

ext_mercure

Report generated: Mon Jun 25 15:02:03 CEST 2018

Table of contents

- 1 Project properties
- 2 Materials/Species
- 3. Model description
 - 3.1. Constantes_Reglages
 - 3.2. Par_Subst
 - 3.3. Conc_gaz_air_exterieur
- 4 Simulation settings



1. Project properties

Project name	ext_mercure
Author	X
Description	Modele_base : version 2.0.1

CHAMP D'UTILISATION

MODUL'ERS est un outil logiciel pour la réalisation des évaluations de risque prospectives effectuées dans le cadre de l'analyse des effets pour la santé des installations classées et pour la réalisation des Analyses de Risques Résiduels des sites et sols pollués.

Il est donc avant tout orienté vers l'estimation des expositions et des risques chroniques pour une source de contamination locale.

Toutefois, les concentrations dans les milieux et les niveaux d'exposition sont également données en fonction du temps. La représentativité de ces données de sortie dépend de celles des données d'entrée et des hypothèses sur lesquelles reposent les modèles utilisés (calcul dynamique ou à l'état stationnaire, temps nécessaire pour satisfaire une hypothèse d'équilibre,...). Le détail de ces hypothèses est présenté dans le document "Jeux d'équations pour la modélisation des expositions liées à la contamination d'un sol ou aux émissions d'une installation industrielle" (référence INERIS DRC-08-94882-16675B).

MODUL'ERS peut être utilisé pour des substances organiques et inorganiques. Toutefois, dans sa version actuelle, MODUL'ERS ne prend pas en compte le pH des milieux et ne calcule pas la fraction ionisée des substances organiques partiellement ionisables. Pour étudier les substances organiques partiellement ionisables, il peut être nécessaire d'ajuster les paramètres relatifs aux substances en fonction de la répartition entre la forme neutre et la forme ionisée dans le milieu. Pour le mercure, MODUL'ERS donne des valeurs de paramètres pour les formes inorganique et organique, mais n'estime pas la répartition des deux formes dans les différents milieux.

2. Materials/Species

Materials


Name	Enabled
Mercure	Yes

3. Model description

Interaction Matrix

Constantes Reglages	Constantes Reglages to Conc gaz air exterieur		1
	Conc gaz air exterieur		2
	Par Subst to Conc gaz air exterieur	Par Subst	3
1	2	3	

3.1. Constantes Reglages


Constantes Reglages		Sub-system
Id	Constantes_Reglages	
Enabled flag	Yes	
Symbol	Constantes Reglages	
Object	Output	Sub-system
organique	organique	Conc gaz air exterieur
type Polluant	type Polluant	Conc gaz air exterieur
inorganique	inorganique	Conc gaz air exterieur

Parameter changes

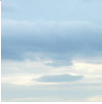
Vector parameters

Full Name	Symbol	Unit				
Age minimal de chaque classe d'âge	Age _{min,classes}	year				
Description						
sert au calcul de la dose d'exposition de l'individu en fonction de son âge (effets cancérogènes). Pour chaque classe d'âge à prendre en compte, définir l'âge minimal. Les classes doivent se succéder selon l'âge croissant. Pour les classes non utilisées, laisser la valeur infinie par défaut.						
Classes_d'age	Value	Predefined	Min value	Max value	PDF	Predefined
classe_1	0.0					
classe_10	Infinity					
classe_2	6.0	1.0				
classe_3	Infinity	3.0				
classe_4	Infinity	6.0				
classe_5	Infinity	11.0				
classe_6	Infinity	15.0				
classe_7	Infinity	18.0				
classe_8	Infinity					
classe_9	Infinity					

3.2. Par Subst

Par Subst		Sub-system
Id	Par_Subst	
Enabled flag	Yes	
Symbol	Par Subst	
Description	Définir ici les valeurs des données d'entrée communes à plusieurs modules de calcul, si nécessaire. Cela permet d'utiliser les mêmes valeurs de données d'entrée pour estimer les concentrations dans différents modules. Seules les données connectées nécessitent d'être définies par l'utilisateur.	
Object	Output	Sub-system
S	S	Conc gaz air extérieur
Pvap Ta	Pvap Ta	Conc gaz air extérieur
Koc	Koc	Conc gaz air extérieur
Da	Da	Conc gaz air extérieur
3271495A-BC55-DBC1-6A0F-9FA88F086D9B	logKoc	Conc gaz air extérieur
M	M	Conc gaz air extérieur
Tm	Tm	Conc gaz air extérieur
De	De	Conc gaz air extérieur

3.3. Conc gaz air exterieur

Conc gaz air exterieur		Sub-system
Id	Conc_gaz_air_exterieur	
Enabled flag	Yes	
Symbol	Conc gaz air exterieur	
Description	<p>Le module permet le calcul du flux d'émission à partir d'une source sol ou d'une source nappe et l'estimation des concentrations attendues dans l'air.</p> <p>Dans les deux cas, l'utilisateur peut définir les caractéristiques de 2 couches de sol différentes au-dessus de la source (sauf pour le calcul du flux de diffusion à partir d'une source sol finie). Ces couches de sol sont numérotées de la source vers la surface. Si une seule couche de sol a besoin d'être renseignée entre la source et la surface d'émission (sol homogène), renseigner la couche numérotée 2 et laisser les valeurs par défaut des données d'entrée pour la couche 1.</p> <p>Dans le cas d'une source nappe, la concentration devra être définie comme une constante . Il sera possible de considérer des remontées capillaires jusqu'à la surface ou non et la diffusion du polluant dans la nappe ("aquifère mal mélangé") en plus du transfert dans la frange capillaire.</p> <p>Dans le cas d'une source sol, si la distance entre la source et la surface du sol est non nulle, le flux de diffusion devra être calculé en considérant l'état de la source stationnaire (ce qui correspond à une source sol infinie), avec ou sans remontées capillaires à la surface. En définissant le volume de la source, il est néanmoins possible de limiter le flux d'émission émis à un instant t par la quantité initiale de polluant dans le sol, divisée par t et la surface d'émission (cf. voir équation 1.2.33 du document INERIS-DRC-08-94882-16675B). Par ailleurs, avec cette approche, la concentration dans l'air du sol peut être calculée en tenant compte ou non du mélange de substances présentes dans le sol et en appliquant ou non la loi de Raoult pour cela.</p> <p>Dans le cas d'une source sol, si la distance entre la source et la surface du sol est nulle, le flux de diffusion devra être calculé en utilisant l'approche de Jury (1984) : approche avec une source-sol finie.</p> <p>Pour le calcul de la concentration inhalée par les cibles, il est possible, en plus des sources sol ou nappe, de tenir compte de la concentration de polluant liée à d'autres sources de polluants issues du site. Pour définir cette concentration et la concentration de bruit de fond dans l'air, l'utilisateur peut définir les concentrations incluant les fractions gazeuse et particulaire (Ca_e_autres_sources_sites et Ca_e_BF respectivement) ou les concentrations gazeuses seules (Cag_e_autres_sources_sites_E et Cag_e_BF). Dans le premier cas, la fraction gazeuse sera calculée à partir de l'équation 1.1.35 du rapport sur les Jeux d'équation.</p> <p>La concentration inhalée par les cibles est calculée à la hauteur de respiration de ces cibles. Il est aussi possible de calculer la concentration dans l'air à une hauteur Hb différente (exemple hauteur des fenêtres pour connecter cette donnée au module Conc_gaz_air_int_Volasoil et tenir compte de l'apport de polluant dans le bâtiment à partir de l'extérieur).</p> <p>Le module calcule également les concentrations moyennes inhalées par an par les différentes cibles et la concentration moyenne inhalée par un individu rapportée à la durée d'exposition.</p> <p>Voir le chapitre 1.2 Partie B du rapport Jeux d'équations pour la modélisation des expositions liées à la contamination d'un sol ou aux émissions d'une installation industrielle.</p>	
Object	Input	Sub-system
type Polluant	type Polluant	Constantes Reglages
Da	Da	Par Subst

M	M	Par Subst
Tm	Tm	Par Subst
organique	organique	Constantes Reglages
Pvap _{Ta}	Pvap _{Ta}	Par Subst
logKoc	3271495A-BC55-DBC1-6A0F-9FA88F086D9B	Par Subst
inorganique	inorganique	Constantes Reglages
S	S	Par Subst
Koc	Koc	Par Subst
De	De	Par Subst

General variable changes

Vector general variables

Full Name	Symbol	Unit
definition_Cas_source_sol	definition Cas source sol	
Description		
A définir si definition_flux_J=source_sol_infinie ou si definition_flux_J= source_sol_finie.Sélectionner le mode d'estimation de la concentration dans l'air du sol, attribuable à la source sol étudiée (hors bruit de fond) : valeur définie par l'utilisateur ou valeur calculée.		
Materials	Value	Predefined value
Mercure	valeur_calulee	Conc_gaz_air_exterieur.valeur_entree

Full Name	Symbol	Unit
definition_Cinh	definition Cinh	
Description		
Sélectionner la concentration à prendre en compte pour le calcul du niveau d'exposition des cibles. Il peut s'agir d'une valeur calculée par le modèle : concentration attribuable au site (valeur_Cag_e_inh_attrib) ou concentration totale (valeur_Cag_e_inh_tot) ou d'une valeur définie par l'utilisateur (valeur entree)		
Materials	Value	Predefined value
Mercure	valeur_Cag_e_inh_tot	Conc_gaz_air_exterieur.valeur_entree

Full Name	Symbol	Unit
definition_flux_J	definition flux J	
Description		
A si definition_Cinh est différent de valeur_entree ou si l'utilisateur veut calculer la concentration gazeuse à la hauteur Hb. Sélectionner le mode d'estimation du flux d'émission à utiliser pour le calcul de la concentration dans l'air extérieur attribuable à la contamination du sol ou de la nappe : valeur calculée par le modèle pour une source-nappe sans remontées capillaires à la surface, pour une source-nappe avec remontées capillaires jusqu'à la surface, pour une source-sol finie, pour une source-sol infinie ou valeur définie par l'utilisateur. Si la source sol affleure à la surface, sélectionner source-sol finie.		
Materials	Value	Predefined value
Mercure	source_sol_infinie	Conc_gaz_air_exterieur.valeur_entree

Parameter changes

Scalar parameters

Full Name	Symbol	Unit			
Dimension de la source parallèle à la direction du vent	Dim _{source,sol}	m			
Description					
A définir si definition_C_inh est différent de valeur_entree ou si l'utilisateur veut calculer la concentration gazeuse à la hauteur Hb. Sert au calcul des concentrations gazeuses dans l'air extérieur attribuable au sol ou à la nappe					
Value	Predefined	Min value	Max value	PDF	Predefined
110.0	0.0				

--

Full Name				Symbol	Unit
Porosité de la couche contenant la source sol				Porosite _{couche,source}	unitless
Description					
A définir si definition_Flux_J=source_sol_finie ou definition_Flux_J=source_sol_infinie					
Value	Predefined	Min value	Max value	PDF	Predefined
0.25	0.0	0.25	0.5		
Comment					
Vérifié. Sols sableux : 0,25 à 0,4 (0,4 par défaut) ; sols limoneux et argileux : 0,35 à 0,5 (0,45 par défaut)					

Full Name		Symbol		Unit	
Porosité de la couche de sol 2		n ₂		unitless	
Value	Predefined	Min value	Max value	PDF	Predefined
0.25	0.0	0.3	0.7		
Comment					
Vérifié. Sols sableux : 0,4 par défaut : sols limoneux et argileux : 0,5					

Vector parameters

Full Name				Symbol		Unit	
Concentration au niveau de la source sol (hors bruit de fond)				Cs _{source,sol}		mg kg ⁻¹	
Description							
A définir si 1) definition_J= source_sol_finie ou 2) definition_Cas_source=valeur_calculée ou 3) definition_J= source_sol_infinie ou 4) melange_source_sol=oui. Concentration dans le sol prise en compte pour le calcul des émissions de polluants gazeux à partir du sol vers l'air extérieur (concentration hors bruit de fond). Pour le calcul du flux, si definition_J= source_sol_infinie et si la concentration de la source n'est pas connue, laisser la valeur par défaut (le flux maximal émis lié à la quantité initiale de polluant présente dans le sol ne sera alors pas pris en compte).							
Materials	Value	Predefined	Min value	Max value	PDF	Predefined	
Mercure	0.37	0.0					

Full Name				Symbol		Unit	
Epaisseur de la couche 2 de la ZNS (située entre la couche 1 et la surface du sol)				l ₂		m	
Description							
Epaisseur de la couche 2 de la zone insaturée du sol (situé entre la surface et la couche1). A définir si definition_flux_J =source_sol_infinie ou si definition_Cas_source_nappe=valeur_calculée. Si definition_flux_J =source_sol_infinie, l'épaisseur de la couche 2 doit être supérieure à 0 (approche ne pouvant pas être utilisée pour une source sol affleurant à la surface)							
Materials	Value	Predefined	Min value	Max value	PDF	Predefined	
Mercur	0.05	0.0					

Full Name	Symbol	Unit
Hauteur de respiration de la cible	H _{resp}	m
Description		

doit être supérieure à 0

Classes_d'age	Value	Predefined	Min value	Max value	PDF	Predefined
classe_1	1.0	0.3				
classe_10	0.0					
classe_2	1.7	0.7				
classe_3	0.9					
classe_4	1.1					
classe_5	1.35					
classe_6	1.5					
classe_7	1.55					
classe_8	0.0					
classe_9	0.0					
Classes_d'age	Comment					
classe_1	Se rapporte à un enfant assis					
classe_10						
classe_2	Estimé à partir de la taille					
classe_3	Estimé à partir de la taille					
classe_4	Estimé à partir de la taille					
classe_5	Estimé à partir de la taille					
classe_6	Estimé à partir de la taille					
classe_7	Estimé à partir de la taille					
classe_8						
classe_9						

Full Name					Symbol	Unit
Kd_source_sol_E (Coefficient de partition particules du sol-eau du sol pour la couche de sol contenant la source sol)					Kd _{source,sol,E}	l kg ⁻¹
Description						
Valeur définie par l'utilisateur. A définir si definition_Flux_J=source_sol_finie ou definition_Cas_source_sol=valeur_calculées. L'utilisateur doit définir pour chaque substance une valeur soit pour Kd_source_E, soit pour log Kd_source_E, soit pour Koc, soit pour log Koc (en l'absence de connexion pour ce paramètre à partir de modules amont)						
Materials	Value	Predefined	Min value	Max value	PDF	Predefined
Mercure	1000.0	-1.0	0.22	631000.0	Logn4(3980.0,5.0,0.22,631000.0)	
Materials	Comment					
Mercure	Distribution relative au mercure inorganique. Pour le mercure organique (méthylmercure) : voir colonne Comment de logKd_source_sol_E					

Full Name					Symbol	Unit
Vitesse du vent dans la boîte à la hauteur de respiration des cibles					u_{Hresp}	$m\ s^{-1}$
Classes_d'age	Value	Predefined	Min value	Max value	PDF	Predefined
classe_1	2.0	0.0				
classe_10	0.0					
classe_2	2.0	0.0				
classe_3	0.0					

classe_4	0.0
classe_5	0.0
classe_6	0.0
classe_7	0.0
classe_8	0.0
classe_9	0.0

Lookup table changes

Scalar lookup tables

Full Name	Symbol	Unit
Teneur en eau de la couche contenant la source sol	Θ couche,source	unitless
Description		
A définir si definition_Flux_J=source_sol_finie ou definition_Cas_source_sol=valeur_calculée		
sables : de 0,04 à 0,26, limons : de 0,05 à 0,35, argile : 0,08 à 0,35 (USEPA, 2004; Bruand, 2004)		
Cyclic option		
No		
Interpolation		
Interpolation-Use End Values		
Time	Values	
Predefined	0.0:0.0	
0.0	0.15	

Full Name	Symbol	Unit
Teneur en eau de la couche de sol 2	Θ couche2	unitless
Description		
A définir en fonction du bilan hydrique		
A définir en fonction du bilan hydrique, sables : de 0,04 à 0,28, limons : de 0,1 à 0,34, argile : 0,15 à 0,39 (Bruand, 2004 ; EPFL, 2006 ; Cornell University)		
Cyclic option		
No		
Interpolation		
Interpolation-Use End Values		
Time	Values	
Predefined	0.0:0.0	
0.0	0.15	

4. Simulation settings

Simulation type	Deterministic
Start time	0.0 Years
End time	30.0 Years
Output option	Produce specified output only
Time series	Linear Increment(start,end,1.0)
Solver	NDF
Absolute tolerance	Auto
Relative tolerance	0.0010
Initial step size	1.0E-5
Maximum step size	0.5
Minimum step size	Auto
Refine output	1
Limit number of data points to last	1000
Control error relative to norm of solution	No
Allowed number of step size violations	1
Enable saturation	Yes
Maximum order	5
LU decomposition matrix format	Dense