

# Défis rencontrés dans la modélisation hydrogéochimique des dépôts de résidus en pâte en surface



Thomas Deschamps<sup>1,7</sup>, John W. Molson<sup>5,6</sup>, Mostafa Benzaazoua<sup>1,4</sup>, Michel Aubertin<sup>2,3</sup>, and Bruno Bussière<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Université du Québec en Abitibi-Témiscamingue, <sup>2</sup> Ecole Polytechnique de Montréal, <sup>3</sup> Chaire CRSNG-Polytechnique-UQAT en Environnement et Gestion des Rejets Miniers, <sup>4</sup> Chaire de Recherche du Canada en Gestion Intégrée des Rejets Miniers, <sup>5</sup> Université Laval, Département de géologie et de génie géologique, <sup>6</sup> Chaire de Recherche du Canada sur l'Hydrogéologie Quantitative des Milieux Poreux Fissurés, <sup>7</sup> Actuellement Ecole des Mines de Douai, Département Génie Civil et Environnemental (Univ Lille Nord de France; EMDouai, MPE-GCE)

## RÉSUMÉ

La modélisation hydrogéochimique est couramment utilisée pour analyser des problèmes liés à l'environnement et la gestion des rejets miniers. Cependant, la modélisation des dépôts de surface de résidus en pâte (résidus de concentrateur minier dont une partie de l'eau a été retirée par épaississement et filtration) amène à relever de nouveaux défis. Dans ce papier, nous présenterons, dans un premier temps, différents modèles numériques présentés dans la littérature et portant sur des dépôts de résidus en pâte ou des cas similaires. Dans un deuxième temps, nous discuterons des difficultés à modéliser ces dépôts et des défis à relever pour progresser dans cette voie. Ensuite, nous proposerons un modèle préliminaire pour simuler l'oxydation des minéraux sulfureux dans les résidus en pâte considérés ici comme formant un milieu poreux fracturé.

## ABSTRACT

Hydro-geochemical modelling is a common approach for helping to solve problems related to mining and the environment and to mine waste management. However, modelling of surface paste tailings (mill tailings dewatered by thickening and filtration) involves new challenges. In the first part of this paper, a review of different numerical models for simulating paste tailings-like materials will be presented. In the second part, the authors will discuss the difficulties in modelling such deposits and the challenges to improve hydro-geochemical modelling. In the last part, a model is proposed to simulate the oxidation of sulphide minerals within a paste tailings deposit containing a discrete fracture network.

## 1 INTRODUCTION

La technique des résidus miniers en pâte déposés en surface (appelée ici DPS, pour dépôt en pâte de surface) constitue une approche récente de stockage des résidus. Cette technique consiste à déposer les rejets de concentrateurs sous forme de pâte, de laquelle une partie de l'eau du procédé minéralurgique a été retirée par épaississement et/ou filtration. Même si la modélisation hydrogéochimique est assez couramment employée pour analyser et prédire le comportement environnemental de rejets miniers réactifs (e.g. Bain *et al.*, 2000; Jurjovec *et al.*, 2004; Molson *et al.*, 2004; Molson *et al.*, 2005), il existe pour l'instant peu de tentatives de modélisation de DPS prenant en compte les particularités de cette méthode.

Simms *et al.* (2005; 2007; 2008) ont mené une série d'essais en laboratoire (modèle physique et colonne) ainsi que sur le terrain (à la mine de Bulyanhulu, de la compagnie Barrick Gold, en Tanzanie) pour étudier l'évaporation et les écoulements non saturés dans des résidus sulfureux entreposés en surface selon la méthode des DPS ; ces travaux n'ont pas pris en compte l'aspect géochimique. Ils se sont servis des données récoltées sur le terrain (teneur en eau et albédo) et en

laboratoire (albédo, changement de volume, degré de fissuration, succion matricielle, teneur en eau et vitesse de séchage) pour effectuer des simulations numériques en utilisant un modèle d'écoulement non saturé unidimensionnel. Leurs résultats montrent que le comportement des résidus est influencé par la consolidation, l'évaporation et le changement de volume, ce qui affecte leurs propriétés hydriques. Ces auteurs ont aussi noté qu'il se formait progressivement une croûte de sel à la surface du dépôt de résidus sulfureux, ce qui semble ralentir le taux d'évaporation. De plus, les résidus étudiés ont montré une grande susceptibilité à la fissuration ; ceci est confirmé par les résultats de Saleh-Mbemba *et al.* (2010). La grande majorité des modèles numériques existants ne prennent pas en compte les phénomènes précités.

Molson *et al.* (2006) ont proposé deux approches pour modéliser la génération et le transport de drainage minier acide en milieu poreux fracturé. Dans ces deux approches, on combine un modèle cinétique pour l'oxydation des sulfures et l'équilibre géochimique pour les autres minéraux (notamment les carbonates).

Dans le premier modèle, les fentes de dessiccation sont représentées par une ouverture d'une largeur de quelques millimètres, sur une profondeur pouvant

atteindre environ 1 mètre (selon l'épaisseur des couches déposées), et pour un espacement allant jusqu'à 2 mètres. Le code HYDRUS 2D (Šimůnek *et al.*, 1996) a été utilisé pour simuler les écoulements non-saturés et le logiciel POLYMIN (Molson *et al.*, 2008) a été utilisé pour simuler la diffusion de l'oxygène, l'oxydation des sulfures (selon le modèle du noyau réactif, ou « shrinking core model »; Davis et Ritchie, 1986) et le transport réactif. Après le calcul d'un profil de teneur en eau à l'équilibre, les calculs géochimiques ont été menés en régime permanent.

Le deuxième modèle conceptuel représente des résidus réactifs entreposés au dessus d'un milieu fracturé (comme un massif rocheux) saturé en eau. Le réseau de fracture a été généré avec le modèle NETWORK (Molson, 2006), et leur ouverture moyenne a été fixée à 500µm. Le taux de recharge est imposé à la surface du dépôt. Il y a aussi un écoulement latéral selon un gradient hydraulique régional. La source de DMA du rejet a été simulée avec le modèle PYROX (Wunderly *et al.*, 1996). Le code HEATFLOW (Molson et Frind, 1994, 2010) est utilisé pour le transport réactif.

A travers ces deux séries de simulations, les résultats présentés par Molson *et al.* (2006) ont démontré que la présence des fractures avait un effet considérable sur la génération et la migration du DMA. Bien que ces simulations étaient avant tout de nature conceptuelle (elles ne cherchaient pas à représenter des cas réels), les résultats préliminaires ont démontré que les approches proposées avaient un potentiel prometteur pour représenter les conditions propres aux DPS en présence de fractures.

Parmi les limitations des modélisations réalisées, on note en particulier, dans la deuxième approche, l'utilisation d'une représentation basée uniquement sur les équilibres géochimiques. Puisque les vitesses rapides d'écoulement à travers les fractures empêcheraient probablement d'atteindre l'équilibre dans un cas réel, il serait préférable d'utiliser une approche cinétique pour représenter les réactions plus lentes, telles celles qui impliquent les minéraux silicatés. D'autres limitations des modèles existants sont discutées plus loin.

On discutera aussi dans ce qui suit des difficultés spécifiques à la modélisation des DPS, en se basant sur la littérature. Par la suite, on propose un modèle préliminaire d'oxydation des résidus en milieu fracturé. Ce modèle n'est cependant pas autonome puisqu'il est voué à être couplé à d'autres modèles, pour représenter l'écoulement et l'évaporation de l'eau.

## 2 DIFFICULTÉS POUR MODELISER LES DPS

Les DPS formés de résidus réactifs fissurés présentent certaines spécificités qu'il faudrait pouvoir prendre en compte afin de modéliser adéquatement leur comportement hydrogéochimique, mais certaines de ces spécificités sont encore mal comprises. Les principaux points qu'il faudrait idéalement pouvoir inclure dans une modélisation sont décrits ci-après; on verra qu'ils sont parfois intimement liés entre eux.

### 2.1 Fracturation et discontinuités

Comme mis en évidence par Deschamps *et al.* (2008) et Deschamps (2009), trois différentes catégories de discontinuités peuvent apparaître dans les DPS formés de résidus réactifs (avec ou sans ciment):

1. Fractures de dessiccation : Fractures ouvertes en surface plus ou moins profondes et plus ou moins larges, causées par le dessèchement ;
2. Interfaces entre les couches : Dans certains cas, l'interface entre 2 couches de résidus en pâte peut être ouverte et fortement oxydée ;
3. Fracturation secondaire : De petites fissures causées par l'attaque sulfatique des résidus lorsqu'ils sont cimentés semblent apparaître tardivement et préférentiellement pour certaines quantités de liant.

Ces différentes discontinuités peuvent former un réseau d'infiltration et d'oxydation préférentiel qui peut jouer un rôle important dans la formation du drainage minier acide et donc dans les propriétés environnementales du DPS. Il est à noter que dans le cas de résidus en pâte non cimentés, les fractures peuvent facilement se refermer et « cicatriser » quand la pâte redevient humide, ce qui n'est pas le cas en présence de ciment.

Actuellement, on comprend mal les processus qui causent l'apparition de ces différentes discontinuités dans les DPS, et on ne dispose pas encore de modèles qui puissent prédire leur apparition et leur évolution dans le temps et l'espace (voir par exemple Saleh-Mbemba *et al.*, 2010). On doit donc adopter des approches simplificatrices afin de modéliser l'effet de leur présence dans les résidus en pâte.

Une approche de simulation simplifiée consiste à considérer les différentes discontinuités comme préexistantes dans le modèle numérique; c'est le cas des modélisations présentées ci-après. Pour aller plus loin, il faudrait mieux définir (et comprendre) les mécanismes qui sont à la base de leur formation; mais cela est complexe car chaque type de discontinuités peut être créé par des causes différentes pouvant par contre interagir entre elles.

### 2.2 Évolution des propriétés des résidus en pâte

Godbout (2005) a montré que la courbe de rétention d'eau et la conductivité hydraulique saturée ( $K_{sat}$ ) des résidus en pâte cimentée évoluaient pendant le curage (28 jours). De plus, Deschamps (2009) a montré, grâce à un essai cinétique en modèle physique simulant un DPS au laboratoire, que pour les couches de résidus qui contenaient 2% de ciment, la teneur en eau résiduelle à la fin de chaque cycle d'arrosage/drainage/séchage (de 4 semaines) était de plus en plus basse. Cela indique que les propriétés de rétention d'eau de la pâte cimentée peuvent aussi évoluer à long terme. Deschamps *et al.* (2007) montrent que, pour la pâte non cimentée, la quantité de lixiviat récoltée après chaque arrosage lors d'essais en colonne variait fortement (diminution pendant 15 semaines, puis augmentation). Cela s'expliquerait par

la réactivité des sulfures et les phénomènes de précipitations secondaires qui y sont liés et qui modifient le milieu et surtout sa porosité. Dans le même ordre d'idée, on a observé que, pour plusieurs colonnes contenant du résidu cimenté, la vitesse de drainage était, dans un premier temps faible, puis augmentait après 15 semaines. Ces changements, probablement causés par la fracturation secondaire ou d'autres changements dans la structure, jouent un rôle important dans le comportement hydrogéochimique du matériau.

Les phénomènes de précipitation/dissolution peuvent aussi jouer un rôle important sur l'effet de cette fracturation. Par exemple, on observe une baisse de la porosité dans les résidus juste autour des fractures, ce qui pourrait ralentir la migration de l'eau et la diffusion de l'oxygène et donc atténuer l'effet de ces fractures à plus long terme (Deschamps *et al.*, 2008 et Ouellet *et al.*, 2006).

### 2.3 Prise en compte de l'apport des liants

L'hydratation des ciments dans les résidus cimentés est différente des conditions usuelles qui prévalent dans les mortiers et bétons (Benzaazoua *et al.*, 2004). Si on commence à comprendre les phénomènes d'hydratation dans ces matériaux il n'y a pas, à la connaissance des auteurs, d'étude sur l'hydratation des ciments dans le cas spécifique des dépôts de pâte en surface. L'ajout de ciment, même en faible quantité, joue un rôle important au niveau de l'évolution des propriétés du matériau et de la formation de fractures. De plus, le ciment augmente le un potentiel de neutralisation intrinsèque du rejet. Ces aspects sont plus ou moins faciles à prendre en compte dans la modélisation.

L'ajout de ciment modifie aussi la microstructure (voir par exemple Ouellet *et al.*, 2007), ce qui affecte la cohésion, la porosité et les propriétés hydriques.. De plus, la modification de la microstructure liée à la dissolution des hydrates de ciment influencent fortement les propriétés hydrogéologiques du matériau.

### 2.4 Formation d'une croûte superficielle

On a vu aussi qu'il peut se former une couche superficielle de précipités sur la surface (exposée à l'air) d'un DPS formés de résidus réactifs. Cette couche semble ralentir l'évaporation. Les modèles qui prédisent l'assèchement par drainage et évaporation (Simms *et al.*, 2007; Simms *et al.*, 2008 ; Saleh-Mbemba *et al.*, 2010) semblent assez bien prédire le comportement des résidus en pâte, jusqu'à la formation de cette croûte de sel. Mais les modèles existants ne permettent pas encore de prendre en compte la formation d'une telle couche de sel, et d'en modéliser les effets.

## 3 MODELISATION NUMERIQUE

Dans cette étude, nous avons utilisé le modèle numérique POLYMIN (Molson *et al.*, 2008), qui a été modifié spécifiquement pour ce travail afin de prendre en compte l'oxydation le long des fractures. Le modèle se

compose de quatre modules distincts présentés dans ce qui suit.

### 3.1 Transport de masse

Les espèces en solution sont transportées par advection et dispersion dans la phase aqueuse du milieu poreux suivant l'équation suivante (pour une espèce k) :

$$\frac{\partial \theta_w C_k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta_w D_{ij} \frac{\partial C_k}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i C_k) + R_k \quad (1)$$

où  $C_k$  est la concentration du  $k^{\text{ième}}$  composant dans l'eau des pores [ $\text{ML}^{-3}$ ],  $\theta_w$  est la porosité remplie d'eau (ou teneur en eau volumique),  $q_i$  est le  $i^{\text{ième}}$  composant du flux de Darcy [ $\text{LT}^{-1}$ ],  $D_{ij}$  est le tenseur du coefficient de dispersion [ $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ],  $R_k$  est un terme source/puits du  $k^{\text{ième}}$  élément qui résulte des réactions géochimiques [ $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$ ],  $x_{ij}$  représente les coordonnées spatiales [ $\text{L}$ ] et  $t$  est le temps [ $\text{T}$ ].

### 3.2 Transport de l'oxygène

La convection de l'oxygène est considérée comme négligeable ici. Le transport de l'oxygène en milieu poreux non saturé est donc décrit par les équations de diffusion en milieu poreux :

$$\theta_{eq} \frac{\partial [O_2]_a}{\partial t} = D_e \left( \frac{\partial^2 [O_2]_a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 [O_2]_a}{\partial z^2} \right) - Q_{O_2} \quad (2)$$

où  $[O_2]_a$  est la concentration d'oxygène en phase gazeuse [ $\text{ML}^{-3}$ ],  $\theta_{eq}$  est la teneur en air équivalente [ $\text{L}^3\text{L}^{-3}$ ],  $D_e$  est le coefficient effectif de diffusion de l'oxygène dans les résidus [ $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ] et  $Q_{O_2}$  est le taux de consommation d'oxygène [ $\text{M}_{O_2}\text{L}^{-3}\text{T}^{-1}$ ] (voir équation 8). On notera que  $D_e$  est considéré égal en  $x$  et en  $z$ .

Dans l'équation 2, la teneur en eau équivalente  $\theta_{eq}$  est définie comme suit (Aubertin *et al.*, 1999, 2000) :

$$\theta_{eq} = \theta_a + \theta_w / H \quad (3)$$

où  $\theta_a$  est la porosité remplie par l'air,  $\theta_w$  est la porosité remplis par l'eau et  $H$  est la constante de Henry pour la répartition de l'oxygène entre l'air et l'eau.

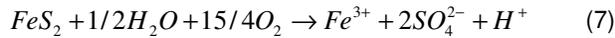
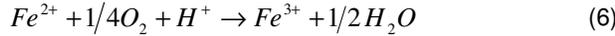
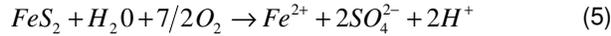
Le coefficient effectif de diffusion de l'oxygène  $D_e$  est calculé à l'aide de l'équation suivante (Aachib *et al.*, 2002) :

$$D_e = \frac{1}{\theta_s} \left[ D_a \theta_a^{p_a} + \frac{D_w}{H} \theta_w^{p_w} \right] \quad (4)$$

où  $D_a$  et  $D_w$  sont les coefficients de diffusion libre dans l'air et dans l'eau,  $p_a$  et  $p_w$  sont des paramètres d'ajustement du modèle qui dépendent de la tortuosité du milieu (ici  $p_a = p_w = 3.3$  (Aachib *et al.*, 2002)),  $H$  est la constante de Henry et  $\theta_s$  est la porosité du matériau.

### 3.3 Oxydation des sulfures

L'oxydation des minéraux sulfureux est à la base de la formation du drainage minier acide dans les résidus miniers. La pyrite est le sulfure le plus commun; son oxydation peut s'écrire de la manière suivante (e.g. Wunderly *et al.*, 1996)



La pyrite s'oxyde en présence d'eau et d'oxygène selon l'équation 5 ou selon l'équation 7 (selon la quantité de  $Fe^{2+}$  oxydé en  $Fe^{3+}$  (éq. 6)). En milieux neutres à alcalins, cette réaction est lente.

Dans le modèle POLYMIN, l'oxydation des sulfures est décrite par un modèle de type noyau réactif. Le taux de consommation (réaction) de l'oxygène  $Q_{O_2}$  devient alors:

$$Q_{O_2} = D_g \frac{3(1-\theta_s)}{R^2} \left( \frac{r_c}{R-r_c} \right) \frac{[O_2]_a}{H} \quad (8)$$

où  $D_g$  est le coefficient de diffusion de l'oxygène à travers les grains [ $L^2T^{-1}$ ] qui tient compte des propriétés de diffusion du film d'eau et de la partie déjà oxydée du grain de sulfure,  $R$  est le rayon moyen d'un grain [L],  $r_c$  est le rayon moyen du noyau non oxydé du grain [L],  $\theta_s$  est la teneur en eau à saturation (soit la porosité),  $H$  est la constante de Henry pour l'oxygène et  $[O_2]_a$  est la concentration en oxygène dans la phase gazeuse.

La diminution du rayon du noyau non oxydé du grain ( $r_c$ ) est décrite par l'équation suivante:

$$\frac{dr_c}{dt} = \frac{D_w(1-\theta)}{\varepsilon\rho_s} \frac{R}{r_c(R-r_c)} \frac{[O_2]_a}{H} \quad (9)$$

où  $\varepsilon$  est la masse d'oxygène sur la masse de soufre consommé dans les équations 5 à 7 ;  $\rho_s = f_s \rho_b$  (sans unité), où  $f_s$  est la masse de sulfure sur la masse des solides et  $\rho_b$  est la densité apparente du matériau (sans unité).

### 3.4 Fractures

La surface des fractures est représentée dans le modèle par des points où la teneur en oxygène est égale à la teneur en oxygène atmosphérique. Dans la présente version du modèle, on considère que tout le réseau de fractures est relié à la surface et que le renouvellement de l'air dans les fractures est suffisamment important pour maintenir la quantité d'oxygène constante (à sa valeur atmosphérique). Cette hypothèse s'appuie sur des observations visuelles de fractures profondes qui étaient altérées dans un tas de résidus issus du démantèlement d'un test en colonne (Deschamps, 2009).

## 4 MODELE CONCEPTUEL

Quatre simulations ont été effectuées dans le cadre de ce travail; les conditions sont décrites au Tableau 1. Le modèle en 2D mesure 0.9 m de haut et 0.4 m de large; le maillage est représenté par une grille de 50 x 100 éléments rectangulaires (soit 51x101 nœuds). Le pas de temps du modèle a été fixé à 0.01 an (POLYMIN ne permet pas d'ajuster automatiquement le pas de temps).

Comme le montre la figure 1, les éléments de la grille sont plus petits autour des fractures. Deux types de profil de teneur en eau sont testés : (i) dans le premier cas (simulations 1 et 2), on considère une pâte de résidus réactifs proche de la saturation en eau ( $\theta_w = 0.37$  pour une porosité de 0.4), (ii) dans le deuxième cas (simulations 3 et 4), on considère un matériau partiellement désaturé (selon un profil qui va d'une teneur en eau volumique  $\theta_w$  de 0.25 en haut à 0.35 en bas).

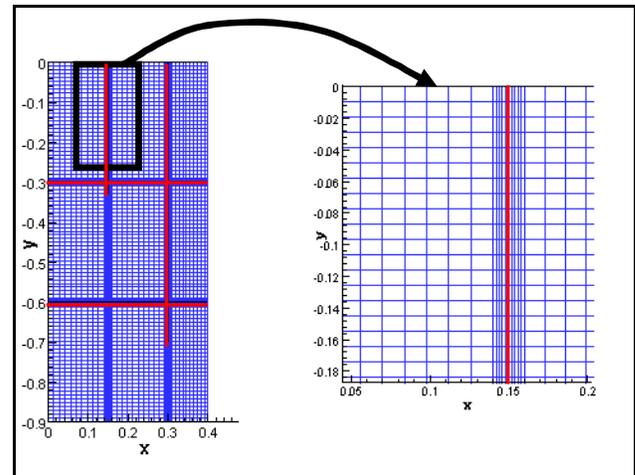


Figure 1. Schéma du modèle avec l'emplacement des fractures dans les simulations 2 et 4 (en rouge) ; la figure de droite montre le détail du maillage.

Tableau 1. Caractéristiques des 4 simulations effectuées.

	teneur en eau volumique	fracture
simulation 1	0.37	non
simulation 2	0.37	oui
simulation 3	désaturé*	non
simulation 4	désaturé*	oui

\* profil de teneur en eau : de 0.25 en haut à 0.35 en bas

Pour chacun de ces cas, une simulation sans discontinuité et une avec des fractures est effectuée. Les différentes discontinuités (fentes de dessiccation et interfaces entre les couches) prises en compte dans le modèle sont montrées à la figure 1.

Le tableau 2 résume les principaux paramètres du modèle communs à toutes les simulations. On remarque notamment que la porosité dans le dépôt de pâte est de 0.4, la taille moyenne des grains est de 34  $\mu m$  et la teneur en pyrite est de 10%. L'évolution du rayon des grains de sulfure matérialise les taux de réactivité du matériau.

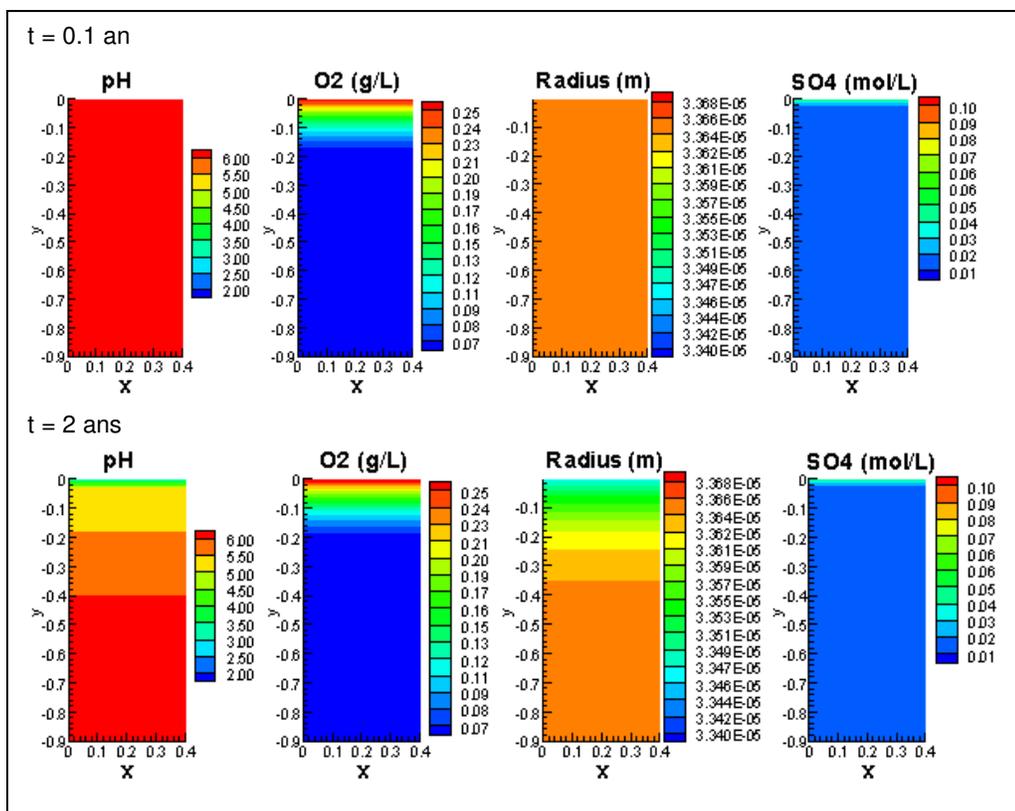


Figure 2. Résultats de la simulation 1 pour des temps de 0.1 et 2 ans, en termes de pH, concentration en  $O_2$  dans l'eau, rayon des grains de sulfure, et concentration en  $SO_4$ .

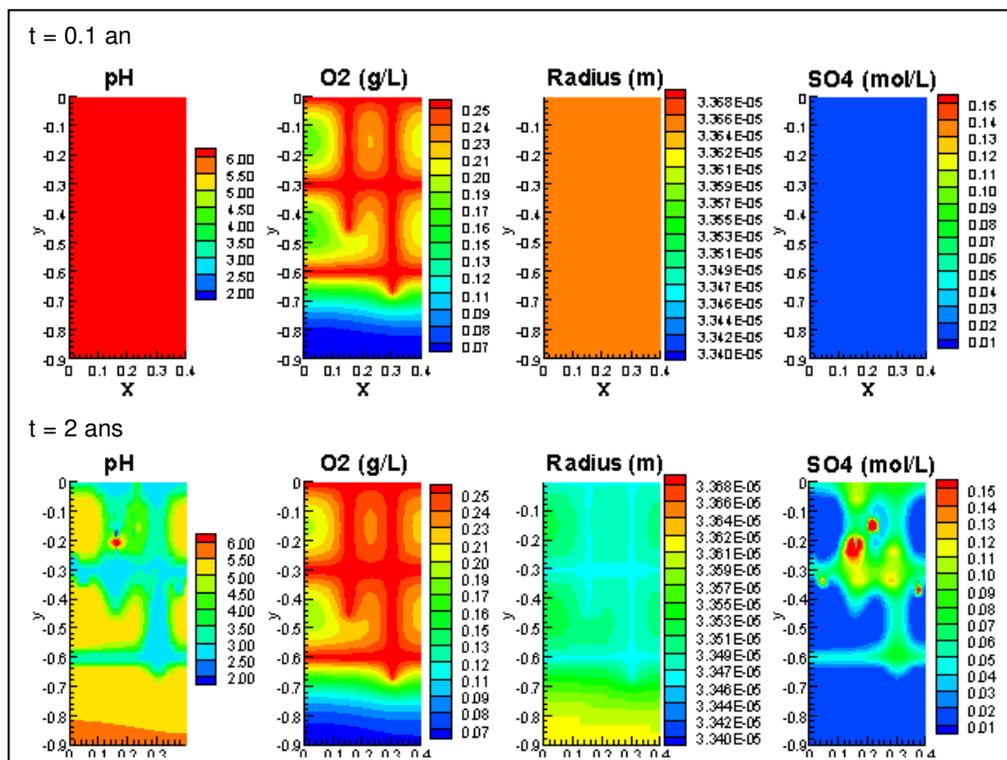


Figure 3. Résultats de la simulation 2 pour des temps de 0.1 et 2 ans, en termes de pH, concentration en  $O_2$  dans l'eau, rayon des grains de sulfure, et concentration en  $SO_4$ .

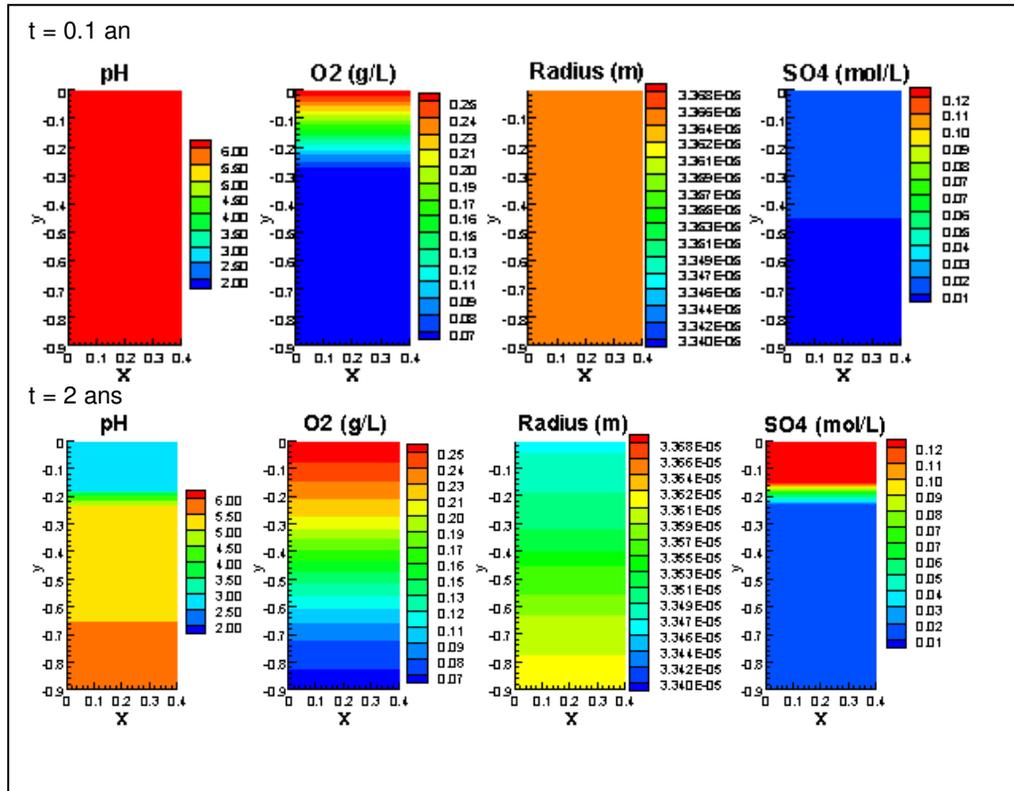


Figure 4. Résultats de la simulation 3 pour des temps de 0.1 et 2 ans, en termes de pH, concentration en  $O_2$  dans l'eau, rayon des grains de sulfure, et concentration en  $SO_4$ .

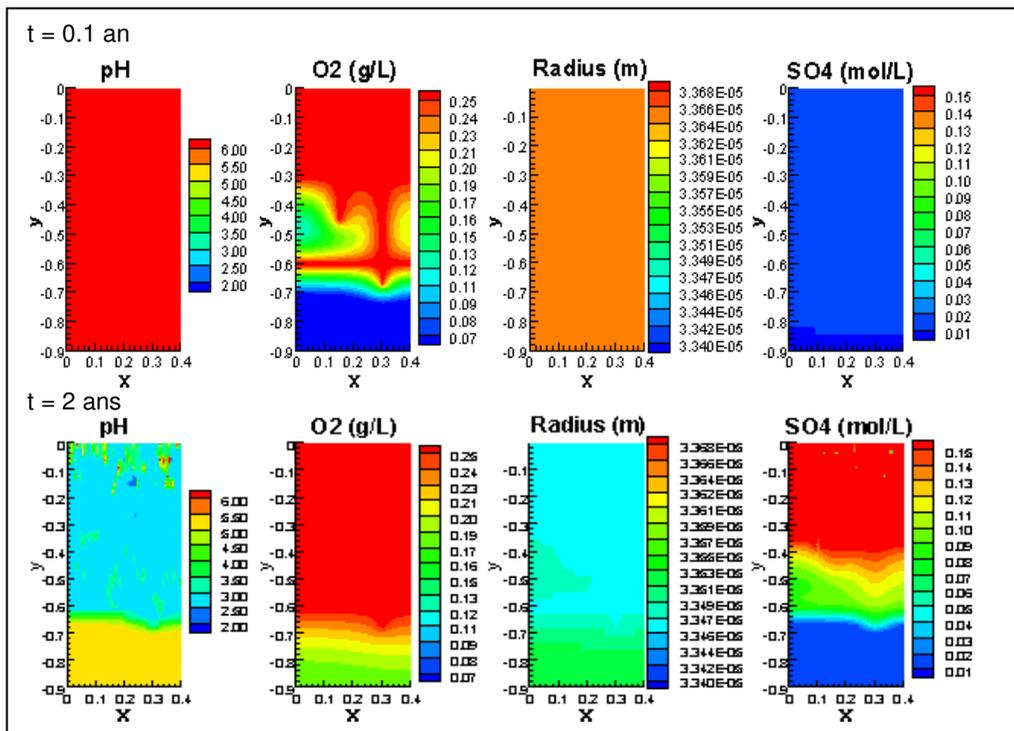


Figure 5. Résultats de la simulation 4 pour des temps de 0.1 et 2 ans, en termes de pH, concentration en  $O_2$  dans l'eau, rayon des grains de sulfure, et concentration en  $SO_4$ .

Tableau 2. Paramètres physiques

Paramètres	valeurs
Porosité	0,4
Taille moyenne des grains (noyau réactif)	34 $\mu\text{m}$
Teneur en pyrite	10%
Constante de Henry (entre l'air et l'eau)	33,2
Température	10°C
Coefficient de diffusion de $\text{O}_2$ dans les grains	$10^{-8} \text{ m}^2/\text{an}$
Dispersivité	0,05 m

En ce qui concerne les conditions frontières, on considère des parois imperméables à gauche et à droite du modèle; le taux de recharge en eau par le haut est de  $0,1 \times 10^{-2} \text{ m/j}$ .

## 5 RESULTATS DES SIMULATIONS

Les figures 2 à 5 montrent les principaux résultats (en termes de pH, concentration en oxygène et en sulfate, et rayon des grains de sulfure) des 4 simulations pour des temps de 0,1 (36,5 jours) et 2 ans. Ces résultats rendent compte de l'importance des discontinuités dans la formation du DMA.

Dans le cas de la simulation 1 (cf. figure 2, cas sans fracture, teneur en eau = 0,37), la baisse du pH reste peu marquée. Lorsqu'on ajoute un réseau de fractures (simulation 2, figure 3), on observe une importante production d'eau acide le long des discontinuités. Pour un milieu partiellement saturé et sans fracture (simulation 3, figure 4), on note que les 20 cm supérieures sont oxydés après 2 ans. Si on ajoute le réseau de fracturation (simulation 4, figure 5), la zone oxydée s'étend alors sur une profondeur de 60-70 cm après 2 ans. Il est à noter que dans le cas de la simulation 4, des problèmes de stabilité numérique du programme sont apparues après 2 ans (voir figure 5 à  $t=2$  ans, particulièrement le pH, ou l'on peut voir de fortes hétérogénéités principalement dans la partie supérieure). Ces instabilités sont apparues en dépit du fait que les différents paramètres de la simulation ont été optimisés pour limiter leur apparition.

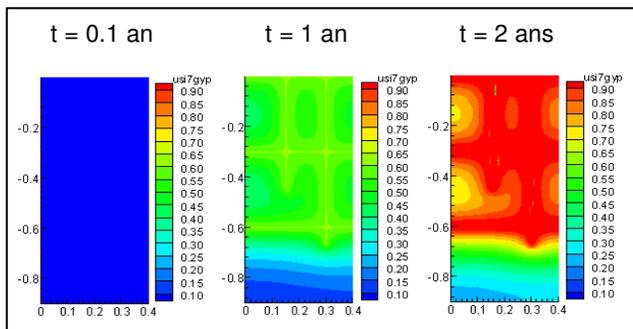


Figure 6. Simulation 2 : précipitation de gypse au niveau des fractures (mol/L).

La figure 6 montre l'évolution de la quantité de gypse ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) présente dans la pâte de résidu pour la

simulation 2. Le gypse se formerait suite à l'oxydation des sulfures qui génèrent des sulfates. Ces derniers précipiteraient avec le calcium issu de la dissolution des carbonates participant aux processus de neutralisation. On observe que les zones de fractures, ainsi que la surface supérieure des résidus en pâte sont des lieux favorables à la précipitation du gypse (et d'autres minéraux comme les hydroxydes de fer, non montrés ici). En réalité, on peut penser que cette précipitation remplirait les pores des zones oxydées, comme observé par Ouellet *et al.* (2006) et Deschamps *et al.* (2008), ce qui pourrait limiter l'expansion de ce phénomène.

Dans le cas des tests en colonne de laboratoire effectués par Deschamps *et al.* (2008), les résidus étaient arrosés toutes les semaines, ce qui leur permettait de demeurer à une saturation en eau élevée (sauf pour une colonne non-arrosée). On a alors observé que l'oxydation se produisait à travers le réseau de discontinuités formé par les fractures et les interfaces entre les couches. La partie supérieure des colonnes ne présentait que des signes d'oxydation superficiels. Ces tendances sont également observées dans nos simulations (voir en particulier la simulation 2, figure 3).

Deschamps (2009) a aussi utilisé un modèle physique de taille intermédiaire (2m x 0.5m) qui était arrosé toutes les quatre semaines ; il subissait par conséquent une certaine désaturation. Dans ce cas, on a observé une oxydation dans le réseau de discontinuités formé par les fractures et les interfaces entre les couches, ainsi que dans la partie supérieure du dépôt. Ces observations concordent bien avec nos simulations (voir en particulier la simulation 4, figure 5).

Les résultats tendent aussi à indiquer que l'impact du réseau de fracturation est d'autant plus important que le degré de saturation des résidus demeure élevé.

## 6 CONCLUSION

La modélisation du comportement hydrogéochimique des DPS formés de résidus miniers sulfureux réactifs soulève plusieurs difficultés et implique plusieurs défis. Nous avons évoqués quatre points problématiques (qui peuvent être intimement liés) : (i) la prise en compte des différentes discontinuités, (ii) les problèmes liés à l'évolution des propriétés du matériau, (iii) l'éventuelle action des ciments, et (iv) la formation d'une croûte de précipités à la surface des couches exposées à l'air. Les différentes simulations effectuées ici avec le modèle POILYMIN permettent de mieux comprendre l'influence de la fracturation dans la formation de drainage minier acide. Une prochaine étape pourrait consister à prendre en compte l'effet des phénomènes de précipitation/dissolution sur la porosité (et donc la diffusion d'oxygène et la circulation de l'eau), principalement autour des fractures.

Pour progresser dans la modélisation numérique du comportement hydrogéochimique des DPS, il serait aussi important de prévoir, et donc de modéliser, la formation des différentes discontinuités observées : (I) définir dans quelles conditions (de teneur en eau ou de succion matricielle) les fissures de dessiccation

apparaissent, selon les propriétés (granulométrie, minéralogie, etc.) du résidu ; (ii) il serait aussi important de mieux comprendre l'effet des différents paramètres (teneur en ciment, minéralogie, sulfates, granulométrie...) qui sont à l'origine du développement de la fracturation secondaire dans les résidus pâte (cimentés ou non).

## REFERENCES

- Aachib, M., Aubertin, M. and Mbonimpa, M., (2002) Laboratory measurements and predictive equations for gas diffusion coefficient of unsaturated soils. In: *Proceedings of the 55th Canadian Geotechnical and Joint IAH-CNC and CGS Groundwater Speciality Conference*, pp. 163-171, Niagara Falls (Ontario).
- Aubertin, M., Aachib, M. and Authier, K., (2000) Evaluation of diffusive gas flux through covers with a GCL. *Geotextiles and Geomembranes*, 18, 215-233.
- Aubertin, M., Bussière, B., Joanes, A.-M., Monzon, M., Gagnon, D., Barbera, J.-M., Bédard, C., Chapuis, R.P. and Bernier, L., (1999) Projet sur les barrières sèches construites à partir de résidus miniers, Phase II: essais en place. *Mine Environment Neutral Drainage (MEND) Report 2.22.2c*.
- Bain, J.G., Blowes, D.W., Robertson, W.D. and Frind, E.O., (2000) Modelling of sulfide oxidation with reactive transport at a mine drainage site. *Journal of Contaminant Hydrology*, 41, 23-47.
- Benzaazoua, M., Fall, M. and Belem, T., (2004) A contribution to understanding the hardening process of cemented pastefill. *Minerals Engineering*, 17, 141-152.
- Davis, G.B. and Ritchie, A.I.M., (1986). A model of oxidation in pyritic mine waste. Part 1. Equations and approximate solution. *Applied Mathematical Modelling*, 10, 314-322.
- Deschamps, T., Benzaazoua, M., Bussière, B., Belem, T., Aubertin, M., (2007) The effect of disposal configuration on the environmental behavior of paste tailings. *Proceedings of Minefill 2007, 29 April-2 May 2007*. Montreal, Canada.
- Deschamps, T., Benzaazoua, M., Bussière, B., Aubertin, M., Belem, T., (2008) Microstructural and geochemical evolution of paste tailings in surface disposal conditions. *Mineral Engineering*, volume 21-5, pages 341-353.
- Deschamps, T. (2009) Study of the physical and hydrogeochemical behaviour of surface paste disposal, *Ph.D. Thesis*, pp. 315, Université du Québec en Abitibi-Témiscamingue.
- Godbout, J., (2005) Évolution des propriétés hydriques des remblais miniers cimentés en pâte durant le curage, *Mémoire de maîtrise*, pp. 213. École Polytechnique de Montréal.
- Jurjovec, J., Blowes, D.W., Ptacek, C.J. and Mayer, K.U., (2004) Multicomponent reactive transport modeling of acid neutralization reactions in mine tailings. *Water Resources Research*, 40, 123-145.
- Molson, J.W., (2006) *The NETWORK model for random orthogonal fracture networks - User guide*. Ecole Polytechnique, Montréal.
- Molson, J.W., Aubertin, M., Bussière, B. and Joanes, A.M., (2004) Simulating acid mine drainage through mine wastes constructed with capillary barrier covers. In: *5th joint IAH-CNC-CGS Conference*, Québec City, Canada.
- Molson, J.W., Aubertin, M., Martin, V. and Bussière, B., (2006) Conceptual and numerical models of oxygen diffusion, sulphide oxidation and acid mine drainage within discretely fractured porous media. In: *Sea to Sky Geotechnique 2006: Proceedings of the 59th Canadian Geotechnical Conference and 7th Joint CGS/IAH Groundwater Speciality Conference*, Vancouver, B.C., Canada.
- Molson, J.W., Fala, O., Aubertin, M. and Bussière, B., (2005) Numerical simulations of pyrite oxidation and acid mine drainage in unsaturated waste rock piles. *Contaminant Hydrology*, 78, 343-371.
- Molson, J.W., and E.O. Frind (2010), *HEATFLOW-SMOKER*, Density-dependent flow and advective-dispersive transport of mass, thermal energy or residence time in 3D fractured porous media, Version 5.0, Université Laval & University of Waterloo.
- Molson, J.W. and Frind, E.O., (1994) Predicting the behaviour of thermal energy in porous and discretely fractured porous media. In: *Vol II of Proceedings: Eighth International Conference of the Association for Computer Methods and Advances in Geomechanics* (Ed. by H.J. Siriwardane, M.M. Zaman), pp. 1237-1242. A.A. Balkema, Rotterdam.
- Molson, J.W., Frind, E.O., Aubertin, M. and Blowes, D.W., (2008) POLYMIN version 4.0: 2D reactive mass transport model with oxygen diffusion, sulphide oxidation & geochemical speciation - User Guide.
- Ouellet, S., Bussière, B., Mbonimpa, M. and Aubertin, M., (2006) Reactivity and mineralogical evolution of an underground mine sulphidic cemented paste backfill. *Minerals engineering*, 19, 407-419.
- Ouellet, S., Bussière, B., Aubertin, M. and Benzaazoua, M. (2007) Microstructural evolution of cemented paste backfill: Mercury intrusion porosimetry test results. *Cement and Concrete Research*, 37, 1654-1665.
- Saleh-Mbemba, F., Aubertin, M. and Mbonimpa, M. (2010) Desiccation and Shrinkage of Low Plasticity Tailings: Testing and Preliminary Modeling. *Proceedings of GEO2010, Calgary, Canada*.
- Simms, P., Grabinsky, M.W. and Zhan, J., (2005) Laboratory evaluation of evaporative drying from surface deposited tailings at the Bulyanhulu gold mine. In: *58th Canadian Geotechnical Conference*, Saskatoon, Canada.
- Simms, P., Grabinsky, M.W. and Zhan, J., (2007) Modelling evaporation of paste tailings from the Bulyanhulu mine. *Canadian Geotechnical Journal*, 44, 1417-1432.

- Simms, P., Grabinsky, M.W., Zhan, J. and Martin, V., (2008) Modelling evaporation and unsaturated flow in surface deposited paste tailings. In: *Réunion annuelle conjointe de l'AGC - AMC - SEG - SGA*, Québec City, Canada.
- Šimůnek, J., Šejna, M., and van Genuchten, M.Th. (1996) HYDRUS-2D, Simulating water flow and solute transport in two-dimensional variably saturated media. U.S. Salinity Laboratory, USDA/ARS Riverside, California, Distributed by International Ground Water Modelling Center, 167 pp.
- Wunderly, M.D., Blowes, D.W., Frind, E.O. and Ptacek, C.J., (1996) Sulfide mineral oxidation and subsequent reactive transport of oxidation products in mine tailings impoundments: A numerical model. *Water Resources Research*, 30, 3173-3187.