

Annexe 4 : Données d'entrée pour les simulations PHREEQC

- Composition de la solution dans chaque cellule du dépôt déterminée après une durée de simulation de 100 jours
- Nombre de cellules, longueur de chaque cellule et dispersivité. La dispersivité étant 10% de l'épaisseur du dépôt.

T (m)	n_cell	Longueur	Dispersivité
10	10	1	1
1	2	0,5	0,1
0,3162	1	0,3162	$3,162 \cdot 10^{-2}$
0,1	1	0,1	0,01
$3,162 \cdot 10^{-2}$	1	$3,162 \cdot 10^{-2}$	$3,162 \cdot 10^{-3}$
0,01	1	0,01	0,001
$3,162 \cdot 10^{-3}$	1	$3,162 \cdot 10^{-3}$	$3,162 \cdot 10^{-4}$
0,001	1	0,001	0,0001

- La concentration en mol.L⁻¹ des minéraux solides et du verre rhyolitique est calculée d'après :

$$c_i = \%massique_i \times \frac{m_{tot}}{V_{tot}} \times \frac{1000}{Mm_i}$$

Le $\%massique_i$ est la fraction de m_{tot} , la masse totale de cendres contenues dans 1 m² du dépôt d'une certaine épaisseur, occupée par le minéral ou le verre i , Mm_i est la masse molaire du minéral ou du verre i (g.mol⁻¹), V_{tot} le volume total d'eau dans le dépôt en L. Il est défini pour une surface de 1m² par :

$$V_{tot} = \phi \times T \times 1000$$

Avec ϕ la porosité et T l'épaisseur du dépôt de cendres (m). La masse totale est définie de la même manière, pour une surface de 1 m² par :

$$m_{tot} = T \times \rho_a$$

Avec ρ_a la densité apparente (kg.m⁻³)

- La surface spécifique, entrant dans l'équation de la vitesse de l'altération propre à chacun des minéraux et du verre, elle a donc été déterminée séparément pour chaque espèce qui compose les cendres. Elle est calculée en m² pour tout le dépôt et sera divisée par le volume après dans la formule :

$$SSA_i = \frac{6}{\rho_s d} \times \frac{c_i}{V_{tot}} \times Mm_i \times 0,001$$

Avec ρ_s la densité absolue des cendres, 2500 kg.m⁻³ et d le diamètre des particules (m)

- La diffusion effective est dépendante de la porosité :

$$D_e^w = 10^{-9} \times (1 - 0,8 \ln(\phi))$$

- Le temps que l'eau met pour traverser le dépôt, appelé time_step, est défini par K_{sat} divisé par l'épaisseur, c'est-à-dire :

$$time_step = K_{sat} \times \frac{1}{T \times n_{cell}}$$

- Le nombre de passages de l'eau dans le dépôt, shifts est défini pour 1000 jours par :

$$shifts = \frac{60 \times 60 \times 24 \times 365,25 \times 100}{time_step}$$