

DEVELOPPEMENT D'UN DISPOSITIF PORTABLE POUR LE PRELEVEMENT DES AEROSOLS SEMI-VOLATILS PAR SIMULATIONS NUMERIQUES

N. REKEB¹, B. SUTTER¹ E. BELUT¹ et E. GEHIN²

¹INRS, 1 rue du Morvan, F-54500 Vandœuvre, France

²CERTES, 61 avenue du Général de Gaulle, 94010, Créteil, France

*Courriel de l'orateur : noredine.rekeb@inrs.fr

TITLE Development of a personal semi-volatile aerosol dichotomous sampler using numerical simulation

RESUME

Les aérosols semi-volatils sont simultanément présents dans l'air sous forme particulaire et gazeuse et sont de nature chimique très diverse. Supposant des effets sur la santé différents des phases particulaires et gazeuses, l'évaluation de l'exposition des salariés nécessite le prélèvement et la collecte séparée de chaque phase. Cet article rapporte les résultats de simulations numériques 2D axisymétriques et 3D réalisées sur un nouveau dispositif de prélèvement appelé SADS, et basé sur le principe de l'impacteur virtuel. Ces simulations ont permis de mettre en lumière les phénomènes physiques réduisant l'efficacité de séparation des deux phases.

ABSTRACT

Semi-volatile aerosols are simultaneously present in the particle and vapour phase, and have a high chemical diversity. Considering different effects of the phases on human health, the exposure assessment of the workers requires to sample these phases separately. This article reports numerical 2D axisymmetric and 3D numerical simulation results carried on a new sampler called SADS (Semi-volatile Aerosol Dichotomous Sampler), based on the virtual impactor principle. These numerical simulations highlighted the physical phenomena decreasing the separation efficiency of the device.

MOTS-CLES : Aérosols semi-volatils, SADS, CFD, Efficacité de séparation / **KEYWORDS**: Semivolatile aerosol, SADS, CFD, Separation efficiency.

1. INTRODUCTION

La norme NF EN 13936 définit un composé organique semi-volatile (COSV) selon sa pression de vapeur saturante, comprise entre 0,001 et 100 Pa. Ces pressions de vapeurs saturantes faibles se traduisent par une présence simultanée d'une phase condensée (liquide ou solide) et gazeuse dans les conditions ambiantes de pression et température. Or chacune de ces phases doit être quantifiée séparément, car elles ont des effets différents sur l'organisme humain (Volckens, 2003) : prélever une seule des deux phases présentes résulterait en une estimation erronée de l'exposition des personnes aux COSV. Les techniques existantes telles que les tubes dénuder, les précipitateurs électrostatiques ou les prélèvements sur filtre sont entachées de biais importants dus à l'évaporation des particules collectées dans les dispositifs au cours du prélèvement.

L'objectif de cet article est d'étudier un nouveau type d'impacteur virtuel pour le prélèvement des COSV permettant la séparation et la collecte des fractions particulaires et vapeurs sans biais. Le Semi-Volatile Aerosol Dichotomous Sampler (SADS) a été étudié préalablement par Kim *et al.* de l'université de Minnesota en 2009 (Kim & Raynor, 2009) et ses performances évaluées numériquement et expérimentalement. Cependant, il existe un écart important entre les résultats de simulations numériques en 2D axisymétrique et les résultats expérimentaux de Kim *et al.*, pouvant être expliqué en partie par une méthodologie de simulation numérique non adaptée. Ainsi, sur la base des résultats expérimentaux disponibles dans la littérature, nous avons réalisé des simulations 2D axisymétriques et 3D selon une méthodologie plus appropriée au problème afin d'identifier les paramètres qui influencent l'efficacité de séparation des particules et vapeurs dans le dispositif.

Le principe de fonctionnement du SADS est schématisé en figure 1. L'aérosol semi-volatile, constitué d'un mélange de particules et de vapeurs, est aspiré à l'intérieur du dispositif à l'aide d'une pompe à un débit de 2,1 l/min. Le mélange est accéléré par une buse d'accélération et est projeté en direction d'une buse de collecte qui lui est opposée. L'inertie acquise par les particules permet à celles-ci de poursuivre leur trajectoire vers la buse de collecte alors qu'un prélèvement de la phase gazeuse, perpendiculairement aux axes des buses, est effectué. Ainsi, le prélèvement des particules et vapeurs issues de la buse de collecte permet de déterminer les concentrations en particules et vapeur cumulées, alors que le prélèvement perpendiculaire à l'axe des buses permet de déterminer la concentration en vapeurs. Néanmoins, les particules les plus petites

< 0,1 µm et donc non inertielles, peuvent aussi être dirigées vers le prélèvement de la phase vapeurs, diminuant l'efficacité de séparation des deux phases et biaisant ainsi les résultats.

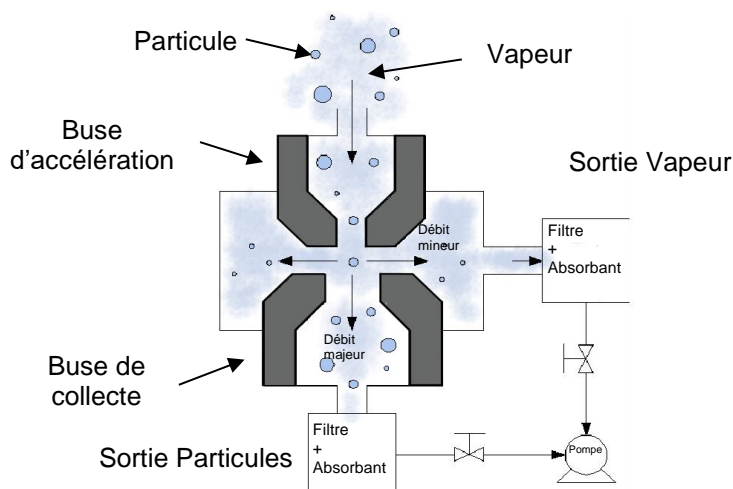


Figure 1: Semi-volatile Aerosol Dichotomous Sampler.

L'efficacité de séparation est calculée suivant la relation :

$$\eta = \frac{\dot{m}_{particule}}{\dot{m}_{total}} \quad (1)$$

Avec η l'efficacité de séparation, \dot{m}_{total} et $\dot{m}_{particule}$ les débits massique de particule à l'entrée et à la sortie particules

L'efficacité de séparation présentée par Kim et al. (2009) peut être interprétée pour suivre cette définition à l'aide de la relation :

$$\eta = 1 - \frac{1}{7}(1 - \eta_{kim}) \quad (2)$$

Avec η_{kim} l'efficacité de séparation présentée par Kim et al. (2009).

2. MODELISATION NUMERIQUE

L'écoulement étudié est diphasique car constitué d'une phase continue (gazeuse) et d'une phase discrète (particules). La phase continue est considérée comme un fluide newtonien, incompressible dont l'écoulement est stationnaire et la turbulence prise en compte grâce à l'approche RANS (Reynolds Averaged NavierStokes). La phase discrète est modélisée par une gamme de particules sphériques indéformables dont le diamètre est compris entre 0.01µm et 2µm. La fraction volumique des particules dans la phase continue est supposée suffisamment faible ($\alpha_p < 10^{-6}$) pour ne pas avoir d'effet sur l'écoulement (approche one-way coupling). Lorsqu'une particule évolue dans le dispositif, les principaux mécanismes qui interviennent sont la diffusion brownienne, le dépôt aux parois dû à l'impaction inertielle et la dispersion turbulente. La sédimentation, Thermophorèse, diffusionphorèse, les forces électriques ne sont pas prises en compte dans les simulations. Une description lagrangienne est utilisée pour les simulation 2D axisymétrique et 3D, afin de modéliser les trajectoires des particules. Une attention particulière a été portée à l'injection de particules en 2D axisymétrique qui a été revue pour représenter correctement la réalité, par rapport à la méthodologie utilisée par Kim et Raynor (2009). Une subroutine permettant de pondérer le débit massique des particules injectées a été spécifiquement développée pour obtenir une répartition surfacique uniforme des particules pénétrant dans le dispositif. L'injection de particules en simulations 3D a été réalisée également en imposant une répartition surfacique uniforme des particules en entrée.

3. RÉSULTATS

3.1 Calculs numériques de la phase continue

Les pertes de charge dans le dispositif publiées par Kim et Raynor (2009) permettent de valider la qualité de nos simulations numériques. Une étude de convergence en maillage a été menée afin de réaliser des

simulations précises et moins coûteuses. Les pertes de charge sont évaluées entre l'entrée du dispositif et la sortie vapeur, et entre l'entrée à la sortie particules (figure 2).

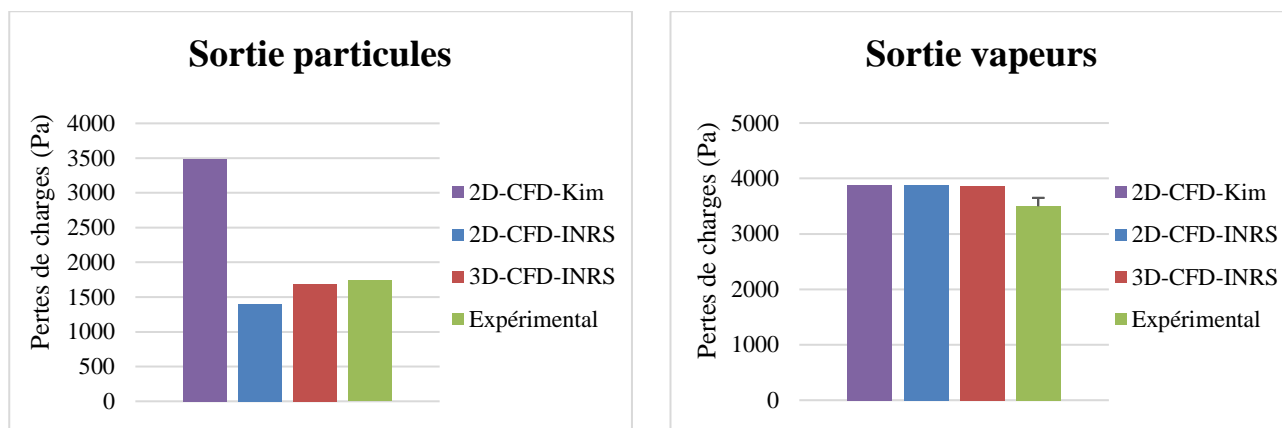


Figure 2: Pertes de charge entre l'entrée du dispositif et les sorties particules et vapeurs du SADS, obtenues par simulations numériques et mesures expérimentales

Les simulations numériques 2D axisymétriques et 3D que nous avons réalisées sont bien plus performantes pour estimer les pertes de charge réelles entre l'entrée et les sorties particules et vapeur. Nous avons observé que la solution numérique est sensible au modèle de turbulence et que le modèle k- ω type BSL semble le mieux adapté pour l'étude. Néanmoins, les résultats 2D et 3D ne sont pas identiques. Ceci peut être expliqué par une asymétrie de l'écoulement dans le système contrairement à l'hypothèse faite par Kim et Raynor (2009).

Le post-traitement des profils de vitesse calculés en simulation 3D a démontré qu'ils ne sont pas axisymétriques. Ainsi, les calculs numériques effectués selon une hypothèse 2D axisymétrique, tels que réalisés par Kim et al. (2009), ne peuvent tenir compte de l'asymétrie de l'écoulement de la phase continue dans le dispositif et donc produisent des résultats erronés.

3.2 Calculs numériques de l'efficacité de séparation (phase discrète)

Les résultats d'efficacité de séparation publiés par Kim et al. (2009) ont été comparés aux simulations numériques 2D et 3D réalisées à l'INRS. La figure 3 présente l'évolution de l'efficacité de séparation calculée à la sortie vapeur du dispositif, en fonction du diamètre aérodynamique des particules et pour différentes simulations numériques et mesures expérimentales.

Des simulations ont été effectuées pour évaluer l'effet de la dispersion turbulente des particules dans le dispositif et conclure sur son caractère négligeable ou non. Les résultats numériques confirment qu'il faut tenir compte de la dispersion turbulente dans les simulations pour représenter au mieux les efficacités expérimentales obtenues par Kim et al. (2009).

Les simulations 2D-axisymétrique et 3D réalisées reproduisent les données expérimentales de Kim et al. (2009). L'examen détaillé des simulations indique que les particules de faible inertie situées près des parois de la buse d'air peuvent être déviées du flux majeur et être collectées à la sortie vapeur. L'efficacité de séparation des particules ayant un diamètre aérodynamique inférieur à 0.5 μm est comprise entre 85 et 98% (figure 3). Cependant, pour les particules ayant un diamètre aérodynamique compris entre 0.5 et 1 μm l'efficacité de séparation est de l'ordre de 100% (figure 3).

Concernant les particules de diamètre aérodynamique compris entre 1 et 8 μm l'efficacité de séparation est de l'ordre de 100%. En revanche, des travaux d'optimisation du dispositif sont nécessaires pour augmenter l'efficacité de séparation des particules comprises entre 8 et 100 μm (figure 4), pour lesquelles l'efficacité de séparation s'écroule en raison d'un dépôt important sur les parois du dispositif.

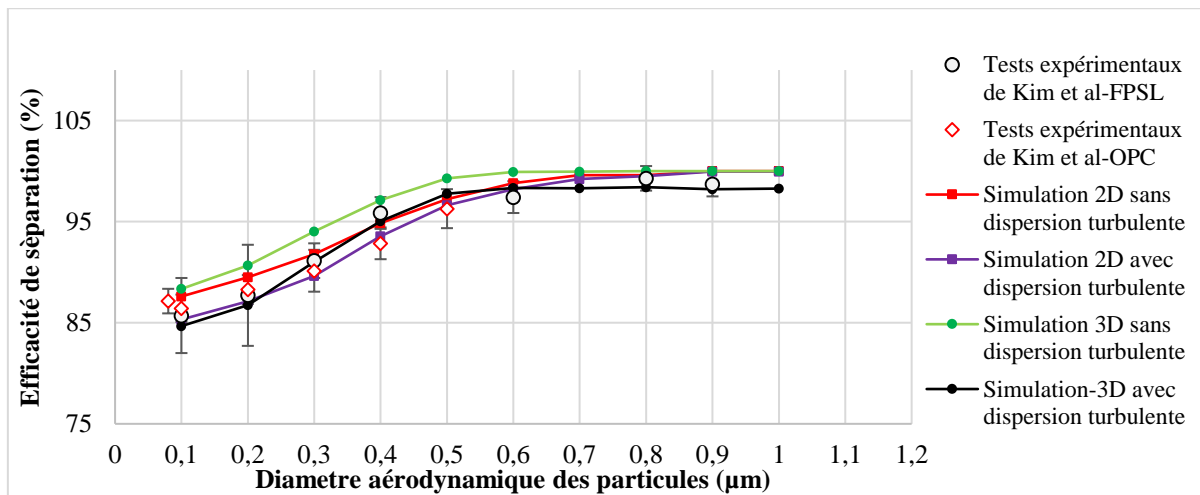


Figure 3 : Efficacité de séparation en fonction du diamètre aérodynamique des particules [0.1 - 1µm]

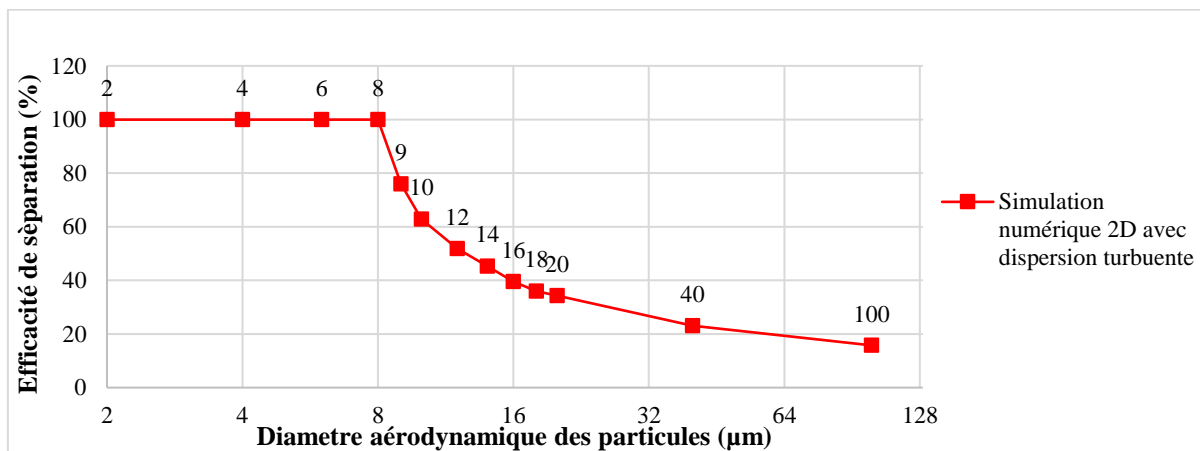


Figure 4 : Efficacité de séparation en fonction du diamètre aérodynamique des particules [2 - 100µm]

CONCLUSION

L'utilisation du SADS pour l'échantillonnage des aérosols semi-volatils permet de réaliser un prélèvement dichotomique des phases particulaires et vapeurs d'un aérosol semi-volatile avec une efficacité très importante pour des particules de diamètre aérodynamique supérieur à 0,5 µm. Le SADS devient une alternative aux méthodes conventionnelles, car il permet de s'affranchir du problème de l'évaporation de la phase particulaire au cours du prélèvement, à conditions que les dépôts soient maîtrisés. De plus, le SADS permet de répondre aux contraintes d'encombrement et de pertes de charge liées au prélèvement individuel sur le lieu de travail. Néanmoins, les simulations réalisées et les résultats expérimentaux montrent qu'il est nécessaire d'optimiser la géométrie du dispositif afin d'améliorer l'efficacité de séparation particules / vapeur pour les particules supérieures à 8 µm en diamètre aérodynamique. Ces travaux de simulation numérique ont permis d'identifier les paramètres physiques essentiels à intégrer impérativement au modèle numérique et de sélectionner la méthode de calcul permettant de représenter au mieux le phénomène de séparation dans le dispositif. Ainsi, la dispersion turbulente doit être prise en compte dans le modèle numérique, car elle réduit l'efficacité de séparation de manière notable. Pour des simulations 2D axisymétriques, une attention particulière doit également être portée à la bonne représentation de la répartition spatiale des particules en entrée du dispositif. En revanche, étant donné les incertitudes expérimentales rapportées par Kim *et al.*, il n'est pas possible de conclure quant à l'impact exact de la tridimensionnalité de l'écoulement sur l'efficacité de séparation. En ce qui concerne la séparation, nous constatons que les particules ayant une faible inertie (<500 nm) et situées en proche paroi ne sont pas séparées de la phase vapeur et que les particules inertielles (> 8 µm) se déposent rapidement sur les parois du dispositif.

Sur la base des connaissances acquises lors de ces travaux, une étude d'optimisation du dispositif par simulation numérique sera menée afin d'améliorer l'efficacité théorique de séparation de celui-ci.

Kim, S. W., & Raynor, P. C. (2009). A New Semivolatile Aerosol Dichotomous Sampler. *Annals of Occupational Hygiene*, 53(3), 239–248. <https://doi.org/10.1093/annhyg/mep008>

Volckens, J. (2003). Partitioning Theory for Respiratory Deposition of Semivolatile Aerosols. *Annals of Occupational Hygiene*, 47(2), 157–164. <https://doi.org/10.1093/annhyg/meg015>