

RÉSUMÉ

Titre : Modélisation des transferts réactifs en roche sédimentaire : Rapport sur l'état de la science
Rapport n° : NWMO TR-2007-12
Auteurs : K. U. Mayer¹ et K. T. B. MacQuarrie²
Sociétés : ¹Université de Colombie-Britannique, ²Université du Nouveau-Brunswick
Date : Décembre 2007

Résumé

Pour évaluer le caractère adéquat des unités de roche sédimentaire destinées à accueillir un dépôt géologique en profondeur (DGP) pour le combustible nucléaire irradié, il est nécessaire d'étudier la stabilité géochimique à long terme de ces formations. La modélisation des transferts réactifs multi-constituants fournit une méthode valable pour évaluer les modèles conceptuels et déterminer la sensibilité aux paramètres dans le contexte d'une interaction roche-eau et permet par conséquent d'appuyer et de compléter les études sur le terrain, qui peuvent être onéreuses. Dans ce rapport, les données hydrogéologiques et hydrochimiques sont étudiées pour déterminer les processus de transfert et de réactivité pertinents qui agissent sur l'évolution et la composition des eaux souterraines. En outre, les travaux antérieurs de modélisation des transferts réactifs dans des conditions similaires sont examinés afin d'évaluer l'état actuel de la modélisation des transferts réactifs en formations de roches sédimentaires. Les capacités des modèles et les lacunes dans les formulations sont établies d'après ces données. De plus, des recommandations sont faites concernant la façon dont la modélisation des transferts réactifs pourrait être utilisée efficacement pour évaluer la stabilité redox et l'évolution de la salinité dans les unités de roche sédimentaire en réaction aux périodes de glaciation et de déglaciation. Nous avons trouvé que la modélisation des transferts réactifs n'a pas encore été utilisée pour évaluer un tel scénario. Cependant, les études de modélisation de l'entrée d'eau de mer et de la séquestration du CO₂ dans les roches sédimentaires donnent des résultats intéressants et semblent indiquer que la modélisation de l'évolution géochimique dans une sous-section 2D d'un bassin sédimentaire constitue un objectif réalisable. Bien qu'il existe des modèles de transferts réactifs multi-constituants avancés qui tiennent compte de nombreux processus importants, notamment la spéciation aqueuse, l'échange d'ions, la dissolution-précipitation des minéraux, les réactions redox à médiation microbienne, le couplage de densité entre le débit d'écoulement et le transfert réactif, ainsi que les changements de porosité et de perméabilité, aucun des codes actuellement disponibles ne permet de rendre compte de tous les processus pertinents. Le code MIN3P appartient à ce groupe de codes et il est recommandé d'étendre les capacités de ce modèle pour inclure a) le modèle d'interaction ionique de Pitzer, b) une formulation modifiée des réactions à médiation microbienne qui tient compte de l'inhibition en fonction de la salinité, c) une formulation pour la diffusion variant en fonction de plusieurs constituants et espèces et d) des méthodes de discrétisation qui facilitent la production de maillages non structurés mieux adaptés aux géométries irrégulières et aux aquifères et aquitards affleurant la surface. De plus, il est recommandé d'utiliser le code amélioré pour étudier une série de modèles conceptuels d'unités sédimentaires; dans le cadre de ces modèles, l'effet de l'incertitude paramétrique peut être évalué en relation avec la profondeur des zones d'infiltration, la stabilité redox et l'évolution de la salinité.