

# Pollution des sols et interaction avec la biosphère

**Mazen SAAD**

Ecole Centrale de Nantes  
Laboratoire de Mathématiques Jean Leray-FRANCE

Mathématiques Pour La Planète

La Rochelle 17 octobre 2013

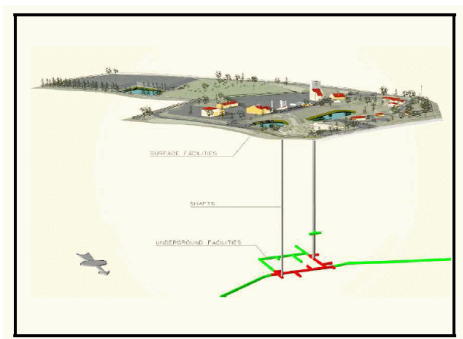
① Transport d'éléments radioactifs

② Interaction avec la biosphère

③ Stockage du CO<sub>2</sub>

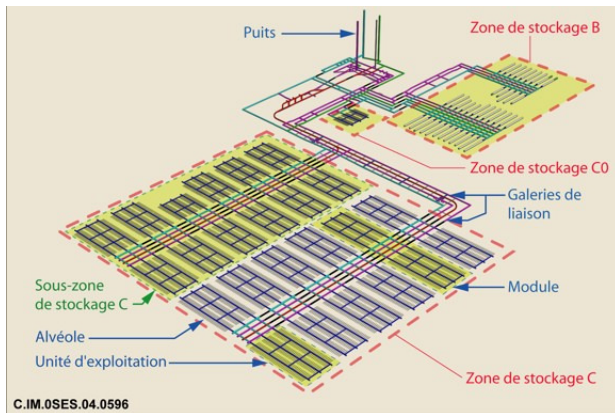
# Stockage des déchets radioactifs

GdR MoMaS initié par l'ANDRA



**Simuler la fuite éventuelle des radionucléides**

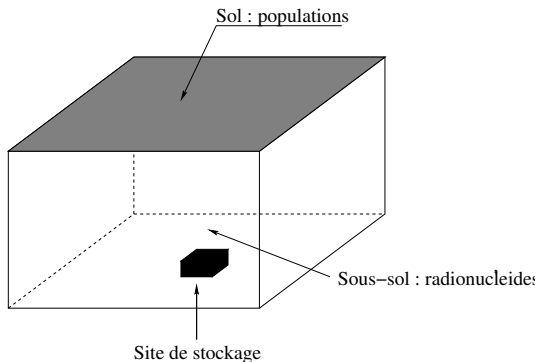
# Stockage des déchets radioactifs



Plan du site de stockage

# Modélisation de transport des éléments radioactifs

Simuler une fuite éventuelle des radionucléides de leur site de stockage



Une seule phase EAU dans un milieu poreux hétérogène  
Des composés chimiques miscibles à l'eau.

## Modèle mathématique

Déplacement de  $m$ -radionuclides de concentration  $c = (c_1, \dots, c_m)^T$

$$\partial_t G_k(x, c_k) + \operatorname{div}(c_k \mathbf{V}) - \operatorname{div}\left(D_k(x, c_k, \mathbf{V}) \nabla c_k(t, x)\right) + \lambda_k G_k(x, c_k) - \sum_{l < k} \lambda_l R_{k,l} G_l(x, c_l) = f_k, \quad k = 1, \dots, m, \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{V} = \mathbf{0}, \quad \text{et} \quad \mathbf{V} = -\frac{1}{\mu(c)} K \left( \nabla p - \rho(c) \vec{g} \right) \quad (2)$$

avec  $G_k(x, c) = \phi(x)c + (1 - \phi(x))\rho_s(x)F_k(x, c)$

**Adsorption** :  $F_k(x, c)$

**Transport** :  $c_k \mathbf{V}$

**Diffusion-Dispersion** :  $D_k = d_m I_d + d_s(x, V)$

**Décroissance radioactive** :  $\lambda_k$

**Filiation** :  $R_{k,l}$  (structure triangulaire)

$f_k$  : terme source

# Stockage des déchets radioactifs

Site de Bure

Site de stockage :  $3240 \times 6 \text{ m}^2$

Plusieurs strates : argile, calcaire

2 composés radioactifs :

Iode  $^{129}\text{I}$ , Plutonium  $^{242}\text{Pu}$

Adsorption dans l'argile :

0,001 pour  $^{129}\text{I}$

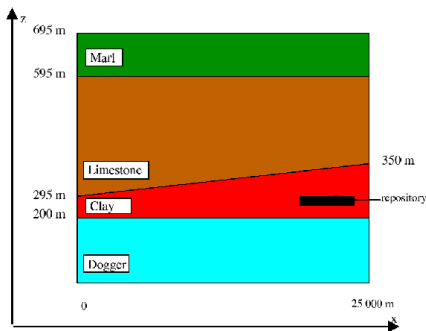
$2 \times 10^5$  pour  $^{242}\text{Pu}$ .

Décroissance :

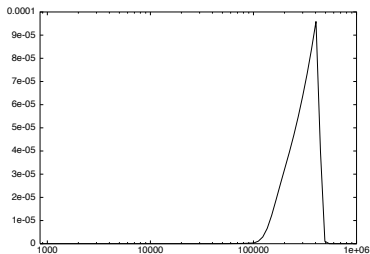
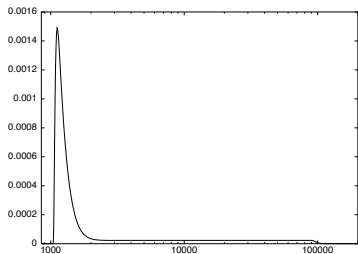
$T_1(^{129}\text{I}) = 1,57 \times 10^7$  années;

$T_2(^{242}\text{Pu}) = 3,76 \times 10^5$  années.

Ecoulement de droite à gauche

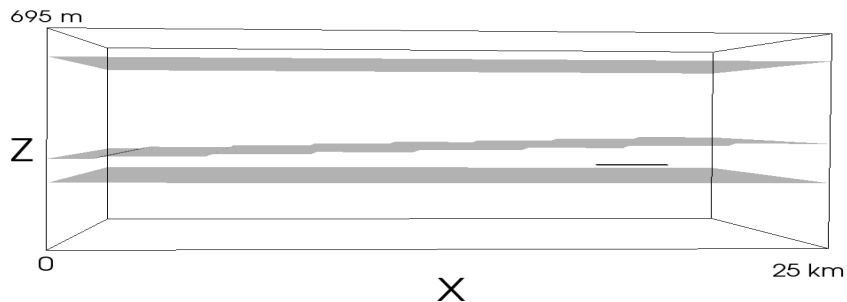


## Fuite de radioactifs

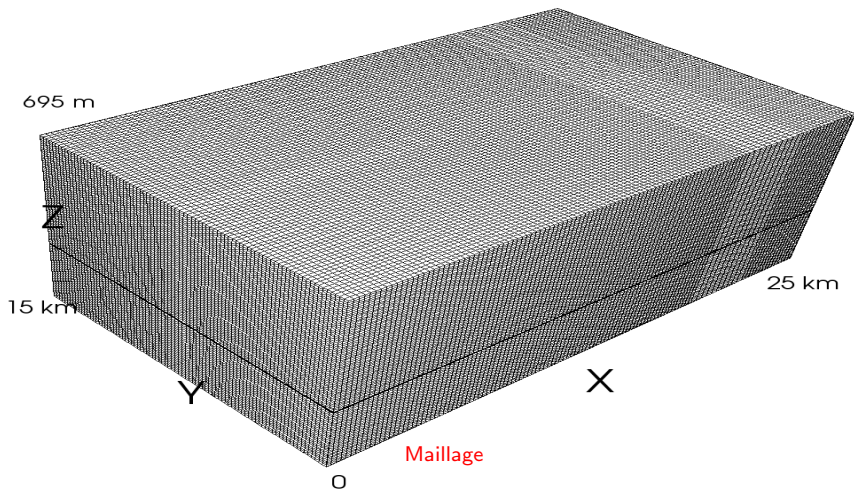


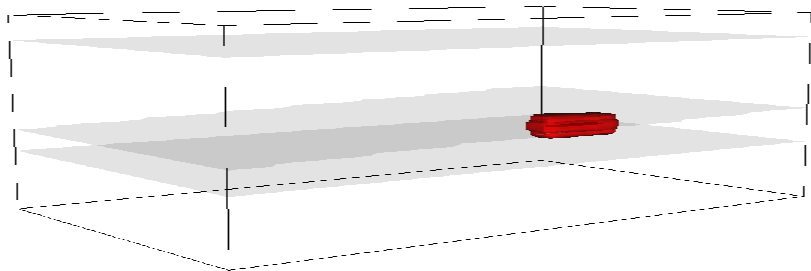
Termes sources pour  $^{129}\text{I}$  (gauche) et  $^{242}\text{Pu}$  (droite)



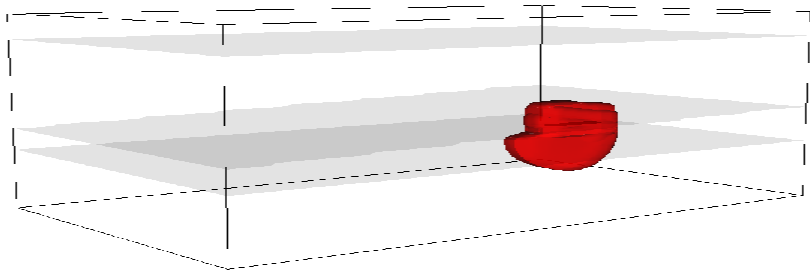


Domaine

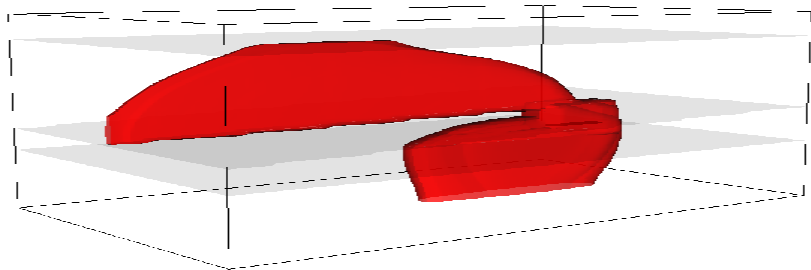




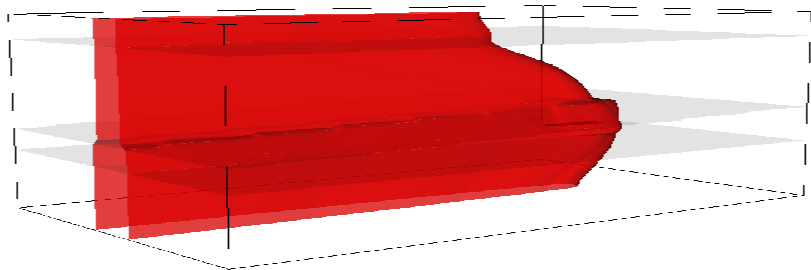
**Iode 129** au Temps = 10110 années



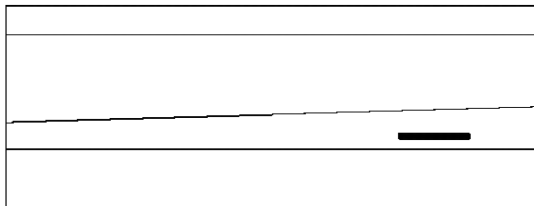
Iode 129 au Temps = 100000 années



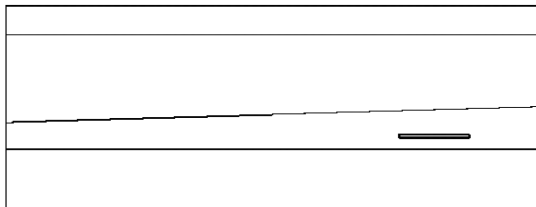
Iode 129 au Temps = 250000 années



Iode 129 au Temps =  $10^6$  années



Plutonium 242 au Temps =  $10^6$  années

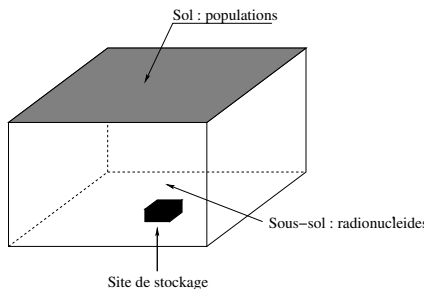


Plutonium 242 au Temps =  $5 \times 10^6$  années



# Interaction avec la biosphère

- Prévoir l'impact sur une population d'une exposition à des radionucléides
- Contamination d'une chaîne alimentaire par des radionucléides
- Couplage entre milieu poreux et dynamique des populations



Trois espèces : Végétaux, Animaux, Super-prédateur(Humain?)

- Exposition des Végétaux aux radionucléides par le sol
- Contamination des animaux sains par prédation des végétaux exposés
- Contamination des supers prédateurs sains par contact avec les animaux exposés.

# Modèles de Contamination et de prédation

Trois espèces :

- $V$  : Végétaux ;  $V = V_S + V_E$
- $A$  : Animaux ;  $A = A_S + A_E$
- $P$  : Super-prédateur ;  $P = P_S + P_E$

# Modèles de Contamination et de prédation

Trois espèces :

- $V$  : Végétaux ;  $V = V_S + V_E$
- $A$  : Animaux ;  $A = A_S + A_E$
- $P$  : Super-prédateur ;  $P = P_S + P_E$

$P_S$  Population Saine ;  $P_E$  Population Exposée

$$\partial_t P_S - d\Delta P_S = r_P \left(1 - \frac{P}{K_P}\right) P_S - \beta_P A_E P_S$$

$$\partial_t P_E - d\Delta P_E = r_P \left(1 - \frac{P}{K_P}\right) P_E + \beta_P A_E P_S$$

$\beta_P$  : **taux de contamination** des super prédateurs par consommation des animaux infectés

## Modèles de Contamination et de prédation

$A_S$  Animaux Sains ;  $A_E$  Animaux Exposés

$$\partial_t A_S - \operatorname{div}(D \nabla A_S) = -m_A A_S + e \frac{pV_S}{1+qV_S} A_S + (1-\beta_A) e \frac{pV_E}{1+qV_E} A_S - \delta A_S P_S$$

$$\partial_t A_E - \operatorname{div}(D \nabla A_E) = -m_A A_E + e \frac{pV_S}{1+qV_S} A_E + e \frac{pV_E}{1+qV_E} A_E + \beta_A e \frac{pV_E}{1+qV_E} A_S - \delta A_E P_S$$

$\beta_A$  : taux de contamination des animaux par consommation des végétaux

## Modèles de Contamination et de prédation

$V_S$  Végétaux Sains ;  $A_E$  Végétaux Exposés

$$\partial_t V_S = r_V \left(1 - \frac{V}{K_V}\right) V_S - \frac{\rho V_S}{1 + q V_S} A - \rho(c) V_S$$

$$\partial_t V_E = r_V \left(1 - \frac{V}{K_V}\right) V_E - \frac{\rho V_E}{1 + q V_E} A + \rho(c) V_S$$

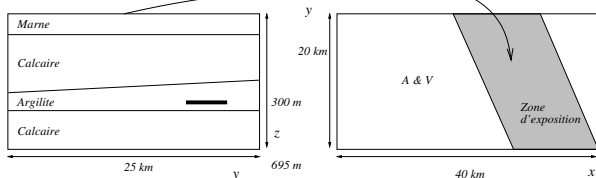
$\rho(c)$  : taux de transmission de la concentration des radionucléides (présents en surface) aux végétaux.

## Interaction radioactifs – Végétaux/Animaux

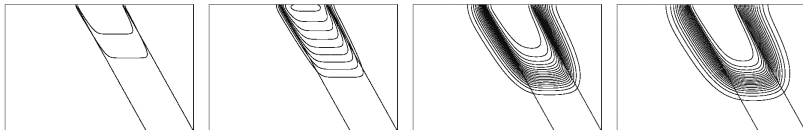
Contamination des végétaux par de l'iode radioactif  $^{129}\text{I}$ . La trace de la concentration à la surface est moyennée sur 15m de profondeur.

Exercice Couplex I apres 800000 ans

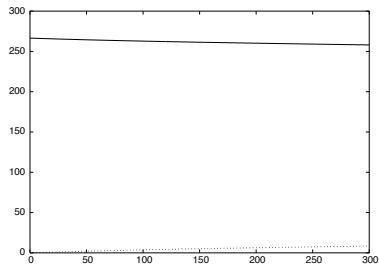
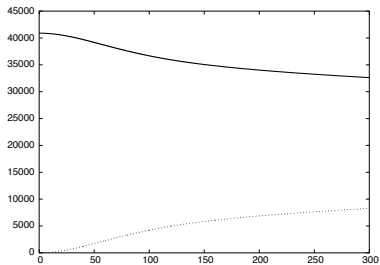
Sol : populations pendant 300 ans



Densités d'individus exposés d'animaux  $A_E$  :



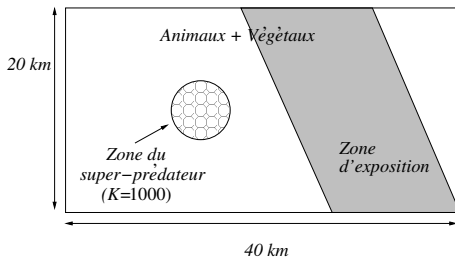
## Quantités totales en fonction du temps pour l'espèce A (gauche) et l'espèce V (droite)



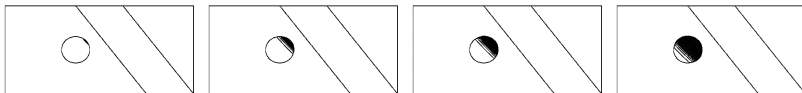
La ligne solide représente les individus sains, la ligne pointillée la classe des exposés.

## Radioactifs – Végétaux/Animaux/Humains

Intrusion d'un super-prédateur dans une zone isolée et non infectée.



Contamination des humains par déplacement des animaux infectés



Densités d'individus exposés  $P_E$  du super-prédateur  $P$ , après 100 ,150, 200, 300 ans de contamination



# Stockage du CO2

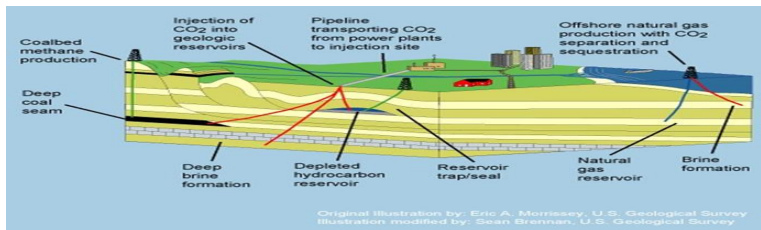
## CO2 capture and storage.

The process consists of capturing waste CO2 and transporting it to a storage site.

Various forms have been conceived for storage CO2 into deep geological formations :

- CO2 is sometimes injected into declining oil fields to increase oil recovery.

This option is attractive because the geology of hydrocarbon reservoirs is generally well understood and storage costs may be partly offset by the sale of additional oil that is recovered.



Model 1 : Gas  $\approx$  90% CO2  $\implies$  Oil-Gas model. **two compressible flow**

Model 2 : Dissolution of CO2 in water. **Two compressible and partially miscible flow**

# Two-phase two-component flow in porous media

## TWO PHASES – TWO COMPONENTS POROUS MEDIA MODEL

Discretize a general model for two phase partially miscible flow in porous media :

**CO2 storage in a liquid–gas reservoir.**

## CO2 in liquid and gas form

After the CO2 injection, several different trapping mechanisms lead to an entrapment of the CO2.

- Shortly after the injection, structural trapping through caprocks is the most important factor.
- Later solubility trapping, where CO2 is dissolved into water, and residual trapping get more important.
- After several thousand years, there could also occur mineral trapping caused by geochemical reactions

To simulate the process of dissolution of CO2, a multiphase flow equation with equilibrium phase exchange is used.

The CO2 storage can be modeled with two components (CO2 and water) in two phases (liquid and gas).

# Mathematical model

We consider herein a porous medium saturated with a fluid composed of :

- two phases : liquid ( $\alpha = l$ ) and gas ( $\alpha = g$ )
- two components in each phase : CO2 ( $\beta = c$ ) and water ( $\beta = w$ )

The component CO2 is present in the two phases :

- In liquid form : dissolved CO2
- In gas form : CO2 in the gas phase

The component **water** exists only in liquid form (no vapor water)

## Two-phase two-component model: Notation

- $s_l, s_g$ : liquid and gas phase saturations
- $p_l, p_g$ : liquid and gas phase pressures
- Phases occupy the entire pore space:  $s_l + s_g = 1$
- $\rho_l, \rho_g$ : liquid and gas phase densities
- $\rho_l^c, \rho_g^c$ : density of dissolved CO2 and density of the CO2 in the gas phase
- $X_l^c = \rho_l^c / \rho_l$ : mass fraction of the CO2 in the liquid phase
- $X_l^w = \rho_l^w / \rho_l$ : mass fraction of the water in the liquid phase
- $X_l^c + X_l^w = 1$
- $X_g^c = \rho_g^c / \rho_l$ : mass fraction of the CO2 in the gas phase
- Capillary pressure between liquid pressure and gas pressure :

$$p_c(s_l) = p_g - p_l$$

## Two-phase two-component model: Assumption

- Isothermal flow ( $T$  is a constant)
- Perfect gas law for CO2 gas phase

$$\rho_g^c = \frac{M^c}{RT} p_g$$

where  $M^c$  is the molar mass of the CO2 and  $R$  is the perfect gas constant

- Equilibrium between dissolved CO2 and gas CO2 is prescribed by Henry's law,

$$\rho_l^c = M^c H^c p_g$$

where  $H^c$  is the Henry's constant.

# Mathematical model

The *mass conservation* of each component :

$$\text{CO2: } \Phi \partial_t (\rho_l^c s_l + \rho_g^c s_g) + \text{div}(\rho_l^c \mathbf{V}_l + \rho_g^c \mathbf{V}_g + J_l^c + J_g^c) = Q_c$$

$$\text{Water: } \Phi \partial_t (\rho_l^w s_l) + \text{div}(\rho_l^w \mathbf{V}_l + J_l^w) = Q_w$$

where diffusion of the components  $\beta = c, w$  in the phase  $\alpha = l, g$  is modeled by

$$J_\alpha^\beta = -\Phi s_\alpha D_\alpha \nabla \rho_\alpha^\beta,$$

$$J_\alpha^c + J_\alpha^w = 0$$

Darcy's law for the velocity of each phase  $\mathbf{V}_\alpha = -\mathbf{K} \frac{k_{r\alpha}(s_\alpha)}{\mu_\alpha} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha \mathbf{g})$

# CO2 field

CO2 in the dissolved form.

