

## RÉSUMÉ

**Titre :** Modélisation du transport des bisulfures à travers le système de barrières ouvragées dans les conditions d'un dépôt : couplage de l'écoulement non saturé et affinage des conditions limites

**Rapport n° :** NWMO-TR-2022-06

**Auteurs :** Md Abdullah Asad<sup>1</sup>, Tarek Rashwan<sup>1</sup>, Ian Molnar<sup>2</sup> et Magdalena Krol<sup>1</sup>

**Société :** <sup>1</sup> Université de York, Canada  
<sup>2</sup> School of Geosciences, Université d'Édimbourg, Édimbourg, Écosse

**Date :** Mars 2022

La Société de gestion des déchets nucléaires (SCGDN) du Canada a proposé un dépôt géologique en profondeur (DGP) comme solution à long terme pour la gestion du combustible nucléaire irradié du Canada. Le DGP est conçu pour isoler les radionucléides au moyen d'un système de barrières ouvragées (SBO) construit à une profondeur d'au moins 500 m dans une roche hôte à faible perméabilité (cristalline ou sédimentaire). Le SBO comprend des conteneurs de combustible irradié (CCI) en acier au carbone recouverts d'une couche de cuivre de 3 mm d'épaisseur, qui constituera une barrière résistante à la corrosion et sera entourée d'une argile de bentonite hautement comprimée (BHC). Bien que le revêtement de cuivre soit thermodynamiquement stable dans des environnements sans oxygène, il est sensible à la corrosion sous influence microbiologique (MIC) dans des conditions anoxiques. Selon les conditions spécifiques du site (par exemple, le type de roche hôte, la chimie des eaux souterraines, les conditions de croissance microbienne), le bisulfure ou d'autres espèces contenant des sulfures, produits par des bactéries sulfato-réductrices près de l'interface entre la roche hôte et la bentonite, pourraient être transportés lentement à travers la BHC, jusqu'à la surface des CCI et corroder le revêtement de cuivre. Ce transport est influencé par les conditions transitoires dans le DGP, telles que la saturation, la température et les conditions microbiennes et géochimiques. Ces conditions sont toutes reliées entre elles et un solide modèle numérique doit être utilisé pour mieux comprendre leur impact sur les mécanismes de transport du bisulfure. Par conséquent, ce rapport décrit un modèle numérique qui pourrait traiter ces processus interreliés et fournir un outil flexible pour aider à évaluer la performance du DGP au fur et à mesure que des informations spécifiques au site seront disponibles.

Le présent rapport décrit les conditions à long terme prévues dans le DGP, les modèles conceptuels des processus qui interviennent dans la MIC et les résultats d'un nouveau modèle couplé bidimensionnel (2-D) et tridimensionnel (3-D) de diffusion thermo-hydraulique-chimique (modèle THC). Le modèle THC simule le transport du bisulfure à travers le DGP dans des conditions variables de saturation et de non-isothermie. De plus, les procédures particulières de mise en oeuvre, de vérification et de validation ont été consignées et sont présentées dans ce document.

Un modèle approximatif 2-D et 3-D du système de dépôt a été élaboré, en presumant que la roche hôte était cristalline ou sédimentaire et tous les paramètres ont été tirés d'études

de cas de la SGDN et d'autres études. Plusieurs hypothèses ont été formulées pour élaborer le modèle. Le transport advectif de masse et le transport convectif de chaleur n'ont pas été pris en compte en raison de la faible perméabilité de la bentonite. En outre, nous n'avons pas tenu compte de la sorption, des réactions géochimiques, des réactions microbiennes, du transport de vapeur et du gonflement de la bentonite. Une série de procédures de vérification ont été mises en oeuvre pour valider le modèle. Une étude de convergence du maillage a été réalisée pour s'assurer que le modèle était correctement discrétisé, et une étude de sensibilité par rapport à diverses conditions limites a été réalisée pour s'assurer que les conditions appliquées étaient adéquates. Les résultats indiquent qu'une profondeur de domaine de 10 000 m permettait de prédire avec précision le profil de température. En outre, des conditions de pression constante ont été utilisées aux limites d'écoulement du modèle pour décrire de manière réaliste les conditions de saturation et éviter les zones de basse pression anormales obtenues avec des limites sans écoulement. Autour des CCI, une source de chaleur limite a été choisie pour modéliser la chaleur générée par le combustible nucléaire irradié, puisque le recours à une source de chaleur pour le domaine en entier conduisait à une surestimation de la température des CCI en raison de la géométrie et des données de modélisation. Enfin, on a supposé que la roche hôte était entièrement saturée tandis que la BHC était initialement à un taux de saturation de 67 % et qu'une condition limite de concentration en bisulfure constante de 1 ppm a été présumée, par prudence, à l'interface entre la roche et la bentonite. Le modèle THC 2-D a été comparé aux modèles précédents élaborés par Briggs et Krol (2018). Un modèle THC tridimensionnel a également été élaboré et comparé au modèle THC bidimensionnel. Enfin, la robustesse de l'approximation numérique utilisée pour le modèle a été confirmée par une bonne correspondance entre les solutions numériques et théoriques.

Dans l'ensemble, le modèle THC a prédit une saturation complète à 20 ans et 160 ans dans un DGP cristallin ou sédimentaire respectivement. Ces délais de saturation sont généralement plus courts, mais restent comparables aux résultats d'autres études de saturation de la BHC présumant des conditions de roche hôte similaires, c'est-à-dire des délais de 10 à 100 ans (par exemple, les résultats du projet DECOVALEX III). Normalement, l'augmentation de la perméabilité de la roche diminuerait le temps de saturation de la bentonite. Cependant, dans le domaine cristallin, les temps de saturation sont insensibles à la perméabilité de la roche, puisque la perméabilité de la roche est supérieure à celle de la bentonite, ce qui fait de la bentonite la couche déterminante. Comme le transport du bisulfure est principalement attribuable à la diffusion et qu'aucun transport gazeux n'est présumé, le transport du bisulfure commence lorsque le SBO devient saturé. Le flux maximal de bisulfure se produit aux extrémités hémisphériques du CCI en raison de la géométrie du conteneur de combustible irradié et du SBO. En supposant que le bisulfure entrant réagit avec le revêtement de cuivre avec une efficacité de 100 % et que la MIC se produit instantanément à la surface du CCI, la profondeur maximale totale atteinte par la MIC serait de 0,645 mm et 0,517 mm par million d'années dans le DGP sédimentaire et cristallin respectivement. En outre, une comparaison des modèles (THC par rapport aux modèles précédents élaborés par Briggs et Krol [2018]) révèle que la MIC est influencée par les changements de saturation et de température du CCI, qui ont un impact sur les taux de diffusion du bisulfure, ce qui ne se produit que

pendant la période de vie initiale du DGP (c'est-à-dire avant 200 000 à 400 000 ans). Après cette période, la MIC ne se produit que par diffusion dans un système saturé et dans des conditions isothermes. Le modèle THC 3-D, appliqué à un DGP cristallin, prédit une profondeur de MIC totale de 0,671 mm. Cette différence est due à la géométrie 3D, qui permet de saisir des taux de MIC dans la troisième dimension qui ne sont pas inclus dans le modèle 2D. Cependant, la température caractéristique des CCI et le degré de saturation des modèles 2-D et 3-D sont très similaires.

Les observations sur les effets des conditions limites, la température du SBO, le temps de saturation et le transport du bisulfure révélés par le modèle sont traitées en détail dans ce rapport. Ces observations permettent de mieux comprendre la MIC prévue dans le dépôt géologique en profondeur et fournissent ainsi des informations précieuses pour l'évaluation de la performance du DGP.