

RÉSUMÉ

Titre : Manuel théorique sur le modèle de corrosion de l'acier, Version 1.0
Rapport n° : NWMO TR-2009-07
Auteurs : Fraser King¹ et Miroslav Kolar²
Sociétés : ¹Integrity Corrosion Consulting Ltd., ²LS Computing Ltd.
Date : Mars 2009

Résumé

Un modèle permettant de prédire le comportement relatif à la corrosion anaérobie des conteneurs de combustible irradié en acier au carbone placés dans un dépôt géologique en profondeur en roche sédimentaire au Canada est décrit. Le modèle est appelé Steel Corrosion Model (Modèle de corrosion de l'acier) Version 1.0 (SCM V1.0). Le modèle est conçu pour prédire non seulement le comportement relatif à la corrosion des conteneurs, mais également les effets des produits de corrosion, plus précisément les espèces ferreuses dissoutes et l'hydrogène, sur les autres barrières du système, en particulier sur le tampon de bentonite ou de bentonite/sable. Ce manuel théorique décrit à la fois le modèle mécaniste conceptuel et le modèle mathématique servant à effectuer les prédictions.

Le modèle conceptuel est fondé sur un système de réactions qui inclut 13 espèces au total, à savoir : un complexe de chlorure ferreux dissous $\text{FeCl}^+(\text{aq})$, un complexe de carbonate ferreux dissous $\text{Fe}(\text{CO}_3)_2^{2-}(\text{aq})$, un complexe ferreux oxhydrile dissous $\text{FeOH}^+(\text{aq})$, de l'hydrogène dissous $\text{H}_2(\text{aq})$, l'ion bicarbonate $\text{HCO}_3^-(\text{aq})$, l'ion chlorure $\text{Cl}^-(\text{aq})$, l'hydroxyde de fer solide $\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{s})$, la magnétite $\text{Fe}_3\text{O}_4(\text{s})$, le fer météoritique $\text{FeCO}_3(\text{s})$, des espèces ferreuses adsorbées $\text{Fe}(\text{II})_{\text{ADS}}$, une argile modifiée au fer $\text{Fe}(\text{argile})$, la calcite $\text{CaCO}_3(\text{s})$, et l'hydrogène gazeux $\text{H}_2(\text{g})$. Ces espèces participent à des réactions électrochimiques interfaciales, à des processus de précipitation et de dissolution, à l'adsorption et à la désorption de cations sur l'argile bentonitique, au transport de matière vers et à partir des conteneurs, à la modification de l'argile bentonitique par réaction avec $\text{Fe}(\text{II})$, à la production et au transport de gaz et à la séparation entre les phases aqueuse et gazeuse.

Le modèle comprend d'autres éléments, notamment une analyse détaillée des processus de formation des films de produits de corrosion, dont la prédiction de l'épaisseur et de la porosité du film en fonction du temps fait partie. Les effets de la saturation du dépôt sur le transport de matière et sur la vitesse des autres processus interfaciaux sont considérés. Le modèle traite également de la production et du transport d'hydrogène, ainsi que de la modification de l'argile en réaction avec les espèces de $\text{Fe}(\text{II})$ dissoutes.

Le modèle mathématique est basé sur une série de 15 équations réaction-transport unidimensionnelles, une pour chacune des 13 espèces chimiques, une pour la porosité du film de produits de corrosions et une pour la température. Ces équations sont résolues relativement à diverses conditions initiales et limites à l'intérieur d'une grille spatiale conçue pour représenter la géométrie du dépôt. Les plus importantes de ces conditions limites sont les expressions électrochimiques qui décrivent la vitesse des réactions de corrosion interfaciales. En utilisant les réactions comme conditions limites pour résoudre les équations de bilan massique, le modèle permet non seulement de coupler le comportement de corrosion du conteneur à l'évolution du milieu du dépôt,

mais aussi de prédire la dépendance temporelle du potentiel de corrosion et du taux de corrosion au moyen de la théorie du potentiel mixte.

Le manuel théorique décrit le modèle conceptuel et le système de réactions de manière relativement détaillée et examine diverses hypothèses qui sous-tendent le modèle. Le modèle mathématique est aussi décrit, y compris les 15 équations réaction-transport, les conditions initiales et limites, la grille spatiale et la technique en différences finies servant à la solution numérique des équations.