



Titre: Title:	Mouvements des gaz en milieux poreux partiellement saturés
Auteurs: Authors:	Mamert Mbonimpa et Michel Aubertin
Date:	2003
Type:	Rapport / Report
Référence: Citation:	Mbonimpa, M. et Aubertin, M. (2003). Mouvement des gaz en milieux poreux partiellement saturés. Rapport technique. EPM-RT-2003-04.



Document en libre accès dans PolyPublie

Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: PolyPublie URL:	http://publications.polymtl.ca/2606/
Version:	Version officielle de l'éditeur / Published version Non révisé par les pairs / Unrefereed
Conditions d'utilisation: Terms of Use:	Autre / Other



Document publié chez l'éditeur officiel

Document issued by the official publisher

Maison d'édition: Publisher:	École Polytechnique de Montréal
URL officiel: Official URL:	http://publications.polymtl.ca/2606/
Mention légale: Legal notice:	Tous droits réservés / All rights reserved

**Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie,
le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal**

This file has been downloaded from PolyPublie, the
institutional repository of Polytechnique Montréal

<http://publications.polymtl.ca>

EPM-RT-2003-04

**MOUVEMENTS DES GAZ EN MILIEUX POREUX
PARTIELLEMENT SATURÉS**

M. Mbonimpa et M. Aubertin
Département des génies civil, géologique et des mines
École Polytechnique de Montréal

Avril 2003

Poly

EPM-RT-2003-04

**MOUVEMENT DES GAZ EN MILIEUX
POREUX PARTIELLEMENT SATURÉS**

M. MBONIMPA et M. AUBERTIN

Département des Génies Civil, Géologique et des Mines, EPM
Chaire Industrielle CRSNG-Polytechnique-UQAT
en Environnement et Gestion des Rejets Miniers.

Avril 2003

©2003
Mamert Mbonimpa et Michel Aubertin,

Dépôt légal :
Bibliothèque nationale du Québec, 2002
Bibliothèque nationale du Canada, 2002

Tous droits réservés

EPM-RT-2003-04

Mouvement des gaz en milieux poreux partiellement saturés.

Préparé dans le cadre du cours CIV 6908 Environnement minier et restauration des sites

Par: M. MBONIMPA et M. AUBERTIN

Département des Génies Civil, Géologique et des Mines, EPM
Chaire Industrielle CRSNG-Polytechnique-UQAT en Environnement et Gestion des Rejets Miniers.

Toute reproduction de ce document à des fins d'étude personnelle ou de recherche est autorisée à la condition que la citation ci-dessus y soit mentionnée.

Tout autre usage doit faire l'objet d'une autorisation écrite des auteurs. Les demandes peuvent être adressées directement aux auteurs (consulter le bottin sur le site <http://www.polymtl.ca>) ou par l'entremise de la Bibliothèque :

École Polytechnique de Montréal
Bibliothèque – Service de fourniture de documents
Case postale 6079, Succursale « Centre-Ville »
Montréal (Québec)
Canada H3C 3A7

Téléphone : (514)340-4846
Télécopie : (514)340-4026
Courrier électronique : biblio.sfd@courriel.polymtl.ca

Pour se procurer une copie de ce rapport, s'adresser à la Bibliothèque de l'École Polytechnique de Montréal.

Prix : 25.00\$ (sujet à changement sans préavis)
Régler par chèque ou mandat-poste au nom de l'École Polytechnique de Montréal.

Toute commande doit être accompagnée d'un paiement sauf en cas d'entente préalable avec des établissements d'enseignement, des sociétés et des organismes canadiens.

TABLE DES MATIÈRES

1. Introduction.....	1
2. Mécanismes de transfert des gaz.....	3
2.1. Diffusion moléculaire de l’oxygène.....	3
2.1.1. Lois de Fick.....	3
2.1.2. Constante de Henry H.....	5
2.1.3. Calcul du flux de surface.....	11
2.1.4. Autres facteurs d’influence.....	12
2.1.5. Obtention des paramètres.....	13
2.2. Advection (et convection).....	17
2.2.1. Effets des gradients de pression.....	17
2.2.2. Transport avec l’eau de percolation.....	26
2.2.3. Écoulement turbulent de l’air sous l’effet des vents.....	26
3. Transfert de chaleur et mouvement d’air.....	27
3.1. Transfert par conduction.....	27
3.2. Transfert par convection.....	32
4. Dernières remarques.....	34
5. Références.....	35

1. Introduction

Pour des fins de protection de l'environnement, la migration des fluides (gaz et liquides) doit être contrôlée à l'intérieur et au pourtour des sites d'entreposage des rejets miniers. Pour les rejets du concentrateur (résidus miniers) et les roches stériles contenant des minéraux sulfureux (potentiellement générateurs de drainage minier acide, DMA), on s'intéresse principalement aux mouvements de l'eau et de l'oxygène. L'écoulement de l'eau est abordé ailleurs dans le cours. On traitera dans ce chapitre du processus de transfert d'oxygène associé à la production du DMA.

Le mouvement des gaz est mieux documenté pour le cas des matériaux fins, comme ceux employés dans les systèmes de recouvrement (e.g. Nicholson et al. 1989; Ritcey 1989, Collin and Rasmuson 1990; Aachib et al. 1993; Aubertin et al. 1993,1995,1999, 2000; Mbonimpa et al. 2001), que pour les matériaux plus grossiers (comme les roches stériles).

Tableau 1. Quelques différences entre les haldes et les parcs à résidus miniers, avec leurs effets sur le mouvement des fluides.

<i>Résidus</i>	<i>Stériles</i>
Granulométrie fine (silt-sable), relativement uniforme	Fragments grossiers (dimension allant du cm au m) et porosité élevée localement
Pyrite directement accessible à l'oxygène	Oxygène doit diffuser dans les pores internes pour atteindre la pyrite contenue dans les fragments plus gros
Parcs ont une faible hauteur	Haldes de stériles sont des amas élevés (10-40m au-dessus de la zone saturée)
Oxydation de la pyrite initialement limitée à la partie superficielle du parc à résidus	Oxydation de la pyrite peut affecter de grandes profondeurs dans la halde
Température généralement peu élevée	Températures peuvent être élevées
Apport de l'oxygène limité à la diffusion	Apport d'oxygène par diffusion, convection, transfert thermiques, etc.

Le tableau 1, qui présente quelques différences entre les haldes à stériles et les parcs à résidus, aide à saisir à quel point ce processus est complexe dans les haldes. Alors que la diffusion moléculaire est généralement considérée comme le principal (et souvent le seul) mécanisme de transfert d'oxygène dans les recouvrements multicouches et les résidus miniers, en raison de leur faible perméabilité intrinsèque - et donc d'une faible conductivité pneumatique, plusieurs autres mécanismes physico-chimiques contrôlent la disponibilité de l'oxygène (et la production du DMA) dans une halde (voir figure 1). Dans ce dernier cas, en plus de la diffusion moléculaire, il faut tenir compte des mécanismes d'advection/convection et de l'effet de la chaleur produite par les réactions exothermiques d'oxydation sur les mouvements des fluides.

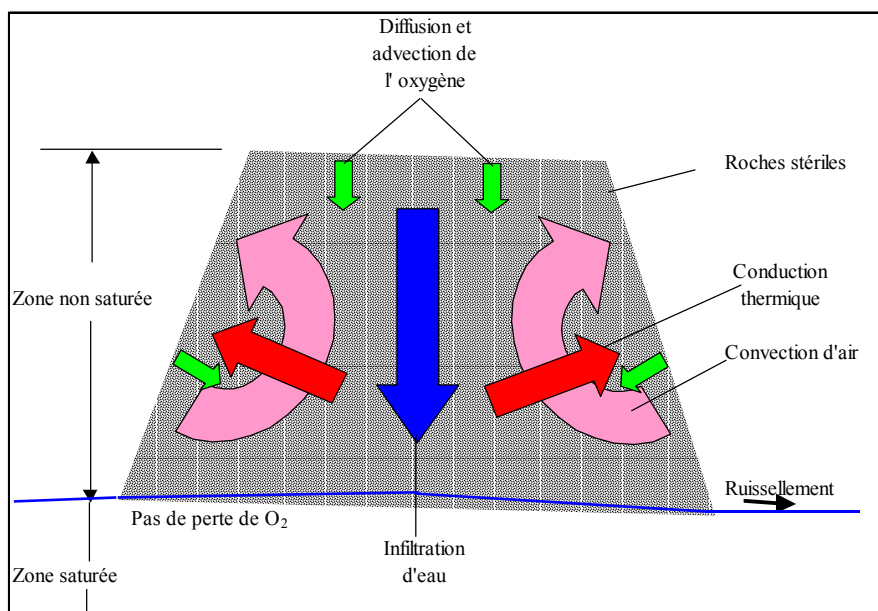


Figure 1. Schématisation des phénomènes physico-chimiques d'échange et de mouvement des fluides, impliqués dans la production du DMA dans les haldes à stériles (adaptée de Lefebvre et al. 2001):

Les échanges (flux) hydriques, gazeux et thermiques montrés à la figure 1 constituent des phénomènes interdépendants. Comme on le verra plus loin, les gradients de température peuvent influencer le potentiel matriciel et induire des mouvements liquides et gazeux. Réciproquement, les variations spatiales d'humidité, impliquant des modifications de la charge hydraulique, engendrent des écoulements porteurs de chaleur. Le mouvement des gaz est aussi influencé par la

teneur en eau et la température et *vice versa*. On est alors en face de transferts couplés, dont la résolution est très complexe.

Dans ce qui suit, ces différents mécanismes internes et externes de transfert de gaz et de chaleur seront décrits individuellement (mais assez sommairement). Une *liste des symboles* est présentée à la fin du document, afin d'aider le lecteur à bien identifier chacun des paramètres introduits dans le texte.

2. Mécanismes de transfert des gaz

2.1. Diffusion moléculaire de l'oxygène

2.1.1. Lois de Fick

La diffusion moléculaire, causée par des gradients de concentration, contribue au transport d'oxygène dans les couvertures, les résidus et les haldes. Lorsque les matériaux sont peu perméables (à l'eau et à l'air), ce mécanisme peut devenir dominant pour les échanges gazeux. Le flux diffusif d'oxygène F_o^D [$\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ou $\text{MolL}^{-2}\text{T}^{-1}$] dans un milieu poreux non saturé, à une position z au temps t , peut être défini par la première loi de Fick. En une dimension, elle s'écrit comme suit (Bear 1972; Hillel 1980):

$$[1] \quad F_o^D(z,t) = -D_e \frac{\partial C(z,t)}{\partial z}$$

où D_e [L^2T^{-1}] est le coefficient de diffusion effectif, C [ML^{-3} ou MolL^{-3}] est la concentration d'oxygène dans les pores au temps t [T] et à la position z [L].

Dans les matériaux contenant des sulfures qui s'oxydent au contact de l'air, l'expression du phénomène de diffusion doit tenir compte de la « consommation » d'oxygène par les réactions d'oxydation. Généralement, on admet que cette réaction d'oxydation suit une cinétique de 1^{er}

ordre (e.g. Nicholson et al. 1984; Lefebvre 1994; Ritchie 1994b) et donc que la vitesse de consommation d'oxygène est linéairement proportionnelle à sa concentration. L'équation de continuité tenant compte de cette consommation d'oxygène peut être décrite par la 2^e loi de Fick modifiée (e.g. Crank 1979; Schackelford 1991; Aachib et al. 1993; Lefebvre 1994; Elberling and Nicholson 1996; Yanful et al. 1999); on la définit par l'équation différentielle suivante (Mbonimpa et al. 2002a,b) :

$$[2] \quad \frac{\partial}{\partial t}(\theta_{eq} C) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_e \frac{\partial C}{\partial z} \right) - K_r C$$

où K_r [$L^3 L^{-3} T^{-1}$ ou T^{-1}] est le coefficient du taux de réaction (consommation) de l'oxygène (par ex. $m^3(O_2)/m^3(\text{rejets}.s)$) ($K_r = 0$ pour les matériaux inertes), et θ_{eq} [$L^3 L^{-3}$] la porosité en air équivalente définie par :

$$[3] \quad \theta_{eq} = \theta_a + H\theta_w .$$

Dans l'équation ci-dessus; θ_w et θ_a sont les teneurs en eau et en air volumiques respectivement ($\theta_w = nS_r$ et $\theta_a = n - \theta_w$ où n est la porosité totale et S_r le degré de saturation); H représente la constante de Henry en cas de dissolution de l'oxygène dans l'eau et est définie par le rapport ($H = C_w/C_a$) des concentrations d'oxygène dans l'eau C_w (voir section 2.1.2) et dans l'air C_a à l'équilibre ($C_a \cong 20.9\%$). À 20°C, $C_w \cong 0.28 \text{ mol/m}^3$ d'eau, $\cong 9.0 \text{ g/m}^3$ d'eau et $C_a \cong 20.9\% \cong 8.7 \text{ mol/m}^3$ d'air $\cong 278.4 \text{ g/m}^3$ d'air, ce qui conduit à $H \cong 0.03$.

Dans les équations de Fick ([1] et [2]), on définit les coefficients de diffusion effective et du taux de réaction en fonction de paramètres apparents (ou globaux, « bulk ») D^* et K_r^* de la façon suivante (Aubertin et al. 1999, 2000; Mbonimpa et al. 2002a,b) :

$$[4a] \quad D_e = \theta_{eq} D^*$$

et

$$[4b] \quad K_r = \theta_{eq} K_r^* .$$

Dans ce cas, la 2^e loi de Fick modifiée prend aussi la forme suivante (si on suppose que θ_{eq} et D_e ne dépendent pas de t et z respectivement):

$$[5] \quad \frac{\partial C}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - K_r^* C$$

2.1.2. Constante de Henry H

Différentes définitions sont utilisées dans la littérature pour la constante de Henry (e.g., Stumm and Morgan 1996; Mihelcic 1998; Looney et Falta 2000). Dans le cas où le transfert de O_2 se fait de la phase liquide vers l'atmosphère (phase gazeuse), on a :

$$[6a] \quad H = \frac{P_i}{x_o}$$

où P_i et x_o sont la pression partielle et la fraction molaire de l'oxygène respectivement (x_o correspond $C_a = 0.209$).

$$[6b] \quad H = \frac{P_i}{c_w}$$

où C_w est la concentration molaire d'oxygène dans la phase aqueuse (eau) (mole par unité de volume d'eau).

$$[6c] \quad H = \frac{C_a}{C_w}$$

Dans cette équation, est la concentration molaire de l'oxygène dans l'air (mole par unité de volume d'air).

Comme le montre les équations [6a] à [6c], l'unité de H dépend de la définition choisie. Ainsi, H a les unités de pression avec l'éq. [6a], les unités de pression×volume/mole avec l'éq. [6b], et est sans dimension (mais en réalité on a l'unité volume d'air/volume d'eau) avec l'éq. [6c]. Le tableau 2 suivant propose les relations qui relient les trois paramètres.

Tableau 2 Conversion des unités de la constante de Henry H dans le cas de transfert de gaz de la phase liquide vers l'atmosphère (phase gazeuse), (adapté de Mihelcic 1998)

$$H\left(\frac{L_{H_2O}}{L_{Air}}\right) = \frac{H\left(\frac{L \cdot atm}{mol}\right)}{RT}$$

$$H\left(\frac{L \cdot atm}{mol}\right) = H\left(\frac{L_{H_2O}}{L_{Air}}\right) \times RT$$

$$H\left(\frac{L_{H_2O}}{L_{Air}}\right) = \frac{H(atm)}{RT \times 55.6 \frac{mol H_2O}{L_{H_2O}}}$$

$$H\left(\frac{L \cdot atm}{mol}\right) = \frac{H(atm)}{55.6 \frac{mol H_2O}{L_{H_2O}}}$$

$$H(atm) = H\left(\frac{L \cdot atm}{mol}\right) \times 55.6 \frac{mol H_2O}{L_{H_2O}}$$

$$H(atm) = H\left(\frac{L_{H_2O}}{L_{Air}}\right) \times RT \times 55.6 \frac{mol H_2O}{L_{H_2O}}$$

$$R = 0.08205 \frac{atm \cdot L}{mol K}$$

L : litre; R est la constante des gaz parfaits; T est la température (°K)

Lorsque l'oxygène est transféré de la phase gazeuse (air atmosphérique) vers la phase liquide (eau), ce qui est le cas qui nous intéresse, la constante de Henry est définie par les relations inverses de celles données ci-dessus et les conversions des unités du tableau 2 doivent aussi être modifiées en conséquence. Ainsi, la constante de Henry utilisée dans l'équation [3] est donnée par l'inverse de la relation [6c] (i.e. rapport ($H = C_w/C_a$)).

Les concentrations d'oxygène dans l'air C_a et dans l'eau C_w peuvent être exprimées dans différentes unités (en terme de concentration massique, volumique ou molaire). Généralement, la concentration de gaz dissous dans l'eau C_w à l'équilibre avec une phase gazeuse peut être estimée comme suit (Hillel 1998) :

$$[7] \quad C_w = s_c \frac{P_i}{P_{atm}}$$

où s_c est le coefficient de solubilité du gaz dans l'eau, P_{atm} la pression atmosphérique totale et P_i la pression partielle de l'oxygène (voir eq. 8a.4 ci-dessous). Le coefficient de solubilité peut être exprimé en terme de rapport de masse ou de volume suivant que C_w est une concentration massique, volumique, ou molaire. Le tableau 3 compare les coefficients de solubilité de quelques gaz (gaz carbonique (CO₂), oxygène (O₂), azote (N₂) et air (sans CO₂)) à différentes températures. Comme le CO₂ réagit avec l'eau, sa solubilité est élevée. Ce tableau montre la solubilité de ces gaz dans l'eau diminue lorsque la température augmente.

Tableau 3. Coefficients de solubilité volumique de quelques gaz dans l'eau (Hillel 1998).

Température (°C)	Coefficient de solubilité s_c (volume gaz par unité de volume d'eau)			
	Azote (N ₂)	Oxygène (O ₂)	Gaz carbonique (CO ₂)	Air (sans CO ₂)
0	0.0235	0.0489	1.713	0.0292
10	0.0186	0.0380	1.194	0.0228
20	0.0154	0.0310	0.878	0.0187
30	0.0134	0.0261	0.665	0.0156
40	0.0118	0.0231	0.530	-

La concentration d'oxygène dans l'eau C_w (mol O₂/vol. eau) peut aussi être obtenue à l'aide de la relation suivante proposée par Benson et Krause (1980):

$$[8a] \quad C_w = \frac{\rho_w P_i}{\omega_o M_w} (1 - \mathcal{G}_o P_{atm})$$

où ρ_w (g/cm³) et M_w (g/mole) sont la densité et la masse moléculaire de l'eau pure ($M_w = 18.0153$ g/mole; voir aussi éq. [21]) respectivement, P_i (atm) est la pression partielle, P_{atm} (atm) est la pression totale (atmosphérique), ω_o (atm) est le coefficient de Henry (correspondant à l'équation [6a]), et \mathcal{G}_o (1/atm)¹ est un paramètre associé au comportement thermodynamique de l'oxygène (selon la loi universelle des gaz).

La dépendance des paramètres ρ_w , ω_o , et \mathcal{G}_o en fonction de la température peut être exprimée par les relations suivantes (entre 0 and 40 °C).

$$[8b] \quad \ln \rho_w = -0.589581 + \frac{326.785}{T_K} - \frac{45284.1}{T_K^2} \quad (\rho_w \text{ en g/cm}^3)$$

$$[8c] \quad \ln \omega_o = 3.71814 + \frac{5596.17}{T_K} - \frac{1049668}{T_K^2} \quad (\omega_o \text{ en atm})$$

$$[8d] \quad \mathcal{G}_o = 0.000975 - 1.426 \times 10^{-5} (T_K - 273.13) + 6.436 \times 10^{-8} (T_K - 273.15)^2 \quad (\mathcal{G}_o \text{ en atm}^{-1})$$

Dans l'équation [8a], la pression partielle P_i peut être exprimée comme le produit de la fraction molaire et de la pression du mélange :

$$[8e] \quad P_i = x_o (P_{atm} - P_{sat})$$

où x_o est la fraction molaire de l'oxygène (généralement pris à 20.946% dans les conditions atmosphériques normales) et P_{sat} est la pression de vapeur saturante (pression partielle de l'eau), qui peut être estimée par :

$$[8f] \quad \ln P_{sat} = 11.8571 - \frac{3840.70}{T_K} - \frac{216961}{T_K^2}$$

Finalement, à partir de ces équations, on obtient :

$$[8g] \quad C_w = x_o (P_{atm} - P_{sat}) \frac{\rho_w}{\omega_o M_w} (1 - \mathcal{G}_o P_{atm})$$

Le tableau 4, tiré de Otwinowski (1995), donne quelques valeurs de C_w en fonction de la température à la pression atmosphérique pour différentes fractions molaires d'oxygène x_o dans la phase gazeuse (exprimée en %volume). Ces solubilités sont données en terme d'oxygène dissous dans 1L d'eau en équilibre avec l'atmosphère saturé de vapeur d'eau. Ces valeurs diffèrent légèrement de celles proposées par Mihelcic (1998); ce dernier donne les valeurs suivantes pour la concentration de l'oxygène dissous en équilibre avec l'atmosphère : 9.2 mg/L à 20°C, et 8.6 mg/L à 25°C.

Si l'influence de la pression atmosphérique est négligée, l'influence de la température sur la concentration C_w peut d'autre part être estimée par la loi de Van't Hoff donnée par l'équation ci-dessous (Appelo et Postma 1994; Mihelcic 1998):

$$[9a] \quad \frac{d \ln C_w}{dT_K} = \frac{\Delta H_r^0}{RT_K^2}$$

ou

$$[9b] \quad \log C_w(T_{K2}) = \log C_w(T_{K1}) + \frac{\Delta H_r^0}{2.303R} \left(\frac{1}{T_{K1}} - \frac{1}{T_{K2}} \right)$$

où ΔH_r^0 est l'enthalpie de réaction, R la constante universelle des gaz ($R \cong 8.31441 \text{ J/mol.K}$) et T_K est la température en K. L'enthalpie de réaction, qui varie légèrement avec la température, est ici supposée constante ($\Delta H_r^0 \cong -10 \text{ kJ/mol}$ dans le cas de l'oxygène). Sachant que $C_w = 0.27 \text{ mmol/l} = 8.6 \text{ mg/l}$ à 25°C (Appelo et Postma 1994; Mihelcic 1998), il est alors possible de trouver la concentration C_w à une autre température. Pour 5°C par exemple, on obtiendrait ici $C_w = 0.36 \text{ mmol/l} = 11.5 \text{ mg/l}$, ce qui est légèrement différents de la valeur du tableau 4.

Tableau 4 Concentrations d'oxygène dissous dans l'eau C_w en fonction de la température à la pression atmosphérique (101.3 kPa) pour différentes fractions molaires d'oxygène x_o dans la phase gazeuse (volume %) (adapté de Otwinowski 1995).

T °C	$x_o = 21\%$		$x_o = 15\%$		$x_o = 10\%$		$x_o = 5\%$		$x_o = 1\%$	
	mg/L	$\mu\text{mol/L}$	mg/L	$\mu\text{mol/L}$	mg/L	$\mu\text{mol/L}$	mg/L	$\mu\text{mol/L}$	mg/L	$\mu\text{mol/L}$
5	12.79	399.6	9.60	299.9	6.02	188.1	2.92	91.2	0.50	15.6
10	11.30	353.0	8.03	250.9	5.31	165.9	2.59	80.9	0.41	12.8
15	10.11	315.9	7.16	223.7	4.72	147.5	2.27	70.9	0.32	10.0
20	9.12	284.9	6.45	201.5	4.23	132.2	2.01	62.8	0.23	7.2
25	8.30	259.3	5.86	183.1	3.77	117.8	1.82	56.8	0.14	4.4
30	7.60	237.5	5.33	166.5	3.44	107.5	1.56	48.7	0.05	1.6
35	7.00	218.7	4.88	152.5	3.12	97.5	1.43	44.7	0.00	0.0
40	6.47	202.1	4.47	139.7	2.81	87.8	1.15	35.9	0.00	0.0
45	6.00	187.5	4.10	128.1	2.52	78.7	0.94	29.4	0.00	0.0
50	5.57	174.0	3.75	117.2	2.25	70.3	0.74	23.1	0.00	0.0
55	5.17	161.5	3.55	110.9	1.96	61.2	0.50	15.6	0.00	0.0
60	4.89	152.8	3.38	105.6	1.64	51.2	0.25	7.8	0.00	0.0

2.1.3. Calcul du flux de surface

L'équation précédente peut être résolue analytiquement pour des conditions initiales et aux frontières relativement simples (Carslaw and Jaeger 1959; Astarica 1967; Crank 1979; Mbonimpa et al. 2002a,b). Sinon, on recourt à des méthodes de résolution numériques (Aubertin et al. 1995, 1999).

Les solutions analytiques développées par Mbonimpa et al. (2002a,b) pour le cas des couvertures et des résidus miniers, peuvent être aussi utilisées pour les roches stériles. En supposant que tout l'oxygène est consommé à une profondeur L dans les résidus ou les haldes exposées (i.e. $C = 0$ pour $z = L$), que la concentration initiale d'oxygène dans les pores est nulle, et que les propriétés θ_{eq} , D^* et K_r^* sont constantes sur toute l'épaisseur L (n.b. cette condition n'est pas toujours satisfaite), le flux diffusif entrant à la surface des rejets non couverts est donné par :

$$\begin{aligned}
 F_o^D(z=0) &= \frac{C_0 \theta_{eq} D^*}{L} + 2 \frac{C_0 \theta_{eq} D^*}{L} K_r^* \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\frac{i^2 \pi^2 D^*}{L^2} + K_r^*} + \\
 [10] \quad & 2 \frac{C_0 \theta_{eq} D^*}{L} \sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(-\left(\frac{i^2 \pi^2 D^*}{L^2} + K_r^*\right)t\right) - \\
 & 2 \frac{C_0 \theta_{eq} D^*}{L} K_r^* \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\frac{i^2 \pi^2 D^*}{L^2} + K_r^*} \exp\left(-\left(\frac{i^2 \pi^2 D^*}{L^2} + K_r^*\right)t\right)
 \end{aligned}$$

où C_0 est la concentration d'oxygène à la surface ($z = 0$) ($C_0 = C_a \cong 20.9\%$, ou $\cong 8.7 \text{ mole/m}^3$, ou $\cong 276 \text{ g/m}^3$ à la pression atmosphérique).

Cette solution transitoire générale peut servir à dériver des solutions particulières pour des rejets miniers (résidus et stériles) non réactifs ($K_r^* = 0$). De plus, en adoptant $t \rightarrow \infty$ dans les solutions transitoires, les solutions stationnaires peuvent être obtenues (pour $K_r^* \neq 0$ et $K_r^* = 0$).

Il est à noter que le flux qui entre dans la couverture (donné par l'équation [10]), n'est pas identique au flux à la base de la couverture (Mbonimpa et al. 2002a). Le premier décroît avec le temps, alors que le second augmente. Dans les matériaux non réactifs ($K_r^* = 0$), ces flux deviennent identiques mais restent différents (la différence représente la quantité d'oxygène consommée) lorsque l'état stationnaire est atteint.

Généralement, l'oxydation à travers un matériau meuble est un phénomène qui évolue assez lentement, et il peut s'étendre sur des dizaines d'années. Comme les conditions varient peu dans un court laps de temps, elles peuvent être considérées comme (pseudo)stationnaires à court terme (i.e. $\partial C/\partial t = 0$) (Bennet et al. 1994; Lefebvre 1994). La 2^e loi de Fick peut alors être résolue en considérant que la concentration d'oxygène est nulle à une profondeur suffisamment grande ($z \rightarrow \infty$). Le profil de la concentration d'oxygène est ainsi donnée par :

$$[11] \quad C = C_0 \exp(-z\sqrt{K_r^* / D^*}) = C_0 \exp(-z\sqrt{K_r / D_e})$$

À l'aide de la première loi de Fick et de l'équation qui précède, le flux stationnaire de surface entrant dans les rejets peut être évalué comme suit :

$$[12] \quad F_{o,s}^D(z=0) = \theta_{eq} C_0 \sqrt{D^* K_r^*} = C_0 \sqrt{D_e K_r}$$

2.1.4. Autres facteurs d'influence

Pour décrire précisément la cinétique de réaction de la pyrite dans les rejets, on devrait tenir compte de 2 facteurs X_T et X_0 tiennent respectivement compte de l'influence de la température T et de la concentration d'oxygène C sur la cinétique de consommation d'oxygène et donc affectent la valeur de K_r (Lefebvre 1994). Le coefficient de réactivité K_r^* utilisé dans l'équation [5] est alors exprimé en fonction d'un coefficient $K_r'^*$ indépendant de la température et de la concentration d'oxygène disponible comme suit :

$$[13] \quad K_r^*(C, T) = X_T X_O K_r'^*$$

Le premier facteur X_T tient compte de la diminution de la vitesse de la réaction d'oxydation lorsque la température devient trop élevée (un phénomène surtout observé dans les haldes). La réduction de la solubilité de l'oxygène dans l'eau à température élevée (voir équations [8] et [9], et tableau 4) est la principale cause de cette diminution de cinétique selon Otwinowski (1993). La température limite inférieure T_{inf} au-delà de laquelle la vitesse diminue (i.e. $X_T = 1$ pour $T \leq T_{inf}$ et $X_T < 1$ pour $T > T_{inf}$) est de l'ordre de 65°C selon Cathles et Schlitt (1980) et Lefebvre (1994), et de 40 à 50°C selon Panthelis et Ritchie (1991). La température limite supérieure T_{sup} au-delà de laquelle la réaction d'oxydation est supposée inactive (i.e. $X_T = 0$ pour $T \geq T_{sup}$) serait de 80°C selon Cathles et Schlitt (1980), Lefebvre (1994) et Lefebvre et al.(2001), et de 100°C selon Panthelis et Ritchie (1991). La méthode de calcul de X_T pour $T_{inf} < T < T_{sup}$ est décrite par Lefebvre (1994), et ne sera pas présentée ici.

Le second facteur X_O qui influence la cinétique de réaction tient compte de la baisse du taux d'oxydation lorsque la concentration d'oxygène tombe sous un certain seuil C_{min} ($X_O = 1$ pour $C > C_{min}$ et $X_O < 1$ pour $C \leq C_{min}$). Selon Jaynes (1983), ce phénomène serait relié l'activité bactérienne réduite lorsque la concentration d'oxygène dans l'air interstitielle est inférieure à 5% de fraction molaire. En se basant sur la solubilité de l'oxygène dans l'eau, cette valeur est équivalente à environ 2% en poids d'oxygène dans l'eau aux conditions normales de températures. La méthode de calcul de X_O est aussi décrite par Lefebvre (1994).

2.1.5. Obtention des paramètres

Il existe une difficulté non négligeable pour quantifier précisément le flux de diffusion de l'oxygène dans les rejets, soit la détermination des valeurs appropriées des paramètres D_e et K_r . En laboratoire, des progrès importants ont été réalisés ces dernières années (e.g. Aubertin et al. 1995, 1999, 2000; Aachib 1997; 2002; Mbonimpa et al. 2002a,b). Il existe aussi certains travaux qui font état de mesures *in situ* (voir Mbonimpa et al. 2000, 2002c; Dagenais 2001; Bussière et al. 2002). À la mine Heath Steele (N.B.) par exemple, le coefficient de diffusion a pu être déterminé

en place (de façon indirecte) à l'aide de la méthode du traceur gazeux SF6 (hexafluorure de soufre) (Riley and Ritchie 1997). Il reste cependant du travail à réaliser afin de définir plus correctement les méthodes pour mesurer D_e et K_r sur le terrain (n.b. des travaux sont en cours dans le cadre de la Chaire Polytechnique-UQAT à cet effet). En outre, comme d'autres processus peuvent contribuer au transport d'oxygène, les approches basées sur l'estimation de D_e et K_r à partir de la mesure de la concentration dans un réservoir fermé en surface (e.g., Bennet et al. 1994; Elberling 1994) ne sont appropriées que lorsque que la diffusion domine l'apport d'oxygène. Ceci n'est pas toujours le cas comme on le verra plus loin.

Pour nous aider, les travaux de laboratoire ont néanmoins confirmé que le coefficient de diffusion effectif peut être estimé par diverses relations semi-empiriques proposées dans la littérature. Mentionnons entre autre la relation de Millington et Shearer (1971) modifiée plus tard par Collin (1987). Sous une forme pratique, celle-ci peut s'écrire (Aubertin et al. 1999, 2000; Aachib et al 2002) :

$$[14] \quad D_e = \frac{I}{n^2} \left(D_a^0 \theta_a^{p_a} + HD_w^0 \theta_w^{p_w} \right)$$

où D_a^0 et D_w^0 [L^2T^{-1}] sont les coefficients de diffusion libre dans l'air et dans l'eau respectivement, ($D_a^0 \cong 1.8 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ et $D_w^0 \cong 2.5 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ aux conditions ambiantes selon Scharer et al. 1993); p_a et p_w tiennent compte de la tortuosité dans l'air et dans l'eau. Les exposants p_a et p_w sont définis en fonction de la porosité et du degré de saturation ou des teneurs en eau θ_w et en air θ_a (Aubertin et al. 1999, 2000; Mbonimpa et al. 2002a; Aachib 2002). Des valeurs estimées suffisamment réalistes sont aussi obtenues en adoptant $p_a = p_w = 3.3$.

Dans les haldes, il faut aussi tenir compte de l'influence de la température et de la pression sur le coefficient de diffusion effectif. L'effet de ces facteurs se fait sentir sur le coefficient de diffusion libre dans l'air (D_a^0), et il peut être exprimé par la relation suivante (Lefebvre et al. 2001a):

$$[15] \quad D_a^0 = D_{a,0}^0 \frac{P_{atm}}{P} \left(\frac{T_C + 273.15}{273.5} \right)^\phi$$

où $D_{a,0}^o$ est le coefficient de diffusion libre dans l'air à 0°C et à la pression atmosphérique P_{atm} , T_C est la température (°C), P la pression (Pa), et l'exposant ϕ (-) est un paramètre empirique normalement pris égal à 1.8. Il faut aussi noter que le coefficient de diffusion libre de l'oxygène dans l'eau D_w^o peut être affecté par la température et de la pression.

Par ailleurs, comme cela a été mentionné (voir tableau 1), les roches stériles contiennent des cailloux ayant un diamètre relativement grand (dimension de cm à m). Ainsi, après l'oxydation de la surface des grains de pyrite, l'oxygène doit migrer dans les pores internes pour atteindre la pyrite contenue à l'intérieur des fragments de roche (ce phénomène serait négligeable dans les rejets de concentrateur, car on considère que la pyrite est directement accessible à l'oxygène dans les résidus miniers réactifs). La pénétration de l'oxygène dans ces blocs de roche dépend de leur coefficient de diffusion interne $D_{e,in}$. Une des approches utilisés pour déterminer le taux global de consommation d'oxygène K_r est le modèle du noyau de réaction (« reaction core », « shrinking core »; Cathles et Schlitt 1980; Panthelis et Ritchie 1991; Lefebvre 1994). Plus de détails sur le modèle sont données dans les références précitées. Le taux global de consommation d'oxygène K_r^* [T^{-1}] est alors donné par (Lefebvre 1994) :

$$[16a] \quad K_r^* = \frac{3(1-n)K_{r0} a_{py}^{rock} H\delta}{r}$$

où n est la porosité, K_{r0} la constante cinétique de réaction de surface (m/s), a_{py}^{rock} la surface de pyrite par unité de volume de roche stérile, H est la constante de Henry, δ l'épaisseur de la couche où se fait l'oxydation de la pyrite (m) ($\delta = (D_{e,in}/K_{r0})^{0.5}$), r le rayon du block de stérile (m). La constante cinétique de réaction de surface K_{r0} , qui a une valeur assez constante et bien documentée (Otwinowski 1993), est définie comme suit :

$$[16b] \quad K_{r0} = \frac{\text{Quantité d'oxygène consommée}}{\text{temps} \times \text{surface} \times \text{concentration volumique d'oxygène}}$$

Quelques valeurs typiques (i.e. ordres de grandeur) des paramètres D_e et K_r utilisées dans quelques études sur le DMA dans des haldes sont donnés dans les tableaux 5 et 6 respectivement. Il faut néanmoins noter que dans le tableau 6, certaines valeurs correspondent au paramètre IOR (« Intrinsic Oxydation Rate »). Lorsque IOR est exprimé en $\text{kg}(\text{O}_2)/\text{m}^3$ (rejet).s) et K_r en $\text{m}^3(\text{O}_2)/\text{m}^3(\text{rejets}).\text{s}$, alors $IOR = \rho_o \cdot K_r$, où ρ_o est la masse volumique de l'oxygène en kg/m^3 .

Tableau 5. Ordre de grandeur de coefficients de diffusion effectifs D_e mesurés *in situ* dans des haldes à stériles

Location de la halde	Nombre de points de mesure dans la halde	Ordre de grandeur de D_e (m^2/s) $\times 10^{-6}$
Aitik Mine, Suède ¹	2	(2.25 ± 1.04) à (6.85 ± 1.02)
Heath Steele, Canada ¹	3	(2.65 ± 0.55) à (4.35 ± 0.25)
Woodlawn, Australia ¹	2	(3.49 ± 1.64) à (5.07 ± 0.39)
Doyon, Canada ²		2.85
Nordhalde, Allemagne ²		5.70

¹ Source : Ritchie (1994a)

² Source : Lefebvre et al. (2001a)

Tableau 6. Ordre de grandeur de taux de consommation d'oxygène (IOR ou K_r)

Localisation de la HDS	Ordre de grandeur de IOR ($\text{kg}(\text{O}_2)/\text{m}^3 \cdot \text{s}$) ou de K_r ($\text{m}^3(\text{O}_2)/\text{m}^3$ (rejets).s)
Aitik Mine, Suède ¹	$IOR = (0.3-4.3) \times 10^{-8}$
Woodlawn, Australia ¹	$IOR = (0.2-2.7) \times 10^{-8}$
Rum Jungle, Australie ¹	$IOR = (0.3-8.8) \times 10^{-8}$
Doyon, Canada ²	$K_r = 7.5 \times 10^{-7}$
Nordhalde, Allemagne ²	$K_r = 1.0 \times 10^{-8}$

¹ Source : Ritchie (1994b) ; IOR : Intrinsic Oxydation Rate.

² Source : Lefebvre et al. (2001a)

$IOR = \rho_o \cdot K_r$, où ρ_o est la masse volumique de l'oxygène en kg/m^3 . ($\cong 1.33 \text{ kg}/\text{m}^3$ à 20°C)

2.2. Advection (et convection)

Si le mouvement par advection des gaz est généralement négligeable dans les rejets du concentrateur et dans les couvertures formées de sols fins, ce n'est pas le cas dans les haldes à stériles. On sait par exemple que les taux d'oxydation indiqués par les analyses de données thermiques sont souvent trop élevés pour être soutenus uniquement par la diffusion comme seul mécanisme d'apport d'oxygène. Dans ce cas, l'advection est un des autres mécanismes d'apport d'oxygène. Selon Bennet et al. (1989), l'advection peut être dominante par rapport à la diffusion dans le cas de halde avec perméabilité intrinsèque $K [L^2]$ du milieu à l'air élevée (i.e. K de l'air est supérieure à environ 10^{-9} à $10^{-10} m^2$; voir aussi Morin et al. 1991).

Le transport d'air (ou d'oxygène) par advection peut résulter de l'infiltration de l'eau contenant de l'oxygène et de l'azote dissous, des gradients de pression résultant des variations barométriques, de l'écoulement (turbulent) d'air causé par l'action du vent, et par la convection thermique. La convection thermique sera traitée dans la section suivante.

Lorsqu'on traite de l'advection, l'eau et l'air sont généralement considérés comme des fluides immiscibles, dont le déplacement simultané dans les pores est interdépendant. Cet écoulement multiphasique (liquide-gaz) peut être représenté par la loi de Darcy généralisée nécessitant l'utilisation des propriétés capillaires et de la conductivité hydraulique non saturée du milieu poreux (Dake 1978; de Marsily 1986; Pruess 1987, 1991; Parker 1989; Hillel 1980; Fredlund and Rahardjo 1993; Delleur 1999).

2.2.1. Effets des gradients de pression

Les variations de pression atmosphérique peuvent causer le transport de quantités considérables d'oxygène contenu dans l'air atmosphérique à l'intérieur des haldes de stériles. L'écoulement de l'air en milieu poreux non saturé est, comme c'est le cas pour d'autres fluides, contrôlé par la perméabilité intrinsèque du milieu et par ses propriétés capillaires. Le flux d'air (ou débit spécifique) peut être représenté par une loi dynamique similaire à la loi de Darcy pour l'écoulement de l'eau; en milieu non saturé on écrit alors (en une dimension):

$$[17] \quad F_a^{A,P} = -K \frac{k_{ra}}{\mu_a} \frac{\partial}{\partial z} (P_a + \rho_a g z)$$

Dans cette équation, $F_a^{A,P}$ [$L^3L^{-2}T^{-1}$ ou LT^{-1}] est le flux advectif d'air dû à des gradients de pression, K [L^2] est la perméabilité intrinsèque du milieu, k_{ra} [-] est la conductivité relative pour l'air, P_a [$ML^{-1}T^{-2}$], ρ_a [ML^{-3}] et μ_a [$ML^{-1}T^{-1}$] sont respectivement la pression, la masse volumique et la viscosité dynamique de la phase gazeuse, g [LT^{-2}] est l'accélération de la pesanteur, z [L] est la position.

L'équation de continuité de l'écoulement d'air en milieu non saturé s'écrit, à l'image de l'équation de Richards pour l'écoulement de l'eau, de la façon suivante:

$$[18] \quad \frac{\partial}{\partial t} (\rho_a \theta_a) = -\frac{\partial}{\partial z} (\rho_a F_a^{A,P}) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho_a K \frac{k_{ra}}{\mu_a} \frac{\partial}{\partial z} (P_a + \rho_a g z) \right)$$

où θ_a [-] est la teneur en air volumique.

Dans la problématique du drainage minier acide, c'est le flux advectif d'oxygène $F_o^{A,P}$ [$ML^{-2}T^{-1}$ ou $MOLL^{-2}T^{-1}$] contenu dans le flux d'air $F_a^{A,P}$ qui est d'intérêt. Ce flux est donné par (Nastev et al. 2001) :

$$[19] \quad F_o^{A,P} = F_a^{A,P} C_a = -K \frac{k_{ra}}{\mu_a} \frac{\partial}{\partial z} (P_a + \rho_a g z) C_a$$

où C_a [ML^{-3} ou $MOLL^{-3}$] est la concentration de l'oxygène dans l'air.

La valeur ρ_a peut être calculée pour l'air sec et saturé en vapeur d'eau par les relations suivantes (Lefebvre 1994) :

$$[20] \quad \rho_{a,sec} = \frac{P_{atm}M_a}{R(273.15 + T_C)}$$

$$[21] \quad \rho_{a,sat} = \frac{M_a P_{atm} - (M_a - M_w)P_{sat}}{R(273.15 + T_C)}$$

Dans cette équation, M_a est masse moléculaire de l'air (0.02896kg/mol), M_w est la masse moléculaire de l'eau (0.018016 kg/mol), R est la constante des gaz (8.31456 Pa.m³/mol.K), P_{atm} est la pression atmosphérique (101325 Pa), P_{sat} est la pression de vapeur saturante (Pa), et T_C est la température (°C). On trouve les valeurs de ρ_a , μ_a et P_{sat} en fonction de la température pour l'air sec et saturé en eau dans le tableau 7.

La perméabilité intrinsèque $K [L^2]$ du milieu est reliée à de la conductivité pneumatique (à l'air) du milieu saturé en air ($k_{sa} [LT^{-1}]$) par la relation suivante :

$$[22] \quad k_{sa} = K \frac{\rho_a g}{\mu_a}$$

La conductivité pneumatique (à l'air) d'un matériau poreux peut être obtenue au laboratoire à l'aide de perméamètres (e.g., Carter 1993, Didier et al. 2000; Shan et Yao 2000; Godbout 2003). Deux méthodes sont généralement utilisées : d'une part celle au cours de la quelle le gradient de pression est maintenu constant et où on mesure le volume d'air qui traverse l'échantillon et d'autre part celle au cours de la quelle le flux d'air traversant l'échantillon est maintenu constant et où on mesure la pression à l'entrée de l'échantillon. Dans les deux méthodes, la pression à la sortie de l'échantillon correspond à la pression atmosphérique. Contrairement à l'eau supposé incompressible lors des essais de perméabilité, ici la compressibilité de l'air est prise en compte (surtout lorsque les pressions sont élevées) en faisant intervenir la loi des gaz parfaits lors de la résolution de la loi de Darcy. Plus de détails sont donnés dans les références citées ci-haut.

Tableau 7. Densité et viscosité dynamique de l'air en fonction de la température à la pression atmosphérique (valeurs calculées par Lefebvre 1994, selon équations fondamentales).

T_c [°C]	P_{sat} (Pa)	Air sec		Air saturé en vapeur d'eau	
		ρ_a [kg/m ³]	μ_a [10 ⁻⁶ Pa.s]	ρ_a [kg/m ³]	μ_a [10 ⁻⁶ Pa.s]
0	611	1.292	-	1.289	-
5	872	1.269	17.58	1.265	17.56
10	1227	1.246	17.78	1.241	17.76
15	1704	1.225	17.98	1.217	17.95
20	2337	1.204	18.18	1.193	18.14
25	3166	1.184	18.38	1.170	18.32
30	4241	1.164	18.59	1.146	18.49
35	5622	1.145	18.79	1.121	18.66
40	7375	1.127	18.99	1.096	18.81
45	9582	1.109	19.19	1.070	19.04
50	12335	1.092	19.39	1.042	19.39
55	15741	1.075	19.59	1.012	19.09
60	19920	1.049	19.79	0.981	19.09
65	25009	1.044	19.99	0.946	18.99
70	31162	1.028	20.19	0.909	18.77
75	38549	1.014	20.39	0.868	18.38
80	47360	0.999	20.59	0.823	17.77
85	57803	0.985	20.79	0.773	16.88
90	70109	0.972	20.99	0.718	15.66
95	84526	0.959	21.19	0.656	14.05
100	101325	0.946		0.588	

Dans l'équation [22], il suffit de remplacer les propriétés de l'air (ρ_a et μ_a) par celles de l'eau (ρ_w et μ_w) pour obtenir la conductivité hydraulique saturée k_{sw} [LT⁻¹] de l'eau. On peut ainsi déduire que :

$$[23] \quad k_{sa} = \frac{\rho_a}{\rho_w} \frac{\mu_w}{\mu_a} k_{sw}$$

À 20°C par exemple, $\rho_a = 1.2 \text{ kg/m}^3$, $\mu_a = 1.81 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$, $\rho_w = 1000 \text{ kg/m}^3$, et $\mu_w = 1 \times 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$. On obtient alors $k_{sa} \cong 0.066 k_{sw}$, ce qui veut dire que la conductivité pneumatique d'un milieu sec (saturé en air) est inférieure à la conductivité hydraulique du même milieu saturé en eau.

La fonction de conductivité effective du milieu non saturé à l'air $k_{ua} [\text{LT}^{-1}]$ est donnée par :

$$[24] \quad k_{ua} = k_{sa} k_{ra}$$

La conductivité relative de l'air k_{ra} dans un milieu partiellement saturé peut être estimée à partir de la courbe de rétention d'eau (CRE). Généralement, il est plus pratique d'estimer k_{ra} à l'aide de relations semi-empiriques. Selon le modèle utilisé pour décrire la CRE, k_{ra} peut par exemple être estimé comme suit :

$$[25] \quad k_{ra} = (1 - S_{re})^{0.5} (1 - S_{re}^{1/m_v})^{2m_v} \quad (\text{Parker 1989; Lefebvre 1994}),$$

On utilise ici le modèle de van Genuchten (1980) (vu ailleurs dans le cours) pour définir la CRE:

$$S_{re} = [1 + \alpha_v \psi^{n_v}]^{-m_v}; \quad \alpha_v, m_v \text{ et } n_v \text{ sont les paramètres du modèle (usuellement, } m_v = 1 - 1/n_v).$$

$$[26] \quad k_{ra} = (1 - S_{re})^2 (1 - S_{re}^{(2+\chi)/\chi}) \quad \text{Brooks and Corey (1964)}$$

Dans ce cas, $S_{re} = (\psi_d/\psi)^\chi$; ψ_d est la pression d'entrée d'air, ψ la succion matricielle et χ l'index de la géométrie des pores.

Dans ces équations, on rappelle que le degré de saturation effectif S_{re} est défini par :

$$[27] \quad S_{re} = \frac{\theta_w - \theta_{wres}}{\theta_{ws} - \theta_{wres}} = \frac{S_r - S_{rres}}{1 - S_{rres}}$$

où S_r est degré de saturation en eau, S_{rres} le degré de saturation en eau à l'état résiduel, θ_w est la teneur en eau volumique, θ_{ws} la teneur en eau volumique saturée ($\theta_{ws} = n$; n étant la porosité) et θ_{wres} la teneur en eau volumique à l'état résiduel.

La figure 2 compare les conductivités relatives à l'air k_{ra} (définie par la relation 25 ci-dessus) et à l'eau k_{rw} pour un sable avec, $\theta_{ws} = 0.40$, $\theta_{wres} = 0.032$, $n_v = 1.60$ et $m_v = 0.374$. Dans cette application, k_{rw} est calculée par la relation de van Genuchten (1980) :

$$[28] \quad k_{rw} = \sqrt{S_{re}} \left[1 - (1 - S_{re}^{1/m_v})^{m_v} \right]^2 .$$

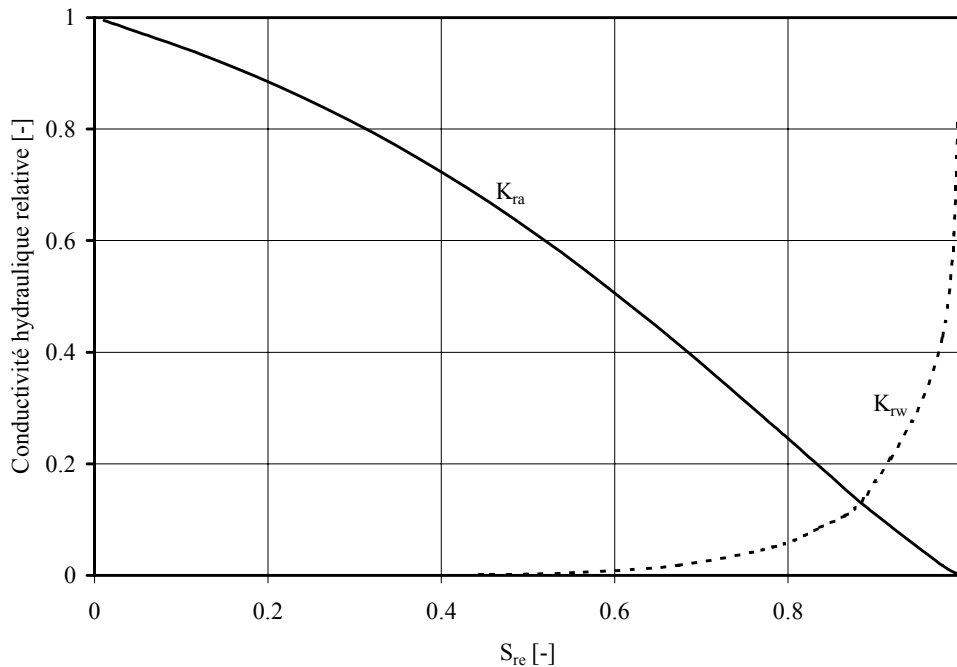
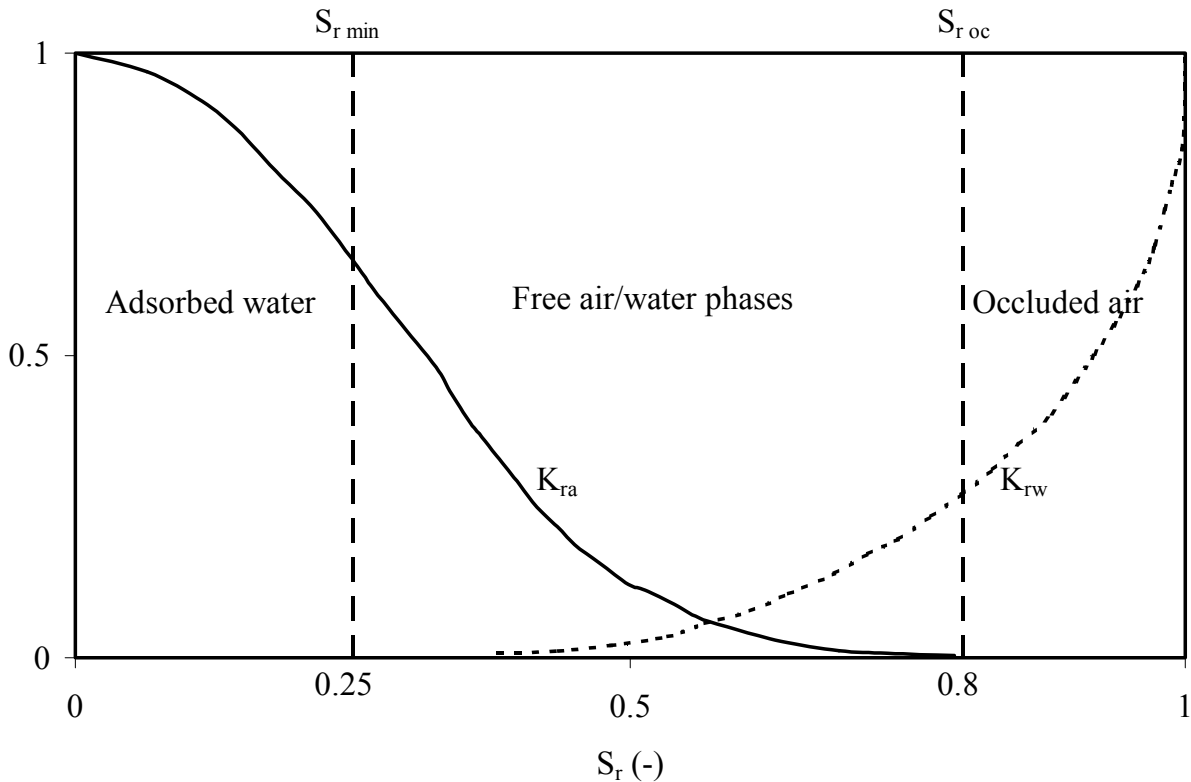


Figure 2. Évolution des fonctions de conductivités relatives à l'air $k_{ra}(S_r)$ et à l'eau $k_{rw}(S_r)$ pour un sable avec, $\theta_{ws} = 0.40$, $\theta_{wres} = 0.032$, $n_v = 1.60$ et $m_v = 0.374$ (selon le modèle de van Genuchten 1980).

A noter que, généralement, la phase gazeuse devient occluse (discontinue) lorsque le degré de saturation dépasse une valeur autour de 80 à 90%. La perméabilité relative devrait alors être considérablement réduite (pour $S_r > 80$ à 90%, soit autour du AEV tel que défini par Aubertin et al. 1998) comme le montre la figure 3 (Delleur 1999). On peut constater que la fonction de perméabilité relative k_{ra} obtenue avec l'éq. 25 (figure 2) dévie de façon significative de la fonction de la figure 3 lorsque le degré de saturation est élevé; cela est dû à la forme des équations empiriques de van Genuchten utilisées pour obtenir la conductivité pneumatique d'un milieu partiellement saturé (elles pourraient – et devraient - être modifiées pour tenir compte de ce phénomène). Le problème ne se pose pas avec l'équation de Brooks et Corey (1964).



$S_{r\ oc}$: degré de saturation d'occlusion de l'air; il n'y pas d'écoulement libre d'air si $S_r > S_{r\ oc}$.

$S_{r\ min}$: degré de saturation d'adsorption (résiduel) de l'eau ; l'eau est adsorbée sur les grains solides et le matériau poreux peut être considéré comme sec si $S_r < S_{r\ min}$.

Figure 3. Évolution schématique des fonctions de conductivités relatives à l'air $k_{ra}(S_r)$ et à l'eau $k_{rw}(S_r)$ en fonction du degré de saturation S_r (adapté de Delleur 1999).

Le tableau 8 donne l'ordre de grandeur des perméabilités à l'air mesurées in situ pour quelques haldes à stériles. Quelques valeurs mesurées de conductivité pneumatique et de perméabilité à l'air dans des matériaux très fins (i.e. géocomposites bentonitiques – GCB/GCL) sont montrées à la figure 4.

Tableau 8. Ordre de grandeur des perméabilités intrinsèques mesurées in situ.

Localisation de la halde	Nombre de points de mesure dans la halde	Ordre de grandeur de K (m^2)
Aitik Mine, Suède ¹	27	$(2.6 \pm 0.2) \times 10^{-11}$ à $(1.4 \pm 0.1) \times 10^{-9}$
Heath Steele, Canada ¹	24	$(1.6 \pm 0.15) \times 10^{-10}$ à $(4.7 \pm 0.5) \times 10^{-9}$
Kelian, Indonésie ¹	18	$(3.9 \pm 0.1) \times 10^{-13}$ à $(9.3 \pm 0.6) \times 10^{-10}$
Rum Jungle, Australie ¹	144	$(8.89 \pm 0.19) \times 10^{-13}$ à $(1.49 \pm 0.21) \times 10^{-9}$
Doyon, Canada ²		8.1×10^{-10}
Nordhalde, Allemagne ²		2.5×10^{-12}

¹ Source : Ritchie (1994a).

² Source : Lefebvre et al.(2001a) (Perméabilité verticale à l'air)

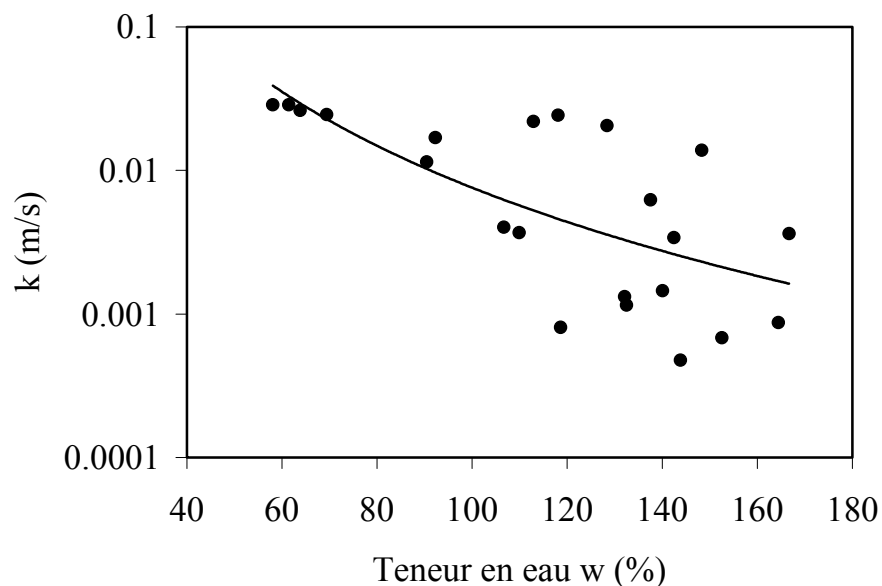


Figure 4a. Relation entre la conductivité pneumatique (à l'air) et la teneur en eau du GCB (adapté de Shan et Yao 200).

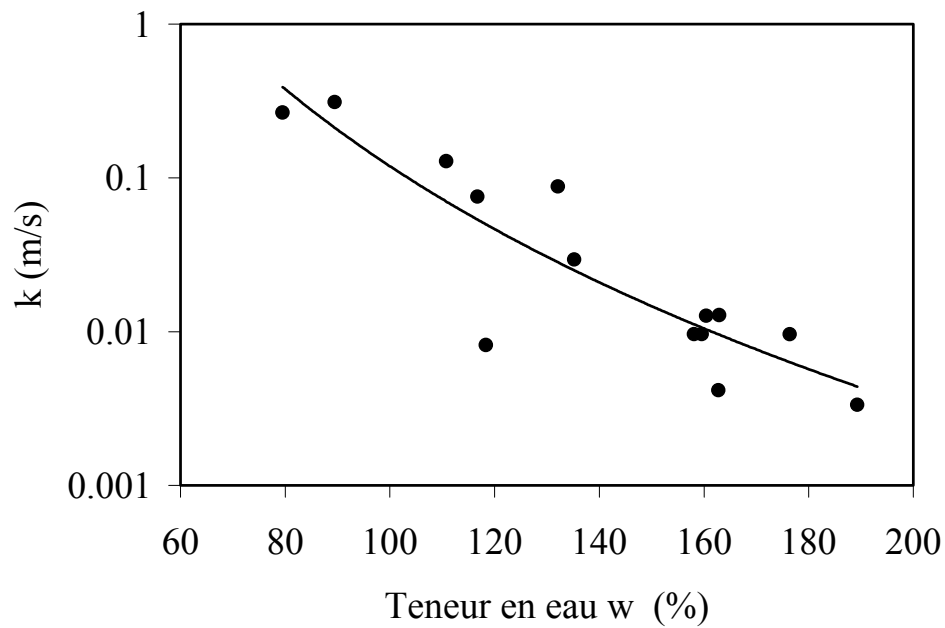


Figure 4b. Relation entre la conductivité pneumatique et la teneur en eau du GCB (adapté de Shan et Yao 2000)

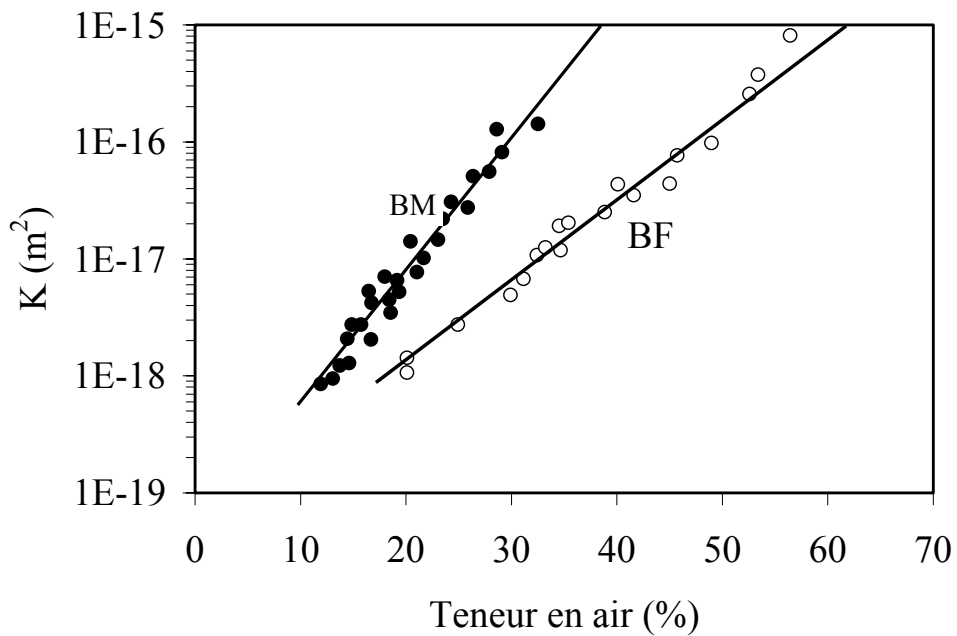


Figure 4c. Perméabilité à l'air en fonction de la teneur en air de deux GCB (BF et BM) hydratés sans confinement (Didier et al. 2000).

2.2.2. Transport avec l'eau de percolation

L'eau d'infiltration provenant des précipitations peut transporter de l'oxygène dissous en profondeur dans les rejets miniers. Le flux d'oxygène $F_o^{C,i}$ [$\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$ ou $\text{MolL}^{-2}\text{T}^{-1}$] résultant du flux d'infiltration est donné par de la relation suivante :

$$[29] \quad F_o^{C,i} = F_w^i C_w$$

où F_w^i [$\text{L}^3\text{L}^{-2}\text{T}^{-1}$ ou LT^{-1}] est le débit spécifique d'infiltration d'eau et C_w [ML^{-3} ou MolL^{-3}] est la concentration en oxygène dissous dans l'eau d'infiltration. Il est à noter que la concentration C_w est affectée par la température et la pression comme on l'a montré plus haut (éq. 8 et 9, et tableau 4).

Selon Morin et al (1991), ce mode de transport ne devient significatif que lorsque la conductivité hydraulique saturée k_{sw} est supérieure à environ 10^{-5} m/s (ou 10^{-3} cm/s). Dans tous les cas, le flux spécifique associé à l'infiltration représente la borne inférieure de la quantité d'oxygène disponible aux rejets réactifs près de la surface.

2.2.3. Écoulement turbulent de l'air sous l'effet des vents

Surtout applicable aux roches stériles, peu de travaux ont jusqu'ici été effectués en rapport avec ce mode de transport de gaz dans les haldes. Selon Morrin et al. (1991), l'advection causée par les vents est seulement importante pour les haldes érigées de manière à dominer en hauteur tout le milieu environnant. Ce mécanisme est souvent négligé car les vents ne soufflent que de façon intermittente (généralement pendant quelques heures), ce qui réduit l'apport d'oxygène (Ritchie 1994b).

3. Transfert de chaleur et mouvement d'air

L'oxydation de la pyrite qui produit l'acide sulfurique et le sulfate ferreux est une réaction exothermique générant 1440 kJ/mole de FeS₂ (Bennet et al.1989; Ritchie 1994a). La chaleur produite peut élever considérablement la température (jusqu'à 80°C) dans les haldes (Stuart et al. 1994; Miller et al. 1990). Dans les rejets du parc à résidus miniers, la température reste généralement peu élevée à cause de l'influence des conditions atmosphériques et des pertes de chaleurs dues à la présence d'eau et au rapport surface/volume défavorable. Pour les haldes, cet aspect peut cependant devenir très significatif pour les échanges gazeux (Lefebvre et al. 2001)

Une description du comportement thermique global des haldes repose sur une bonne définition des échanges énergétiques internes (au sein des haldes) et externes (avec le milieu extérieur). Seuls les échanges internes, qui se produisent selon les processus de conduction et de convection thermique, seront abordés ici (de façon assez sommaire).

3 1. Transfert par conduction

La chaleur produite par l'oxydation de la pyrite est dissipée vers la surface extérieure et par la base des haldes par un mécanisme de conduction (voir fig. 1). La conduction thermique est un processus de propagation de la chaleur dans les matériaux, par transfert d'énergie d'agitation thermique lors des collisions moléculaires; rappelons que la température est une expression du degré d'agitation thermique des molécules constitutives d'un corps. En présence de gradients thermiques (température d'un corps non uniforme), il y a transfert de chaleur des régions à température élevée (p.ex. intérieur de la halde) vers les régions à température faible (p.ex. extérieur de la halde, ou partie de la halde plus profonde ou sous la nappe). La conduction thermique peut être considérée comme une diffusion thermique (d'ailleurs le même type d'équation s'applique). La perte de chaleur affecte la distribution de la température dans les haldes.

Il faut noter que les conditions externes (comme la température à l'extérieur des haldes) ne sont usuellement pas constantes et connaissent des fluctuations journalières ou saisonnières,

particulièrement dans les zones tempérées. Bien que ces fluctuations affectent le transfert de chaleur par conduction, leurs effets ne se font sentir que sur une profondeur relativement limitée, de 5 à 10 m (Lefebvre et al. 2001a,b).

Le flux de chaleur transférée par conduction ou (diffusion) thermique F_c^C ($J/m^2/s=W/m^2$) est donné par la loi de Fourier qui s'écrit en une dimension comme suit (Musy et Soutter 1991) :

$$[30] \quad F_c^C = -\lambda \frac{\partial T}{\partial z}$$

où λ est le coefficient de Fourier ou conductivité thermique (J/msK), T la température (K) et z la position [L]. Cette équation est similaire à la 1^{ère} loi de Fick (eq. 1).

À titre indicatif, le tableau 9 donne les valeurs du coefficient λ pour diverses composantes du sol. Plus la valeur de λ est élevée, plus le matériau est conducteur de chaleur.

Tableau 9 : Conductivité thermique de quelques constituants des sols (Musy et Soutter 1991)

Constituant	λ (J/msK) ¹
Minéraux (val. moy.)	2.90
Quartz	8.80
Matière organique	0.25
Eau	0.585
Glace	2.20
Air	0.023

¹ $1J/msK=1W/mK$

Une méthode d'estimation de la conductivité thermique globale de différents types de matériaux poreux non saturés à partir des conductivités thermiques des différents constituants (eau, air, grains solides) a été présentée entre autre par de Vries (1963), van Bavel et Hillel (1975, 1976,

1998), Hadas (1977), Gori (1983) etc. Selon la méthode de van Bavel et Hillel (1975, 1976) (voir aussi Hillel 1998), la conductivité thermique globale d'un matériau partiellement saturé peut être obtenue comme suit :

$$[31] \quad \lambda = \frac{\theta_w \lambda_w + \kappa_{so} \theta_{so} \lambda_{so} + \kappa_a \theta_a \lambda_a}{\theta_w + \kappa_{so} \theta_{so} + \kappa_a \theta_a}$$

Les indices so , w et a désignent respectivement les fractions solide, liquide et gazeuse. Le paramètre θ représente la fraction volumique de chaque phase ($\theta_a + \theta_w = n$; $\theta_{so} = 1 - n$; n est la porosité). Le facteur κ représente le rapport entre le gradient thermique dans la phase considérée et dans la phase liquide (avec $\kappa_w = 1$).

Comme les conductivités thermiques de l'eau et de l'air sont faibles comparées à celle des solides (voir tableau 9), la conductivité thermique globale d'un matériau poreux dépend principalement de sa phase solide. Mentionnons qu'un matériau poreux sec (degré de saturation $S_r = 0$) devient moins bon conducteur de chaleur qu'un matériau saturé en eau $S_r = 1$). Somerton et al. (1973, 1974) expriment la dépendance $\lambda(S_r)$ par le relation suivante (Lefebvre 1994) :

$$[32] \quad \lambda(S_r) = \lambda(S_r = 0) + \sqrt{S_r} [\lambda(S_r = 1) - \lambda(S_r = 0)],$$

$$\text{avec } \lambda(S_r = 1) > \lambda(S_r = 0)$$

Cette relation montre aussi, indirectement, l'influence de l'infiltration d'eau sur le processus de transfert de chaleur. Le flux d'infiltration affecte la teneur en eau (ou le degré de saturation) dans les rejets ou les sols, ce qui modifie le coefficient de conductivité global. Les conditions internes et externes qui contrôlent l'advection affectent donc le transfert de chaleur par conduction. Le tableau 10 présente l'ordre de grandeurs des conductivités thermiques mesurées in situ sur quelques haldes.

Tableau 10 Ordre de grandeur des conductivités thermiques mesurées in situ.

Localisation de la halde	Nombre de points de mesure	Ordre de grandeur de λ (W/mK)	Valeur moyenne de λ (W/mK)
Aitik Mine, Suède ¹	8	0.71 à 1.63	1.2 ± 0.4
Heath Steele, Canada ¹	3	1.04 à 1.22	1.2 ± 0.1
Kelian, Indonésie ¹	7	1.57 à 3.31	2.1 ± 0.6
Rum Jungle, Australie	6	1.77 à 3.12	2.2 ± 0.5
Doyon, Canada ²		-	2.5
Nordhalde, Allemagne ²		-	1.0

¹ Source : Ritchie (1994a).

² Source : Lefebvre et al. (2001a)

La figure 5 présente la conductivité thermique globale de quelques sols en fonction de la teneur en eau.

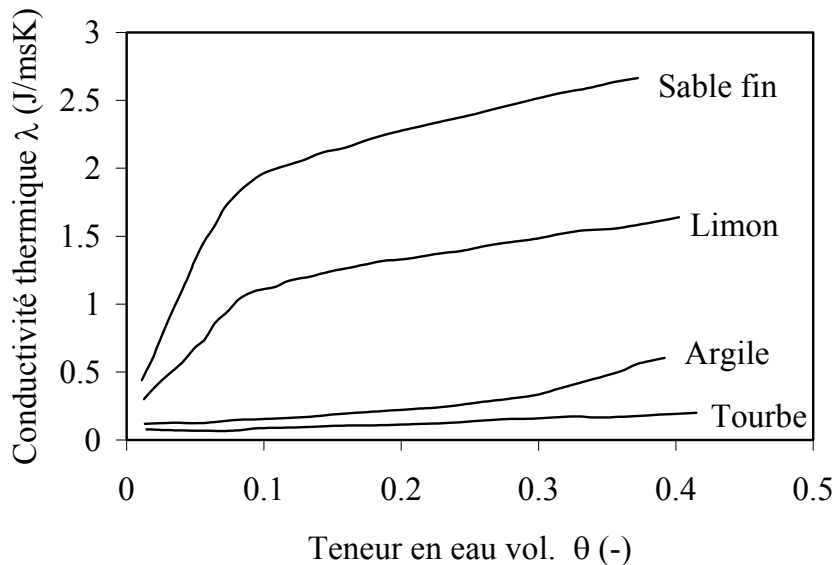


Figure 5. Conductivité thermique de quelques types de sols en fonction de la teneur en eau (adapté de Mousy et Soutter 1991).

Lorsqu'il existe une source de chaleur interne $Q(z)$ (J/m^3s), on peut utiliser l'équation de continuité appliquée au transfert de chaleur par conduction pour déterminer le profil de la température. En une dimension, cette équation différentielle s'écrit de la façon suivante (Lefebvre 1994) :

$$[33] \quad \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + Q(z)$$

où c_p est la capacité thermique massique globale (J/kgK) et ρ la masse volumique (kg/m^3) du milieu poreux. La capacité thermique massique représente la capacité d'emménagement de chaleur d'un corps, par unité de masse et de température. Le coefficient ρc_p est appelé capacité thermique volumique (souvent désigné par $c_v = \rho c_p$ (J/m^3K)). Plus la capacité thermique massique c_p d'un corps est élevée, plus la chaleur nécessaire pour réchauffer ce corps (élever sa température) est grande.

Dans le cas de milieux poreux, la capacité thermique globale est obtenue par une moyenne pondérée des capacités thermiques respectives de ses constituants (Musy et Soutter 1991; Hillel 1998).

$$[34] \quad c_p = [1 - (\theta_w + \theta_a)]c_{p,so} + \theta_w c_{p,w} + \theta_a c_{p,a}$$

À nouveau, les indices so , w et a désignent respectivement les fractions solides, liquides et gazeuses. Le tableau 11 donne des valeurs typiques du coefficient c_p pour les diverses composantes du sol. Comme l'eau a une capacité thermique supérieure à celle des autres composants, le réchauffement d'un matériau poreux sera d'autant plus lent que sa teneur en eau sera élevée. Par ailleurs, pour un matériau sec, ce réchauffement sera d'autant plus rapide que sa porosité est grande.

Tableau 11 . Valeurs de la densité ρ , et des capacités thermiques massique c_p et volumique c_v pour diverses composantes du sol (adapté de Musy et Soutter 1991; Hillel 1998).

Constituant	ρ [kg/m ³]	c_p [J/kgK]	c_v [J/m ³ K]
Minéraux (moyenne)	2.65x10 ³	0.8x10 ³	2.10x10 ⁶
Matière organique	1.30x10 ³	1.90x10 ³	2.47x10 ⁶
Eau	1.00x10 ³	4.20x10 ³	4.20x10 ⁶
Glace	0.92x10 ³	2.10x10 ³	1.93x10 ⁶
Air	1.25	1.00x10 ³	1.25x10 ³

Dans les haldes à stériles, la production du DMA se produit sur de très longues périodes, ce qui permet de considérer les systèmes comme étant (quasi) stationnaire ($\partial T/\partial t = 0$), du moins lorsque l'intervalle de temps considéré est court (Lefebvre 1994). L'équation différentielle de conduction devient alors :

$$[35] \quad Q(z) = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

3.2. Transfert par convection

Les gradients de températures entre l'air ambiant et le gaz à l'intérieur du matériau (la halde) peuvent générer des mouvements de convection des gaz. L'observation de sorties d'air chaud à la surface des haldes, les profils des températures mesurés, la composition de l'air à l'intérieur de ces haldes, et les relevés thermographiques à la surface des empilements sont autant d'indications qui confirment l'importance de la convection de l'air dans les roches stériles. Cette convection est interdépendante des transferts de chaleur (Lefebvre 1994).

Les gradients de température engendrent des gradients de densité de gaz qui initient la convection, lorsque la perméabilité des stériles est suffisante (i.e. si $K > 10^{-9}$ à 10^{-10} m²

typiquement). Ainsi, l'air chaud de l'intérieur de la halde est remplacé par l'air froid de l'atmosphère qui apporte alors de l'oxygène disponible pour la réaction d'oxydation de la pyrite. Ceci produit plus de chaleur et le cycle continue.

La convection thermique est un processus similaire à la conduction thermique, avec la différence que dans le premier cas, le transfert par agitation thermique s'effectue entre les molécules situées de part et d'autre de la frontière séparant un solide et un fluide en mouvement. Il faut donc associer au problème purement physique du transfert de chaleur, une composante de mécanique des fluides (liquide ou gaz). Le flux de chaleur par convection $F_c^{C,T}$ [W/m²] est donné par (Nastev et al. 2000; Lebevre 1994):

$$[36] \quad F_c^{C,T} = F_w^A c_{pw} \rho_w (T_{so} - T_w) + F_a^A c_{pa} \rho_a (T_{so} - T_a)$$

Dans cette équation, so , w et a désignent respectivement les fractions solides, liquides et gazeuses (air). F_w^A est le flux advectif de l'eau [L³/L²T], F_a^A est le flux advectif de l'air [L³/L²T].

Dans le cas de matériaux non saturés, le transfert de chaleur par convection fait intervenir les mouvements des phases liquides et gazeuses.

Le transfert combiné de chaleur par conduction et convection peut être décrit par l'équation différentielle suivante (donnée ici en une dimension) :

$$[37] \quad \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \left(F_w^A c_{p,w} \rho_w + F_a^A c_{p,a} \rho_a \right) \frac{\partial T}{\partial z} + Q(z)$$

Dans ce cas, la source de chaleur $Q(z)$ serait fournie par l'oxydation de la pyrite (Lefebvre 1994). On sait que 3.5 moles d'oxygène sont typiquement consommées pour l'oxydation d'une mole de pyrite, ce qui produit 1.4MJ de chaleur; autrement dit, la chaleur α dégagée par mole d'oxygène consommé est d'environ 0.4 MJ. Or la quantité d'oxygène consommée q_{oxy} (par unité de volume) dans un intervalle de temps peut être estimée en supposant une cinétique de premier ordre par :

$$[38] \quad q_{oxy} = K_r C$$

où C (mol/m³) est la concentration d'oxygène et K_r est le coefficient du taux de réaction (consommation) de l'oxygène. Le terme de source de chaleur $Q(z)$ s'exprime alors par (Lefebvre 1994):

$$[39] \quad Q(z) = \alpha q_{oxy} = \alpha K_r C$$

Si les propriétés thermiques des stériles sont connues, l'équation [37] permet d'obtenir la production de chaleur par l'oxydation de la pyrite à partir des profils de températures (Lefebvre 1994). En posant que la grande partie de la production de chaleur est causée par l'oxydation de la pyrite, il devient alors possible d'évaluer le taux d'oxydation. Plus de détails sur cet aspect sont donnés par Lefebvre (1994).

4. Dernières remarques

Les phénomènes de transferts d'eau, de gaz et de chaleur dans les haldes de stériles ont été ici décrits individuellement, en essayant de mettre en lumière leur interdépendance. Il s'agit en réalité de phénomènes couplés, dont la formulation mathématique est complexe. Pour obtenir des solutions pratiques, on doit généralement recourir à des solutions numériques. Citons à titre indicatif le modèle numérique TOUGH AMD adapté au DMA par Lefebvre (1994) (voir aussi Lefebvre et al. 2001 a,b) à partir du code numérique TOUGH2 (Pruess 1991), ainsi que FIDHELM développé par Australian Nuclear Science and Technology Organisation (ANSTO) (Riley and Ritchie 1997).

Les équations présentées ici illustrent à quel point le nombre de paramètres impliqués est élevé. Une bonne caractérisation des rejets est donc la condition essentielle pour bien évaluer le transfert des gaz.

Plus de détails sont donnés dans les références qui suivent. Les articles de Aachib et al. (2002) et Mbonimpa et al. (2002b) ainsi que le rapport technique Mbonimpa et al. (2002a) élaborent plus spécifiquement les aspects reliés à la diffusion des gaz, et comprennent également de nombreuses références additionnelles.

5. Références

- Aachib, M. 1997. Étude en laboratoire de la performance de barrières de recouvrement constituées de rejets miniers pour limiter le DMA. Thèse Ph.D, Dept. CGM, École Polytechnique de Montréal, 298 pages (plus annexes, 55 pages).
- Aachib, M., Aubertin, M. and Chapuis, R.P. 1993. Étude en laboratoire de la performance des barrières de recouvrement constituées de rejets miniers pour limiter le drainage minier acide - Un état de la question. Rapport EPM/RT-93/32., École Polytechnique de Montréal.
- Aachib, M, Mbonimpa, M., and Aubertin, M. 2002. Measurement and prediction of the oxygen diffusion coefficient in partly saturated media, with applications to soil covers. Submitted for publication to *Water, Air and Soil Pollution*, August 2002.
- Apello, C.A.J. and Postma, D. 1994. *Geochemistry, Groundwater and Pollution*. A.A. Balkema, Rotterdam.
- Astarita, G. 1967. *Mass Transfer with Chemical Reaction*. Elsevier Publishing Company.
- Aubertin, M. and Chapuis, R.P. 1991. Considérations hydro-géotechniques pour l'entreposage de résidus miniers dans le nord-ouest du Québec. *Proceedings of the Second International Conference on the Abatement of Acidic Drainage, Montreal, MEND/Canmet*, **3**: 1-22.
- Aubertin, M., Aachib M, and Authier, K. 2000b. Evaluation of diffusive gas flux through covers with a GCL. *Geotextiles and Geomebranes*, **18** : 1-19.
- Aubertin, M., Bussière, B. Monzon, M., Joanes, A.-M., Gagnon, D., Barbera, J.-M., Aachib, M., Bédard, C. Chapuis, R.P. and Bernier, L. 1999. Étude sur les barrières sèches construites à partir des résidus miniers. – Phase II : Essais en place. Rapport de Recherche, Projet CDT P1899. NEDEM/MEND 2.22.2c, 331 pages.

- Aubertin, M., Chapuis, R.P., Aachib, M., Bussière, B., Ricard, J.F. and Tremblay, L. 1995. Évaluation en laboratoire de barrières sèches construites à partir de résidus miniers. École Polytechnique de Montréal, NEDEM/MEND Projet 2.22.2a, 164 pages.
- Aubertin, M., Chapuis, R.P., Bussière, B. and Aachib, M, 1993. Propriétés des résidus miniers utilisés comme matériaux de recouvrement pour limiter le DMA. *Geoconfine'93*, Arnould, Barrès et Cômes (eds.), Balkema, vol. I., 299-308.
- Aubertin, M., Mbonimpa, M., and Dagenais, A.-M. 2000a. Nouvelles procédures d'essais de diffusion et de consommation d'oxygène: Applications au site LTA, Malartic, Québec. Rapport final soumis à Golder Associés (non publié).
- Aubertin, M., Ricard, J.F. and Chapuis, R.P. 1998. A predictive model for water retention curve: Application to tailings from hard-rock mines. *Canadian Geotechnical Journal*, **35**: 55-69.
- Bear, J. 1972. *Dynamics of Fluids in Porous Media*, Dover Publications Inc., New York.
- Bennet, J.W., Gibson, D.K., Ritchie, A.I.M., Tan, Y., Broman, P.G., et Jönsson, H. 1994. Oxydation rates and pollution loads in drainage; Correlation of measurements in a pyritic waste rock dump. *Third Int. Conf. on the Abatement of Acid Mine Drainage*, Pittsburgh, PA, April 24-29, 1994, vol. 1, pp. 400-409.
- Bennet, J.W., Harries, J.R., Pantelis, G. and Ritchie, A.I.M. 1989. Limitations on pyrite oxidation rates set by air transport mechanisms. *Proceedings, Biohydrometallurgy International Symposium*, August 13-18, 1989. Jackson Hole, Australia.
- Bennett, J. W., Harries, J.R. and Ritchie, A.I.M. 1988. Rehabilitation of Waste Rock Dumps at the Rum Jungle Site. *Proceedings, Mine Drainage and Surface Mine Reclamation Conference*. April 17-22, 1988. Pittsburgh, PA.
- Benson, B.B. and Krause, D. Jr. 1980. The concentration and isotopic fractionation of gases dissolved in fresh water in equilibrium with the atmosphere, I Oxygen. *Limnology and Oceanography*., **25**(4), 662-671.
- Brooks, R.H. et Corey, A.T. 1964. Hydraulic properties of porous media. *Colorado State Uni. Hydrol. Paper*, 3, 27pp.
- Bussière, B., Dagenais, A.-M., Aubertin, M., and Mbonimpa, M. 2002. Modification of oxygen-consumption testing for the evaluation of oxygen barrier performance. 55th Canadian Geotechnical Conference, 3rd Joint IAH-CNC/CGS Conference. Niagara Falls, Ontario, Canada, October 20-23, 2002.

- Carslaw, H.S. and Jaeger, J.C. 1959. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford University Press, London.
- Cathles, L.M. et Schlitt, W.J. 1980. A model of the dump leaching process that incorporates oxygen balance, heat balance, and two dimensional air convection. *In Schlitt, W.J., ed. Leaching and recovering copper from as-mined materials. Proc. of the Las Vegas Symposium 26, Solutions Mining Committee, Soc. of Mining Engng Of AIME*, pp. 9-27
- Collin, M. 1987. *Mathematical modeling of water and oxygen transport in layered soil covers for deposits of pyritic mine tailings. Licenciate Treatise. Royal Institute of Technology. Department of Chemical Engineering. S-10044 Stockholm, Sweden.*
- Collin, M. and Rasmusson, A. 1990. *Mathematical modeling of water and oxygen transport in layered soil covers for deposits of pyritic mine tailings. Acid Mine Drainage : Designing for closure. GAC-MAC Annual Meeting, May, 311-333.*
- Crank, J. 1979. *The Mathematics of Diffusion. 2nd Ed. Clarendon Press, Oxford, U.K.*
- Dagenais, A.-M., Aubertin, M., Bussière , B., Bernier, L., and Cyr, J. 2001. *Monitoring at the Lorraine Mine Site: A follow-up on the remediation plan. 2001 National Association of Abandoned Mine Land Programs Annual Conference: Land Reborn: Tolls for the 21st Century, Athens, Ohio. Proceedings on CD-Rom.*
- Dake, L.P.1978. *Fundamentals of Reservoir Engineering. Elsevier, Amsterdam, 443p.*
- de Vries, D.A. 1963. *Thermal properties of soils. In: W.R. van Wijk (ed.). Physics of Plant Environment. North Holland Pub. Co. Amsterdam.*
- Delleur, J.W. 1999. *The Handbook of Groundwater Engineering. CRC Press, New York.*
- Didier,G, Bouazza,A., Cazaux, D. 2000. *Gas permeability of geosynthetic clay liners. Geotextiles and Geomebranes, 18: 235-250.*
- Elberling, B., and Nicholson, R.V. 1996. *Field determination of sulphide oxydation rates in mine tailings. Water Resources Research, 32 (6): 1773-1784.*
- Fredlund, D.G., and Rahardjo, H. 1993. *Soil Mechanics for Unsaturated Soils. John Wiley & Sons, Inc., New York, N.Y.*
- Godbout, J. 2003. *Détermination de la perméabilité d'un matériau poreux. Document préparé dans le cadre du cours «Séminaire des géomatériaux » (GML6003), École Polytechnique de Montréal.*

- Gori, F. 1983. A theoretical model for predicting the effective thermal conductivity of unsaturated frozen soils. Proc. 4th Intern. Conf. on Permafrost. July 17-22, Fairbanks, Alaska.
- Guo, W. and Parizek, R.R. 1992. Research on thermal anomalies indicating acid reactions in mine spoil and temperature prediction by numerical model. Proceedings – Environmental Geochemistry of Sulfide Oxidation, ACS Symposium Series 550 (Eds. C.N. Alpers and D.W. Blowes), Washington DC, August 23-28, 1992.
- Hadas, A. 1977. Heat transfer in dry aggregated soils: I Heat conduction. Soil Science Society of America Journal, 41: 1055-1059.
- Hillel, D. 1980. Fundamentals of Soils Physics. Academic Press, New York.
- Hillel, D. 1998. Environmental Soil Physics. Academic Press. San Diego.
- Jaynes, D.B. 1983. Atmosphere and temperature within a reclaimed coal-stripmine and a numerical simulation of acid mine drainage from stripmined lands. Ph.D. Thesis, Pennsylvania State University, 198p.
- Lefebvre, R. 1994. Caractérisation et modélisation numérique du drainage minier acide dans les haldes de stériles. Thèse Ph.D., Université de Laval.
- Lefebvre, R., Gélinas, P., and Isabel, D. 1994 Heat transfer during acid mine drainage production in a waste rock dump, La Mine Doyon (Québec). MEND Report 1.14.2c, 106p.
- Lefebvre, R., Hockley, D., Smolensky, J. and Gélinas, P. 2001a. Multiphase transfer process in waste rock piles producing acid mine drainage. 1. Conceptual model and system characterization. Journal of Contaminant Hydrology, 52 : 137-164.
- Lefebvre, R., Hockley, D., Smolensky, J. and Lamontagne, A. 2001b. Multiphase transfer process in waste rock piles producing acid mine drainage. 2. Applications of numerical simulation. Journal of Contaminant Hydrology, 52 : 165-186.
- Looney, B.B. and Falta, R.W. 2000. Vadose Zone. Science and Technology Solutions. Vol. I. Battelle Press, Columbus, OH.
- Marsily, G. de, 1986. Quantitative Hydrogeology. Academic Press, San Diego, 440 p.
- Mbonimpa, M., Aubertin, M., Bussière, B., and Julien, M. 2000. Procédures et interprétation des essais de diffusion et de consommation d'oxygène en laboratoire et in situ. Colloque sur la recherche des méthodes innovatrices pour le contrôle du drainage minier acide, Nedem 2000, 3-5 octobre 2000, Sherbrooke, Québec : 617-620

- Mbonimpa, M., Aubertin, M., Aachib, M., et Bussière, B. 2002a. Oxygen diffusion and consumption in unsaturated cover materials. Technical Report EPM-RT-02-04, École Polytechnique de Montréal. 55pp.
- Mbonimpa, M., Aubertin, M., Aachib, M. et Bussière, B. 2002b. Diffusion and consumption of oxygen in unsaturated cover materials. Originally submitted in December 2001, revised in January 2003, Canadian Geotechnical Journal.
- Mbonimpa, M., Aubertin, M., Dagenais, A.-M., Bussière, B., Julien, M., and Kissiova, M. 2002c. Interpretation of field tests to determine the oxygen diffusion and reaction rate coefficients of tailings and soil covers. Proceedings of the 55th Canadian Geotechnical and Joint IAH-CNC and CGS Groundwater Speciality Conferences, Niagara Falls, October 2002, pp. 147-154.
- Mihelcic, J.R. 1998. Fundamentals of Environmental Engineering. John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Miller, S.D., Jeffrey, J.J., et Murray, G.S.C. 1990. Identification and management of acid generation mine wastes – Procedures and practices in South-East Asia and the Pacific regions. GAC/MAC joint Annual Meeting. Acide Mine Drainage : Designing for closure. Vancouver, B.C. Canada.
- Millington, R.J. and Shearer, R.C. 1971. Diffusion in aggregated porous media. Soil Science, **111**: 372-378.
- Morin et K. A., Gerencher, E., Jones, C.E., et Konasewich, D.E. 1991. Critical literature review of acid drainage from waste rock. MEND Project 1.11.1. MEND Reports 1988-2000 on CD-Rom: Predicting, Treatment, Monitoring, Technology Transfer, New Ideas.
- Musy, A. et Soutter, M. 1991. Physique du Sol. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes.
- Nastev, M., Therrien, R., Lefebvre, R., et Gélinas, P. 2001. Gas production and migration in landfills and geological materials. Journal of Contaminant Hydrology , 52(1): 187-213
- Nicholson, R.V. 1984. Pyrite oxidation in carbonate-buffered systems : »Experimental kinetic and control by oxygen diffusion in the porous medium. Ph.D. Thesis, University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada.

- Nicholson, R.V., Gillham, R.W., Cherry, J.A., and Reardon, E.J. 1989. Reduction of acid generation in mine tailings through the use of moisture-retaining layers as oxygen barriers. *Canadian Geotechnical Journal*, **26**: 1-8.
- Otwinowski, M. 1993. Quantitative analysis of chemical and biological kinetics for acid mine drainage problem. MEND/B.C. AMD Task Force Report, 143p.
- Otwinowski, M. 1995. Scaling analysis of acid rock drainage. MEND Project 1.19.2, 71p.
- Pantheis, G. et Ritchie, A. I.M. 1991. Macroscopic transport mechanisms as rate-limiting factor in dump leaching of pyritic ores. *Appl. Math. Modeling*, 15 : 136-143.
- Parker, J.C. 1989. Multiphase flow transport in porous media. *Reviews in Geophys.* 27, (3) : 311-328.
- Pruess, K.1987. TOUGH User's Guide. Lawrence Berkely Laboratory LBL-20700, Nuclear Reg. Comm. NUREG/CR-4645, 78 p.
- Riley, M.D. and Ritchie, A.I.M. 1997. Assesment of gas transfer-ANSTO model at Health Steele Mines. MEND Project 1.22.1b, 199p.
- Ritcey, G.M. 1989. Tailings Management - Problems and Solutions in the Mining Industry. Elsevier Science Publishers.
- Ritchie, A.I.M. 1994a. The waste-rock environment. In J.L. Jambor and D.W. Blowes (eds) : Short Course Handbook on Environmental Geochemistry of Sulfide Mine-Waste, Mineralogical Association of Canada, Waterloo, Ontario, May 1994, pp. 133-161.
- Ritchie, A.I.M. 1994b. Sulphide oxydation mechanisms: Controls and rates of oxygen transport. In J.L. Jambor and D.W. Blowes (eds) : Short Course Handbook on Environmental Geochemistry of Sulfide Mine-Waste, Mineralogical Association of Canada, Waterloo, Ontario, May 1994, pp. 201-245.
- Scharer, J.M., Annable, W.K., Nicholson, R.V. 1993. WATAIL 1.0 User's Manual, Institute for Groundwater Research, University of Waterloo, Canada.
- Shackelford, C.D. 1991. Laboratory diffusion testing for waste disposal. A review . *Journal of Contaminant Hydrology*, 7: 117-120.
- Shan, H.-Y. and Tao, J.-T. 2000. Measurement of air permeability of geosynthetic clay liners. *Geotextiles and Geomebranes*, **18**: 251-261.

- Somerton, W.H., El-Shaarani, A.H., et Mobarak, S.M. 1974. High temperature behavior of rocks associated with geothermal type reservoirs. Paper SPE-4897, 44th Annual California Regional Meeting of the Society of Petroleum Engineers, San Francisco, CA.
- Stuart, D.M., John, J.J., et Theresa, A.D. 1994. Developments in predicting and management of acid forming wastes in Australia and Southeast Asia. Proc. 3rd Int. Conf. On the Abatement of Acid Mine Drainage. Pittsburgh, PA, USDI, Bureau of Mines Special Publication SP 06D-94, 177-184.
- Stumm, W. et Morgan, J.J. 1996. Aquatic Chemistry. Chemical Equilibria and Rates in Natural Waters. 3rd Ed., John Wiley & Sons, New York.
- Vargaftik, N.B. 1975. Table on the Thermophysical Properties of Liquids and Gases. 2nd Ed. John Wiley & Sons, New York.
- van Bavel, C.H.M. et Hillel, D. 1975. A simulation study on heat and moisture dynamics as affected by a dry mulch. In: Proc. Summer Comput. Simul. Conf., San Francisco, CA, Simulation Councils, LaJolla, CA.
- van Bavel, C.H.M. et Hillel, D. 1976. Calculating potential and actual evaporation from a bare soil surface by simulation of current flow of water and heat. Agr. Meteorol. 17: 543-476.
- van Genuchten, M.Th. 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Science Society of America Journal, **44**: 892-898.
- Yanful, E.K., Simms, P.H., and Payant, S.C. 1999. Soil covers for controlling acid generation in mine tailings: a laboratory evaluation of the physics and geochemistry. Water, Air, and Soil Pollution, **114**: 347-375.

Liste des symboles

- a indice pour designer la phase gazeuse (air)
- a_{py}^{rock} surface de pyrite par unité de volume de roche stérile (m^2/m^3)
- b facteur stœchiométrique (masse de pyrite oxydé/masse de O_2 consommé)
- c_p capacité thermique massique (J/kgK)
- c_v capacité thermique volumique ($c_v = \rho c_p$) (J/m³K).
- C concentration d'oxygène dans les pores [ML⁻³ ou MolL⁻³]
- C_0 concentration d'oxygène dans l'atmosphère ($C_0 \cong 20.9\%$, or 9.3 mole/m³, or 276 mg/l)
- C_a concentration d'oxygène dans l'air à l'équilibre [ML⁻³ ou MolL⁻³ ou L³L⁻³]
- C_{min} concentration en oxygène au-dessous de laquelle la vitesse de réaction diminue [ML⁻³ ou MolL⁻³ ou L³L⁻³]
- C_w concentration d'oxygène dans l'eau à l'équilibre [ML⁻³ ou MolL⁻³ ou L³L⁻³]
- D^* coefficient de diffusion apparent [L²T⁻¹]
- D_a^o coefficient de diffusion libre dans l'air [L²T⁻¹]
- $D_{a,0}^o$ est le coefficient de diffusion libre dans l'air à 0°C et à la pression atmosphérique P_0 [L²T⁻¹], ($D_{a,0}^o = 2.13 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$)
- D_e coefficient de diffusion effectif [L²T⁻¹]
- D_{ein} coefficient de diffusion de l'oxygène à l'intérieure d'un roche de stérile [L²T⁻¹],
- D_w^o coefficient de diffusion libre dans l'eau [L²T⁻¹]
- F_a^A flux advectif de l'air [L³/L²T].
- $F_c^{C,T}$ flux de chaleur par convection [W/m²]
- F_c^C flux de chaleur transférée par conduction ou (diffusion) thermique (J/m²/s = W/m²)
- $F_o^{A,P}$ flux advectif d'oxygène contenu dans le flux d'air $F_a^{A,P}$
- F_o^D flux diffusif d'oxygène [ML⁻²T⁻¹ ou MolL⁻²T⁻¹]
- F_w^A flux advectif de l'eau [L³/L²T]

F_w^i	débit spécifique d'infiltration d'eau [$L^3L^{-2}T^{-1}$]
g	accélération de la pesanteur [LT^{-2}],
H	constante de Henry définie par le rapport ($H = C_w/C_a$) (-)
IOR	Taux d'oxydation intrinsèque (Intrinsic oxydation rate) ($kg(O_2)/m^3s$)
k_{ra}	conductivité relative de l'air dans un milieu partiellement saturé (-)
k_{rw}	conductivité hydraulique relative de l'eau dans un milieu partiellement saturé (-)
k_{sa}	conductivité hydraulique saturée de l'air [LT^{-1}]
k_{sw}	conductivité hydraulique saturée de l'eau [LT^{-1}]
k_{ua}	fonction de perméabilité effective du milieu non saturé à l'air [LT^{-1}]
K	conductivité intrinsèque du milieu [L^2],
K_r	coefficient du taux de réaction (consommation) de l'oxygène [T^{-1}]
K_r^*	coefficient apparent du taux de réaction (consommation) de l'oxygène [T^{-1}]
$K_r'^*$	coefficient apparent du taux de réaction indépendant de la température et de la concentration d'oxygène disponible [T^{-1}]
K_{r0}	cinétique de réaction de surface (m/s),
L	épaisseur [L]
M_a	masse moléculaire de l'air (0.02896kg/mol)
m_v	paramètre du modèle de van Genuchten ($m_v = 1-1/n_v$) (-)
M_w	masse moléculaire de l'eau (0.018016 kg/mol)
n	porosité (-)
n_v	paramètre du modèle de van Genuchten (-).
P	pression [$ML^{-1}T^{-2}$]
P_{atm}	pression atmosphérique [$ML^{-1}T^{-2}$] (101325 Pa)
P_i	pression partielle du gaz
P_{sat}	pression de vapeur saturante [$ML^{-1}T^{-2}$]
q_{oxy}	quantité d'oxygène consommée q_{oxy}
$Q(z)$	source de chaleur interne (J/m^3s)
r	rayon d'un block de roche de stérile (m),
R	constante universelle des gaz ($R \cong 8.31441 J/mol.K$)
so	indice pour designer la phase solide

s_c	le coefficient de solubilité du gaz dans l'eau [ML^{-3} ou MolL^{-3} ou L^3L^{-3}],
S_r	degré de saturation en eau (-)
S_{re}	degré de saturation effectif (-)
S_{roc}	degré de saturation d'occlusion de l'air (-)
S_{rmin}	degré de saturation d'adsorption (résiduel) de l'eau (-)
S_{rres}	degré de saturation en eau à l'état résiduel (-)
t	temps [T]
t_c	temps requis pour obtenir une oxydation complète de la pyrite dans les blocs de stériles si on considère que seuls le processus limitant la vitesse de réaction est la cinétique de réaction de surface (et non le taux de diffusion de l'oxygène dans les blocs)
T	température en (T_K ou T_C pour °K ou °C) ($K=C+273.15$)
T_a	coefficient de tortuosité dans l'air [-]
T_C	Température en °C
T_{inf}	température limite inférieure au-delà de laquelle la vitesse diminue
T_K	Température en °K
T_{sup}	température limite supérieure au-delà de laquelle la réaction d'oxydation est supposée inactive
T_w	coefficient de tortuosité dans l'eau [-]
w	indice pour désigner la phase liquide (eau)
X_O	facteur qui tient compte de la baisse du taux d'oxydation lorsque la concentration d'oxygène tombe sous un certain seuil C_{min} (-).
x_o	Fraction molaire de l'oxygène (-)
X_T	facteur X_T de correction de la constante du taux de réaction pour tient compte de la diminution de la vitesse de la réaction d'oxydation lorsque la température devient trop élevée (surtout observée dans les haldes) (-)
z	position [L]
α	chaleur dégagée par mole d'oxygène consommée par l'oxydation de la pyrite
α_v	paramètre du modèle de van Genuchten (-)
δ	épaisseur de la couche où se fait l'oxydation de la pyrite (m),
ϕ	paramètre empirique (normalement pris égal à 1.8)
κ	rapport entre le gradient thermique dans la phase considérée et dans la phase liquide (-)

λ	coefficient de Fourier ou conductivité thermique ($J/msK = W/mK$),
χ	index de la géométrie des pore (-)
μ_a	viscosité dynamique de la phase gazeuse [$ML^{-1}T^{-1}$]
μ_w	viscosité dynamique de l'eau [$ML^{-1}T^{-1}$]
θ	fraction volumique des phases d'un matériau poreux (L^3L^{-3})
θ_a	teneur en air volumique (L^3L^{-3})
θ_{eq}	porosité en air équivalente [L^3L^{-3}]
θ_{res}	teneur en eau volumique à l'état résiduel (L^3L^{-3})
θ_s	teneur volumique en solide (L^3L^{-3})
θ_{sat}	teneur en eau volumique saturée ($\theta_{sat} = n$; n étant la porosité) (L^3L^{-3})
θ_w	teneur en eau volumique (L^3L^{-3})
ρ	masse volumique du milieu poreux (kg/m^3).
ρ_a	masse volumique de la phase gazeuse [ML^{-3}]
ρ_o	masse volumique de l'oxygène [kg/m^3]
ρ_w	masse volumique de l'eau [ML^{-3}]
ω_o	Coefficient deHenry (atm)
ψ	succion matricielle ([L] ou [$ML^{-1}T^{-2}$])
ψ_a	pression d'entrée d'air [L] ou [$ML^{-1}T^{-2}$]
\mathcal{G}_o	paramètre associé au comportement thermodynamique de l'oxygène (1/atm)
ΔH_r^0	enthalpie de réaction (KJ/mole)

L'École Polytechnique se spécialise dans la formation d'ingénieurs et la recherche en ingénierie depuis 1873



École Polytechnique de Montréal

**École affiliée à l'Université
de Montréal**

Campus de l'Université de Montréal
C.P. 6079, succ. Centre-ville
Montréal (Québec)
Canada H3C 3A7

www.polymtl.ca

