le nuage de gaz vers l'avant dans la direction du vent, ce dernier étant toujours supposé dirigé dans le sens du rejet.

Dans le cas d'un rejet instantané, la quantité de mouvement est supposée être distribuée de façon isotrope autour du point de rejet. Elle participe donc à son expansion, mais ne contribue pas au déplacement du nuage. Elle joue de plus un rôle essentiel dans la dilution initiale du nuage.

Quand le nuage est en contact avec le sol ou atteint une couche d'inversion dont l'altitude est fixée par l'utilisateur, la composante verticale de la quantité de mouvement est transformée en composante horizontale, ce qui se traduit par une augmentation de la largeur du nuage.

Si le nuage est plus lourd que l'air, il va s'effondrer sur le sol, ce qui va générer de la turbulence et entraîner de l'air et changer sa section transversale circulaire en une ellipse tronquée. Le sol exerce en outre une force de frottement sur les zones du nuage qui sont à son contact, ce qui diminue la quantité de mouvement du nuage.

Si un nuage au sol a une densité suffisamment petite par rapport à celle de l'air alors le nuage peut décoller du sol.

La quantité de mouvement initiale est progressivement dissipée du fait de l'entraînement de l'air et de l'éventuel frottement du nuage avec le sol.

Le nuage est par la suite entraîné par le vent.

2.4 DILUTION DU NUAGE

2.4.1 Entraînement d'air

Plusieurs sources sont à l'origine du mélange du polluant avec l'air ambiant. L'entraînement d'air dans le mélange de polluant et d'air peut être dû :

- à la quantité de mouvement initiale
En fonction des conditions de rejet, le nuage peut avoir initialement une quantité de mouvement importante près du point d'émission. La différence entre la quantité de mouvement du polluant et celle de l'air environnant provoque une turbulence importante, à l'origine d'un taux important d'entraînement d'air.
- au cisaillement du champ de vent
Si l'altitude du nuage évolue lors de sa progression (direction de rejet différente de l'horizontale ou densité différente de celle de l'air ambiant), alors il est cisailé par le champ de vent. La différence entre la quantité de mouvement du nuage et celle de l'air produit des tourbillons qui favorisent le mélange entre l'air et le polluant.
- à l'effondrement d'un nuage dense ou à l'élévation d'un nuage plus léger que l'air
Si le nuage est de densité différente à celle de l'air ambiant, alors il va s'effondrer ou s'élever sous l'effet de la différence de gravité. Ce mouvement induit de la turbulence sur les bords du nuage qui entraîne de l'air dans le nuage.
- à la turbulence atmosphérique
La turbulence atmosphérique favorise en permanence l'entraînement de l'air dans le nuage. L'intensité de la turbulence atmosphérique dépend de plusieurs facteurs tels que le gradient vertical de température de l'atmosphère et le gradient de la vitesse du vent (rugosité du terrain où la dispersion s'opère).

Chacun des mécanismes décrits précédemment participe à la dilution du nuage avec une intensité différente et variable selon l'évolution des caractéristiques du nuage :

- pour des rejets de grande vitesse, la quantité de mouvement va être prédominante dans les premiers instants, puis va être réduite du fait de l'entraînement de l'air et du frottement éventuel avec le sol ;
- si le nuage est plus dense que l'air, l'effondrement est alors l'effet prépondérant ;
- enfin, à mesure que la densité devient proche de celle de l'air, l'effet lié à la turbulence atmosphérique devient le plus important.

A chaque étape de la dispersion, les mécanismes les plus actifs sont recherchés dans le modèle UDM et ils sont utilisés pour calculer un taux d'entraînement d'air total.

2.4.2 Concentration dans le nuage

L'air est supposé être entraîné par les bords et par le sommet du nuage et être diffusé graduellement vers le centre du nuage.

Le profil de concentration dans une section du mélange d'air et de polluant n'est donc pas uniforme et va changer au cours du temps. En général, le profil de concentration varie de façon franche dans les premiers instants de la dispersion pour suivre par la suite des variations moins marquées au fur et à mesure que la dilution s'opère. Le profil de concentration tend ainsi vers une forme gaussienne lorsque la dispersion devient passive. Pour mémoire, la dispersion d'un polluant est dite passive lorsque cette dernière n'est contrôlée que par la turbulence atmosphérique.

2.5 CONDITIONS METEOROLOGIQUES

L'U.D.M. permet de considérer la variation de la vitesse du vent, de la température de l'air et de la densité de l'atmosphère avec l'altitude en prenant en compte différents profils verticaux pour ces variables.

Ainsi, la vitesse de vent spécifiée est relative à une hauteur de référence. Aussi, par exemple, lorsque l'option d'un profil de vent logarithmique est choisie, la vitesse du vent est plus petite que la valeur spécifiée en dessous de la hauteur de référence et plus grande au-dessus.

Par ailleurs, une couche d'inversion de température peut être prise en compte. Cette altitude n'est pas calculée, elle est spécifiée par l'utilisateur. Il est dommage qu'il ne soit pas proposée des modèles de calcul pour estimer l'altitude de la couche d'inversion.

2.6 COEFFICIENTS D'AJUSTEMENT

Souvent, les modèles intégraux comportent quelques coefficients « arbitraires » pour la résolution de certaines équations. Le problème de cette approche est que des erreurs inhérentes au code ou aux modèles physiques employés peuvent être masquées par l'utilisation de ces coefficients.

Pour l'U.D.M., les coefficients retenus pour les différents modèles utilisés dans l'UDM ont été obtenus à partir de données tirées de la littérature pour partie sur des expérimentations. Les coefficients qui ont été introduits dans l'UDM sont ceux identifiés pour les différents modèles physiques (entraînement d'air,...), indépendamment des autres modèles. De fait, il n'y a pas de paramètres globaux permettant d'ajuster les résultats globaux par rapport à des résultats expérimentaux par exemple.

2.7 PRINCIPALES MODIFICATIONS ENTRE LA VERSION 4.2 ET LA VERSION 6.0

Les principales modifications entre la version évaluée précédemment par l'INERIS (4.2) et la version évaluée (6.0) portent sur :

- Une meilleure transition entre les différents modèles. Ce point qui peut paraître anodin revêt en fait une grande importance car permet de s'affranchir des incertitudes qui pouvaient être rencontrées par le passé lorsque les concentrations recherchées étaient calculées au niveau d'une transition entre deux modèles ;
- Un nouveau modèle pour la prise en compte des rejets diphasiques. Ce modèle est plus pertinent et il permet en particulier d'améliorer la prédiction de la quantité de liquide tombant au sol lors d'un rejet diphasique ;
- Une prise en compte d'un profil logarithmique de vent ;
- La possibilité pour un mélange de polluant et d'air plus léger que l'air de décoller du sol. Il est à noter que ce point constitue une évolution notoire par rapport à la précédente version évaluée où, de façon schématisée, tout nuage ou panache qui touchait le sol n'en décollait plus (Mouilleau et al,1991, « rapport d'évaluation de PHAST 4.2 », Document INERIS) ;
- La possibilité de fixer l'altitude d'une couche d'inversion par l'utilisateur (aucune corrélation n'est proposée pour la calculer), cette nouvelle fonctionnalité constitue une nouvelle fonction importante qui n'existait pas dans la version précédente.

2.8 PRINCIPALES MODIFICATIONS ENTRE LA VERSION 6.0 ET 6.1

Les principales modifications sont :

- Le développement d'un nouveau module de calcul de terme source dans le cas d'un scénario de rejet par une longue canalisation.
Ce nouveau module s'appuie sur deux modèles différents, selon que le produit reste gazeux ou est diphasique. L'ajout de ce module constitue un apport important compte tenu des remarques effectuées sur la version 6.0 relativement au calcul du débit de fuite dans le cas d'une rupture de canalisation. Ce point a fait l'objet d'une évaluation au chapitre suivant ;
- L'évaporation à la suite de la disparition du toit d'un bac contenant un produit réfrigéré (ou avec une pression légèrement supérieure à la pression atmosphérique)
Dans la mesure où ce scénario n'est pas très courant, il n'a pas fait l'objet d'une évaluation. De plus, compte tenu du nombre important de paramètres intervenant dans la modélisation, l'évaluation de ce type de module ne peut pas être faite dans le cas d'une évaluation portant plus spécifiquement sur la dispersion atmosphérique ;
- La dispersion d'une fuite survenant dans le sillage d'un bâtiment
Compte tenu de la spécificité de ce module et du temps imparti pour la réalisation de ce complément d'étude, il n'a pas fait l'objet d'une évaluation. Rappelons toutefois que le rejet dans un sillage met en œuvre des mécanismes complexes qui sont a priori difficiles à prendre en compte dans un modèle intégral de dispersion. En particulier, le sillage fait apparaître des zones de recirculation avec des échappements tourbillonnaires périodiques.
- Le calcul des effets toxiques sur des personnes situées à l'intérieur de bâtiment
Ce nouveau module n'a pas fait l'objet d'une évaluation particulière, dans la mesure où la relation entre la concentration calculée à l'extérieur et la concentration calculée à l'intérieur est basée sur un taux de renouvellement horaire du volume où sont présentes les personnes. Ce taux est supposé constant au cours du temps et il est fixé par l'utilisateur. Cette démarche en première approximation n'appelle pas de remarques particulières de la part de l'INERIS.
- L'actualisation de la base de données au format DIPPR 2000
Cette actualisation permet d'affiner le calcul des propriétés physico-chimiques des substances rejetées.
- La possibilité de suivre une concentration à une altitude donnée.
Cette possibilité permet de simplifier l'accès aux données recherchées par l'utilisateur. L'accès aux données avait été identifié comme un point faible de la version 6.0.

3. TERME SOURCE - SYNTHÈSE DE L'ÉVALUATION

Le parti pris est d'exposer les résultats de la phase d'évaluation selon les scénarios suivants :

- Mise à l'atmosphère instantanée
- Fuite continue de liquide à la brèche et à travers une canalisation
- Fuite continue de gaz à la brèche et à travers une canalisation
- Formation de flaque ("Rain-out") et évaporation de nappe

Pour chaque scénario, dans un premier temps, tous les cas réalisés seront listés. Pour chaque cas, il est précisé si la tendance attendue est observée.

Dans un deuxième temps, des commentaires sont apportés pour tous les tests qui ont débouché sur une tendance totalement ou partiellement différente de celle attendue.

En préalable, il est également utile de rappeler que pour la majorité des tests effectués, l'influence de la longueur de la canalisation sera étudiée. Pour ne pas alourdir inutilement les tableaux qui suivent, ce paramètre ne sera pas mentionné.

3.1 MISE A L'ATMOSPHERE INSTANTANEE

Le calcul de la température de détente d'un gaz initialement sous pression se fait classiquement à l'aide de l'hypothèse d'une évolution isentropique entre l'état initial et l'état final.

La vitesse de décharge augmente logiquement lorsque la température ou la pression initiale augmente. Cette évolution est importante car elle conditionne en partie l'entraînement d'air et donc la dilution initiale.

Dans le cas de la ruine d'un stockage de gaz liquéfié, conformément aux attentes, la fraction liquide et la taille des gouttes diminuent lorsque la température et la pression initiales augmentent alors que dans le même temps la vitesse de décharge augmente.

En conclusion, les résultats des tests de ce module, qui concerne la mise à l'atmosphère instantanée, affichent des tendances cohérentes. Leur comparaison avec des calculs effectués par ailleurs ne soulève pas de remarque particulière.

Paramètre dont l'influence est étudiée	Conforme
Température du réservoir sur la température après expansion	Oui
Pression dans le réservoir sur la température après expansion	Oui
Pression et température dans le réservoir sur la fraction condensée	Oui
Température et pression du réservoir sur la vitesse du fluide à la brèche	Oui
Température du réservoir sur la vitesse, la taille des gouttes et la fraction liquide	Oui

Tableau 1 : Synthèse de l'influence des paramètres sur le terme source lors d'une mise instantanée à l'atmosphère.

3.2 FUITE CONTINUE DE LIQUIDE A LA BRECHE ET A TRAVERS UNE CANALISATION

Les éléments suivants n'ont pas pu être évalués car ils ne sont pas pris en compte ou pas accessibles dans la version 6.0 de PHAST :

- Influence de la forme de la brèche (pas pris en compte) ;
- Influence du coefficient C_D (pas accessible) ;
- Effet champagne (pas pris en compte).

Paramètre	Conforme
Continuité entre les modèles d'émission continue et instantanée	Oui
Continuité entre fuite à travers un orifice et fuite à travers une canalisation	Non
Cohérence des calculs par rapport au type de stockage	Oui
Température et pression du réservoir sur le débit et la vitesse.	Oui
Température du réservoir sur la fraction flashée.	Oui
Diamètre sur le débit et la vitesse.	Oui
Suivi de la vidange d'un réservoir de stockage de gaz liquéfié sous pression	Oui
Rugosité de la canalisation sur le débit et la vitesse	Oui
Viscosité du produit rejeté sur le débit	Oui
Prise en compte de pertes de charge singulières	Oui
Prise en compte de la pression hydrostatique	Oui
Prise en compte d'un flash à l'intérieur et en sortie de canalisation	Non

Tableau 2 : Synthèse de l'influence des paramètres sur le terme source dans le cas d'une fuite en phase liquide

Dans un premier temps, il convient de rappeler que, comme dans la version précédente, deux modèles différents sont utilisés dans PHAST 6.0 pour estimer le débit de fuite. Un premier modèle est utilisé pour les fuites en ras de paroi et un deuxième modèle est utilisé lorsque la fuite se produit à la suite d'une rupture guillotine d'une canalisation. Le choix consistant à utiliser deux modèles différents suivant le type de fuite est tout à fait justifié car les mécanismes mis en œuvre sont différents.

Dans un deuxième temps, les tests effectués ont montré qu'indépendamment l'un de l'autre, les modèles donnent des résultats qui suivent globalement les tendances attendues.

La seule réserve concerne le modèle de calcul de débit en présence d'une canalisation. En effet, ce modèle ne calcule pas d'évaporation au sein de la canalisation, même si cette dernière est très longue. Ce défaut résulte du fait que le calcul est réalisé en supposant que la canalisation est adiabatique et donc que la fraction liquide à la brèche dépend uniquement des conditions régnant dans le réservoir et des conditions atmosphériques.

Dans un troisième et dernier temps, il est apparu que les deux modèles ne se raccordent pas lorsque le modèle de calcul de débit avec une canalisation est employé en considérant une longueur de canalisation voisine de 0. Ce constat avait déjà été effectué lors de l'évaluation des versions précédentes et il n'a donc pas été corrigé dans la nouvelle version. L'INERIS recommande donc l'utilisation du modèle de fuite en ras de paroi lorsque la canalisation est courte comme pour la version 4.2 de PHAST.

En conclusion :

- Chaque modèle considéré indépendamment donne des résultats conformes aux tendances attendues ;
- PHAST 6.0 ne calcule pas de détente dans les canalisations, la fraction liquide est calculée uniquement à partir des conditions initiales régnant dans le réservoir et des conditions atmosphériques.
- Le modèle de calcul de débit au travers d'une canalisation ne se raccorde pas au modèle de calcul de débit au travers d'une brèche en ras de paroi. Ce dernier modèle donne des valeurs plus élevées pour le débit. Ce constat avait déjà été fait lors de l'évaluation d'une version précédente (4.2) par Mouilleau et al, (1991, « rapport d'évaluation de PHAST 4.2 », Document INERIS). Il est donc recommandé d'utiliser le modèle de fuite en ras de paroi dans le cas d'une canalisation courte (un ordre de grandeur pour une canalisation courte est une longueur inférieure à 10 fois le diamètre).

3.3 FUITE CONTINUE DE GAZ A LA BRECHE ET A TRAVERS UNE CANALISATION

Ce module de tests a pour objectif principal d'examiner comment le logiciel PHAST 6.0 traite des fuites continues de gaz dans le cas d'une brèche et au travers d'une canalisation.

En terme d'observations plus générales, notons que le logiciel PHAST 6.0 ne permet pas de traiter les cas de fuite de petits diamètres sur une canalisation (ex : fuite sur joints). En effet, cet outil ne permet que d'envisager des fuites de type « rupture guillotine ».

Paramètre	Conforme
Continuité entre les modèles d'émission continue et instantanée	oui
Continuité entre rejet à travers un orifice et à travers une canalisation	non
Cohérence par rapport au type de stockage retenu.	Oui
Température du réservoir sur le calcul du débit et de la vitesse dans le cas d'une fuite en ras de réservoir	Oui
Température du réservoir sur le calcul du débit et de la vitesse dans le cas d'une rupture de canalisation	Non
Pression du réservoir sur la température du fluide dans le cas d'une fuite en ras de réservoir	Oui
Pression du réservoir sur la température du fluide dans le cas d'une rupture de canalisation	Non
Diamètre à la brèche sur le calcul du débit et de la vitesse	Oui
Suivi de la vidange d'un réservoir d'hydrogène gazeux	Oui
Rugosité sur le débit et la vitesse	Oui
Viscosité du produit rejeté sur le débit et la vitesse	Oui
Prise en compte de pertes de charge singulières	Oui
Longueur de la canalisation sur la température du fluide rejeté	Non
Température et pression du réservoir sur le calcul de la fraction condensée	Oui

Tableau 3 : Synthèse de l'influence des paramètres sur le terme source dans le cas d'une fuite en phase gazeuse.

Comme pour le cas d'une fuite en phase liquide, deux modèles différents sont utilisés selon que la fuite se produit en ras de paroi ou à la suite d'une rupture guillotine d'une canalisation.

Les tests effectués ont montré que :

- le modèle de calcul de fuite en ras de réservoir donne des résultats conformes à ceux attendus.
- En revanche, le modèle de calcul de fuite suite à la rupture d'une canalisation donne des résultats peu cohérents dans certaines conditions. Ces cas sont précisés par la suite.

Il en résulte bien évidemment que le raccordement entre les deux modèles ne se fait pas convenablement, comme dans le cas d'une fuite en phase liquide.

Les problèmes rencontrés dans le cas d'une fuite consécutive à la rupture d'une canalisation sont :

1- Lors de l'étude de l'influence de la température du réservoir sur le calcul du débit et de la vitesse, les tests effectués montrent des variations difficilement explicables de la vitesse de décharge et la fraction liquide calculées. A titre d'exemple, le graphique suivant représente l'évolution de la fraction condensée en fonction de la longueur de canalisation dans le cas d'un rejet de chlore en phase gazeuse.

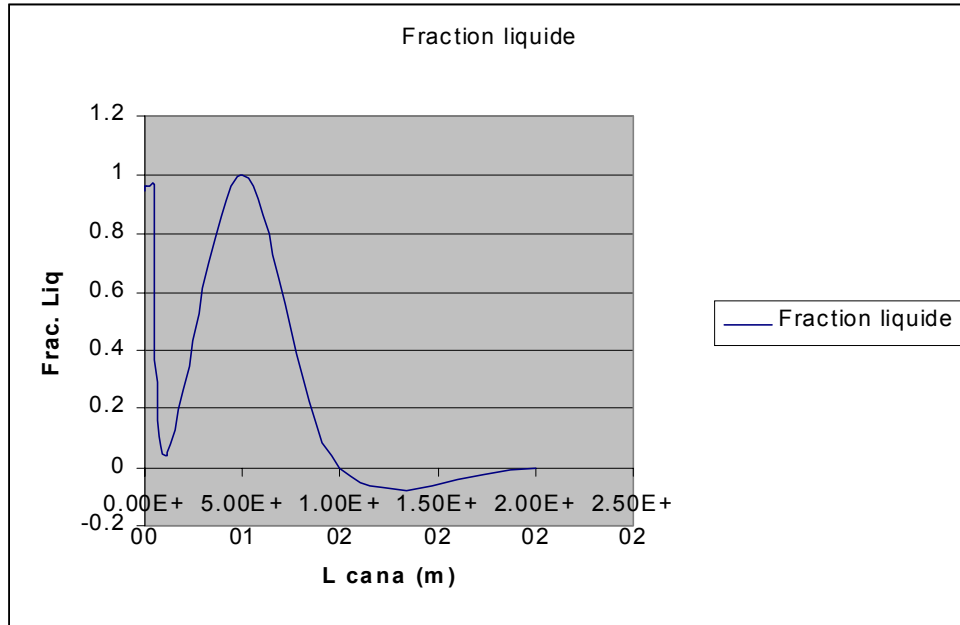


Figure 4

Ce test a été effectué pour un stockage d'ammoniac gazeux à une pression de l'ordre de 5 bar (abs).

Des tendances similaires ont été observées dans tous les cas. Ces valeurs calculées pour la fraction de liquide ont bien évidemment une répercussion immédiate sur les valeurs de la vitesse de décharge. Par contre, le débit semble quant à lui suivre une tendance correcte.

En conclusion, la fraction liquide, et par conséquent la vitesse également, calculées par PHAST 6.0 dans le cas d'un rejet gazeux au travers d'une canalisation ne sont pas fiables. Comme ces paramètres ont une influence directe sur la dispersion du polluant (formation de flaque, entraînement d'air), il est conseillé de ne pas utiliser ce modèle lorsqu'une fraction liquide est calculée.

2- Lors de l'étude de l'influence de la pression du réservoir sur la température du fluide après expansion, des résultats inattendus ont été observés dans le cas d'une canalisation, à l'exception du débit, l'évolution des autres paramètres examinés (température, vitesse, fraction liquide) montre des discontinuités marquées en fonction de la pression. Ceci est illustré sur la figure suivante. Il est à noter que ces observations ont été effectuées pour tous les rejets en phase gaz avec une canalisation.

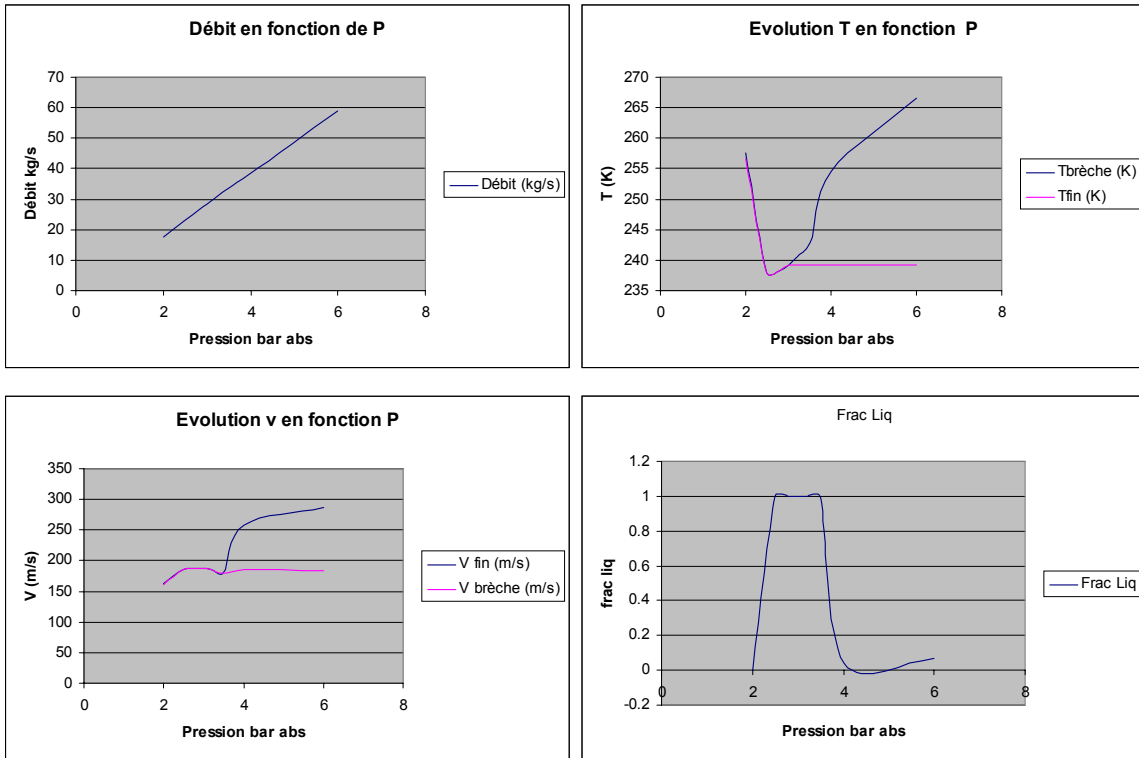


Figure 5

L'observation de ces courbes montre que dans certaines conditions de pression, le produit rejeté (du chlore, dans ce cas précis) peut se trouver totalement en phase liquide. Ce résultat n'a rien de physique, il est toutefois utile de préciser qu'il est identique aux résultats fournis par la version précédente de PHAST (4.2). Par conséquent, dans le cas d'une fuite gazeuse, il est fortement conseillé de forcer la valeur de la fraction liquide à une valeur proche de 0 en utilisant le module « User defined source » qui permet d'imposer la valeur de la fraction liquide.

Pour finir, lors de l'étude de l'influence de la longueur de la canalisation sur la température du fluide rejeté, des variations aléatoires de la température à la brèche ont été observées, les températures "finales" ayant quant à elles des valeurs plus normales. Cette dernière est quasiment constante, à l'exception de la valeur calculée pour la plus longue canalisation.

En conclusion, des deux modèles disponibles pour estimer le débit de fuite en phase gaz, seul le modèle de calcul de fuite en ras de paroi peut être utilisé sans restriction. Le modèle de calcul de fuite consécutive à la rupture d'une canalisation a montré de nombreuses lacunes qui poussent l'INERIS à déconseiller son utilisation ou pour le moins à faire preuve de beaucoup de prudence lors de son utilisation.

3.4 EVAPORATION DE NAPPE

Concernant l'évaporation d'une nappe de liquide recueillie sur le sol, l'influence de différents paramètres a été évaluée. Cette évaluation montre que les tendances attendues sont globalement observées pour chacun des paramètres. La seule remarque porte sur l'absence de vérification entre la densité du produit rejeté et la densité de l'eau lorsque le rejet se produit sur l'eau. Cette absence conduit à déterminer un débit d'évaporation, même si le produit rejeté est non miscible et est plus dense que l'eau : il serait donc amené à couler, ne pouvant plus de fait s'évaporer.

Paramètre	Conforme
Conductivité thermique du sol	Oui
Vitesse du vent	Oui
Température ambiante	Oui
Nature du produit rejeté	Oui
Température de rejet	Oui
Masse totale rejetée	Oui
Rugosité du sol sur le diamètre de la nappe	Oui

Tableau 4 : Synthèse de l'influence des paramètres sur le terme source à considérer dans le cas de l'évaporation d'une nappe.

En conclusion, PHAST 6.0 peut être utilisé pour estimer l'évaporation de nappe. Dans le cas d'un rejet sur de l'eau, il sera toutefois nécessaire de vérifier que le produit rejeté ne va pas couler du fait de sa densité.

3.5 REJET DIPHASIQUE

Concernant les rejets diphasiques, le modèle considéré permet de répondre de façon cohérente à la problématique de la formation de flaque lors d'un rejet diphasique, et en particulier à la formation de flaque ("rain-out"). Il est important de noter que ce point est essentiel car l'importance du rain-out influence directement les caractéristiques du nuage et, en particulier, la quantité de produit toxique ou inflammable impliquée. L'introduction du nouveau modèle pour les jets diphasiques dans la version 6.0 de PHAST constitue un progrès majeur par rapport aux versions précédentes.

Paramètre	Conforme
Pression de stockage	Oui
Température de stockage	Oui
Hauteur de rejet.	Oui
Vitesse du vent et température ambiante	Oui
Direction du rejet	Oui
Nature du produit	Oui

Tableau 5 : Synthèse de l'influence des paramètres sur le terme source à considérer dans le cas d'un rejet diphasique.

3.6 FUITE AU TRAVERS DE LONGUES CANALISATIONS

Le module permet de modéliser des scénarios de fuite sur de longues canalisations en prenant en compte assez finement de nombreux paramètres tels que la présence de vannes dont la date de fermeture peut être renseignée par l'utilisateur ou encore la surface de la brèche qui peut être différente de la section de la section de la canalisation. Il permet également de prendre en compte les caractéristiques de la canalisation pour les échanges thermiques. Cette prise en compte permet notamment de faire évoluer au cours du temps la fraction liquide à la brèche, chose que ne faisait pas le module « Line rupture ».

Paramètre	Conforme
Longueur de canalisation (rejet gazeux)	Oui
Longueur de canalisation (rejet diphasique)	Oui
Section de la brèche (rejet gazeux)	Oui
Section de la brèche (rejet diphasique)	Oui
Pression initiale	Oui
Position de la brèche le long pour une canalisation non alimentée	Oui
Position de la brèche dans le cas d'une canalisation alimentée	Oui
Nombre de pas de temps considéré	Oui
Température ambiante	Oui

Tableau 6 : Synthèse de l'influence des paramètres sur le terme source à considérer dans le cas d'un rejet au travers d'une longue canalisation.

Les tests effectués n'ont pas mis en évidence de tendances contraires à celles attendues. Toutefois, il convient d'être extrêmement prudent lors de l'exploitation des résultats fournis. En effet, ces derniers sont très sensibles aux différents paramètres à la main de l'utilisateur. Parmi les paramètres les plus sensibles, il faut retenir la durée d'intérêt, la finesse de la discrétisation pour le débit (entre 1 et 10 valeurs au maximum sur la durée d'intérêt) et surtout le nombre de pas de temps pour le calcul. En effet, si le nombre de pas de temps choisi est trop faible et en particulier si la valeur par défaut est conservée, il est possible que les vannes ne se ferment pas à la date souhaitée.

De plus, il est à noter qu'avant d'utiliser ce modèle avec une valeur de débit pour la pompe, il est fortement conseillé de réaliser un calcul préliminaire avec le modèle « Leak » pour estimer le débit maximum qui peut passer dans la canalisation. En effet, lorsque ce dernier est trop important, deux situations peuvent se produire :

- Soit le calcul est arrêté en affichant un message, ce qui n'a que peu de conséquences ;
- Soit le logiciel s'arrête définitivement et il est alors obligatoire de fermer PHAST sans pouvoir bien entendu sauvegarder les données entrées auparavant.

3.7 CONCLUSIONS SUR LE CALCUL DU TERME SOURCE

Concernant le terme source, les tests effectués permettent d'aboutir aux conclusions suivantes :

- Concernant les rejets instantanés, les résultats obtenus sont cohérents ;
- Concernant les fuites en ras de paroi, qu'elles soient en phase gazeuse ou liquide, le modèle proposé donne des résultats cohérents ;
- Concernant les fuites consécutives à la rupture d'une canalisation, le modèle proposé donne des résultats cohérents si aucun changement de phase n'est constaté. Dans le cas contraire, les résultats fournis doivent être considérés avec prudence. De plus, comme dans la version précédente, le modèle de fuite en ras de paroi et celui de fuite sur canalisation ne se raccorde pas et il est conseillé d'utiliser le modèle de fuite en ras de paroi lorsque les canalisations sont courtes.
- Concernant l'évaporation de nappe, les résultats obtenus sont cohérents. La seule limitation de ce modèle concerne le cas d'un rejet sur l'eau où il est nécessaire de vérifier au préalable que le produit rejeté ne va pas couler du fait de sa plus grande densité. Ce test n'est pas réalisé automatiquement dans PHAST 6.0.
- Concernant la prise en compte dans le champ proche des rejets diphasiques, la nouvelle version de PHAST 6.0 comporte un modèle plus pertinent qui permet de mieux estimer les quantités recueillies au sol. Pour mémoire, cette quantité peut avoir une incidence notable sur les distances d'effet calculées.
- De plus, il faut ajouter que PHAST 6.0 permet de définir des fuites dont le débit est variable au cours du temps. Ce point constitue également une amélioration notoire par rapport aux versions précédentes.

En plus de ces remarques, il convient d'ajouter que le module traitant de fuites au travers de longues canalisations qui a été implémenté dans la version 6.1 permet de traiter assez finement ce type de scénario en prenant en compte de nombreux paramètres (nature de la canalisation, prise en compte de la contribution amont et aval,...). Ce module permet notamment de combler les lacunes mises en évidence dans le cas de rejet au travers de « courtes » canalisations.

4. DISPERSION - SYNTHÈSE DE L'ÉVALUATION

Pour l'évaluation de la dispersion atmosphérique, les tests de cohérence retenus sont relatifs à :

- l'influence des paramètres météorologiques et orographiques sur la dispersion de gaz neutres ou denses ;
- la problématique de la mise à l'atmosphère continue de gaz neutres, denses ou encore légers, à partir de rejets au sol ou en altitude, avec une direction horizontale ou verticale ;

Les paramètres d'entrée relatifs à chaque test ainsi que les résultats obtenus sont détaillés au chapitre 6. Les principaux enseignements à retenir sont présentés ci-après.

En préalable, il a été jugé utile de rapporter des éléments importants relatifs à l'utilisation du logiciel et plus particulièrement à l'exploitation des résultats de calcul.

4.1 ERGONOMIE DE PHAST 6.0

Il est indispensable de noter qu'une grande attention doit être portée à l'interprétation des résultats au niveau des différents onglets générés par PHAST 6.0. En effet, ces tests ont montré que, toutes choses étant égales par ailleurs, les résultats affichés dans l'onglet "Résumé" pouvaient, dans certains cas, être différents de ceux affichés dans l'onglet "Dispersion". D'une façon générale, il semble prudent de retenir systématiquement les résultats affichés dans ce dernier onglet. Ceci est illustré sur les deux captures d'écran suivantes.

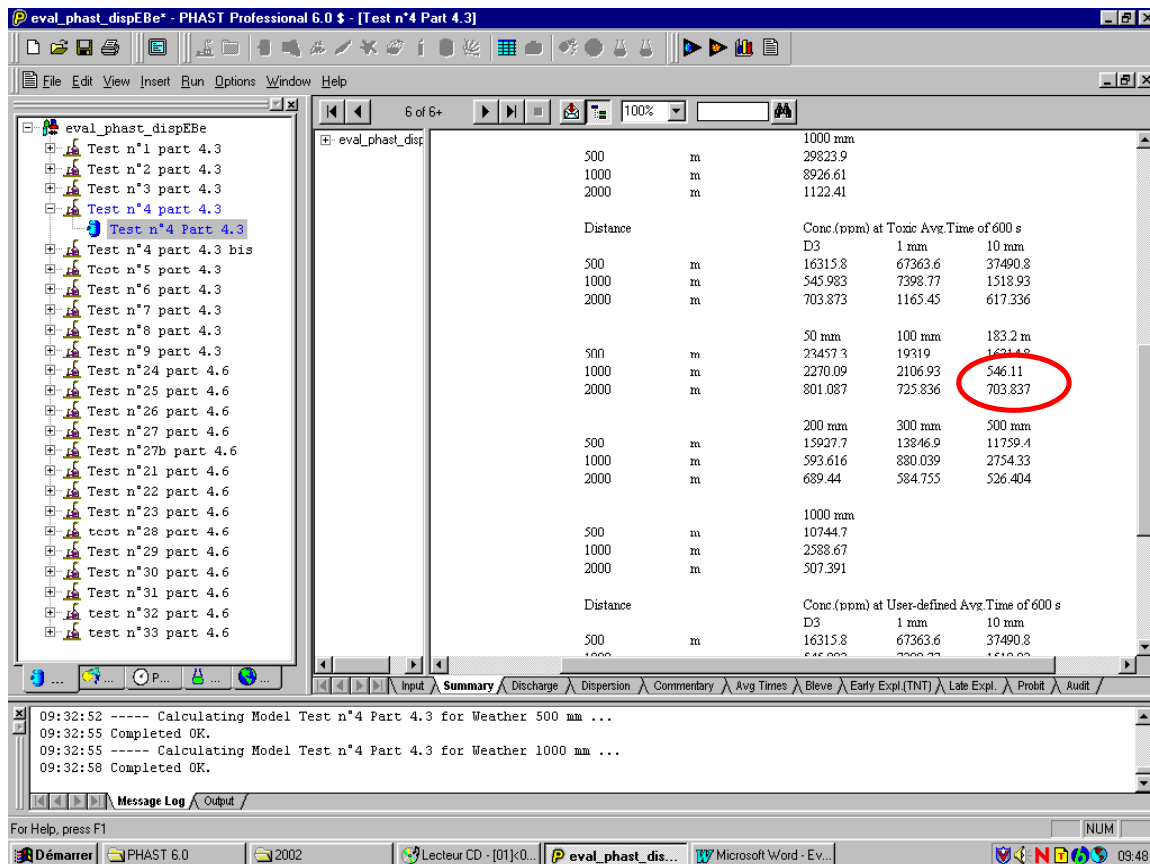


Figure 6 : indications fournies dans l'onglet "résumé"

La figure précédente montre que, à une distance de 1000 m, la concentration en polluant est de 546.11 ppm. La figure suivante montre que la concentration à 1000 m est comprise entre 5245 et 2299 ppm. L'écart entre les deux valeurs ne peut être négligé.

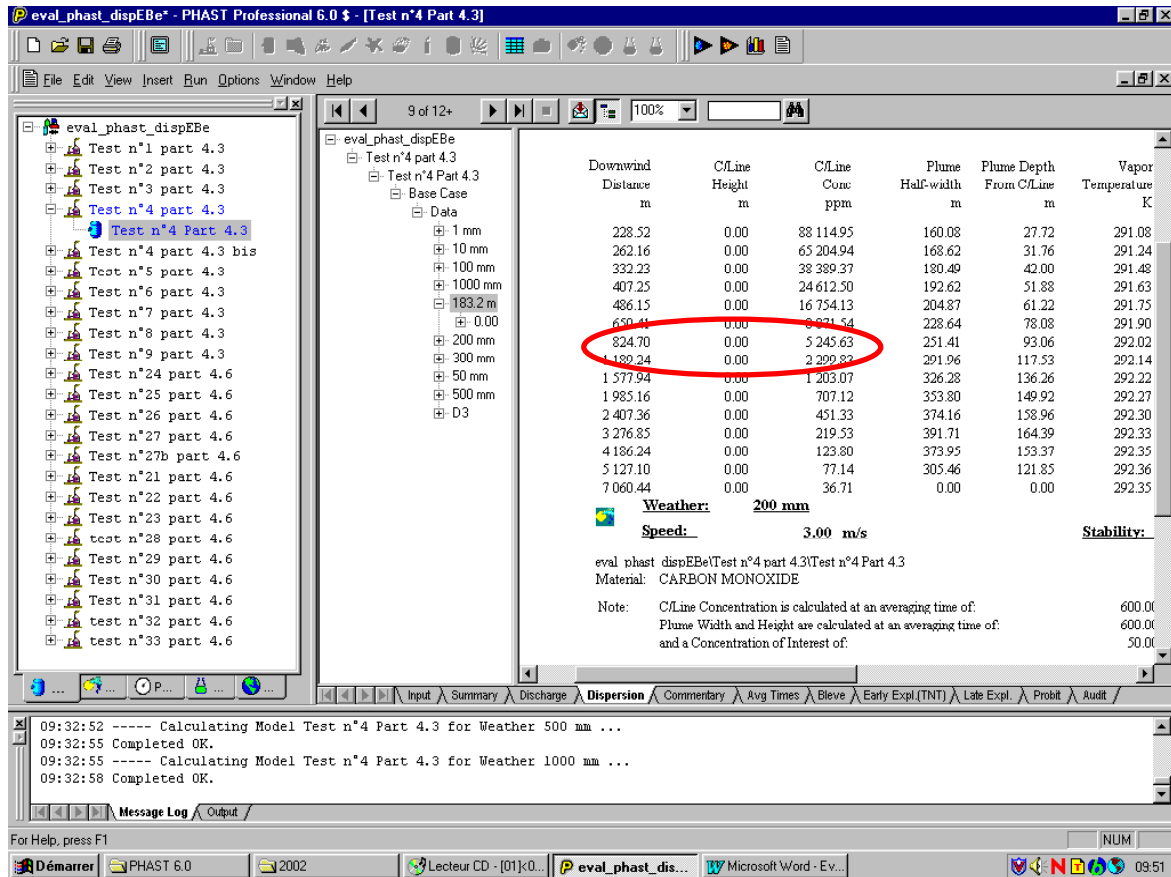


Figure 7 « Dispersion » pour une rugosité de 183,2 mm

En conclusion, il paraît impératif de considérer avec méfiance les valeurs disponibles dans l'onglet "Résumé". Il convient dès lors d'utiliser de préférence les autres onglets pour rechercher des valeurs spécifiques, il est à noter que cela n'est pas toujours possible.

Concernant l'exploitation des résultats, ce sont bien souvent les concentrations calculées au niveau du sol qui intéressent le modélisateur. Celles-ci sont généralement accessibles directement pour la plupart des rejets. Toutefois, dans certains cas, des difficultés importantes ont été rencontrées pour y accéder, notamment lorsque le nuage a tendance à s'élever. Il est important de préciser que les difficultés ne sont pas liées à la valeur des concentrations qui est bien évidemment plus faible que sur l'axe du panache mais, réellement, l'accès à ces valeurs.

Sur le plan pratique, pour réaliser les calculs, il est indispensable d'utiliser un "core averaging time" égal à l'"averaging time" souhaité (20 s pour un inflammable et 600s pour un toxique). En effet, le "core averaging time" par défaut est de 18.75 s et lorsqu'un calcul de dispersion d'un polluant toxique est effectué, il est possible d'avoir accès aux concentrations basées sur un "averaging time" toxique (Toxic averaging time (600s)). Toutefois, ces dernières valeurs sont extrapolées à partir de celles calculées avec le "core averaging time". Des comparaisons ont montré qu'une différence non négligeable existe entre des résultats extrapolés à un "averaging time" de 600s à partir de calculs effectués avec un "core averaging time" de 18.75s et des calculs réalisés directement avec un "core averaging time" de 600s. Ce point est par ailleurs mentionné explicitement dans le documentation de PHAST 6.0.

Par conséquent, dans le cas d'un rejet d'un polluant toxique, il ne faut pas utiliser les concentrations obtenues avec le Toxic averaging time (600 s). Il est absolument indispensable de réaliser les calculs avec un "core averaging time" correspondant aux effets recherchés, c'est-à-dire 600s. Il est bien entendu que si le polluant est à la fois toxique et inflammable, deux calculs distincts devront être réalisés en modifiant la valeur du "core averaging time".

4.2 REJET INSTANTANE

4.2.1 Paramètres météorologiques et orographiques

Cette partie concerne l'influence des paramètres météorologiques et orographiques sur la dispersion d'un gaz dans le cas d'un rejet instantané.

Paramètre	Conforme
Classes de stabilité sur la dispersion	Oui
Humidité de l'air sur la transition entre les modèles gaz dense et gaz passif	Oui
Rugosité du sol sur la dispersion	Oui
Température ambiante sur l'utilisation du modèle de gaz dense	Oui
Vitesse du vent sur la dispersion	Oui
Hauteur d'inversion sur la dispersion pour un rejet de gaz léger	Oui

Tableau 7 : Synthèse de l'influence des paramètres orographiques sur la dispersion d'un produit rejeté à la suite d'une ruine de réservoir

Concernant les rejets, les tendances attendues ont été observées. Toutefois, il est utile de préciser certains points :

1 - Concernant l'influence des classes de stabilité sur la dispersion, dans le cas d'un gaz neutre, les tendances attendues ont été observées en tout point situé sous le vent du point de rejet. Par contre, dans le cas d'un gaz dense, des résultats a priori surprenants ont été obtenus pour des conditions de stabilité de type D, E et F, notamment dans le champ proche. En effet, dans le champ proche, ce sont les deux dernières conditions météorologiques qui aboutissent aux concentrations les plus faibles à 100 m du point de rejet. Par contre, dans le champ lointain (à partir de 1000 m pour le cas considéré), les tendances attendues sont observées. En fait, après un examen plus poussé des résultats, il s'avère que dans le cas d'un gaz dense, le modèle employé dans le champ proche est le modèle de gaz lourd et ce modèle s'avère être le plus « efficace » pour la dilution du nuage. De plus, la stabilité joue un rôle prépondérant lorsque le polluant se comporte comme un gaz neutre, c'est-à-dire dans le champ lointain.

2 - Concernant l'influence de la vitesse du vent sur la dispersion, il apparaît qu'à une distance donnée, les concentrations calculées par PHAST 6.0 sont d'autant plus grandes que la vitesse du vent est élevée que ce soit pour un gaz dense ou pour un gaz neutre. Pour mémoire, il y a deux effets antagonistes :

- plus la vitesse du vent est grande, plus la turbulence et l'entraînement d'air dans le nuage sont importants, favorisant ainsi la dilution ;
- plus la vitesse du vent est grande, plus la vitesse d'advection du nuage est importante d'où des concentrations plus importantes à une distance donnée.

Dans ce cas de figure, PHAST 6.0 donnerait l'avantage à cette seconde influence. Même si cette tendance n'est pas celle attendue, il est toutefois utile de préciser que d'une part, à temps de transfert égal, la concentration calculée est bien d'autant plus faible que la vitesse de vent est grande et que, d'autre part, si l'attention se porte sur la dose reçue en un point et non plus la concentration moyenne, alors la dose reçue décroît avec la vitesse du vent. Ceci signifie que l'influence du vent est bien prise en compte dans le modèle.

En conclusion, la modélisation proposée pour la dispersion d'un nuage formé à la suite d'un rejet instantané prend en compte correctement l'influence des conditions météorologiques et orographiques.

4.2.2 Influence des autres paramètres lors d'un rejet instantané au sol et en altitude

Cette partie est consacrée à la dispersion de rejets instantanés au niveau du sol ou en altitude. L'objectif est d'estimer l'influence des conditions initiales sur la dispersion.

Paramètre	Conforme
Cohérence entre rejet au sol et rejet en altitude	Non
Température de rejet sur la dispersion d'un gaz neutre.	Non
Température de rejet sur la dispersion d'un gaz dense	Oui
Densité du produit sur les principaux résultats de la modélisation.	Oui
Densité du produit sur la distance sous le vent pour laquelle une concentration donnée est observée.	Oui
Densité du produit – problématique des gaz légers	Oui
Masse rejetée de gaz dense ou neutre	Oui

Tableau 8 : Synthèse de l'influence des paramètres sur la dispersion d'un gaz rejeté à la suite d'une ruine d'un réservoir

Concernant l'influence des paramètres, deux tendances observées suscitent des remarques :

1 - Concernant la cohérence des résultats entre un rejet au sol et un rejet en altitude de gaz dense, la tendance attendue pour un gaz neutre voudrait que plus un rejet se fait à une altitude élevée, plus la concentration observée au sol serait faible. Cette tendance est effectivement observée dans le cas du rejet d'un gaz neutre.

Dans le cas d'un rejet de gaz dense, cette tendance est observée en champ proche pour des hauteurs de rejets limitées à 10 m par contre, pour des hauteurs de rejet plus importantes, cette tendance s'inverse et plus le rejet est effectué en hauteur, plus les concentrations à une distance donnée sont importantes. Cette variation diffère de celle observée pour un gaz neutre. Il ne peut toutefois pas être exclu qu'elle soit légitime car, dans le cas d'un gaz dense, la dilution par effondrement du nuage dépend fortement de la forme du nuage. Il est possible que lors d'un rejet au voisinage du sol, la présence du sol entraîne une modification notoire de la géométrie du nuage par frottement et en raison également du cisaillement dû à la variation de la vitesse avec l'altitude dans cette zone. Dans le cadre de l'évaluation, il n'a pas été possible de déterminer à partir des connaissances actuelles si cette tendance est conforme à la réalité.

2 - L'étude de l'influence de la température de rejet sur la dispersion d'un gaz dont la masse molaire est voisine de celle de l'air, a montré que logiquement des modèles différents sont utilisés selon que la masse volumique du produit rejeté est inférieure (gaussien) ou supérieure (gaz dense) à celle de l'air ambiant. Pour mémoire, la masse volumique du produit rejeté est inférieure à celle de l'air ambiant lorsque sa température est supérieure à la température ambiante et vice-versa. Les tests réalisés montrent que les différents modèles utilisés donnent des tendances conformes à celles attendues au sein de leur de domaine de validité respectif.

Cependant, les tests montrent qu'il existe une discontinuité entre les deux modèles lorsque la température du produit est proche de celle de l'air ambiant. En effet, une discontinuité marquée apparaît lors du passage du modèle gaz dense (température inférieure à 275 K) au modèle gaz neutre (température supérieure à 290 K). Toutefois, cette discontinuité peut résulter de la difficulté rencontrée pour estimer les concentrations au niveau du sol lorsque le nuage décolle, c'est-à-dire lorsque la masse volumique du polluant est inférieure à celle de l'air ambiant. Par conséquent, il n'est pas possible de préciser si c'est le modèle ou l'exploitation des résultats qui est à l'origine de cette discontinuité.

Notons que dans le cas du rejet d'un gaz neutre à quelques mètres d'altitude, la discontinuité due au passage gaz dense/ gaz neutre est bien moins marquée que dans le cas d'un rejet au sol.

En conclusion, l'origine de la discontinuité des résultats entre les deux modèles gaz lourd et gaussien dans le cas d'un rejet de gaz dont la masse molaire est proche de celle de l'air ambiant n'est pas identifiée (modèle ou exploitation des résultats. Dès lors, il conviendra d'être prudent lors de l'utilisation de ce type de rejet, en particulier si la masse volumique du produit rejeté est inférieure à celle de l'air ambiant.

Par ailleurs, l'étude de l'influence de l'altitude de rejet pour les rejets instantanés de gaz denses a mis en évidence un comportement inattendu qui ne peut toutefois pas être totalement remis en question au vu des connaissances actuelles.

4.3 REJET CONTINU

4.3.1 Paramètres météorologiques et orographiques

Les paramètres météorologiques et orographiques étudiés sont :

- la stabilité atmosphérique ;
- l'humidité ;
- la rugosité du sol ;
- la vitesse du vent.

Paramètre	Conforme
Classes de la stabilité atmosphérique	Oui
Humidité	Oui
Rugosité du sol	Oui
Vitesse du vent dans le cas d'un rejet au sol	Oui
Vitesse du vent dans le cas d'un rejet en altitude	Oui

Tableau 9 : Synthèse de l'influence des paramètres orographiques sur la dispersion de gaz émis au travers d'une fuite.

Tous les résultats des tests effectués ont été conformes à ceux attendus.

4.3.2 Rejet continu de gaz

Les rejets examinés se font de façon continue soit au niveau du sol, soit en altitude et sont orientés horizontalement ou verticalement.

Les paramètres étudiés sont :

- le débit massique ;
- la vitesse de rejet ;
- la température du gaz rejeté ;
- la densité du gaz rejeté ;
- la densité du gaz rejeté (problématique des gaz légers) ;
- et pour les rejets en altitude, la hauteur de rejet.

4.3.2.1 Rejets continus horizontaux au sol et en altitude

Concernant les rejets continus au sol et en altitude, les tests montrent que les tendances attendues sont globalement observées. Le cas échéant, des commentaires sont apportés à certains tests.

Paramètre	Conforme
Débit massique sur la dispersion d'un gaz neutre	Oui
Débit massique sur la dispersion d'un gaz dense	Oui
Vitesse de rejet sur la dispersion d'un gaz neutre	Oui*
Vitesse de rejet sur la dispersion d'un gaz dense	Oui*
Température de rejet sur la dispersion d'un gaz neutre	Oui
Température de rejet sur la dispersion d'un gaz dense	Oui
Densité d'un produit sur sa dispersion	Oui
Densité d'un produit sur sa dispersion – Problématique des gaz légers	Oui
Hauteur de rejet sur la dispersion	Oui

* : la tendance observée est différente de celle attendue mais elle semble toutefois légitime, ce point est développé par la suite.

Tableau 10 : Synthèse de l'influence des paramètres sur la dispersion d'un gaz émis horizontalement à la suite d'une fuite

S'agissant de l'influence de la **vitesse de rejet**, la tendance attendue spécifiait que la concentration en un point donné devait diminuer lorsque la vitesse du rejet augmentait. Cette tendance attendue n'est observée que dans le champ proche, dans le champ lointain, c'est la tendance inverse qui est observée. Ceci semble toutefois logique car la vitesse de rejet pilote la dispersion uniquement dans le champ proche, en effet, dans le champ lointain, la vitesse du mélange d'air et de polluant est égale à celle du vent. De plus, après analyse du phénomène, il semble que la tendance observée soit correcte.

Les résultats obtenus montrent que :

- Que le gaz émis soit neutre ou dense, le début de la phase passive se produit plus loin lorsque la vitesse de rejet augmente. Ceci traduit le fait que la phase de mélange pilotée par la quantité de mouvement du jet perdure plus longtemps (à la fois pour un rejet au sol et un rejet en altitude).
- Pour les points proches de la source, la concentration diminue pour des vitesses plus grandes, ce qui correspond à une meilleure dilution du rejet (à la fois pour un rejet au sol et un rejet en altitude).
- Par contre, dans le champ lointain, (pour les rejets au sol et pour les gaz neutres rejetés en altitude), les résultats ont été considérés au premier abord comme peu cohérents montrant une concentration augmentant à mesure que la vitesse est importante.

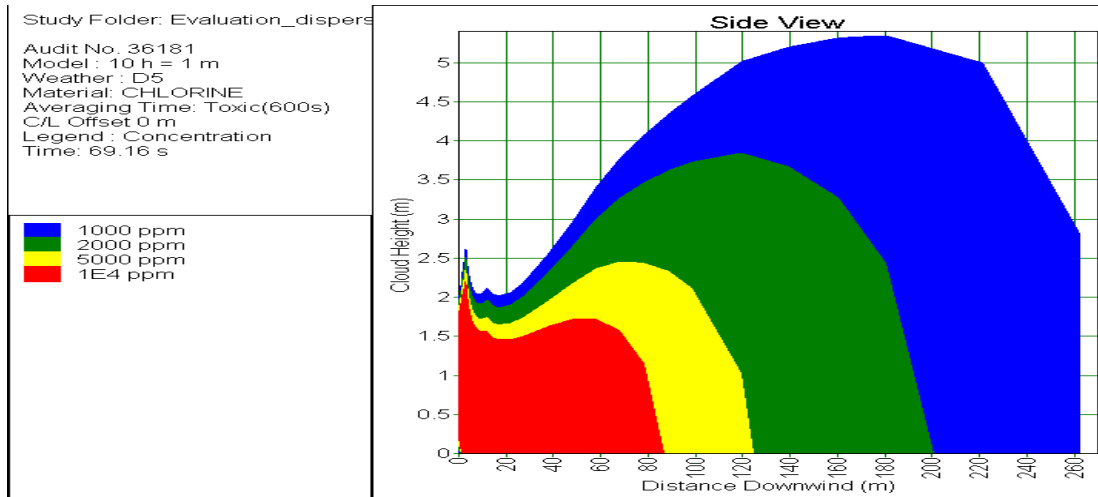
Compte tenu de ces observations, une analyse plus fine des résultats obtenus a été conduite, cette analyse a montré que :

- plus la vitesse de rejet est importante, plus la dilution au sein du nuage est importante et plus loin le jet va toucher le sol,
- lorsque le jet touche le sol, le logiciel PHAST 6.0 passe en mode "Phase dense". L'effondrement du nuage est alors d'autant plus important que sa masse volumique est élevée.

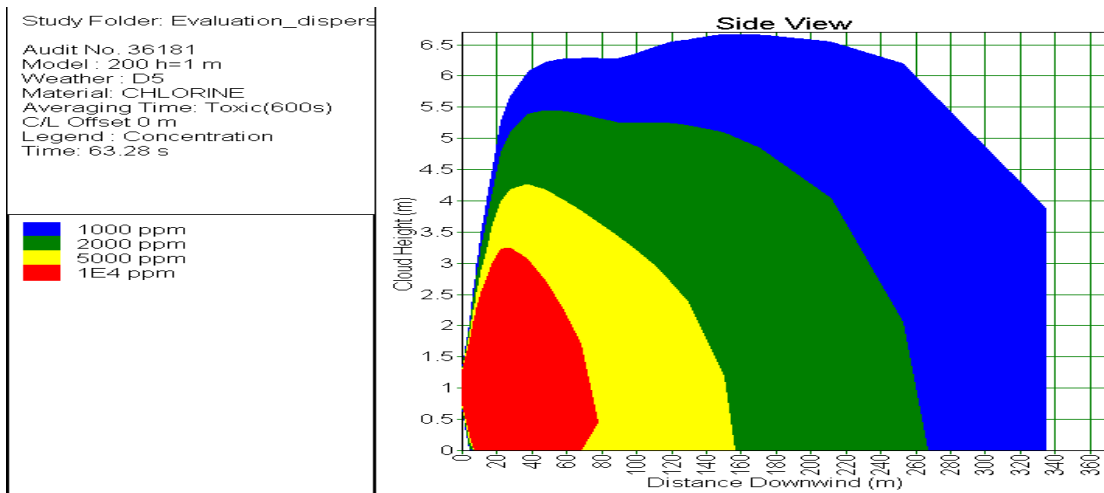
Autrement dit, plus la vitesse est importante, plus le nuage sera dilué avant de toucher le sol et moins sa masse volumique sera grande. Dans ce cas, lors du changement de modèle (passage du modèle de jet au modèle de gaz dense) l'entraînement d'air par effondrement du nuage sera plutôt faible, ce dernier étant principalement piloté par la différence de densité. A l'inverse, plus la vitesse est faible, plus le jet touchera vite le sol et plus la masse volumique du nuage sera importante à ce moment. Dans ce cas, l'entraînement d'air par effondrement du nuage sera plutôt important.

Il semble donc bien qu'il y ait deux modes de dilution possibles, à savoir une dilution du nuage en phase de jet à comparer avec la dilution du nuage dû à son effondrement.

Pour plus de précisions, il a été décidé de relever les distances auxquelles le jet touche le sol ainsi que la masse volumique du nuage. Ces résultats montrent qu'effectivement, plus la vitesse de rejet est faible, plus la masse volumique du nuage lorsqu'il touche le sol est importante. L'influence de ce résultat peut être visualisée graphiquement en étudiant une coupe transversale du nuage.



Profil du nuage (v=10 m/s)



Profil du nuage (v=200 m/s)

Ces graphiques montrent clairement un effondrement significatif du nuage pour une vitesse de rejet faible alors que dans le cas d'une vitesse élevée, cet effondrement est bien moins marqué.

En conclusion, il s'avère que PHAST 6.0 prend en compte les deux effets de dilution prépondérants pour un rejet de gaz dense :

- D'une part la phase de jet au cours de laquelle c'est le rejet le plus rapide qui est le mieux dilué
- et d'autre part une phase d'effondrement du nuage en raison de sa plus grande densité.

Il ressort de la comparaison que toutes choses égales par ailleurs, que c'est la phase d'effondrement qui conduit à une meilleure dilution du nuage. En réalité, en l'état actuel des connaissances, il n'est pas possible d'identifier au préalable quel est le mécanisme qui va présider à la dilution du nuage de polluant. Par conséquent, dans le cadre de l'évaluation, cette tendance n'est pas remise en cause.

Concernant la variation de **la température du rejet**, les résultats des tests montrent que la température initiale n'a que peu d'influence sur les résultats. Par conséquent, même si cela ne correspond pas à la tendance attendue, ce point n'est pas considéré comme rédhibitoire.

Il est important de préciser également que, dans le cas du rejet d'un gaz de masse molaire proche de celle de l'air, aucune discontinuité n'est observée au niveau des résultats lorsque la température de rejet varie. Pour mémoire, une discontinuité apparaît dans ce cas pour les rejets instantanés.

En conclusion, les tendances observées sont jugées cohérentes dans leur ensemble dans le cas de rejets continus horizontaux.

4.3.2.2 Rejets continus verticaux au sol ou en altitude

Concernant les rejets verticaux, la conformité des tendances attendues lors de l'évolution des différents paramètres est précisée dans le Tableau 11.

Paramètre	Conforme
Débit massique sur la dispersion d'un gaz neutre	Oui
Débit massique sur la dispersion d'un gaz dense	Oui
Vitesse de rejet sur la dispersion d'un gaz neutre	Oui
Vitesse de rejet sur la dispersion d'un gaz dense	Oui
Température de rejet sur la dispersion d'un gaz neutre	Oui
Température de rejet sur la dispersion d'un gaz dense	Oui
Densité d'un produit sur sa dispersion	Oui
Densité d'un produit sur sa dispersion – Problématique des gaz légers	Oui
Hauteur de rejet sur la dispersion	Oui

Tableau 11 : Synthèse de l'influence des paramètres sur la dispersion d'un gaz émis verticalement à la suite d'une fuite

Au sol ou en altitude, concernant la variation de **la température du rejet**, pour les gaz neutres, les résultats montrent que la dilution est meilleure avec l'augmentation de température ce qui est compatible avec une élévation du nuage.

Il est à noter que pour les rejets verticaux, aucune discontinuité n'est apparue entre les cas où le produit rejeté est plus lourd que l'air et le cas où il est plus léger que l'air.

En conclusion, les tendances observées sont globalement conformes à celles attendues pour le cas de rejet continus verticaux.

4.3.3 Autres points abordés

Lorsque l'option d'un profil de vent logarithmique est choisie, la vitesse du vent varie en fonction de l'altitude (elle est plus petite que la valeur spécifiée en dessous de la hauteur de référence et plus grande au-dessus).

La valeur de la vitesse du vent affectant le nuage est celle existant à la hauteur du centre du nuage. Aussi, lorsque le centre du nuage est en dessous de la hauteur de référence ce qui est généralement le cas dans les premiers instants de la dispersion pour les rejets au niveau du sol, la vitesse du vent affectant le nuage est inférieure à la valeur spécifiée. A mesure que la dispersion se poursuit, le nuage prend des dimensions plus grandes et l'altitude du centre du nuage augmente pour devenir supérieure à la hauteur de référence. Dans ce cas, la vitesse du vent affectant le nuage est supérieure à la valeur spécifiée.

Ainsi, la vitesse du nuage peut dans un premier temps diminuer pour ensuite augmenter dans un deuxième temps.

4.4 CONCLUSION SUR L'ÉVALUATION DE LA DISPERSION

Concernant la dispersion atmosphérique, il faut retenir les points suivants :

- Pour un rejet instantané
 - Les modèles proposés prennent bien en compte les conditions météorologiques ainsi que les conditions orographiques.
 - Deux modèles sont principalement utilisés dans le cas d'un rejet instantané, les résultats de ces deux modèles évoluent correctement au sein de leur domaine de validité. Toutefois, une discontinuité des résultats entre les deux modèles (gaz lourd, gaz neutre) a été observée dans le cas d'un rejet de gaz de même masse molaire que l'air dont la température initiale varie. Toutefois, cette discontinuité relève pour partie de la difficulté rencontrée pour estimer les concentrations au niveau du sol lorsque le nuage décolle, c'est-à-dire lorsque la masse volumique du polluant est inférieure à celle de l'air ambiant. Il convient dès lors d'être prudent lors de l'utilisation de ce modèle pour des rejets de substances dont la masse volumique est inférieure à celle de l'air ambiant.
 - l'influence de l'altitude de rejet pour les gaz denses sur les concentrations en aval n'est pas celle attendue, mais il ne peut toutefois pas être exclu quelle soit légitime. Les tests réalisés dans le cadre de cette évaluation ne permettent pas de trancher.
- Pour un rejet continu horizontal ou vertical, les tendances observées sont globalement conformes à celles attendues.

Il est également important de rappeler que des améliorations importantes ont été apportées sur certains modèles employés, en particulier, le modèle pour les rejets diphasiques. De plus, les différents modèles employés ont fait l'objet de modifications de sorte que chacun d'entre eux s'appuie indépendamment des autres sur des essais ou des modèles développés par ailleurs. En d'autres termes, ceci signifie qu'un effort important a été réalisé pour qu'il n'y ait plus de paramètre global d'ajustement. De plus, des efforts ont également été réalisés pour soigner la transition entre les différents modèles. Ces efforts ne sont pas anodins car ils permettent de s'affranchir des « sauts » de concentration qui pouvaient être observés avec les versions précédentes lors d'un changement de modèle.

De plus, l'évaluation du logiciel a mis en évidence la difficulté pour exploiter de manière correcte les résultats, notamment au niveau des fichiers « Reports ». Ainsi, si le logiciel PHAST 6.0 présente d'indéniables avantages par rapport à la version 4.2 en terme d'introduction de données, de maîtrise des paramètres d'entrée..., en revanche, l'exploitation des résultats a été rendue largement plus délicate.

La nouvelle version permet, toutefois pour certains scénarios d'obtenir des animations qui permettent de suivre l'évolution au cours du temps du panache ou du nuage formé à la suite d'un rejet instantané.

