

Bonjour,  
J'ai le plaisir de vous informer que ma soutenance de thèse intitulée :

**Modélisation couplée (transport-réaction) des interactions  
fluides-argiles et de leurs effets en retour sur les  
propriétés physiques de barrières ouvragées en bentonite.**

se déroulera le vendredi 10 novembre à 14h30 au CGS, 1 rue Blessig à  
Strasbourg, dans l'amphi du 2ème étage. Les membres du jury seront :

M. B. Fritz (Directeur de thèse)  
M. F. Chabaux (Rapporteur interne)  
M. M. Cathelinau (Rapporteur externe)  
M. L. Trotignon (Rapporteur externe)  
M. B. Grambow (Examineur)  
M. N. Michau (Examineur).

Vous êtes cordialement invités à la soutenance, à la discussion ainsi qu'au  
pot qui suivra. Ci-joint le résumé/abstract.

Nicolas Marty  
Ecole et Observatoire des Sciences de la Terre  
1 rue Blessig  
F67084 Strasbourg Cedex - (France)  
marty@illite.u-strasbg.fr  
Tel : 03.90.24.04.07

## **Résumé / Abstract**

L'objectif de cette thèse est de développer la modélisation du comportement d'une barrière ouvragée d'alvéole de combustible usé en argile compactée, dans les conditions envisagées pour le stockage de déchets radioactifs et en présence de fer libéré par la corrosion des conteneurs métalliques.

L'originalité de ce travail est d'étudier les effets en retour de la modification chimique et minéralogique des argiles, mises en condition de stockage, sur leurs propriétés physiques et par conséquent sur leurs caractéristiques de transport (porosité, diffusion moléculaire, perméabilité). Cet effet en retour a été simulé en utilisant le code KIRMAT (Kinetic of Reaction and MAss Transfer). Ce modèle, développé sur la base du modèle géochimique KINDIS, couple les équations de transport (convection et diffusion) et de réaction (thermodynamique et cinétique) dans une approche 1D. L'ensemble des simulations présentées a été effectué en conditions saturées en eau, à 100°C et sur une durée d'interaction de 100 000 ans.

Les résultats obtenus montrent que la montmorillonite de la barrière ouvragée est partiellement transformée, essentiellement aux interfaces avec la roche hôte du stockage (argilite du Callovo-Oxfordien) et avec les conteneurs de déchets en acier. Au contact du fluide du Callovo-Oxfordien, la smectite se transforme principalement en illite et en saponite. Simultanément, le fer libéré par le surconteneur en acier provoque l'apparition de phases porteuses de Fe (oxydes, carbonates, chlorites, argiles di et trioctaédriques). Ces processus localisés aux parties externes du profil modélisé provoquent la dissolution de la smectite. Le suivi des propriétés physiques de la bentonite MX-80 montre une fermeture drastique de la porosité (colmatage) de part et d'autre de la barrière ouvragée, engendrant une diminution du transport de masse par diffusion moléculaire, notamment à l'interface avec le fer. Les lois de perméabilité retenues dans cette étude montrent une diminution de la conductivité hydraulique en corrélation avec l'évolution de la porosité. La pression de gonflement exercée par la barrière diminue à proximité de la formation du Callovo-Oxfordien. Dans la majorité du profil, la barrière ouvragée garde ses propriétés physiques initiales (porosité, diffusion moléculaire, perméabilité et pression de gonflement). Ces modélisations vont dans le sens d'une préservation des fonctionnalités de la barrière ouvragée argileuse sur le long terme.

The originality of this work is to process feed back effects of mineralogical and chemical modifications of clays, in storage conditions, on their physical properties and therefore on their transport characteristics (porosity, molecular diffusion, permeability). These feed back effects are modelled using the KIRMAT code (Kinetic of Reaction and MAss Transfer) developed from the kinetic code KINDIS by adding the effect of water renewal in the mineral-solution reactive cells. KIRMAT resolves mass balance equations associated with mass transport together with the geochemical reactions in a 1D approach.

After 100 000 years of simulated interaction at 100°C, with the fluid of the Callovo-Oxfordian geological level (COX) and with iron provided by the steel overpack corrosion, the montmorillonite of the clay barrier is only partially transformed (into illite, chlorite, saponite ...). Only outer parts of the modelled profile seem to be significantly affected by smectite dissolution processes, mainly at the interface with the geological environment. The modifications of physical properties show a closure of the porosity at the boundaries of the barrier, by creating a decrease of mass transport by molecular diffusion, essentially at the interface with the iron. Permeability laws applied to this system show a decrease of the hydraulic conductivity correlated with the porosity evolution. Near the COX, the swelling pressure of the clays from the barrier decreases. In the major part of the modelled profile, the engineered clay barrier system seems to keep its initial physical properties (porosity, molecular diffusion, permeability, swelling pressure) and functionalities.