

Titre: Évolution thermo-hydro-géochimique d'un puits à colonne permanente conduisant à la précipitation et à la dissolution de la calcite
Title:

Auteur: Fanny Eppner
Author:

Date: 2016

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Eppner, F. (2016). Évolution thermo-hydro-géochimique d'un puits à colonne permanente conduisant à la précipitation et à la dissolution de la calcite [Ph.D. thesis, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.
Citation: <https://publications.polymtl.ca/2386/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/2386/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Philippe Pasquier, & Paul Baudron
Advisors:

Programme: Génie minéral
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉVOLUTION THERMO-HYDRO-GÉOCHIMIQUE D'UN PUIT À COLONNE
PERMANENTE CONDUISANT À LA PRÉCIPITATION ET À LA DISSOLUTION DE
LA CALCITE

FANNY EPPNER
DÉPARTEMENT DES GÉNIES CIVIL, GÉOLOGIQUE ET DES MINES
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR
(GÉNIE MINÉRAL)
DÉCEMBRE 2016

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée :

ÉVOLUTION THERMO-HYDRO-GÉOCHIMIQUE D'UN PUIT À COLONNE
PERMANENTE CONDUISANT À LA PRÉCIPITATION ET À LA DISSOLUTION DE
LA CALCITE

présentée par : EPPNER Fanny

en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiæ Doctor

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

M. COURCELLES Benoît, Doctorat, président

M. PASQUIER Philippe, Ph. D., membre et directeur de recherche

M. BAUDRON Paul, Doctorat, membre et codirecteur de recherche

M. BARBEAU Benoît, Ph. D., membre

M. MOLSON W. John, Ph. D., membre externe

DÉDICACE

*à Dave pour ses encouragements et sa vision toujours positive
à ma famille pour leur soutien, malgré les 6000 km qui nous séparent . . .*

REMERCIEMENTS

Tout d'abord, je tiens à remercier mon directeur de recherche, le professeur Philippe Pasquier, pour la qualité de son encadrement, le partage de son expertise, ainsi que sa grande disponibilité, malgré l'importante charge de travail que représente le développement d'un laboratoire mobile de géothermie. Cette collaboration d'un peu plus de trois ans m'a faite grandir sur le plan professionnel et personnel. Je suis très reconnaissante d'avoir eu la chance de participer à des projets d'envergure, qui sans aucun doute influenceront ma carrière future.

Mes remerciements s'adressent également au professeur Paul Baudron, mon codirecteur de recherche, pour ses précieux conseils et le temps qu'il m'a accordé. Le partage de ses idées a incontestablement augmenté la qualité du projet. De plus, son œil externe à la géothermie m'a permis d'élargir la portée de ma recherche.

Je remercie également les membres du Jury, les professeurs Benoît Courcelles, Benoît Barbeau et John Molson pour le temps consacré à la lecture et au jugement de cette thèse.

Un grand merci à mes collègues du groupe de recherche, que j'ai côtoyé de près ou de loin durant mon passage à Poly : Alain, Benjamin, Louis, Pascale, Bernard, Émilie et Bruno. Je remercie également Samira et Milad, mes amis de bureau, pour avoir vécu cette aventure avec moi. Les nombreuses discussions concernant nos doctorats, nos voyages ou encore l'éloignement avec nos familles m'ont été d'un grand support.

Finalement, je tiens à remercier ma famille pour leur soutien et leur réconfort durant ces premières années passées à l'étranger, ainsi que durant toutes ces années études. Un merci particulier à Dave, qui m'a accompagné à travers chaque étape de mon doctorat. Les nombreux « ça va bien aller j'en suis sûr » et autres pensées positives m'ont fortement aidé à avancer.

RÉSUMÉ

L'installation d'un puits à colonne permanente, destiné à réduire la consommation énergétique des systèmes de chauffage et de climatisation des bâtiments, dans un aquifère calcaire peut engendrer des problèmes opérationnels. En effet, l'exploitation directe de l'eau souterraine comme fluide caloporteur, ainsi que les fréquentes variations de sa composition chimique favorisent la précipitation de la calcite. La démocratisation de cette technologie est ainsi limitée par un manque de connaissance à ce sujet. De ce fait, l'objectif général de la thèse est de comprendre les mécanismes thermo-hydro-géochimiques, conduisant à la précipitation et la dissolution de la calcite au sein d'un puits à colonne permanente, installé dans un aquifère calcaire fracturé.

Les puits à colonne permanente représentent un système complexe, couplant l'écoulement de l'eau souterraine, le transfert de chaleur par advection et conduction, ainsi que le transport réactif multi-espèces dans l'eau. Pour répondre à l'objectif général de la thèse, un modèle numérique d'un puits installé dans un aquifère calcaire fracturé est développé en couplant trois modèles, à savoir un modèle d'écoulement d'eau, un modèle de transfert de chaleur et un modèle géochimique. La vitesse de Darcy, définie par le modèle d'écoulement d'eau, est utilisée par le modèle de transfert de chaleur pour définir la température sur l'ensemble du domaine. Finalement, la vitesse de Darcy et la température sont intégrées dans le modèle géochimique pour simuler le devenir de neuf espèces chimiques considérées.

De manière générale, neuf équations de transport doivent être résolues pour simuler la concentration de neuf espèces chimiques. La formulation mathématique utilisée permet toutefois de résoudre trois équations de transport au lieu de neuf, en groupant les espèces chimiques en trois concentrations totales. Cette opération simplifie largement le processus de simulation, permettant d'économiser du temps de calcul. D'autre part, six réactions à l'équilibre, ainsi que trois réactions de cinétique sont intégrées au modèle développé. Les réactions à l'équilibre sont simulées et couplées aux processus de transport, en résolvant un système de neuf équations et neuf inconnues, subdivisé en deux ensembles d'équations. Le premier ensemble, comprenant six équations non-linéaires, assure l'équilibre chimique, alors que les trois équations linéaires restantes lient les réactions à l'équilibre aux processus de transport. D'autre part, les réactions de cinétique sont simulées par l'intermédiaire d'un terme source. Les activités des neuf espèces chimiques obtenues sont ensuite intégrées au modèle PWP (Plummer,

Wigley et Parkhurst), permettant de calculer le taux de réaction de la calcite. Finalement, dans le but de valider numériquement la méthodologie utilisée, les concentrations obtenues par le modèle sont comparées avec des concentrations de référence fournies par le logiciel PHREEQC. Les résultats démontrent une très bonne corrélation entre les deux modèles, avec une erreur relative moyenne inférieure à 1%. Cette erreur est justifiée par la discrétisation spatiale et temporelle différente dans les deux approches.

Des simulations annuelles démontrent que les processus géochimiques au sein du puits sont fortement influencés par le comportement thermique du système. Lorsque le puits est parfaitement scellé à son sommet et installé dans un aquifère poreux, la calcite a tendance à précipiter à l'entrée du puits durant l'été en réponse à l'injection d'eau chaude, puis à se dissoudre l'hiver à la suite de l'injection d'eau froide. À la base du puits, ainsi que dans le tube de prélèvement, correspondant au tuyau central de l'ouvrage, le comportement inverse est observé. De ce fait, la précipitation et la dissolution de la calcite sont observées simultanément à différents endroits de l'ouvrage.

La saignée est un élément clé du fonctionnement des puits à colonne permanente, puisqu'en réinjectant une partie de l'eau pompée dans un puits d'injection, elle crée un apport d'eau au sein de l'ouvrage. En stabilisant la température et en évacuant une partie des ions en solution, elle peut limiter l'accumulation de la calcite, à condition que le puits soit parfaitement scellé et que la précipitation s'effectue sur la paroi du forage. Dans ce cas, la masse précipitée à l'entrée du puits est plus faible lorsque la saignée est active. Par contre, en supposant que la calcite s'accumule à la base du puits, une opération sans saignée est bénéfique, puisque la dissolution observée à la base de l'ouvrage réduit la couche minérale. D'autre part, la majorité des puits ne sont pas parfaitement scellés, engendrant un échange gazeux avec l'atmosphère. Le dégazage du CO_2 est à prendre en considération, car en augmentant le pH et en réduisant la concentration en H_2CO_3 , il augmente les risques de précipitation de la calcite. Cependant, sans saignée, ce phénomène n'est pas problématique, car le dégazage s'estompe au fil du temps. Par contre, lorsque la saignée est active, la réserve en H_2CO_3 au sein du puits est constamment alimentée par le nouvel apport d'eau souterraine en provenance de l'aquifère, augmentant le taux de précipitation. Finalement, les simulations démontrent que l'exemple qui présente le plus grand risque de précipitation est le puits soumis au dégazage du CO_2 , opéré avec saignée et installé dans un aquifère fracturé. Pour réduire la masse précipitée, il est recommandé de maintenir une opération avec saignée et d'améliorer l'étanchéité du puits.

ABSTRACT

The installation of standing column wells, to reduce the energy consumption for space heating and cooling of buildings, may cause operational problems in a calcareous aquifer. Indeed, the direct use of groundwater as the heat carrier fluid, as well as frequent changes in its chemical composition, favor calcite precipitation. The democratization of this technology is thus limited by a lack of knowledge about this topic. Therefore, the main objective of the thesis is to understand the thermo-hydro-geochemical mechanisms leading to precipitation and dissolution of calcite in a standing column well installed in a fractured calcareous aquifer.

Standing column wells form a complex system, coupling groundwater flow, heat transfer by conduction and advection and multi-species reactive transport in water. To meet the main objective of this thesis, a numerical model of a well installed in a fractured calcareous aquifer is developed by coupling three models, namely a groundwater flow model, a heat transfer model and a geochemical model. The Darcy velocity defined by the groundwater flow model is used by the heat transfer model to calculate the temperature throughout the simulation domain. Finally, the Darcy velocity and the temperature are integrated in the geochemical model to simulate the behavior of nine chemical species.

Generally, nine transport equations must be solved to simulate the concentration of nine chemical species. However, the chosen mathematical formulation allows solving three transport equations instead of nine, by grouping the chemical species in three total concentrations. This operation greatly simplifies the simulation process, saving computation time. On the other hand, six equilibrium reactions, as well as three kinetic reactions are incorporated in the developed model. The equilibrium reactions are simulated and coupled to the transport processes, by solving a system of nine equations and nine unknowns, divided into two sets of equations. The first set comprising six nonlinear equations ensures chemical equilibrium, while the remaining three linear equations link the equilibrium reactions with the transport processes. Furthermore, the kinetic reactions are simulated by a source term. The activities of the nine chemical species are then integrated in the PWP (Plummer, Wigley et Parkhurst) model to calculate the reaction rate of calcite. Finally, in order to numerically validate the methodology used, the concentrations obtained by the model are compared with reference concentrations supplied by the software PHREEQC. The results show a very good correlation between the two models, with a mean relative error of less than 1 %. This error is justified

by the different spatial and temporal discretization between the two approaches.

Annual cyclic simulations demonstrate that geochemical processes within the well are strongly influenced by the thermal behavior of the system. When the well is completely sealed at its top and installed in a porous aquifer, calcite precipitates at the inlet of the well during the summer in response to the injection of warm water, whereas dissolution is observed in winter due to the injection of cold water. At the base of the well, as well as in the riser pipe, corresponding to the central pipe, the opposite behavior is observed. Thereby, precipitation and dissolution of calcite occur simultaneously at different places in the well.

Bleed activation is a key component of the operation of standing column wells, since the reinjection of a part of the pumped water into an injection well generates groundwater flow to the well. By stabilizing the temperature and evacuating a fraction of ions in solution, it may limit calcite accumulation, on condition that the well is perfectly sealed and that precipitation occurs on the borehole wall. In this case, the precipitated mass at the inlet of the well is lower when the bleed is active. Assuming that calcite accumulates at the base of the well, an operation without bleed can also be beneficial, since the dissolution observed at the base of the system reduces the thickness of the mineral layer. On the other hand, most wells are not perfectly sealed, resulting in gas exchange with the atmosphere. CO_2 degassing must be considered, since by increasing the pH and reducing the concentration of H_2CO_3 , degassing increases the risk of precipitation of calcite. However, without bleed, this phenomenon is not problematic as degassing fades over time. If the bleed is active, H_2CO_3 reserve within the well is constantly supplied by groundwater from the aquifer, increasing the rate of precipitation. Finally, the simulations show that the greatest risk of precipitation occurs when the well experiences degassing of CO_2 , and is operated with bleed and installed in a fractured aquifer. To reduce the precipitated mass, it is recommended to operate the well with bleed and to improve the sealing of the well.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	vii
TABLE DES MATIÈRES	ix
LISTE DES TABLEAUX	xii
LISTE DES FIGURES	xiii
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xx
LISTE DES ANNEXES	xxv
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Potentiel des échangeurs de chaleur souterrain	2
1.1.1 Efficacité énergétique	2
1.1.2 Coûts de construction	5
1.1.3 Possibilités d'installation	6
1.2 Problématique	7
1.3 Objectifs de recherche	10
1.4 Plan de la thèse	10
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	11
2.1 Théorie sur la précipitation et la dissolution de la calcite	11
2.1.1 Modèles basés sur des formulations chimiques cinétiques classiques	12
2.1.2 Modèles basés sur des équations empiriques	17
2.1.3 Modèle basé sur la spéciation de surface	19
2.1.4 Synthèse	21
2.2 Risques de précipitation de la calcite dans les puits à colonne permanente	21
2.2.1 Impact des variations de la température	22
2.2.2 Impact du dégazage du CO ₂	23

2.2.3 Synthèse	24
CHAPITRE 3 DÉVELOPPEMENT D'UN MODÈLE DE PUIT À COLONNE PER-	
MANENTE COUPLANT DES PROCESSUS THERMIQUE, HYDROGÉOLOGIQUE	
ET RÉACTIF MULTI-ESPÈCES	
3.1 Description du modèle thermo-hydro-géochimique	26
3.1.1 Géométrie	28
3.1.2 Discrétisation spatiale	30
3.2 Développement du modèle d'écoulement d'eau	31
3.3 Développement du modèle de transfert de chaleur	34
3.4 Développement du modèle géochimique	35
3.4.1 Transport réactif multi-espèces	36
3.4.2 Réactions à l'équilibre	38
3.4.3 Réactions de cinétique	43
3.4.4 Synthèse du modèle géochimique	47
3.5 Conditions aux frontières du modèle numérique	49
3.5.1 Modèle d'écoulement d'eau	49
3.5.2 Modèle de transfert de chaleur	50
3.5.3 Modèle géochimique	51
3.6 Hypothèses	55
CHAPITRE 4 COMPARAISON AVEC UNE SOLUTION DE RÉFÉRENCE	
4.1 Description des modèles en colonne	57
4.1.1 Modèle thermo-hydro-géochimique	57
4.1.2 Modèle de référence	59
4.2 Scénarios de comparaison	63
4.3 Résultats de la validation numérique	63
4.4 Synthèse	66
CHAPITRE 5 ÉVOLUTION THERMO-HYDRO-GÉOCHIMIQUE D'UN PUIT À	
COLONNE PERMANENTE	
5.1 Paramètres d'entrée et conditions frontières	68
5.2 Évolution hydrogéologique	72
5.3 Évolution thermique	78
5.4 Évolution géochimique	79
5.5 Synthèse	90

CHAPITRE 6	IMPACT DE LA SAIGNÉE SUR LES PROCESSUS GÉOCHIMIQUES	93
6.1	Paramètres d'entrée et conditions frontières	93
6.2	Écoulement homogène dans l'aquifère	95
6.2.1	Évolution thermique du puits	95
6.2.2	Évolution géochimique du puits	96
6.3	Écoulement préférentiel dans une fracture	103
6.3.1	Évolution thermique du puits	104
6.3.2	Évolution géochimique du puits	107
6.3.3	Évolution thermique de la fracture	113
6.3.4	Évolution géochimique de la fracture	114
6.4	Synthèse	122
CHAPITRE 7	IMPACT DU DÉGAZAGE DU CO ₂ SUR LES PROCESSUS GÉOCHIMIQUES	126
7.1	Paramètres d'entrée et conditions frontières	126
7.2	Cas sans saignée	127
7.2.1	Évolution géochimique du puits	127
7.2.2	Évolution géochimique de l'aquifère	135
7.2.3	Évolution géochimique de la fracture	140
7.3	Cas avec saignée	145
7.3.1	Évolution géochimique du puits	145
7.3.2	Évolution géochimique de l'aquifère	151
7.3.3	Évolution géochimique de la fracture	155
7.4	Synthèse	157
CHAPITRE 8	DISCUSSION GÉNÉRALE	160
8.1	Modèle thermo-hydro-géochimique	160
8.2	Évolution thermo-hydro-géochimique du puits	161
8.3	Impact de la saignée	162
8.4	Impact du dégazage du CO ₂	164
8.5	Masses précipitées	165
8.6	Indications pour l'opération d'un PCP dans un aquifère calcaire	166
CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS		168
RÉFÉRENCES		172
ANNEXES		177

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1	Paramètres géométriques du modèle développé.	29
Tableau 3.2	Propriétés hydrogéologiques du modèle développé.	32
Tableau 3.3	Propriétés thermiques du modèle développé.	35
Tableau 3.4	Illustration de la méthode Tableaux	42
Tableau 3.5	Propriétés géochimiques du modèle développé	47
Tableau 3.6	Paramètres intégrés dans le modèle de Lunardini (1981)	51
Tableau 4.1	Paramètres intégrés dans les modèles Comsol Multiphysics et PHREEQC.	58
Tableau 5.1	Paramètres géométriques du modèle THG présentant un PCP parfaitement scellé et un milieu poreux équivalent.	70
Tableau 5.2	Paramètres modifiés par rapport au modèle THG présenté au chapitre 3.	70
Tableau 5.3	Composition initiale de l'eau souterraine pour une température de 10 °C, un pH de 7 et une P_{CO_2} de $10^{-1.39}$ atm.	72
Tableau 8.1	Quantification de la masse précipitée au sein du puits pour les différents cas étudiés, après une année d'opération.	166

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Illustration (a) d'un ECS en boucle fermée et (b) d'un ECS en boucle ouverte.	3
Figure 1.2	Illustration d'un puits à colonne permanente (PCP).	5
Figure 2.1	Graphiques permettant de définir (a) la constante k_1 , (b) la quantité correspondant à $k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3} + k_3$ et la constante k_4 et (c) les constantes k_2 et k_3	15
Figure 3.1	Schématisation du modèle développé dans le cadre de cette thèse. . .	29
Figure 3.2	Géométrie et conditions aux frontières pour les modèles d'écoulement d'eau en bleu, de transfert de chaleur en rouge et géochimique en vert.	30
Figure 3.3	Maillage utilisé dans le modèle numérique.	31
Figure 3.4	Illustration de la magnitude de la vitesse de Darcy (v) sur l'ensemble du domaine.	34
Figure 3.5	Illustration de la température (T) sur l'ensemble du domaine.	35
Figure 3.6	Illustration de la concentration en calcium ($[Ca^{2+}]$) sur l'ensemble du domaine	48
Figure 3.7	Illustration des variables EWT et LWT	52
Figure 3.8	Illustration des échanges de CO_2 entre la colonne d'eau dans le puits et l'atmosphère (a) en réalité et (b) dans le modèle développé.	55
Figure 4.1	Schématisation du modèle en colonne utilisé pour la validation de la méthodologie.	58
Figure 4.2	Géométrie du modèle THG en colonne et conditions aux frontières des modèles d'écoulement d'eau en bleu, de transfert de chaleur en rouge et géochimique en vert.	59
Figure 4.3	Évolution de la température à la base de la colonne en fonction du volume des pores purgé, lorsque la température de la solution injectée est de (a) 60 °C et (b) 5 °C. La température initiale est de 25 °C dans les deux cas.	65
Figure 4.4	Évolution de la concentration des espèces à la base de la colonne en fonction du volume des pores purgé, lorsque la température de la solution injectée est de (a) 60 °C et (b) 5 °C. La température initiale est de 25 °C.	66

Figure 5.1	Géométrie du modèle présentant un PCP parfaitement scellé et un milieu poreux équivalent et conditions aux frontières pour les modèles d'écoulement d'eau en bleu, de transfert de chaleur en rouge et géochimie en vert. Les chiffres illustrent le type de condition limite (1 pour Dirichlet, 2 pour Neumann et 3 pour frontière ouverte).	69
Figure 5.2	Charges au sol de chauffage (valeur négative) et de climatisation (valeur positive) hebdomadaires utilisées dans la simulation décrivant un PCP fermé à l'atmosphère, installé dans un milieu poreux équivalent.	71
Figure 5.3	Taux de saignée considéré dans la simulation décrivant un PCP fermé à l'atmosphère, installé dans un milieu poreux équivalent. La saignée est active lorsque $\beta \neq 0$	71
Figure 5.4	Lignes de courant observées dans l'aquifère, (a) le 20 juillet ($\beta = 0$) et (b) le 15 décembre ($\beta = 0.26$), lorsque le puits est fermé à l'atmosphère et installé dans une matrice poreuse. Les flèches indiquent le sens de l'écoulement.	74
Figure 5.5	Charge hydraulique (H) mesurée à la paroi du forage en fonction de la profondeur, (a) le 20 juillet ($\beta = 0$) et (b) le 15 décembre ($\beta = 0.26$), lorsque le puits est fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent.	75
Figure 5.6	Charges hydrauliques et sens de l'écoulement dans le puits et l'aquifère, tels qu'observés en réalité (a et b) et tels que simulés (c et d), sans saignée (colonne de gauche) et avec saignée (colonne de droite).	76
Figure 5.7	Vitesse de Darcy horizontale (\vec{v}_r) mesurée à la paroi du forage en fonction de la profondeur, (a) le 20 juillet ($\beta = 0$) et (b) le 15 décembre ($\beta = 0.26$), lorsque le puits est fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent.	77
Figure 5.8	Composante verticale du champ de vitesse de Darcy, mesurée au centre des fluides (a) ascendant et (b) descendant en fonction de la profondeur, le 20 juillet et le 15 décembre, lorsque le puits est fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent.	77
Figure 5.9	Évolution annuelle de la température mesurée à l'entrée et à la sortie du puits fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent. Tiré de Pasquier, Nguyen, Eppner, Marcotte et Baudron (2016).	78

Figure 5.10	Profils de température en fonction de la profondeur dans les fluides ascendant et descendant, (a) le 15 juillet et (b) le 15 décembre, lorsque le puits est fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent. Adapté de Pasquier, Nguyen, Eppner, Marcotte et Baudron (2016).	79
Figure 5.11	Évolution annuelle de la concentration en (a) H^+ , (b) HCO_3^- , (c) Ca^{2+} , (d) OH^- et (e) H_2CO_3 à l'entrée et à la sortie du puits fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent. Figure (c) tirée de Pasquier, Nguyen, Eppner, Marcotte et Baudron (2016).	82
Figure 5.12	Évolution annuelle (a) du pH et (b) de la pression partielle du CO_2 , à l'entrée et à la sortie du puits fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent.	83
Figure 5.13	Évolution annuelle du taux de réaction de la calcite à l'entrée et à la sortie du puits fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent. Tiré de Pasquier, Nguyen, Eppner, Marcotte et Baudron (2016).	84
Figure 5.14	Distribution spatiale du taux de réaction de la calcite dans le puits et l'aquifère environnant, aux mois de (a) juillet et (b) décembre.	85
Figure 5.15	Profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} (a et b) et du taux de réaction de la calcite (c et d), dans les fluides ascendant et descendant du puits, aux mois de juillet (colonne de gauche) et décembre (colonne de droite). Adapté de Pasquier, Nguyen, Eppner, Marcotte et Baudron (2016).	86
Figure 5.16	Évolution des constantes d'équilibre (a) $K_{CaCO_{3(aq)}}$ et (b) $K_{CaHCO_3^+}$, en fonction de la température à l'entrée du puits.	88
Figure 5.17	Évolution des concentrations en (a) Ca^{2+} , (b) HCO_3^- , (c) CO_3^{2-} , (d) $CaCO_{3(aq)}$ et (e) $CaHCO_3^+$, en fonction de la température à l'entrée du puits.	89
Figure 5.18	Évolution du taux de réaction de la calcite, en fonction de la température à l'entrée du puits.	90
Figure 6.1	Charges au sol hebdomadaires de chauffage et de climatisation utilisées dans les simulations. Tiré de Eppner <i>et al.</i> (2016).	95
Figure 6.2	Évolution temporelle de la température, à l'entrée et à la sortie du puits, avec et sans saignée, lorsque le puits est installé dans un milieu poreux homogène.	96

Figure 6.3	Profils verticaux de la température dans les fluides ascendant et descendant du puits, avec et sans saignée, aux mois de (a) janvier et (b) juillet, lorsque le puits est installé dans un milieu poreux homogène.	96
Figure 6.4	Évolution temporelle de (a) la concentration en Ca^{2+} et (b) du taux de réaction de la calcite, à l'entrée du puits et à la sortie du puits, lorsque le puits est installé dans un milieu poreux homogène.	97
Figure 6.5	Profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} (a et b) et du taux de réaction de la calcite (c et d), dans les fluides ascendant et descendant du puits, avec et sans saignée, aux mois de janvier (colonne de gauche) et juillet (colonne de droite), lorsque le puits est installé dans un milieu poreux homogène.	99
Figure 6.6	Évolution temporelle du bilan de masse dans le tube de prélèvement et dans la partie externe du puits, avec et sans saignée, lorsque le puits est installé dans un aquifère poreux homogène.	100
Figure 6.7	Masse de calcite précipitée (valeur positive) ou dissoute (valeur négative) cumulée à la fin de l'année d'opération, dans la partie externe du PCP (a et c) et dans le tube de prélèvement (b et d), sans saignée (première ligne) et avec saignée (deuxième ligne), lorsque le puits est installé dans un milieu poreux homogène.	101
Figure 6.8	Illustration des mécanismes de précipitation et de dissolution de la calcite au sein d'un puits à colonne permanente.	102
Figure 6.9	Illustration de la vitesse de Darcy sur l'ensemble du domaine, lorsque la saignée est active.	104
Figure 6.10	Évolution temporelle de la température, à l'entrée et à la sortie du puits, avec et sans saignée, lorsque le puits est installé dans un aquifère fracturé.	105
Figure 6.11	Profils verticaux de la température dans les fluides ascendant et descendant, avec et sans saignée, aux mois de (a) juillet et (b) décembre, lorsque le puits est installé dans un aquifère fracturé. Tiré de Eppner <i>et al.</i> (2016)	105
Figure 6.12	Profils verticaux de la température dans les fluides ascendant et descendant, avec et sans saignée, au mois de juillet, lorsque le puits est installé dans un milieu poreux équivalent et dans un aquifère fracturé.	107

Figure 6.13	Profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} (a et b) et du taux de réaction de la calcite (c et d), dans les fluides ascendant et descendant, avec et sans saignée, au mois de juillet (colonne de gauche) et décembre (colonne de droite), lorsque le puits est installé dans un aquifère fracturé. Tiré de Eppner <i>et al.</i> (2016)	109
Figure 6.14	Profils verticaux de la concentration en calcium dans les fluides ascendant et descendant, avec et sans saignée, au mois de juillet, lorsque le puits est installé dans un milieu poreux équivalent et dans un aquifère fracturé.	110
Figure 6.15	Évolution temporelle du bilan de masse dans le tube de prélèvement et dans la partie externe du puits, avec et sans saignée, lorsque le puits est installé dans un aquifère fracturé.	111
Figure 6.16	Masse de calcite précipitée (valeur positive) ou dissoute (valeur négative) cumulée après une année d'opération, dans le tube de prélèvement et dans la partie externe du puits, avec et sans saignée, lorsque le PCP est installé dans un aquifère fracturé.	112
Figure 6.17	Profils radiaux de la température au sein la fracture, (a) sans saignée et (b) avec saignée.	114
Figure 6.18	Distribution de la température dans le puits, la fracture et l'aquifère environnant, au mois de (a) juillet et (b) décembre, lorsque le système est opéré sans saignée.	115
Figure 6.19	Distribution de la température dans le puits, la fracture et l'aquifère environnant, au mois de (a) juillet et (b) décembre, lorsque le système est opéré avec saignée.	116
Figure 6.20	Profils radiaux de la concentration de Ca^{2+} (a et b) et du taux de réaction de la calcite (c et d) au sein de la fracture, sans saignée (colonne de gauche) et avec saignée (colonne de droite).	117
Figure 6.21	Distribution de la concentration en Ca^{2+} au sein de l'aquifère, aux mois de (a) juillet et (b) décembre, sans saignée.	120
Figure 6.22	Distribution du taux de réaction de la calcite au sein de l'aquifère, aux mois de (a) juillet et (b) décembre, sans saignée.	121
Figure 6.23	Distribution de la concentration en calcium au mois de décembre, sans saignée et illustration du flux total de l'ion Ca^{2+} (flèches).	122
Figure 6.24	Profils radiaux de l'ouverture de la fracture, (a) sans saignée et (b) avec saignée.	123

Figure 7.1	Évolution temporelle (a) du flux de CO_2 , (b) de la concentration en H_2CO_3 , (c) du pH, (d) de la concentration en Ca^{2+} et (e) du taux de réaction de la calcite, à l'entrée et à la sortie du puits, avec et sans dégazage, lorsque la saignée n'est pas en fonction.	130
Figure 7.2	Profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} (a et b) et du taux de réaction de la calcite (c et d), dans les fluides ascendant et descendant du puits, aux mois de juillet (colonne de gauche) et décembre (colonne de droite), avec et sans dégazage, lorsque la saignée n'est pas en fonction.	132
Figure 7.3	Évolution temporelle du bilan de masse dans le tube de prélèvement et dans la partie externe du puits, avec et sans dégazage, lorsque la saignée n'est pas en fonction.	133
Figure 7.4	Masse de calcite précipitée (valeur positive) ou dissoute (valeur négative) cumulée à la fin de l'année d'opération dans la partie externe du PCP (a et c) et dans le tube de prélèvement (b et d), sans dégazage (première ligne) et avec dégazage (deuxième ligne), lorsque la saignée n'est pas en fonction.	134
Figure 7.5	Distribution de la concentration en Ca^{2+} dans le puits et l'aquifère fracturé, sans dégazage (a et b) et avec dégazage (c et d), aux mois de juillet (colonne de gauche) et décembre (colonne de droite), lorsque la saignée n'est pas en fonction. Les flèches illustrent la direction du flux total du calcium.	137
Figure 7.6	Direction de l'écoulement souterrain au sein de l'aquifère, lorsque la saignée n'est pas en fonction.	139
Figure 7.7	Évolution temporelle des flux radiaux advectif, diffusif et dispersif de l'espèce Ca^{2+} , avec et sans dégazage, (a) dans la partie supérieure du système (0.5 m du centre du puits et à 40 m de profondeur) et (b) dans la partie inférieure du système (0.5 m du centre du puits et à 240 m de profondeur), lorsque la saignée n'est pas en fonction.	140
Figure 7.8	Profils radiaux de la concentration en calcium (a et b), du pH (c et d), du taux de réaction de la calcite (e et f) et de l'ouverture de la fracture (g et h), à 150 m de profondeur, sans dégazage (colonne de gauche) et avec dégazage (colonne de droite), lorsque la saignée n'est pas en fonction.	143
Figure 7.9	Évolution temporelle du bilan de masse dans la fracture, avec et sans dégazage, lorsque la saignée n'est pas en fonction.	144

Figure 7.10	Masse de calcite précipitée ou dissoute cumulée après une année d'opération dans la fracture, (a) sans dégazage et (b) avec dégazage, lorsque la saignée n'est pas en fonction.	145
Figure 7.11	Évolution temporelle (a) du flux de CO_2 , (b) de la concentration en H_2CO_3 , (c) du pH, (d) de la concentration en Ca^{2+} et (e) du taux de réaction de la calcite, à l'entrée et à la sortie du puits, avec et sans dégazage, lorsque la saignée est active.	148
Figure 7.12	Taux de réaction de la calcite en fonction du temps, à l'entrée et à la sortie du puits dont le sommet est ouvert à l'atmosphère, avec et sans saignée.	149
Figure 7.13	Profils verticaux du taux de réaction de la calcite dans les fluides ascendant et descendant du puits aux mois de (a) juillet et (b) décembre, avec et sans dégazage, lorsque la saignée est active.	149
Figure 7.14	Évolution temporelle du bilan de masse de calcite dans le tube de prélèvement et dans la partie externe du puits, avec et sans dégazage, lorsque la saignée est active.	150
Figure 7.15	Masse de calcite précipitée (valeur positive) ou dissoute (valeur négative) cumulée à la fin de l'année d'opération, dans la partie externe du PCP (a et c) et dans le tube de prélèvement (b et d), sans dégazage (première ligne) et avec dégazage (deuxième ligne), lorsque la saignée est active.	152
Figure 7.16	Direction de l'écoulement souterrain au sein de l'aquifère, lorsque la saignée est en fonction.	153
Figure 7.17	Distribution de la concentration en Ca^{2+} dans le puits et l'aquifère fracturé, sans dégazage (a et b) et avec dégazage (c et d), aux mois de juillet (colonne de gauche) et décembre (colonne de droite), lorsque la saignée est active. Les flèches illustrent la direction du flux total de calcium.	154
Figure 7.18	Évolution temporelle du flux total de Ca^{2+} dans l'aquifère, à 0.5 m du centre du puits et 40 m de profondeur, avec et sans saignée, pour les cas avec et sans dégazage.	155
Figure 7.19	Profils radiaux de la concentration en calcium (a et b), du pH (c et d), du taux de réaction de la calcite (e et f) et de l'ouverture de la fracture (g et h), à 150 m de profondeur, sans dégazage (colonne de gauche) et avec dégazage (colonne de droite), lorsque la saignée est active.	157
Figure A.1	Extrait du code PHREEQC utilisé pour la validation numérique.	178

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Acronymes

COP	Coefficient de performance
ECS	Échangeur de chaleur souterrain
EWT	Entering water temperature (température d'entrée de l'eau)
IAP	Ionic activity product (produit d'activité ionique)
LWT	Leaving water temperature (température de sortie de l'eau)
PAC	Pompe à chaleur
PCP	Puits à colonne permanente
PWP	Plummer, Wigley et Parkhurst
SI	Saturation index (indice de saturation)
THG	Thermo-hydro-géochimique

Alphabet latin

Paramètres géométriques et temporelles

A_i	Espace annulaire entre la paroi interne du forage et la paroi externe du tuyau central (m ²)
A_o	Aire transversale du tuyau central (m ²)
b	Ouverture de la fracture (m)
b_{ini}	Ouverture initiale de la fracture (m)
L_a	Épaisseur de l'aquifère (m)
L_b	Longueur du puits à colonne permanente (m)
L_{fr}	Profondeur de la fracture (m)
r_a	Rayon de l'aquifère (m)
r_b	Rayon du forage (m)
r_{pi}	Rayon interne du tuyau central du puits (m)
r_{pe}	Rayon externe du tuyau central du puits (m)
t	Temps (s)
t_d	Laps de temps entre le 1 ^{er} janvier et la température la plus froide (s)
x	Distance (m)
z	Profondeur sous la surface du sol (m)

Paramètres hydrauliques

D_v	Coordonnée verticale (-)
g	Accélération gravitationnelle (m/s^2)
H	Charge hydraulique (m)
K_j	Conductivité hydraulique (m/s)
p	Pression (Pa)
S	Coefficient d'emmagasinement (-)
$S_{s,j}$	Emmagasinement spécifique (1/m)
\dot{V}	Débit de pompage (m^3/s)
\bar{v}	Vitesse de Darcy (m/s)
v_i	Vitesse du fluide ascendant (m/s)
v_o	Vitesse du fluide descendant (m/s)

Paramètres thermiques

$C_{m,j}$	Capacité thermique massique ($\text{kJ}/(\text{°C} \cdot \text{kg})$)
$C_{s,j}$	Capacité thermique volumique ($\text{kJ}/(\text{m}^3 \cdot \text{K})$)
k_{eq}	Conductivité thermique équivalente du sol ($\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$)
k_j	Conductivité thermique ($\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$)
P	Période d'un cycle (s)
\dot{Q}_g	Charge extraite ou transmise au sol (J/s)
q_g	Flux de chaleur (W/m^2)
R_T	Facteur de retard
T	Température ($^{\circ}\text{C}$ ou K)
T_m	Température moyenne annuelle de l'air ($^{\circ}\text{C}$)
T_o	Amplitude des variations saisonnière de T_m ($^{\circ}\text{C}$)

Paramètres géochimiques

A	Aire de la calcite (m^2)
a_j	Diamètre effectif de l'ion (m)
A_T, B_T	Constantes dépendantes de la température (-)
\mathbf{c}	Vecteur contenant les concentrations des espèces chimiques (-)
c_j	Concentration des espèces (kg/m^3)
D	Coefficient de dispersion (m^2/s)
$D_{f,j}$	Diffusion moléculaire (m^2/s)

D_L	Coefficient de dispersion hydrodynamique longitudinal (m^2/s)
$D_{l,j}$	Dispersivité longitudinale (m)
$D_{t,j}$	Dispersivité transversale (m)
e	Épaisseur de la couche de calcite précipitée sur une des parois de la fracture (m)
f_2	Coefficient d'activité divalent (-)
$F_{Ca^{2+},ad}$	Flux advectif de l'ion Ca^{2+} ($kg/(m^2 \cdot s)$)
$F_{Ca^{2+},dis}$	Flux dispersif de l'ion Ca^{2+} ($kg/(m^2 \cdot s)$)
$F_{Ca^{2+},dif}$	Flux diffusif de l'ion Ca^{2+} ($kg/(m^2 \cdot s)$)
F_{CO_2}	Flux de CO_2 ($kg/(m^2 \cdot s)$)
F_{Γ_j}	Flux des espèces totales ($kg/(m^2 \cdot s)$)
I	Force ionique de la solution (mol/l)
$\mathbf{I}_{N_s - N_r}$	Matrice unité composée de $N_s - N_r$ lignes ou colonnes (-)
k'_1	Constante 10 à 20 fois plus grande que k_1 (m/s)
k_{+j}, k_{-j}	Constantes de réaction directes et inverses (unités variables)
k_{CO_2}	Vitesse de transfert du CO_2 (m/s)
\mathbf{K}_{eq}	Vecteur contenant les constantes d'équilibre des réactions à l'équilibre (-)
K_j	Constante d'équilibre (unités variables)
M	Ion métallique (-)
m, n	Coefficient stoechiométrique des réactifs et des produits (-)
N_r, N_s	Nombre de réaction à l'équilibre et nombre d'espèce (-)
P_{CO_2}	Pression partielle du CO_2 (atm)
$\hat{P}_{CO_2}, \hat{P}_{CO_2}$	P_{CO_2} de l'eau souterraine et de l'atmosphère (atm)
\tilde{R}	Taux de réaction global de la calcite défini par le modèle PWP ($kg/(cm^2 \cdot s)$)
R_b	Taux de réaction inverse de la calcite ($kg/(cm^2 \cdot s)$)
$\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_k$	Vecteurs contenant les taux de réaction des réactions à l'équilibre et des réactions de cinétiques (-)
R_f	Taux de réaction direct de la calcite ($kg/(cm^2 \cdot s)$)
\hat{R}_j	Taux de réaction des réactions de précipitation et de dissolution de la calcite ($kg/(cm^2 \cdot s)$)
s	Surface de cristallisation (m^2)
\mathbf{S}^*	Matrice utilisée pour définir la matrice \mathbf{U} (-)
$\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$	Matrices stoechiométriques faisant références aux espèces primaires et secondaires (-)
S_c	Nombre de Schmidt du CO_2 (-)
$\mathbf{S}_e, \mathbf{S}_k$	Matrices stoechiométriques pour les réactions à l'équilibre et les réactions de

	cinétique (-)
\mathbf{U}	Matrice de transformation (-)
u_{av}	Vitesse du vent (m/s)
V	Volume de la solution (m ³)
z_j	Charge ionique de l'ion (-)
$\nabla\alpha_{Ca^{2+}}$	Gradient de la concentration en calcium (kg/m ⁴)

*Alphabet grec**Paramètres hydrauliques*

β	Taux de saignée (-)
κ_j	Perméabilité (m ²)
μ	Viscosité dynamique de l'eau (kg/(m · s))
ρ	Densité du fluide (kg/m ³)
φ_j	Porosité (-)

Paramètres thermiques

α_t	Diffusivité thermique du sol (m ² /s)
β_L	Dispersivité thermique (m)
κ_e	Coefficient de diffusion thermique (m ² /s)
κ_L	Coefficient de dispersion thermique (m ² /s)
ω	Fréquence angulaire (1/s)
ρC_P	Capacité thermique volumique équivalente (J/(kg · K))

Paramètres géochimiques

α	Vecteur contenant les activités des espèces chimiques (-)
α_j	Activité des espèces (kg/m ³)
γ	Coefficient d'activité (-)
Γ_j	Concentration des espèces totales (kg/m ³)
$\tilde{\Gamma}_j$	Concentration des espèces totales imposée au sommet de la partie externe du puits (kg/m ³)
$\hat{\Gamma}_j$	Concentration des espèces totales imposée à la base de la partie interne du puits (kg/m ³)
Γ	Vecteur contenant les concentrations totales (-)
Ω	État de saturation par rapport à la calcite (-)
ρ_{CaCO_3}	Densité de la calcite (kg/m ³)

Indice et exposant

<i>a</i>	Aquifère
<i>eq</i>	Équivalent
<i>f</i>	Fluide
<i>fr</i>	Fracture
<i>p</i>	Produit ou pipe
<i>r</i>	Réactif
<i>s</i>	Sol
<i>w</i>	Water
'	Opérateur transposé

LISTE DES ANNEXES

Annexe A	Code PHREEQC utilisé pour la validation numérique	177
----------	---	-----

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

L'énergie est un élément incontournable de notre société moderne. Le transport, le chauffage, l'éclairage et la climatisation sont, à titre d'exemples, devenus indispensables dans nos modes de vie contemporains. En 2012, la consommation énergétique mondiale provenait à 81.7 % de la combustion d'énergies fossiles, à 13.5 % des énergies renouvelables et à 4.8 % du nucléaire (AIE, 2012). Certaines sources d'énergie primaires exploitées exercent une pression considérable sur l'environnement. L'exploitation intensive des combustibles fossiles par exemple génère des émissions importantes de gaz à effet de serre, contribuant à l'élévation globale des températures moyennes. Par conséquent, il est essentiel de modifier nos habitudes, d'innover et d'adopter des mesures d'économie d'énergie en vue de respecter les engagements signés à Paris en décembre 2015, lors de la 21^e Conférence des Nations Unies sur les changements climatiques, visant à contenir le réchauffement global sous la barre des 2 °C d'ici 2100. En misant sur le développement durable et l'efficacité énergétique, il est possible d'améliorer la gestion de la production et de la consommation d'énergie, sans compromettre le niveau de confort de la population.

Dans les climats froids, une réduction de la consommation énergétique globale passe inévitablement par la diminution de l'énergie consommée par les systèmes de chauffage. Au Québec par exemple, en 2012 le chauffage des espaces et de l'eau chaude sanitaire représentait 316 PJ (pétajoule ou million de milliards de joules) dans le secteur résidentiel et 237 PJ dans le secteur commercial et institutionnel, correspondant respectivement à 78 % et 38 % de l'énergie consommée dans chacun des deux secteurs (Whitmore et Pineau, 2015). De ce fait, améliorer l'efficacité énergétique des bâtiments, en axant les efforts sur les systèmes de chauffage, peut avoir un impact considérable sur la consommation énergétique de la province. De plus, des économies financières, ainsi qu'une diminution de l'empreinte écologique sont les conséquences directes d'une baisse de la consommation d'énergie. La communauté scientifique est donc amenée à axer ses recherches vers des mesures destinées à réduire la consommation énergétique des systèmes de chauffage des bâtiments.

La géothermie de basse température est une solution écoresponsable, pouvant réduire jusqu'à 72 % la consommation d'énergie associée au chauffage des bâtiments (Ewings, 2008). En effet, en exploitant la capacité thermique des matériaux géologiques, ces systèmes composés d'un Échangeur de Chaleur Souterrain (ECS) et d'une Pompe À Chaleur (PAC) fournissent entre

trois à cinq fois l'énergie électrique nécessaire à leur opération. Durant la saison froide, la chaleur extraite du milieu géologique est transférée par une PAC, au bâtiment via un système de distribution de chaleur (généralement par air pulsé ou planchers radiants). Durant la période estivale, la chaleur du bâtiment est captée par la PAC, puis réinjectée dans le sous-sol. Ces systèmes se différencient par la géométrie de l'ECS, dont les trois principaux types sont les systèmes en boucle fermée, les systèmes en boucle ouverte et les Puits à Colonne Permanente (PCP). La section suivante vise à présenter ces trois types d'ECS, selon les caractéristiques suivantes : l'efficacité énergétique, les coûts de construction et les possibilités d'installation dans différents environnements géologiques et urbains.

1.1 Potentiel des échangeurs de chaleur souterrain

1.1.1 Efficacité énergétique

La quantité d'énergie extraite des systèmes géothermiques opérant à basse température est directement proportionnelle à l'efficacité du transfert de chaleur entre la formation géologique et le fluide caloporteur. Cet échange thermique, induit par conduction et/ou advection, est engendré par la circulation d'un fluide caloporteur dans l'ECS. Un échange de chaleur efficace se traduit par une augmentation importante de la température du fluide au sein du puits durant l'hiver et une diminution conséquente durant l'été, ayant pour conséquence d'augmenter le rendement énergétique du système. Par conséquent, la nature du fluide caloporteur, la géométrie du puits, ainsi que la conductivité thermique des matériaux et de la formation géologique sont les principaux éléments influençant les performances énergétiques des ECS.

Les systèmes en boucle fermée (Fig. 1.1 a) sont composés d'une boucle en forme de U, insérée dans un puits d'une longueur typique variant entre 100 et 200 m de profondeur. En circulant dans la boucle souterraine, le fluide caloporteur (généralement un mélange d'eau et d'anti-gel) échange de la chaleur par convection avec le tuyau, puis par conduction avec le tuyau et la formation géologique. L'énergie thermique récupérée par le fluide en mode chauffage est ensuite captée par une PAC, puis amplifiée en vue de transmettre au bâtiment une énergie thermique suffisante pour chauffer les espaces et l'eau chaude sanitaire. Cependant, la quantité de chaleur recueillie par le fluide caloporteur est limitée par plusieurs paramètres, dont notamment la conductivité thermique des tuyaux et du matériel de remplissage, ainsi que la géométrie du puits et des tuyaux, qui ensemble forment la résistance thermique équivalente du puits (Yavuzturk et Chiasson, 2002). Le rendement énergétique des ECS en boucle fermée est ainsi relativement faible, soit un taux d'extraction ou d'injection de chaleur d'approxi-

mativement 50 watts par mètre de forage (Banks, 2008). Par conséquent, il est fréquent que plusieurs puits soient nécessaires pour subvenir aux besoins thermiques d'un seul bâtiment.

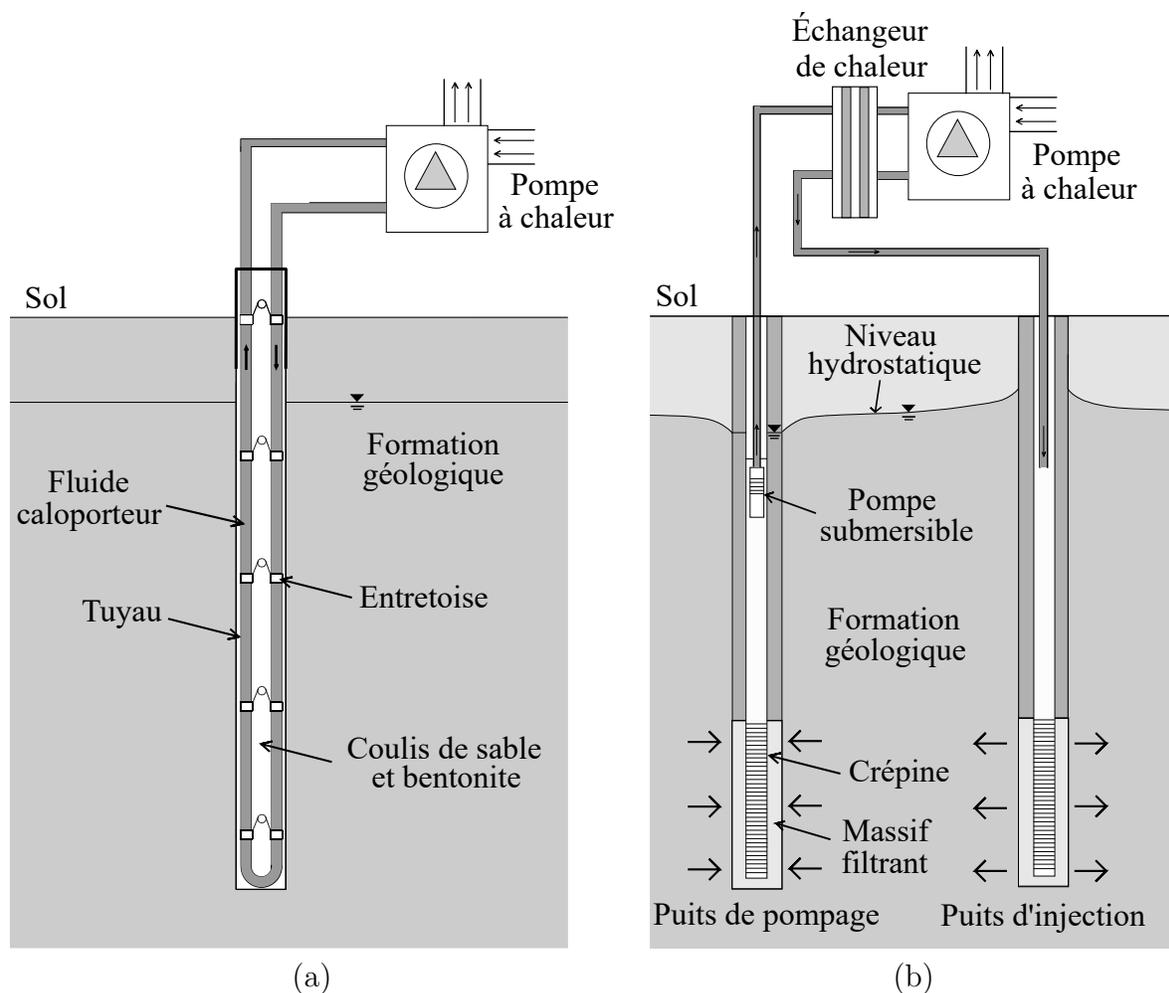


Figure 1.1 Illustration (a) d'un ECS en boucle fermée et (b) d'un ECS en boucle ouverte.

Dans les systèmes en boucle ouverte, schématisés à la Fig. 1.1 (b), la source de chaleur provient directement de l'eau souterraine, utilisée comme fluide caloporteur. L'eau est captée par un puits de pompage, afin d'être acheminée vers une pompe à chaleur. De ce fait, l'échange de chaleur entre le puits et la formation géologique environnante s'effectue par advection, nécessitant la présence d'un aquifère productif. L'eau pompée est ensuite réinjectée dans des puits d'injection, afin de prévenir l'abaissement de la nappe phréatique, conduisant à l'épuisement de la ressource disponible. En raison des variations de température, la circulation de l'eau souterraine au sein de la PAC peut engendrer des problèmes opérationnels, associés notamment à la précipitation de minéraux et au développement d'algues et de bactéries. Pour faciliter

l'entretien du système, il est recommandé de placer un échangeur de chaleur à la sortie de la boucle souterraine, évitant le contact entre l'eau souterraine et la PAC. En premier lieu, l'eau souterraine transfère sa chaleur au fluide circulant dans l'échangeur de chaleur, qui dans un deuxième temps transmet son énergie thermique à la PAC. Lors de l'entretien du système, l'échangeur de chaleur, ayant un contact permanent avec l'eau souterraine, peut facilement être nettoyé. Par ailleurs, l'utilisation directe de l'eau souterraine comme fluide caloporteur augmente la quantité de chaleur transmise à la PAC et au bâtiment, car l'échange thermique n'est pas limité par la résistance thermique équivalente du puits. Les performances énergétiques élevées fournies par ce type de système permettent l'utilisation de puits relativement courts, soit généralement entre 25 et 40 m en fonction des conditions hydrogéologiques.

Les PCP, présentés à la Fig. 1.2, se situent à la frontière entre un système ouvert et un système fermé. La boucle souterraine est dite "ouverte" puisque la source de chaleur provient de l'eau souterraine. Cependant, ils s'apparentent aux systèmes en boucle fermée car l'eau souterraine, utilisée comme fluide caloporteur, est pompée puis réinjectée au sein du même puits. Les PCP sont forés dans le socle à une profondeur variant généralement entre 300 et 500 m. Un tube de prélèvement est ensuite inséré au sein du forage. Une pompe submersible placée au centre de ce tube permet d'acheminer l'eau souterraine vers une PAC. L'énergie thermique fournie par l'eau souterraine est transmise au bâtiment par l'intermédiaire d'un système de distribution de chaleur. L'eau pompée est finalement réinjectée dans le même puits, entre le tube de prélèvement et la paroi du forage. La proximité du fluide descendant au sein du PCP avec la formation géologique environnante favorise les échanges de chaleur par advection et conduction. Conséquemment, la résistance thermique équivalente du PCP est inférieure à celle d'un système en boucle fermée (Yavuzturk et Chiasson, 2002). D'autre part, la réinjection de l'eau pompée au sein du même puits réduit la quantité d'eau prélevée dans l'aquifère. De ce fait, l'opération d'un PCP ne nécessite pas la présence d'un aquifère extrêmement productif.

En mode chauffage, l'eau réinjectée à l'entrée du PCP présente une température plus faible que l'eau pompée à la sortie du puits puisque une certaine quantité de chaleur a été captée par la PAC. Le comportement inverse est observé en mode climatisation. Par conséquent, la température de l'eau souterraine au sein de l'ECS est logiquement diminuée durant la période hivernale et augmentée durant la saison chaude. Ces oscillations thermiques peuvent être atténuées en déchargeant une partie de l'eau pompée dans un puits d'injection. Cette opération, appelée *saignée*, crée un rabattement dans le PCP, générant subséquemment un écoulement d'eau souterraine en direction du puits. Le nouvel apport d'eau souterraine, ayant

une température constante tout au long de l'année (environ 10 °C au Québec), permet de stabiliser les températures dans l'ECS et ainsi d'augmenter l'efficacité énergétique du système (Nguyen *et al.*, 2013, 2015c).

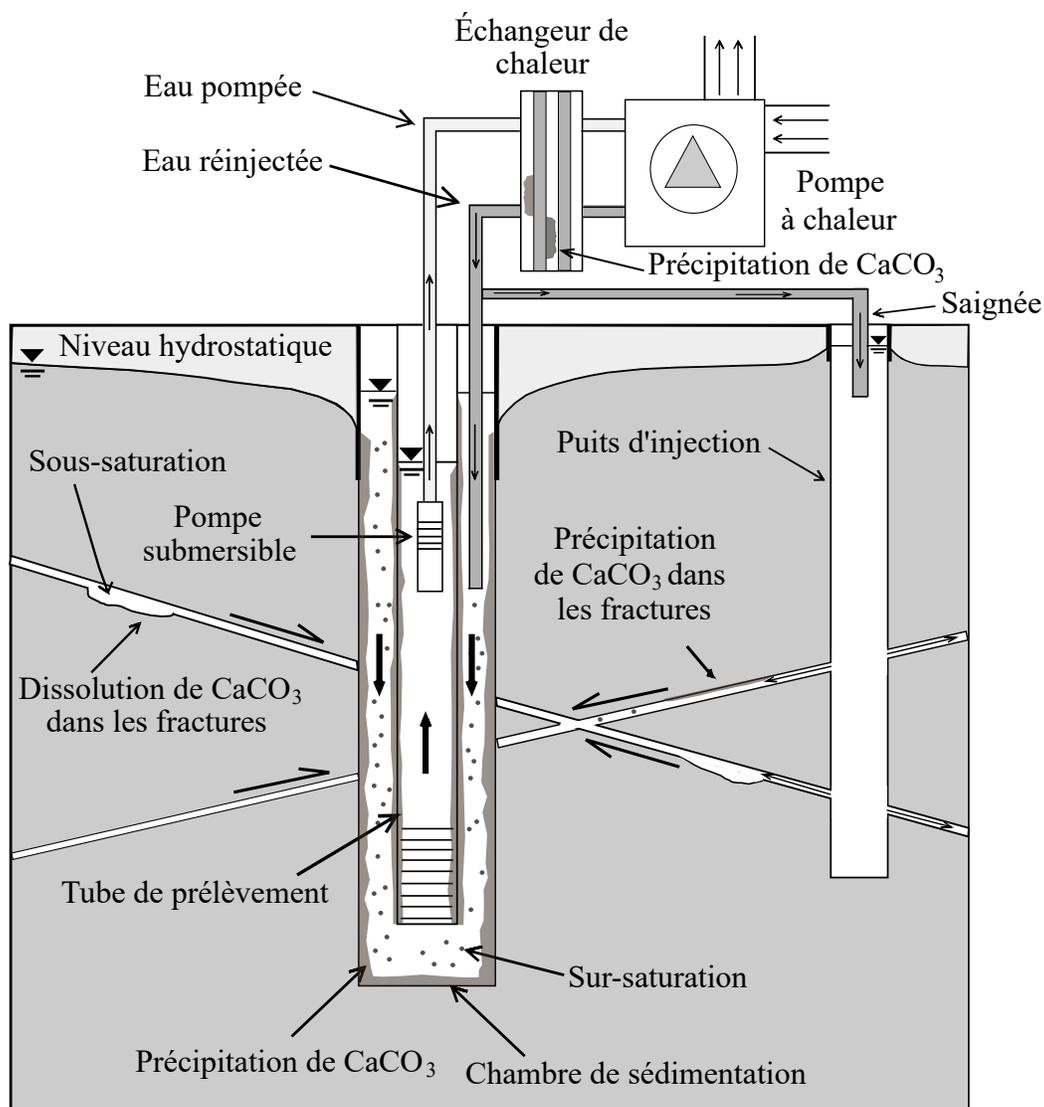


Figure 1.2 Illustration d'un puits à colonne permanente (PCP).

1.1.2 Coûts de construction

Au Québec, en raison de leur fiabilité, les systèmes en boucle fermée sont les ECS les plus utilisés dans l'industrie de la géothermie de basse température. Entre 2008 et 2012, ils représentaient 83% des systèmes géothermiques opérant à basse température installés dans la province (CCEG, 2012). Cependant, leur utilisation est freinée en raison notamment des

coûts élevés associés à leur installation. Ces frais sont principalement liés à la longueur importante du forage et à la complexité du processus d'installation du puits. Les paragraphes suivants visent à démontrer que les coûts d'installation d'un ECS peuvent être réduits, en changeant les habitudes acquises durant les dernières années, consistant à favoriser les systèmes en boucle fermée par rapport aux autres types d'ECS.

L'utilisation directe de l'eau souterraine comme fluide caloporteur augmente l'efficacité énergétique du système, permettant de réduire la longueur du forage et conséquemment les coûts associés à la construction de l'ECS. Par exemple, l'opération d'un PCP à la place d'un système en boucle fermée peut conduire à une réduction de la longueur du forage de 25 à 65% sans saignée et de 49 à 78 % avec saignée (O'Neill *et al.*, 2006). De plus, la construction d'un PCP est relativement aisée, réduisant le temps travail et de ce fait le coût lié à son installation. Cependant, une réticence justifiée persiste quant à l'utilisation des PCP, en raison des risques géochimiques encore peu connus pour ce type de puits en milieu calcaire. Le terme «risque géochimique» englobe l'ensemble des processus géochimiques résultant d'une modification de la signature chimique de l'eau souterraine au sein du PCP et/ou de l'aquifère environnant, causée par les variations de température, le dégazage du CO_2 ou encore l'oxygénation de l'eau souterraine. Ces risques engendrent des problèmes opérationnels, pouvant affecter la productivité du système. Les deux principaux exemples sont la précipitation et la dissolution de minéraux et le développement d'algues et de colonies de bactéries. Des travaux de recherche visant à identifier et contrôler les risques géochimiques doivent donc impérativement être entrepris.

1.1.3 Possibilités d'installation

Les trois types d'ECS diffèrent au niveau de leur géométrie, du type de fluide caloporteur utilisé, ainsi que par la longueur du forage nécessaire pour combler une même charge thermique. Conséquemment, les environnements propices à leur installation sont variables. Le puits doit être compatible avec l'environnement géologique dans lequel il se trouve. De ce fait, le type d'aquifère (poreux ou fracturé), sa conductivité thermique, la présence d'une nappe phréatique, ainsi que la productivité de l'aquifère sont des paramètres à prendre en considération avant la conception de l'ECS. D'autre part, le puits géothermique doit pouvoir s'intégrer dans le contexte qui l'entoure, c'est-à-dire que le terrain disponible doit être suffisamment grand pour permettre son installation. Les paragraphes suivants visent à décrire les milieux favorables à l'opération des trois principaux types d'ECS.

Un grand nombre d'environnements géologiques sont propices à l'installation d'un système en boucle fermée. En effet, ils peuvent être construits dans le roc ou dans un aquifère poreux et ils ne nécessitent pas la présence d'eau souterraine. Par contre, en raison du faible rendement énergétique associé à ce type d'ECS, l'installation de plusieurs puits est souvent nécessaire pour combler les charges thermiques d'un seul bâtiment. Conséquemment, leur intégration dans un contexte urbain largement développé peut être relativement complexe, voir impossible si l'espace disponible n'est pas suffisant.

Les systèmes en boucle ouverte peuvent être installés dans le roc ou dans un aquifère poreux, capable de fournir des débits de pompage de l'ordre de 10 l/s. La présence d'un aquifère productif est donc nécessaire. La qualité de l'eau souterraine est également un paramètre important. Leur installation dans des roches sédimentaires facilement solubles au contact de l'eau est possible mais peut engendrer des problèmes opérationnels liés à la précipitation de minéraux, tels que l'augmentation de la rugosité des tuyaux causant des pertes de charge et la limitation du débit pouvant être pompé ou réinjecté dans l'aquifère. D'autre part, la présence d'un terrain suffisamment grand permettant d'éviter les interférences hydrauliques et thermiques entre le puits de pompage et le puits d'injection est un élément essentiel.

Les PCP peuvent être installés dans le roc ou dans un aquifère poreux, à condition d'utiliser un cuvelage d'acier. En raison de la recirculation continue de l'eau souterraine au sein du puits, les débits d'eau prélevés dans l'aquifère sont relativement faibles. Ainsi, la présence d'un aquifère très productif n'est pas obligatoire. De plus, en raison de l'efficacité énergétique de ces systèmes et de la longueur importante du forage, la construction d'un seul puits est souvent suffisante pour satisfaire les besoins thermiques d'un bâtiment. Les PCP peuvent ainsi être intégrés à des bâtiments existants dans des zones urbaines largement développées, où l'installation des deux autres types de puits n'est pas possible. Similairement aux ECS en boucle ouverte, les risques géochimiques au sein des PCP, causés notamment par les variations de température et de pression, sont potentiellement importants.

1.2 Problématique

Parmi les trois principaux types d'ECS, les PCP présentent le plus grand potentiel pour réduire la consommation énergétique des systèmes de chauffage et de climatisation des bâtiments commerciaux et résidentiels. Cependant, l'utilisation directe de l'eau souterraine comme fluide caloporteur peut entraîner de fréquentes modifications de sa composition chimique et par là-même favoriser la précipitation et la dissolution de minéraux au sein du

puits et de la formation géologique environnante. Les variations de la signature chimique de l'eau sont associées aux fluctuations de la température de l'eau souterraine, ainsi qu'au dégazage du CO_2 au sommet de la colonne d'eau, conduisant à une augmentation du pH. Les oscillations de la température sont engendrées par l'opération de la pompe à chaleur, destinée à combler les besoins thermiques du bâtiment. Le dégazage du CO_2 est quant à lui provoqué par la baisse de la solubilité du CO_2 induit par l'augmentation de la température, ainsi que par le brassage mécanique de l'eau lors des processus de pompage et de réinjection. Par conséquent, les échanges gazeux avec l'atmosphère apparaissent au sommet des parties interne et externe du PCP. Des problèmes opérationnels peuvent ainsi apparaître, si des travaux de maintenance, généralement onéreux et nécessitant l'interruption des opérations, ne sont pas entrepris.

La précipitation de minéraux dans les systèmes en boucle ouverte a été observée à maintes reprises (Criaud et Fouillac, 1989; Thomas et Gudmundsson, 1989; Vuataz *et al.*, 1989; Kristmannsdóttir, 1989; Liping *et al.*, 1997; Stanasel *et al.*, 2001, 2006; Gunnlaugsson, 2012; Ma *et al.*, 2012). Cependant, aucune étude similaire n'a été effectuée pour les PCP, malgré le risque existant. Cette réalité est en partie expliquée par le faible nombre de PCP en fonction, soit environ 1000 unités en 2004 (statistique la plus récente à ce jour) (Deng, 2004). D'autre part, l'environnement géologique dans lequel la majorité de ces puits sont installés explique également ce manque de données. Une étude réalisée par Orio *et al.* (2005) démontre que plusieurs PCP ont été opérés avec succès aux États-Unis et au Canada. Ils sont principalement localisés dans les Appalaches, constituées de roches ignées et métamorphiques peu solubles au contact de l'eau, limitant considérablement les risques géochimiques. En revanche, l'utilisation des PCP dans des aquifères de type calcaire est peu commune.

La composition des dépôts reportés dans les systèmes en boucle ouverte varie en fonction de la composition chimique de l'eau, de la température et du type de matériel utilisé pour la confection du puits (Stanasel *et al.*, 2001). Ils peuvent appartenir à différentes familles de minéraux, telles que les carbonates (Vuataz *et al.*, 1989; Kristmannsdóttir, 1989; Liping *et al.*, 1997; Stanasel *et al.*, 2001, 2006; Gunnlaugsson, 2012), les silicates (Thomas et Gudmundsson, 1989; Gunnlaugsson, 2012) et les mélanges d'oxydes et sulfures métalliques (Thomas et Gudmundsson, 1989; Criaud et Fouillac, 1989; Kristmannsdóttir, 1989). Outre cette grande variété de minéraux, la calcite est le minéral le plus communément observé au sein des systèmes en boucle ouverte (Liping *et al.*, 1997; Izgec *et al.*, 2005; Gunnlaugsson, 2012) et elle est susceptible de précipiter à la suite d'une augmentation de température et/ou une diminution de la pression partielle du CO_2 , conduisant à une augmentation du pH.

Les minéraux peuvent s'accumuler dans la matrice géologique, le puits de pompage, les équipements de surface (échangeur de chaleur ou directement dans la PAC en cas d'absence d'échangeur de chaleur), les tuyaux et le puits d'injection (Thomas et Gudmundsson, 1989; Liping *et al.*, 1997; Stanasel *et al.*, 2001), donnant lieu à des situations défavorables au bon fonctionnement du système. Par exemple, la précipitation de minéraux peut :

1. dans le puits :
 - augmenter la rugosité de la surface des tuyaux et ainsi augmenter les pertes de charge et le rabattement dans le puits ;
 - diminuer le transfert de chaleur avec la formation géologique ;
 - limiter le débit de recirculation en raison de la diminution du volume de pompage, causée par la précipitation de minéraux sur les parois des puits ;
2. dans l'échangeur de chaleur/ pompe à chaleur :
 - diminuer l'échange de chaleur entre l'eau souterraine et le liquide réfrigérant de l'échangeur de chaleur ou de la PAC ;
 - augmenter les pertes de charges et/ou le différentiel de pression ;
3. dans l'ouvrage d'infiltration :
 - limiter le débit de saignée maximal pouvant être injecté, ayant pour conséquence d'augmenter le débordement du puits d'injection ;
4. dans la matrice géologique :
 - diminuer la perméabilité du milieu géologique et limiter l'apport d'eau souterraine dans le système lors de la saignée, augmentant ainsi le rabattement du puits.

Les problèmes opérationnels peuvent potentiellement empêcher le système géothermique de combler les besoins thermiques du bâtiment.

Les PCP représentent un système complexe, couplant l'écoulement de l'eau souterraine au sein du puits et de la formation géologique, le transfert de chaleur par advection et conduction, ainsi que des processus géochimiques, opérant dans la phase aqueuse et à l'interface minérale. Dans le but d'identifier et d'anticiper les problèmes potentiels liés à la précipitation de minéraux, il est essentiel de comprendre les processus Thermo-Hydro-Géochimiques (THG) se produisant dans le puits et l'aquifère environnant. Il n'existe cependant pas de modèle pouvant être appliqué à cette problématique. Ce manque de connaissance limite la démocratisation de cette technologie, hautement prometteuse pour réduire la consommation énergétique des systèmes de chauffage et de refroidissement des bâtiments.

1.3 Objectifs de recherche

L'objectif général de cette thèse est de comprendre les mécanismes thermo-hydro-géochimiques, conduisant à la précipitation et la dissolution de calcite au sein d'un puits à colonne permanente, installé dans un aquifère calcaire fracturé. Subséquemment à cet objectif général, quatre objectifs spécifiques sont visés :

1. développer un modèle numérique de transport réactif multi-espèces dans l'eau souterraine, appliqué aux puits à colonne permanente ;
2. étudier le comportement thermo-hydro-géochimique d'un puits à colonne permanente et de l'aquifère environnant ;
3. investiguer l'impact de la saignée sur le taux de précipitation de la calcite ; et
4. analyser l'effet de la mise en équilibre du CO_2 avec l'atmosphère au sommet de la colonne d'eau sur le taux de précipitation de la calcite.

1.4 Plan de la thèse

Cette thèse de doctorat comprend huit chapitres. Le chapitre suivant illustre en premier lieu différents modèles exprimant le taux de réaction de la calcite. La simulation des mécanismes de précipitation et de dissolution de la calcite repose sur l'intégration d'un modèle de ce type, au sein du modèle numérique. La deuxième partie du chapitre est consacrée aux risques de précipitation de la calcite dans les puits à colonne permanente. Le chapitre 3 présente le développement des modèles hydraulique, thermique et géochimique, qui une fois couplés, reproduisent les conditions THG au sein du PCP et de la matrice géologique. L'approche de Saaltink *et al.* (1998), utilisée pour simuler le transport réactif multi-espèces, y est présentée en détail. Cette méthodologie, applicable à des problèmes plus larges d'hydrogéologie, permet d'obtenir la concentration des espèces chimiques dans l'eau. Le quatrième chapitre présente la validation de la méthodologie à l'aide d'une solution de référence fournie par le logiciel PHREEQC, permettant de vérifier que l'impact de la température sur les processus géochimiques est correctement pris en considération. L'étude du comportement THG d'un PCP parfaitement scellé à son sommet et installé dans un aquifère poreux homogène est ensuite exposée dans le chapitre 5. Si l'effet bénéfique de la saignée sur les performances thermiques du puits est de nos jours bien connu, son impact sur le taux de réaction de la calcite au sein du PCP est inconnu. Cette analyse est présentée dans le chapitre 6. Étant donné que la majorité des PCP ne sont pas totalement fermés à l'atmosphère, l'impact du dégazage du CO_2 sur les processus géochimiques dans le puits, l'aquifère et la fracture est investigué au chapitre 7. Finalement, le chapitre 8 comprend la discussion générale.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

Les calcaires et les roches dolomitiques, exposés à environ 20% de la surface de la Terre, sont les composants principaux de nombreux aquifères (Langmuir, 1997). Le caractère soluble de ces roches freine l'installation des PCP dans ces environnements géologiques, par crainte que la précipitation et la dissolution de la calcite engendrent des problèmes opérationnels. Une meilleure connaissance de ce risque géochimique permettrait la mise au point de systèmes de traitement de l'eau, visant à limiter la précipitation de la calcite au sein du puits, des équipements associés et de la formation géologique. Le maintien de la qualité de l'eau souterraine permettrait ainsi une utilisation contrôlée des PCP dans des aquifères de type calcaire.

La première partie de cette revue de littérature présente la théorie générale sur les mécanismes de précipitation et de dissolution de la calcite, en comparant différents modèles permettant d'exprimer son taux de réaction. La deuxième partie du chapitre illustre les risques de précipitation de la calcite dans les PCP, en soulignant le lien entre les mécanismes illustrés dans la première section et les conditions thermo-hydro-géochimiques au sein de ce type de système. Des exemples de cas concrets, reportant la formation de calcite dans des ECS en boucle ouverte, sont utilisés pour exposer ces risques géochimiques. Aucune étude similaire pour les PCP n'est présentée, en raison de l'absence de support scientifique à ce sujet. Ce manque de données est expliqué par le faible nombre de PCP actuellement en opération et leur installation majoritaire dans des roches plutôt insolubles. Notez que la revue de littérature n'est pas consacrée aux modèles THG en raison de la faible documentation à ce sujet présente dans la littérature.

2.1 Théorie sur la précipitation et la dissolution de la calcite

Dans le but d'exprimer les mécanismes de précipitation et de dissolution de la calcite, dont la formule chimique est $CaCO_{3(s)}$, différents modèles de réaction ont été publiés dans la littérature. Cependant, les approches divergent quant aux concepts de base utilisés pour fonder ces modèles, permettant de les classer dans différentes catégories. Cette classification, inspirée de celle proposée par Arakaki et Mucci (1995), est la suivante :

1. modèles basés sur des formulations chimiques cinétiques classiques ;
2. modèles basés sur des équations empiriques ; et
3. modèle basé sur la spéciation de surface.

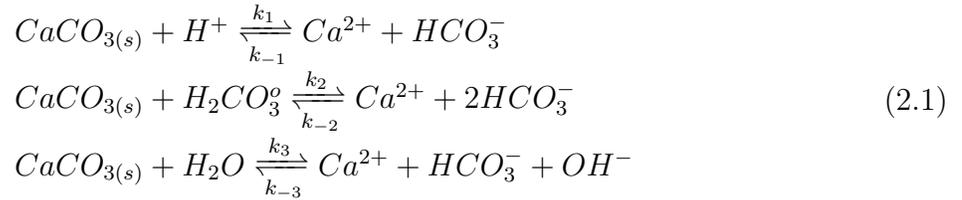
Cette liste n'est toutefois pas exhaustive. L'objectif commun de ces modèles est d'exprimer la masse de calcite précipitée ou dissoute en fonction de la surface minérale en contact avec le solvant et du temps.

2.1.1 Modèles basés sur des formulations chimiques cinétiques classiques

Les modèles basés sur des formulations chimiques cinétiques classiques suggèrent que le taux de précipitation et de dissolution de la calcite dépend des activités des réactifs et des produits des réactions concernées, ainsi que de la vitesse de ces réactions, exprimée par l'intermédiaire de constantes. Les modèles proposés par Plummer *et al.* (1978) et Chou *et al.* (1989), décrits ci-dessous, sont les plus cités dans la littérature et sont présentés pour illustrer l'approche .

Modèle de Plummer *et al.* (1978)

Plummer *et al.* (1978) ont été les premiers à investiguer l'influence de l'activité de H^+ , de la pression partielle du CO_2 (P_{CO_2}) et de la température sur le taux de dissolution de la calcite. Suite à leurs observations, ils ont proposé le modèle Plummer, Wigley et Parkhurst ou plus communément le modèle PWP, permettant d'exprimer le taux de réaction de la calcite. Ce dernier est basé sur les trois réactions élémentaires suivantes :



où k_1 , k_2 et k_3 sont les constantes de réaction directes de chacune des réactions élémentaires. Ces constantes, exprimées en cm/s, sont des mesures de la vitesse des réactions de dissolution. Étant donné que l'énergie thermique d'un système influence la vitesse des réactions, ces constantes sont définies comme des fonctions de la température (T en kelvin), comme suit :

$$\begin{aligned}
 \log k_1 &= 0.198 - (444/T) \\
 \log k_2 &= 2.84 - (2177/T) \\
 \log k_3 &= -5.86 - (317/T) \text{ pour } T < 298.15 \text{ K} \\
 \log k_3 &= -1.10 - (1737/T) \text{ pour } T > 298.15 \text{ K}
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

Ces équations définies par Plummer *et al.* (1978) résultent d'une analyse expérimentale ri-

goureuse, consistant à dissoudre un fragment de calcite dans de l'eau désionisée en rotation autour du minéral sous une large gamme de conditions thermo-chimiques. La méthode "free-drift" fournissant des courbes de pH en fonction du temps, ainsi que la méthode "pH-stat" permettant de maintenir un pH constant tout au long de l'essai ont été utilisées. Les expériences se déroulent à une température et une P_{CO_2} constantes. En procédant à une multitude d'analyses présentant des combinaisons de température, P_{CO_2} , pH et vitesse de rotation du fluide différentes, les auteurs ont défini une relation entre le taux de dissolution et le pH. La dissolution est quantifiée en mesurant la variation de la masse minérale au cours de l'essai.

Les résultats démontrent que pour les solutions présentant des pH inférieurs à 3.5, le taux de dissolution est directement proportionnel à l'activité de H^+ et indépendant de la P_{CO_2} . Cette relation est décrite par la première réaction présentée en 2.1, en intégrant uniquement H^+ comme espèce dissoute dans la partie de gauche de la réaction. En effet, le pH est lié à l'activité de H^+ par la relation $pH = -\log(\alpha_{H^+})$. Conséquemment, pour des pH faibles, le taux de dissolution de la calcite, exprimé en mmol de calcite par cm^2 de calcite par seconde, est défini par :

$$R_{r1} = k_1 \cdot \alpha_{H^+} \quad (2.3)$$

Pour les solutions présentant un pH entre 3.5 et 5.5, le taux de dissolution est dicté par le pH et la P_{CO_2} , comme l'indique la partie de gauche des deux premières réactions décrites en 2.1, en intégrant H^+ et $H_2CO_3^o$. En effet, la P_{CO_2} est liée à l'activité de H_2CO_3 par l'équation $P_{CO_2} = \alpha_{H_2CO_3}/K_H$, où K_H est la constante de Henry et $H_2CO_3 = H_2CO_3^o + CO_{2(aq)}$. Conséquemment, pour des pH variant entre 3.5 et 5.5, le taux de dissolution est exprimé par :

$$R_{r1,2} = k_1 \cdot \alpha_{H^+} + k_2 \alpha_{H_2CO_3} + k_3 \quad (2.4)$$

Enfin, lorsque le pH dépasse 5.5, le taux de précipitation devient une composante importante du taux de réaction global de la calcite, spécifié par :

$$R_{tot} = k_1 \cdot \alpha_{H^+} + k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3} + k_3 \cdot \alpha_{H_2O} - k_4 \cdot \alpha_{Ca^{2+}} \cdot \alpha_{HCO_3^-} \quad (2.5)$$

où k_4 est la constante de réaction inverse ($cm^4/(mmol \cdot s)$). Un taux de réaction positif signifie que le taux de dissolution de la calcite est supérieur au taux de précipitation et inversement.

En utilisant une méthode graphique, schématisée à la Fig. 2.1, Plummer *et al.* (1978) ont défini les différentes constantes de réaction. Premièrement, la pente du graphique exprimant

le taux de dissolution à des pH faibles, en fonction de l'activité de H^+ , donne la valeur de la constante k_1 (Fig. 2.1 (a)). Deuxièmement, en supposant que k_1 est connu, le graphique présentant $R_{tot} - k_1 \cdot \alpha_{H^+}$, en fonction de $\alpha_{Ca^{2+}} \cdot \alpha_{HCO_3^-}$, peut être tracé (Fig. 2.1 (b)). La pente fournit la valeur de $-k_4$ et l'intersection avec l'ordonnée, la valeur de $k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3} + k_3$. Finalement, la pente du graphique illustrant $k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3} + k_3$, en fonction de la P_{CO_2} , correspond à $k_2 \cdot K_H$. L'intersection avec l'ordonnée donne la valeur de la constante k_3 . Ainsi, à l'aide des trois graphiques présentés à la Fig. 2.1, les quatre constantes de réaction peuvent être calculées. Des équations dépendantes de la température, permettant de satisfaire les valeurs expérimentales de ces constantes, ont ensuite été définies par les auteurs (Éq. 2.2).

La constante k_4 intègre l'ensemble des constantes de réaction inverses, comme suit :

$$k_4 = k_{-1} + k_{-2} \cdot \alpha_{HCO_3^-} + k_{-3} \cdot \alpha_{OH^-} \quad (2.6)$$

et est obtenue par :

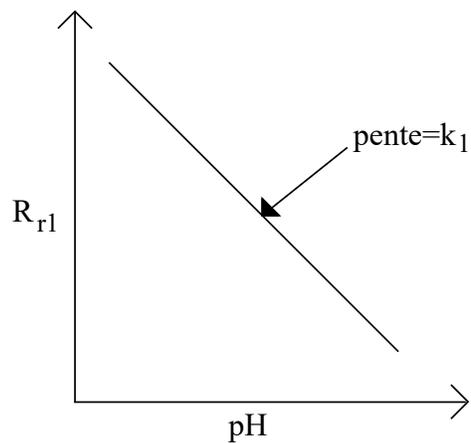
$$k_4 = \frac{K_2}{K_{sp}} \left[k'_1 + \frac{1}{\alpha_{H^+}} [k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3} + k_3 \cdot \alpha_{H_2O}] \right] \quad (2.7)$$

où K_2 et K_{sp} sont respectivement la deuxième constante de dissociation de l'acide carbonique et la constante de solubilité de la calcite et k'_1 une constante 10 à 20 fois plus grande que k_1 , définie expérimentalement. En raison de l'incertitude reliée à la valeur de k'_1 et conséquemment à k_4 , différentes alternatives ont été publiées pour calculer le taux de réaction global de la calcite. Premièrement, les constantes de réaction inverses peuvent être obtenues par (voir Langmuir, 1997; Appelo et Postma, 2005; Brantley *et al.*, 2008) :

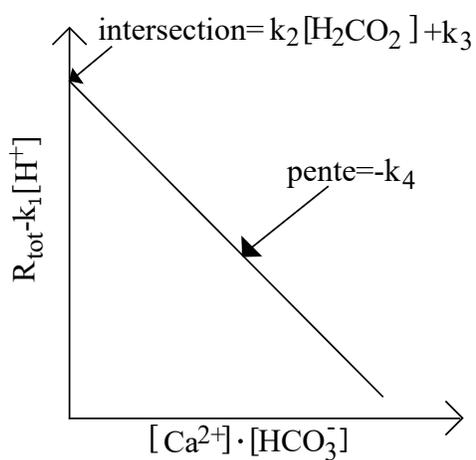
$$k_{-j} = \frac{k_{+j}}{K_{eq,j}} \quad (2.8)$$

où k_{+j} est la constante de réaction directe et $K_{eq,j}$ la constante d'équilibre de la réaction j . La constante k_4 est ensuite calculée par l'équation 2.6, puis intégrée dans l'équation 2.5, permettant de définir le taux de réaction global de la calcite. La deuxième alternative est une approximation du taux de réaction global, éliminant les constantes de réaction inverses et intégrant la constante de solubilité de la calcite, comme suit (Parkhurst et Appelo, 1999) :

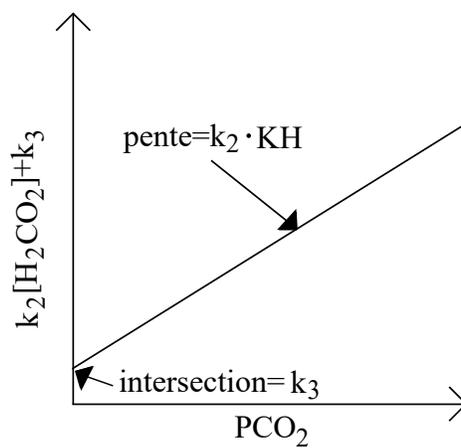
$$R = (k_1 \cdot \alpha_{H^+} + k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3} + k_3 \cdot \alpha_{H_2O}) \cdot \left[1 - \left(\frac{\alpha_{Ca^{2+}} \cdot \alpha_{CO_3^{2-}}}{K_{sp}} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \quad (2.9)$$



(a)



(b)

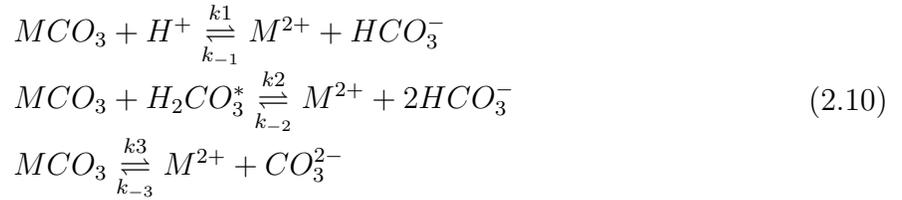


(c)

Figure 2.1 Graphiques permettant de définir (a) la constante k_1 , (b) la quantité correspondant à $k_2 \cdot \alpha_{\text{H}_2\text{CO}_3} + k_3$ et la constante k_4 et (c) les constantes k_2 et k_3 .

Modèle de Chou *et al.* (1989)

Une dizaine d'années plus tard, Chou *et al.* (1989) ont réalisé des expériences similaires à celles effectuées par Plummer *et al.* (1978). Cependant, un réacteur à lit fluidisé a été utilisé à la place des méthodes "free drift" et "pH-stat". Ce dernier assure un meilleur mélange de l'eau désionisée autour de la calcite, signifiant qu'un taux de turbulence élevé peut être atteint, sans que les processus de transport soient affectés. Le modèle de Chou *et al.* (1989) est valide pour l'ensemble des carbonates et se base sur les trois réactions élémentaires suivantes :



où M représente un ion métallique, tel que le calcium, le magnésium ou le baryum.

La relation entre le pH et le taux de dissolution observée par Chou *et al.* (1989) est similaire à celle observée précédemment par Plummer *et al.* (1978). En effet, le taux de dissolution est proportionnel à l'activité de H^+ à des pH faibles, puis proportionnel au pH et à la P_{CO_2} à des pH plus élevés. Les équations des taux de dissolution (R_f) et de précipitation (R_b) de la calcite proposées par Chou *et al.* (1989), satisfaisant les observations expérimentales, sont les suivantes :

$$R_f = k_1 \cdot \alpha_{H^+} + k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3^*} + k_3 \tag{2.11}$$

$$R_b = k_{-1} \cdot \alpha_{M^{2+}} \cdot \alpha_{HCO_3^-} + k_{-2} \cdot \alpha_{M^{2+}} \cdot \alpha_{(HCO_3^-)}^2 + k_{-3} \cdot \alpha_{M^{2+}} \cdot \alpha_{CO_3^{2-}} \tag{2.12}$$

où les constantes de réaction directes ont été déterminées en procédant au meilleur ajustement des valeurs, permettant de reproduire le taux de dissolution observé expérimentalement.

La différence majeure entre les deux modèles présentés dans cette section réside dans le fait que le modèle PWP fournit des équations dépendantes de la température pour les constantes de réaction directes, contrairement au modèle de Chou *et al.* (1989). D'autre part, la troisième réaction proposée par Chou *et al.* (1989) n'intègre pas les espèces H_2O et OH^- . Finalement, le modèle de Chou *et al.* (1989) peut s'adapter à l'ensemble des carbonates, contrairement au modèle de Plummer *et al.* (1978) valide uniquement pour la calcite. Au-delà de ces différences, les deux approches restent très similaires.

2.1.2 Modèles basés sur des équations empiriques

Les modèles fondés sur des équations empiriques se basent sur la réaction de précipitation et de dissolution de la calcite suivante :



Ces derniers supposent que le taux de réaction dépend de la constante de réaction, de la surface réactive de la calcite, ainsi que des activités de Ca^{2+} et CO_3^{2-} uniquement. Les modèles de Nancollas et Reddy (1971), Morse et Berner (1972) et Lasaga (1998) sont présentés dans cette section.

Modèle de Nancollas et Reddy (1971)

Dans les modèles exposés jusqu'à présent, le taux de réaction de la calcite a été défini expérimentalement en observant uniquement le taux de dissolution. Ce point est justifiable, car en laboratoire les conditions thermo-chimiques conduisant à la dissolution de la calcite sont plus aisément atteignables que les conditions menant à la précipitation. Cependant, en 1971, Nancollas et Reddy (1971) ont observé expérimentalement le taux de cristallisation de la calcite. Le protocole expérimental consistait à ajouter des germes de cristaux de $CaCO_3$ à des solutions sursaturées par rapport à la calcite, présentant des températures de 25 et 40°C.

Durant l'analyse des processus de cristallisation, les concentrations de différentes espèces chimiques ont été mesurées, permettant de définir que le taux de précipitation de la calcite est proportionnel au produit des concentrations de Ca^{2+} et CO_3^{2-} . Ainsi, l'équation proposée par Nancollas et Reddy (1971), spécifiant le taux de précipitation de la calcite est la suivante :

$$\frac{-dT_{Ca^{2+}}}{dt} = k \cdot s \left([Ca^{2+}][CO_3^{2-}] - \frac{K_{sp}}{f_2^2} \right) \quad (2.14)$$

où k est la constante du taux de croissance ($m^2/(mol \cdot s)$), s la surface de cristallisation (m^2), $[]$ la concentration molaire (mol/m^3), f_2 le coefficient d'activité divalent (-) et K_{sp} le produit de solubilité de la calcite (mol^2/m^6). Dans le modèle proposé, Nancollas et Reddy (1971) prennent en considération la surface réactive de la calcite. Ainsi, il apparaît que plus la surface du minéral en contact avec la phase aqueuse est importante, plus le taux de précipitation est élevé. D'autre part, la dépendance du taux de précipitation à la température est prise en compte par la constante de réaction, ainsi que par la constante de solubilité de

la calcite, pouvant être aisément calculée en fonction de la température, comme suit (Appelo et Postma, 1993) :

$$K_{sp} = -171.9065 - 0.077993 \cdot T + 2839.319/T + 71.595 \cdot \log(T) \quad (2.15)$$

où T est la température en kelvin. Ce modèle définit uniquement le taux de précipitation de la calcite, contrairement aux modèles de Plummer *et al.* (1978) et de Chou *et al.* (1989), fournissant le taux de réaction global.

Modèle de Morse et Berner (1972)

Morse et Berner (1972) ont observé le taux de dissolution des carbonates de calcium, en utilisant des sédiments riches en $CaCO_3$ collectés dans les océans Indien, Atlantique et Pacifique. Similairement à Plummer *et al.* (1978), la méthode "pH-stat" a été utilisée. Les auteurs ont réalisé conjointement des expériences en laboratoire et des expériences dans une colonne d'eau placée directement dans l'océan Atlantique. Ainsi, ce modèle illustre la précipitation et la dissolution de la calcite dans l'eau salée.

Les résultats démontrent que le taux de dissolution observé dans les deux environnements est similaire et satisfait l'équation suivante :

$$R = -\frac{dm_{calcite}}{dt} = \left(\frac{A}{V}k\right) (1 - \Omega)^n \quad (2.16)$$

où m est la concentration molaire en calcite, t le temps, A la surface de la calcite, V le volume de la solution, k la constante de réaction, Ω l'état de saturation par rapport à la calcite et n une constante positive définie comme l'ordre de la réaction. L'état de saturation par rapport à la calcite correspond au rapport entre le produit d'activité ionique (IAP) et la constante de solubilité de la calcite (K_{sp}), comme présenté ci-dessous :

$$\Omega = \frac{IAP}{K_{sp}} = \frac{\alpha_{CO_3^{2-}} \cdot \alpha_{Ca^{2+}}}{K_{sp}} \quad (2.17)$$

L'état de saturation permet de définir si une solution est sursaturée par rapport à la calcite ($IAP > K_{sp}$), sous-saturée ($IAP < K_{sp}$) ou encore à l'équilibre ($IAP = K_{sp}$). Une solution sursaturée présente un risque de précipitation, alors qu'une solution sous-saturée favorise la dissolution. Le terme $\left(\frac{A}{V}k\right)$ présent dans l'équation 2.16 est souvent regroupé en une seule constante nommée k^* . Cette dernière est définie en traçant le graphique illustrant le $\log(R)$

en fonction de $\log(1 - \Omega)$. L'intersection avec l'ordonnée fournit la valeur de k^* et la pente, l'ordre de la réaction défini par n . L'équation 2.16 repose également sur le fait que le taux de dissolution de la calcite varie en fonction de la taille du fragment minéral, tout comme le taux de précipitation décrit par le modèle de Nancollas et Reddy (1971). Ainsi, plus la surface minérale en contact avec la phase aqueuse est importante, plus le taux de dissolution est élevé. Finalement, contrairement aux approches proposées par Plummer *et al.* (1978) et Chou *et al.* (1989), ce modèle permet de définir uniquement le taux de dissolution.

Modèle de Lasaga (1998)

À l'équilibre, le rapport entre la constante de réaction directe (k_+), exprimant la vitesse de la réaction de dissolution et la constante de réaction inverse (k_-), exprimant la vitesse de la réaction de précipitation correspond à la constante d'équilibre (K_{eq}), comme illustré ci-dessous (Lasaga, 1998) :

$$\frac{k_+}{k_-} = K_{eq} \quad (2.18)$$

Lasaga (1998) a modifié l'équation générale de Morse et Berner (1972) décrite en 2.16, en se basant sur ce principe. Ainsi, il a exprimé la constante de réaction directe en fonction de la constante de réaction inverse et du produit de solubilité de la calcite, comme suit :

$$R = -\frac{dm_{calcite}}{dt} = \left(\frac{A}{V}k_-\right) \cdot K_{sp}^n(1 - \Omega^n) \quad (2.19)$$

Pour un même taux de saturation, les équations 2.16 et 2.19 sont égales. Par conséquent :

$$k(1 - \Omega)^n = k_- \cdot K_{sp}^n(1 - \Omega^n) \quad (2.20)$$

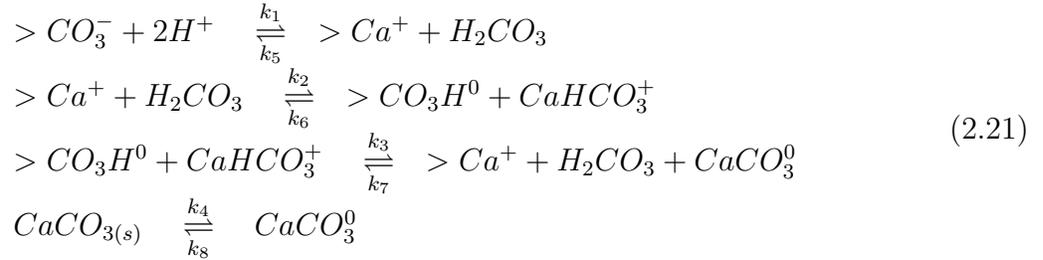
où la partie de gauche de l'équation 2.20 est un terme de l'équation 2.16 et la partie de droite, un terme de l'équation 2.19. Le modèle proposé par Lasaga (1998) est donc une dérivée du modèle de Morse et Berner (1972), permettant de définir uniquement le taux de dissolution de la calcite.

2.1.3 Modèle basé sur la spéciation de surface

Les modèles basés sur la spéciation de surface supposent que les molécules d'eau et les espèces chimiques en solution forment des complexes chimiques à la surface du minéral. Les cations et les anions en phase aqueuse sont ainsi absorbés à la surface de la calcite, en échangeant un ion H^+ ou OH^- . Ces modèles assument que des réactions se produisent conjointement à

la surface de ces complexes et à la surface de la calcite.

Arakaki et Mucci (1995) ont proposé une extension des modèles de Plummer *et al.* (1978) et de Chou *et al.* (1989), après avoir réalisé des expériences similaires à celles effectuées par Plummer *et al.* (1978). Ils ont observé que lorsque le pH varie entre 4.5 et 6.5, les complexes dominants à la surface de la calcite sont $>CO_3^-$ et $>Ca^+$, où $>$ est utilisé pour différencier les complexes de surface des espèces en solution. Leur approche est basée sur les réactions suivantes :



Les trois premières réactions illustrent les processus se produisant à la surface des complexes chimiques, alors que la dernière réaction exprime la précipitation et la dissolution engendrée à la surface de la calcite. Similairement aux modèles basés sur la cinétique chimique, le taux de réaction de la calcite dépend des activités des espèces dissoutes et des constantes de réaction. Cependant, le modèle d'Arakaki et Mucci (1995) prend également en compte la densité des complexes de surface, comme suit :

$$\begin{aligned}
R &= k_1 >CO_3^- \cdot (\alpha_{H^+})^2 + (k_2 - k_5) >Ca^+ \cdot \alpha_{H_2CO_3^*} + k_4 - (k_6 - k_3) \\
&>CO_3H^0 \cdot \alpha_{CaHCO_3^+} - k_7 >Ca^+ \cdot \alpha_{H_2CO_3^*} \cdot \alpha_{CaCO_3^0} - k_8 \cdot \alpha_{CaCO_3^0}
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Cette équation satisfait le taux de dissolution observé expérimentalement, en mesurant durant l'essai les variations de la concentration totale en Ca^{2+} ($\delta \Sigma Ca$), exprimé par :

$$R = \frac{\delta \Sigma Ca}{\delta t} \cdot \frac{V}{A} \tag{2.23}$$

où δt est le pas de temps auquel la concentration est mesurée (5 secondes dans ce cas), V le volume de la solution et A la surface de la calcite. Finalement, les constantes de réaction sont obtenues en procédant au meilleur ajustement des valeurs, permettant de reproduire le taux de dissolution observé expérimentalement (Éq. 2.23).

2.1.4 Synthèse

Les modèles présentés dans cette section ont été définis en observant expérimentalement le taux de dissolution ou de précipitation de la calcite. Les principes sur lesquels ces approches sont fondées sont différentes, permettant de les regrouper dans plusieurs catégories. Les modèles basés sur la cinétique chimique suggèrent que le taux de réaction global de la calcite dépend des activités des réactifs et des produits des réactions concernées, ainsi que de la vitesse de ces réactions, exprimée par l'intermédiaire de constantes. Les modèles empiriques sont, quant à eux, fondés sur la simple réaction de précipitation et de dissolution suivante $Ca^{2+} + CO_3^{2-} = CaCO_3$ et assument que le taux de réaction est proportionnel à la surface réactive du minéral. La dernière catégorie supporte le fait que des réactions se produisent simultanément à la surface des complexes chimiques et à la surface de la calcite. Ces différentes approches permettent d'exprimer le taux de précipitation de la calcite (Nancollas et Reddy, 1971), le taux de dissolution (Morse et Berner, 1972; Lasaga, 1998; Arakaki et Mucci, 1995) ou le taux de réaction global (Plummer *et al.*, 1978; Chou *et al.*, 1989).

Les mécanismes décrits par ces modèles illustrent l'augmentation du taux de précipitation avec la température et le dégazage du CO_2 , provoquant une augmentation du pH. Ces deux processus se produisent couramment dans les PCP, au cours d'une année d'opération typique. La section suivante vise ainsi à faire le lien entre les mécanismes présentés ci-dessus et les conditions THG dans les PCP.

2.2 Risques de précipitation de la calcite dans les puits à colonne permanente

Les risques de précipitation et de dissolution de la calcite dans les PCP n'ont encore jamais été démontrés. Actuellement, les PCP sont essentiellement en opération dans des roches ignées et métamorphiques relativement peu solubles, expliquant le manque de support scientifique à ce sujet. Dans une optique d'élargir l'exploitation de cette technologie, leur installation dans des aquifères de type calcaire est inévitable. Ainsi, la connaissance des mécanismes conduisant à la précipitation et à la dissolution de la calcite dans ces systèmes devient une nécessité.

Dans cette section, des cas réels illustrant la formation de calcite dans des systèmes en boucle ouverte sont utilisés pour exposer les risques potentiels de précipitation dans les PCP, lorsque ceux-ci sont installés des aquifères calcaires. En effet, la précipitation de la calcite a été communément observée au sein de nombreux ECS en boucle ouverte, notamment en France (Vuataz *et al.*, 1989), en Islande (Kristmannsdóttir, 1989; Liping *et al.*, 1997;

Gunnlaugsson, 2012), en Serbie (Papic, 1991), en Roumanie (Stanasel *et al.*, 2001, 2006) et en Chine (Ma *et al.*, 2012). Le lien entre les mécanismes présentés à la section 2.1 conduisant à la précipitation de la calcite (variations des températures et dégazage) et les conditions THG au sein des PCP est présenté dans les sections suivantes.

2.2.1 Impact des variations de la température

Les variations de la température affectent le sens des réactions de précipitation et de dissolution de la calcite, ainsi que la vitesse de ces réactions, ayant pour impact d'influencer le taux de réaction global. Le comportement thermique des PCP a déjà été étudié à de multiples reprises, notamment à l'aide de modèles numériques (Deng, 2004; Croteau, 2011; Nguyen *et al.*, 2013). Il apparaît que la température au sein du puits a tendance à augmenter en mode climatisation et à diminuer en mode chauffage. Conséquemment, le taux de réaction global de la calcite risque de subir d'importantes variations au cours d'une année d'opération d'un PCP.

L'impact de la température sur l'indice de saturation (SI) de la calcite a été analysé par Stanasel *et al.* (2001), en étudiant le comportement thermo-chimique de l'exploitation géothermique en boucle ouverte de Ciumeghiu, en Roumanie. L'indice de saturation est spécifié par la relation $SI = \log(\Omega)$, où Ω est l'état de saturation défini à l'équation 2.17. Pour rappel, une solution est sursaturée par rapport à la calcite quand $IAP > K_{sp}$, sous-saturée lorsque $IAP < K_{sp}$ ou encore à l'équilibre si $IAP = K_{sp}$. Ce site géothermique a été choisi pour cette étude, car des problèmes liés à la précipitation de la calcite ont été reportés dès le début de l'opération. Des plaques insérées à la tête du puits en septembre 1997 ont été retirées en mai 1998, pour permettre l'analyse des minéraux formés sur celles-ci. Les analyses par diffraction des rayons X ont démontré la présence de calcite et de cristaux de type magnésien dans les échantillons solides. Pour une meilleure compréhension, des analyses infrarouges ont ensuite été réalisées. Les résultats indiquent que les dépôts solides étaient composés à 95% de $(Ca, Mg)CO_3$.

Le programme WATCH (Arnórsson *et al.*, 1982), permettant de calculer la composition chimique d'un fluide à une température de référence, a été utilisé par les auteurs pour définir l'indice de saturation par rapport à la calcite en exploitant des analyses de la composition chimique de l'eau souterraine réalisées entre 1993 et 1999. Les résultats ont indiqué qu'une élévation de la température de 40 à 93 °C avait provoqué une augmentation de la valeur de SI . En 1993, l'indice de saturation, proche de 1 à 40 °C, avait atteint une valeur de 2, en augmentant la température à 93 °C. En 1999, SI approximait également l'unité à 40 °C, mais

n'avait subi qu'une légère augmentation en élevant la température à 93 °C. Les auteurs ont mentionné que cette modification de l'état d'équilibre avait été provoquée par une variation de la composition chimique de l'eau souterraine au fil du temps.

Cette étude illustre la relation entre la précipitation de la calcite et les variations de température au sein des ECS en boucle ouverte. Ainsi, plus la température augmente, plus les risques de précipitation de la calcite sont importants. L'exploitation directe de l'eau souterraine dans les PCP et les variations de température induites par la pompe à chaleur rendent cette technologie sujette au même risque.

2.2.2 Impact du dégazage du CO_2

Le dégazage des fluides favorise la précipitation des carbonates de calcium (Kristmannsdóttir, 1989; Vuataz *et al.*, 1989; Papic, 1991; Stanasel *et al.*, 2001; Gunnlaugsson, 2012). Ainsi, cette section vise à illustrer l'impact du dégazage du CO_2 , provoquant une augmentation du pH et une variation de la signature chimique de l'eau souterraine, sur le taux de précipitation de la calcite. La perte de CO_2 dissous peut être induite par une augmentation de la température, provoquant une baisse de la solubilité du CO_2 et/ou par le brassage mécanique de l'eau. Dans un PCP, une augmentation de la température est notamment observée au sommet du tuyau externe, lorsque de l'eau chaude est réinjectée dans le puits (mode climatisation). De plus, l'eau est continuellement brassée au sommet du puits lors des processus de pompage et de réinjection. Conséquemment, la précipitation de la calcite est susceptible de se produire au sommet des parties interne et externe du PCP, en raison de la baisse de la concentration en CO_2 dissous. À l'inverse, une augmentation en CO_2 dissous favorise la dissolution de la calcite au sein du puits au raison de la diminution de pH. Ce phénomène est peu rapporté dans la littérature, même pour les systèmes en boucle ouverte (plus documentés que les PCP), puisqu'il ne consitue pas un problème opérationnel majeur pour les puits géothermiques.

Papic (1991) a analysé le potentiel de précipitation de l'eau souterraine dans quarante-trois sites géothermiques en Serbie, présentant des températures variant entre 25 et 94 °C. La composition chimique des différentes eaux a été analysée à la sortie des puits de pompage, puis introduite dans le logiciel WATCH (Arnórsson *et al.*, 1982). Dans un premier temps, l'objectif était de définir l'état de saturation des eaux souterraines sur les différents sites, puis dans un deuxième temps, d'analyser l'impact du dégazage du CO_2 sur l'indice de saturation de la calcite.

Les résultats indiquent que les eaux étudiées sont sursaturées par rapport à la calcite, avec un indice de saturation moyen de 0.175. Des simulations, intégrant un taux de dégazage variant entre 0.01 et 1 (signifiant que l'ensemble du CO_2 dissous s'échappe de la solution), ont ensuite été réalisées. Les auteurs ont observé que l'indice de saturation augmentait avec la diminution de la concentration en CO_2 dissous. Par exemple à 25 °C, l'indice de saturation moyen augmente de 0.09 à 1.29, avec une hausse du facteur de dégazage de 0.01 à 1. D'autre part, à 65 °C, la valeur de SI passe de 0.94 à 1.84, en augmentant le facteur de 0.01 à 1. L'indice de saturation croît fortement entre les facteurs 0.01 et 0.1, puis augmente de manière moins abrupte entre 0.1 et 1. Ces résultats illustrent, premièrement, l'augmentation de la tendance de précipitation de la calcite avec le dégazage du CO_2 et deuxièmement, l'augmentation du taux de précipitation avec l'élévation de la température.

Des gaz, tels que du méthane, du dioxyde de carbone ou de l'azote peuvent se retrouver naturellement dans les eaux souterraines. En plus de favoriser les risques de précipitation (dans le cas du CO_2), les bulles de gaz peuvent colmater l'aquifère et engendrer des problèmes de réinjection, lors de l'opération d'un ECS en boucle ouverte. Dégazer le fluide est donc inévitable pour continuer à exploiter le système. Cependant, comme mentionné précédemment, le dégazage engendre une augmentation du pH et favorise les risques de précipitation de la calcite. Ce problème a été observé dans les exploitations géothermiques situées à Melleray et à Achères en France, où des performances de réinjection faibles ont été observées, malgré l'importante perméabilité de l'aquifère (Vuataz *et al.*, 1989). Dans le but d'éviter le colmatage rapide de l'aquifère par des bulles de gaz, les auteurs mentionnent qu'il peut être nécessaire de dégazer le fluide avant la réinjection. Des simulations réalisées à l'aide du code TPDE-GAZ (Czernichowski-Lauriol, 1988) ont permis d'évaluer les tendances de précipitation de la calcite. Deux simulations intégrant respectivement un dégazage avant et après l'échangeur de chaleur ont été comparées. Les résultats démontrent qu'en mode chauffage, il est avantageux de dégazer le fluide après l'échangeur de chaleur, pour limiter les risques de précipitation de la calcite, puisqu'à la sortie de l'échangeur, la température du fluide est plus basse qu'à l'entrée.

La présence de gaz au sein des eaux souterraines engendre donc une difficulté supplémentaire à l'exploitation d'un PCP, en augmentant les risques de précipitation.

2.2.3 Synthèse

Les ECS en boucle ouverte ont été utilisés pour illustrer les risques de précipitation dans les PCP, en raison du manque de support scientifique à ce sujet. Les deux paramètres majeurs

influençant la précipitation et la dissolution de la calcite sont les variations de la température et le dégazage du CO_2 , provoquant une augmentation du pH. Dans les PCP, les variations de température sont engendrées par les pompes à chaleur, destinées à combler les besoins thermiques du bâtiment. Le dégazage du CO_2 est, quant à lui, provoqué conjointement par une augmentation de la température de l'eau, réduisant la solubilité du CO_2 dissous et le brassage mécanique de l'eau souterraine.

Les carbonates de calcium sont les minéraux les plus communément observés sous forme de précipité dans les ECS en boucle ouverte. Cependant, il est important de mentionner, que des silicates de magnésium ($MgSiO_3 \cdot H_2O$) ont également été reportés dans certains systèmes géothermiques en Islande (Kristmannsdóttir, 1989; Gunnlaugsson, 2012). Ils se forment lorsque l'eau souterraine est chauffée après avoir été désaérée et également lorsque des eaux présentant des compositions chimiques différentes se mélangent. De plus, des mélanges de sulfures et d'oxydes métalliques ont été retrouvés dans plusieurs systèmes géothermiques (Thomas et Gudmundsson, 1989). L'étude des mécanismes menant à la précipitation de la calcite dans les PCP représente donc une première étape cruciale, visant à élargir les environnements géologiques dans lesquels ces systèmes peuvent être installés.

CHAPITRE 3 DÉVELOPPEMENT D'UN MODÈLE DE PUIITS À COLONNE PERMANENTE COUPLANT DES PROCESSUS THERMIQUE, HYDROGÉOLOGIQUE ET RÉACTIF MULTI-ESPÈCES

Les phénomènes de précipitation et de dissolution de la calcite dans les PCP et l'aquifère environnant découlent de mécanismes de réactions chimiques complexes, couplant des processus thermiques. Leur identification requiert la reproduction des conditions thermo-hydro-géochimiques au sein du puits et de la formation géologique. Dans le cadre de cette étude, la modélisation multiphysique a été utilisée pour répondre à cet objectif. En effet, un modèle thermo-hydro-géochimique d'un PCP installé dans un aquifère fracturé a été développé. Ce dernier permet de simuler les interactions entre l'écoulement de l'eau souterraine, le transfert de chaleur par advection et conduction et le transport réactif des espèces dissoutes par advection et diffusion. Même si plusieurs modèles numériques de PCP permettant de simuler les processus thermiques et hydrauliques ont déjà été développés, le couplage THG n'a encore jamais été réalisé pour ce type de système.

Deng (2004) a été la première à présenter un modèle numérique d'un PCP, utilisant la méthode des volumes finis. Ce modèle 2D-axisymétrique, intégrant l'opération de la saignée, avait pour objectif d'analyser les mécanismes hydrauliques et thermiques au sein d'un PCP. Le transfert de chaleur dans le puits est simulé par une série de résistances et de capacités inter-connectées. Des modèles 3D, utilisant également la méthode des volumes finis, ont subéquemment été développés. Abu-Nada *et al.* (2008) ont été les premiers à présenter ce type de modèle pour les PCP et à prendre en considération les variations saisonnières de la température, sous la forme de conditions aux frontières. Ce dernier intègre également l'opération de la saignée. Dans le modèle de Liu *et al.* (2009), la résolution du champ hydraulique et du champ thermique se déroule en deux étapes distinctes. D'autre part, le flux de chaleur est, en premier lieu, calculé dans le puits à la paroi du forage, puis utilisé dans le modèle de l'aquifère, comme condition aux frontières. Quelques années plus tard, le modèle de Ng *et al.* (2011) permet pour la première fois la simulation des processus thermiques et hydrauliques au sein d'un champ de PCP. Ce modèle subdivisé en deux modèles, à savoir le puits et la matrice géologique, simule également l'opération de la saignée. Les conditions hydrauliques et thermiques sont modélisées dans le puits via un réseau nodal 1D, qui par la suite permet l'intégration du puits dans le modèle de l'aquifère, par l'intermédiaire d'un terme source.

Récemment, plusieurs modèles 2D-axisymétriques de PCP, utilisant la méthode des éléments finis ont été développés. Le modèle de Croteau (2011) est le premier à inclure un processus de contrôle de la saignée, en ajustant le débit entrant dans le PCP. L'approche utilisée par Croteau (2011) a par la suite inspiré Nguyen *et al.* (2012) dans le développement d'un modèle numérique, intégrant un contrôle de la saignée à trois niveaux par l'intermédiaire d'une fonction par palier. Cette stratégie de modélisation permet de désactiver de manière séquentielle les pompes à chaleur, afin de stabiliser la température de l'eau souterraine au sein du puits. Nguyen *et al.* (2015c) ont ensuite développé un modèle capable de simuler l'écoulement de l'eau souterraine et le transfert de chaleur au sein d'un PCP et de l'aquifère environnant, à l'aide d'un réseau de résistances et capacités thermiques couplé à une solution analytique. Le contrôle de la saignée à trois niveaux y est également intégré. À l'aide de ce modèle, Nguyen *et al.* (2015b) ont investigué l'impact d'une zone fracturée sur les performances d'un PCP. Ils ont observé que la présence d'une zone fracturée au sein de l'aquifère était bénéfique pour le coefficient de performance de la pompe à chaleur, quand la saignée est active. En vue d'accélérer l'intégration numérique des modèles de résistances et capacités thermiques, Nguyen et Pasquier (2015) ont développé une méthode séquentielle d'intégration basée sur la méthode des ondelettes de Haar. L'approche proposée est 3 à 17 fois plus rapide que les solveurs commerciaux (par exemple le solveur ode15s de Matlab).

La description de ces modèles confirme que les processus géochimiques n'ont encore jamais été pris en considération. Ces derniers ne sont donc pas adaptés à la problématique de cette thèse. La liste présentée ci-dessus n'est toutefois pas exhaustive. Des modèles couplés thermohydriques utilisant la méthode des différences finies et des méthodes d'intégration numérique (séquentielle ou spectrale par exemple), ainsi que des modèles analytiques ont également été publiés dans la littérature. Cependant, pour rester dans le cadre du projet, ils ne seront pas discutés dans cette section. Pour de plus amples informations à ce sujet, la revue de littérature présentée par Nguyen (2015) illustrant l'ensemble de ces modèles peut être consultée.

La première section de ce chapitre vise à décrire le modèle THG développé dans le cadre de cette étude, en exposant sa géométrie et sa discrétisation spatiale. Les trois sections suivantes illustrent la méthodologie appliquée pour développer respectivement les modèles hydraulique, thermique et géochimique. Finalement, la présentation des conditions aux frontières, ainsi que des hypothèses sur lesquels le modèle repose conclut ce chapitre.

3.1 Description du modèle thermo-hydro-géochimique

Un modèle numérique d'un PCP utilisant la méthode des éléments finis a été développé pour reproduire l'opération du système, en milieu fracturé. Le comportement THG du PCP et de l'aquifère environnant est simulé en couplant trois modèles, à savoir un modèle d'écoulement d'eau, un modèle de transfert de chaleur et un modèle géochimique. Cette stratégie de modélisation permet de coupler l'écoulement de l'eau souterraine au sein du puits et de l'aquifère fracturé au transfert de chaleur induit par advection et conduction, ainsi qu'au transport réactif des espèces dissoutes. Le transport réactif désigne le transport, par advection et diffusion, des espèces en phase aqueuse pouvant participer à différents types de réactions chimiques.

Les trois modèles sont couplés de telle façon que la solution du modèle d'écoulement d'eau, à savoir la vitesse de Darcy, est utilisée par le modèle de transfert de chaleur pour définir la température en tout point du modèle (Fig. 3.1). La température et la vitesse de l'eau sont ensuite utilisées par le modèle géochimique pour simuler les activités des différentes espèces dissoutes dans la phase aqueuse du puits et de l'aquifère. Les concentrations chimiques obtenues sont ensuite converties en activités et intégrées dans le modèle PWP, dans le but de définir le taux de précipitation et de dissolution de la calcite. Dans le modèle géochimique, la matrice U (présentée à la section 3.4.2) permet de lier les réactions à l'équilibre aux réactions de cinétique et aux processus de transport.

3.1.1 Géométrie

La géométrie du modèle 2D axisymétrique est illustrée à la Fig. 3.2. Le puits simulé a une profondeur de 300 m et un rayon de 0.102 m. Le domaine complet représente environ 18 850 m³, soit 300 m de profondeur et 20 m de rayon. À 150 m de profondeur, une fracture horizontale de 3 mm d'ouverture est intégrée dans l'aquifère. D'autre part, les conditions THG se produisant à la base du PCP sont considérées comme négligeables. Ainsi, pour faciliter la modélisation, la chambre de sédimentation, correspondant à la zone dans laquelle les minéraux s'accumulent à la base du puits (voir Fig. 1.2) n'est pas simulée. L'ensemble des paramètres géométriques est résumé dans le tableau 3.1.

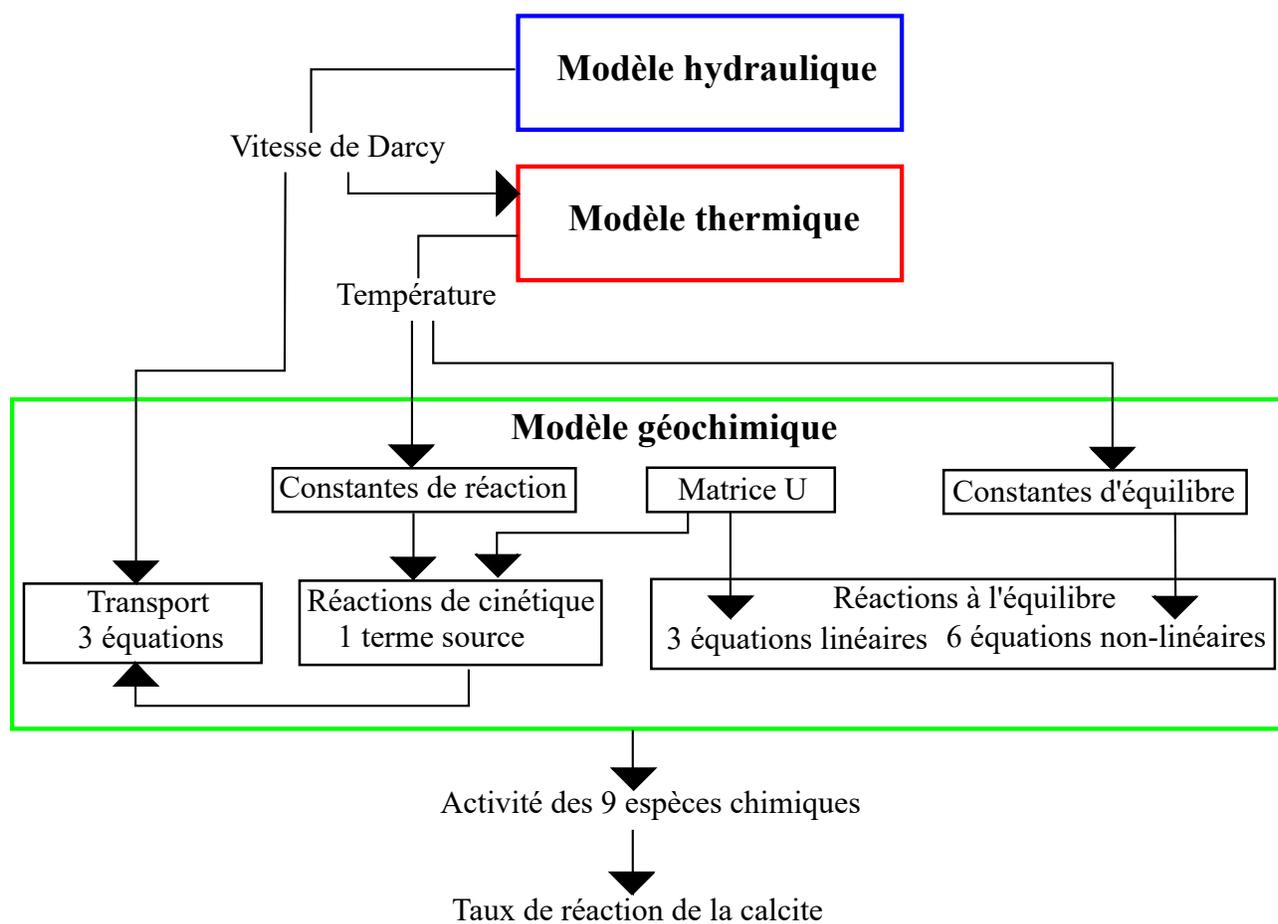


Figure 3.1 Schématisation du modèle développé dans le cadre de cette thèse.

Tableau 3.1 Paramètres géométriques du modèle développé.

Paramètre	Symbole	Unité	Valeur
Rayon du PCP	r_b	m	0.102
Longueur du PCP	L_b	m	300
Rayon interne du tube de prélèvement	r_{pi}	m	0.070
Rayon externe du tube de prélèvement	r_{po}	m	0.076
Rayon de l'aquifère	r_a	m	20
Épaisseur de l'aquifère	L_a	m	300
Profondeur de la fracture	L_{fr}	m	150
Ouverture initiale de la fracture	b_{ini}	m	0.003

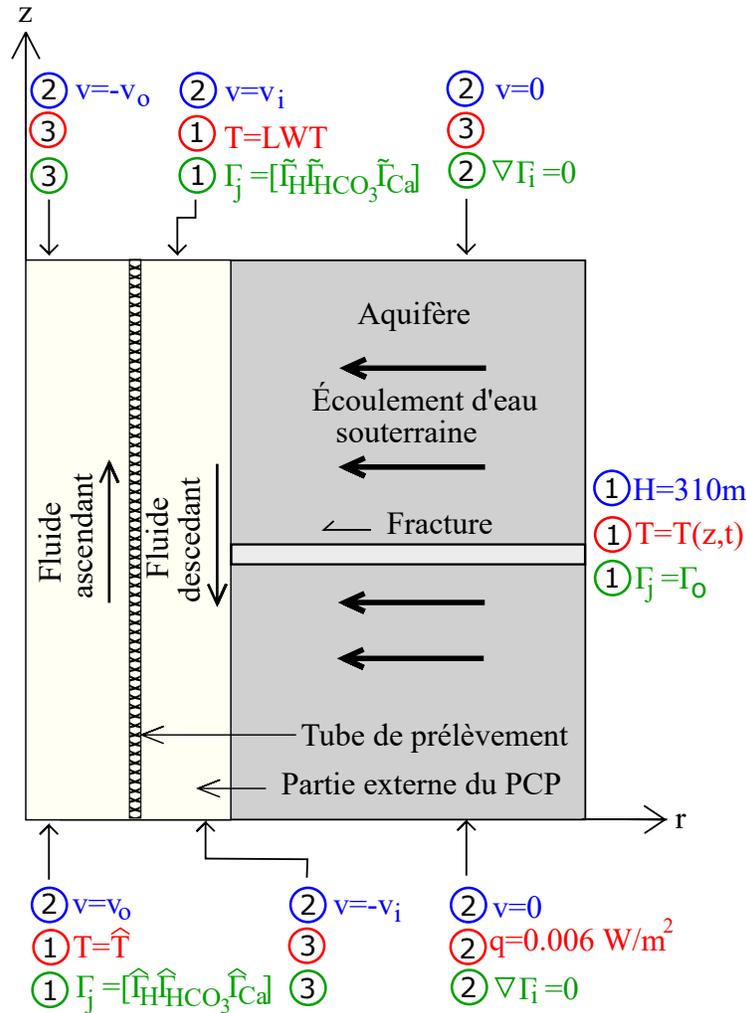


Figure 3.2 Géométrie et conditions aux frontières pour les modèles d'écoulement d'eau en bleu, de transfert de chaleur en rouge et géochimie en vert. Les chiffres illustrent le type de condition frontière avec 1 pour Dirichlet, 2 pour Neumann et 3 pour frontière ouverte.

3.1.2 Discrétisation spatiale

Le modèle numérique a été discrétisé à l'aide de 72 900 éléments finis rectangulaires, soit :

- 5 400 éléments pour le puits ;
- 66 000 éléments pour la formation géologique et ;
- 1 500 éléments pour la fracture.

La Fig. 3.3 illustre le maillage utilisé. Les différents paramètres THG sont calculés sur 4 261 688 noeuds, à chaque pas de temps de 24 h. Un test d'indépendance au maillage a montré que les solutions obtenues étaient stables avec ce maillage. Avec un maillage plus fin,

les solutions sont identiques aux solutions obtenues avec le maillage choisi pour cette étude. Les nombres de Peclet et de Courant sont respectés dans le puits. Aucune dispersion numérique n'a été observée, malgré le fait que ces nombres ne soient pas respectés dans l'aquifère. Une discrétisation plus grossière dans l'aquifère a été retenue afin de limiter les temps de calculs du modèle THG qui étaient déjà significatifs.

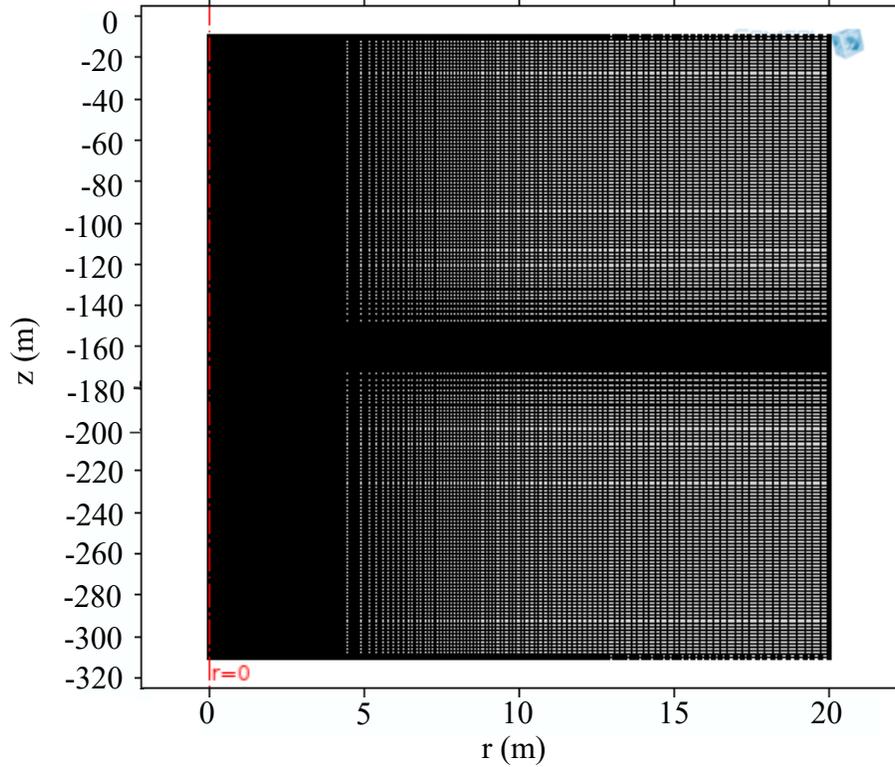


Figure 3.3 Maillage utilisé dans le modèle numérique.

3.2 Développement du modèle d'écoulement d'eau

L'approche utilisée pour simuler l'écoulement de l'eau souterraine dans le puits et la matrice géologique est inspirée des travaux de Nguyen *et al.* (2012, 2015b,c). En supposant un aquifère confiné et saturé, les équations qui gouvernent l'écoulement de l'eau souterraine sont les suivantes :

$$\rho S \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0 \quad (3.1)$$

et

$$v = -\frac{K}{\rho g} (\nabla p + \rho g \nabla D_v) \quad (3.2)$$

où v est la vitesse de Darcy (m/s), K la conductivité hydraulique (m/s), ρ la densité du

fluide (kg/m^3), g l'accélération gravitationnelle (m/s^2), p la pression (Pa), D_v la coordonnée verticale (m), S le coefficient d'emménagement (-) et t le temps (s). Il est important de spécifier que la viscosité dynamique du fluide, ainsi que sa densité sont calculées en fonction de la température, signifiant que la conductivité hydraulique du milieu varie en fonction de la température. Les propriétés hydrauliques utilisées dans le modèle numérique sont présentées au tableau 3.2. Les paramètres introduits dans le modèle visent à reproduire l'opération typique d'un PCP. Cependant, aucune étude paramétrique n'a été réalisée.

Tableau 3.2 Propriétés hydrogéologiques du modèle développé.

Propriété	Symbole	Unité	Valeur
Cond. hydraulique du domaine contenant le fluide dans le puits	K_f	m/s	1000
Cond. hydraulique du domaine correspondant au tuyau	K_p	m/s	1.0e-9
Cond. hydraulique équivalente de l'aquifère	$K_{eq,a}$	m/s	5.36e-5
Cond. hydraulique de l'aquifère (sans la fracture)	K_a	m/s	1.0e-6
Cond. hydraulique initiale de la fracture	K_{fr}	m/s	5.26
Perméabilité du domaine contenant le fluide dans le puits	κ_f	m^2	1.43e-4
Perméabilité équivalente de l'aquifère	$\kappa_{eq,a}$	m^2	1.65e-8
Perméabilité de l'aquifère (sans la fracture)	κ_a	m^2	1.43e-13
Perméabilité initiale de la fracture	κ_{fr}	m^2	7.50e-7
Emmagasinement spécifique du fluide	$S_{s,f}$	1/m	4.0e-6
Emmagasinement spécifique du domaine correspondant au tuyau	$S_{s,p}$	1/m	1.3e-7
Emmagasinement spécifique de l'aquifère	$S_{s,a}$	1/m	5.0e-5
Porosité du domaine contenant le fluide	φ_f	-	1.0
Porosité du domaine contenant le tuyau	φ_p	-	1.0e-5
Porosité de l'aquifère (sans la fracture)	φ_a	-	0.1
Porosité initiale de la fracture	φ_{fr}	-	1.0
Débit de pompage	\dot{V}	l/min	189

Une forte conductivité hydraulique et une porosité de 1 ont été imposées au domaine contenant le fluide dans le PCP. À l'inverse, des valeurs faibles de conductivité hydraulique et de porosité ont été assignées au tuyau. Concernant l'aquifère, une porosité de 0.1 a été utilisée. De ce fait, lorsque la saignée est active, l'écoulement de l'eau souterraine engendré dans la matrice géologique se produit principalement dans la fracture, dont la conductivité hydraulique élevée est définie par l'équation suivante, en référence à la loi cubique :

$$K_{fr} = \frac{\rho \cdot g \cdot b^2}{\mu \cdot 12} \quad (3.3)$$

où b est l'ouverture de la fracture (m) et μ la viscosité dynamique de l'eau ($\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$). La

perméabilité de la fracture est, quant à elle, calculée par l'équation suivante :

$$\kappa_{fr} = b^2/12 \quad (3.4)$$

L'aquifère est considéré comme un milieu poreux équivalent, dont la conductivité hydraulique équivalente est spécifiée par :

$$K_{eq} = \frac{(L_a - b) \cdot K_a + b \cdot K_{fr}}{L_a} \quad (3.5)$$

où K_a est la conductivité hydraulique de la matrice géologique (m/s) et L_a l'épaisseur de l'aquifère (m). L'équation 3.5 prend ainsi en considération la conductivité hydraulique de la fracture et de la matrice géologique.

Les réactions de précipitation et de dissolution influencent la porosité du milieu dans lequel elles se produisent. Dans le modèle développé, ces variations sont prises en considération dans la fracture, de la façon suivante (Yahiaoui et Courcelles, 2013) :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{1}{\rho CaCO_3} \cdot \frac{\partial [CaCO_3]}{\partial t} = -\frac{1}{\rho CaCO_3} \cdot -\tilde{R} \cdot \frac{A}{V} \quad (3.6)$$

où $\rho CaCO_3$ est la masse volumique de la calcite (kg/m³), $[CaCO_3]$ la masse de calcite par volume total (kg/m³), \tilde{R} le taux de réaction global de la calcite (kg/(m²·s)) décrit par le modèle PWP (Éq. 3.40), A l'aire de la calcite (m²) et V le volume de la solution (m³). La précipitation et la dissolution de la calcite sont supposées uniformes et symétriques sur les deux plans de la fracture. Ainsi, l'épaisseur de la couche de calcite précipitée sur un des deux plans (e) est exprimée par :

$$e = (1 - \varphi)b_{ini}/2 \quad (3.7)$$

où b_{ini} est l'ouverture initiale de la fracture (m). Subséquemment, l'ouverture de la fracture est définie par :

$$b = b_{ini} - 2e = \varphi \cdot b_{ini} \quad (3.8)$$

Le modèle d'écoulement d'eau permet d'obtenir la vitesse de Darcy sur l'ensemble du domaine, comme illustré sur la Fig. 3.4.

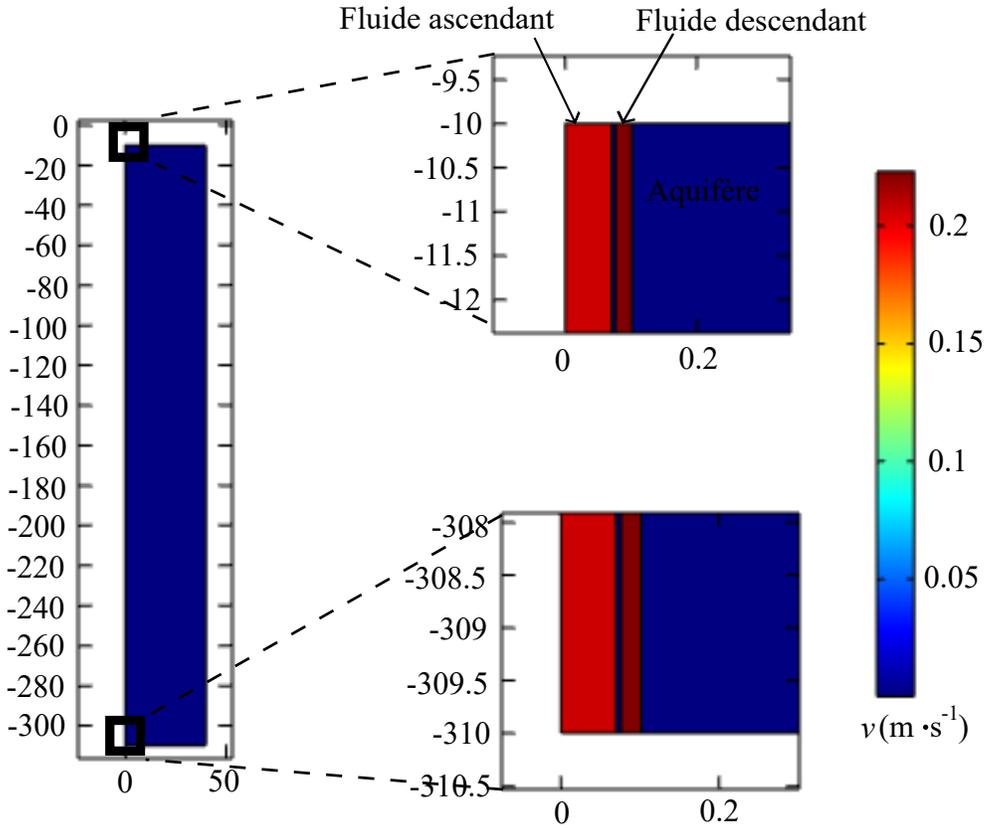


Figure 3.4 Illustration de la magnitude de la vitesse de Darcy (v) sur l'ensemble du domaine.

3.3 Développement du modèle de transfert de chaleur

Le modèle thermique permet de simuler le transfert de chaleur dans le puits et l'aquifère, induit conjointement par conduction et advection. La vitesse de Darcy, calculée par le modèle d'écoulement d'eau, est utilisée pour résoudre le modèle de transfert de chaleur exprimé par (voir Fig. 3.1) :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \vec{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k_{eq} \nabla T) \quad (3.9)$$

où k_{eq} et ρC_p sont respectivement la conductivité thermique équivalente ($\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$) et la capacité thermique volumique équivalente ($\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$) et T la température de l'eau souterraine (K), sous l'hypothèse qu'un équilibre thermique local entre l'eau et la formation géologique est atteint. Le terme équivalent considère les paramètres du fluide et de la matrice solide. Les propriétés thermiques utilisées dans le modèle sont présentées dans le tableau 3.3.

Le modèle de transfert de chaleur permet de définir la température sur l'ensemble du domaine,

comme illustré sur la Fig. 3.5.

Tableau 3.3 Propriétés thermiques du modèle développé.

Propriété	Symbole	Unité	Valeur
Conductivité thermique du fluide	k_f	W/(m·K)	0.6
Conductivité thermique du tuyau	k_p	W/(m·K)	0.1
Conductivité thermique de l'aquifère	k_a	W/(m·K)	2.5
Capacité thermique vol. du fluide	$C_{s,f}$	J/(kg·K)	4200
Capacité thermique vol. du tuyau	$C_{s,p}$	J/(kg·K)	1200
Capacité thermique vol. de l'aquifère	$C_{s,a}$	J/(kg·K)	800

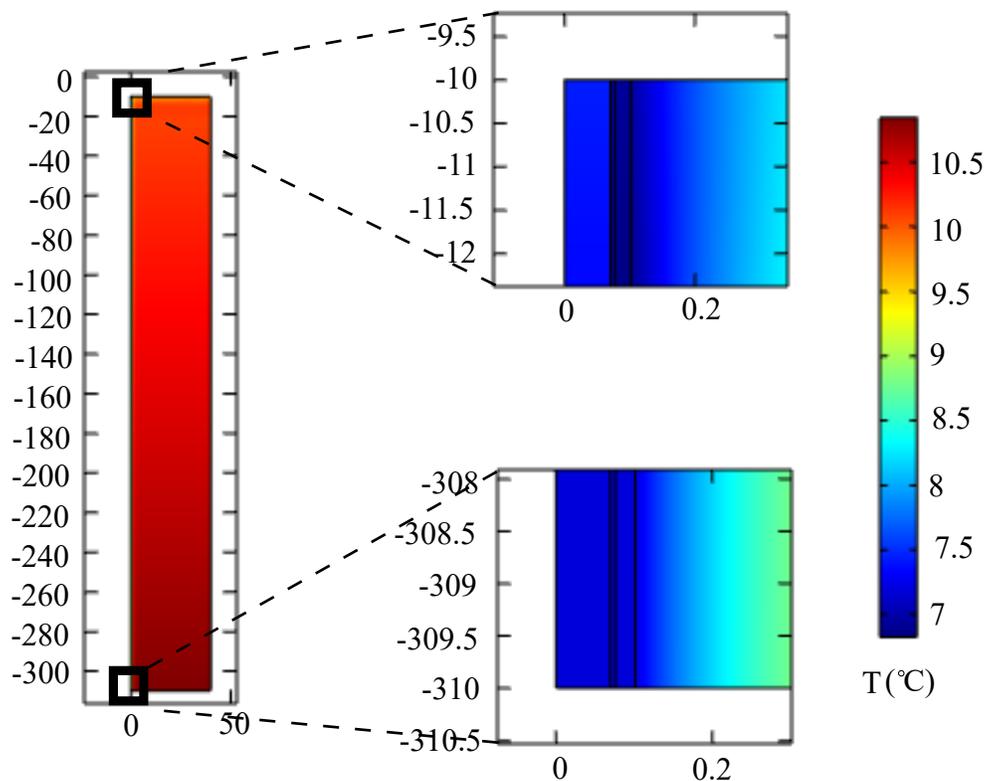


Figure 3.5 Illustration de la température (T) sur l'ensemble du domaine.

3.4 Développement du modèle géochimique

Le modèle géochimique est utilisé pour simuler le transport réactif des neuf espèces chimiques présentes dans la phase aqueuse du PCP et de l'aquifère (H^+ , HCO_3^- , Ca^{2+} , OH^- , H_2CO_3 , CO_3^{2-} , $CaHCO_3^+$, $CaCO_{3(aq)}$ et $CaOH^+$). Le transport réactif désigne le transport, par advection et diffusion moléculaire des espèces dissoutes pouvant participer à différentes

réactions chimiques. Les réactions considérées sont séparées en deux catégories. La première représente les réactions à l'équilibre, correspondant aux réactions rapides (quasi instantanées) se produisant dans la phase aqueuse. Ainsi, l'équilibre local peut être assumé en tout point du modèle. La deuxième catégorie comprend les réactions de cinétique, intégrant les réactions de précipitation et de dissolution de la calcite. Elles se déroulent à la surface des particules solides et sont considérées comme lentes par rapport aux processus de transport.

Saaltink *et al.* (1998) ont présenté une formulation mathématique générale, décrivant le transport réactif des espèces chimiques dans l'eau. L'idée consiste à réduire le nombre d'inconnues des équations à résoudre, par diverses manipulations algébriques linéaires des coefficients stoechiométriques des réactions chimiques. Cette approche hautement efficace est utilisée dans cette étude pour simuler les processus géochimiques au sein du puits et de l'aquifère environnant. Les sections suivantes présentent comment le transport des espèces est couplé aux réactions de cinétique et d'équilibre, puis intégré au modèle développé.

3.4.1 Transport réactif multi-espèces

L'équation qui gouverne le transport advectif et dispersif des espèces chimiques dans la phase aqueuse est la suivante :

$$\varphi \frac{\partial c}{\partial t} = (\nabla \cdot (D\nabla c) - \nabla \cdot (\vec{v}c))\varphi \quad (3.10)$$

où φ est la porosité (-), c la concentration des espèces (kg/m³) et D le coefficient de dispersion hydrodynamique (m²/s).

Dans le but de coupler le transport des espèces aux réactions chimiques, deux termes décrivant respectivement les réactions de cinétique et les réactions à l'équilibre doivent être intégrés à l'équation de transport (Éq. 3.10). Ainsi, l'équation exprimant la variation de la concentration des espèces en fonction du temps, causée par les processus de transport $((\nabla \cdot (D\nabla \mathbf{c}) - \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{c}))\varphi)$, les réactions à l'équilibre $(\mathbf{S}'_e \mathbf{r}_e)$ et les réactions de cinétique $(\mathbf{S}'_k \mathbf{r}_k)$, est la suivante :

$$\varphi \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} = (\nabla \cdot (D\nabla \mathbf{c}) - \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{c}))\varphi + \mathbf{S}'_e \mathbf{r}_e + \mathbf{S}'_k \mathbf{r}_k \quad (3.11)$$

où \mathbf{S}_e et \mathbf{S}_k sont respectivement des matrices stoechiométriques pour les réactions à l'équilibre et de cinétique, \mathbf{r}_e est un vecteur contenant les taux de réaction des réactions à l'équilibre,

correspondant au taux requis pour maintenir la réaction dans un état d'équilibre et \mathbf{r}_k est le vecteur contenant les taux de réaction des réactions de cinétique, correspondant à la quantité de réactifs convertie en produit par unité de temps. Finalement, ' représente l'opérateur de transposé. Les matrices, ainsi que les vecteurs sont présentés en détail dans les sections 3.4.2 et 3.4.3.

Le terme \mathbf{r}_k peut aisément être défini comme une fonction des concentrations des espèces. Cependant, la même approche n'est pas applicable au terme \mathbf{r}_e et aucune équation n'est disponible pour le définir. Par conséquent, Saaltink *et al.* (1998) ont proposé une formulation prenant en compte la contribution de \mathbf{r}_e , sans le calculer directement. Cette méthode consiste à multiplier l'équation 3.11 par une matrice de transformation \mathbf{U} (décrite à la section 3.4.2), de façon à simuler le transport des trois concentrations totales notées $\mathbf{\Gamma}$. Regrouper les concentrations des espèces chimiques dans des concentrations totales permet de réduire de N_s à $N_s - N_r$ le nombre d'équations de transport à résoudre, avec N_s correspondant au nombre d'espèces et N_r au nombre de réactions à l'équilibre. Conséquemment, le modèle est simplifié et le temps de calcul réduit. L'équation 3.11 devient alors (Saaltink *et al.*, 1998; Holzbecher, 2005, 2012) :

$$\varphi \frac{\partial \mathbf{\Gamma}}{\partial t} = (\nabla \cdot (D \nabla \mathbf{\Gamma}) - \nabla \cdot (\vec{v} \mathbf{\Gamma})) \varphi + \mathbf{U} \mathbf{S}'_k \mathbf{r}_k \quad (3.12)$$

Dans le but de respecter l'état d'équilibre décrit par :

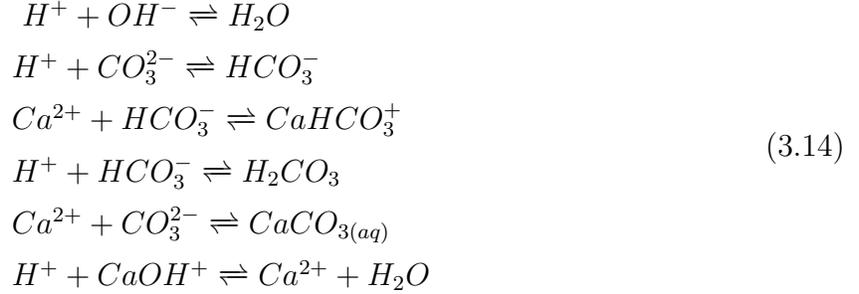
$$\mathbf{S}'_e \mathbf{r}_e = 0 \quad (3.13)$$

la matrice \mathbf{U} est choisie pour satisfaire l'équation $\mathbf{U} \mathbf{S}'_e = 0$.

La masse globale des composants totaux est indépendante des réactions à l'équilibre, ce qui explique pourquoi l'équation 3.11 est multipliée par \mathbf{U} pour éliminer le terme \mathbf{r}_e (Saaltink *et al.*, 1998).

3.4.2 Réactions à l'équilibre

Dans l'environnement étudié, les neuf espèces chimiques considérées peuvent participer aux six réactions à l'équilibre suivantes :



Dans un système à l'équilibre chimique, signifiant que l'énergie libre de Gibbs est minimale (Saaltink *et al.*, 1998), les réactifs et les produits sont liés par une constante d'équilibre dépendante de la température. Selon la loi d'action de masse et en utilisant la notation de Holzbecher (2012), le logarithme de la constante d'équilibre ($K_{eq,j}$) est décrit comme suit :

$$\log(K_{eq,j}) = \sum_{i=1}^{N_s} (m_i^{(j)} - n_i^{(j)}) \cdot \log(\alpha_i) \tag{3.15}$$

où $j = 1, \dots, N_r$ et m et n correspondent aux coefficients stoechiométriques des réactifs et des produits de la réaction j et α aux activités des espèces (kg/m^3).

La phase aqueuse considérée n'est pas suffisamment diluée pour supposer que les activités sont égales aux concentrations. Lorsque la solution est concentrée, les interactions entre les différents ions et/ou molécules empêchent une partie des espèces de participer aux réactions chimiques. Pour prendre en considération ce phénomène, l'activité, définie par l'équation suivante, peut être utilisée à la place de la concentration :

$$\alpha = \gamma \cdot c \tag{3.16}$$

où γ est le coefficient d'activité variant entre 0 et 1 (-) et c la concentration molaire (mol/l). Pour calculer les coefficients d'activité des différentes espèces, la force ionique (I) de la solution définie par l'équation suivante doit être connue :

$$I = \frac{1}{2} \sum c_j \cdot z_j^2 \tag{3.17}$$

où z_j est la charge ionique de l'ion (-). Pour les solutions ayant une force ionique inférieure ou égale à 0.1 mol/l, le coefficient d'activité est défini par l'équation de Debye-Hückel :

$$- \log(\gamma_j) = \frac{A_T z_j^2 \sqrt{I}}{1 + a_j B_T \sqrt{I}} \quad (3.18)$$

où A_T et B_T sont des constantes dépendantes de la température (-) et a_j le diamètre effectif de l'ion (m). En revanche, pour les solutions présentant une force ionique supérieure à 0.1 mol/l, l'équation de Davies est utilisée :

$$- \log(\gamma_j) = \frac{A_T z_j^2 \sqrt{I}}{1 + a_j B_T \sqrt{I}} + 0.3 \sqrt{I} \quad (3.19)$$

La forme matricielle de l'équation 3.15 est donnée par Saaltink *et al.* (1998) :

$$\log \mathbf{K}_{eq} = \mathbf{S}_e \cdot \log \boldsymbol{\alpha} \quad (3.20)$$

où \mathbf{K}_{eq} est un vecteur comprenant les constantes d'équilibre des réactions à l'équilibre et \mathbf{S}_e une matrice stoechiométrique $N_r \times N_s$ pour les réactions à l'équilibre, où chaque ligne représente une réaction à l'équilibre et chaque colonne une espèce chimique. Les chiffres composant la matrice sont les coefficients stoechiométriques des réactions à l'équilibre. Les chiffres positifs sont utilisés pour les réactifs et les chiffres négatifs pour les produits. Le rang de la matrice \mathbf{S}_e , correspondant au nombre maximum de colonnes ou de lignes linéairement indépendantes dans la matrice doit être égal à N_r , car il est nécessaire que les réactions soient indépendantes. La matrice \mathbf{S}_e a une double utilité, consistant à assurer respectivement l'équilibre chimique par le biais de la loi d'action de masse et l'équilibre de masse entre les moles créées et consommées de la réaction. La matrice \mathbf{S}_e correspondant au système de réaction décrit en 3.14 est la suivante :

$$\mathbf{S}_e = \begin{matrix} & \begin{matrix} H^+ & HCO_3^- & Ca^{2+} & OH^- & H_2CO_3 & CO_3^{2-} & CaHCO_3^+ & CaCO_{3(aq)} & CaOH^+ \end{matrix} \\ \begin{matrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \\ r_5 \\ r_6 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (3.21)$$

Étant donné que \mathbf{S}_e est une matrice de dimension $N_r \times N_s$, le système décrit par l'équation 3.13 comprend N_s équations. Il y a cependant uniquement N_r réactions à l'équilibre, signifiant que seules N_r équations, intégrant les constantes d'équilibre, peuvent être résolues. Ainsi, pour compléter le système de N_s équations, $N_s - N_r$ équations, intégrant les concentrations totales (Γ_j) et la matrice \mathbf{U} , doivent être ajoutées.

Il existe deux méthodes pour définir la matrice \mathbf{U} , dont les lignes correspondent aux concentrations totales et les colonnes aux espèces chimiques. Le choix de l'approche est propre à l'utilisateur puisqu'elles fournissent toutes les deux exactement le même résultat. La méthode présentée par Saaltink *et al.* (1998) consiste à séparer la matrice \mathbf{S}_e en deux matrices :

$$\mathbf{S}_e = (\mathbf{S}_1 | \mathbf{S}_2) \quad (3.22)$$

où les matrices \mathbf{S}_1 et \mathbf{S}_2 font respectivement références aux espèces primaires et secondaires. Les espèces primaires sont les $N_s - N_r$ premières espèces, alors que les espèces restantes représentent les espèces secondaires. Il existe plusieurs combinaisons possibles pour définir les espèces primaires et secondaires. Cependant, les conditions suivantes doivent être respectées (Saaltink *et al.*, 1998) :

- La matrice \mathbf{S}_2 doit être une matrice carrée ;
- Le rang de la matrice \mathbf{S}_2 doit être maximal, soit égal à N_r ;
- La matrice \mathbf{S}_2 doit être inversible ;
- La matrice \mathbf{S}_1 doit contenir $N_s - N_r$ lignes et N_r colonnes ;
- Pour éviter les instabilités numériques lorsque les concentrations des espèces primaires sont proches de 0, il est préférable de ne pas inclure les espèces avec les concentrations les plus faibles dans les espèces primaires.

La matrice \mathbf{U} est ensuite calculée par :

$$\mathbf{U} = [\mathbf{I}_{N_s - N_r} | \mathbf{S}^{*'}] \quad (3.23)$$

avec

$$\mathbf{S}^* = -\mathbf{S}_2^{-1} \cdot \mathbf{S}_1 \quad (3.24)$$

où $\mathbf{I}_{N_s - N_r}$ est une matrice identité composée de $N_s - N_r$ lignes ou colonnes. Dans le système

étudié, \mathbf{S}_1 et \mathbf{S}_2 sont définies par :

$$\mathbf{S}_1 = \begin{pmatrix} & H^+ & HCO_3^- & Ca^{2+} \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

$$\mathbf{S}_2 = \begin{pmatrix} & OH^- & H_2CO_3 & CO_3^{2-} & CaHCO_3^+ & CaCO_{3(aq)} & CaOH^+ \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

alors que les matrices $\mathbf{I}_{N_s-N_r}$ et \mathbf{S}^* sont exprimées par :

$$\mathbf{I}_{N_s-N_r} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

$$\mathbf{S}^* = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

Finalement, la matrice \mathbf{U} correspond à :

$$\mathbf{U} = \begin{matrix} & H^+ & HCO_3^- & Ca^{2+} & OH^- & H_2CO_3 & CO_3^{2-} & CaHCO_3^+ & CaCO_{3(aq)} & CaOH^+ \\ \Gamma_H & \left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right. & \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right. & \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 1 \end{array} \right. & \left(\begin{array}{c} -1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right. & \left(\begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right. & \left(\begin{array}{c} -1 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right. & \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right. & \left(\begin{array}{c} -1 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right. & \left. \begin{array}{c} -1 \\ 0 \\ 1 \end{array} \right) \end{matrix} \quad (3.29)$$

La matrice \mathbf{U} peut également être déterminée à l'aide de la méthode Tableaux définie par Morel et Hering (1993), en utilisant H^+ , HCO_3^- et Ca^{2+} comme composants de base (Eppner *et al.*, 2015). L'approche consiste à former plusieurs combinaisons linéaires intégrant les composants de base. Comme le nom de la méthode l'indique, un tableau est créé en plaçant les espèces dans la première colonne, les combinaisons linéaires dans la deuxième colonne et les composants de base dans les colonnes suivantes, comme illustré dans le tableau 3.4. Lorsque le composant de base est ajouté à la combinaison linéaire pour former l'espèce en question, le chiffre 1 est ajouté dans le tableau sous le composant correspondant. En revanche, lorsque le composant de base est soustrait à la combinaison pour former l'espèce, le chiffre -1 est alors ajouté dans le tableau. Finalement, lorsque le composant de base n'est pas utilisé pour former l'espèce, le chiffre 0 est utilisé. La méthode Tableaux permet de définir la matrice \mathbf{U} , dont la transposée correspond aux trois dernières colonnes du tableau 3.4. Pour le système étudié, les trois concentrations totales obtenues à partir du tableau 3.4 sont les suivantes :

$$\begin{aligned} \Gamma_H &= H^+ - OH^- + H_2CO_3 - CO_3^{2-} - CaCO_{3(aq)} - CaOH^+ \\ \Gamma_{HCO_3} &= HCO_3^- + H_2CO_3 + CO_3^{2-} + CaHCO_3^+ + CaCO_{3(aq)} \\ \Gamma_{Ca} &= Ca^{2+} + CaHCO_3^+ + CaCO_{3(aq)} + CaOH^+ \end{aligned} \quad (3.30)$$

Tableau 3.4 Illustration de la méthode Tableaux

Espèce	Combinaison	Composant de base		
		H^+	HCO_3^-	Ca^{2+}
H^+	$(H^+)_1$	1	0	0
HCO_3^-	$(HCO_3^-)_1$	0	1	0
Ca^{2+}	$(Ca^{2+})_1$	0	0	1
OH^-	$(H_2O)_1(H^+)_{-1}$	-1	0	0
H_2CO_3	$(HCO_3^-)_1(H^+)_1$	1	1	0
CO_3^{2-}	$(HCO_3^-)_1(H^+)_{-1}$	-1	1	0
$CaHCO_3^+$	$(Ca^{2+})_1(HCO_3^-)_1$	0	1	1
$CaCO_{3(aq)}$	$(H^+)_{-1}(HCO_3^-)_1(Ca^{2+})_1$	-1	1	1
$CaOH^+$	$(H_2O)_1(H^+)_{-1}(Ca^{2+})_1$	-1	0	1

Au final, le système de N_s inconnues (une pour chaque concentration) et N_s équations est résolu. Il y a N_r conditions d'équilibre (une pour chaque réaction à l'équilibre), ainsi N_r équations non-linéaires, décrites par l'équation suivante sont résolues :

$$\mathbf{S}_e \cdot \log \boldsymbol{\alpha} - \log \mathbf{K}_{eq} = 0 \quad (3.31)$$

Pour compléter le système de N_s équations, $N_s - N_r$ équations linéaires intégrant les concentrations totales sont résolues, comme présenté ci-dessous :

$$\mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\Gamma} = 0 \quad (3.32)$$

Dans le modèle numérique, l'intégration des équations 3.31 et 3.32 permet de simuler les réactions à l'équilibre et de les coupler aux processus de transport.

3.4.3 Réactions de cinétique

La loi d'action de masse est utilisée uniquement dans des conditions à l'équilibre. Les réactions de cinétique ne sont donc pas caractérisées par une constante d'équilibre, mais par un taux de réaction (R_j), définissant la quantité de réactifs transformée en produit par unité de temps. Le taux de réaction d'une réaction de cinétique est donné par (voir Langmuir, 1997; Appelo et Postma, 2005; Brantley *et al.*, 2008) :

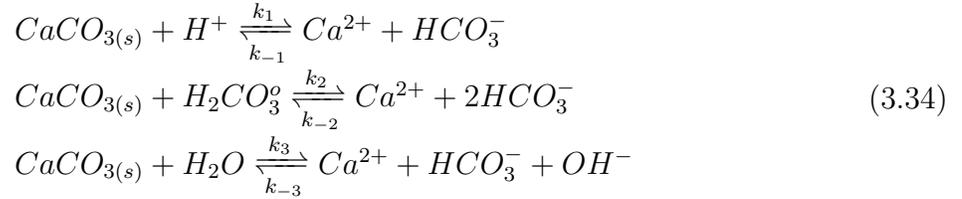
$$\hat{R}_j = k_{+j} \cdot \alpha_{r,j} - k_{-j} \cdot \alpha_{p,j} \quad (3.33)$$

où k_{+j} et k_{-j} représentent respectivement les constantes de réaction directe et inverse, alors que les indices r et p sont utilisés pour les réactifs et les produits.

Comme mentionné dans la revue de littérature, le taux de précipitation et de dissolution de la calcite peut être exprimé par de nombreux modèles de réaction. Dans cette étude, le modèle PWP a été retenu pour exprimer ces mécanismes. Ce choix est justifié par plusieurs arguments. Premièrement, il fournit des équations liant les constantes de réaction directes à la température, permettant de coupler aisément les variations de température induites par la pompe à chaleur aux réactions de précipitation et de dissolution de la calcite. De plus, les nombreuses citations dans la littérature démontrent que ce modèle est, de nos jours, largement accepté et considéré comme une référence dans le domaine. D'autre part, il permet de définir le taux de réaction global de la calcite, contrairement à d'autres approches, spécifiant

uniquement le taux de précipitation ou de dissolution. Le modèle basé sur la spéciation de surface n'a pas été considéré, car à l'échelle du puits, les processus microscopiques se produisant à la surface des complexes chimiques ont été estimés négligeables. Finalement, le modèle PWP s'intègre facilement dans un logiciel de simulation.

Pour simplifier la lecture et faciliter la compréhension, les équations gouvernant le modèle PWP illustrées dans la revue de littérature sont à nouveau présentées dans cette section. De ce fait, les équations 3.34, 3.35, 3.36, 3.38 et 3.40 correspondent respectivement aux équations 2.1, 2.2, 2.8, 2.7 et 2.5 du chapitre précédent. La précipitation et la dissolution de la calcite sont exprimées par les réactions élémentaires suivantes (Plummer *et al.*, 1978) :



Dans l'environnement étudié, les réactions de cinétique se produisent dans un contexte où les changements de température sont fréquents et favorisent le sens des réactions, ainsi que leur vitesse. Ainsi, les changements de température sont pris en considération par l'intermédiaire des constantes de réaction directes (Éq. 3.35) et des constantes d'équilibre, utilisées pour définir les constantes de réaction inverses (Éq. 3.36). En effet, selon Plummer *et al.* (1978) les constantes de réaction directes sont calculées comme des fonctions de la température (T) :

$$\begin{aligned}
 \log k_1 &= 0.198 - (444/T) \\
 \log k_2 &= 2.84 - (2177/T) \\
 \log k_3 &= -5.86 - (317/T) \text{ pour } T < 298.15 \text{ K} \\
 \log k_3 &= -1.10 - (1737/T) \text{ pour } T > 298.15 \text{ K}
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

Les constantes de réaction inverses sont, quant à elles, définies par l'équation suivante :

$$k_{-j} = \frac{k_{+j}}{K_{eq,j}} \tag{3.36}$$

avec

$$\begin{aligned}
 K_{eq1} &= \log(K_{sp}) + \log(K_2) \\
 K_{eq2} &= \log(K_{sp}) + \log(K_1) + \log(K_2) \\
 K_{eq3} &= \log(K_{sp}) + \log(K_w) + \log(K_2)
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

où K_{eqj} sont les constantes d'équilibre des réactions présentées en 3.34. Ces constantes sont calculées comme des fonctions de la température, comme précédemment illustré dans l'équation 3.55. Plummer *et al.* (1978) ont proposé l'équation suivante pour définir la constante de réaction inverse k_4 :

$$k_4 = \frac{K_2}{K_{sp}} \left[k'_1 + \frac{1}{\alpha_{H^+}} [k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3} + k_3 \cdot \alpha_{H_2O}] \right] \quad (3.38)$$

Cependant, dans cette étude, l'équation 3.36 a été préférée à l'équation 3.38, en raison de l'incertitude associée à la constante k'_1 . Les constantes de réaction directes et inverses permettent ensuite de définir les taux de réaction des réactions de précipitation et de dissolution de la calcite (Éq. 3.34), comme suit :

$$\begin{aligned} \hat{R}_1 &= k_1 \cdot \alpha_{H^+} - k_{-1} \cdot \alpha_{Ca^{2+}} \cdot \alpha_{HCO_3^-} \\ \hat{R}_2 &= k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3} - k_{-2} \cdot \alpha_{Ca^{2+}} \cdot \alpha_{HCO_3^-}^2 \\ \hat{R}_3 &= k_3 \cdot \alpha_{H_2O} - k_{-3} \cdot \alpha_{Ca^{2+}} \cdot \alpha_{HCO_3^-} \cdot \alpha_{OH^-} \end{aligned} \quad (3.39)$$

où l'activité de H_2O est égale à 1 mol/l. La somme de ces trois taux fournit le taux de réaction global de la calcite (\tilde{R}) :

$$\tilde{R} = \hat{R}_1 + \hat{R}_2 + \hat{R}_3 \quad (3.40)$$

L'équation 3.40 correspond à l'équation 2.5, présentée dans la revue de littérature. Les coefficients stoechiométriques des réactions de cinétique sont intégrés dans la matrice \mathbf{S}_k :

$$\mathbf{S}_k = \begin{matrix} & H^+ & HCO_3^- & Ca^{2+} & OH^- & H_2CO_3^0 & CO_3^{2-} & CaHCO_3^+ & CaCO_{3(aq)} & CaOH^+ \\ \begin{matrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (3.41)$$

où chaque ligne présente une réaction de cinétique et chaque colonne une espèce. Les chiffres positifs représentent les coefficients stoechiométriques des réactifs et les chiffres négatifs des produits. Les taux de réaction des réactions de cinétique (Éq. 3.39) sont ensuite intégrés dans le vecteur \mathbf{r}_k :

$$\mathbf{r}_k = \begin{matrix} & \hat{R}_j \\ \begin{matrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{matrix} & \begin{pmatrix} \hat{R}_1 \\ \hat{R}_2 \\ \hat{R}_3 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (3.42)$$

Finalemment, le terme $US'_k r_k$ de l'équation 3.12, permettant de simuler les réactions de cinétique, est intégré au modèle, sous la forme d'un terme de réaction :

$$US'_k r_k = \begin{pmatrix} \hat{R}_1 + \hat{R}_2 + \hat{R}_3 \\ -\hat{R}_1 - \hat{R}_2 - \hat{R}_3 \\ -\hat{R}_1 - \hat{R}_2 - \hat{R}_3 \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

avec

$$S'_k r_k = \begin{pmatrix} -\hat{R}_1 \\ \hat{R}_1 + 2\hat{R}_2 + \hat{R}_3 \\ \hat{R}_1 + \hat{R}_2 + \hat{R}_3 \\ \hat{R}_3 \\ -\hat{R}_2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

Le taux de réaction décrit par le modèle PWP, exprimé en kg de calcite par m² de calcite par seconde, est multiplié par le rapport entre l'aire de la calcite (A) et le volume de la solution (V), afin de l'exprimer en kg de calcite par m³ de solution par seconde. Dans le puits, A correspond à la surface cylindrique du forage additionnée à la surface des particules solides en solution. Une valeur de 100 mg/l pour le total des solides dissous et un rayon des particules de $5 \cdot 10^{-5}$ m sont utilisés. Dans la fracture, A correspond à la surface des deux plans et V au volume de la solution au sein de la fracture. Finalement, le rapport A/V dans l'aquifère est estimé en considérant 30 fractures de 0.003 m d'ouverture sur l'ensemble de l'aquifère. Les différents rapports A/V , ainsi que les paramètres géochimiques intégrés dans le modèle sont présentés dans le tableau 3.5.

Des valeurs de diffusion moléculaire ont été assignées aux fluides dans le puits, dans l'aquifère et dans la fracture. De manière générale, la diffusion moléculaire des espèces chimiques est de l'ordre de 10^{-9} m²/s (Fetter, 2008). Une valeur plus élevée a cependant été utilisée dans le puits ($1 \cdot 10^{-2}$ m²/s), afin de tenir compte de l'écoulement turbulent. Cette stratégie de simulation permet d'éviter l'utilisation de l'équation de Navier-Stokes, décrivant l'écoulement des fluides. Dans la fracture, la composante turbulente est plus faible que dans le puits en raison de sa faible ouverture, expliquant pourquoi une valeur intermédiaire entre 10^{-9} et 10^{-2} a été choisie. D'autre part, une dispersivité nulle a été assignée au puits. Selon Gelhar

et al. (1992), les dispersivités longitudinale et transversale pour un aquifère calcaire fracturé ayant une épaisseur moyenne de 30 m sont respectivement de 6.7 m et 0.67 m. Ces valeurs ont été intégrées au modèle développé, même si l'épaisseur de l'aquifère est plus importante. De plus, la dispersivité longitudinale au sein d'une fracture de 0.15 mm d'ouverture est de 0.1 m d'après Stafford *et al.* (1998), alors que la dispersivité transversale est nulle. Malgré une fracture de 3 mm d'ouverture, ces mêmes valeurs ont été utilisées dans ce travail, car dans la littérature des valeurs très différentes ont été trouvées pour des ouvertures de fracture relativement proches.

Tableau 3.5 Propriétés géochimiques du modèle développé

Propriété	Symbole	Unité	Valeur
Diffusion moléculaire de l'ion dans l'eau dans le puits	$D_{f,f}$	m ² /s	1.0e-2
Diffusion moléculaire de l'ion dans l'eau dans l'aquifère	$D_{f,a}$	m ² /s	1.0e-9
Diffusion moléculaire de l'ion dans l'eau dans la fracture	$D_{f,fr}$	m ² /s	1.0e-5
Dispersivité longitudinale dans le puits	$D_{l,f}$	m	0
Dispersivité transversale dans le puits	$D_{t,f}$	m	0
Dispersivité longitudinale dans l'aquifère	$D_{l,a}$	m	6.7
Dispersivité transversale dans l'aquifère	$D_{t,a}$	m	0.67
Dispersivité longitudinale dans la fracture	$D_{l,fr}$	m	0.1
Dispersivité transversale dans la fracture	$D_{t,fr}$	m	0
Rapport A/V du puits	A/V_w	1/m	74.9
Rapport A/V de l'aquifère	A/V_a	1/m	8000
Rapport A/V initial de la fracture	A/V_{fr}	1/m	400

Même si les trois concentrations totales sont utilisées dans le processus de modélisation, le modèle géochimique fournit la concentration des neuf espèces chimiques considérées, comme illustré à la Fig. 3.6 avec l'ion Ca^{2+} .

3.4.4 Synthèse du modèle géochimique

Cette synthèse vise à résumer l'approche adoptée pour simuler le transport réactif des espèces chimiques présentes dans la phase aqueuse du puits et de l'aquifère. Les équations précédemment présentées vont donc être illustrées à nouveau dans cette section, afin de faciliter la compréhension. La méthode utilisée permet de réduire le nombre d'inconnues des équations à résoudre, par diverses manipulations algébriques linéaires des coefficients stoechiométriques des réactions chimiques. Ces opérations permettent au final de coupler le transport des neuf espèces chimiques considérées aux six réactions à l'équilibre et aux trois réactions de cinétiques (voir Fig. 3.1).

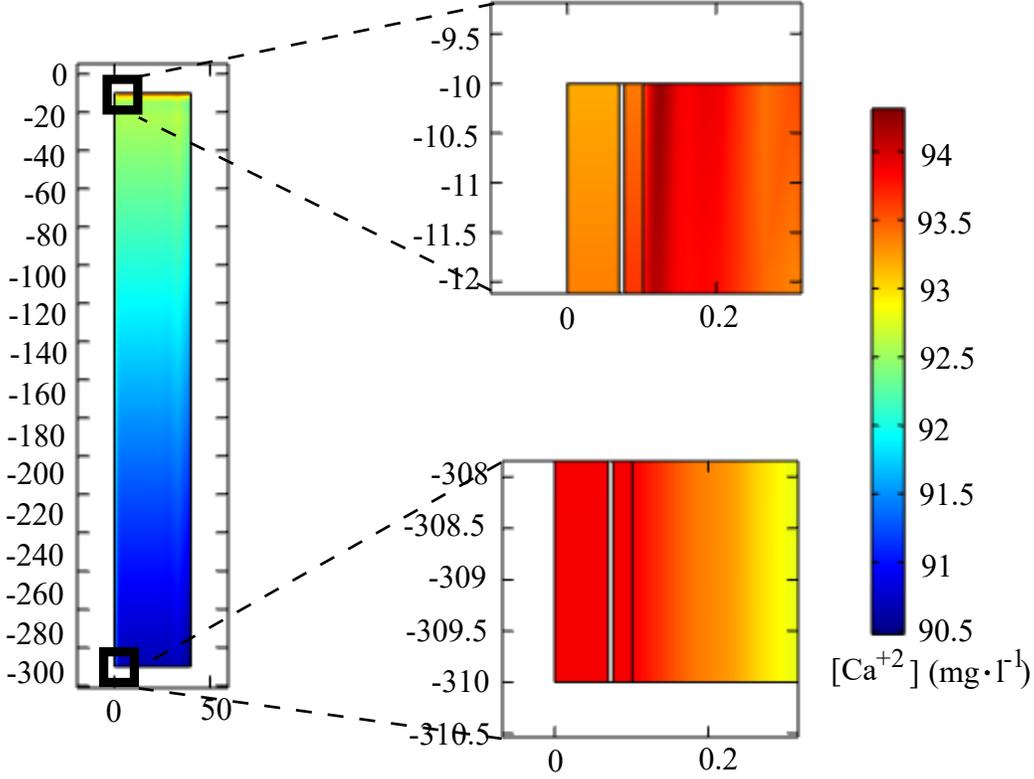


Figure 3.6 Illustration de la concentration en calcium ($[Ca^{2+}]$) sur l'ensemble du domaine

L'équation exprimant la variation de la concentration des espèces en fonction du temps, causée par les processus de transport, les réactions à l'équilibre et les réactions de cinétique, est la suivante :

$$\varphi \frac{\partial c}{\partial t} = (\nabla \cdot (D \nabla c) - \nabla \cdot (\vec{v}c))\varphi + \mathbf{S}'_e \mathbf{r}_e + \mathbf{S}'_k \mathbf{r}_k \quad (3.45)$$

La multiplication de cette équation par la matrice \mathbf{U} permet d'éliminer le terme \mathbf{r}_e (inconnu) et de prendre en considération les concentrations totales au lieu des concentrations de chacune des espèces, réduisant le nombre d'équations de transport à résoudre. L'équation 3.45 devient alors :

$$\varphi \frac{\partial \Gamma}{\partial t} = (\nabla \cdot (D \nabla \Gamma) - \nabla \cdot (\vec{v}\Gamma))\varphi + \mathbf{U} \mathbf{S}'_k \mathbf{r}_k \quad (3.46)$$

Pour simuler les réactions à l'équilibre et les coupler aux processus de transport, un système de neuf inconnues (une pour chaque concentration) et neuf équations est résolu. Il y a six réactions à l'équilibre, signifiant que six équations non-linéaires intégrant les constantes d'équilibre de ces réactions sont résolues, comme présenté ci-dessous :

$$\mathbf{S}_e \cdot \log \alpha - \log \mathbf{K}_{eq} = 0 \quad (3.47)$$

Pour compléter le système de neuf équations, trois équations linéaires intégrant les trois concentrations totales sont résolues :

$$\mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\Gamma} = 0 \quad (3.48)$$

Finalement, les réactions de cinétique, décrites par le terme $\mathbf{U}\mathbf{S}'_k\mathbf{r}_k$ dans l'équation 3.46, sont intégrées au modèle, sous la forme du terme de réaction suivant :

$$\mathbf{U}\mathbf{S}'_k\mathbf{r}_k = \begin{pmatrix} \hat{R}_1 + \hat{R}_2 + \hat{R}_3 \\ -\hat{R}_1 - \hat{R}_2 - \hat{R}_3 \\ -\hat{R}_1 - \hat{R}_2 - \hat{R}_3 \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

Cette approche hautement efficace permet d'obtenir la concentration des neuf espèces chimiques présentes dans la phase aqueuse du puits et de l'aquifère. D'autre part, en réduisant le nombre d'équation à résoudre, elle facilite les processus de simulation et réduit le temps de calcul. Ce dernier point est extrêmement important, en raison du nombre considérable de paramètres pris en considération dans le modèle.

3.5 Conditions aux frontières du modèle numérique

Les conditions aux frontières des modèles d'écoulement d'eau (en bleu), de transfert de chaleur (en rouge) et géochimique (en vert) sont illustrées à la Fig. 3.2 à la page 30. Les chiffres indiquent le type de condition frontière utilisé, avec 1 pour Dirichlet, 2 pour Neumann et 3 pour frontière ouverte. Étant donné que la chambre de sédimentation du puits n'est pas modélisée, les valeurs mesurées à la base de la partie externe du puits (entre le tube de prélèvement et la formation géologique) sont imposées comme conditions frontières à la base du tube de prélèvement (tuyau central de l'ouvrage). Les sections suivantes détaillent les conditions aux frontières pour chacun des modèles.

3.5.1 Modèle d'écoulement d'eau

Une charge hydraulique de 310 m est appliquée initialement sur l'ensemble du domaine, ainsi que sur la paroi latérale verticale située à 20 m de l'axe de symétrie. La vitesse du fluide ascendant, imposée à la base du tube de prélèvement, est donnée par :

$$v_o = \frac{\dot{V}}{A_o} \quad (3.50)$$

où \dot{V} est le débit de pompage (m^3/s) et A_o l'aire transversale du tube de prélèvement (m^2). D'autre part, la vitesse du fluide descendant (v_i), imposée au sommet de la partie externe du puits, est calculée par l'équation suivante :

$$v_i = \frac{\dot{V}(1 - \beta)}{A_i} \quad (3.51)$$

où β est un paramètre variant entre 0 et 1 (-), définissant le taux de saignée. Lorsque $\beta = 0$, l'ensemble de l'eau pompée est réinjecté dans le PCP, signifiant que la saignée n'est pas en opération. En revanche, si $\beta = 1$, la totalité de l'eau pompée est déchargée en dehors du système, abaissant le niveau statique dans le puits et générant un écoulement d'eau souterraine en direction du PCP. En d'autres mots, si $\beta \neq 0$, la saignée est active et un écoulement d'eau dans l'aquifère est simulé, permettant de renouveler une partie de l'eau du puits. A_i représente l'espace annulaire entre le tube de prélèvement et la paroi externe du forage (m^2). D'autre part, des valeurs négatives de v_i et v_o sont également choisies comme conditions aux frontières, respectivement à la base de la partie externe du puits et au sommet du tube de prélèvement. Les frontières restantes sont considérées comme imperméables.

3.5.2 Modèle de transfert de chaleur

La température initiale du domaine, ainsi que la température le long de la paroi latérale verticale ont été définies à l'aide du modèle de Lunardini (1981), permettant d'évaluer la variation saisonnière de la température du sol en fonction de la profondeur, comme suit :

$$T(z, t) = T_m + \frac{q_g \cdot z}{k_{eq}} - T_o \cdot e^{-z \cdot \frac{2\pi}{2\alpha_t P}} \cdot \cos\left(\omega(t - t_d) - z \cdot \frac{2\pi}{2\alpha_t P}\right) \quad (3.52)$$

où T_m est la température moyenne annuelle de l'air ($^\circ\text{C}$), q_g le flux de chaleur (W/m^2), z la profondeur sous la surface du sol (m), k_{eq} la conductivité thermique équivalente du sol ($\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$), T_o l'amplitude des variations saisonnières de T_m ($^\circ\text{C}$), α_t la diffusivité thermique du sol (m^2/s), P la période d'un cycle (s), ω la fréquence angulaire ($1/\text{s}$), t le temps (s) et t_d le décalage entre le 1^{er} janvier et la température la plus froide (s). Les paramètres intégrés dans le modèle de Lunardini (1981) sont illustrés dans le tableau 3.6.

Similairement aux travaux effectués par Nguyen *et al.* (2012, 2015b,c), l'échangeur de chaleur à plaque et la pompe à chaleur ne sont pas directement modélisés, mais leur contribution est prise en considération. La température de l'eau entrant dans l'échangeur de chaleur (*EWT* pour "heat pump's entering water temperature") est évaluée en intégrant la température le

Tableau 3.6 Paramètres intégrés dans le modèle de Lunardini (1981)

Paramètre	Symbole	Unité	Valeur
Température moyenne annuelle de l'air	T_m	°C	10
Flux de chaleur	q_g	W/m ²	$6 \cdot 10^{-3}$
Conductivité thermique équivalente du sol	k_{eq}	W/(m · K)	2.31
Amplitude des variations saisonnières de T_m	T_o	°C	15.08
Diffusivité thermique du sol	α_t	m ² /s	$9.77 \cdot 10^{-7}$
Période d'un cycle	P	s	$3.1536 \cdot 10^7$
Fréquence angulaire	ω	1/s	$2\pi \cdot P$
Décalage entre le 1 ^{er} janvier et la temp. la plus froide	t_d	s	$20.7 \cdot 24 \cdot 3600$

long de la surface du tube de prélèvement, comme illustré sur la Fig. 3.7. La température de l'eau quittant l'échangeur de chaleur (LWT pour "leaving water temperature") et entrant dans le puits au sommet de la partie externe est définie par :

$$LWT = EWT + \frac{\dot{Q}_g}{\dot{V} \cdot \rho C_p} \quad (3.53)$$

où \dot{Q}_g est la charge extraite ou transmise au sol (W) et ρC_p la capacité thermique volumique équivalente (J/(kg · K)). Le dernier terme de l'équation 3.53 correspond à la variation de la température induite par l'opération de la pompe à chaleur. En mode chauffage, EWT est supérieure à LWT , alors que l'inverse est observé en mode climatisation.

Étant donné que la base du puits n'est pas modélisée, la température évaluée à la base de la partie externe du puits est imposée comme condition frontière à la base du tube de prélèvement. D'autre part, un flux géothermique de 0.06 W/m² est défini à la base de l'aquifère. Finalement, le sommet et la base de l'aquifère sont considérés comme des frontières ouvertes.

3.5.3 Modèle géochimique

Les concentrations initiales, ainsi que les concentrations imposées sur la paroi verticale latérale sont à l'équilibre chimique et varient en fonction de la température. L'utilisation du modèle de Lunardini (1981), prenant en compte la variation de la température avec la profondeur, fait en sorte que les concentrations initiales varient également en fonction de z . Les concentrations à l'équilibre utilisées pour définir la solution initiale sont calculées par les équations suivantes :

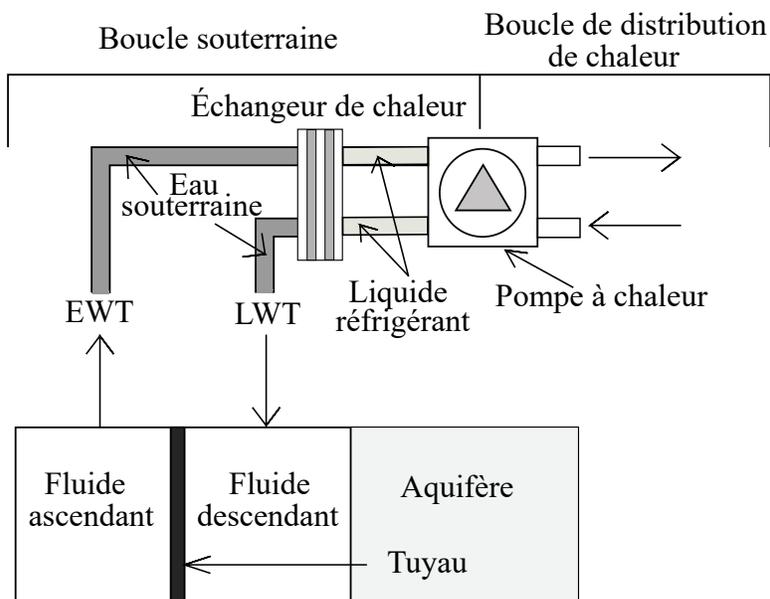


Figure 3.7 Illustration des variables EWT et LWT

$$\begin{aligned}
 c_{H^+} &= 10^{-pH} & c_{CO_3^{2-}} &= \frac{K_2 \cdot c_{HCO_3^-}}{c_{H^+}} \\
 c_{HCO_3^-} &= \frac{K_1 \cdot c_{H_2CO_3}}{c_{H^+}} & c_{CaHCO_3^+} &= \frac{c_{Ca^{2+}} \cdot c_{HCO_3^-}}{K_{CaHCO_3}} \\
 c_{Ca^{2+}} &= \frac{K_{sp}}{c_{CO_3^{2-}}} & c_{CaCO_3(aq)} &= \frac{c_{Ca^{2+}} \cdot c_{CO_3^{2-}}}{K_{CaCO_3(aq)}} \\
 c_{OH^-} &= \frac{K_w}{c_{H^+}} & c_{CaOH^+} &= \frac{K_{CaOH} \cdot c_{Ca^{2+}}}{c_{H^+}} \\
 c_{H_2CO_3} &= K_H \cdot PCO_2
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

où K_j sont les constantes d'équilibre des réactions élémentaires, calculées comme des fonctions de la température (T en kelvin) (Appelo et Postma, 1993) :

$$\begin{aligned}
\log(K_w) &= -283.9710 + 13323/T - 0.05069842 \cdot T + 102.24447 \cdot \log(T) - 1119669/T^2 \\
\log(K_{sp}) &= -171.9065 - 0.077993 \cdot T + 2839.319/T + 71.595 \cdot \log(T) \\
\log(K_H) &= 108.3865 + 0.01985076 \cdot T - 6919.53/T - 40.45154 \cdot \log(T) + 669365/T^2 \\
\log(K_1) &= -3.5631 \cdot 10^2 - 6.0904 \cdot 10^{-2} \cdot T + (2.1834 \cdot 10^4)/T + 1.2683 \cdot 10^2 \cdot \log(T) \\
&\quad - (1.6849 \cdot 10^6)/T^2 \\
\log(K_2) &= -1.0789 \cdot 10^2 - 3.2528 \cdot 10^{-2} \cdot T + (5.1518 \cdot 10^3)/T + 3.8926 \cdot 10^1 \cdot \log(T) \\
&\quad - (5.6371 \cdot 10^5)/T^2 \\
\log(K_{CaHCO_3}) &= -(1209.12 + 0.31294 \cdot T - 34765.05/T - 478.782 \cdot \log(T)) \\
\log(K_{CaCO_3(aq)}) &= -(-1228.732 - 0.2994444 \cdot T + 35512.75/T + 485.81 \cdot \log(T)) \\
\log(K_{CaOH}) &= -12.78
\end{aligned}
\tag{3.55}$$

En accord avec la Fig. 3.2, l'aquifère est considéré comme un système fermé à l'atmosphère, alors qu'une condition frontière de Neumann, intégrant le flux de CO_2 dépendant du gradient des P_{CO_2} entre l'eau et l'atmosphère, a été imposée au sommet du puits. Le sommet du puits est donc considéré comme ouvert à l'atmosphère, alors qu'à la base du PCP, le système est considéré comme fermé à l'atmosphère en raison de l'importante épaisseur de la colonne d'eau. Les espèces $CO_{2(aq)}$ et $H_2CO_3^o$ sont fréquemment regroupées en une seule espèce, à savoir H_2CO_3 . Cependant, étant donné que la concentration de $CO_{2(aq)}$ est 600 fois supérieure à $H_2CO_3^o$ (Appelo et Postma, 2005), la simplification suivante $H_2CO_3 = CO_{2(aq)}$ est faite. Ainsi, le flux de CO_2 simulé correspond au flux de H_2CO_3 .

Le flux de CO_2 se produisant au sommet d'un PCP a) dans la réalité et b) tel que conceptualisé par le modèle développé sont illustrés sur la Fig. 3.8. En réalité, une zone d'air est présente entre le sommet de la colonne d'eau et le sommet du puits. De ce fait, les échanges gazeux se produisent dans le PCP, à l'interface air-eau. Dans le modèle développé, le sommet de la colonne d'eau correspond au sommet du puits. Le dégazage du CO_2 est donc simulé au sommet du tube de prélèvement et de la partie externe du PCP.

Plutôt que d'intégrer un flux pour chacune des espèces, le flux des trois espèces totales (F_{Γ_j}), exprimé en $\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$, est imposé au sommet du puits. À la surface du tube de prélèvement, il est exprimé par :

$$\begin{aligned} F_{\Gamma_H} &= -\Gamma_H \cdot v_o - F_{CO_2} \\ F_{\Gamma_{HCO_3}} &= -\Gamma_{HCO_3} \cdot v_o - F_{CO_2} \\ F_{\Gamma_{Ca}} &= -\Gamma_{Ca} \cdot v_o \end{aligned} \quad (3.56)$$

alors qu'à la surface de la partie externe du puits, il est défini par les équations suivantes :

$$\begin{aligned} F_{\Gamma_H} &= \Gamma_H \cdot v_i - F_{CO_2} \\ F_{\Gamma_{HCO_3}} &= \Gamma_{HCO_3} \cdot v_i - F_{CO_2} \\ F_{\Gamma_{Ca}} &= \Gamma_{Ca} \cdot v_i \end{aligned} \quad (3.57)$$

où Γ_j est la concentration des espèces totales définie par l'équation 3.30 (kg/m^3) et F_{CO_2} le flux de CO_2 ($\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$). Ce dernier est positif lorsque le transfert se fait de l'eau en direction de l'atmosphère et négatif dans le cas opposé. Il est spécifié par Wanninkhof (1989) :

$$F_{CO_2} = k_{CO_2} \cdot K_H \cdot (\dot{P}_{CO_2} - \hat{P}_{CO_2}) \quad (3.58)$$

avec

$$k_{CO_2} = 0.39 \cdot u_{av}^2 \cdot (S_c/600)^{-0.5} \quad (3.59)$$

et

$$S_c = 1911.1 - 118.11 \cdot (T - 273.15) + 3.4527 \cdot (T - 273.15)^2 - 0.041320 \cdot (T - 273.15)^3 \quad (3.60)$$

où k_{CO_2} est la vitesse de transfert du CO_2 (m/s), K_H la constante de Henry ($\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{atm})$), \dot{P}_{CO_2} et \hat{P}_{CO_2} sont respectivement la pression partielle du CO_2 de l'eau souterraine (atm) et de l'atmosphère (atm), u_{av} la vitesse du vent (m/s), S_c le nombre de Schmidt du CO_2 (-) et T la température de l'eau (K). Une vitesse du vent faible (1 cm/s), ainsi qu'une P_{CO_2} représentative de l'atmosphère ($10^{-3.5}$ atm) ont été utilisées. La P_{CO_2} de l'eau souterraine est définie en fonction de la concentration de H_2CO_3 , fournie par le modèle. Il est important de spécifier que la concentration de H_2CO_3 n'est pas intégrée dans l'équation 3.30 définissant Γ_{Ca} . Ce point justifie le fait que le flux de CO_2 ne soit pas présent dans les équations 3.56 et 3.57 décrivant $F_{\Gamma_{Ca}}$.

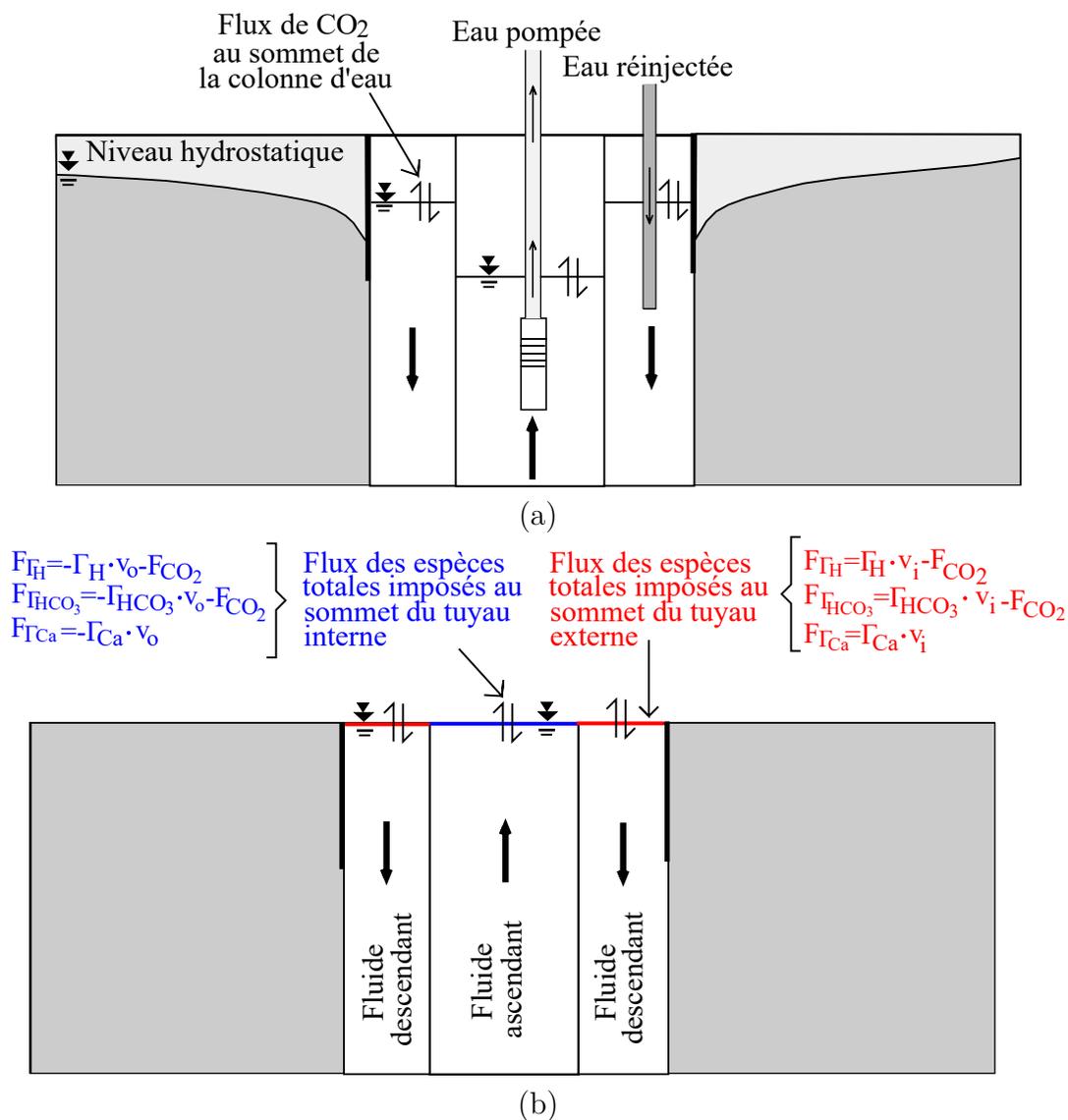


Figure 3.8 Illustration des échanges de CO_2 entre la colonne d'eau dans le puits et l'atmosphère (a) en réalité et (b) dans le modèle développé.

3.6 Hypothèses

D'un point de vue hydraulique, le modèle numérique développé est basé sur les trois hypothèses suivantes :

1. la réinjection de l'eau dans le PCP se fait de façon homogène au sommet de la partie externe et au même niveau que le niveau statique. En réalité, la pompe submersible est placée sous le niveau statique ;
2. l'eau de la saignée n'est pas réinjectée dans le modèle ; et

3. la conductivité hydraulique varie en fonction de la température.

D'autre part, les aspects géochimiques reposent sur les hypothèses suivantes :

1. la formation géologique est composée de calcite pure ;
2. le puits n'est pas parfaitement scellé à son sommet et subit des échanges gazeux avec l'atmosphère ;
3. l'eau souterraine est initialement à l'équilibre chimique ;
4. la calcite ne précipite pas sur les parois du puits ;
5. la précipitation et la dissolution de la calcite affectent la porosité et la perméabilité uniquement dans la fracture ;
6. une masse de calcite initiale est présente dans le puits sous forme de particules en suspension. Par conséquent, il est supposé qu'il n'y a pas de masse maximale de calcite pouvant être dissoute ; et
7. la précipitation et la dissolution de la calcite sont supposées uniformes et symétriques sur les deux plans de la fracture.

De plus, il est admis que les conditions THG ne varient pas entre la base de la partie externe du puits et la base du tube de prélèvement, justifiant le fait que la chambre de sédimentation du puits ne soit pas modélisée.

CHAPITRE 4 COMPARAISON AVEC UNE SOLUTION DE RÉFÉRENCE

L'approche présentée dans le chapitre 3 a été implémentée dans le logiciel Comsol Multiphysics (COMSOL., 2013), un environnement destiné à résoudre des problèmes couplés multiphysiques, par la méthode des éléments finis. Dans le but de valider numériquement la méthodologie utilisée, les concentrations obtenues par le modèle THG ont été comparées avec des concentrations de référence fournies par le logiciel PHREEQC (Parkhurst et Appelo, 1999), largement utilisé par la communauté scientifique. Étant donné que ce programme n'est pas adapté pour modéliser des géométries complexes, le modèle de PCP a été transformé à cet effet en une simple colonne, permettant d'obtenir des résultats comparables. Les sections suivantes visent à présenter les deux modèles utilisés dans la validation, les scénarios de comparaison, ainsi que les résultats obtenus.

4.1 Description des modèles en colonne

L'environnement modélisé représente une colonne de 0.1 m de hauteur et 0.05 m de rayon, remplie de sable de calcite pure, présentant une porosité de 0.25. La masse initiale de calcite est de 1.6 kg. Les pores saturés en permanence sont remplis d'une solution aqueuse circulant verticalement de haut en bas, tel qu'illustré à la Fig. 4.1. L'eau purgée n'est pas recirculée, signifiant qu'une solution, ayant la même signature chimique initiale tout au long de la simulation, entre dans le système par le sommet de la colonne. Les paramètres utilisés dans les deux modèles (Comsol Multiphysics et PHREEQC) sont présentés dans le tableau 4.1.

4.1.1 Modèle thermo-hydro-géochimique

La géométrie 2D axisymétrique du modèle Comsol Multiphysics utilisé pour la validation, ainsi que les conditions aux frontières des modèles d'écoulement d'eau, de transfert de chaleur et géochimique sont illustrées à la Fig. 4.2. Une entrée et une sortie d'eau sont simulées respectivement au sommet et à la base de la colonne, alors que la paroi latérale est imperméable. Une vitesse de Darcy permettant de purger six fois le volume d'eau présent dans la colonne en 2 000 secondes est utilisée, à savoir $7.36 \cdot 10^{-5}$ m/s. La température des deux solutions, c'est-à-dire la solution initialement présente dans la colonne et la solution injectée dans le système, est imposée. Finalement, la paroi latérale du modèle est considérée comme adiabatique.

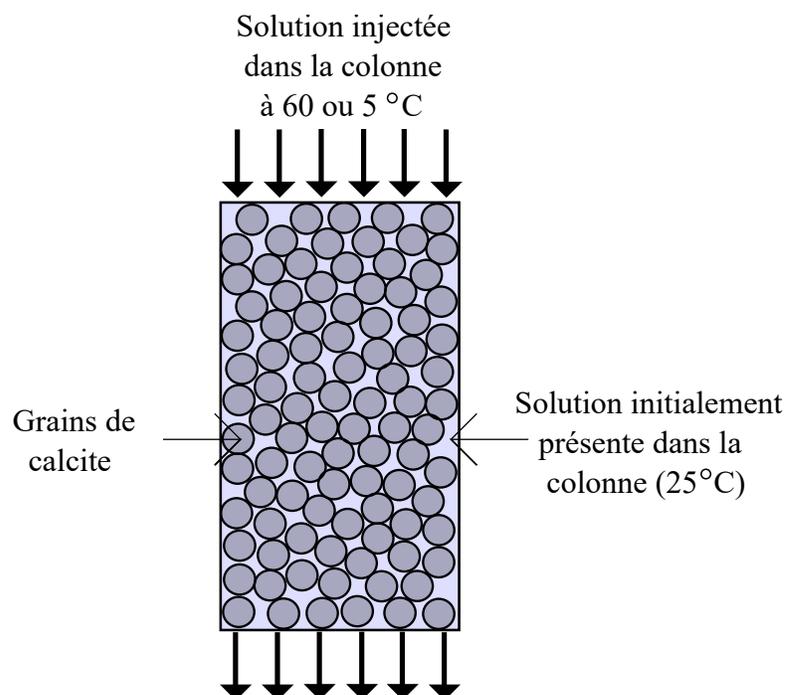


Figure 4.1 Schématisation du modèle en colonne utilisé pour la validation de la méthodologie.

Tableau 4.1 Paramètres intégrés dans les modèles Comsol Multiphysics et PHREEQC.

Paramètre	Unité	Valeur
Porosité	-	0.25
Diamètre des grains de sable	m	$2 \cdot 10^{-3}$
Rapport entre l'aire de la calcite et le volume de la solution	1/m	9 220.4
Vitesse de Darcy	m/s	$7.36 \cdot 10^{-5}$
Densité de l'eau	kg/m ³	1 000
Densité de la calcite	kg/m ³	2 700
Température de la solution initialement dans la colonne (scénario 1)	°C	25
Température de la solution entrant dans la colonne (scénario 1)	°C	60
Température de la solution initialement dans la colonne (scénario 2)	°C	25
Température de la solution entrant dans la colonne (scénario 2)	°C	5
Dispersivité	m	$1 \cdot 10^{-3}$
Coefficient de diffusion	m ² /s	$1 \cdot 10^{-9}$
pH de la solution initiale dans la colonne	-	7
pH de la solution entrant dans la colonne	-	7
Pression partielle de CO_2 de la solution initiale dans la colonne	atm	10^{-2}
Pression partielle de CO_2 de la solution entrant dans la colonne	atm	10^{-2}

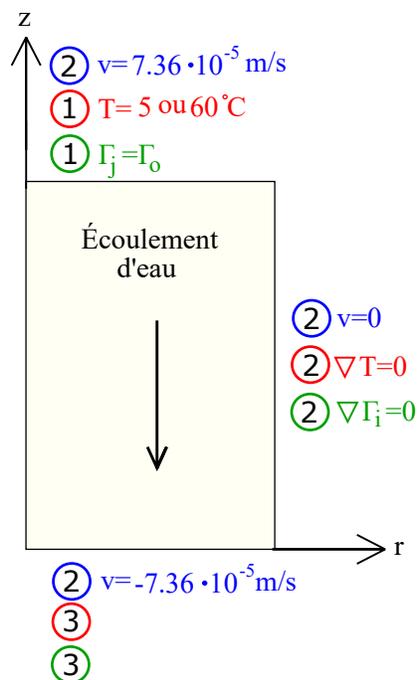


Figure 4.2 Géométrie du modèle THG en colonne et conditions aux frontières des modèles d'écoulement d'eau en bleu, de transfert de chaleur en rouge et géochimique en vert. Les chiffres illustrent le type de condition frontière (1) Dirichlet, 2) Neumann et 3) frontière ouverte).

Les concentrations imposées au sommet de la colonne, ainsi que dans le milieu poreux initial sont calculées à l'aide des équations présentées en 3.54. Les constantes d'équilibre des réactions élémentaires prises en compte dans ces équations permettent d'assurer l'état d'équilibre des solutions initiales, ainsi que la variation des concentrations chimiques en fonction de la température, par l'intermédiaire des équations 3.55.

4.1.2 Modèle de référence

Le logiciel PHREEQC est couramment utilisé pour simuler le transport réactif multi-espèces 1D dans l'eau. L'utilisation de mots clés dans le code source permet d'accéder à une base de données, intégrant notamment les réactions chimiques, les taux de réaction, les constantes de réaction, ainsi que les constantes d'équilibre. Le logiciel offre une grande liberté, puisque la base de données peut être modifiée au gré de l'utilisateur. Pour la calcite par exemple, le taux de réaction intégré dans le logiciel correspond à l'approximation du taux proposé par le modèle PWP, n'intégrant pas les constantes de réaction inverses (Éq. 2.9). Dans ce travail, l'équation 3.40, correspondant au taux de réaction du modèle PWP, a été ajoutée au code

source, permettant d'obtenir des résultats comparables avec le modèle Comsol Multiphysics. Un extrait du code utilisé dans PHREEQC est présenté à l'annexe A.

Transfert de chaleur

L'équation du transfert de chaleur utilisée par PHREEQC est la suivante (Parkhurst et Appelo, 1999) :

$$(\varphi\rho_w C_{m,w})\frac{\partial T}{\partial t} + (1 - \varphi)\rho_s C_{m,s}\frac{\partial T}{\partial t} = -(\varphi\rho_w C_{m,w})v\frac{\partial T}{\partial x} + k_{eq}\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (4.1)$$

où T est la température ($^{\circ}\text{C}$), φ la porosité (-), ρ la densité (kg/m^3), $C_{m,j}$ la capacité thermique massique ($\text{kJ}/(^{\circ}\text{C} \cdot \text{kg})$) et k_{eq} est la conductivité thermique équivalente, comprenant un terme pour la dispersion par advection et un terme pour la conductivité thermique de l'aquifère ($\text{kJ}/(^{\circ}\text{C} \cdot \text{m} \cdot \text{s})$). Les indices w et s désignent respectivement l'eau et la phase solide. En divisant l'équation 4.1 par $(\varphi\rho_w C_{m,w})$, on obtient :

$$R_T\frac{\partial T}{\partial t} = -v\frac{\partial T}{\partial x} + \kappa_L\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (4.2)$$

avec

$$R_T = 1 + \frac{(1 - \varphi)\rho_s C_{m,s}}{\varphi\rho_w C_{m,w}} \quad (4.3)$$

et

$$\kappa_L = \frac{k_{eq}}{\varphi\rho_w C_{m,w}} \quad (4.4)$$

où R_T est un facteur de retard permettant de prendre en considération la capacité thermique de la matrice rocheuse (-) et κ_L le coefficient de dispersion thermique (m^2/s). Ce coefficient, comprenant un premier terme pour la diffusion et un deuxième terme pour la dispersion engendrée par advection, est exprimé par : $\kappa_L = \kappa_e + \beta_L v$, avec κ_e correspondant au coefficient de diffusion thermique et β_L à la dispersivité thermique (m). κ_e est défini par :

$$\kappa_e = \frac{k_a}{\varphi\rho_w C_{m,w}} \quad (4.5)$$

où k_a est la conductivité thermique de la matrice rocheuse, incluant l'eau et la phase solide ($\text{kJ}/(^{\circ}\text{C} \cdot \text{m} \cdot \text{s})$). Selon le guide d'utilisation de PHREEQC (Parkhurst et Appelo, 1999), la valeur de κ_e doit être 1 000 à 1 500 fois supérieure au coefficient de diffusion aqueux ou

proche de $1 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$. Dans le code source, les valeurs de R_T et κ_e doivent être spécifiées.

Dans ce travail, le facteur de retard et κ_e valent respectivement :

$$R_T = 1 + \frac{(1 - 0.25) \cdot 2700 \cdot 0.8}{0.25 \cdot 1000 \cdot 4.2} = 2.54 \quad (4.6)$$

$$\kappa_e = \frac{0.00175}{0.25 \cdot 1000 \cdot 4.2} = 1.66 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s} \quad (4.7)$$

avec

$$k_a = \prod_{j=1}^n k_j^{\varphi_j} = 0.0025^{0.75} \cdot 0.0006^{0.25} = 0.00175 \text{ kJ}/(\text{s} \cdot \text{m} \cdot ^\circ \text{C}) \quad (4.8)$$

Transport advectif, dispersif et diffusif

Le logiciel PHREEQC considère l'équation suivante pour le transport advectif et dispersif (Parkhurst et Appelo, 1999) :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial x} + D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{\partial q}{\partial t} \quad (4.9)$$

avec

$$D_L = D_e + D_l \cdot v \quad (4.10)$$

où c est la concentration (mol/ kg d'eau), t le temps (s), v la vitesse linéaire (m/s), x la distance (m), D_L le coefficient de dispersion hydrodynamique longitudinale (m^2/s), q la concentration dans la phase solide (mol/kg d'eau dans les pores), D_e le coefficient de diffusion effectif (-) et D_l la dispersivité longitudinale (m). Le terme $-v \frac{\partial c}{\partial x}$ représente le transport advectif, le terme $D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ le transport dispersif et finalement le terme $\frac{\partial q}{\partial t}$ la variation de la concentration dans la phase solide, en réponse aux réactions chimiques.

Dans l'équation 4.9, le transport est résolu par la méthode des différences finies. D'autre part, le terme exprimant la variation des concentrations, correspondant à la somme des taux de réaction des réactions de cinétique et d'équilibre, est calculé séparément des termes de transport. À chaque pas de temps, le transport advectif est en premier lieu calculé, suivi des deux types de réaction chimique, puis du transport dispersif (Parkhurst et Appelo, 1999). À la suite de ces trois étapes, les réactions chimiques sont à nouveau résolues. Les réactions sont donc calculées avant les processus advectifs, puis après les processus dispersifs. Ordinairement,

rement, les logiciels de transport hydrogéochimiques calculent les réactions chimiques après les processus advectifs et dispersifs (Yeh et Tripathi, 1989). Cette approche réduit la dispersion numérique, ainsi que la nécessité d'itérer entre la chimie et le transport. Cependant, les avantages de la méthode utilisée par PHREEQC sont la précision numérique, ainsi que la stabilité obtenue en ajustant le pas de temps à la taille des cellules pour chaque partie de l'équation 4.9. La dispersion numérique est minimisée par la relation suivante (Parkhurst et Appelo, 1999) :

$$(\Delta t)_A = \frac{\Delta x}{v} \quad (4.11)$$

où $(\Delta t)_A$ est le pas de temps pour le transport advectif (s) et Δx la taille des cellules (m). D'autre part, les instabilités numériques sont éliminées par la contrainte suivante :

$$(\Delta t)_D \leq \frac{(\Delta x)^2}{3D_L} \quad (4.12)$$

où $(\Delta t)_D$ est le pas de temps pour le transport dispersif et diffusif (s). Les deux conditions des équations 4.11 et 4.12 sont respectivement la condition de Courant pour le transport advectif et le critère de Von Neumann pour le transport dispersif (Parkhurst et Appelo, 1999). Le nombre de Courant est défini par $Courant = (v \cdot \Delta t)/\Delta x$. La dispersion numérique est très souvent négligeable quand $\Delta x \leq \alpha_L$, car le transport dispersif est égal ou supérieur au transport advectif. Dans l'exemple présenté, $\Delta x = \alpha_L = 0.001$ m.

Dans ce travail, 100 cellules de 0.001 m de hauteur sont utilisées. Le transport advectif est simulé en transférant la solution contenue dans la cellule n dans la cellule $n+1$, à chaque pas de temps. D'autre part, le transport diffusif est pris en compte en exécutant un certain nombre d'étapes durant lesquelles, la solution localisée à la cellule n se mélange à la solution située dans les cellules voisines ($n+1$ et $n-1$). Dans les simulations réalisées, 600 passages d'une cellule à l'autre sont effectués sur une période de 2 000 secondes, signifiant que le volume contenu dans les pores est purgé six fois (600 passages/100 cellules=6 volumes purgés). Le pas de temps, correspondant au temps divisé par le nombre de passages d'une cellule à l'autre, est par conséquent de 3.33 secondes (2 000 s/600 passages=3.33 s). Dans le modèle Comsol, un pas de temps de 1 s a été utilisé.

Conditions aux frontières et solutions initiales

Au sommet de la colonne, une condition frontière de Dirichlet, spécifiant la concentration des espèces, est imposée ($C(x_{end}, t) = C_0$), alors qu'une condition de type Neumann, décrivant

le flux des espèces, est assignée à la base de la colonne ($C(x_{end}, t) = C_0 + \frac{D_L}{v} \cdot \frac{\partial C(x_{end}, t)}{\partial x}$). La composition chimique des deux solutions initiales, à savoir la solution injectée dans la colonne et celle initialement présente dans le milieu poreux, est définie en indiquant dans le code source la température, le pH, la P_{CO_2} et la concentration en Ca^{2+} .

4.2 Scénarios de comparaison

Des simulations de 2 000 secondes, au cours desquelles le volume d'eau compris dans la colonne est purgé six fois, sont réalisées. Deux scénarios ont été choisis pour effectuer la validation numérique de la méthodologie appliquée dans le développement du modèle THG. Dans les deux simulations, la solution initialement présente dans la colonne a une température de 25 °C, alors que l'eau entre dans le système à une température de 60 °C dans le premier cas et à 5 °C dans la deuxième simulation. Ainsi, étant donné que les concentrations imposées varient en fonction de la température, la composition chimique de la solution initialement présente dans la colonne est identique dans les deux scénarios, alors que la signature chimique de la solution injectée dans la colonne est différente dans les deux cas.

Ces deux scénarios permettent de valider que le couplage entre le transport advectif, dispersif et diffusif des espèces dissoutes, le transfert de chaleur par advection et conduction, ainsi que les réactions chimiques est correctement effectué dans le modèle THG développé dans cette thèse. Cette étude ne correspond en aucun cas à une validation du modèle de PCP, mais bien à une validation de la méthodologie appliquée. En raison des importantes variations de température se produisant au sein du puits, il est essentiel d'illustrer un cas présentant une baisse de la température et un cas exprimant une augmentation de la température. Ainsi, cette validation permet de s'assurer que l'impact des fluctuations de la température sur les constantes de réaction et les constantes d'équilibre est adéquatement simulé.

4.3 Résultats de la validation numérique

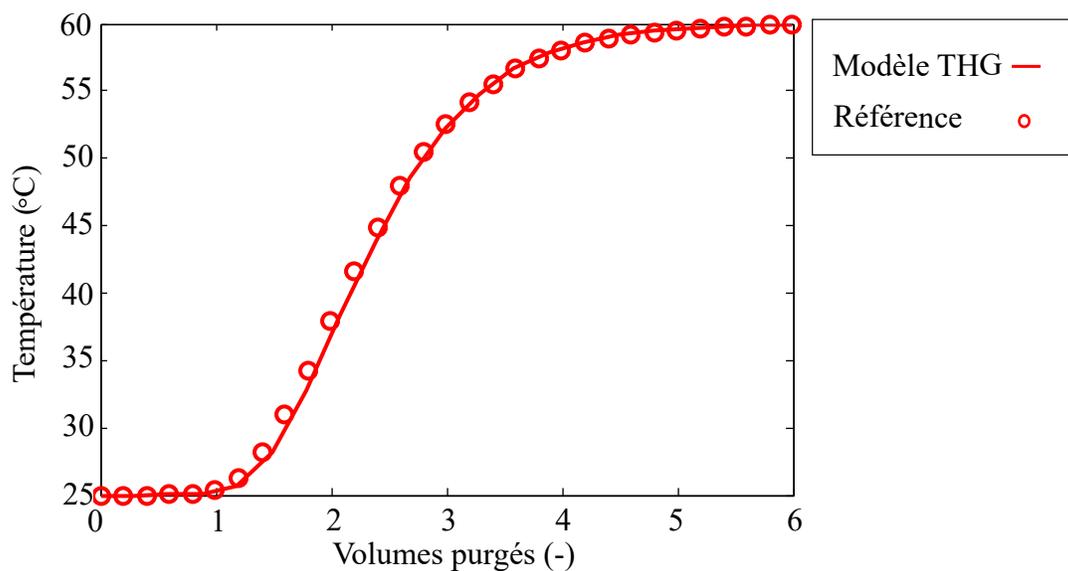
Les résultats de la validation sont illustrés par les Fig. 4.3 et 4.4, présentant respectivement l'évolution de la température et de la concentration des espèces à la base de la colonne, en fonction du volume des pores purgés. Les courbes obtenues démontrent une très bonne corrélation entre les deux modèles (Comsol Multiphysics et PHREEQC), avec une erreur relative moyenne inférieure à 1% pour les deux cas. Cette erreur s'explique par la discrétisation spatiale et temporelle plus fine dans Comsol Multiphysics par rapport au logiciel de référence.

Au début des simulations, la température à la base de la colonne est de 25 °C pour les deux scénarios, correspondant à la température initiale du milieu poreux (Fig. 4.3). Au fur et à mesure que la solution se draine, l'eau purgée subit une augmentation de température dans le premier cas et une diminution dans le deuxième cas. La température commence à varier lorsque la solution injectée au sommet de la colonne a atteint la base du système, signifiant que le volume contenu dans les pores a été purgé une fois sur six. Le temps nécessaire pour que l'eau purgée atteigne la température imposée au sommet de la colonne, à savoir 60 °C ou 5 °C, est de 2 000 secondes, correspondant à six volumes d'eau purgés. Ce délai est expliqué par la chaleur emmagasinée par les grains de calcite, initialement à 25 °C.

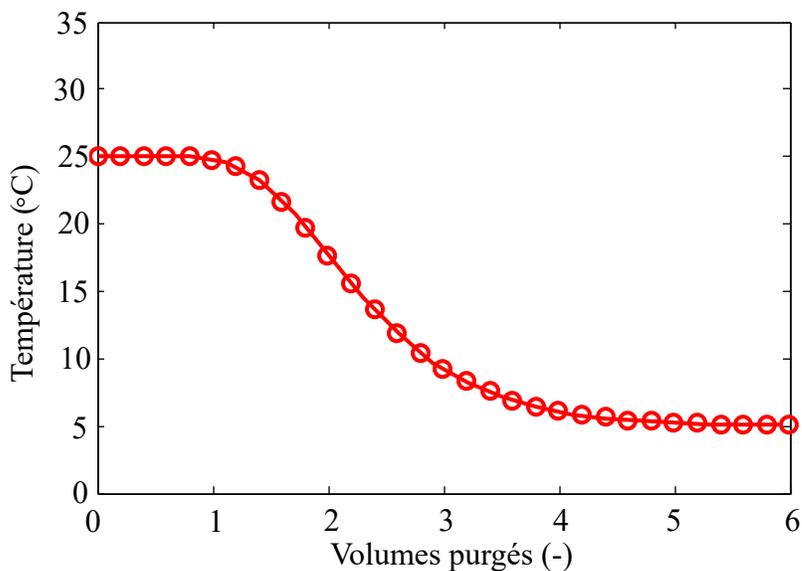
Les changements de concentration illustrés à la Fig. 4.4 sont liés aux fluctuations de la température. Par conséquent, au début des simulations, les concentrations sont à l'équilibre chimique, signifiant qu'elles sont constantes en fonction du temps. Après un volume d'eau purgé, l'augmentation ou la diminution de la température ont pour effet de perturber la signature chimique de l'eau, se traduisant par une variation des concentrations. Une différence de six ordres de grandeur est observée entre la concentration en Ca^{2+} et la concentration en H^+ . L'évolution des concentrations observée dans le premier scénario suit exactement la tendance inverse dans le deuxième cas, en lien avec les températures mesurées. À la fin des simulations, la température de l'eau purgée se stabilise, engendrant à nouveau un état d'équilibre chimique.

Une augmentation de température abaisse la solubilité de la calcite, favorisant sa précipitation, alors qu'une diminution de la température favorise la dissolution. Par conséquent, selon les réactions de cinétique, la concentration en calcium est augmentée lorsque la température diminue et abaissée dans le cas inverse, tel qu'illustré à la Fig. 4.4. Cependant, selon la cinquième réaction de cinétique ($Ca^{2+} + CO_3^{2-} \rightleftharpoons CaCO_{3(aq)}$), les espèces Ca^{2+} et $CaCO_{3(aq)}$ devraient suivre une tendance inverse, ce qui n'est pas le cas avec les résultats obtenus, puisque le $CaCO_{3(aq)}$ baisse lors de l'arrivée du front chaud et augmente lors de l'arrivée du front froid. Ce comportement est expliqué par le fait que la signature chimique de l'eau résulte des interactions entre les réactions à l'équilibre et les réactions de cinétique. Cet aspect est discuté en détail à la section 5.4. Le sens des réactions est influencé par plusieurs paramètres, dont notamment une variation de la température et/ou de la concentration des espèces. Une élévation de la température augmente la constante d'équilibre $K_{CaCO_{3(aq)}}$, favorisant la réaction directe (de gauche à droite) de la cinquième réaction à l'équilibre, diminuant les concentrations en Ca^{2+} et CO_3^{2-} et augmentant la concentration en $CaCO_{3(aq)}$ (voir section 5.4). Cependant, dans le cas illustré à la Fig. 4.4 (a), l'évolution des concen-

trations en CO_3^{2-} et $CaCO_{3(aq)}$ démontre que la réaction se déroule dans le sens inverse. Ce comportement est expliqué par le fait que la diminution de la concentration en calcium engendrée par l'augmentation de la température force la cinquième réaction à l'équilibre à s'effectuer de droite à gauche. Finalement, le comportement inverse est observé lorsque la température diminue.



(a)



(b)

Figure 4.3 Évolution de la température à la base de la colonne en fonction du volume des pores purgés, lorsque la température de la solution injectée est de (a) 60 °C et (b) 5 °C. La température initiale est de 25 °C dans les deux cas.

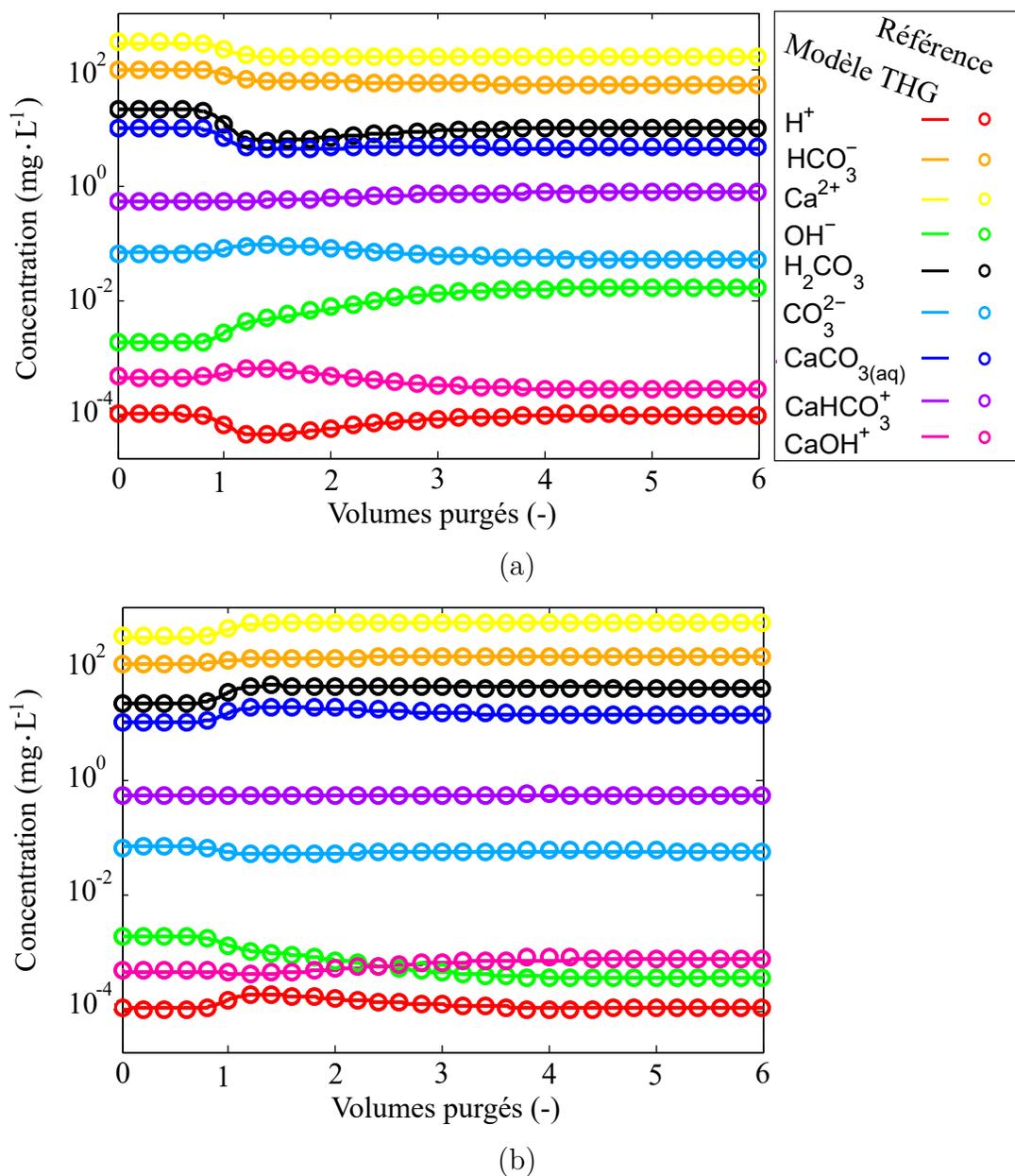


Figure 4.4 Évolution de la concentration des espèces à la base de la colonne en fonction du volume des pores purgés, lorsque la température de la solution injectée est de (a) 60 °C et (b) 5 °C. La température initiale est de 25 °C.

4.4 Synthèse

L'approche présentée au sein de ce chapitre a été validée en comparant les températures et les concentrations obtenues par le modèle THG développé dans Comsol Multiphysics avec des valeurs de référence fournies par le logiciel PHREEQC. La très bonne corrélation entre les

deux modèles permet d'assumer que le couplage entre les processus thermiques, hydrauliques et géochimiques est correctement réalisé dans ce travail. Cette étape est nécessaire pour s'assurer de la fiabilité du modèle développé, avant de procéder à l'étude du comportement THG d'un PCP et de l'aquifère environnement.

CHAPITRE 5 ÉVOLUTION THERMO-HYDRO-GÉOCHIMIQUE D'UN PUIITS À COLONNE PERMANENTE

L'approche présentée au chapitre 3 a été implémentée dans le logiciel Comsol Multiphysics (COMSOL., 2013), dans le but de reproduire numériquement l'opération d'un PCP. Une analyse détaillée des résultats obtenus permet d'identifier les comportements hydrogéologique, thermique et géochimique du puits. Subséquemment, les mécanismes conduisant à la précipitation et à la dissolution de la calcite au sein du tube de prélèvement, ainsi que dans la partie externe du puits sont mis en évidence. Le modèle utilisé dans ce chapitre a été simplifié au maximum, dans le but de présenter un cas de référence, permettant de comprendre les processus THG se produisant au sein d'un PCP. Cet exemple illustre un puits parfaitement scellé et un milieu poreux homogène équivalent. Les simulations se complexifient au fil des chapitres, dans le but d'identifier l'impact de la saignée et du dégazage du CO_2 au sommet du puits. Dans ce présent chapitre, l'impact hydraulique de la saignée est présenté. Cependant, l'impact thermique et géochimique de la saignée est discuté en détail dans le chapitre suivant.

5.1 Paramètres d'entrée et conditions frontières

Le modèle utilisé ici est légèrement différent de celui présenté au chapitre 3, puisque le PCP exclut les échanges gazeux avec l'atmosphère et l'aquifère fracturé est remplacé par un milieu poreux équivalent. Cette opération permet de mettre l'emphasis sur le lien entre les fluctuations thermiques au sein du puits et la variation du taux de réaction de la calcite. Les paramètres pouvant affecter le comportement du système sont ainsi limités.

La géométrie du modèle, ainsi que les conditions aux frontières sont présentées à la Fig. 5.1. Seules les conditions frontières imposées au sommet du PCP diffèrent de celles présentées à la Fig. 3.2, décrivant un puits soumis aux échanges gazeux. Pour modéliser l'ouvrage comme un système fermé à l'atmosphère, les concentrations totales évaluées à la sortie du puits (sommet du tube de prélèvement, tuyau placé au centre de l'ouvrage) sont imposées comme conditions frontières à l'entrée du puits (sommet de la partie externe du PCP, soit entre le tube de prélèvement et la formation géologique). Une variation des concentrations est toutefois observée entre l'entrée et la sortie du puits, en raison du changement de température induit par l'opération de la pompe à chaleur.

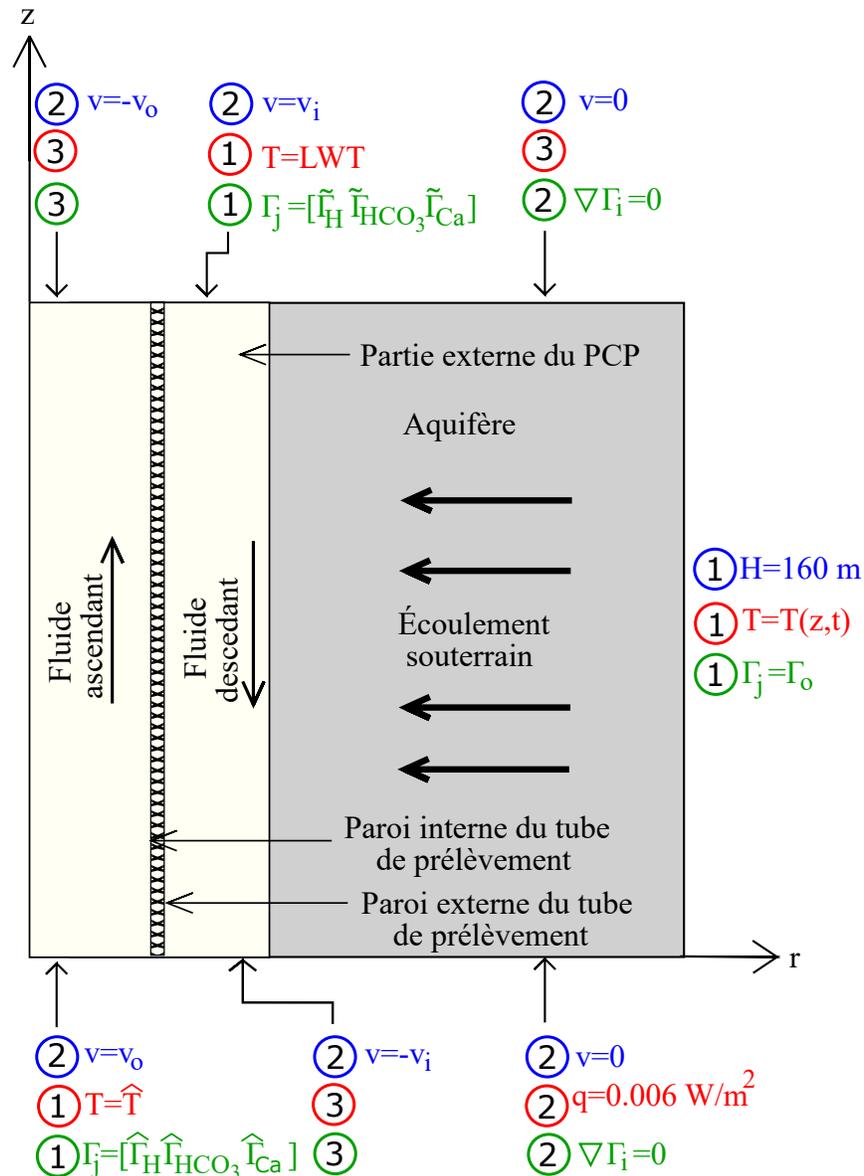


Figure 5.1 Géométrie du modèle présentant un PCP parfaitement scellé et un milieu poreux équivalent et conditions aux frontières pour les modèles d'écoulement d'eau en bleu, de transfert de chaleur en rouge et géochimique en vert. Les chiffres illustrent le type de condition limite (1 pour Dirichlet, 2 pour Neumann et 3 pour frontière ouverte).

Les dimensions du puits et de l'aquifère sont présentées dans le tableau 5.1. Les paramètres hydrogéologique, thermique et géochimique assignés à cette simulation correspondent à ceux présentés dans les tableaux 3.2, 3.3 et 3.5, à l'exception des variables associées à la fracture, non considérées pour cet aquifère et des paramètres illustrés dans le tableau 5.2. Ces derniers sont modifiés pour cet exemple. Le rapport A/V (aire de la calcite sur le volume de la solution) de l'aquifère fait notamment partie des paramètres modifiés pour ce cas. Ici, ce

rapport est défini en supposant un milieu poreux équivalent, composé de grains de calcite parfaitement sphériques, possédant un rayon de $2 \cdot 10^{-3}$ m.

Tableau 5.1 Paramètres géométriques du modèle THG présentant un PCP parfaitement scellé et un milieu poreux équivalent.

Propriété	Symbole	Unité	Valeur
Rayon interne du tuyau	r_{pi}	m	0.038
Rayon externe du tuyau	r_{pe}	m	0.045
Rayon du PCP	r_b	m	0.076
Longueur du PCP	L_b	m	150
Épaisseur de l'aquifère	L_a	m	150
Rayon de l'aquifère	r_a	m	40

Tableau 5.2 Paramètres modifiés par rapport au modèle THG présenté au chapitre 3.

Propriété	Symbole	Unité	Valeur
Conductivité hydraulique de l'aquifère	K_a	m/s	1.0e-6
Capacité thermique volumique du tuyau	$C_{s,p}$	$\text{kJ}/(\text{m}^3\text{K})$	1200
Capacité thermique volumique de l'aquifère	$C_{s,a}$	$\text{kJ}/(\text{m}^3\text{K})$	2500
Débit de pompage	\dot{V}	l/min	151
Rapport A/V de l'aquifère	A/V_a	1/m	1.35e4

La simulation débute le 1^{er} janvier et couvre une période de 365 jours. Les charges hebdomadaires de chauffage et de climatisation utilisées dans cet exemple sont illustrées à la Fig. 5.2. Les valeurs positives décrivent l'injection de chaleur au sein du puits, lorsque ce dernier opère en mode climatisation, alors que les valeurs négatives désignent l'extraction de chaleur en mode chauffage. De plus, la simulation intègre le taux de saignée (β) hebdomadaire présenté à la Fig. 5.3. Pour rappel, lorsque $\beta \neq 0$, la saignée est active (une partie de l'eau pompée est réinjectée dans un puits d'injection) et un écoulement d'eau souterraine en direction du puits est engendré. Par contre, si $\beta = 0$, la saignée n'est pas en opération et la totalité de l'eau pompée est réinjectée dans le PCP. La plage utilisée correspond au taux typiquement appliqué lors de l'opération d'un PCP. La saignée est active durant les périodes de fortes demandes énergétiques, afin de maintenir la température du puits entre 5 et 45 °C, correspondant à la gamme de température d'opération d'une pompe à chaleur.

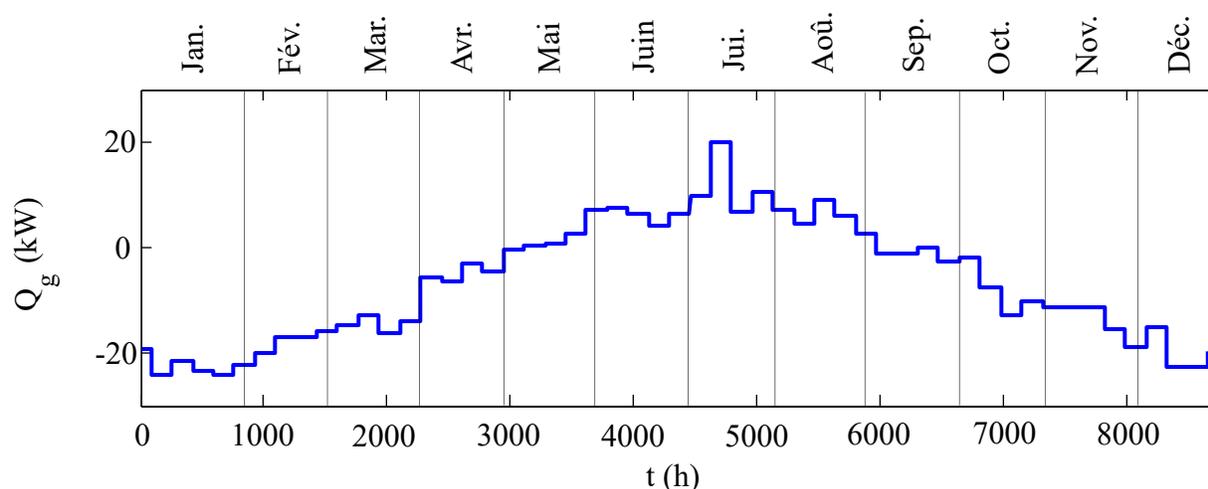


Figure 5.2 Charges au sol de chauffage (valeur négative) et de climatisation (valeur positive) hebdomadaires utilisées dans la simulation décrivant un PCP fermé à l'atmosphère, installé dans un milieu poreux équivalent.

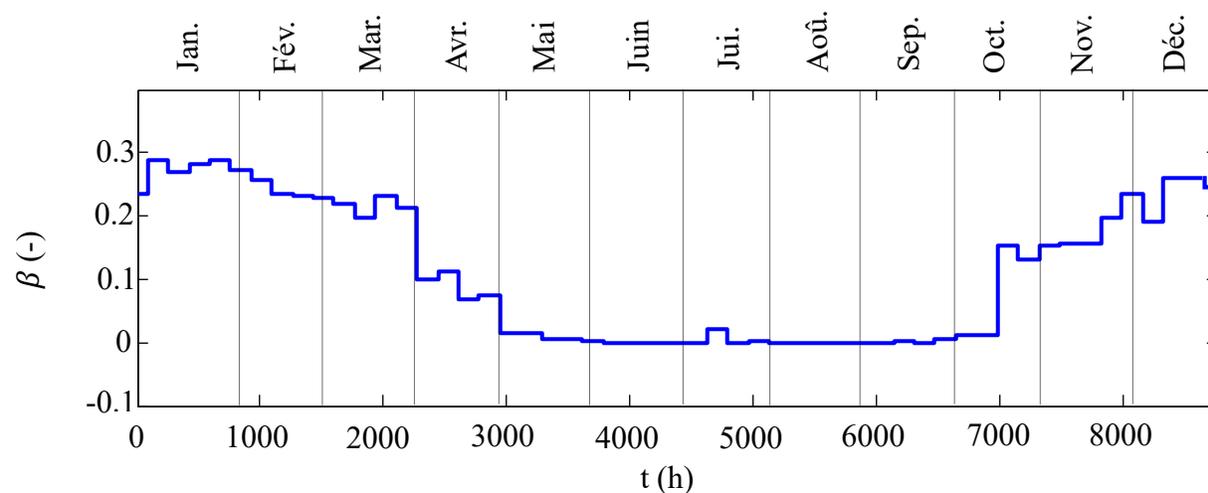


Figure 5.3 Taux de saignée considéré dans la simulation décrivant un PCP fermé à l'atmosphère, installé dans un milieu poreux équivalent. La saignée est active lorsque $\beta \neq 0$.

Les concentrations initiales des espèces dissoutes présentes dans la phase aqueuse du puits et de l'aquifère environnant sont à l'équilibre chimique. Elles sont calculées à l'aide des équations présentées en 3.54, intégrant les constantes d'équilibre des réactions élémentaires. Ces constantes sont dépendantes de la température, signifiant que les concentrations initiales varient en fonction de la température et conséquemment en fonction de la profondeur. La température initiale au sein de l'aquifère varie entre 10 et 10.8 °C. Un pH de 7 et une P_{CO_2} de $10^{-1.39}$ atm, correspondant à des valeurs typiques pour les eaux souterraines, sont utilisées

pour spécifier la signature chimique initiale de l'eau souterraine. Le tableau 5.3 présente les concentrations initiales des espèces chimiques pour une température de 10 °C, correspondant à la température approximative des eaux souterraines au Québec. Dans le modèle développé, ces valeurs sont légèrement différentes, puisque la température initiale n'est pas uniforme sur le domaine de simulation et varie verticalement sous l'effet du gradient géothermique. Finalement, dans l'ensemble des cas présentés dans cette thèse, la signature chimique initiale de l'eau souterraine est définie par les équations décrites en 3.54, avec les mêmes valeurs de pH et de P_{CO_2} .

Tableau 5.3 Composition initiale de l'eau souterraine pour une température de 10 °C, un pH de 7 et une P_{CO_2} de $10^{-1.39}$ atm.

Espèce	Concentration (mg/L)
H^+	1.0e-4
HCO_3^-	452.75
Ca^{2+}	64.93
OH^-	4.98e-4
H_2CO_3	135.83
CO_3^{2-}	0.14
$CaHCO_3^-$	11.22
$CaCO_3(aq)$	0.53
$CaOH^+$	1.53e-4

5.2 Évolution hydrogéologique

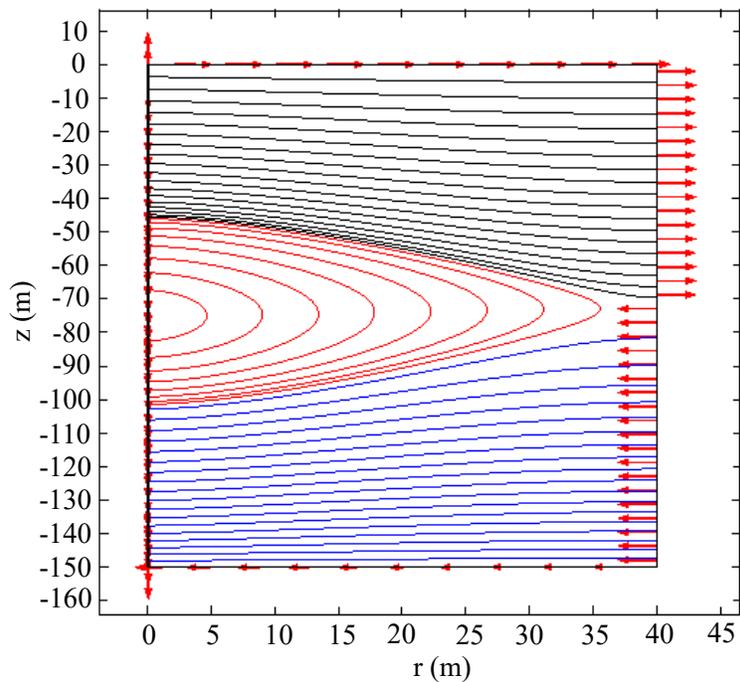
En raison du fort lien hydraulique entre le puits et l'aquifère et de la très forte influence du flux hydraulique sur les concentrations, cette section présente le comportement hydrogéologique des deux domaines, malgré le fait que ce chapitre soit dédié aux processus THG au sein du PCP. La vitesse d'écoulement, ainsi que la direction des lignes de courant au sein de la matrice géologique sont fortement influencées par le débit de réinjection au sein du PCP. Une comparaison des comportements hydrogéologiques avec et sans saignée est donc illustrée. Les journées du 20 juillet ($\beta = 0$) et du 15 décembre ($\beta = 0.26$) ont été retenues pour exposer ces deux situations.

La Fig. 5.4 (a) illustre les lignes de courant observées dans l'aquifère le 20 juillet, lorsque la saignée n'est pas en fonction. Les lignes tracées en noir démontrent qu'une partie de l'eau réinjectée dans le puits s'infiltre dans la matrice géologique entre 0 et 45 m de profondeur, puis

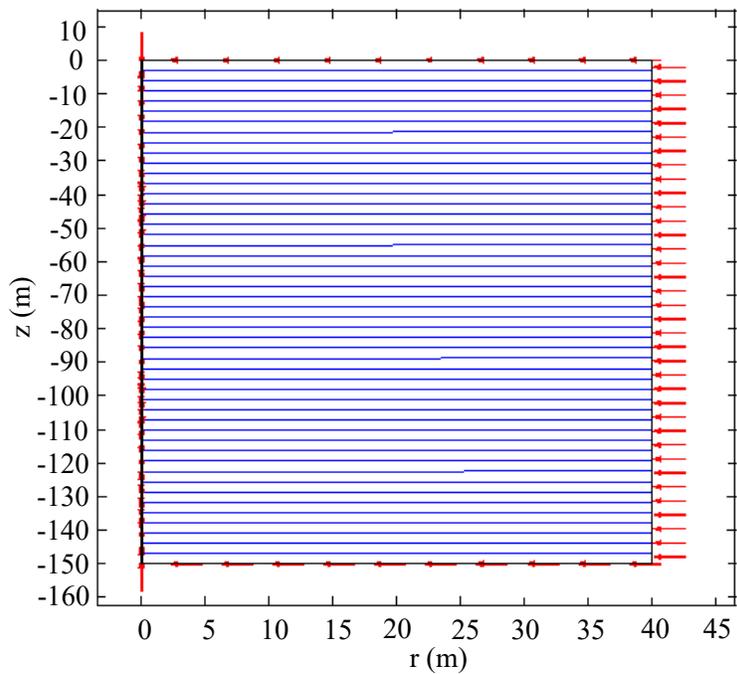
s'écoule en direction de la paroi latérale du modèle. Ce comportement engendre une dépressurisation à la base de la partie externe du PCP, favorisant un écoulement d'eau souterraine en direction du système géothermique entre 100 et 150 m de profondeur, tel qu'illustré par les lignes de courant dessinées en bleu. Finalement, la zone tracée en rouge subit l'influence de ces deux grands systèmes d'écoulement, nommés respectivement «système d'écoulement supérieur» et «système d'écoulement inférieur». Une partie de l'eau du puits s'infiltré dans l'aquifère entre 45 et 75 m de profondeur, similairement à ce qui est observé dans le système d'écoulement supérieur. Cependant, cette eau retourne en direction du puits, puis s'infiltré au sein de celui-ci entre 75 et 100 m de profondeur.

La Fig. 5.4 (b) présente les lignes de courant observées le 15 décembre, lorsque la saignée est en opération. Dans cette situation, étant donné que le débit de pompage ($3.15 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$) est supérieur au débit de réinjection ($2.34 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$), un rabattement est créé au sein du puits. Pour combler cette perte de volume, un écoulement d'eau souterraine en direction du PCP est subséquemment favorisé sur l'ensemble de l'aquifère.

Les lignes de courant observées au sein de l'aquifère répondent à la loi de Darcy, basée sur le fait que l'eau souterraine s'écoule de la charge hydraulique la plus élevée en direction de la charge hydraulique la plus faible. La charge hydraulique de référence (H_r) imposée à la paroi verticale latérale du modèle ($r = 40 \text{ m}$) est de 160 m, alors que la charge mesurée à la paroi du forage (H_b) varie en fonction du temps. De ce fait, l'écoulement au sein de l'aquifère s'effectue en direction du puits si $H_r > H_b$ ou en direction de la paroi latérale du modèle si $H_r < H_b$. Sans saignée, l'injection d'eau au sommet de la partie externe du puits augmente la charge hydraulique à la paroi du forage de 2 cm par rapport à la charge de référence. Ce comportement est illustré à la Fig. 5.5 (a), présentant H_b en fonction de la profondeur. Ainsi, jusqu'à 75 m de profondeur, l'écoulement se fait en direction de la paroi latérale du modèle, alors qu'entre 75 et 150 m de profondeur, le sens est inversé, puisque $H_b < 160 \text{ m}$. D'autre part, lorsque la saignée est active, la charge hydraulique mesurée à la paroi du forage est inférieure à 160 m sur toute la longueur du puits en raison du rabattement causé par la saignée, engendrant un écoulement en direction du PCP (Fig. 5.5 b). Ces résultats sont similaires aux observations faites par Yuill et Mikler (1995).



(a)



(b)

Figure 5.4 Lignes de courant observées dans l'aquifère, (a) le 20 juillet ($\beta = 0$) et (b) le 15 décembre ($\beta = 0.26$), lorsque le puits est fermé à l'atmosphère et installé dans une matrice poreuse. Les flèches indiquent le sens de l'écoulement.

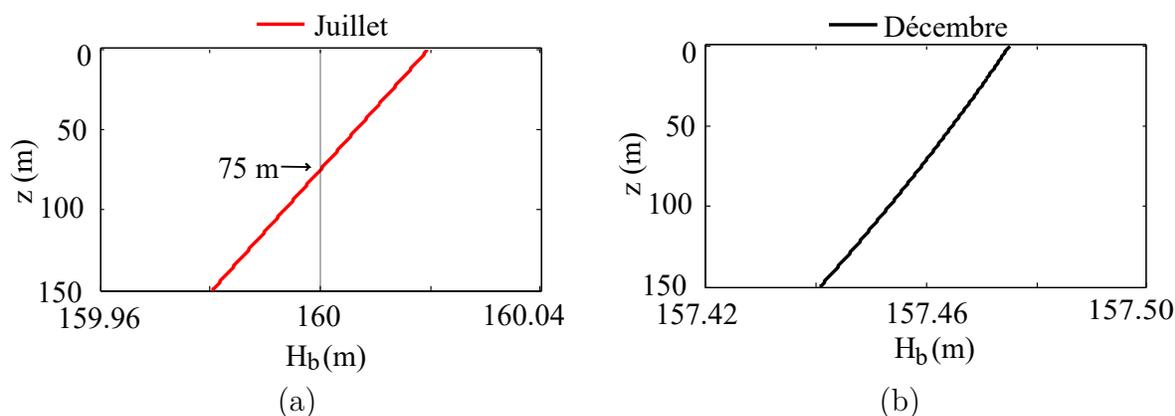


Figure 5.5 Charge hydraulique (H) mesurée à la paroi du forage en fonction de la profondeur, (a) le 20 juillet ($\beta = 0$) et (b) le 15 décembre ($\beta = 0.26$), lorsque le puits est fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent.

Les Fig. 5.6 (a) et (b) schématisent les charges hydrauliques, ainsi que le sens de l'écoulement au sein du puits et de l'aquifère, tels qu'observés en réalité sans saignée, puis avec saignée. Quand $\beta = 0$, un cône de réalimentation se forme dans la partie externe du PCP, augmentant la charge hydraulique à la paroi du forage dans la partie supérieure du puits. Un écoulement dans la direction opposée de l'ouvrage est ainsi favorisé au niveau du cône de réalimentation. En revanche, lorsque $\beta = 0.26$, un cône de rabattement est observé au sein du puits et de l'aquifère, diminuant les charges hydrauliques à la paroi du forage et favorisant un écoulement en direction du puits. Pour des raisons de simplification, les conditions aux frontières du modèle assument que le PCP et l'aquifère sont saturés en permanence et que le puits est parfaitement efficace. Les Fig. 5.6 (c) et (d) schématisent les charges hydrauliques, ainsi que le sens de l'écoulement au sein du puits et de l'aquifère, tels que simulés dans le modèle sans saignée, puis avec saignée.

Le gradient de la charge hydraulique entre le puits et la paroi latérale du modèle contrôle la vitesse de Darcy au sein de l'aquifère. Plus le différentiel de charge est élevé, plus la vitesse est importante. La Fig. 5.7 présente la composante horizontale du champ de vitesse de Darcy (\vec{v}_r), mesurée à la paroi du forage. Une valeur négative de \vec{v}_r indique un écoulement en direction du puits, alors qu'une valeur positive désigne un écoulement en direction de la frontière latérale du domaine. Sans saignée, la vitesse à la paroi du forage passe de $0.87 \cdot 10^{-7}$ à 0 m/s entre 0 et 75 m de profondeur (point où la charge hydraulique mesurée à la paroi du forage est égale à celle observée à $r = 40$ m). Finalement, entre 75 et 300 m, la vitesse augmente jusqu'à $0.87 \cdot 10^{-7}$ m/s. Avec la saignée, \vec{v}_r est négative sur toute la longueur du puits et augmente très légèrement avec la profondeur. Pour des raisons de lisibilité, une

échelle différente a été utilisée pour l'axe des abscisses sur les Fig. 5.7 (a) et (b).

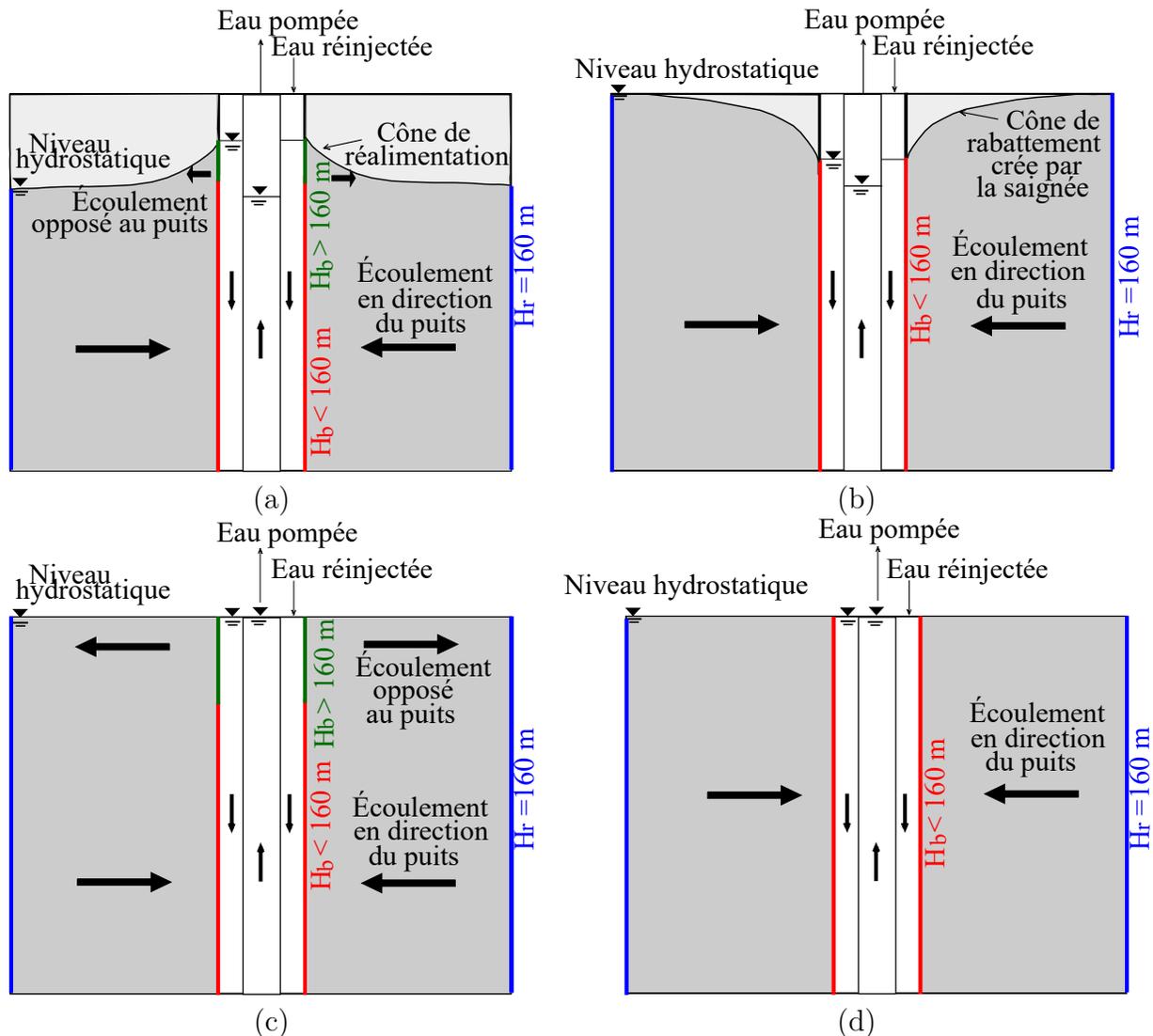


Figure 5.6 Charges hydrauliques et sens de l'écoulement dans le puits et l'aquifère, tels qu'observés en réalité (a et b) et tels que simulés (c et d), sans saignée (colonne de gauche) et avec saignée (colonne de droite).

Dans le but de définir le temps de résidence de l'eau au sein du forage, la Fig. 5.8 présente la composante verticale du champ de vitesse de Darcy, mesurée au centre des fluides ascendant (\vec{v}_{za}) et descendant (\vec{v}_{zd}) du PCP, le 20 juillet et le 15 décembre. La vitesse du fluide ascendant est constante dans le temps, ainsi que sur toute la longueur du puits ($\vec{v}_{za} = 0.691$ m/s), puisque le débit de pompage est identique avec et sans saignée (Fig. 5.8 a). Par contre, la composante verticale de la vitesse de Darcy du fluide descendant varie en fonction du débit d'injection, évoluant avec le taux de saignée (Fig. 5.8 b). \vec{v}_{zd} est constante sur toute la

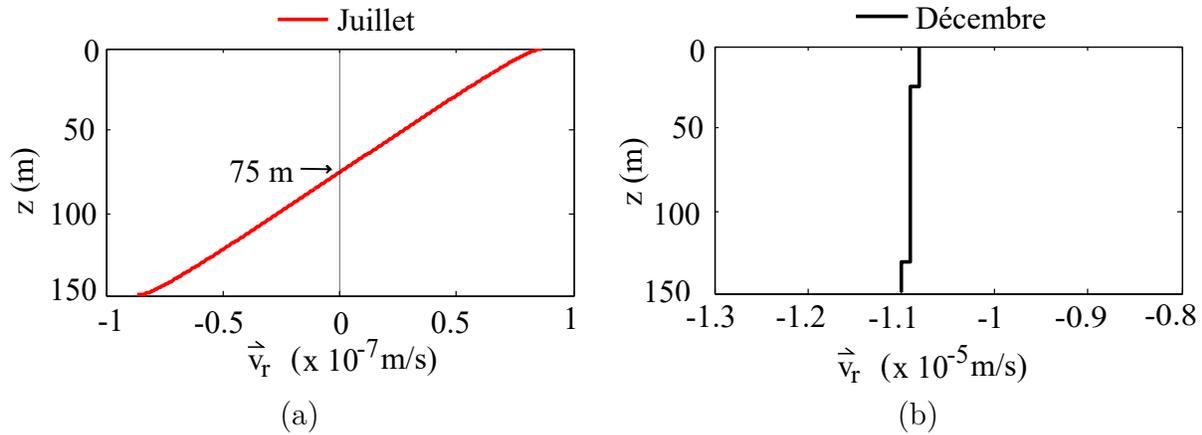


Figure 5.7 Vitesse de Darcy horizontale (\vec{v}_r) mesurée à la paroi du forage en fonction de la profondeur, (a) le 20 juillet ($\beta = 0$) et (b) le 15 décembre ($\beta = 0.26$), lorsque le puits est fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent.

longueur du puits sans saignée, alors qu'elle augmente avec la profondeur lorsque la saignée est active (de 0.19 m/s au sommet et 0.26 m/s à la base). Ce comportement est expliqué par l'infiltration d'eau souterraine en provenance de la formation géologique au sein du PCP, en réponse à l'activation de la saignée. Finalement, en calculant la vitesse moyenne des fluides ascendant et descendant, les temps de résidence de l'eau dans le tube de prélèvement (3 minutes et 35 secondes) et dans la partie externe du PCP (9 minutes et 30 secondes sans saignée et 11 minutes avec saignée) peuvent être définis.

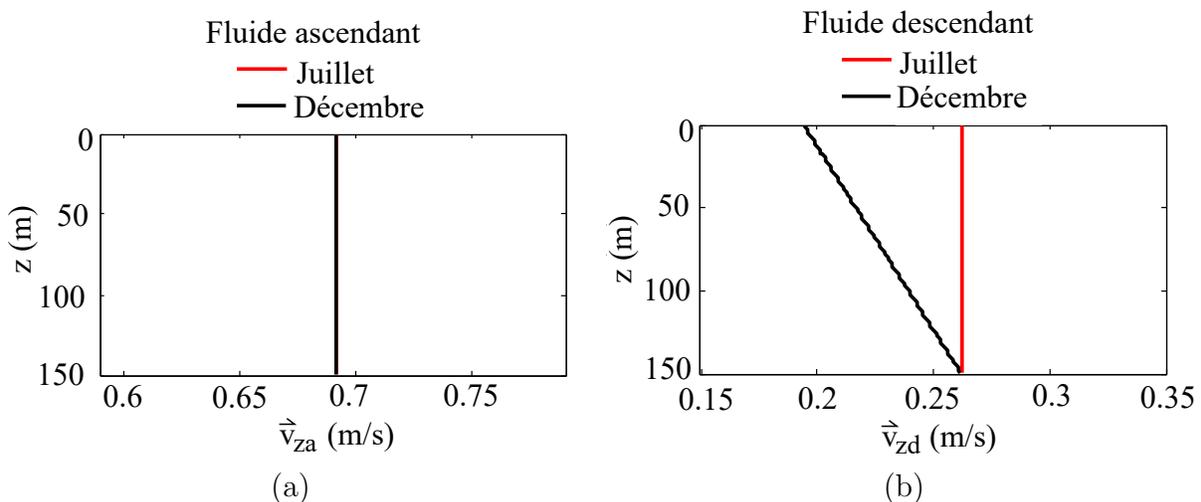


Figure 5.8 Composante verticale du champ de vitesse de Darcy, mesurée au centre des fluides (a) ascendant et (b) descendant en fonction de la profondeur, le 20 juillet et le 15 décembre, lorsque le puits est fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent.

5.3 Évolution thermique

Cette section présente le comportement thermique du puits. Ce dernier est directement relié aux charges de chauffage et de climatisation du bâtiment (voir Fig. 5.2), puisque la quantité de chaleur injectée dans le puits ou extraite est proportionnelle aux besoins thermiques de l'édifice. Pour rappel, la pompe à chaleur n'est pas directement modélisée, mais la variation de température induite par son opération est prise en compte.

La Fig. 5.9 illustre l'évolution annuelle de la température mesurée à l'entrée (sommet de la partie externe du puits) et à la sortie du PCP (sommet du tube de prélèvement). Il apparaît logiquement que durant la saison froide, la température diminue au sein du puits. Ce comportement est expliqué par le transfert d'énergie thermique de l'eau souterraine à la PAC, dans le but de chauffer le bâtiment. Inversement, la température augmente durant la saison chaude, puisque la chaleur du bâtiment est réinjectée dans le puits. D'autre part, une différence de température est constamment mesurée entre l'entrée et la sortie du PCP. Cette observation est expliquée par l'échange de chaleur induit par conduction et advection entre l'eau circulant dans le puits et la formation géologique présentant une température d'environ 10 °C. En effet, en mode climatisation, l'eau chaude réinjectée dans le puits se refroidit en circulant dans le PCP, alors que l'eau froide réinjectée en mode chauffage a tendance à se réchauffer. Conséquemment, l'été la température mesurée à l'entrée du puits est supérieure à celle observée à la sortie et inversement durant l'hiver.

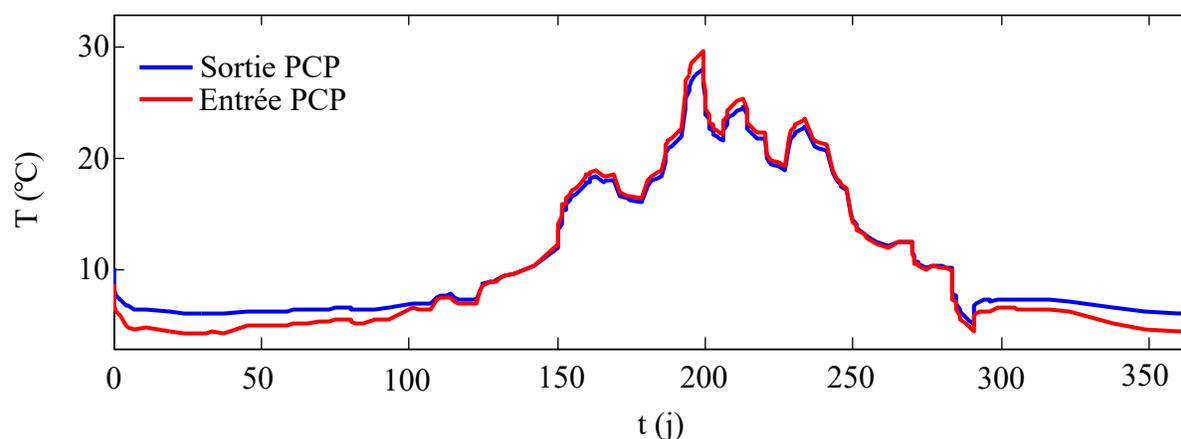


Figure 5.9 Évolution annuelle de la température mesurée à l'entrée et à la sortie du puits fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent. Tiré de Pasquier, Nguyen, Eppner, Marcotte et Baudron (2016).

En vue d'illustrer l'évolution thermique au sein du puits, des profils de température en fonction de la profondeur ont été tracés dans les fluides ascendant et descendant du PCP, pour les journées du 15 juillet et du 15 décembre (Fig. 5.10). En mode climatisation, la température du fluide descendant diminue en fonction de la profondeur (Fig. 5.10 a). Ce comportement est justifié par le différentiel de température entre l'aquifère (environ 10 °C) et le fluide descendant (31.5 °C à $z = 0$ m), engendrant un transfert de chaleur par conduction et advection. À l'inverse, en mode chauffage, le fluide descendant (proche de 5 °C à $z = 0$ m) se réchauffe au contact de la formation géologique plus chaude (Fig. 5.10 b). Entre l'entrée et la sortie du puits, la température passe de 31.5 à 30 °C durant l'été, alors que l'hiver, elle augmente de 4.6 à 6.2 °C. D'autre part, en raison de la géométrie du puits, le tube de prélèvement est isolé de l'aquifère, expliquant les faibles variations de température au sein de celui-ci. Seul un léger transfert de chaleur se produit entre les deux fluides (ascendant et descendant), générant une diminution de la température du fluide ascendant avec la profondeur au mois de juillet et une augmentation au mois de décembre.

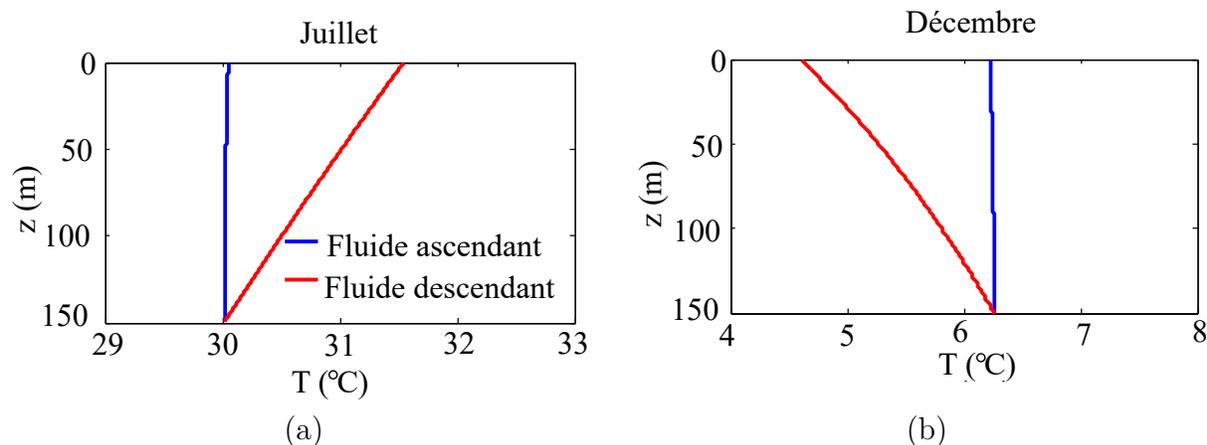


Figure 5.10 Profils de température en fonction de la profondeur dans les fluides ascendant et descendant, (a) le 15 juillet et (b) le 15 décembre, lorsque le puits est fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent. Adapté de Pasquier, Nguyen, Eppner, Marcotte et Baudron (2016).

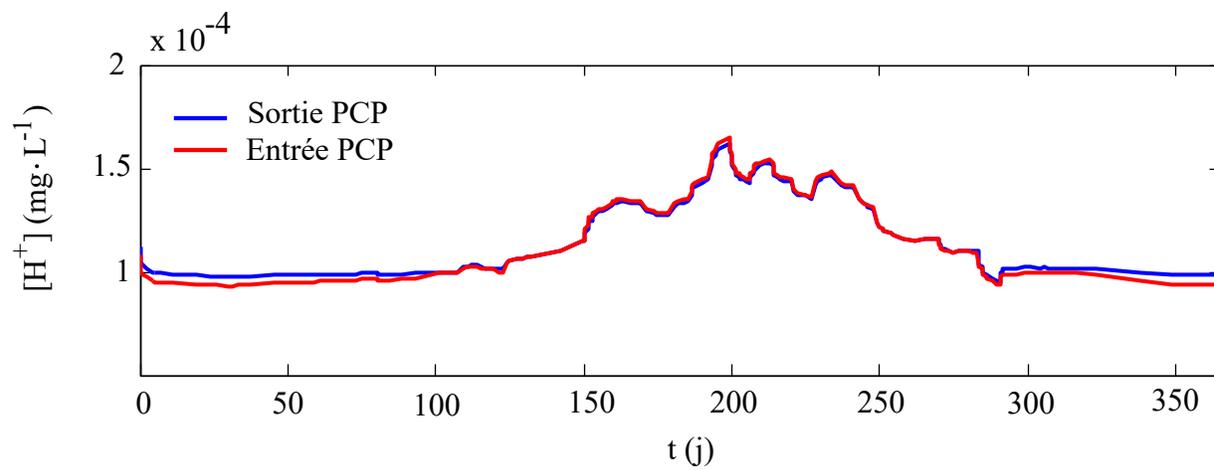
5.4 Évolution géochimique

Le comportement géochimique du PCP est contrôlé par l'évolution thermique du système, influençant le sens des réactions chimiques, ainsi que leur vitesse. Dans le modèle développé, les processus géochimiques sont liés à la température par les constantes de réaction directes

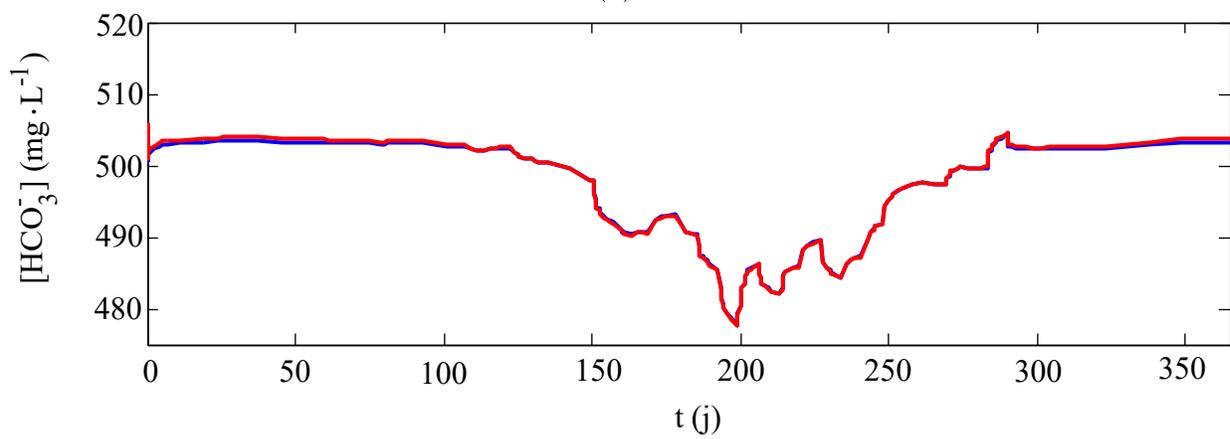
et inverses des trois réactions de cinétique (Éq. 3.35 et 3.36), ainsi que par les constantes d'équilibre des neuf réactions chimiques considérées (Éq. 3.37 et 3.55). Ce couplage permet de lier la signature chimique de l'eau souterraine aux variations de la température dans le puits et l'aquifère.

La Fig. 5.11 illustre l'évolution annuelle à l'entrée et à la sortie du PCP, de la concentration des espèces chimiques utilisées pour calculer le taux de réaction de la calcite (Éq. 3.40). Les résultats démontrent que la concentration des espèces dissoutes est soit corrélée avec la température (H^+ , OH^- et H_2CO_3), soit inversement corrélée avec la température (HCO_3^- et Ca^{2+}). Ce comportement est expliqué par la variation des constantes d'équilibre avec la température, ayant pour impact de modifier le sens des réactions. De ce fait, à l'entrée du puits durant la saison froide, la baisse de la température augmente la solubilité de la calcite. Les trois réactions de cinétique (Éq. 3.34) se déroulent donc de gauche à droite, soit dans la direction favorisant la dissolution, provoquant une diminution des concentrations en H^+ et H_2CO_3 , ainsi qu'une augmentation des concentrations en Ca^{2+} et HCO_3^- . Inversement, une hausse de la température entraîne une baisse de la solubilité de la calcite, favorisant les réactions de précipitation. À l'entrée du puits durant la saison chaude, les réactions de cinétique se produisent donc de droite à gauche, menant à la diminution des concentrations en Ca^{2+} et HCO_3^- et l'augmentation des concentrations en H^+ et H_2CO_3 .

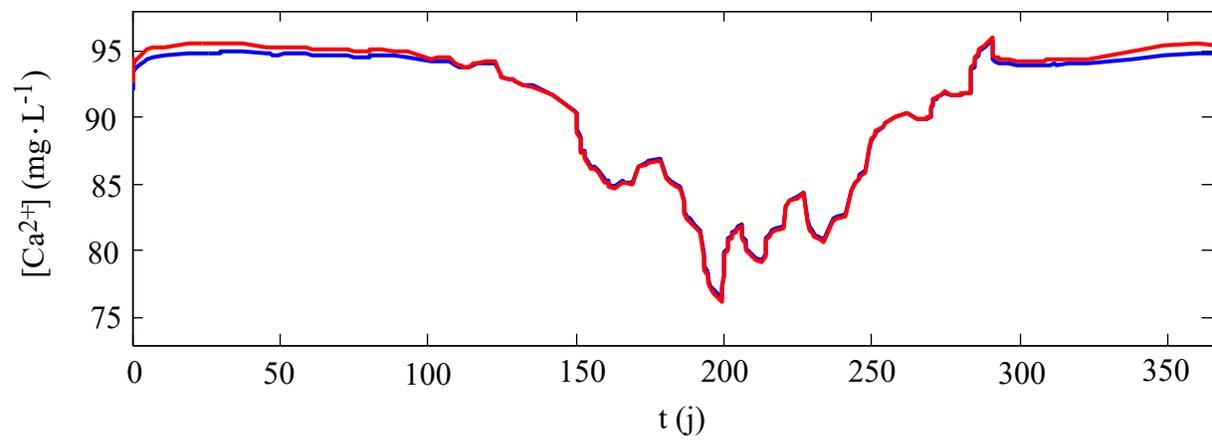
Selon la première et la troisième réaction de cinétique, les espèces H^+ et OH^- devraient suivre une tendance inverse, étant donné que la précipitation de la calcite favorise l'augmentation de la concentration en H^+ et la diminution de la concentration en OH^- . Cependant, les concentrations des deux espèces sont parfaitement corrélées avec la température. Ce comportement s'explique par la première réaction à l'équilibre ($H^+ + OH^- = H_2O$), démontrant que les ions H^+ et OH^- sont conjointement les réactifs ou les produits de la réaction. Étant donné que ces deux espèces se trouvent du même côté dans la réaction, leur concentration est logiquement corrélée. La signature chimique de l'eau souterraine résulte donc des interactions complexes entre les réactions de cinétique et les réactions à l'équilibre qui sont prises en compte par le modèle.



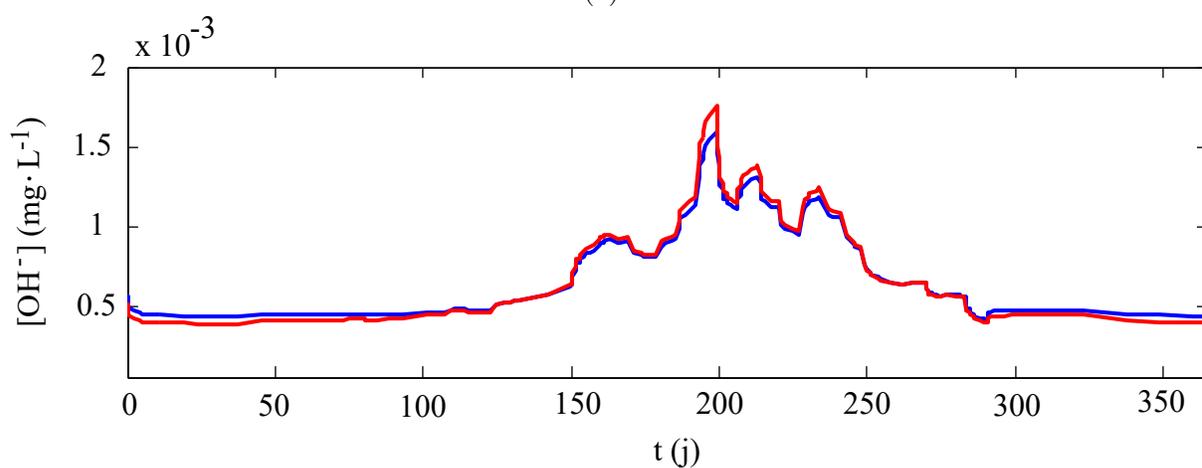
(a)



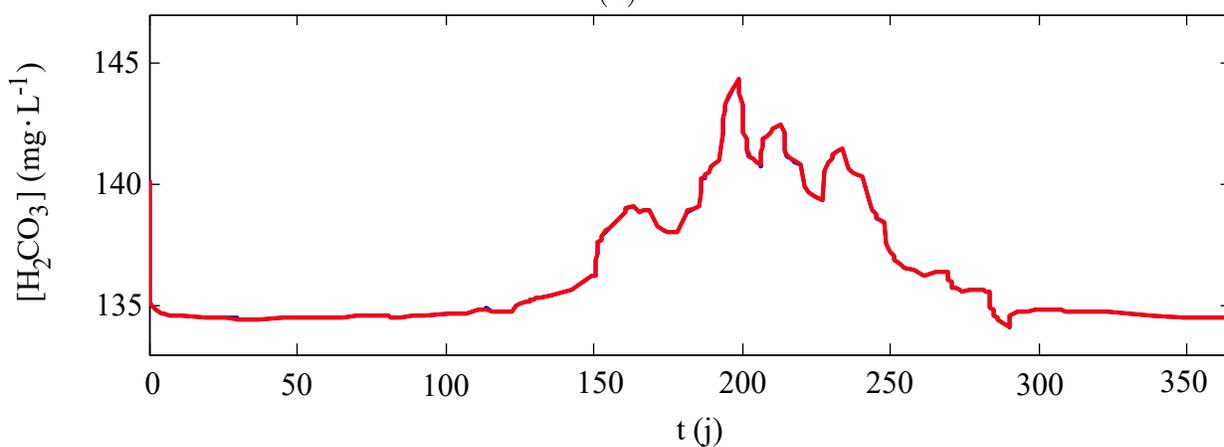
(b)



(c)



(d)



(e)

Figure 5.11 Évolution annuelle de la concentration en (a) H^+ , (b) HCO_3^- , (c) Ca^{2+} , (d) OH^- et (e) H_2CO_3 à l'entrée et à la sortie du puits fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent. Figure (c) tirée de Pasquier, Nguyen, Eppner, Marcotte et Baudron (2016).

Il est souvent plus éloquent d'illustrer les espèces H^+ et H_2CO_3 , sous la forme du pH et de la P_{CO_2} , comme présenté à la Fig. 5.12. Étant donné que le pH est lié à l'activité de H^+ par la relation suivante $pH = -\log(\alpha_{H^+})$, ces deux paramètres suivent une corrélation inverse. Le pH de l'eau souterraine se situe aux alentours de 7 durant l'hiver et diminue à environ 6.8 l'été. La P_{CO_2} et l'activité de H_2CO_3 sont quant à elles reliées par l'équation $P_{CO_2} = \alpha_{H_2CO_3}/K_H$, où K_H est la constante de Henry exprimant la volatilité du CO_2 . Pour rappel, dans cette étude la simplification suivante est faite : $H_2CO_3 = CO_{2(aq)}$. Par conséquent, une augmentation de l'activité de H_2CO_3 provoque une élévation de la P_{CO_2} . De plus, une augmentation de la température engendre une baisse de la constante de Henry, exprimant une diminution de la solubilité de $CO_{2(aq)}$. Dans un système ouvert à l'atmosphère, le dégazage du CO_2 est ainsi favorisé durant la saison chaude, lorsque la P_{CO_2} est élevée. Ce comportement est discuté dans le chapitre 7.

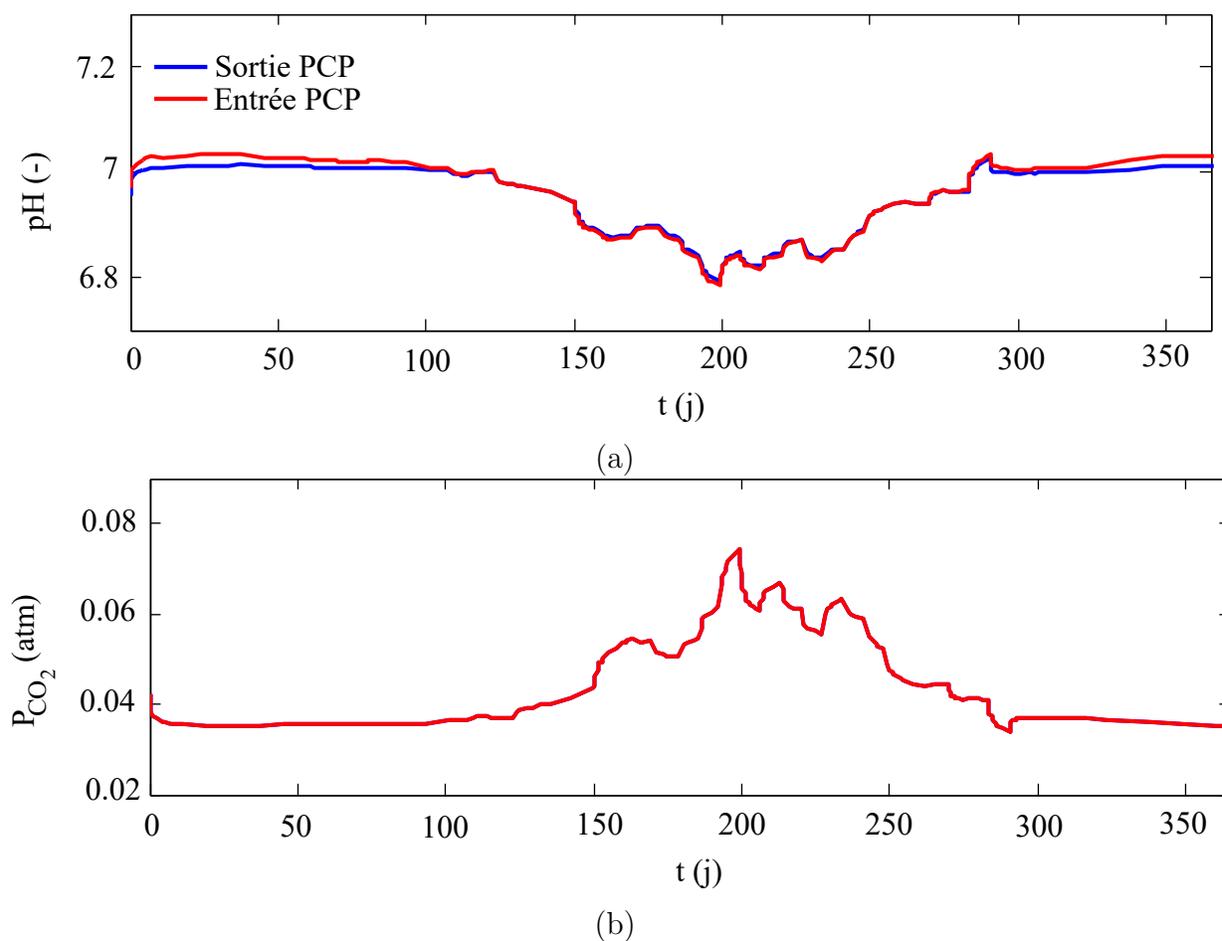


Figure 5.12 Évolution annuelle (a) du pH et (b) de la pression partielle du CO_2 , à l'entrée et à la sortie du puits fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent.

Dans le but d'analyser la tendance de précipitation et de dissolution de la calcite dans le puits, le taux de réaction (\tilde{R}), permettant de définir si la solution est sursaturée par rapport à la calcite ($\tilde{R} < 0$), à l'équilibre ($\tilde{R} = 0$) ou encore sous-saturée ($\tilde{R} > 0$), a été évalué à l'entrée et à la sortie du PCP (Fig. 5.13). Une solution sous-saturée présente un risque de dissolution, alors que les réactions de précipitation sont favorisées dans une solution sursaturée. Les résultats démontrent qu'à l'entrée du puits, la calcite précipite l'été (avec des \tilde{R} variant approximativement entre $-0.2 \cdot 10^{-7}$ et $-2.2 \cdot 10^{-7}$ mg/(cm²·s)), en réponse à l'injection d'eau chaude dans le système. À l'inverse, l'apport d'eau froide durant l'hiver engendre la dissolution du $CaCO_{3(s)}$ (avec des \tilde{R} de l'ordre de $0.2 \cdot 10^{-7}$ mg/(cm²·s)). À la sortie du puits, le comportement opposé est observé. Ainsi, la précipitation et la dissolution de la calcite se produisent simultanément, dans différentes zones du puits. Ce comportement est également illustré à la Fig. 5.14, présentant la distribution spatiale du taux de réaction de la calcite dans le puits et l'aquifère environnant, aux mois de juillet et décembre.

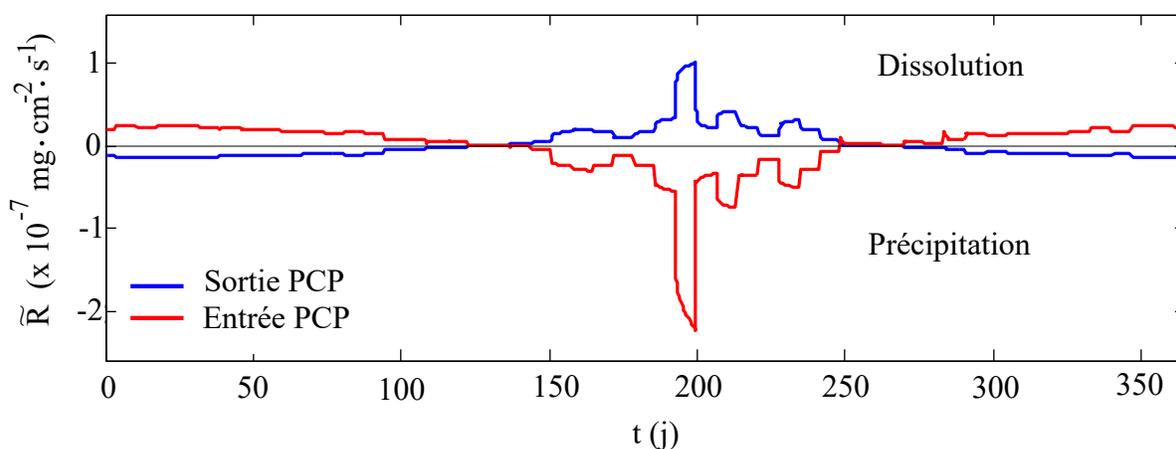


Figure 5.13 Évolution annuelle du taux de réaction de la calcite à l'entrée et à la sortie du puits fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent. Tiré de Pasquier, Nguyen, Eppner, Marcotte et Baudron (2016).

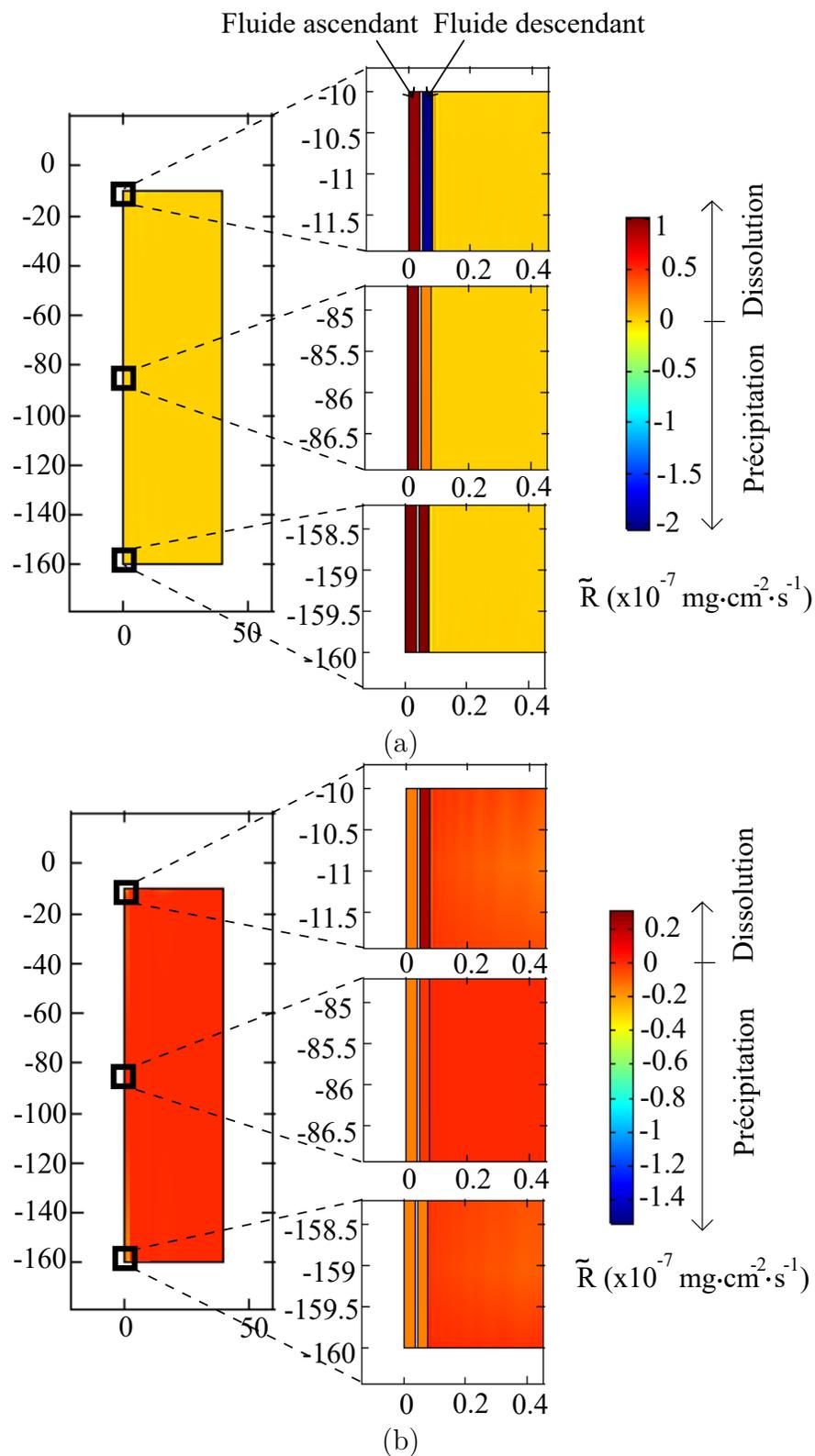


Figure 5.14 Distribution spatiale du taux de réaction de la calcite dans le puits et l'aquifère environnant, aux mois de (a) juillet et (b) décembre.

Dans le but d'expliquer l'apparition conjointe de la précipitation et de la dissolution de la calcite au sein du puits, les profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} et du taux de réaction de la calcite ont été tracés dans les fluides ascendant et descendant du PCP. La Fig. 5.15 illustre ces profils pour les mois de juillet et décembre. Les résultats permettent de définir que les variations de la température et de la concentration en Ca^{2+} avec la profondeur sont à l'origine de l'apparition simultanée de la précipitation et de la dissolution de la calcite, à différents endroits du puits. Pour des raisons de lisibilité, l'échelle des abscisses diffère entre les Fig. 5.15 (c) et (d).

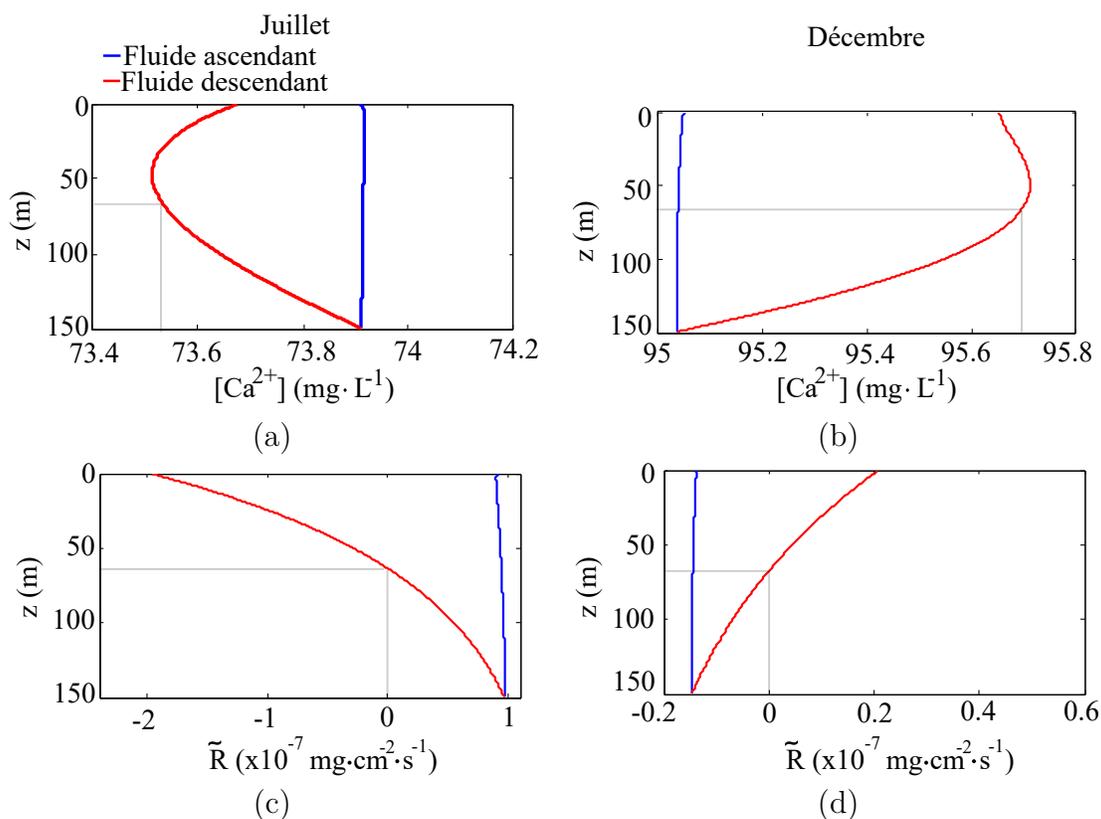
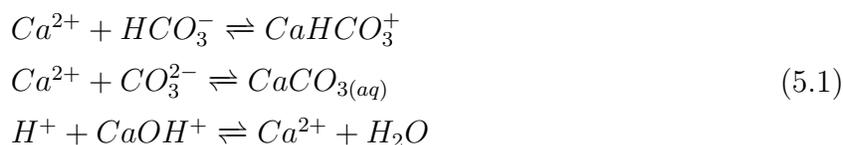


Figure 5.15 Profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} (a et b) et du taux de réaction de la calcite (c et d), dans les fluides ascendant et descendant du puits, aux mois de juillet (colonne de gauche) et décembre (colonne de droite). Adapté de Pasquier, Nguyen, Eppner, Marcotte et Baudron (2016).

Au mois de juillet, l'eau chaude (température supérieure à 30 °C) réinjectée à l'entrée du puits favorise la précipitation de la calcite ($\tilde{R} < 0$) entre 0 et 60 m de profondeur (Fig. 5.15 c). Une baisse de la concentration en calcium est subséquemment observée dans la partie externe du puits (Fig. 5.15 a). La diminution conjointe de la température et de la concentration en Ca^{2+} avec la profondeur conduit la solution dans un état de sous-saturation

par rapport à la calcite. Par conséquent, à partir de 60 m de profondeur, la dissolution de la calcite, ayant pour conséquence de remettre des ions Ca^{2+} en solution, se produit dans le but d'atteindre à nouveau l'équilibre chimique. L'hiver, les processus inverses sont observés (Fig. 5.15 b et b). L'eau froide (environ 5 °C) réinjectée à l'entrée du puits favorise la dissolution de la calcite jusqu'à une profondeur de 60 m, provoquant une hausse de la concentration en Ca^{2+} . L'augmentation simultanée de la température et de la concentration en calcium avec la profondeur amène l'eau souterraine dans un état de sursaturation par rapport à la calcite. Les réactions de précipitation sont ainsi favorisées entre 60 et 150 m de profondeur dans la zone externe du PCP. D'autre part, comme mentionné précédemment, le fluide ascendant est isolé de la formation géologique, expliquant les très faibles variations de sa température. Par conséquent, les fluctuations de la concentration en Ca^{2+} et du taux de réaction de la calcite sont également infimes. Le taux de réaction dans le tube de prélèvement est donc similaire à celui observé à la base de la partie externe du puits et ce, tout au long de l'année.

Entre 200 et 250 jours d'opération, la calcite ($CaCO_{3(s)}$) précipite à l'entrée du puits à un taux global de l'ordre de -10^{-7} mg/(cm² · s), alors que de manière contre-intuitive, la concentration en Ca^{2+} augmente (Fig. 5.11 c et 5.13). Ce comportement s'explique par les réactions à l'équilibre qui dans ce cas affectent davantage la concentration en calcium que les réactions de cinétique, qui ont un taux global de réaction de l'ordre de $\pm 10^{-7}$ mg/(cm² · s). L'ion Ca^{2+} apparaît dans les réactions à l'équilibre suivantes :



dont les constantes d'équilibre correspondent à :

$$K_{CaCO_{3(aq)}} = \frac{[Ca^{2+}] \cdot [CO_3^{2-}]}{[CaCO_{3(aq)}} \quad (5.2)$$

$$K_{CaHCO_3^+} = \frac{[Ca^{2+}] \cdot [HCO_3^-]}{[CaHCO_3^+]} \quad (5.3)$$

$$K_{CaOH^+} = \frac{[Ca^{2+}] \cdot [H_2O]}{[CaOH^+] \cdot [H^+]} \quad (5.4)$$

Un changement de température provoque une variation des constantes d'équilibre, à l'except-

tion de K_{CaOH^+} , puisqu'aucune formule liant cette constante à la température n'a été trouvée dans la littérature (voir Éq. 3.55). Une élévation de la température provoque une diminution des constantes $K_{CaCO_3(aq)}$ et $K_{CaHCO_3^+}$, tel qu'illustré à la Fig. 5.16 (présentant les données à l'entrée du puits), forçant les deux réactions correspondantes à se dérouler de gauche à droite. Par conséquent, les concentrations en Ca^{2+} , HCO_3^- et CO_3^{2-} diminuent, alors que les concentrations en $CaCO_3(aq)$ et $CaHCO_3^+$ augmentent (Fig. 5.17). Par contre, à une température inférieure à 10 °C, la concentration en CO_3^{2-} augmente avec l'élévation de la température, alors que la concentration en $CaCO_3(aq)$ diminue. Ce comportement est expliqué par le fait que $K_{CaCO_3(aq)}$ est pratiquement constante à basse température (Fig. 5.16 a) et étant donné que la concentration en calcium diminue, la concentration en CO_3^{2-} doit augmenter et la concentration en $CaCO_3(aq)$ diminuer pour garder une valeur de $K_{CaCO_3(aq)}$ constante. La signature chimique de l'eau souterraine résulte donc des interactions entre les réactions à l'équilibre et les réactions de cinétique, puisque la concentration en calcium diminue lorsque la température passe de 5 à 30 °C, même si la calcite se dissout à basse température (entre 5 et 15 °C approximativement), puis précipite à une température plus élevée (Fig. 5.18).

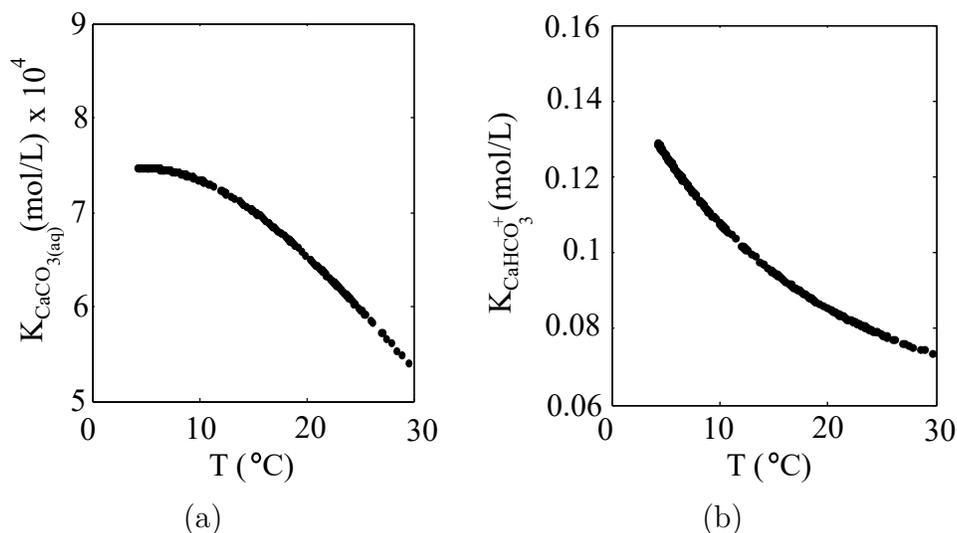


Figure 5.16 Évolution des constantes d'équilibre (a) $K_{CaCO_3(aq)}$ et (b) $K_{CaHCO_3^+}$, en fonction de la température à l'entrée du puits.

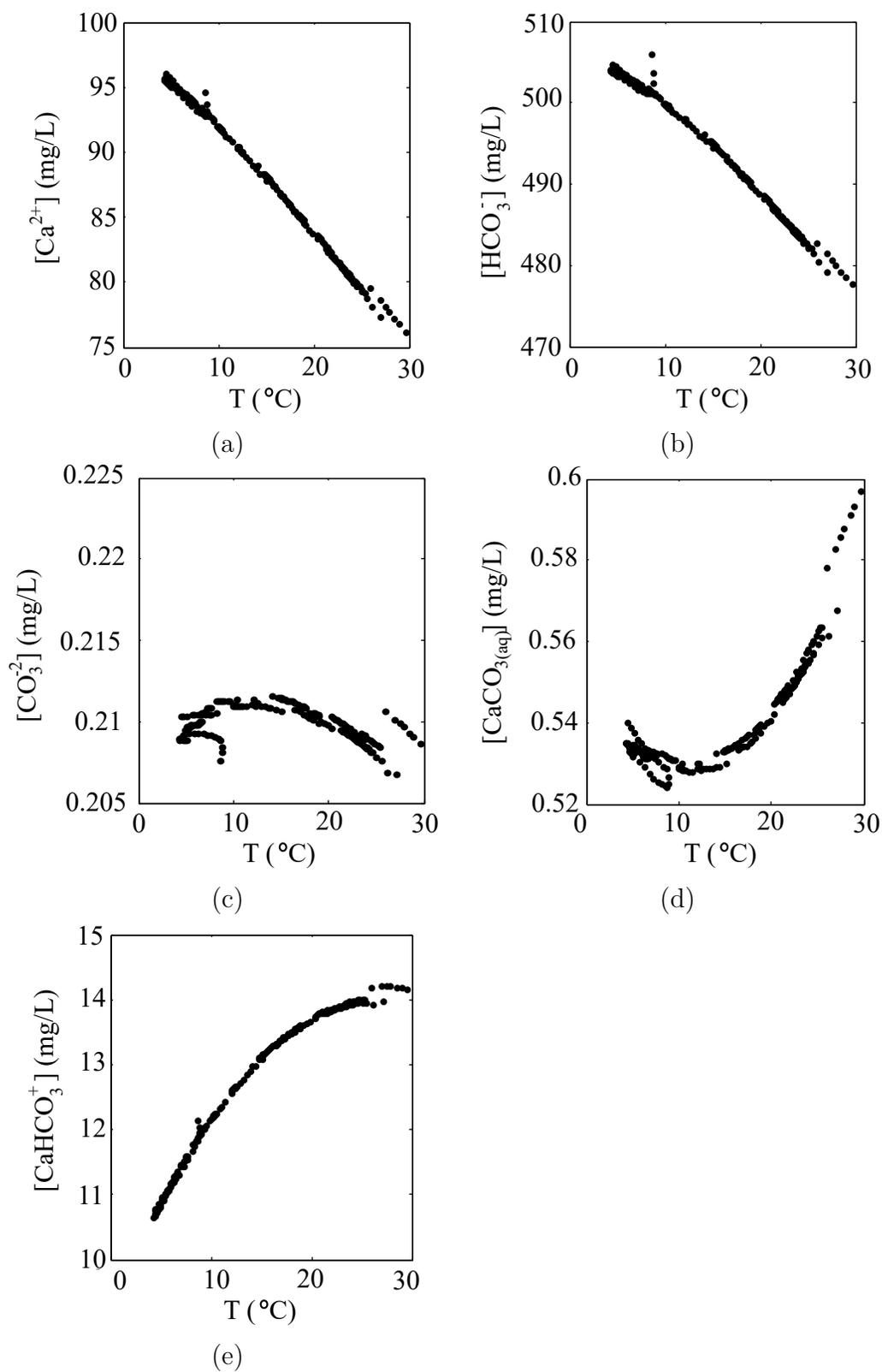


Figure 5.17 Évolution des concentrations en (a) Ca^{2+} , (b) HCO_3^- , (c) CO_3^{2-} , (d) $CaCO_{3(aq)}$ et (e) $CaHCO_3^+$, en fonction de la température à l'entrée du puits.

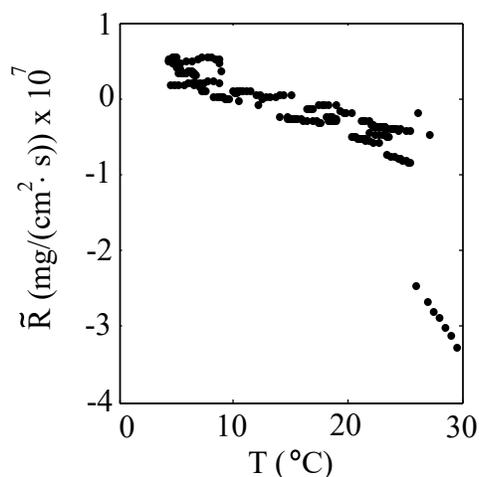


Figure 5.18 Évolution du taux de réaction de la calcite, en fonction de la température à l'entrée du puits.

5.5 Synthèse

Les résultats présentés dans ce chapitre illustrent le comportement d'un PCP opéré sur une période d'un an. Cet exemple représente le cas le plus simple étudié dans le cadre de cette thèse de doctorat, c'est-à-dire un PCP parfaitement scellé à son sommet, excluant les échanges gazeux avec l'atmosphère et un milieu poreux équivalent. Cette analyse détaillée des processus hydrogéologique, thermique et géochimique a permis de mettre en évidence les mécanismes conduisant à la précipitation et à la dissolution de la calcite au sein du puits. Cette étude représente donc la première étape vers la compréhension du comportement THG d'un PCP, ce qui permettra ensuite d'identifier l'impact de la saignée lorsque le PCP est installé dans un milieu poreux équivalent et un aquifère fracturé, ainsi que l'influence du dégazage du CO_2 au sommet du puits.

En modifiant les charges hydrauliques au sein du puits et de l'aquifère environnant, la saignée perturbe l'écoulement souterrain, s'effectuant des charges hydrauliques les plus élevées en direction des charges les plus faibles. Sans saignée, un cône de réalimentation est créé dans l'aquifère environnant, favorisant dans la partie supérieure du système un écoulement opposé au puits. Cette infiltration d'eau au sein de l'aquifère engendre une dépressurisation à la base du puits, favorisant à la base du système un écoulement en direction du PCP. Entre ces deux systèmes, une partie de l'eau du puits s'infiltré dans l'aquifère, avant de retourner en direction du PCP. D'autre part, lorsque la saignée est active, un cône de rabattement

se forme dans l'aquifère environnant, engendrant un écoulement en direction du puits sur l'ensemble du domaine. Les lignes de courant présentées dans ce chapitre sont toutefois spécifiques aux paramètres introduits dans le modèle. En effet, l'infiltration d'eau du puits dans la partie supérieure de la matrice géologique, qui dans cet exemple a été observée uniquement sans saignée, est proportionnelle à la perméabilité de l'aquifère et au débit de réinjection. En supposant un aquifère très perméable et un débit de saignée faible, cette infiltration d'eau peut également se produire lorsque la saignée est active. Ce comportement est notamment observé dans les cas présentés au chapitre 6 et à la section 7.3.

Le comportement thermique du puits est contrôlé par l'opération de la PAC. En mode chauffage, cette dernière capte la chaleur de l'eau souterraine, afin de transmettre au bâtiment une énergie thermique suffisante pour chauffer le bâtiment, diminuant subséquemment la température au sein du puits. À l'inverse, en mode climatisation, la chaleur du bâtiment est injectée dans le puits, augmentant ainsi sa température. En circulant au sein de la boucle souterraine, le fluide abaisse sa température lorsque le système opère en mode climatisation, alors qu'il l'augmente en mode chauffage, grâce aux échanges thermiques engendrés par conduction et advection avec la formation géologique. L'opération de la saignée accentue ce phénomène bénéfique sur le COP de la PAC. En effet, elle augmente le transfert de chaleur par advection, en apportant au puits une eau ayant une température plus constante toute l'année (environ 10 °C).

Le comportement géochimique du puits est fortement influencé par les fluctuations annuelles de la température. Par conséquent, la variation temporelle des espèces est soit corrélée avec la température (H^+ , OH^- et H_2CO_3), soit inversement corrélée avec la température (HCO_3^- et Ca^{2+}). Cette observation est expliquée par la variation des constantes d'équilibre des réactions chimiques avec la température, influençant de ce fait le sens des réactions. Concernant les réactions de cinétique, une augmentation de la température diminue la constante de solubilité de la calcite, favorisant sa précipitation. À l'inverse, un abaissement de la température a tendance à provoquer la dissolution de la calcite. Ainsi, les espèces qui se trouvent du même côté que la calcite dans les réactions de cinétique (Éq. 3.34) sont corrélées avec la température, alors que les espèces se trouvant du côté opposé du $CaCO_{3(s)}$ sont inversement corrélées à la température, à l'exception de l'espèce OH^- . Ce comportement provient des interactions complexes entre les réactions de cinétique et les réactions à l'équilibre. Ainsi, la corrélation de l'espèce OH^- avec la température et l'ion H^+ est justifiée par la première réaction à l'équilibre ($H^+ + OH^- = H_2O$).

Les activités des espèces chimiques sont intégrées dans l'équation 3.40, permettant de définir le taux de réaction de la calcite au sein du puits. Durant l'hiver, l'injection d'eau froide à l'entrée du puits favorise la dissolution de la calcite au sommet de la partie externe du puits, alors que l'été, l'injection d'eau chaude provoque la précipitation de la calcite. À la base du puits, ainsi que dans le tube de prélèvement, le comportement inverse est observé, en raison de la variation de la température et de la concentration en calcium avec la profondeur. Lorsque le système opère en mode chauffage, le fluide descendant devient sursaturé par rapport à la calcite à environ 60 m de profondeur en réponse à la baisse simultanée de la température et de la concentration en calcium, favorisant la précipitation. Inversement, en mode climatisation la base du fluide descendant, ainsi que le fluide ascendant deviennent sous-saturés par rapport à la calcite, engendrant la dissolution du $CaCO_{3(s)}$. La précipitation et la dissolution de la calcite se produisent donc simultanément à différents endroits du puits.

CHAPITRE 6 IMPACT DE LA SAIGNÉE SUR LES PROCESSUS GÉOCHIMIQUES

La recirculation de l'eau souterraine au sein du PCP, bien qu'avantageuse pour limiter le débit extrait de l'aquifère, favorise les fluctuations de la température, ayant pour conséquence d'affecter la productivité thermique du système. En effet, en captant l'énergie thermique de l'eau souterraine durant la saison froide, la PAC abaisse la température au sein du puits, alors qu'elle l'augmente durant la période estivale. Cependant, ces oscillations thermiques peuvent aisément être atténuées en réinjectant une fraction de l'eau pompée dans un puits d'injection. Cette opération permet ainsi de renouveler en partie l'eau circulant au sein du puits à colonne.

L'effet bénéfique de la saignée sur le coefficient de performance de la PAC est, à ce jour, bien connu (O'Neill *et al.*, 2006; Nguyen *et al.*, 2015a,b). Cependant, son impact sur la signature chimique de l'eau souterraine n'a encore jamais été investigué. Le lien étroit entre la température et le taux de réaction de la calcite laisse toutefois croire que la saignée pourrait être utilisée dans le but de limiter la précipitation de la calcite. De ce fait, l'objectif de ce chapitre est de déterminer si l'apport d'eau en provenance de l'aquifère, possédant une composition chimique proche de l'état d'équilibre et une température constante tout au long de l'année, peut atténuer la précipitation et la dissolution de la calcite dans le PCP et les équipements mécaniques associés. Pour répondre à cette interrogation, la première section de ce chapitre présente l'impact de la saignée sur le taux de réaction de la calcite au sein du puits, lorsque ce dernier est installé dans un milieu poreux homogène. Dans ce cas, l'apport d'eau souterraine se produit de façon homogène sur toute la longueur du puits. La deuxième section illustre la même analyse pour un PCP intersecté par une fracture de 3 mm d'ouverture. Lorsque la saignée est en fonction, l'écoulement de l'eau souterraine au sein de l'aquifère est ainsi concentré dans la fracture, créant un chemin d'écoulement préférentiel. Les deux aquifères modélisés possèdent toutefois la même conductivité hydraulique équivalente. Finalement, cette analyse est nécessaire pour comprendre par la suite l'impact du dégazage sur les processus géochimiques, lorsque le puits est opéré avec et sans saignée (chapitre 7).

6.1 Paramètres d'entrée et conditions frontières

À la section 6.2, l'aquifère est modélisé comme un milieu poreux homogène, alors qu'il est modélisé comme un aquifère fracturé à la section 6.3. Dans l'ensemble des simulations réalisées,

le PCP et la matrice géologique sont considérés comme des systèmes fermés à l’atmosphère, excluant les échanges gazeux. En réalité, un puits parfaitement scellé est peu commun. Cependant, le dégazage est expressément exclu dans cet exemple, dans le but de mettre l’emphase sur l’impact de la saignée sur les processus géochimiques. Le comportement d’un PCP dont le sommet est ouvert à l’atmosphère est illustré dans le chapitre suivant.

La géométrie et les conditions frontières du modèle considérant l’aquifère comme un milieu poreux sont présentées à la Fig. 5.1, alors que la géométrie et les conditions frontières du modèle considérant l’aquifère fracturé sont respectivement illustrées aux Fig. 3.2 et 5.1. Le tableau 3.1 expose les paramètres géométriques du système, tandis que les paramètres hydrauliques, thermiques et géochimiques peuvent être retrouvés dans les tableaux 3.2, 3.3 et 3.5. Les variables concernant la fracture ne s’appliquent toutefois pas au premier exemple. De plus, pour modéliser le milieu poreux équivalent, le rapport A/V de la matrice géologique est modifié ($A/V_a = 1.35e4 \text{ m}^{-1}$ (voir section 5.1) au lieu de 8000 m^{-1} (voir section 3.4.3)).

Comme pour l’ensemble des cas exposés dans cette thèse, les simulations débutent le 1^{er} janvier et couvrent une période de 365 jours. Les charges au sol hebdomadaires de chauffage et de climatisation intégrées dans le modèle sont illustrées à la Fig. 6.1. Finalement, dans le but d’analyser l’impact de la saignée, deux scénarios sont comparés pour les deux aquifères (milieux poreux équivalent et fracturé). La première simulation considère un taux de saignée nul ($\beta = 0$), signifiant que la totalité de l’eau pompée est réinjectée dans le PCP, alors que dans la deuxième simulation, seulement 85% de l’eau pompée est réinjectée dans le puits ($\beta = 0.15$). La stratégie de modélisation appliquée considère que l’eau de la saignée est évacuée de l’aquifère. L’eau qui s’écoule en direction du puits n’a donc jamais séjourné au sein de celui-ci.

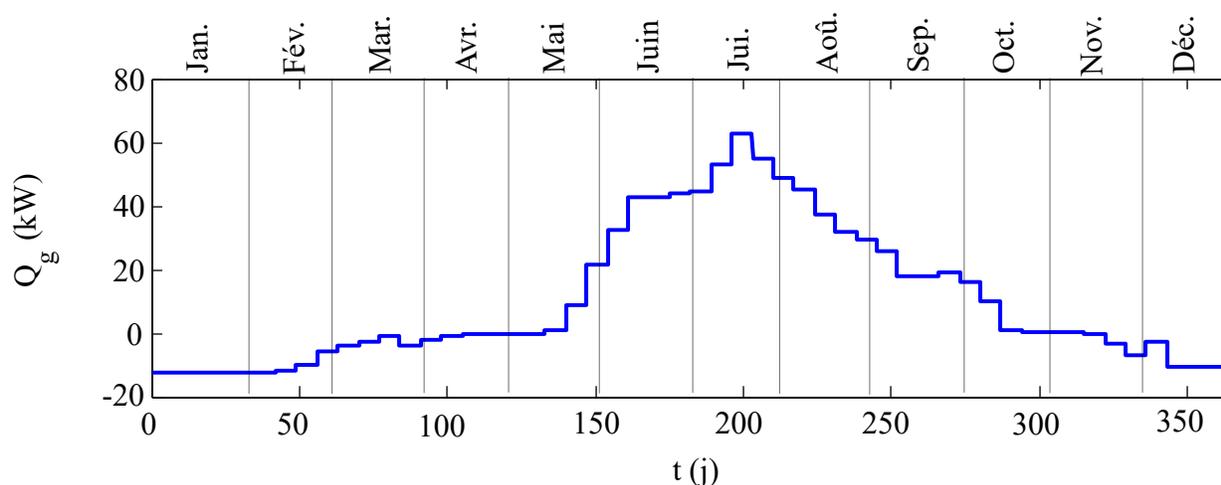


Figure 6.1 Charges au sol hebdomadaires de chauffage et de climatisation utilisées dans les simulations. Tiré de Eppner *et al.* (2016).

6.2 Écoulement homogène dans l'aquifère

6.2.1 Évolution thermique du puits

L'activation de la saignée est un élément clé du fonctionnement d'un PCP, puisqu'elle génère un écoulement d'eau souterraine en direction du puits. La Fig. 6.2, présentant l'évolution temporelle de la température à l'entrée et à la sortie du puits, avec et sans saignée, montre clairement que l'apport d'eau souterraine, ayant une température constante tout au long de l'année (environ 10 °C), atténue les fluctuations thermiques au sein du puits. Durant la période estivale, la température est réduite d'environ 10°C, alors qu'elle est augmentée de quelques degrés durant la saison froide. Dans cet exemple, l'impact de la saignée est davantage marqué l'été, puisque les charges au sol de climatisation sont supérieures aux charges de chauffage.

La différence de comportement entre les cas avec et sans saignée est également exposée à la Fig. 6.3, illustrant les profils verticaux de la température dans les fluides ascendant et descendant du puits, aux mois de janvier et juillet. Les résultats démontrent que dans l'ensemble du PCP, la température est plus basse l'hiver et plus élevée l'été, lorsque la saignée n'est pas en fonction. En renouvelant une partie de l'eau au sein du PCP, l'échange thermique par advection entre le fluide descendant et la formation géologique est accentué, permettant de limiter les oscillations thermiques au sein du PCP.

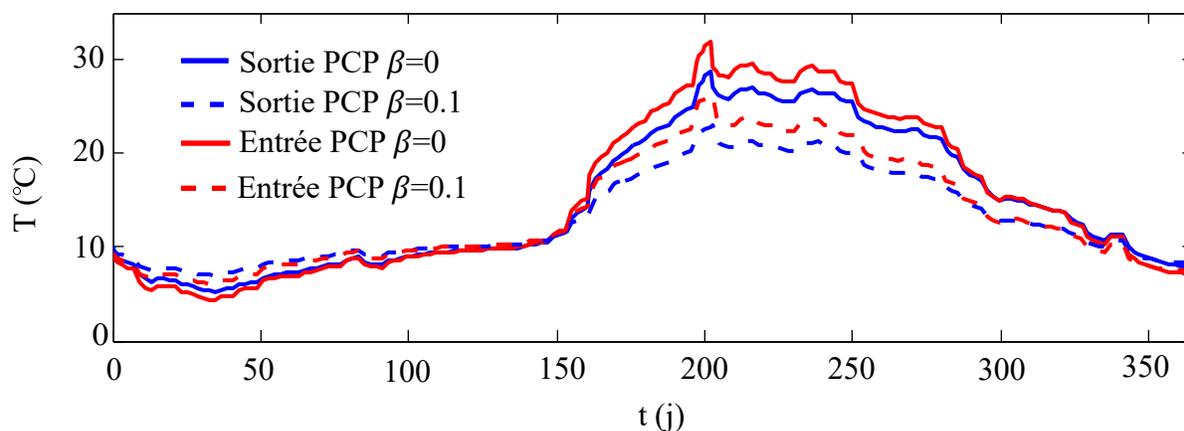


Figure 6.2 Évolution temporelle de la température, à l'entrée et à la sortie du puits, avec et sans saignée, lorsque le puits est installé dans un milieu poreux homogène.

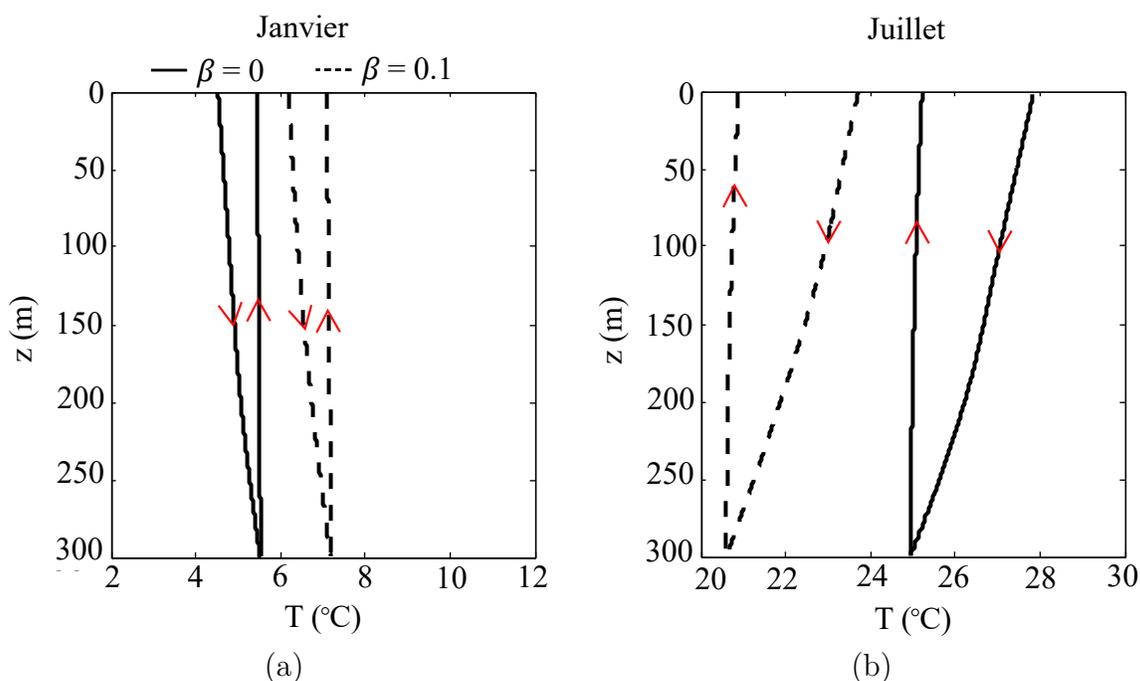


Figure 6.3 Profils verticaux de la température dans les fluides ascendant et descendant du puits, avec et sans saignée, aux mois de (a) janvier et (b) juillet, lorsque le puits est installé dans un milieu poreux homogène.

6.2.2 Évolution géochimique du puits

En plus de stabiliser la température, la saignée permet d'évacuer une partie des ions en solution, ayant pour conséquence d'atténuer les fluctuations annuelles de la concentration des espèces. Ce comportement est illustré à la Fig. 6.4 (a) pour le calcium. Une diminution de la

concentration (d'environ 10 mg/L) est observée l'été, alors qu'une augmentation (d'environ 5 mg/L) apparaît l'hiver. La différence de concentration entre les deux cas ($\beta = 0$ et $\beta = 0.1$) est proportionnelle à la variation de la température. L'ion Ca^{2+} est utilisé dans cet exemple, cependant cette tendance se maintient pour l'ensemble des espèces simulées.

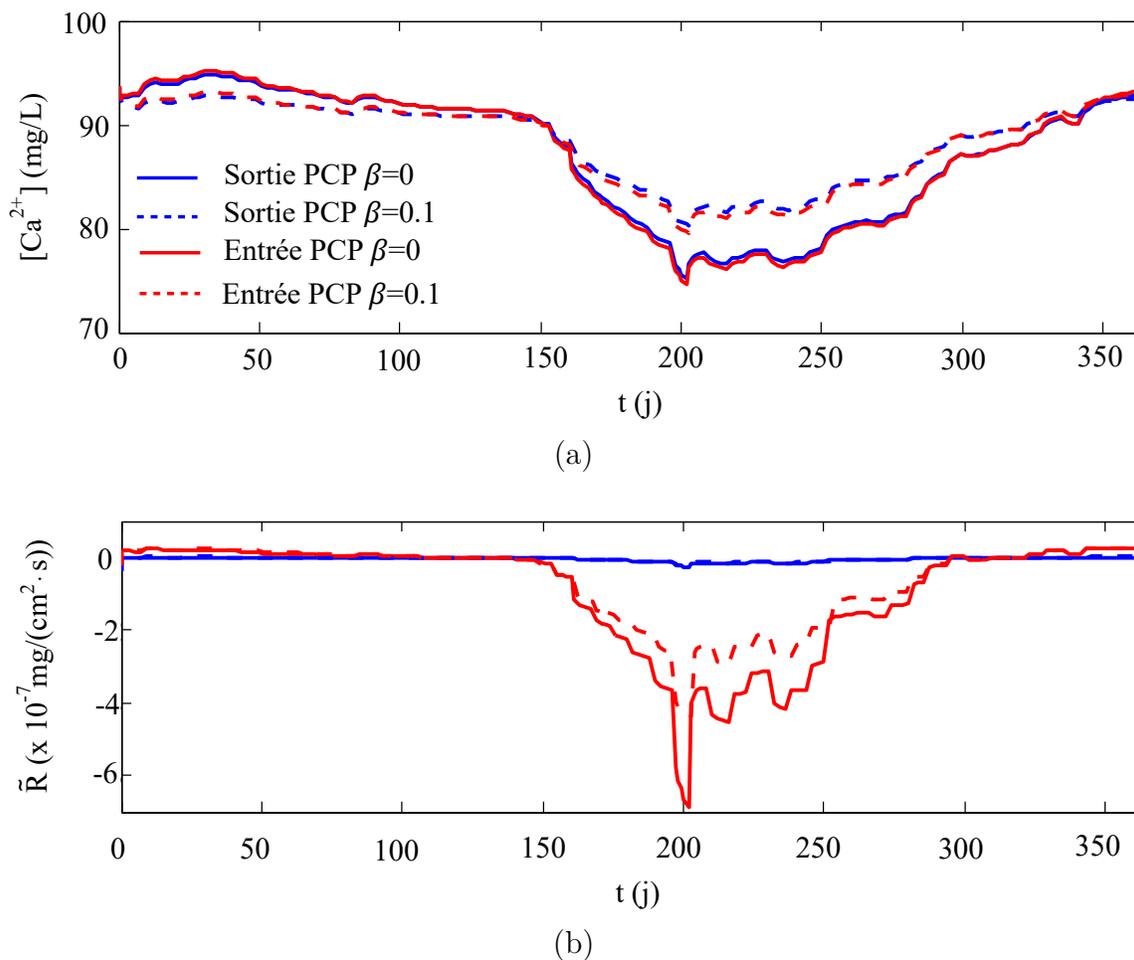


Figure 6.4 Évolution temporelle de (a) la concentration en Ca^{2+} et (b) du taux de réaction de la calcite, à l'entrée du puits et à la sortie du puits, lorsque le puits est installé dans un milieu poreux homogène.

La variation de la signature chimique de l'eau souterraine au sein du puits, sous l'influence de la saignée, a un impact direct sur le taux de réaction de la calcite. La Fig. 6.4 (b) présente l'évolution temporelle du taux de réaction de la calcite à l'entrée et à la sortie du puits, avec et sans saignée. Les résultats démontrent que le taux de précipitation observé l'été à l'entrée du puits passe de $-7 \cdot 10^{-7}$ à $-4 \cdot 10^{-7}$ mg/(cm²·s) lorsque la saignée est active, correspondant à une baisse (en valeur absolue) de 42.9 %. Dans cet exemple, étant

donné que les charges de chauffage sont relativement faibles, le taux de réaction observé l'hiver est proche de l'équilibre chimique, expliquant pourquoi l'effet de la saignée est peu visible.

Pour mieux illustrer les processus au sein du puits, les profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} et du taux de réaction de la calcite ont été tracés dans les fluides ascendant et descendant du puits, aux mois de janvier et juillet. Il apparaît clairement que la concentration en calcium au sein de la boucle souterraine est plus basse l'hiver et plus élevée l'été, lorsque la saignée est en opération (Fig. 6.5 a et b). En effet, en activant la saignée, la concentration en calcium à 300 m de profondeur passe de 94.5 à 92.7 mg/L au mois de janvier et de 78.3 à 82.1 mg/L au mois de juillet. Concernant le taux de réaction de la calcite, au mois de janvier, l'impact de la saignée est peu significatif, puisque le taux de réaction est très faible (Fig. 6.5 c). Par contre, au mois de juillet, le taux de précipitation à l'entrée du PCP passe de $-3.7 \cdot 10^{-7}$ à $-2.4 \cdot 10^{-7}$ mg/(cm² · s) lorsqu'une fraction de l'eau souterraine circulant dans l'ouvrage est renouvelée, correspondant à une baisse (en valeur absolue) de 35.1 % (Fig. 6.5 d). De plus, lorsque la saignée est active, le fluide descendant est proche de l'équilibre chimique à partir de 100 m de profondeur et ce, jusqu'à la sortie du puits. D'autre part, sans saignée, la calcite se dissout entre 50 et 300 m de profondeur, remettant ainsi des ions Ca^{2+} en solution et augmentant les risques de précipitation. Pour des questions de lisibilité, une échelle différente est utilisée en abscisse sur les Fig. 6.5 (c) et (d).

Dans le but de quantifier la précipitation et la dissolution de la calcite au sein du puits, un bilan de masse a été calculé en fonction du temps dans le tube de prélèvement, ainsi que dans la partie externe du PCP (Fig. 6.6). Un bilan de masse positif signifie que le taux de précipitation moyen sur l'ensemble de la zone étudiée est supérieur au taux de dissolution moyen et inversement lorsque le bilan est négatif. Les résultats démontrent qu'à la fin de l'année, le bilan est positif dans la partie externe du puits pour les cas avec (0.34 kg) et sans saignée (0.08 kg). En revanche, dans le tube de prélèvement, le bilan est négatif sans saignée (-0.07 kg) et légèrement positif avec saignée (0.008 kg). D'autre part, les plus grandes variations de masse apparaissent durant l'été, lorsque les variations de température sont les plus importantes. En analysant ces chiffres, il semble que la saignée ne soit pas bénéfique d'un point de vue géochimique, puisque le bilan de masse dans la partie externe du puits est plus élevé lorsque la saignée est active. Cependant, avant de tirer des conclusions, il est important d'identifier les zones du puits propices à la précipitation et à la dissolution de la calcite.

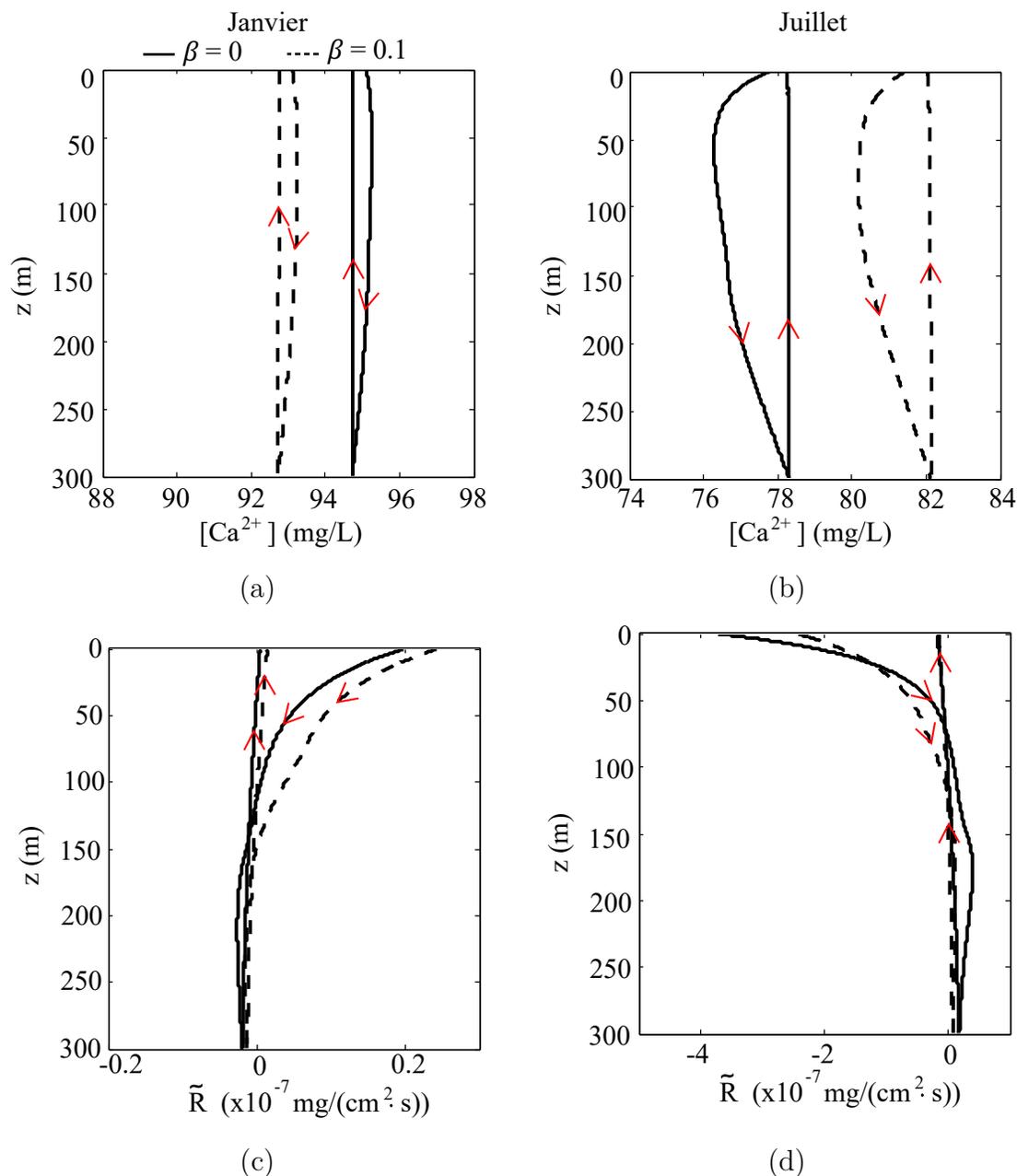


Figure 6.5 Profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} (a et b) et du taux de réaction de la calcite (c et d), dans les fluides ascendant et descendant du puits, avec et sans saignée, aux mois de janvier (colonne de gauche) et juillet (colonne de droite), lorsque le puits est installé dans un milieu poreux homogène.

La Fig. 6.7 illustre la masse de calcite précipitée ou dissoute cumulée après une année d'opération dans le tube de prélèvement et dans la partie externe du PCP. Les valeurs positives indiquent une masse précipitée, alors que les valeurs négatives font référence à une masse dissoute. Les résultats confirment que la calcite précipite principalement dans la partie externe

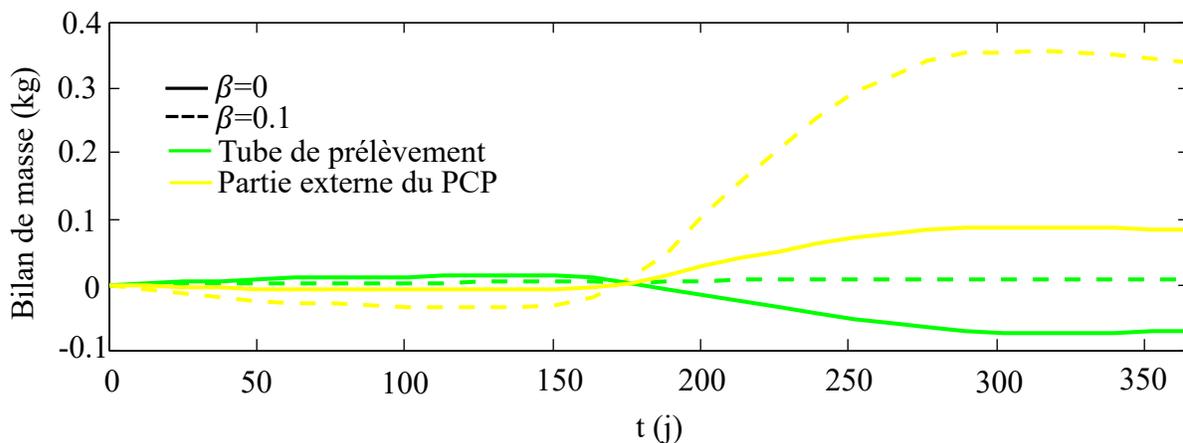


Figure 6.6 Évolution temporelle du bilan de masse dans le tube de prélèvement et dans la partie externe du puits, avec et sans saignée, lorsque le puits est installé dans un aquifère poreux homogène.

du puits, où les variations de température sont davantage marquées. De plus, dans cette zone et après une année d'opération, la masse précipitée est supérieure à la masse dissoute entre 0 et 70 m de profondeur sans saignée et entre 0 et 110 m avec saignée, puis à la base de l'ouvrage le comportement inverse est observé.

Dans les deux cas étudiés, la masse précipitée la plus importante se situe au sommet du puits. En effet, entre 0 et 10 m de profondeur, 0.24 kg de calcite a précipité sans saignée, contre 0.18 kg avec saignée (en une année). Il est important de spécifier que la calcite peut précipiter sur la paroi externe du puits, correspondant à la formation géologique et/ou sur les particules en suspension dans la phase aqueuse, qui par avection et/ou gravité vont s'accumuler à la base du puits, dans la chambre de sédimentation, comme illustré sur la Fig. 6.8. Il est toutefois peu probable qu'elle précipite sur les parois du tube de prélèvement, en raison de la faible rugosité du tuyau en PVC.

La partie externe du puits entre 0 et 10 m de profondeur comprend un volume de 0.1419 m^3 , pouvant contenir 383.13 kg de calcite dans le pire des scénarios, en considérant une masse volumique de $\text{CaCO}_{3(s)}$ de 2700 kg/m^3 . En supposant que la totalité de la calcite qui précipite entre 0 et 10 m de profondeur s'accumule sur la paroi du forage, environ 0.06 % de cette zone est colmatée après une année d'opération lorsque le puits est opéré sans saignée, contre 0.05 % avec saignée. Dans ce cas, la masse de calcite qui est dissoute à la base du puits ne correspond pas à la masse précipitée durant l'opération, mais plutôt à la

formation géologique et/ou à des particules en suspension initialement présentes dans le puits.

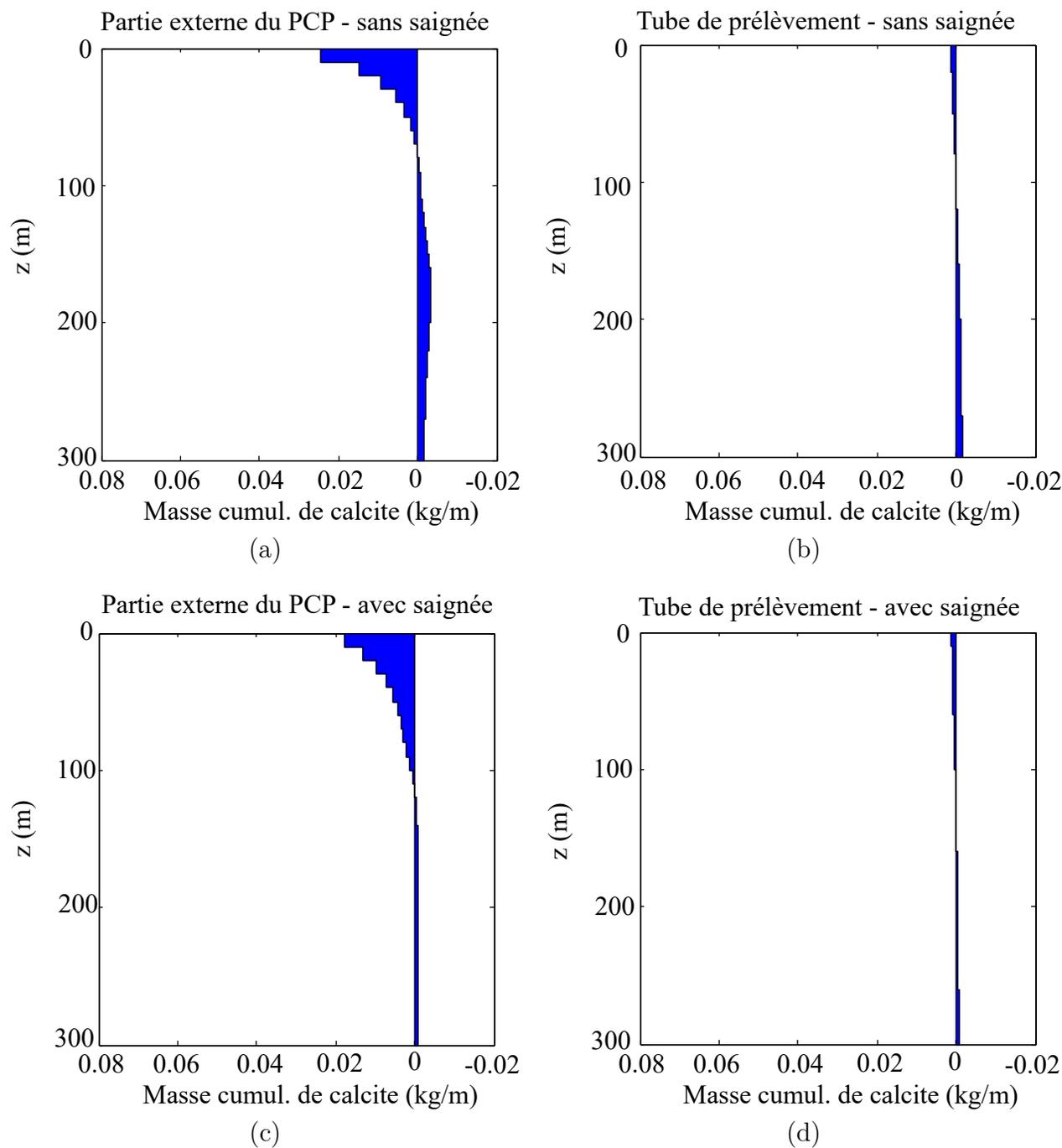


Figure 6.7 Masse de calcite précipitée (valeur positive) ou dissoute (valeur négative) cumulée à la fin de l'année d'opération, dans la partie externe du PCP (a et c) et dans le tube de prélèvement (b et d), sans saignée (première ligne) et avec saignée (deuxième ligne), lorsque le puits est installé dans un milieu poreux homogène.

En supposant maintenant que la calcite précipite uniquement sur les particules en suspension et que la totalité de la masse (0.08 kg sans saignée et 0.34 kg avec saignée, selon le bilan de masse, voir Fig. 6.8) s'accumule dans la chambre de sédimentation de 0.1016 m de rayon, l'épaisseur de la couche de calcite après une année est de 0.09 cm sans saignée et 0.39 cm avec saignée. Dans ce cas, la masse qui est dissoute à la base de l'ouvrage peut potentiellement être de la calcite qui a précipité durant l'opération du puits. Il peut donc être conclu que la saignée est bénéfique d'un point de vue géochimique, si l'accumulation minérale s'effectue sur la paroi du forage. Cependant, en supposant que la calcite précipite sur les particules en suspension, le cas sans saignée est plus avantageux, puisque la dissolution dans la partie inférieure du puits réduit l'accumulation.

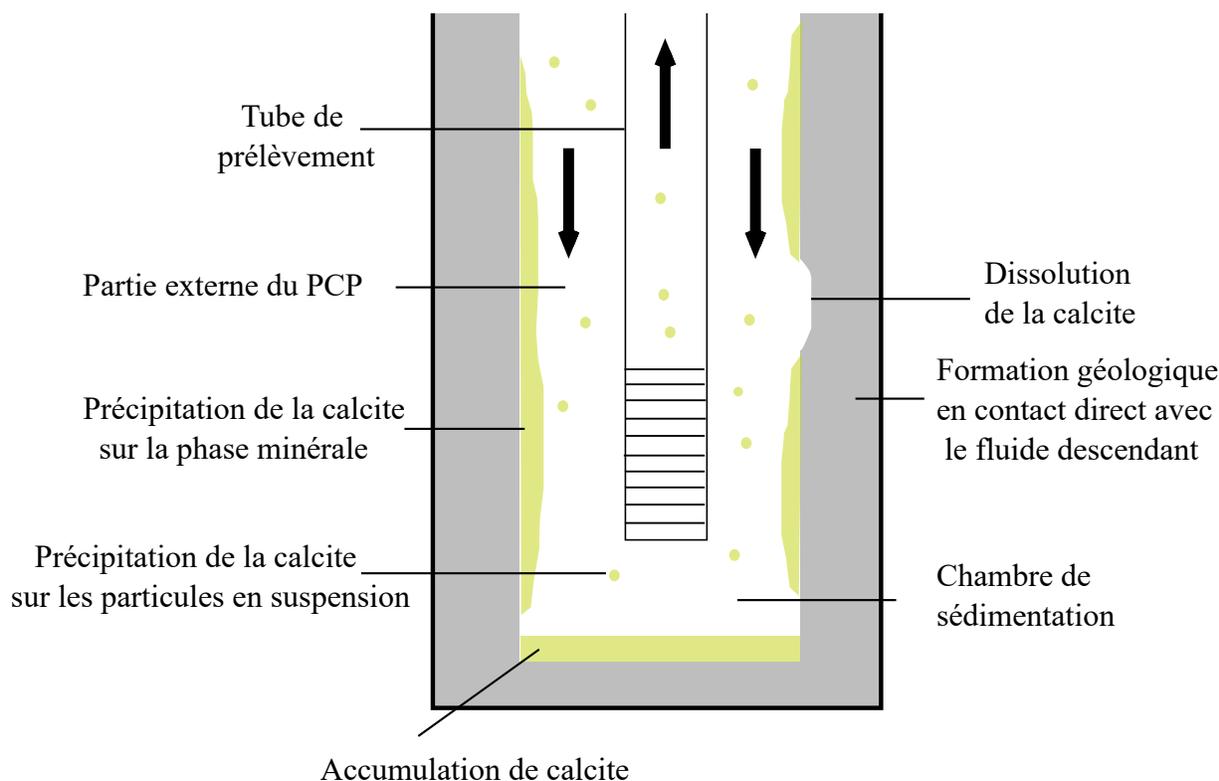


Figure 6.8 Illustration des mécanismes de précipitation et de dissolution de la calcite au sein d'un puits à colonne permanente.

L'accumulation de calcite au sein des PCP peut causer des problèmes opérationnels, tels que :

1. augmenter les pertes de charge et le rabattement au sein du puits, puisque la rugosité de la surface des tuyaux ou les restrictions hydrauliques sont plus importante ;

2. diminuer le transfert de chaleur par conduction et advection entre l'eau souterraine et la matrice géologique; et
3. limiter le volume de recirculation, en réponse à la diminution du volume du PCP, causée par la précipitation de la calcite sur la paroi du forage.

Cependant, même en sachant que le puits peut être opéré sur plusieurs années, les masses précipitées sont très faibles et ne semblent pas causer de problème pour l'exploitation du puits. Le taux de précipitation observé à l'entrée du PCP suggère toutefois que la calcite peut également précipiter dans l'échangeur de chaleur, où les variations de température sont engendrées, ainsi que dans le réseau de tuyaux. Le transfert de chaleur entre l'eau souterraine et le liquide réfrigérant de l'échangeur de chaleur peut par conséquent être réduit, alors que les pertes de charges et/ou le différentiel de pression peuvent augmenter, puisque la rugosité de la surface des tuyaux est plus importante. Dans l'échangeur de chaleur, l'eau souterraine circule dans des volumes plus restreints que dans le puits, signifiant que les espaces sont plus rapidement colmatés. La précipitation de la calcite pourrait donc être davantage problématique dans les équipements mécaniques, ainsi que dans la tuyauterie.

6.3 Écoulement préférentiel dans une fracture

Dans un aquifère fracturé, l'écoulement de l'eau souterraine se produit principalement au sein des fractures, qui en raison de leur conductivité hydraulique élevée créent des chemins d'écoulement préférentiels (voir Fig. 6.9). Nguyen *et al.* (2015b) ont observé que la présence d'une zone fracturée au sein de l'aquifère était bénéfique pour le coefficient de performance de la pompe à chaleur, quand la saignée est active. L'objectif de cette section est de définir si une fracture intégrée dans l'aquifère peut également être bénéfique pour réduire la précipitation de la calcite au sein du puits, en sachant que les mécanismes de précipitation et de dissolution de la calcite affectent la perméabilité de la fracture.

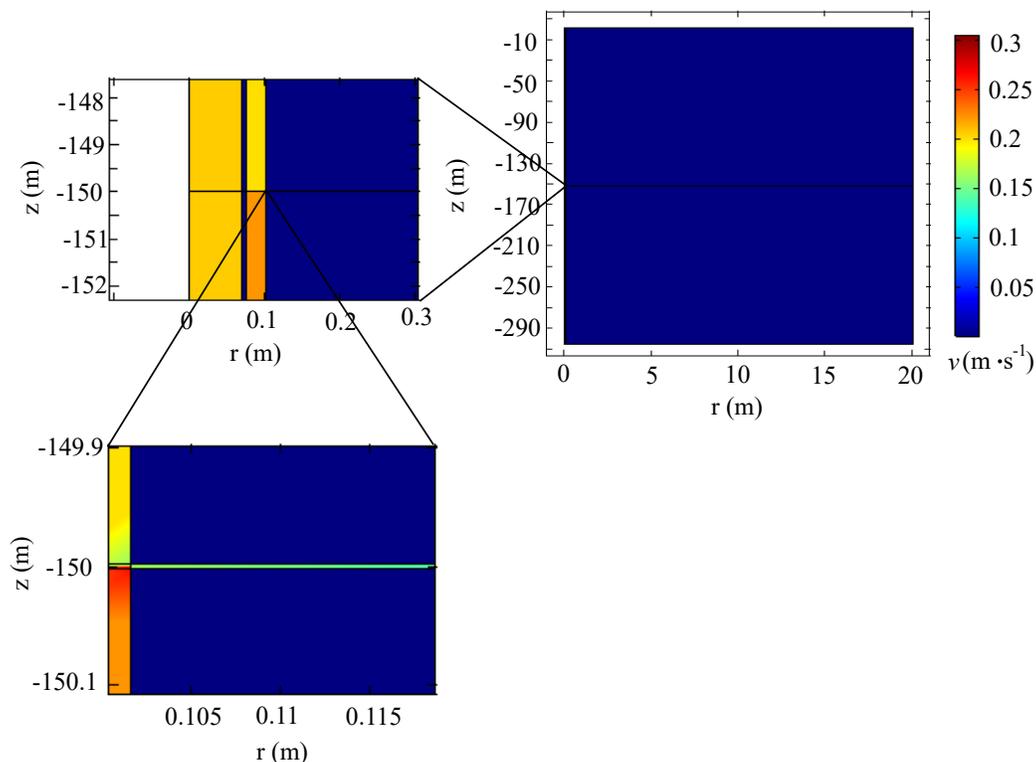


Figure 6.9 Illustration de la vitesse de Darcy sur l'ensemble du domaine, lorsque la saignée est active.

6.3.1 Évolution thermique du puits

En présence d'un aquifère fracturé, la saignée permet également de réduire les fluctuations annuelles de la température, mesurées à l'entrée et à la sortie du puits (Fig. 6.10), ainsi que dans la totalité de l'ouvrage (Fig. 6.11). La variation abrupte de la température observée à 150 m de profondeur confirme que l'écoulement engendré par la saignée se produit principalement dans la fracture, contrairement au cas illustré à la section précédente, où l'apport d'eau s'effectue de façon homogène sur toute la longueur du puits. En effet, la température passe de 22.79 à 21.75 °C entre 149.985 et 150.015 m de profondeur durant l'été, alors qu'elle augmente de 7.63 à 7.87 °C durant l'hiver. En vue des importantes variations de la température, l'échelle des abscisses diffère entre les Fig. 6.11 (a) et (b).

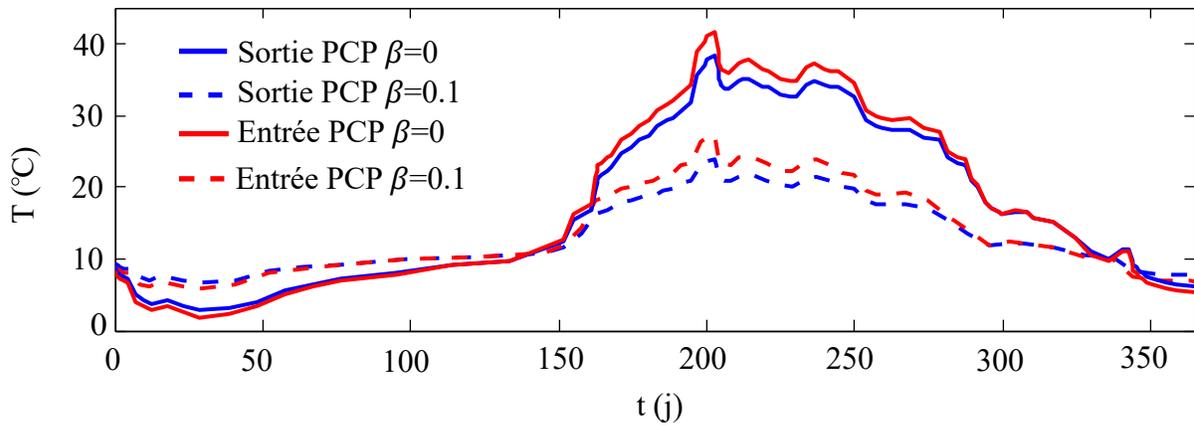


Figure 6.10 Évolution temporelle de la température, à l'entrée et à la sortie du puits, avec et sans saignée, lorsque le puits est installé dans un aquifère fracturé.

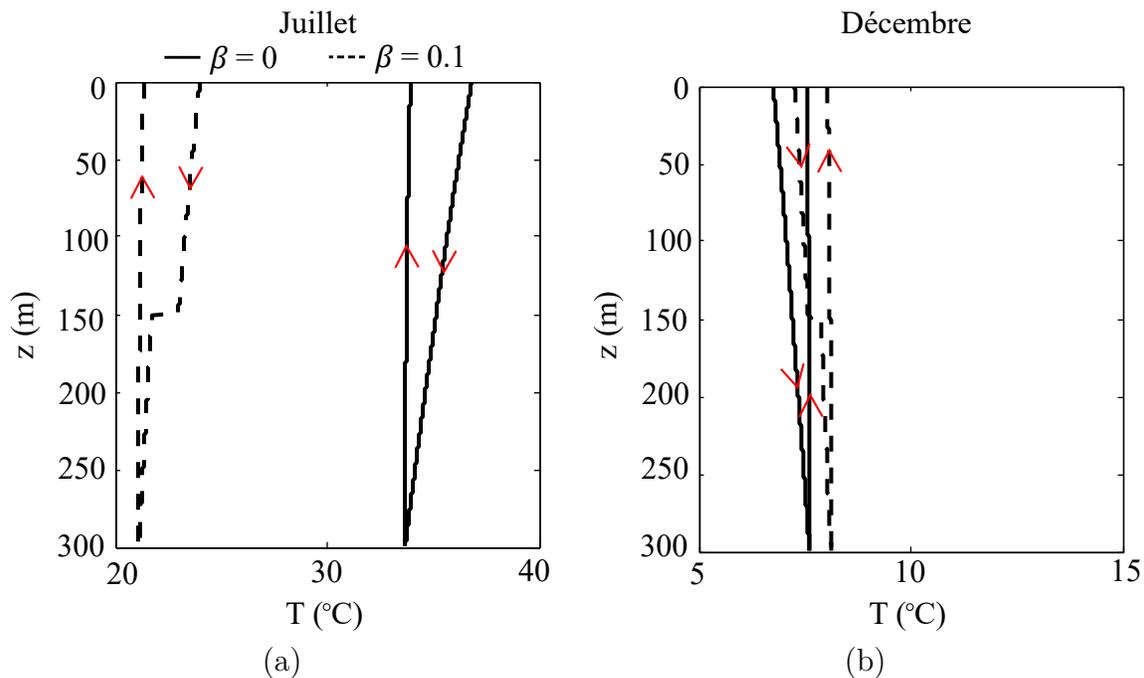


Figure 6.11 Profils verticaux de la température dans les fluides ascendant et descendant, avec et sans saignée, aux mois de (a) juillet et (b) décembre, lorsque le puits est installé dans un aquifère fracturé. Tiré de Eppner *et al.* (2016)

La température au sein du puits est différente lorsque celui est installé dans un aquifère fracturé ou dans un milieu poreux équivalent. Pour faciliter la comparaison, les profils verticaux de la température dans les fluides ascendant et descendant du puits, observés au mois de juillet, sont illustrés sur la même figure, pour les deux cas (Fig 6.12). Sans saignée, les résultats attendus étaient d'observer le même comportement thermique, que le puits soit

installé dans un milieu poreux équivalent ou fracturé. Cependant, même sans saignée, une partie de l'eau réinjectée au sommet de la partie externe du PCP s'infiltré dans la matrice géologique, engendrant un écoulement d'eau souterraine en direction de la base de l'ouvrage. La conductivité hydraulique de la matrice poreuse ($5.36 \cdot 10^{-5}$ m/s) correspond à la conductivité hydraulique équivalente de l'aquifère fracturé (intégrant la conductivité hydraulique de la fracture et de la matrice géologique). Cependant, au sommet du système, l'aquifère fracturé est moins perméable ($1 \cdot 10^{-6}$ m/s) que le milieu poreux équivalent, dont la conductivité hydraulique est homogène sur toute sa longueur. De ce fait, dans le cas présentant l'aquifère fracturé, l'eau réinjectée dans le puits s'infiltré plus difficilement dans la formation géologique. Un léger rabattement se produit au sein du puits et un apport d'eau faible est ainsi observé au sein de l'ouvrage par la base du PCP. L'eau du puits est donc davantage renouvelée, lorsque le puits est installé dans un milieu poreux équivalent. Durant l'été, la température mesurée dans le puits installé dans le milieu poreux équivalent est conséquemment plus basse que la température observée dans le puits foré dans l'aquifère fracturé. Un aquifère poreux est donc plus avantageux, si une opération sans saignée est envisagée, puisque la température au sein du système est réduite durant la période estivale. En effet, à la base du puits par exemple, la température passe de 33.7 à 24.9°C. D'autre part, lorsque la saignée est active, la température au sein du PCP est similaire pour les deux types d'aquifère, puisque la conductivité hydraulique équivalente de la matrice géologique est identique. Le même comportement est observé durant l'hiver.

Ces observations sont contradictoires aux résultats obtenus par Nguyen *et al.* (2015b), illustrant qu'une zone fracturée est bénéfique pour le coefficient de performance de la PAC, lorsque la saignée est active. Cette différence peut être expliquée par le fait qu'une saignée constante de 10 % est utilisée dans cette étude, alors que dans le modèle de Nguyen *et al.* (2015b), la saignée s'active uniquement lorsqu'elle est nécessaire. Un taux de saignée variable est davantage réaliste. Cependant, en vue de la complexité du modèle développé dans le cadre de cette thèse, un taux de saignée constant est utilisé pour des raisons de simplification.

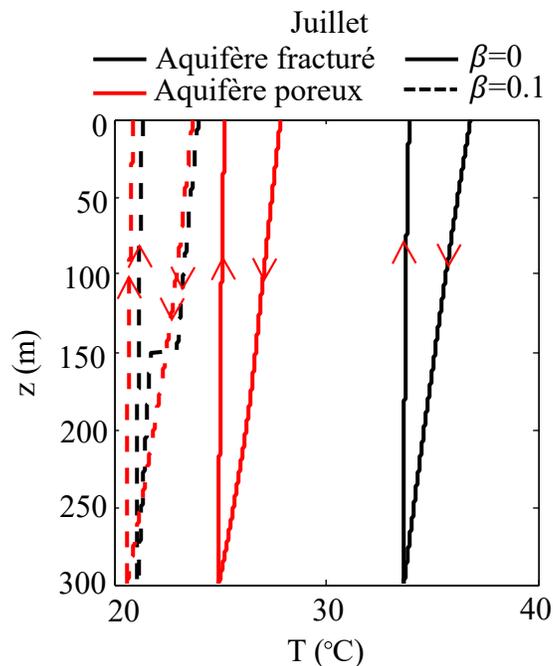


Figure 6.12 Profils verticaux de la température dans les fluides ascendant et descendant, avec et sans saignée, au mois de juillet, lorsque le puits est installé dans un milieu poreux équivalent et dans un aquifère fracturé.

6.3.2 Évolution géochimique du puits

L'eau en provenance de la fracture modifie la température de l'eau souterraine au sein du puits, ainsi que sa composition chimique, puisque deux eaux, ayant des signatures chimiques différentes, se mélangent à 150 m de profondeur (voir Fig. 6.9). Ce comportement est illustré à la Fig. 6.13, présentant les profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} et du taux de réaction de la calcite, dans les fluides ascendant et descendant du puits, aux mois de juillet et décembre. Il est important de spécifier que pour des raisons de lisibilité, la partie supérieure du fluide descendant n'est pas illustrée à la Fig. 6.13 (c), pour le cas sans saignée. De plus, la même échelle n'a pas pu être utilisée pour l'axe des abscisses, puisque l'amplitude des paramètres est différente entre les mois de juillet et décembre.

Au mois de juillet, l'injection d'eau chaude au sommet du puits favorise la précipitation de la calcite, réduisant la concentration en Ca^{2+} (Fig. 6.13 a et c). De plus, le taux de précipitation à l'entrée du puits est plus important sans saignée ($-8.67 \cdot 10^{-7} \text{ mg}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$) qu'avec saignée ($-3.09 \cdot 10^{-7} \text{ mg}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$). Ces résultats indiquent que la saignée permet de réduire le taux de précipitation à l'entrée du puits de 64.36 % (en valeur absolue). Lorsque la totalité

de l'eau pompée est réinjectée dans le PCP, la baisse conjointe de la température et de la concentration en calcium conduit le fluide descendant dans un état de sous-saturation par rapport à la calcite, à environ 100 m de profondeur (Fig. 6.13 c). La dissolution est ainsi favorisée à la base de la partie externe du PCP, ainsi que dans le tube de prélèvement. Par contre, en activant la saignée, l'apport d'eau conduit le fluide descendant dans un état proche de l'équilibre chimique à environ 200 m de profondeur (Fig. 6.13 c). En comparaison avec le fluide descendant, l'eau en provenance de la fracture est plus riche en calcium à cause de la précipitation de la calcite observée au sommet du puits et plus froide, expliquant les changements rapides du taux de réaction de la calcite à environ 150 m de profondeur. L'apport de calcium augmente le taux de précipitation, qui diminue quasiment instantanément en raison de la diminution de la température.

Au mois de décembre, le comportement inverse est observé. L'injection d'eau froide au sommet du puits favorise la dissolution de la calcite, élevant légèrement la concentration en calcium (Fig. 6.13 b et d). Sans saignée, l'augmentation simultanée de la température et de la concentration en Ca^{2+} conduit le fluide descendant dans un état de sursaturation par rapport à la calcite à environ 150 m de profondeur, favorisant la précipitation à la base de la partie externe du PCP et dans le tube de prélèvement. Lorsque la saignée est active, le taux de réaction de la calcite est proche de 0 à la base de la partie externe du PCP et dans le tube de prélèvement, grâce à l'apport d'eau proche de l'équilibre chimique en provenance de la fracture.

En vue de comparer l'évolution de la signature chimique de l'eau souterraine au sein du puits pour les deux types d'aquifère, les profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} dans les fluides ascendant et descendant, mesurés au mois de juillet, sont illustrés sur la même figure (Fig 6.14). Il apparaît clairement que lorsque la saignée est active, la tendance des courbes est similaire, que le puits soit installé dans un milieu poreux équivalent ou fracturé. Cependant, sans saignée, le comportement thermique, ainsi que l'apport d'eau au sein du puits diffèrent pour les deux cas étudiés. Étant donné que l'été, en présence d'un milieu poreux équivalent, la température au sein du puits est plus basse qu'en présence d'un aquifère fracturé (voir Fig. 6.12) et l'apport d'eau en provenance de la matrice géologique plus important, la concentration en calcium est plus élevée. Pour rappel, la conductivité hydraulique équivalente du milieu poreux et de l'aquifère fracturé sont identiques, signifiant que la matrice géologique de l'aquifère fracturé (excluant la fracture) a une conductivité hydraulique inférieure au milieu poreux équivalent. Cette caractéristique explique la différence de la signature géochimique de l'eau souterraine entre les deux cas. Par exemple, à la base du puits, la concentration est

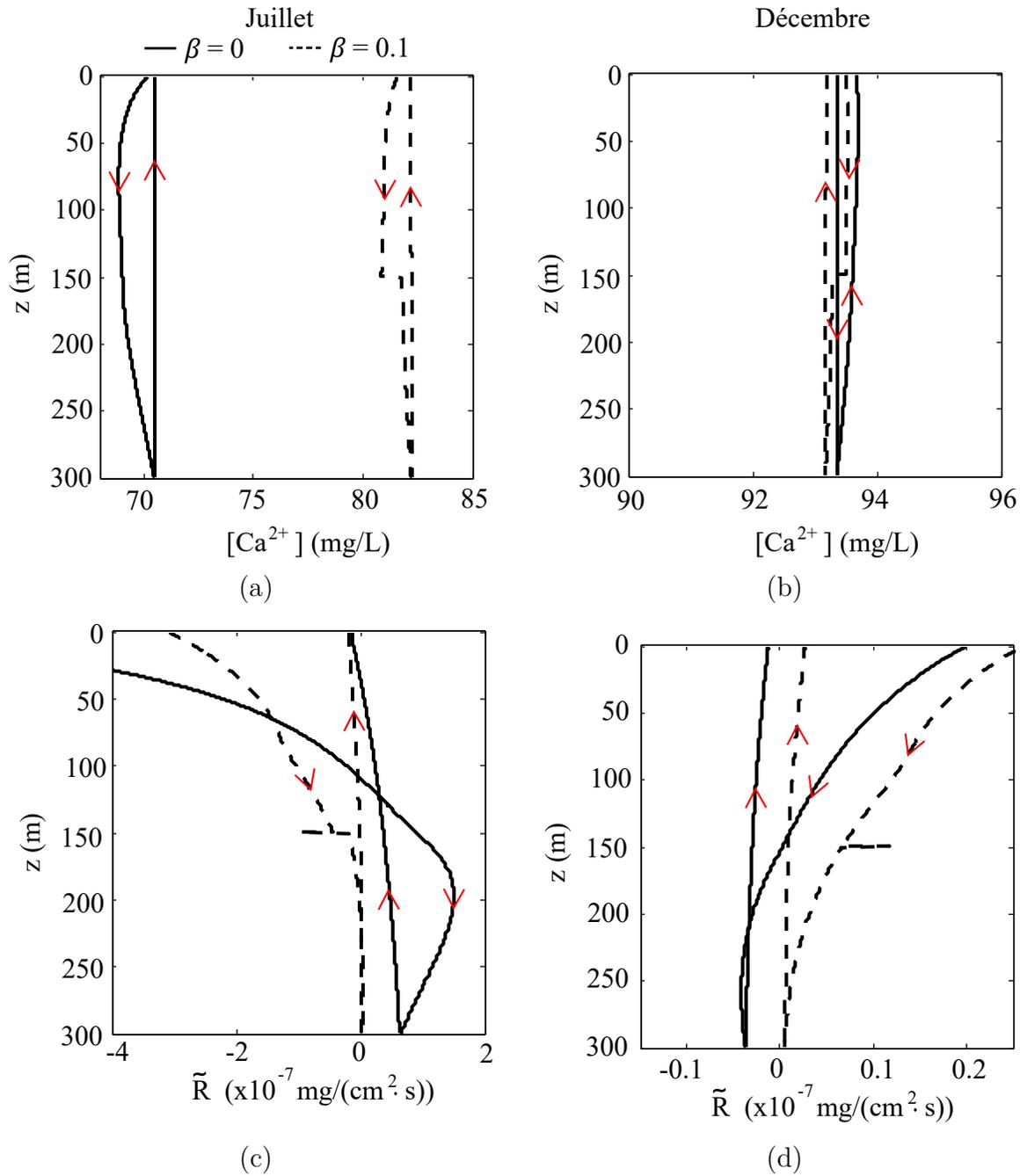


Figure 6.13 Profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} (a et b) et du taux de réaction de la calcite (c et d), dans les fluides ascendant et descendant, avec et sans saignée, au mois de juillet (colonne de gauche) et décembre (colonne de droite), lorsque le puits est installé dans un aquifère fracturé. Tiré de Eppner *et al.* (2016)

de 70.5 mg/L lorsque l'aquifère est fracturé et de 78.31 mg/L quand le milieu est poreux équivalent, signifiant que la baisse importante de la concentration en Ca^{2+} au sein du puits durant la période estivale est limitée lorsque le milieu est poreux équivalent.

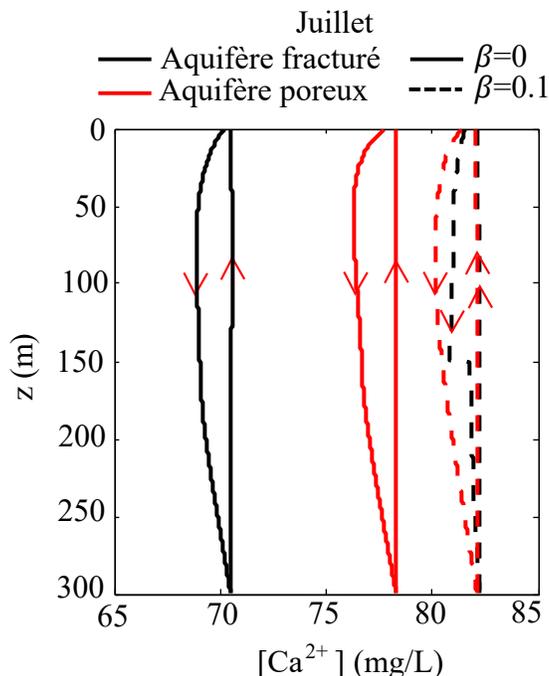


Figure 6.14 Profils verticaux de la concentration en calcium dans les fluides ascendant et descendant, avec et sans saignée, au mois de juillet, lorsque le puits est installé dans un milieu poreux équivalent et dans un aquifère fracturé.

Dans le but de quantifier la précipitation et la dissolution de la calcite au sein du puits, le bilan de masse a été calculé en fonction du temps, dans la partie externe du PCP et dans le tube de prélèvement (Fig. 6.15). Pour rappel, un bilan positif signifie que le taux de précipitation moyen est supérieur au taux de dissolution moyen et inversement lorsque le bilan est négatif. Les résultats démontrent qu'après une année d'opération, le bilan est positif dans la partie externe du puits (0.95 kg) et dans le tube de prélèvement (0.03 kg), lorsque la saignée est active. Par contre, sans saignée, il est positif dans la partie externe du PCP (0.25 kg) et négatif dans le tube de prélèvement (-0.61 kg). Similairement au cas présenté à la section précédente, les variations de masse se produisent principalement durant l'été, lorsque les changements de température sont importants. Finalement, ces valeurs ne permettent pas de conclure directement que la saignée n'est pas bénéfique pour contrôler la précipitation de la calcite dans un aquifère fracturé, car il est essentiel d'observer dans quelles zones du puits la précipitation et la dissolution de la calcite sont favorisées.

La Fig. 6.16 illustre la masse de calcite précipitée ou dissoute cumulée après une année d'opération, dans la partie externe du PCP et dans le tube de prélèvement. Similairement au cas présenté à la section précédente, la calcite précipite principalement dans la partie externe du puits. Dans cette zone, la masse précipitée est supérieure à la masse dissoute entre 0 et

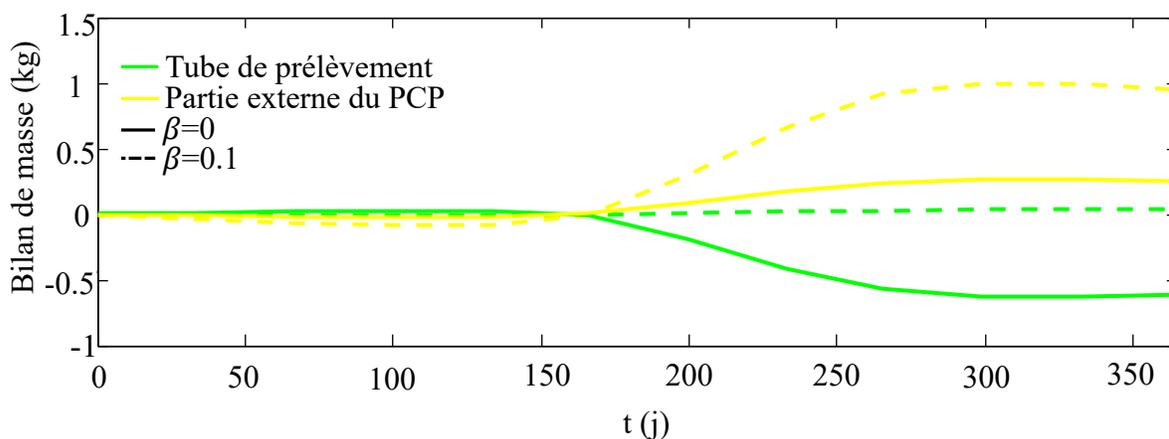


Figure 6.15 Évolution temporelle du bilan de masse dans le tube de prélèvement et dans la partie externe du puits, avec et sans saignée, lorsque le puits est installé dans un aquifère fracturé.

100 m de profondeur sans saignée et entre 0 et 180 m avec saignée. À la base du puits, l'inverse est observé pour le cas sans saignée, alors qu'en activant la saignée, le bilan de masse devient pratiquement nul à la base de l'ouvrage.

Dans les deux cas étudiés, la masse précipitée la plus importante se situe au sommet du puits. En effet, entre 0 et 10 m de profondeur, 0.47 kg de calcite a précipité sans saignée, contre 0.25 kg avec saignée. Cette zone du puits comprend un volume de 0.1419 m^3 , pouvant contenir 383.13 kg de calcite dans le pire des scénarios. En supposant que la totalité de la calcite qui précipite entre 0 et 10 m de profondeur s'accumule sur la paroi du forage, environ 0.12 % de cette zone est colmatée après une année d'opération lorsque le puits est opéré sans saignée, contre 0.07 % avec saignée.

En supposant maintenant que la calcite précipite uniquement sur les particules en suspension et que la totalité de la masse (0.25 kg sans saignée et 0.98 kg avec saignée, selon le bilan de masse, voir Fig. 6.15) s'accumule dans la chambre de sédimentation de 0.1016 m de rayon, l'épaisseur de la couche de calcite après une année est de 0.29 cm sans saignée et 1.12 cm avec saignée. Il peut donc être conclu que la saignée est bénéfique d'un point de vue géochimique, si la calcite s'accumule sur la paroi du forage. Cependant, en imaginant qu'elle s'amoncelle dans la chambre de sédimentation, le cas sans saignée est plus avantageux, puisque la dissolution observée à la base de l'ouvrage permet de réduire l'accumulation. Il est toutefois important de mentionner que les masses précipitées sont relativement faibles par rapport à

la taille du puits (moins de 1% du volume du puits est colmaté).

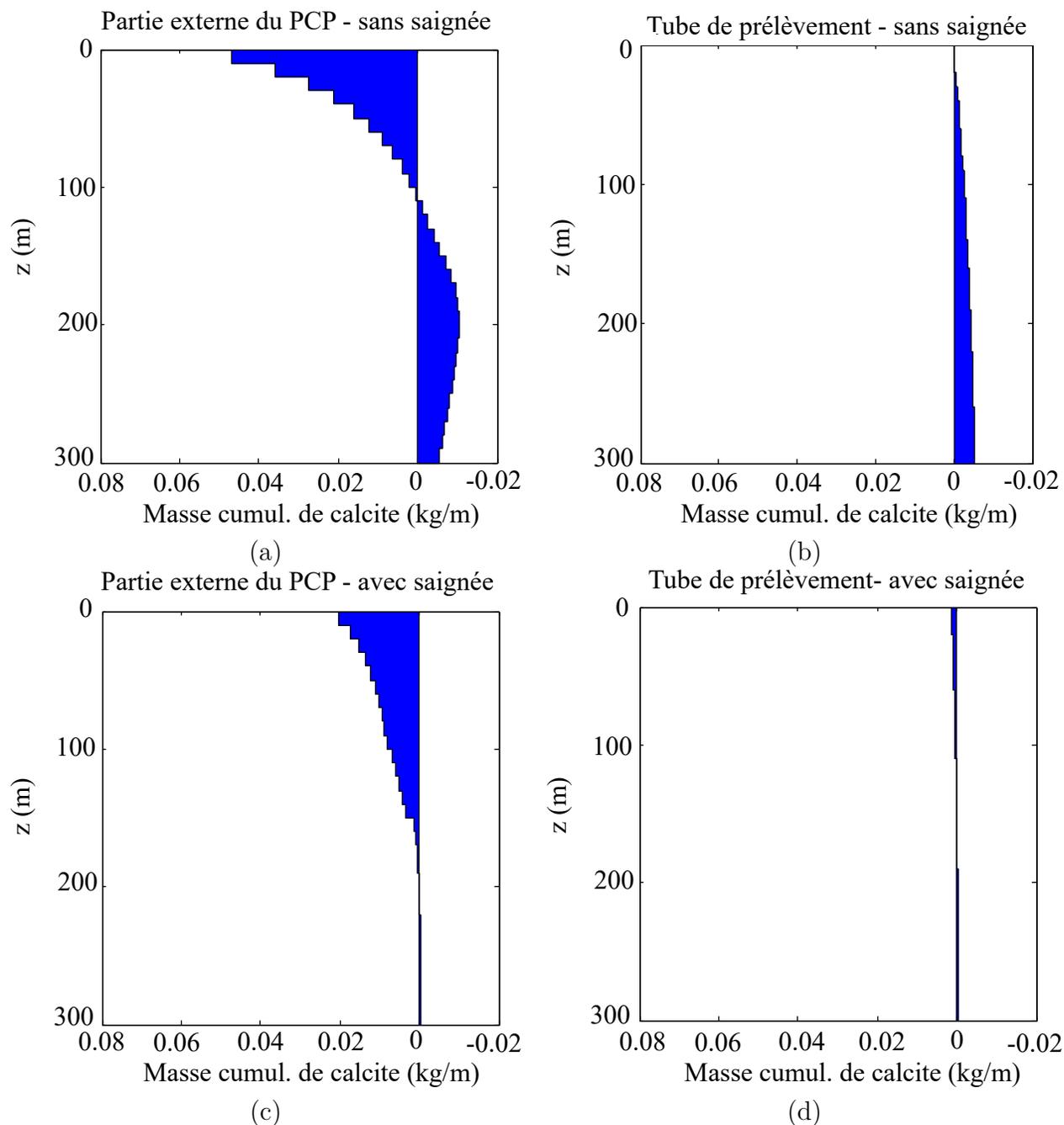


Figure 6.16 Masse de calcite précipitée (valeur positive) ou dissoute (valeur négative) cumulée après une année d'opération, dans le tube de prélèvement et dans la partie externe du puits, avec et sans saignée, lorsque le PCP est installé dans un aquifère fracturé.

6.3.3 Évolution thermique de la fracture

Il est important d'observer les processus THG qui se produisent dans la fracture, car ils peuvent considérablement affecter le comportement du puits. Par exemple, la précipitation de la calcite peut colmater ce chemin d'écoulement préférentiel, réduisant subséquemment l'apport d'eau au sein du puits, ainsi que l'effet bénéfique de la saignée sur le COP du système. D'autre part, la dissolution de la fracture peut augmenter les risques de précipitation au sein du PCP et des équipements mécaniques, puisqu'en remettant des ions Ca^{2+} en solution, l'état de saturation par rapport à la calcite augmente. L'ensemble de ces processus sont donc illustrés dans cette section.

L'impact de l'injection et de l'extraction de chaleur dans le puits se ressent dans la fracture, jusqu'à 8 m du centre de l'ouvrage. Ce rayon d'influence est mis en évidence à la Fig. 6.17, illustrant les profils radiaux de la température à 150 m de profondeur. Sans saignée, la température de l'eau au sein de la fracture diminue en s'approchant du puits, entre janvier et mai, en raison de l'extraction de chaleur au sein du système (Fig. 6.17 a). L'été et jusqu'au mois d'octobre, la température augmente, puisque le système opère en mode climatisation, signifiant que la chaleur du bâtiment est réinjectée dans le puits. Aux mois de novembre et décembre, la température de l'eau augmente à environ 8 m, puis diminue en s'approchant du puits. Cette augmentation de chaleur est expliquée par l'impact thermique de l'été précédent. L'injection de chaleur au sein du puits durant l'été a eu pour effet de réchauffer l'aquifère. Ce comportement est également illustré aux Fig. 6.18 et 6.19, présentant la distribution de la température au sein du puits, de l'aquifère et de la fracture, aux mois de juillet et décembre. L'impact thermique de la saison estivale est clairement illustré par une zone plus chaude au sein de l'aquifère, entre 0.5 et 10 m du centre du puits (Fig. 6.18 b et Fig. 6.19 b).

En activant la saignée, les fluctuations de la température au sein de la fracture diminuent considérablement, étant donné que l'eau entre dans la fracture, à la paroi latérale du modèle, à une température constante (d'environ 10 °C), tout au long de l'année (Fig. 6.17 b). En effet, sans saignée, la température au sein de la fracture varie entre 5 et 45 °C, alors qu'en activant la saignée, elle est proche de 10 °C sur l'ensemble de la fracture, sauf proche du puits où elle varie entre 7 et 22 °C. Durant l'été, l'eau souterraine circulant dans la fracture a donc tendance à refroidir l'aquifère environnant, ainsi que le fluide descendant du PCP, tel qu'illustré à la Fig. 6.19 (a). À l'inverse, l'hiver, l'eau au sein de la fracture réchauffe l'aquifère, ainsi que le fluide descendant (Fig. 6.19 b). La saignée permet donc de réduire les fluctuations annuelles de la température au sein de l'ouvrage géothermique.

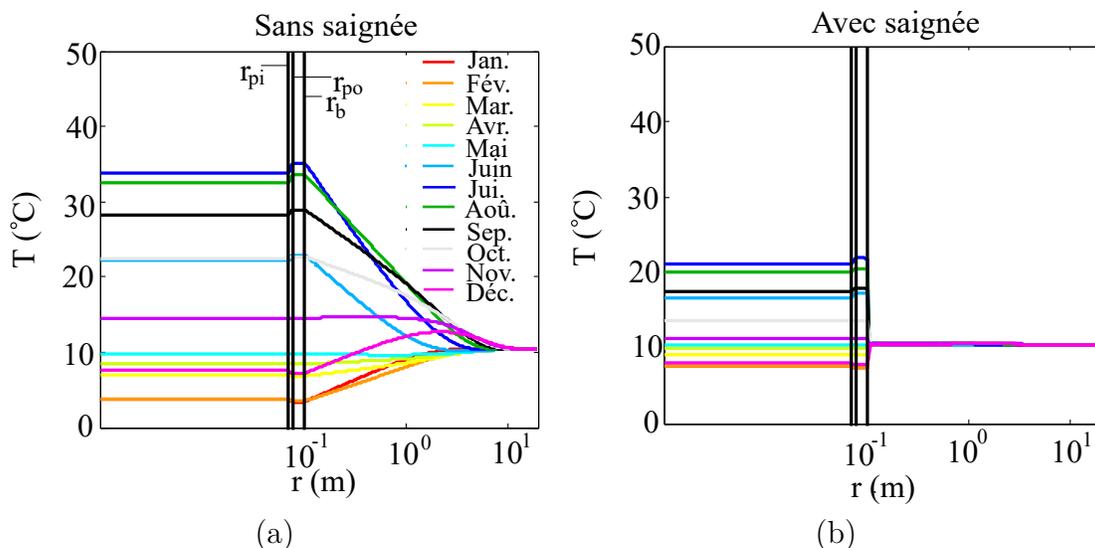


Figure 6.17 Profils radiaux de la température au sein la fracture, (a) sans saignée et (b) avec saignée.

6.3.4 Évolution géochimique de la fracture

Les variations annuelles de la température influencent fortement la signature chimique de l'eau souterraine circulant dans la fracture. La Fig. 6.20 présente les profils radiaux de la concentration en Ca^{2+} et du taux de réaction de la calcite au sein de la fracture, avec et sans saignée. Pour les deux cas ($\beta = 0$ et $\beta = 0.1$), la concentration en calcium diminue l'été (de 91 à 70 mg/L sans saignée et de 91 à 85 mg/L avec saignée) et augmente l'hiver (de 91 à 98 mg/L sans saignée et de 91 à 93 mg/L avec saignée) en s'approchant du puits (Fig. 6.20 a et b). Concernant le taux de réaction de la calcite au sein de la fracture, les résultats attendus étaient d'observer de la précipitation proche du puits durant l'été due à l'augmentation de la température et de la dissolution durant l'hiver à la suite de la baisse de la température. Cependant, les Fig. 6.20 (c) et (d) indiquent le comportement inverse. Les paragraphes suivants visent à expliquer ce phénomène. Finalement, il est important de noter que l'échelle de l'axe des ordonnées diffère pour les Fig. 6.20 (c) et (d) pour des raisons de lisibilité.

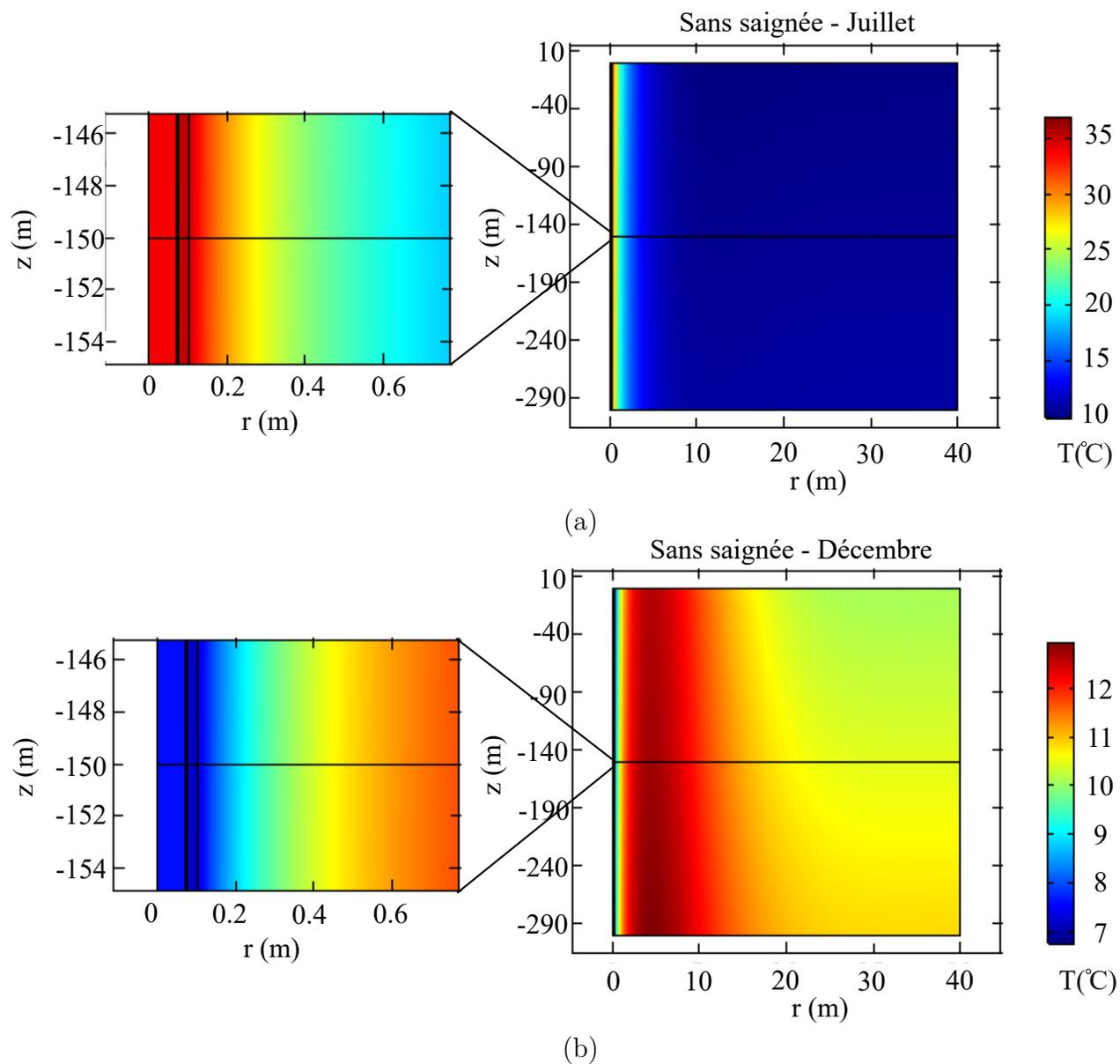


Figure 6.18 Distribution de la température dans le puits, la fracture et l'aquifère environnant, au mois de (a) juillet et (b) décembre, lorsque le système est opéré sans saignée.

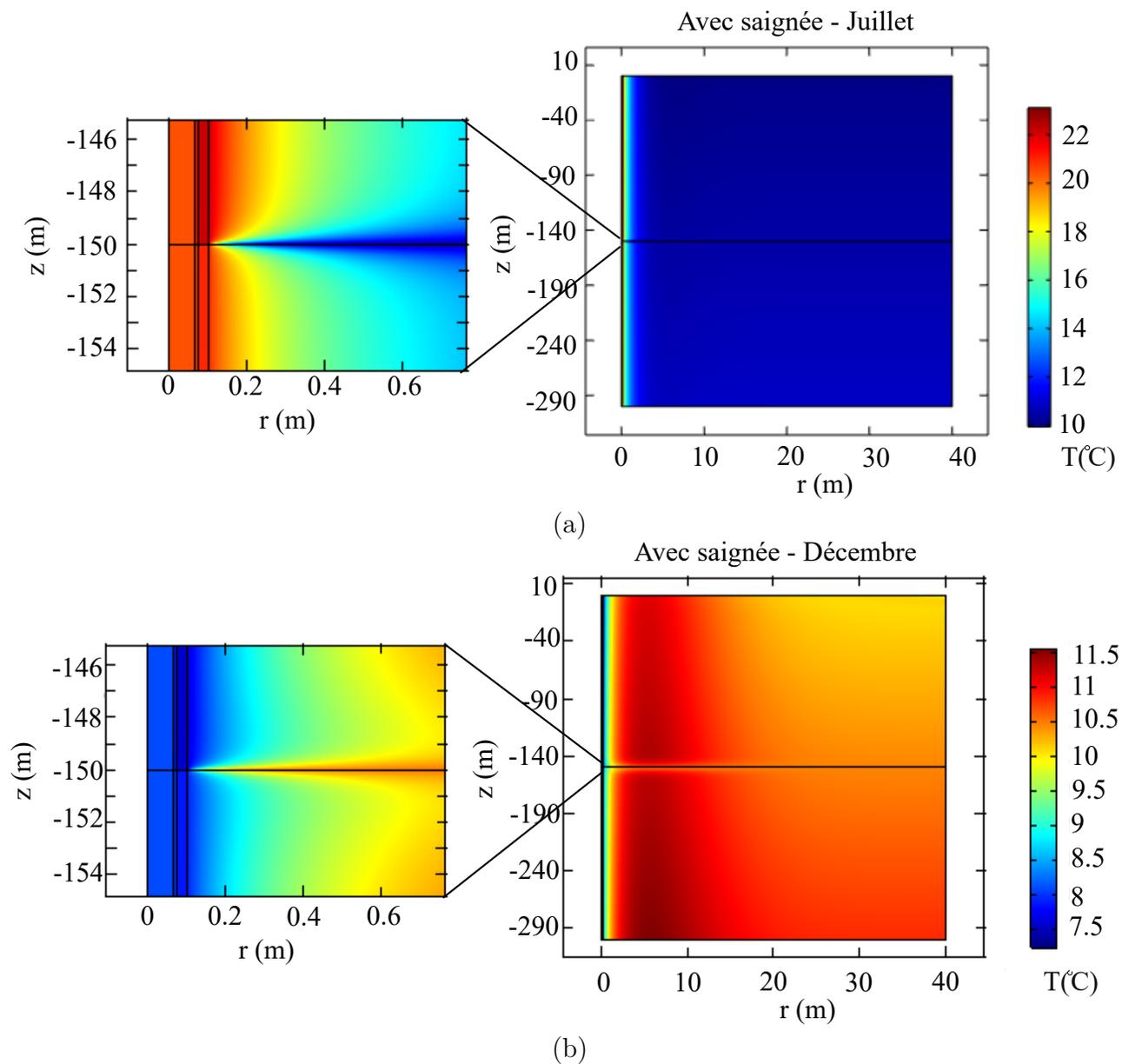


Figure 6.19 Distribution de la température dans le puits, la fracture et l'aquifère environnant, au mois de (a) juillet et (b) décembre, lorsque le système est opéré avec saignée.

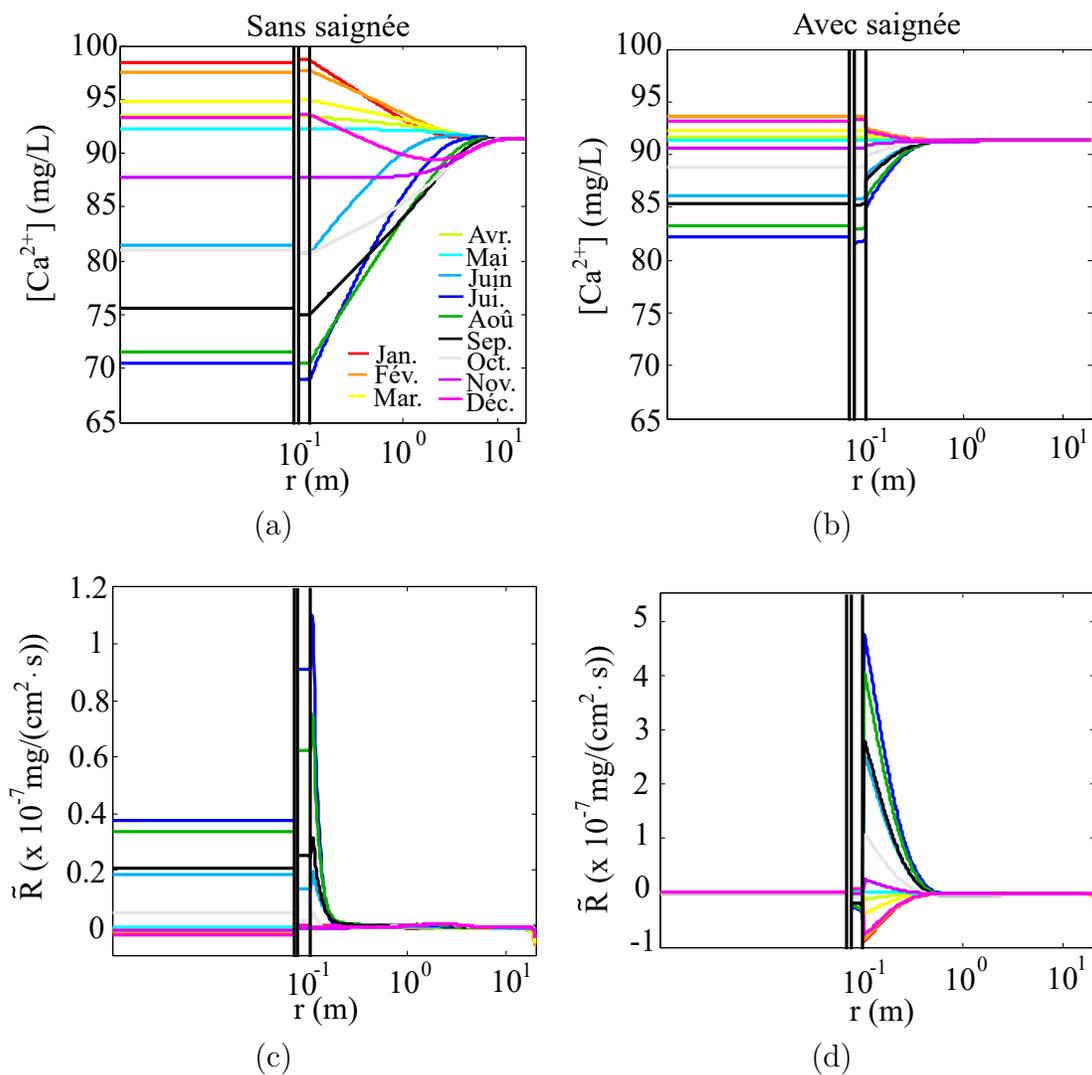


Figure 6.20 Profils radiaux de la concentration de Ca^{2+} (a et b) et du taux de réaction de la calcite (c et d) au sein de la fracture, sans saignée (colonne de gauche) et avec saignée (colonne de droite).

En observant les profils radiaux au sein de la fracture (Fig. 6.20), il apparaît que les variations la concentration en Ca^{2+} ne proviennent pas directement des réactions de précipitation et de dissolution de la calcite, dont le taux de réaction global varie entre $-1 \cdot 10^{-7}$ et $5 \cdot 10^{-7}$ mg/(cm²· s). Les fluctuations de la concentration en calcium sont expliquées par les réactions à l'équilibre. À la section 5.4, il a été mentionné qu'une augmentation de la température force les réactions à l'équilibre intégrant l'ion Ca^{2+} à se dérouler de gauche à droite (Éq. 5.1). Par conséquent, la concentration en calcium diminue lorsque la température augmente et inversement (voir Fig. 5.17 a).

La Fig. 6.21 présente la distribution de la concentration en calcium au sein de l'aquifère, aux mois de juillet et décembre, sans saignée. En comparant les Fig. 6.18 et 6.21, il apparaît clairement que la concentration en Ca^{2+} est inversement proportionnelle à la température. L'été, l'injection de chaleur au sein du puits augmente la température de l'aquifère aux alentours du PCP, provoquant une diminution de la concentration en Ca^{2+} , due aux réactions à l'équilibre intégrant le calcium. À l'inverse, l'hiver, l'extraction de chaleur au sein du puits refroidit la matrice géologique environnante, engendrant une augmentation de la concentration de Ca^{2+} . De plus, au mois de décembre, une zone relativement chaude (environ 13 °C) et appauvrie en calcium (<90 mg/l) est observée entre 1 et 8 m du centre du puits, sur toute la longueur de l'aquifère (Fig. 6.21 b). Cette température plus élevée par rapport au reste de l'aquifère est associée à l'opération du puits en mode climatisation, durant l'été précédent. Au-delà du rayon d'impact du puits, la température de l'aquifère augmente avec la profondeur, engendrant une diminution de la concentration en calcium en fonction de z . Cependant, la variation de la concentration en Ca^{2+} n'est pas uniquement liée à la précipitation et à la dissolution de calcite, puisque le taux de réaction observé dans la formation géologique, aux mois de juillet et décembre, est proche de 0, synonyme d'état d'équilibre chimique (Fig. 6.22). Le taux de réaction varie uniquement sur quelques centimètres proche du puits.

Le taux de réaction de la calcite est affecté par les variations de la concentration des espèces, ainsi que par les fluctuations de la température. Par exemple, une diminution de la température et de la concentration en Ca^{2+} favorise la dissolution de la calcite. Cependant, il est possible d'observer la dissolution de la calcite lorsque la température augmente, si une baisse importante de la concentration en calcium apparaît. Ce phénomène est observé dans la fracture. La baisse de la concentration en Ca^{2+} observée dans la fracture durant l'été conduit l'eau souterraine dans un état de sous-saturation par rapport à la calcite, favorisant la dissolution proche du puits et ce, même si la température est élevée (Fig. 6.20 c). Le comportement inverse est observé l'hiver, signifiant que l'augmentation de la concentration

en calcium amène l'eau circulant dans la fracture dans un état de sursaturation par rapport à la calcite, favorisant la précipitation, même si la température est basse.

En activant la saignée, l'évolution du taux de réaction au sein de la fracture est similaire au cas sans saignée, à la différence que l'été le taux de dissolution est plus important que sans saignée (taux maximal de $11 \cdot 10^{-8}$ mg/(cm²· s) sans saignée et $4.5 \cdot 10^{-7}$ mg/(cm²· s) avec saignée) (Fig. 6.20 c et d). Similairement, le taux de précipitation observé l'hiver est plus important avec la saignée (taux maximal (en valeur absolue) de $1 \cdot 10^{-8}$ mg/(cm²· s) sans saignée et $0.8 \cdot 10^{-7}$ mg/(cm²· s) avec saignée). Ce comportement est expliqué par le fait que la saignée abaisse la température au sein de la fracture durant l'été, favorisant davantage la dissolution de la calcite et augmente la température l'hiver, favorisant davantage la précipitation. En effet, l'été, la température maximale au sein de la fracture est d'environ 35 °C sans saignée et 22 °C avec saignée. Étant donné qu'une baisse de la température favorise la dissolution, ces valeurs expliquent pourquoi le taux de dissolution est plus important avec saignée. De plus, l'hiver, la température minimale dans la fracture est de 4 °C sans saignée et 7 °C avec saignée, expliquant pourquoi le taux de précipitation est plus important lorsque la saignée est active.

Au mois de décembre, une zone présentant une concentration élevée en Ca^{2+} est observée proche du puits, à 150 m de profondeur (Fig. 6.21 b). Sans saignée, entre 0 et 150 m de profondeur, une partie de l'eau du puits s'infiltré dans l'aquifère et se dirige vers la frontière externe du modèle. En revanche, entre 150 et 300 m de profondeur, l'écoulement souterrain se fait en direction du puits. Par conséquent, la vitesse de l'eau souterraine à la paroi du forage est nulle à 150 m de profondeur. Le flux total du calcium mesuré à 130 m de profondeur (par exemple) est plus important que le flux mesuré proche de 150 m, puisqu'il est lié à la vitesse de l'eau (Fig. 6.23). La différence de l'amplitude du flux est illustrée par la taille des deux flèches. L'hiver, la diminution de la température de l'aquifère augmente la concentration en calcium, puis étant donné que le flux total du calcium est faible proche du puits à 150 m de profondeur, les ions se déplacent très peu et restent concentrés dans cette zone rouge, contrairement aux autres profondeurs. Finalement, étant donné que la fracture se situe à 150 m de profondeur, il n'y a pas d'écoulement horizontal au sein de cette dernière. Si elle était placée à une profondeur inférieure à 150 m, un écoulement horizontal en direction de la frontière externe du modèle serait observé, alors que si elle était placée à une profondeur supérieure à 150 m, un écoulement horizontal en direction du puits serait observé.

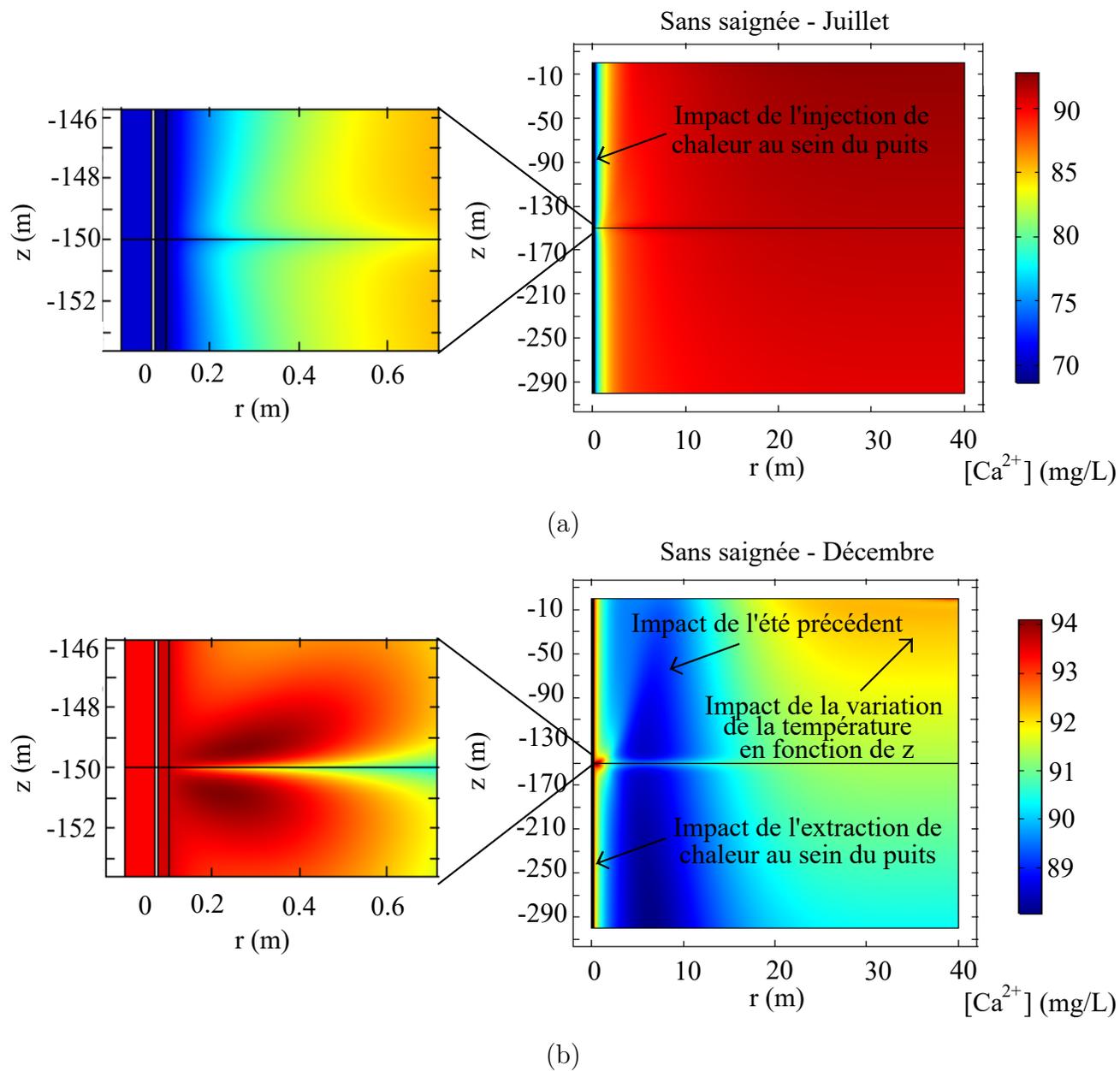


Figure 6.21 Distribution de la concentration en Ca^{2+} au sein de l'aquifère, aux mois de (a) juillet et (b) décembre, sans saignée.

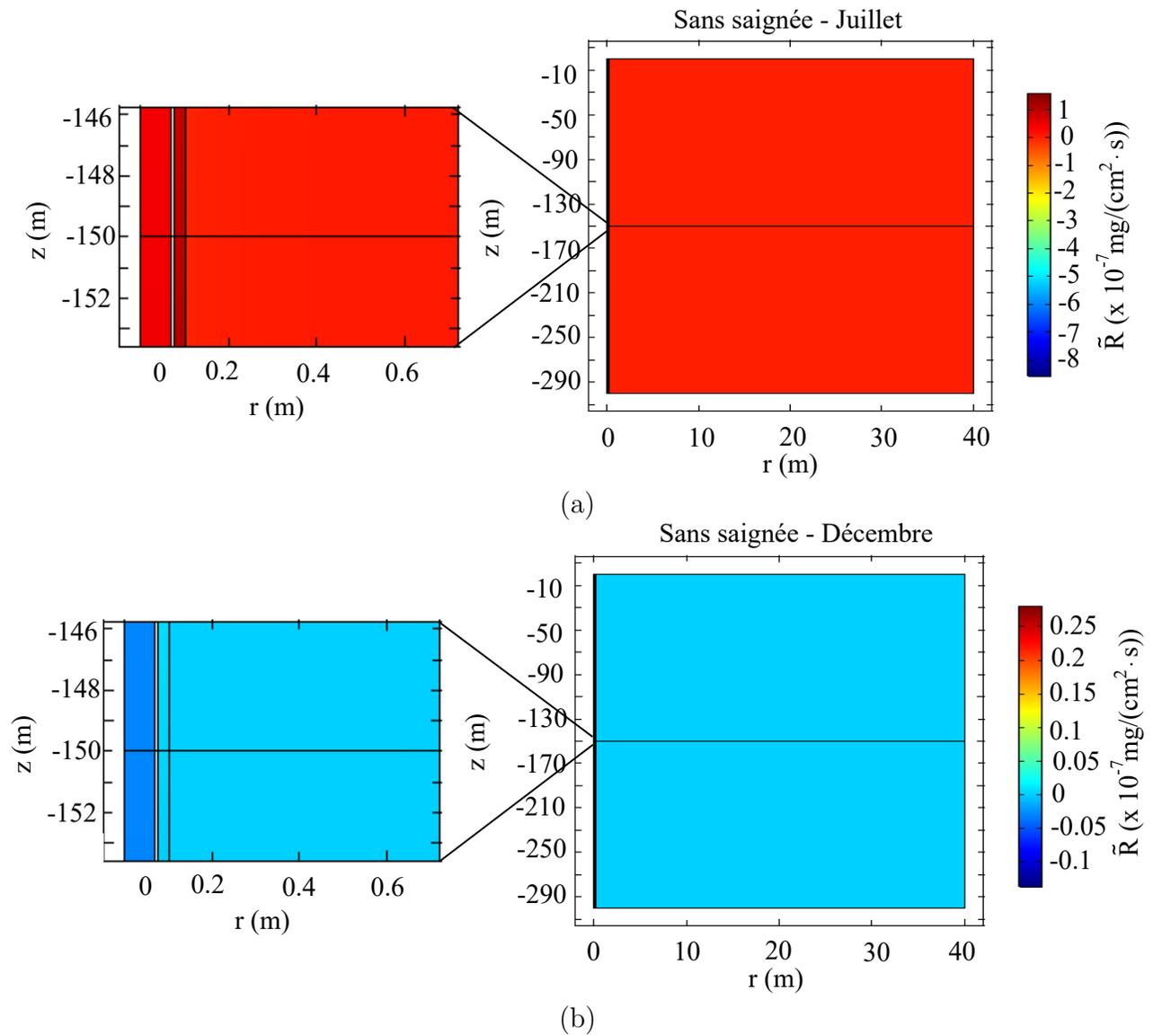


Figure 6.22 Distribution du taux de réaction de la calcite au sein de l'aquifère, aux mois de (a) juillet et (b) décembre, sans saignée.

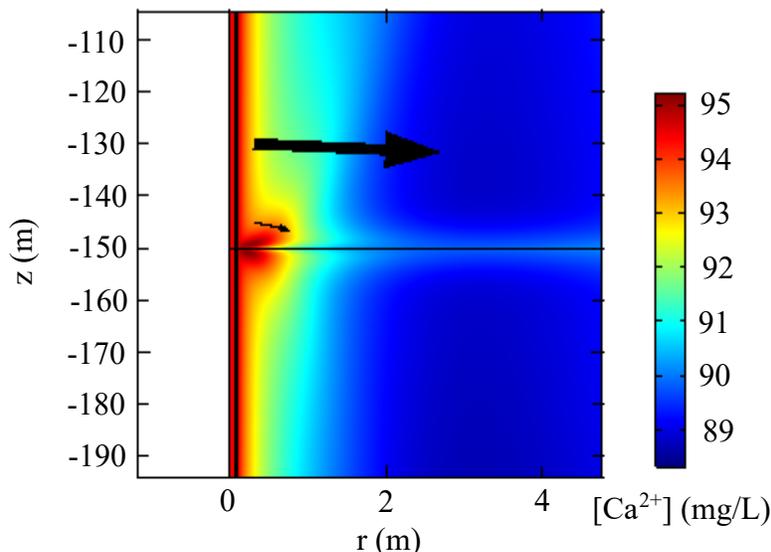


Figure 6.23 Distribution de la concentration en calcium au mois de décembre, sans saignée et illustration du flux total de l'ion Ca^{2+} (flèches).

Finalement, les réactions de précipitation et de dissolution de la calcite font varier l'ouverture de la fracture. La Fig. 6.24 présente les profils radiaux de l'ouverture de la fracture avec et sans saignée. Étant donné que l'amplitude de b diffère pour les deux cas, la même échelle pour l'axe des x n'a pas pu être conservée pour les deux figures. La tendance des courbes est logiquement similaire au taux de réaction de la calcite. À la fin d'une année d'exploitation, l'ouverture de la fracture a très légèrement augmenté proche du puits, soit de 0.005 mm sans saignée et de 0.025 mm avec saignée, puisque le taux de réaction de la calcite indique de la dissolution. Ce comportement est expliqué par le fait que les charges au sol de climatisation sont plus importantes que les charges de chauffage. Avec des charges identiques, la masse qui précipite proche du puits durant l'hiver peut potentiellement être dissoute l'été suivant. De plus, entre environ 8 et 20 m du centre du puits sans saignée et entre 1 et 20 m avec saignée, l'ouverture de la fracture a très légèrement diminué après une année.

6.4 Synthèse

Ce chapitre a permis d'analyser l'impact de la saignée, lorsque le PCP est installé dans un milieu poreux homogène équivalent et dans un aquifère fracturé. Dans les deux cas, les résultats démontrent que la saignée permet de réduire les fluctuations annuelles de la température au sein du puits, puisqu'elle génère un apport d'eau souterraine, ayant une température constante tout au long de l'année (environ 10 °C). Lorsque l'aquifère est considéré comme

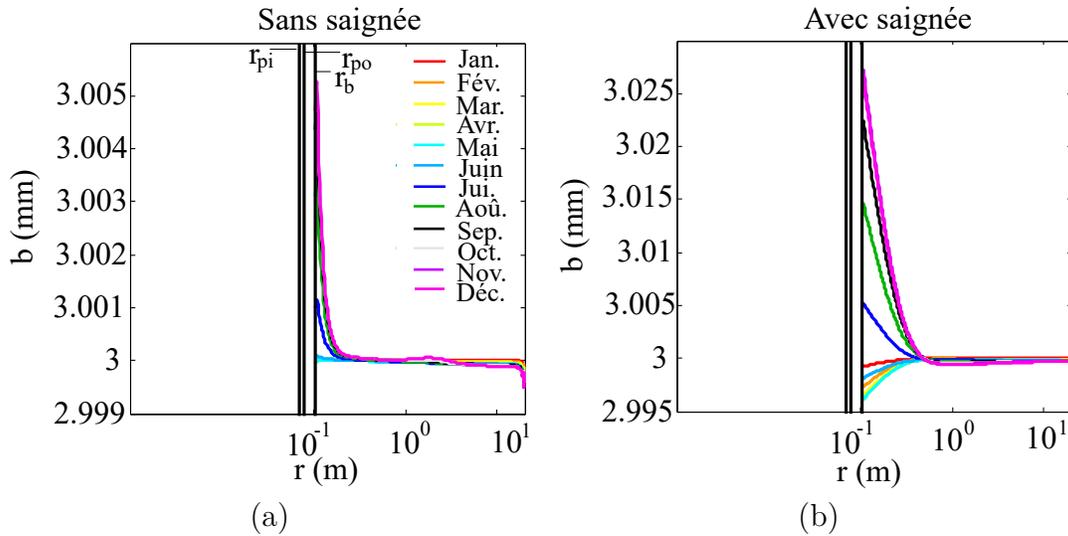


Figure 6.24 Profils radiaux de l'ouverture de la fracture, (a) sans saignée et (b) avec saignée.

un milieu poreux équivalent, l'apport d'eau se fait sur toute la longueur du puits, alors qu'en présence d'une fracture il est concentré dans cette dernière. En considérant un exemple avec une même conductivité hydraulique équivalente pour chaque aquifère, le comportement thermique du puits est similaire, lorsque la saignée est constamment active. La seule différence se situe dans le fait qu'en présence d'une fracture, la variation de la température au sein du puits se fait de manière abrupte à la profondeur de la fracture, alors qu'elle se fait de manière progressive sur toute la longueur du puits installé dans un milieu poreux équivalent. Par contre, sans saignée, le comportement thermique du puits est considérablement différent pour les deux types d'aquifère. En effet, au sommet du puits, le milieu poreux équivalent est plus perméable que l'aquifère fracturé, signifiant que la quantité d'eau du puits qui s'infiltré dans l'aquifère est plus importante. Par conséquent, la baisse de pression créée à la base de l'ouvrage, favorisant un écoulement d'eau en direction de la base du PCP, est plus importante. Lorsque l'aquifère est considéré comme un milieu poreux équivalent, l'apport d'eau au sein du puits est de ce fait plus important. Ce comportement a un impact direct sur la variation de la température au sein du puits. Sans saignée, l'aquifère considéré comme un milieu poreux équivalent est plus avantageux d'un point de vue thermique, puisque la température est réduite durant l'été et augmentée durant l'hiver. Finalement, ces résultats sont contradictoires aux observations faites par Nguyen *et al.* (2015b). En effet, en utilisant un taux de saignée variable, Nguyen *et al.* (2015b) ont défini qu'une zone fracturée est bénéfique sur le coefficient de performance de la pompe à chaleur, lorsque la saignée est active. Cette différence provient probablement du fait que l'étude en question considère un taux de saignée variable, et non pas constant comme dans le cas présenté ici. En vue de la complexité du

modèle, ce choix a été fait pour des raisons de simplification.

D'un point de vue géochimique, la saignée permet d'évacuer une partie des ions en solution, ayant pour conséquence d'atténuer les fluctuations annuelles de la concentration des espèces. À nouveau, lorsque la saignée est active, l'évolution de la concentration en calcium dans les fluides ascendant et descendant du puits est similaire pour les deux types d'aquifère. Cependant, étant donné que la quantité d'eau en provenance de l'aquifère qui s'infiltre dans le puits varie de manière significative entre les deux types d'aquifère, lorsque la saignée n'est pas en fonction, le comportement géochimique est également différent. En effet, l'été la concentration en calcium diminue au sein du puits en raison de l'augmentation de la température. Premièrement, cette baisse de concentration est expliquée par les réactions à l'équilibre intégrant l'ion Ca^{2+} . Une augmentation de la température diminue les constantes d'équilibre $K_{CaCO_{3(aq)}} (=([Ca^{2+}] \cdot [CO_3^{2-}])/[CaCO_{3(aq)}])$ et $K_{CaHCO_3^+} (=([Ca^{2+}] \cdot [HCO_3^-])/[CaHCO_3^+])$, contraignant une baisse de la concentration en calcium pour maintenir l'équilibre chimique. Deuxièmement, une augmentation de la température diminue la solubilité de la calcite, favorisant la précipitation, qui par conséquent diminue la concentration en calcium. Cependant, sans saignée, cette baisse est limitée lorsque l'aquifère est considéré comme un milieu poreux équivalent, en raison de l'apport d'eau plus conséquent. Il peut donc être conclu que pour une opération sans saignée, il est plus avantageux que le puits soit installé dans un aquifère poreux, pour autant que la conductivité hydraulique équivalente des deux aquifères soit identique.

La variation de la signature chimique de l'eau souterraine affecte grandement le taux de réaction de la calcite. Dans ce chapitre, la masse précipitée ou dissoute cumulée après une année d'opération dans la partie externe du PCP, ainsi que dans le tube de prélèvement a été calculée pour l'ensemble des cas. Les résultats démontrent que la calcite précipite principalement à l'entrée du puits peu importe le type d'aquifère. Dans le tube de prélèvement, le taux de précipitation est très faible. En considérant que la calcite s'accumule au sommet du puits, entre 0 et 10 m de profondeur, le volume colmaté, après une année d'opération, est compris entre 0.05 et 0.12 %. Les résultats démontrent que la saignée atténue très légèrement la précipitation de la calcite dans les deux types d'aquifère. En revanche, si la calcite précipite sur les particules en suspension qui vont s'accumuler au fond du puits, l'épaisseur de la couche de $CaCO_{3(s)}$, après une année, varie entre 0.29 et 1.1 cm. Dans cet exemple, le cas sans saignée est plus avantageux, car la calcite se dissout dans la partie inférieure de l'ouvrage, limitant l'accumulation minérale à la base du puits. Par contre, en activant la saignée, la base du puits est à l'équilibre chimique et les particules de calcite qui vont s'accumuler dans

la chambre de sédimentation ne seront pas dissoutes.

Dans tous les cas exposés, les masses précipitées sont faibles et ne semblent pas causer de problème opérationnel, même après plusieurs années d'opération. Ces résultats permettent de rassurer les concepteurs et les utilisateurs sur les risques géochimiques au sein des PCP. Cependant, le taux de précipitation observé à l'entrée du puits suggère que la calcite peut également précipiter dans l'échangeur de chaleur, ainsi que dans les tuyaux. Étant donné que les volumes sont restreints, l'accumulation de $CaCO_{3(s)}$ dans les équipements mécaniques et dans la tuyauterie pourrait être davantage problématique.

Les variations de la température au sein de la fracture contrôlent la composition chimique de l'eau souterraine au sein de celle-ci. De plus, il a été démontré que les réactions à l'équilibre influencent fortement la concentration en calcium. En effet, une augmentation de la température force les réactions à l'équilibre contenant l'ion Ca^{2+} à se dérouler dans le sens favorisant la baisse de la concentration en calcium. De ce fait, la concentration en Ca^{2+} dans la fracture est inversement proportionnelle à la température. D'autre part, les oscillations de la concentration affectent le taux de réaction de la calcite. La baisse de la concentration en calcium observée l'été en s'approchant du puits conduit l'eau souterraine au sein de la fracture dans un état de sous-saturation par rapport à la calcite, favorisant la dissolution (même si la température est élevée). Inversement, l'augmentation de la concentration en calcium durant l'hiver en s'approchant de l'ouvrage conduit l'eau souterraine dans un état de sursaturation par rapport à la calcite, favorisant la précipitation (même si la température est basse). Lorsque la saignée est active, les variations de la concentration sont moins marquées. Cependant, durant la saison froide, le taux de précipitation proche du puits est plus important que sans saignée, puisque la température est plus élevée. De plus, le taux de dissolution observé proche du puits durant la période estivale est également plus conséquent, puisque la température est plus faible. Après une année d'opération, la fracture est légèrement dissoute jusqu'à environ 1 m du centre du puits, alors qu'elle est faiblement colmatée en s'éloignant de l'ouvrage et ce, jusqu'à la frontière latérale du modèle.

CHAPITRE 7 IMPACT DU DÉGAZAGE DU CO_2 SUR LES PROCESSUS GÉOCHIMIQUES

Ordinairement, la tête d'un PCP n'est pas parfaitement scellée et des échanges de CO_2 entre le sommet de la colonne d'eau et l'atmosphère peuvent se produire. Ce phénomène doit impérativement être considéré lors des processus de conception et d'exploitation du puits, puisqu'en haussant le pH, le dégazage du CO_2 peut entraîner la précipitation de la calcite, ainsi que des problèmes opérationnels associés. De plus, les mécanismes conduisant au dégazage, à savoir l'élévation de la température (diminuant la solubilité du CO_2) et le brassage mécanique de l'eau, sont couramment observés dans les systèmes géothermiques exploitant l'eau souterraine comme fluide caloporteur.

La première section de ce chapitre illustre l'impact du dégazage du CO_2 sur le comportement géochimique du puits, de l'aquifère et de la fracture, lorsque la saignée n'est pas en fonction. Elle met l'accent sur le lien entre le dégazage du CO_2 et le taux de réaction de la calcite. La deuxième section comprend la même analyse, mais pour un cas intégrant une saignée constante de 10 %. L'objectif est d'identifier si la diminution du taux de précipitation de la calcite à la suite de l'activation de la saignée est également observée lorsque le puits est soumis aux échanges gazeux.

7.1 Paramètres d'entrée et conditions frontières

Dans ce chapitre, le sommet du puits est modélisé comme un système ouvert à l'atmosphère, alors que l'aquifère est modélisé comme un système fermé. Une fracture de 3 mm d'ouverture est intégrée dans l'aquifère à 150 m de profondeur. La géométrie et les conditions frontières du modèle sont présentées à la Fig. 3.2. Le tableau 3.1 illustre les paramètres géométriques du système, alors que les paramètres hydraulique, thermique et géochimique peuvent être retrouvés dans les tableaux 3.2, 3.3 et 3.5. Comme pour l'ensemble des cas exposés dans cette thèse, les simulations débutent le 1^{er} janvier et couvrent une période de 365 jours. Les charges hebdomadaires au sol de chauffage et de climatisation utilisées dans le modèle sont identiques à celles présentées dans le chapitre précédent (voir Fig. 6.1). Finalement, une saignée constante de 10 % est appliquée dans la deuxième partie du chapitre.

7.2 Cas sans saignée

7.2.1 Évolution géochimique du puits

L'équilibre du CO_2 entre le sommet de la colonne d'eau et l'atmosphère s'effectue selon le gradient de la P_{CO_2} entre ces deux milieux. De ce fait, le flux de CO_2 est positif, si le transfert se déroule de l'eau en direction de l'atmosphère (signifiant que la P_{CO_2} de l'eau est supérieure à la P_{CO_2} de l'atmosphère) ou négatif dans le cas opposé. La Fig. 7.1 (a) indique logiquement que le flux de CO_2 est nul au sommet du puits parfaitement scellé, alors qu'à l'entrée et à la sortie du puits soumis aux échanges gazeux, il se dirige en direction de l'atmosphère, tout au long de l'année. La P_{CO_2} de l'atmosphère est de $10^{-3.5}$ atm, alors que la P_{CO_2} de l'eau souterraine à l'entrée et à la sortie du puits varie entre $10^{-2.72}$ et $10^{-1.5}$ atm durant l'année d'opération. Le flux de CO_2 s'atténue toutefois au fil du temps, puisque la réserve en CO_2 dissous (l'équivalent de l'espèce H_2CO_3 dans cette étude) s'épuise (Fig. 7.1 b). Pour rappel, le PCP est opéré sans saignée, signifiant qu'il y a peu d'apports de H_2CO_3 en provenance de l'aquifère. De ce fait, une baisse de la concentration en H_2CO_3 engendre une diminution de la P_{CO_2} de l'eau souterraine et par conséquent une réduction du dégazage.

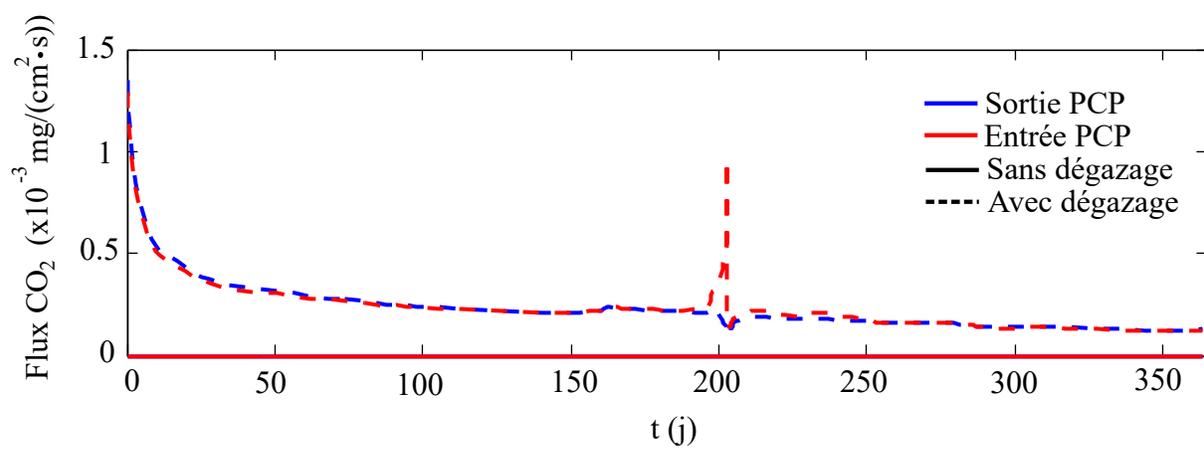
Pour le cas avec dégazage, le flux de CO_2 mesuré à la sortie du puits est légèrement supérieur à celui observé à l'entrée du système, excepté durant la période estivale. Ce comportement est lié à la précipitation de la calcite au sein de la boucle souterraine, qui selon la deuxième réaction de cinétique ($CaCO_{3(s)} + H_2CO_3^o \rightleftharpoons Ca^{2+} + 2HCO_3^-$) provoque une augmentation de la concentration en acide carbonique. Par conséquent, en circulant dans l'ECS, l'eau souterraine élève sa concentration en H_2CO_3 , amplifiant subséquemment le dégazage à la sortie du puits. D'autre part, le pic observé au niveau du flux de CO_2 à l'entrée du puits (à environ 200 jours d'opération) est provoqué par l'augmentation de la température, qui en diminuant la constante de Henry (synonyme d'une réduction de la solubilité du CO_2) favorise le dégazage. Ce pic coïncide avec le pic des charges de climatisation au sol (voir Fig. 6.1).

Durant les derniers mois d'opération (entre 200 et 365 j), la concentration en H_2CO_3 mesurée à l'entrée et à la sortie du PCP dont le sommet est ouvert à l'atmosphère augmente, signifiant que l'apport d'acide carbonique dû à la précipitation de la calcite est plus important que la perte engendrée par le dégazage (Fig. 7.1 b). Comme l'indique cette même figure, lorsque le puits est fermé à l'atmosphère, la concentration en H_2CO_3 mesurée au sommet du système varie légèrement en fonction du temps (entre 132 à 150 mg/L). Ces oscillations sont dues aux fluctuations de la température, influençant la vitesse, ainsi que le sens des réactions chi-

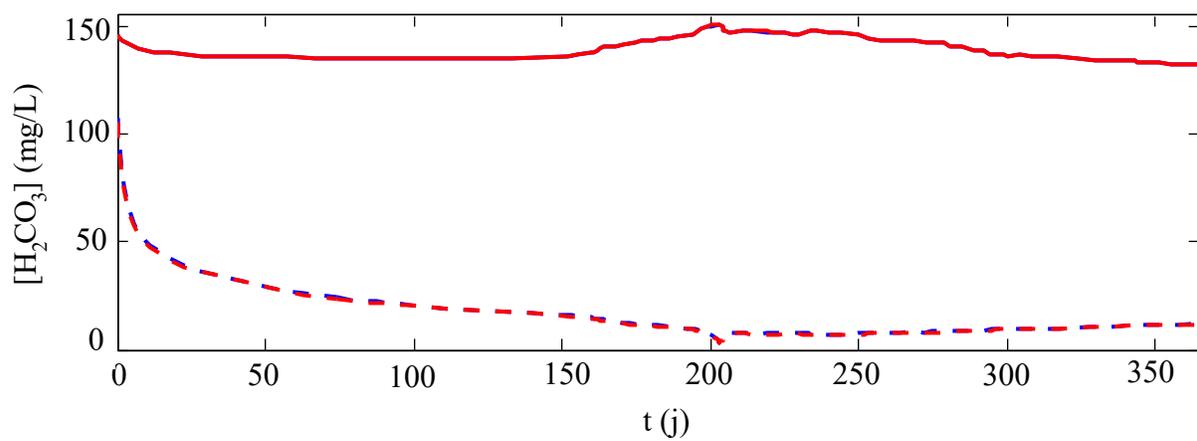
miques. Dans la section 5.4, la corrélation entre la température et la concentration en H_2CO_3 a été illustrée.

Une des conséquences néfastes du dégazage du CO_2 est l'augmentation du pH de l'eau souterraine, favorisant la précipitation de la calcite (Fig. 7.1 c). En effet, selon la quatrième réaction à l'équilibre ($H^+ + HCO_3^- \rightleftharpoons H_2CO_3$), une baisse de la concentration en H_2CO_3 force la réaction à se dérouler de gauche à droite. De ce fait, la concentration en H^+ diminue et le pH de l'eau augmente. Le problème se situe dans le fait qu'une réduction de la concentration en H^+ (augmentation du pH) favorise la précipitation de la calcite, selon la première réaction de cinétique ($CaCO_{3(s)} + H^+ \rightleftharpoons Ca^{2+} + HCO_3^-$), diminuant la concentration en calcium. Ce comportement est illustré aux Fig. 7.1 (d) et (e), présentant l'évolution temporelle de la concentration en Ca^{2+} et du taux de réaction de la calcite à l'entrée et à la sortie du puits, avec et sans dégazage. Quand le sommet du puits est ouvert à l'atmosphère, la calcite précipite à l'entrée du système, tout au long de l'année, provoquant une baisse de la concentration en calcium (d'environ 70 mg/L) par rapport au puits fermé à l'atmosphère. Dans l'ensemble des cas exposés jusqu'à présent, la dissolution de la calcite était favorisée l'hiver à l'entrée du puits. Cependant, dans le cas illustré, selon les deux premières réactions de cinétique ($CaCO_{3(s)} + H^+ \rightleftharpoons Ca^{2+} + HCO_3^-$ et $CaCO_{3(s)} + H_2CO_3^o \rightleftharpoons Ca^{2+} + 2HCO_3^-$), une diminution des concentrations en H^+ et H_2CO_3 force la précipitation de la calcite, et ce même si la température diminue.

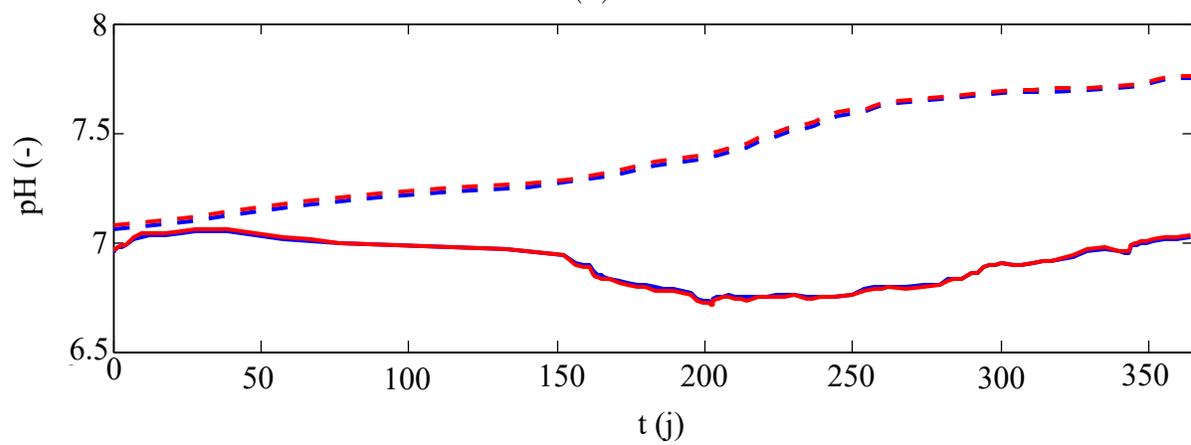
Durant la saison chaude, l'élévation de la température engendre une augmentation du taux de précipitation à l'entrée des deux puits, soit (en valeur absolue) de $1 \cdot 10^{-8}$ à $13.5 \cdot 10^{-7}$ mg/(cm²· s) sans dégazage et de $6 \cdot 10^{-8}$ à $7 \cdot 10^{-7}$ mg/(cm²· s) avec dégazage. Le taux de précipitation est de manière contre-intuitive supérieur lorsque l'ouvrage est parfaitement scellé. Ce comportement est lié à l'indice de saturation de l'eau souterraine par rapport à la calcite, fortement dépendant de la concentration en Ca^{2+} . L'eau circulant au sein du puits fermé à l'atmosphère est davantage sursaturée par rapport à la calcite, puisque sa concentration en Ca^{2+} est plus élevée (environ 70 mg/L à l'entrée du puits durant l'été sans dégazage, contre approximativement 4 mg/L avec dégazage). Il est important de spécifier que d'autres espèces influencent également le taux de réaction de la calcite, comme par exemple HCO_3^- , même si elles ne sont pas illustrées ici.



(a)



(b)



(c)

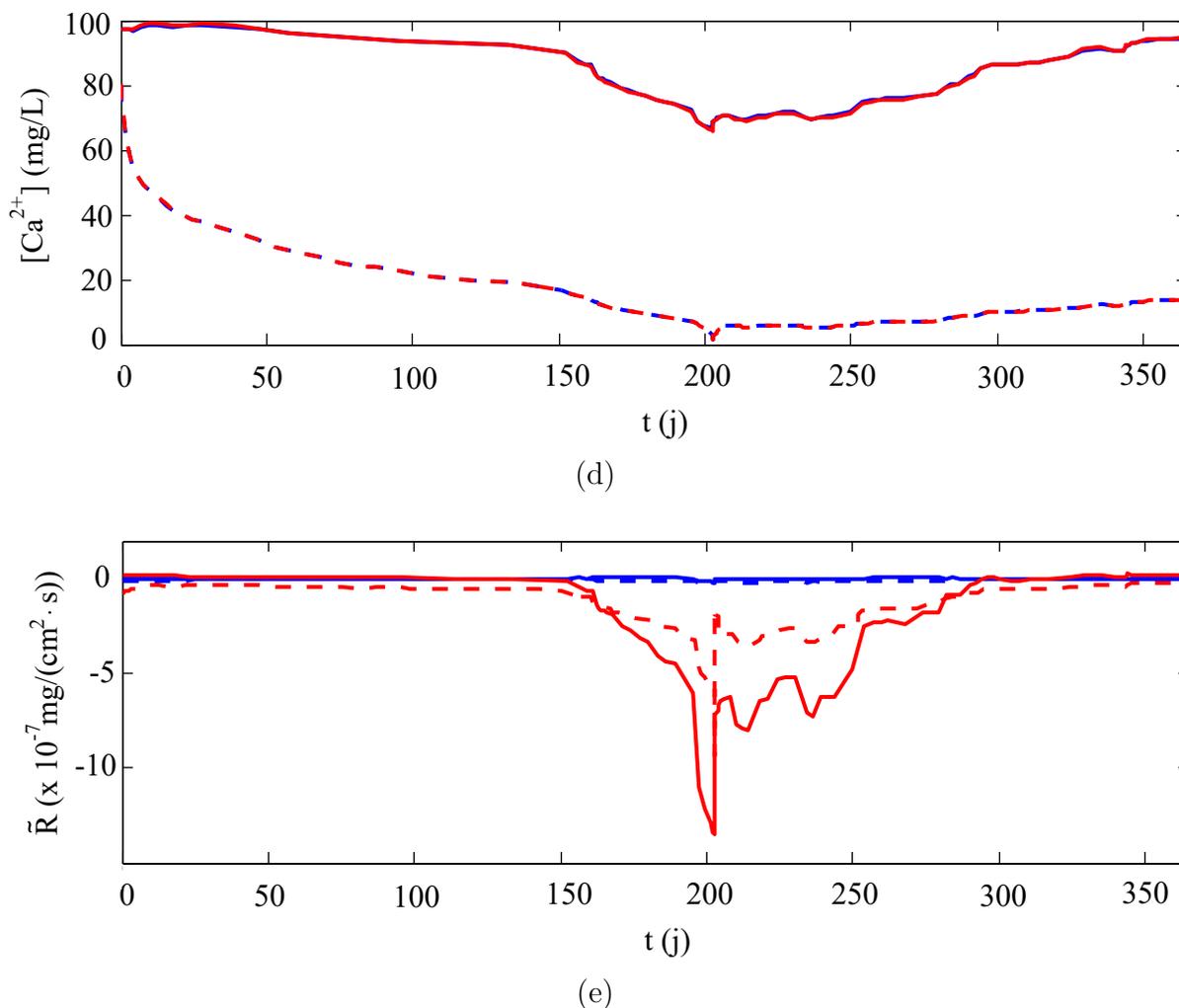


Figure 7.1 Évolution temporelle (a) du flux de CO_2 , (b) de la concentration en H_2CO_3 , (c) du pH, (d) de la concentration en Ca^{2+} et (e) du taux de réaction de la calcite, à l'entrée et à la sortie du puits, avec et sans dégazage, lorsque la saignée n'est pas en fonction.

La différence de comportement entre les cas avec et sans dégazage est également illustrée à la Fig. 7.2, présentant les profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} et du taux de réaction de la calcite, dans les fluides ascendant et descendant du puits, aux mois de juillet et décembre. Pour des raisons de lisibilité, l'axe des abscisses est discontinu sur les Fig. 7.2 (a) et (b). Les résultats démontrent clairement que le taux de précipitation observé l'été à l'entrée du puits est supérieur sans dégazage (Fig. 7.2 c). Dans le PCP fermé à l'atmosphère, le fluide descendant devient sous-saturé par rapport à la calcite à environ 100 m de profondeur, favorisant la dissolution du $CaCO_{3(s)}$ à la base de la zone externe du puits, ainsi que dans le tube de prélèvement. En revanche, lorsque le puits est soumis au dégazage, la base du fluide descendant, ainsi que le fluide ascendant sont proches de l'équilibre chimique.

En effet, selon les deux premières réactions de cinétique ($CaCO_{3(s)} + H^+ \rightleftharpoons Ca^{2+} + HCO_3^-$ et $CaCO_{3(s)} + H_2CO_3^o \rightleftharpoons Ca^{2+} + 2HCO_3^-$), la diminution de la concentration en Ca^{2+} favorise la dissolution de la calcite, alors que la baisse des concentrations en H^+ et H_2CO_3 privilégie la précipitation. Les taux de réaction direct (de gauche à droite) et inverse (de droite à gauche) sont donc pratiquement identiques ($3.394 \cdot 10^{-6}$ mg/(cm²· s) à la base du puits pour le taux de réaction direct et $3.387 \cdot 10^{-6}$ mg/(cm²· s) pour le taux de réaction inverse), expliquant cet état proche de l'équilibre chimique.

D'autre part, la calcite se dissout l'hiver à l'entrée du puits fermé à l'atmosphère, jusqu'à environ 150 m de profondeur, provoquant une augmentation de la concentration en calcium (Fig. 7.2 b et d). Le fluide descendant devient ensuite sursaturé par rapport à la calcite, favorisant la précipitation à la base de la zone externe du puits, ainsi que dans le tube de prélèvement. Finalement, au mois de décembre, la calcite précipite dans l'ensemble du PCP dont le sommet est ouvert à l'atmosphère.

Similairement au chapitre précédent, il est pertinent d'illustrer le bilan de masse au sein du tube de prélèvement, ainsi que dans la partie externe du PCP en fonction du temps, pour les cas avec et sans dégazage (Fig. 7.3). À la fin de l'année, le bilan de masse est positif dans la zone abritant le fluide descendant, avec et sans dégazage, confirmant que le taux de précipitation moyen est supérieur au taux de dissolution moyen. La masse précipitée à la fin de l'année est de 0.77 kg avec dégazage et 0.25 kg sans dégazage. En revanche, dans la zone abritant le fluide ascendant, le bilan est positif avec dégazage (0.05 kg) et négatif sans dégazage (-0.6 kg).

La Fig. 7.3 est intéressante pour quantifier les processus géochimiques au sein du PCP. Cependant, elle ne permet pas d'identifier les zones propices à la précipitation et à la dissolution de la calcite. Pour combler ce manque, la masse de $CaCO_{3(s)}$ précipitée ou dissoute cumulée après une année d'opération a été calculée dans le tube de prélèvement et dans la zone externe du PCP (Fig. 7.4). Les résultats démontrent que la calcite précipite principalement entre le tube de prélèvement et la formation géologique. De plus, après une année d'exploitation, dans la zone externe du puits fermé à l'atmosphère, la masse précipitée moyenne est supérieure à la masse dissoute entre 0 et 110 m de profondeur sans dégazage et entre 0 et 160 m avec dégazage (correspondant à un bilan de masse positif), alors que l'inverse (bilan de masse négatif) est observé à la base de l'ouvrage (Fig. 7.4 a et c).

La masse cumulée de calcite a été calculée par section de 10 m de profondeur et il appa-

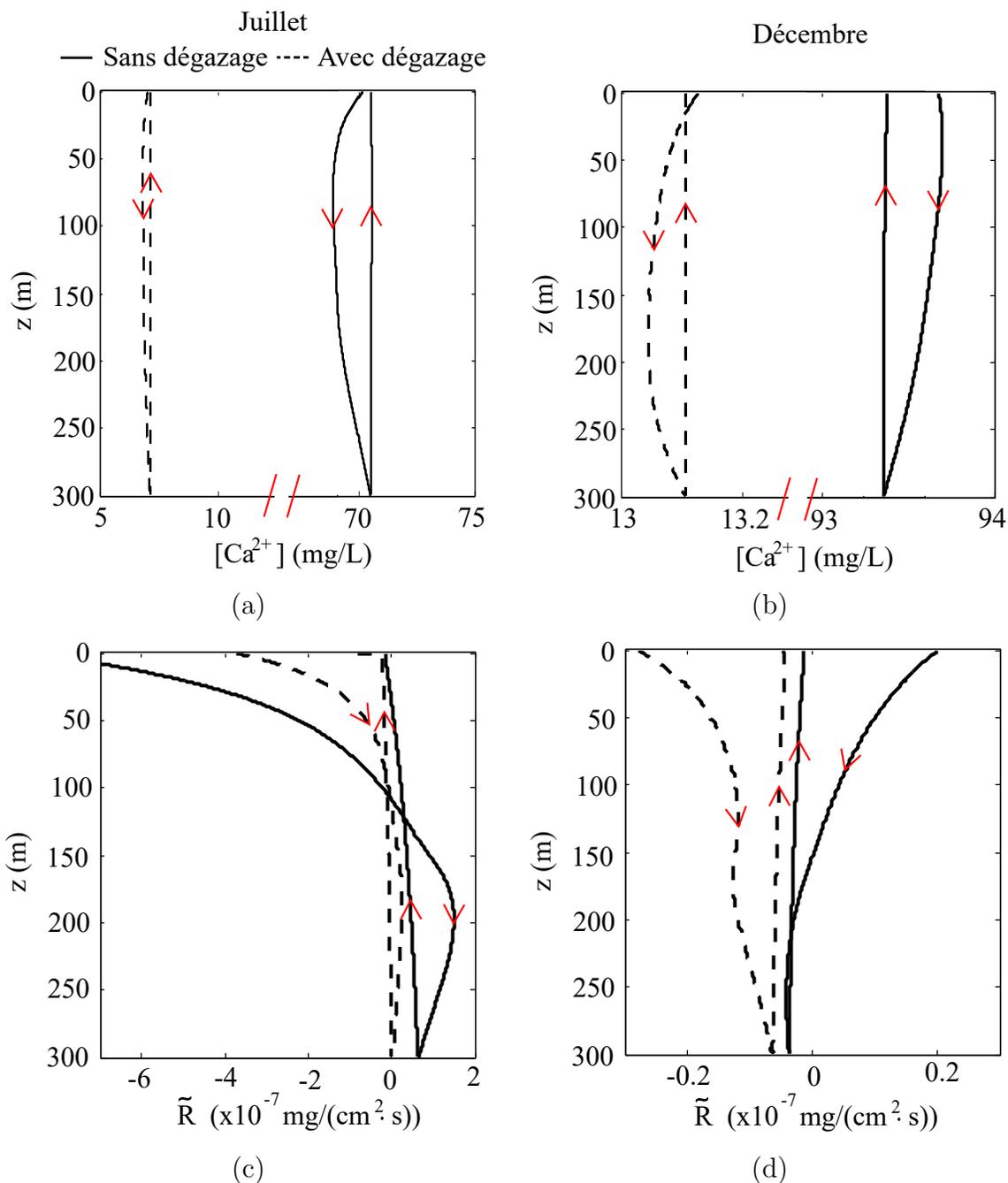


Figure 7.2 Profils verticaux de la concentration en Ca^{2+} (a et b) et du taux de réaction de la calcite (c et d), dans les fluides ascendant et descendant du puits, aux mois de juillet (colonne de gauche) et décembre (colonne de droite), avec et sans dégazage, lorsque la saignée n'est pas en fonction.

raît que la valeur maximale se situe entre 0 et 10 m dans la partie externe du puits, soit 0.45 kg de calcite précipitée après un an sans dégazage et 0.33 kg avec dégazage. Cette partie du puits comprend un volume de 0.1419 m³, pouvant potentiellement contenir

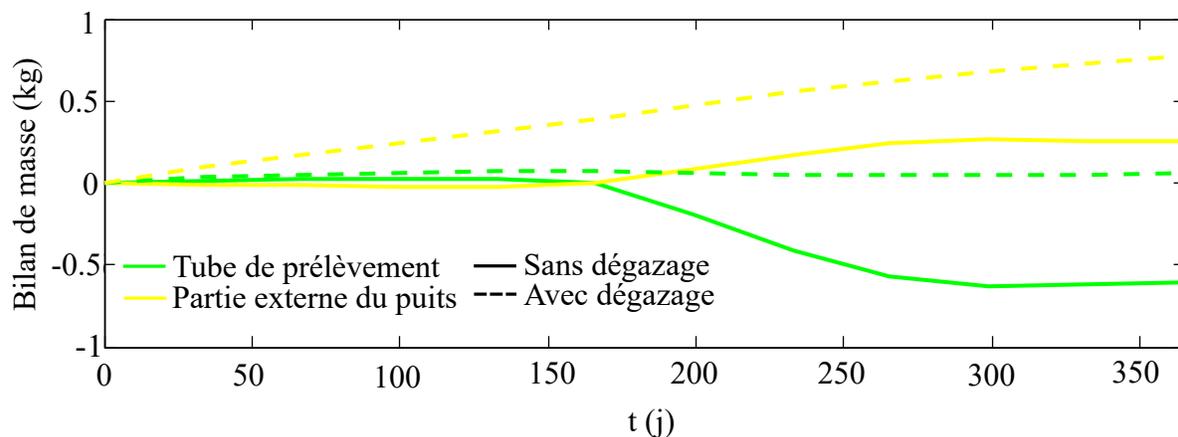


Figure 7.3 Évolution temporelle du bilan de masse dans le tube de prélèvement et dans la partie externe du puits, avec et sans dégazage, lorsque la saignée n'est pas en fonction.

383 kg de calcite. En supposant que la précipitation se fait uniquement sur la paroi du forage, 0.12 % de cette zone est colmatée après un an sans dégazage, contre 0.09 % avec dégazage. Il apparaît donc que le cas sans dégazage est le plus problématique, puisque à la fin de l'année, l'accumulation de $CaCO_{3(s)}$ à l'entrée du puits est plus élevée. De plus, à la base du puits, la dissolution des particules de calcite en suspension dans la phase aqueuse et/ou de la formation géologique composant la paroi externe du forage a tendance à remettre des ions Ca^{2+} en solution et à augmenter les risques de précipitation.

En supposant maintenant que la calcite précipite uniquement sur les particules en suspension et que la totalité de la masse (0.25 kg sans dégazage et 0.82 kg avec dégazage, selon le bilan de masse, voir Fig. 7.3) s'accumule à la base du puits, l'épaisseur de la couche de calcite après une année est de 0.29 cm sans dégazage et 0.94 cm avec dégazage. L'accumulation est donc supérieure, lorsque le sommet du puits est ouvert à l'atmosphère. En effet, dans le PCP parfaitement scellé, une partie de la masse précipitée au sommet va être dissoute à la base, réduisant ainsi la couche de calcite dans la chambre de sédimentation. Par contre, une très faible quantité de calcite est dissoute à la base du puits qui est ouvert à l'atmosphère à son sommet. Cependant, même en sachant que le système peut être opéré sur plusieurs années, la précipitation de la calcite au sein des PCP dont les sommets sont ouverts et fermés à l'atmosphère, utilisés dans cet exemple, n'est pas inquiétante lorsque la saignée n'est pas en fonction, puisque les masses précipitées sont très faibles.

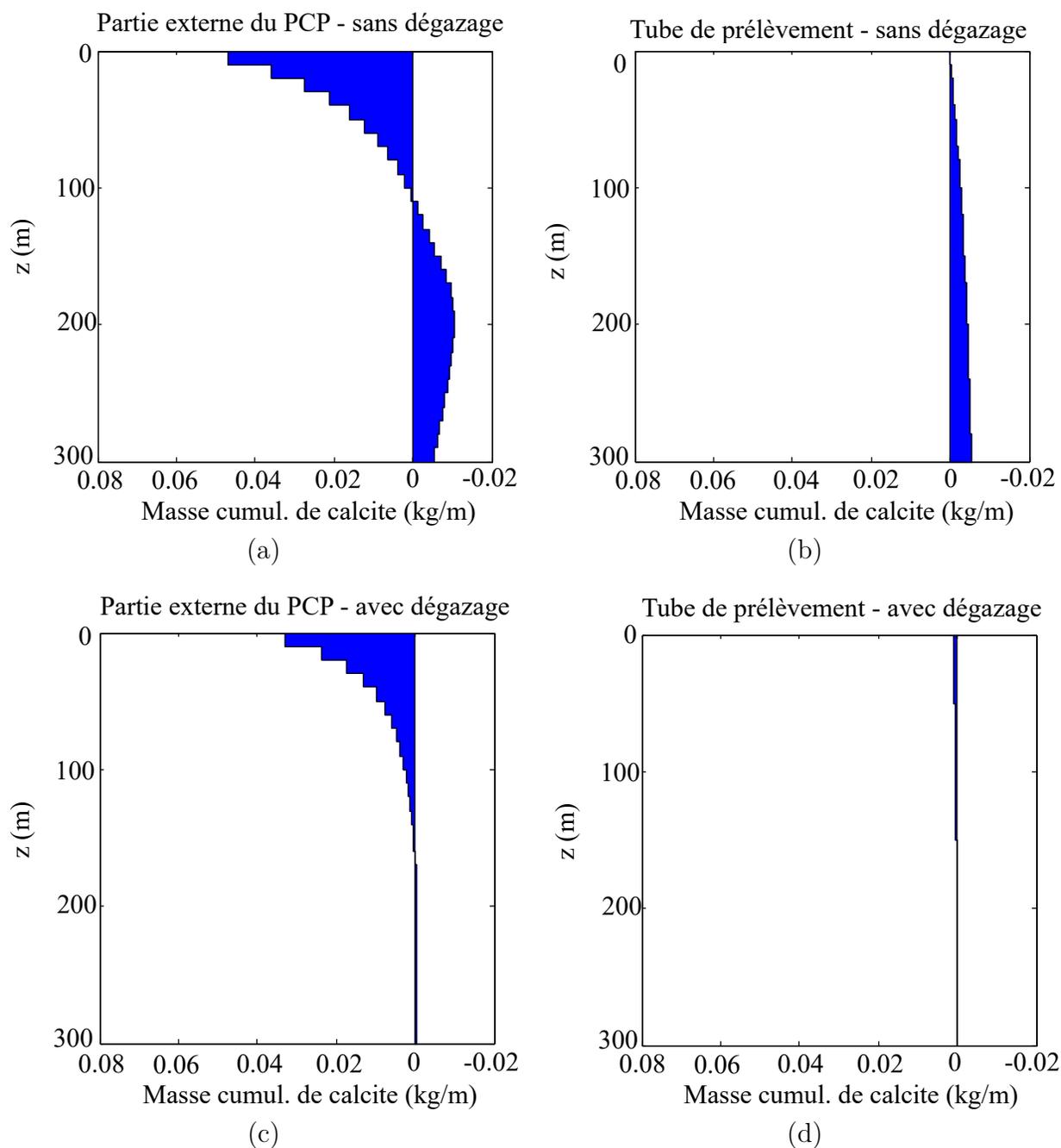


Figure 7.4 Masse de calcite précipitée (valeur positive) ou dissoute (valeur négative) cumulée à la fin de l'année d'opération dans la partie externe du PCP (a et c) et dans le tube de prélèvement (b et d), sans dégazage (première ligne) et avec dégazage (deuxième ligne), lorsque la saignée n'est pas en fonction.

7.2.2 Évolution géochimique de l'aquifère

Dans le but d'identifier l'impact du dégazage du CO_2 au sommet du PCP sur les processus géochimiques au sein de l'aquifère, le transport de l'ion Ca^{2+} a été étudié. Pour ce faire, le flux total du calcium a été investigué sur l'ensemble de l'aquifère. Ce paramètre correspond à la somme des flux advectif, dispersif et diffusif ($kg/(m^2 \cdot s)$), spécifiés respectivement par :

$$F_{Ca^{2+},ad} = v \cdot \alpha_{Ca^{2+}} \quad (7.1)$$

$$F_{Ca^{2+},dis} = - \cdot D_{i,a} \cdot v \cdot \nabla \alpha_{Ca^{2+}} \quad (7.2)$$

$$F_{Ca^{2+},dif} = -\varphi \cdot D_{f,a} \cdot \varphi^{1/3} \cdot \nabla \alpha_{Ca^{2+}} \quad (7.3)$$

où v est la vitesse de Darcy (horizontale ou verticale) (m/s), $D_{f,a}$ la diffusion moléculaire de l'aquifère (m^2/s), $\nabla \alpha_{Ca^{2+}}$ le gradient de l'activité du calcium (kg/m^4) et $D_{i,a}$ la dispersivité longitudinale ou transversale de l'aquifère (m). Le terme $\varphi^{1/3}$ correspond à la tortuosité du milieu, selon le modèle de Millington et Quirk (Millington et Quirk, 1961), correspondant au modèle utilisé par Comsol.

Le transport advectif est engendré par le déplacement d'une masse d'eau, alors que la diffusion se produit lorsqu'il y a un gradient de concentration, même si le fluide n'est pas en déplacement (Fetter, 2008). Le mouvement des espèces dissoutes par diffusion se produit des zones les plus concentrées en direction des zones les moins concentrées. De plus, dans un milieu poreux, l'eau ne se déplace pas partout à la même vitesse, à cause de 1) la taille des pores qui varie, 2) des chemins différents empruntés par les molécules d'eau et 3) de la friction des pores. Ces variations au niveau de la vitesse engendrent un mélange appelé dispersion mécanique, résultant de la dilution des espèces dissoutes (Fetter, 2008). La dispersion peut être longitudinale ou transversale, signifiant qu'elle se produit dans le sens de l'écoulement ou perpendiculairement à l'écoulement. Les dispersivités longitudinale et transversale sont introduites dans Comsol et ce dernier calcule les composantes du tenseur de dispersion.

La distribution de la concentration en calcium au sein de l'aquifère, ainsi que la direction du flux total de cet ion sont illustrées à la Fig. 7.5, pour les cas avec et sans dégazage, aux mois de juillet et décembre. L'évolution du Ca^{2+} au sein de la matrice géologique lorsque le puits est parfaitement scellé a déjà été décrite à la section 6.3.4 et il a été mentionné que les variations de la concentration aux alentours de l'ouvrage géothermique sont engendrées par les fluctuations de la température. La zone appauvrie en calcium observée au

mois de juillet proche du puits fermé à l'atmosphère est également présente lorsque le système est soumis au dégazage, mais elle s'étire toutefois sur un plus grand rayon (Fig. 7.5 a et c). De plus, elle persiste jusqu'au mois de décembre, alors que sans échange gazeux, cette fraction de l'aquifère est enrichie en Ca^{2+} , en réponse à la baisse de la température (Fig. 7.5 b et d). Ce comportement est expliqué par le gradient de la concentration en calcium, influençant de manière significative le flux total et les paragraphes suivants visent à le démontrer. Une attention particulière doit être portée à l'échelle utilisée pour illustrer la concentration en calcium, qui diffère largement pour les Fig. 7.5 (a) à (d). Par exemple, à la Fig. 7.5 (b), l'amplitude de la variation de la concentration en calcium est nettement moins prononcée que pour les trois autres figures.

Selon la Fig. 7.5 (a), au mois de juillet, le flux total de l'espèce Ca^{2+} aux alentours du puits fermé à l'atmosphère est contraire à l'écoulement souterrain (décrit à la Fig. 7.6) entre 0 et 150 m de profondeur. Ce comportement s'explique par le transport dispersif de l'ion Ca^{2+} , fortement dépendant du gradient de la concentration. À l'entrée du puits, l'injection d'eau chaude favorise la précipitation de la calcite, diminuant subséquemment la concentration en calcium. De ce fait, le flux dispersif s'effectue en direction du puits, soit de la concentration la plus élevée en direction de la concentration la plus faible. Ce transfert d'ion vers le PCP abaisse la concentration en Ca^{2+} dans cette zone de l'aquifère. Pour des questions de lisibilité, il était inévitable de normaliser la taille des flèches, signifiant que l'amplitude du flux n'est pas indiquée sur cette figure.

Le flux diffusif s'effectue également de la concentration la plus élevée en direction de la concentration la plus faible. Pour identifier l'importance des différents processus, les flux advectif, diffusif et dispersif de l'espèce Ca^{2+} dans l'aquifère à 0.5 m du centre du puits et à 40 m de profondeur ont été tracés en fonction du temps, avec et sans dégazage (Fig. 7.7 a). La profondeur du point a été choisie par hasard mais devait se trouver dans la partie supérieure du système. Les valeurs négatives indiquent un flux en direction du puits, alors que les valeurs positives expriment un flux opposé à l'ouvrage géothermique. Les résultats démontrent que le flux dispersif est dominant au mois de juillet (entre 182 à 112 j) par rapport au transport advectif et diffusif. De plus, le flux diffusif est négligeable tout au long de l'année. La Fig. 7.7 n'illustre pas l'amplitude du flux total de l'ion Ca^{2+} en fonction du temps, car il est présenté ultérieurement à la Fig. 7.18.

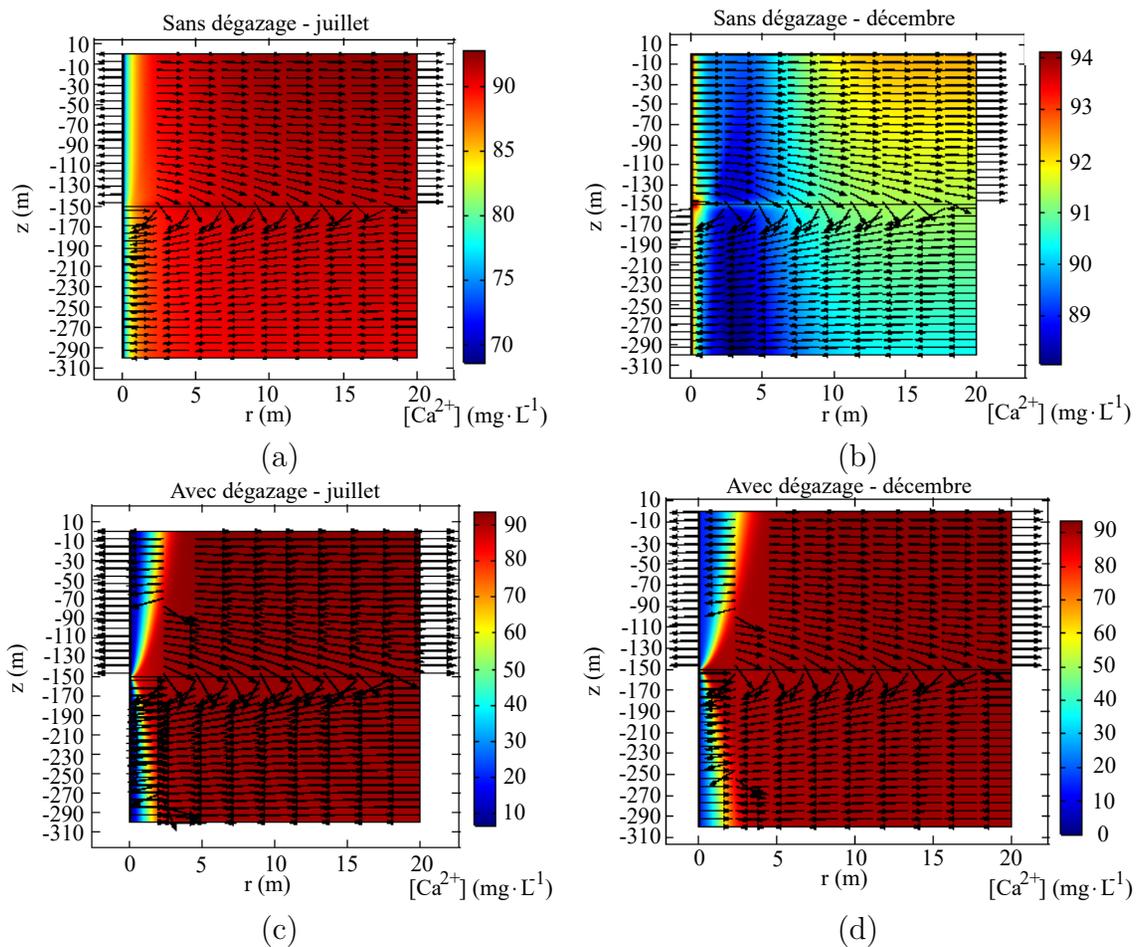


Figure 7.5 Distribution de la concentration en Ca^{2+} dans le puits et l'aquifère fracturé, sans dégazage (a et b) et avec dégazage (c et d), aux mois de juillet (colonne de gauche) et décembre (colonne de droite), lorsque la saignée n'est pas en fonction. Les flèches illustrent la direction du flux total du calcium.

Dans la partie inférieure du système, le flux total proche du puits fermé à l'atmosphère s'effectue en direction de la paroi externe du modèle, signifiant qu'il est opposé à l'écoulement souterrain (Fig. 7.5 a). Ce comportement est également expliqué par le gradient de la concentration. À la Fig. 7.2 (a), il a été démontré que la concentration en calcium dans le fluide descendant augmente entre 100 et 300 m de profondeur. Par conséquent, la concentration en Ca^{2+} à la base du PCP dépasse la concentration mesurée dans l'aquifère, expliquant la direction du flux total. La Fig. 7.7 (b), illustrant l'évolution temporelle des trois flux dans l'aquifère à 0.5 m du centre du puits et 240 m de profondeur (profondeur choisie par hasard), avec et sans dégazage, indique que le flux dispersif est également dominant dans la partie inférieure du système au mois de juillet (entre 182 à 112 j). Il peut donc être conclu qu'aux alentours du puits, le flux dispersif contrôle le flux total, alors qu'en s'éloignant de l'ouvrage géothermique, le flux total est fortement influencé par le transport advectif, puisque le gradient de la concentration en calcium est faible.

Au mois de décembre, le gradient de la concentration en calcium entre le puits parfaitement scellé et l'aquifère est plus faible que durant la saison chaude, puisque les charges de chauffage sont inférieures aux charges de climatisation. Par conséquent, le flux total est contrôlé par l'écoulement de l'eau souterraine et ce, sur l'ensemble de l'aquifère (Fig. 7.5 b). Les Fig. 7.7 (a) et (b) confirment que durant l'hiver ou plutôt durant toute l'année sauf durant la période estivale (entre 150 et 250 jours environ), sans dégazage, le flux advectif est dominant dans les parties inférieure et supérieure du domaine.

Lorsque le système est ouvert à l'atmosphère, la concentration en calcium au sein du PCP est plus faible et ce, durant toute la durée de l'opération (voir Fig. 7.1 d et Fig. 7.2 a et b). L'été, aux alentours du puits, les ions Ca^{2+} se déplacent donc en direction de l'ouvrage géothermique entre 0 et 150 m de profondeur, sous l'influence du transport dispersif (Fig. 7.5 c). La Fig. 7.7 (a) confirme que le flux dispersif est supérieur au flux advectif dans cette zone du système, durant la saison chaude.

Dans la partie inférieure de l'aquifère, le flux total s'effectue dans la direction opposée de l'écoulement. Ce comportement est également expliqué par l'augmentation de la concentration en calcium au sein du fluide descendant avec la profondeur (voir Fig. 7.2 a). La Fig. 7.7 (b) indique qu'au mois de juillet le flux dispersif est dominant dans cette zone du système, pour le cas ouvert à l'atmosphère. En s'éloignant de l'ouvrage géothermique, le gradient de la concentration en calcium diminue, signifiant que la composante advective du flux total

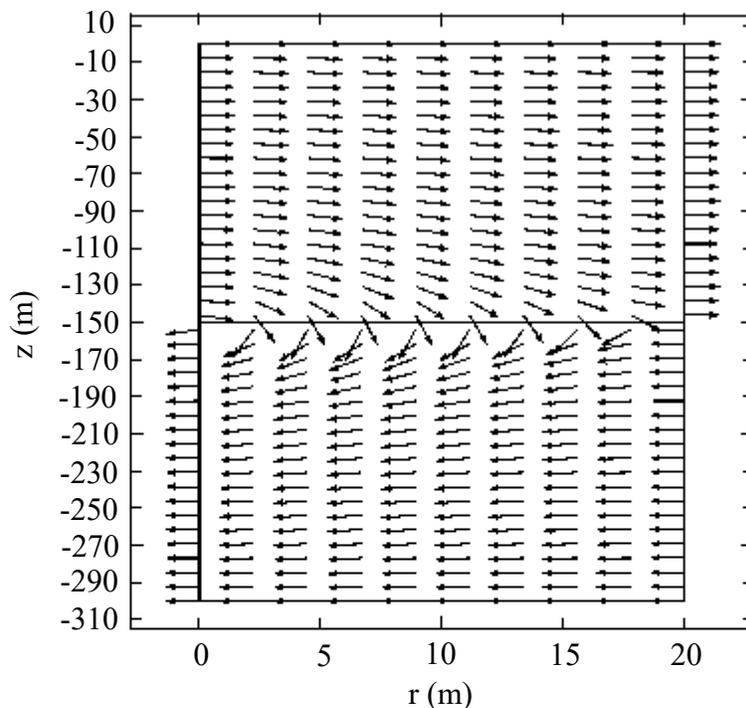
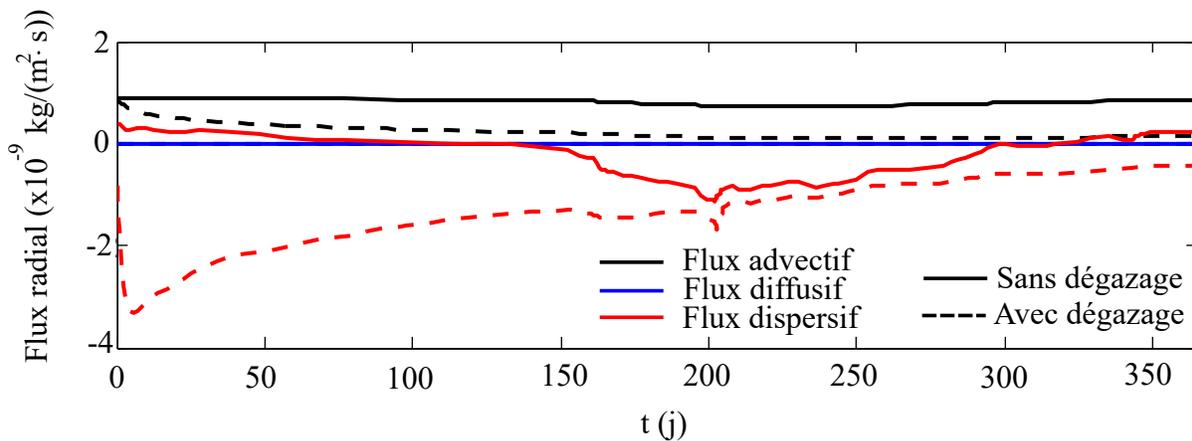


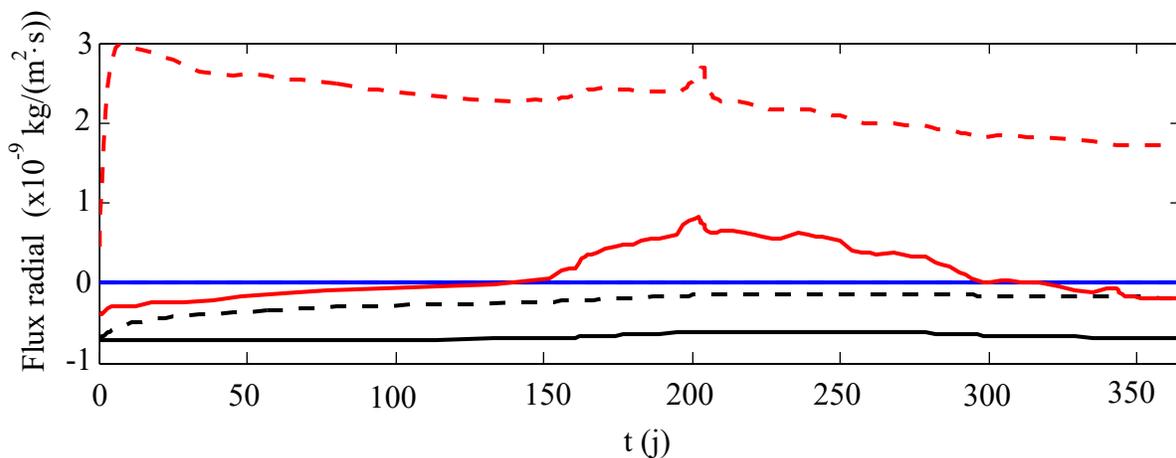
Figure 7.6 Direction de l'écoulement souterrain au sein de l'aquifère, lorsque la saignée n'est pas en fonction.

prend davantage d'importance. Au mois de décembre, la direction du flux total est similaire à celle observée au mois de juillet (Fig. 7.5 d), puisque la concentration en calcium au sein du puits varie peu entre juillet (environ 7 mg/L) et décembre (environ 13 mg/L), en raison du dégazage du CO_2 .

En ayant un impact sur le gradient des concentrations, le dégazage du CO_2 influence de manière significative la distribution des espèces au sein de l'aquifère. Il a été démontré que dans les zones présentant un gradient de concentration élevé, le flux dispersif est dominant, alors que le flux advectif est supérieur quand le gradient est faible. L'influence du dégazage sur le taux de réaction de la calcite est présentée dans la section suivante, consacrée aux processus géochimiques au sein de la fracture. En effet, lorsque la saignée n'est pas en fonction, le comportement observé dans la fracture est relativement similaire à ce qui se produit dans le reste de l'aquifère.



(a)



(b)

Figure 7.7 Évolution temporelle des flux radiaux advection, diffusion et dispersion de l'espèce Ca^{2+} , avec et sans dégazage, (a) dans la partie supérieure du système (0.5 m du centre du puits et à 40 m de profondeur) et (b) dans la partie inférieure du système (0.5 m du centre du puits et à 240 m de profondeur), lorsque la saignée n'est pas en fonction.

7.2.3 Évolution géochimique de la fracture

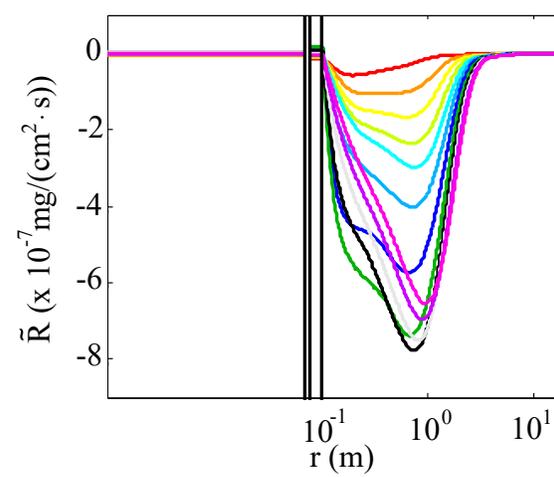
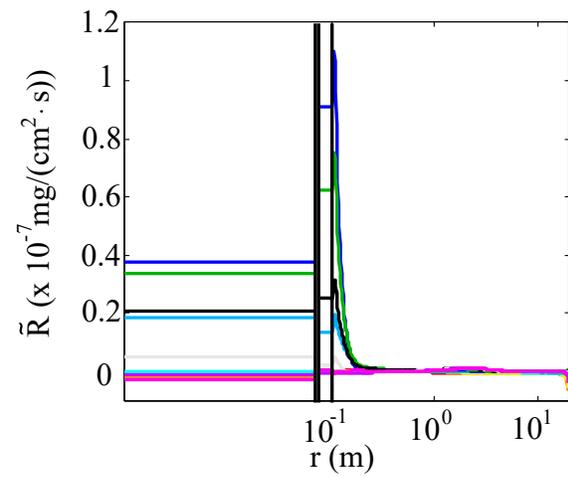
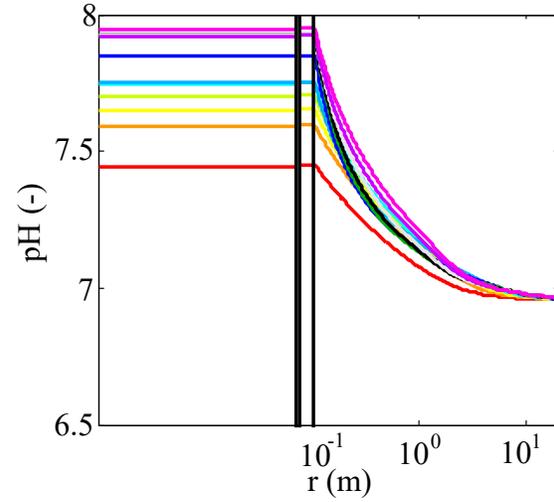
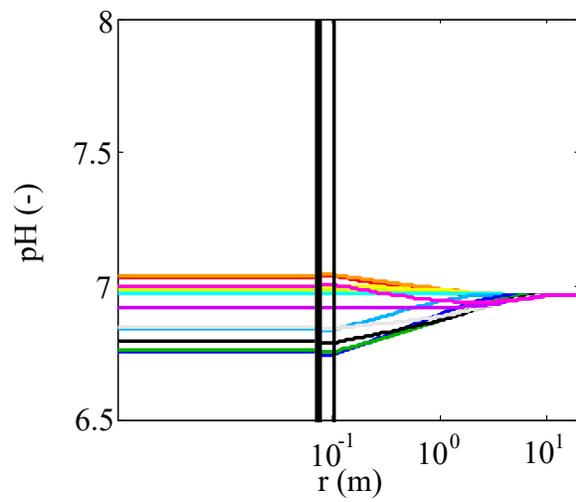
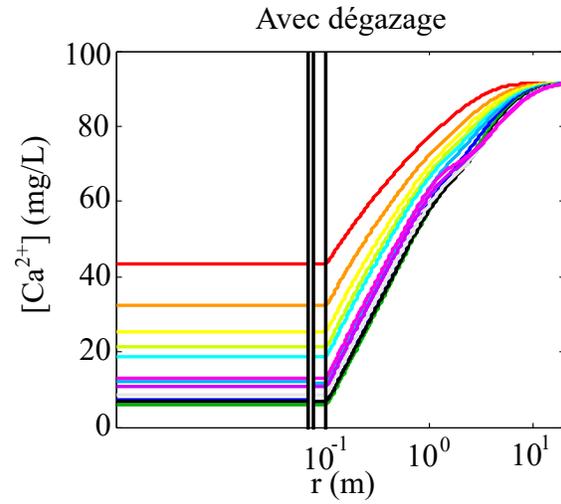
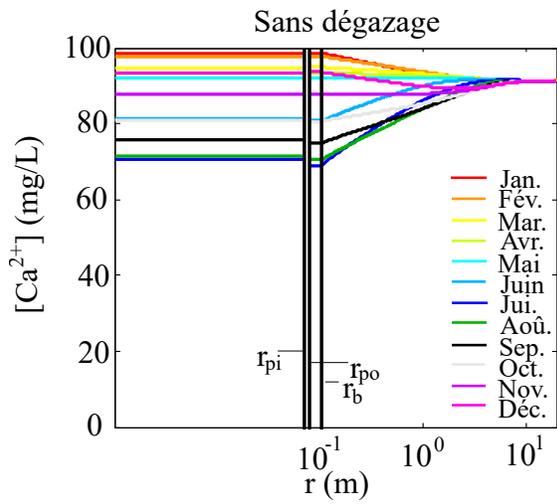
À la section 6.3.3, il a été démontré que l'injection et l'extraction de chaleur au sein du PCP parfaitement scellé se ressentent dans la fracture sur un rayon d'environ 8 m, lorsque la saignée n'est pas en fonction. De ce fait, sans dégazage, les processus géochimiques au sein de la fracture sont contrôlés par les fluctuations de la température. Cependant, même si les variations de température sont identiques, le rayon d'impact du puits augmente lorsqu'il est soumis aux échanges gazeux avec l'atmosphère. Ce comportement s'explique par l'augmentation du gradient de la concentration des espèces, favorisant le transport des ions et molécules

par dispersion et diffusion. Ce rayon d'impact est mis en évidence à la Fig. 7.8, illustrant les profils radiaux de la concentration en calcium, du pH, du taux de réaction de la calcite et de l'ouverture de la fracture, à 150 m de profondeur, avec et sans dégazage. En raison de la différence d'amplitude du taux de réaction et de l'ouverture de la fracture entre les cas avec et sans dégazage, une échelle différente pour l'axe des ordonnées a dû être utilisée pour les Fig. 7.8 (e) à (h).

En s'approchant du PCP fermé à l'atmosphère, la concentration en calcium au sein de la fracture augmente l'hiver, puis diminue l'été, en réponse aux fluctuations de la température (Fig. 7.8 a). Cependant, lorsqu'un dégazage de CO_2 est observé au sommet du PCP, la concentration en Ca^{2+} diminue toute l'année en s'approchant de l'ouvrage (Fig. 7.8 b). Ce comportement est expliqué par le déplacement des ions en direction du puits appauvri en Ca^{2+} . Sans saignée, le transport dispersif est plus important que le transport advectif, signifiant que l'eau entrant dans la fracture avec une composition chimique initiale à l'équilibre n'arrive pas à combler cette baisse de la concentration en calcium.

Ce comportement est également observé pour l'espèce H^+ . Sans dégazage, le pH diminue durant la saison chaude en s'approchant du puits, alors qu'il augmente durant la saison froide (Fig. 7.8 c). D'autre part, pour le cas présentant un dégazage, le pH au sein de la fracture augmente toute l'année en s'approchant du puits (Fig. 7.8 d). Ce comportement est expliqué par le transport dispersif de l'ion H^+ qui s'effectue en direction du puits appauvri en hydrogène à la suite du dégazage.

La variation de la signature chimique de l'eau souterraine au sein de la fracture influence fortement le taux de réaction de la calcite. Sans dégazage, la baisse de la concentration en calcium durant la période estivale conduit l'eau souterraine circulant dans la fracture dans un état de sous-saturation par rapport à la calcite, favorisant ainsi la dissolution (Fig. 7.8 e). En revanche, l'augmentation de la concentration en Ca^{2+} durant l'hiver amène le fluide dans un état de sursaturation par rapport à la calcite, engendrant sa précipitation. Le taux de précipitation est toutefois plus faible que le taux de dissolution, puisque les charges de climatisation sont supérieures aux charges de chauffage. Lorsque le puits est soumis au dégazage du CO_2 , l'augmentation du pH au sein de la fracture favorise la précipitation de la calcite tout au long de l'année entre 1 et 20 m du centre du puits (Fig. 7.8 f). Cependant, en s'approchant du puits (entre la paroi du forage et $r = 1$ m), le taux de précipitation diminue, en réponse à la baisse de la concentration en calcium, ayant pour impact de réduire l'état de sursaturation de l'eau souterraine par rapport à la calcite.



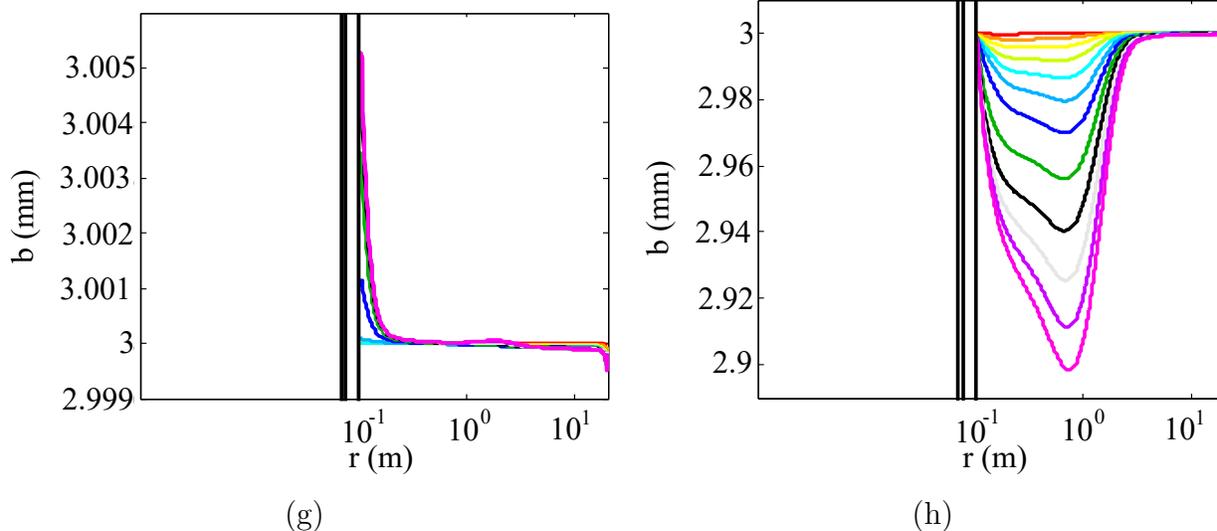


Figure 7.8 Profils radiaux de la concentration en calcium (a et b), du pH (c et d), du taux de réaction de la calcite (e et f) et de l'ouverture de la fracture (g et h), à 150 m de profondeur, sans dégazage (colonne de gauche) et avec dégazage (colonne de droite), lorsque la saignée n'est pas en fonction.

La variation de l'ouverture de la fracture est dictée par le taux de réaction de la calcite. Sans dégazage, à la fin de l'année d'opération, l'ouverture de la fracture a légèrement augmenté proche du puits, soit de 0.005 mm (Fig. 7.8 g). Dans ce cas, la précipitation de la calcite n'est pas problématique pour l'opération du puits. Cependant, lorsque le PCP est soumis au dégazage, à environ 1 m du centre de l'ouvrage, l'ouverture de la fracture a diminué de 0.1 mm, une variation de 3.33 % après une année d'opération (Fig. 7.8 h). Sans saignée, l'écoulement d'eau en direction du puits est faible, signifiant que le colmatage de la fracture est moins problématique pour l'opération du système qu'avec une saignée. En effet, lorsque la saignée est active, l'écoulement de l'eau souterraine est concentré dans la fracture et une baisse de sa perméabilité pourrait réduire l'effet bénéfique de la saignée. Cette analyse est présentée à la section suivante.

Dans le but de quantifier la précipitation de la calcite, le bilan de masse sur l'ensemble de la fracture a été calculé en fonction du temps, avec et sans dégazage. Ces résultats sont présentés à la Fig. 7.9. À la fin d'une année d'opération, environ 2.5 kg de calcite ont précipités dans la fracture, lorsque le puits est soumis au dégazage, contre moins de 0.5 kg sans dégazage.

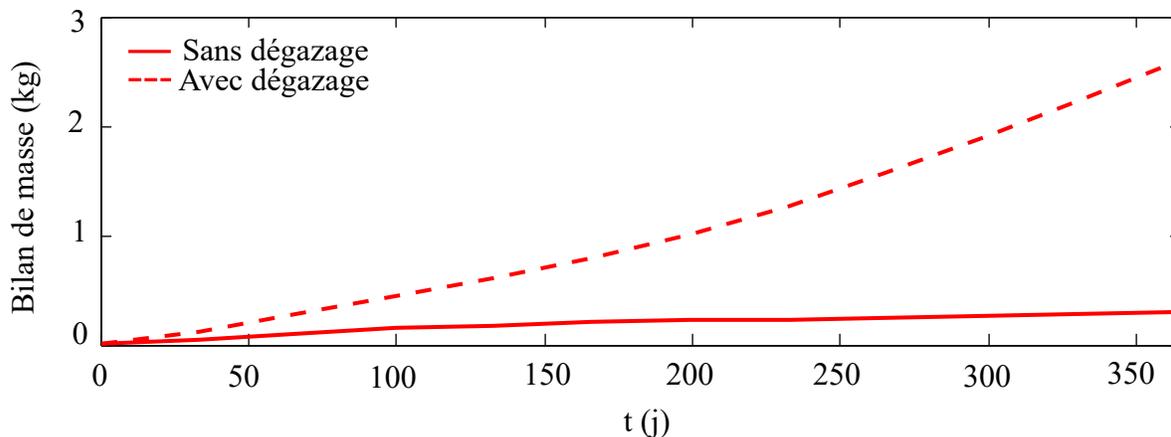


Figure 7.9 Évolution temporelle du bilan de masse dans la fracture, avec et sans dégazage, lorsque la saignée n'est pas en fonction.

Pour mieux discerner les zones favorables à la précipitation, la masse de calcite précipitée ou dissoute cumulée dans la fracture, en fonction de la distance par rapport au centre du puits, a été calculée après une année d'opération, pour les cas avec et sans dégazage (Fig. 7.10). L'eau souterraine au sein de la fracture n'est jamais parfaitement à l'équilibre chimique, en raison des faibles variations de température ou de concentration notamment liées au transport advectif, dispersif et diffusif entre la fracture et l'aquifère. Un faible taux de précipitation ou de dissolution est donc constamment observé. Lorsque le puits est fermé à l'atmosphère, une petite quantité de calcite s'accumule dans la fracture entre 3 et 20 m du centre du puits (Fig. 7.10 a). La masse cumulée maximale par section de 1 m est légèrement supérieure à 0.1 kg et se situe entre 19 et 20 m du centre du puits. Dans cette zone de la fracture, la section est de 122.5 m^2 et le volume de 0.37 m^3 , signifiant que 992 kg de calcite peuvent précipiter avant de colmater la totalité de l'espace disponible. Dans l'exemple présenté, seul 0.01% de cette zone est colmaté par la calcite. Sans dégazage et sans saignée, l'eau souterraine au sein de la fracture peut donc être considérée comme à l'équilibre chimique.

Dans le cas présentant un dégazage, la masse cumulée maximale par section de 1 m est de 1.5 kg et se situe entre 1 et 2 m du centre du puits (Fig. 7.10 b). La section de la fracture dans cette zone est de 9.4 m^2 , alors que le volume disponible est de 0.028 m^3 et la masse maximale pouvant précipiter dans cette partie est de 75.6 kg. Par conséquent, entre 1 et 2 m du centre du puits, 1.98 % de la fracture sont colmatés, réduisant légèrement sa perméabilité. Après une année d'opération, l'accumulation de calcite dans la fracture ne posera probablement pas de problème opérationnel, puisque la masse précipitée est encore relativement faible. Cependant,

après 25 ans, 50% de la fracture pourrait être obturée. À nouveau sans saignée, l'apport d'eau en direction du puits est faible et la diminution de la perméabilité de la fracture n'est pas problématique. En réalité, la saignée est opérée uniquement lorsqu'elle est nécessaire. La fracture aura donc tendance à se colmater lorsque la saignée n'est pas en fonction, puis en l'activant, l'apport d'eau au puits pourrait être diminué due à la baisse de la perméabilité. Par conséquent, l'impact thermique de la saignée pourrait être réduit.

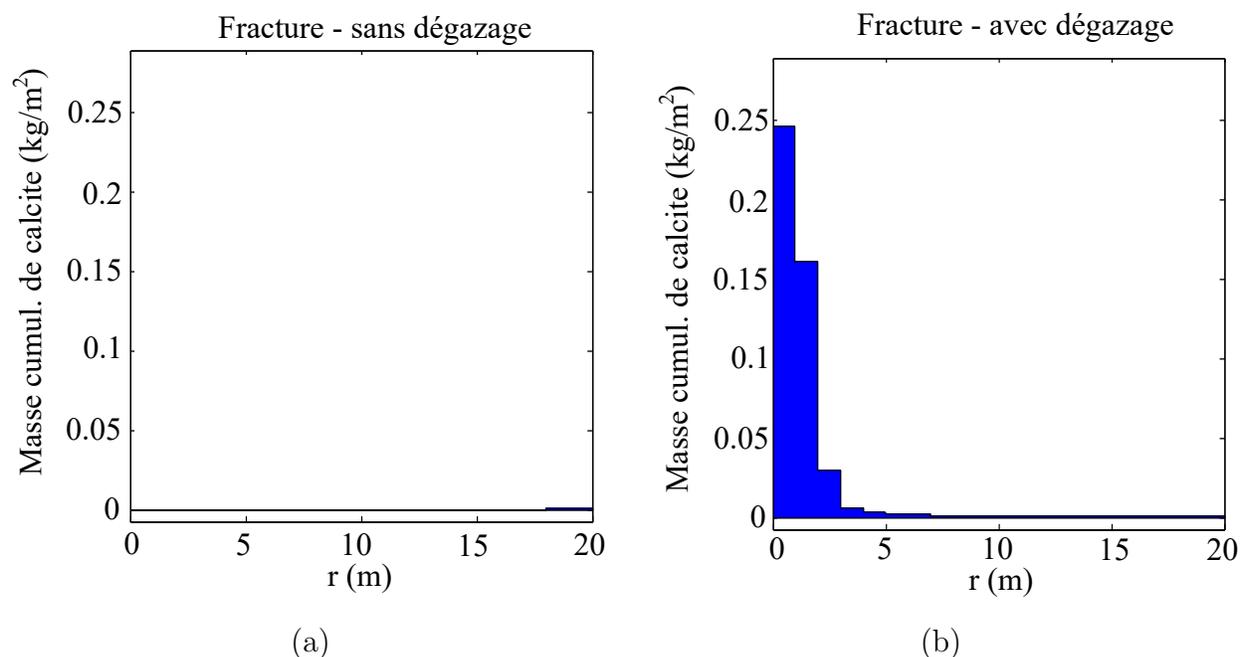


Figure 7.10 Masse de calcite précipitée ou dissoute cumulée après une année d'opération dans la fracture, (a) sans dégazage et (b) avec dégazage, lorsque la saignée n'est pas en fonction.

7.3 Cas avec saignée

7.3.1 Évolution géochimique du puits

Dans cette section, les simulations intègrent un taux de saignée constant de 10%, signifiant que l'eau du puits se renouvelle au fil du temps. La signature chimique de l'eau souterraine, ainsi que le taux de réaction de la calcite sont de ce fait considérablement différents par rapport aux cas présentés dans la section précédente. L'objectif de cette section est d'identifier si l'effet bénéfique de la saignée sur le comportement géochimique du PCP se maintient, lorsque ce dernier est ouvert à l'atmosphère à son sommet.

Précédemment, il a été démontré que sans saignée, la diminution de la concentration en

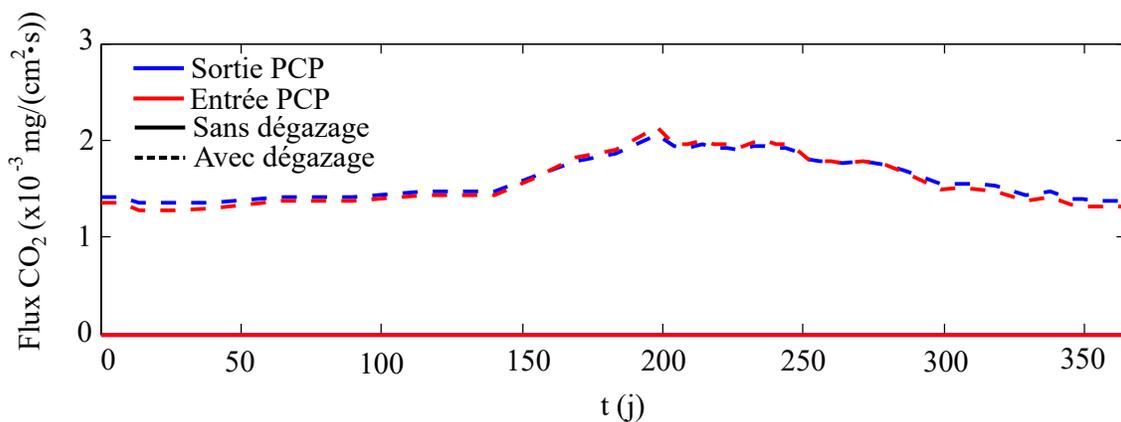
H_2CO_3 au sein du puits avait pour conséquence de réduire le dégazage au fil du temps. Dans cette section, l'apport d'eau en provenance de l'aquifère, lorsque la saignée est active, empêche la réduction du flux de CO_2 en fonction du temps (Fig. 7.11 a), en limitant la baisse de la concentration en H_2CO_3 liée au dégazage (Fig. 7.11 b). Ce comportement a pour effet de maintenir un flux de CO_2 plus ou moins constant durant toute l'année, à l'exception de la période estivale, durant laquelle ce dernier croît en réponse à l'augmentation de la température (Fig. 7.11 a). En comparant les Fig. 7.1 et 7.11, on remarque que le flux de CO_2 au sommet du puits est plus élevé lorsque la saignée est active, favorisant davantage la précipitation de la calcite.

La croissance du flux de CO_2 durant l'été est plus importante lorsque la saignée est en opération. Ce comportement est expliqué par le fait que sans saignée, l'élévation de la température a tendance à augmenter le flux, alors que la baisse de la concentration en H_2CO_3 a tendance à le diminuer, atténuant de ce fait l'impact de la température sur le dégazage. De plus, il apparaît que la différence de concentration en H_2CO_3 entre l'entrée et la sortie du puits est davantage marquée en activant la saignée. L'augmentation de la concentration en H_2CO_3 au sein de la boucle souterraine provient de l'apport d'eau sous l'influence de la saignée, ainsi que de la précipitation de la calcite ($CaCO_{3(s)} + H_2CO_3^o \rightleftharpoons Ca^{2+} + 2HCO_3^-$).

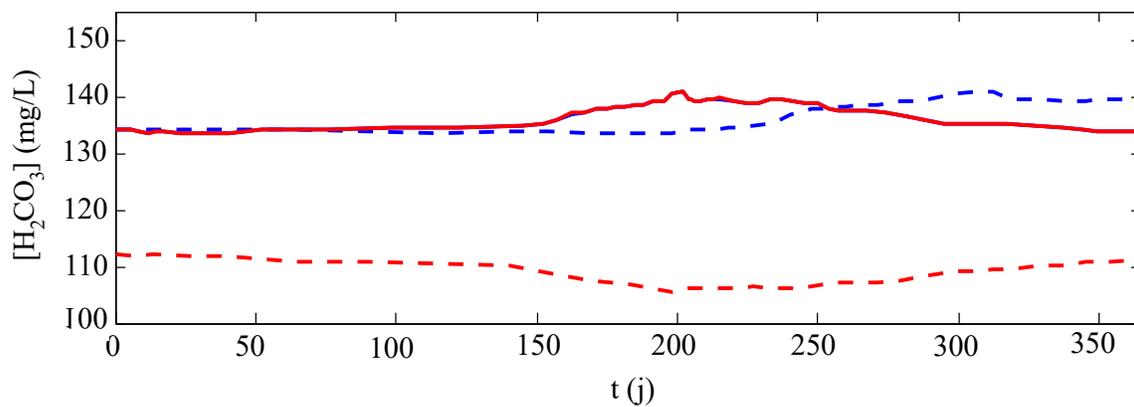
La saignée a également un impact sur le pH de l'eau souterraine circulant au sein du puits. Similairement au cas sans saignée, le dégazage du CO_2 provoque une augmentation du pH, par rapport au puits fermé à l'atmosphère (Fig. 7.11 c). Cependant, l'apport d'eau souterraine au sein de l'ouvrage limite la baisse abrupte de la concentration en H^+ , évitant une augmentation du pH au fil du temps.

La variation de la signature chimique de l'eau souterraine influence fortement le taux de réaction de la calcite, affectant l'évolution de la concentration en calcium (Fig. 7.11 d et e). À l'entrée et à la sortie du puits dont le sommet est ouvert à l'atmosphère, la calcite précipite tout au long de l'année, alors qu'elle se dissout l'hiver à l'entrée du puits fermé à l'atmosphère. De plus, étant donné que le flux de CO_2 est plus important lorsque la saignée est en opération, le taux de précipitation au sommet de l'ouvrage est conséquemment plus élevé par rapport au cas sans saignée. L'évolution du taux de réaction de la calcite au sommet du puits ouvert à l'atmosphère, avec et sans saignée, est illustré sur la même figure, dans le but de faciliter la comparaison entre ces deux cas (Fig. 7.12). Finalement, similairement aux espèces H_2CO_3 et H^+ , la saignée empêche une diminution abrupte de la concentration en calcium au sein du

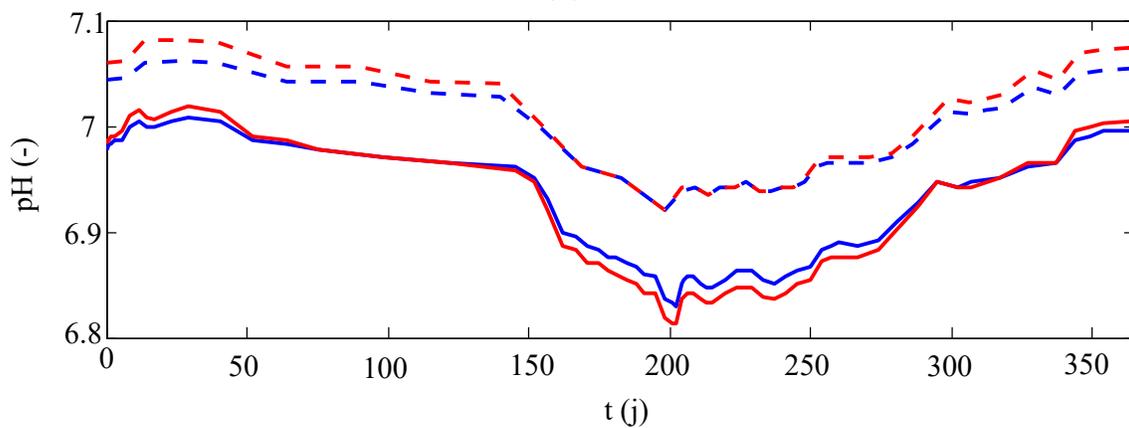
puits, augmentant conséquemment l'état de saturation de l'eau par rapport à la calcite. La concentration en Ca^{2+} est toutefois plus faible au sein du puits dont le sommet est ouvert à l'atmosphère par rapport au puits parfaitement scellé, puisque le taux de précipitation est plus important.



(a)



(b)



(c)

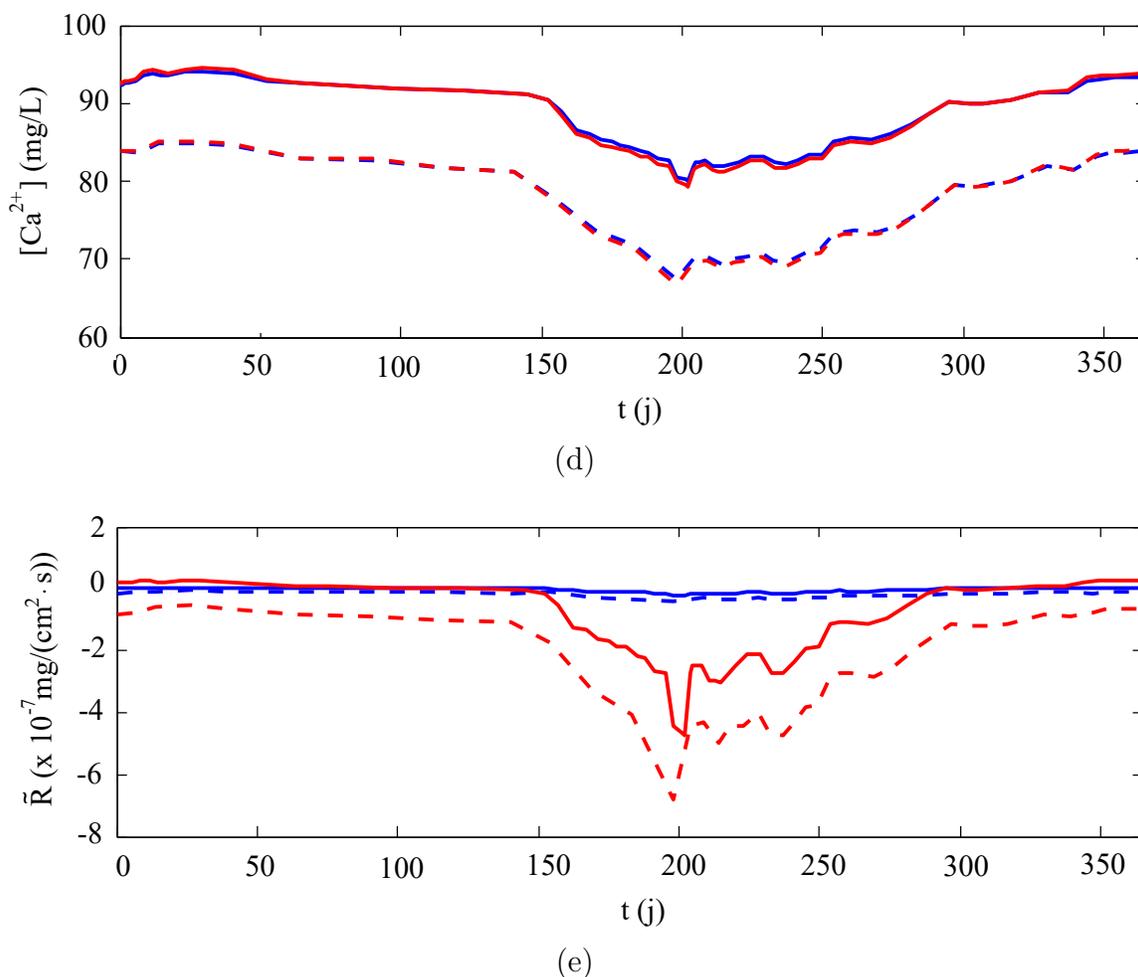


Figure 7.11 Évolution temporelle (a) du flux de CO_2 , (b) de la concentration en H_2CO_3 , (c) du pH, (d) de la concentration en Ca^{2+} et (e) du taux de réaction de la calcite, à l'entrée et à la sortie du puits, avec et sans dégazage, lorsque la saignée est active.

L'impact du dégazage sur le taux de précipitation de la calcite est également illustré à la Fig. 7.13, présentant les profils verticaux du taux de réaction de la calcite, dans les fluides ascendant et descendant des puits ouvert et fermé à l'atmosphère, aux mois de juillet et décembre. Une échelle différente pour l'axe des abscisses a toutefois été utilisée pour des raisons de lisibilité. Les résultats démontrent que dans l'ensemble du puits soumis au dégazage, la calcite précipite l'été et l'hiver. En revanche, la calcite précipite au mois de juillet à l'entrée du puits fermé à l'atmosphère, à la suite de l'injection d'eau chaude, puis se dissout au mois de décembre, en réponse à l'injection d'eau froide. D'autre part, à l'entrée du puits ouvert à l'atmosphère, le taux de précipitation avec saignée est supérieur au taux observé sans saignée, aux mois de juillet et décembre.

Le taux de réaction est intéressant pour définir l'état de saturation de l'eau souterraine par

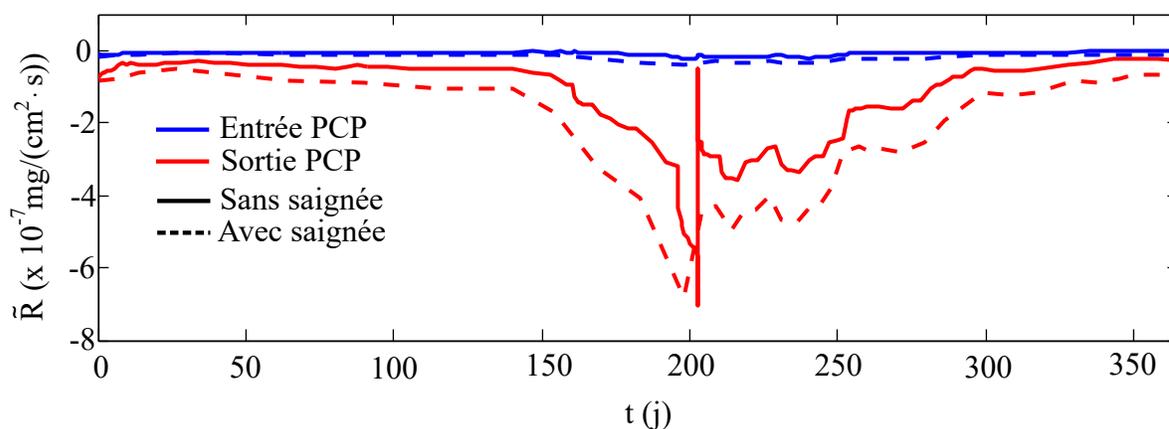


Figure 7.12 Taux de réaction de la calcite en fonction du temps, à l'entrée et à la sortie du puits dont le sommet est ouvert à l'atmosphère, avec et sans saignée.

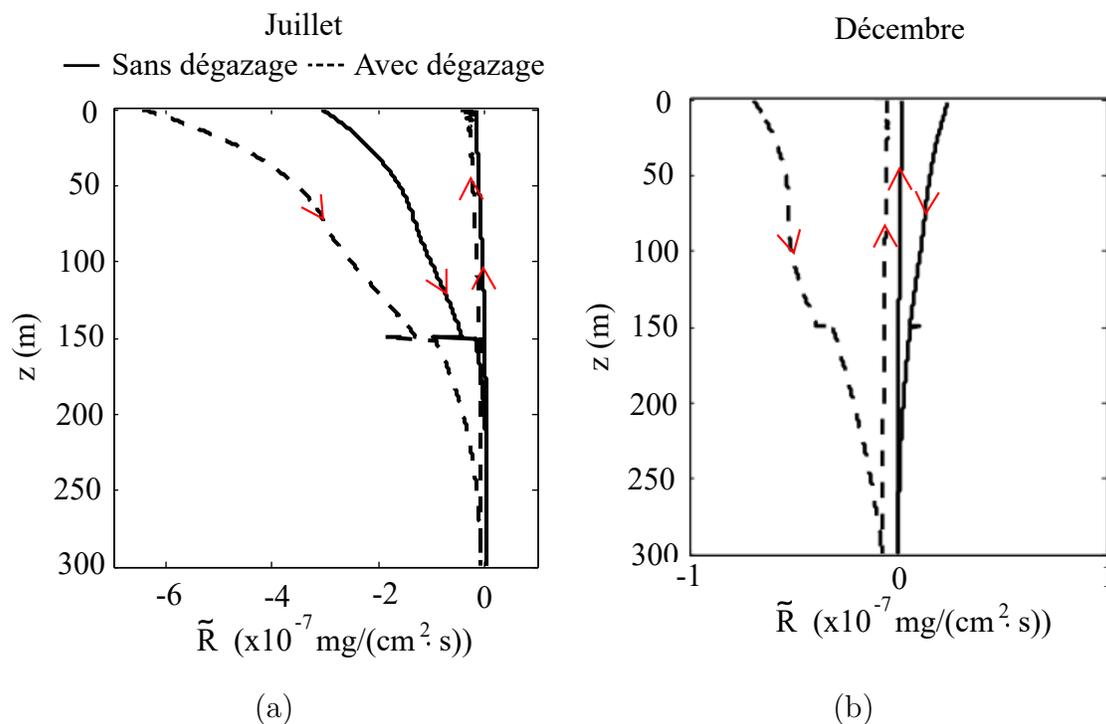


Figure 7.13 Profils verticaux du taux de réaction de la calcite dans les fluides ascendant et descendant du puits aux mois de (a) juillet et (b) décembre, avec et sans dégazage, lorsque la saignée est active.

rapport à la calcite, mais il ne permet pas réellement d'apprécier l'ampleur des processus. Dans le but de quantifier la précipitation de la calcite au sein du puits, le bilan de masse a été calculé en fonction du temps, dans le tube de prélèvement, ainsi que dans la partie

externe du PCP, avec et sans dégazage (Fig. 7.14). Après une année d'opération, le bilan de masse est positif dans la partie externe du puits, avec une masse précipitée cumulée de 0.98 kg sans dégazage et 4.5 kg avec dégazage. Par contre, dans le tube de prélèvement, la masse précipitée cumulée est pratiquement nulle sans dégazage et approxime 0.5 kg avec dégazage. Il apparaît donc clairement que les problèmes opérationnels, pouvant subvenir à la suite de la précipitation de la calcite, peuvent être limités en améliorant l'étanchéité du puits, dans le but de réduire le dégazage. En comparant maintenant les résultats obtenus pour le puits dont le sommet est ouvert à l'atmosphère, avec et sans saignée, la masse cumulée à la fin de l'année augmente de 3.75 kg dans la partie externe du puits et de 0.4 kg dans le tube de prélèvement, en activant la saignée. Il peut donc être conclu que lorsque le sommet du puits est ouvert à l'atmosphère, la saignée perd son effet bénéfique sur les processus géochimiques. En atténuant la baisse de la concentration en H_2CO_3 , elle augmente le dégazage du CO_2 , favorisant davantage le taux de précipitation de la calcite au sein du PCP.

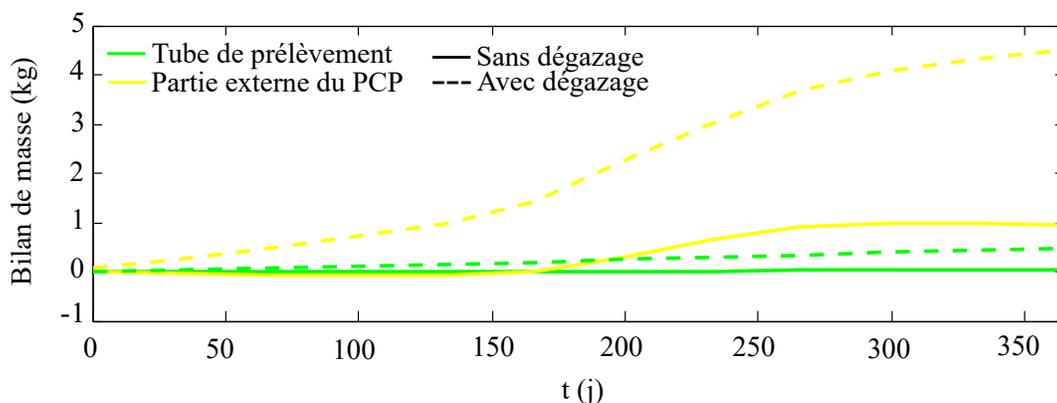


Figure 7.14 Évolution temporelle du bilan de masse de calcite dans le tube de prélèvement et dans la partie externe du puits, avec et sans dégazage, lorsque la saignée est active.

Dans le but d'identifier les zones du puits propices à la précipitation et à la dissolution de la calcite, la masse précipitée ou dissoute cumulée à la fin de l'année a été calculée dans le tube de prélèvement, ainsi que dans la partie externe du PCP, avec et sans dégazage (Fig. 7.15). Pour les cas ouvert et fermé à l'atmosphère, les masses cumulées précipitées et dissoutes dans le tube de prélèvement sont considérées comme négligeables. Par contre, dans la partie externe du puits, la masse précipitée cumulée la plus importante par section de 10 m de profondeur est de 0.25 kg sans dégazage et 0.65 kg avec dégazage. Cette masse maximale se situe entre 0 et 10 m de profondeur. Le volume disponible dans cette zone du puits est de 0.1419 m^3 . En considérant que la totalité de la calcite précipite sur les parois du forage, 0.07 % de cette partie l'ouvrage est colmatée sans dégazage après une année, contre 0.17 %

avec dégazage. Même en considérant que le puits peut être opéré sur plusieurs années, la précipitation de la calcite n'est pas problématique.

En supposant maintenant que la totalité de la masse précipitée (0.98 kg sans dégazage et 5 kg avec dégazage, selon le bilan de masse, voir Fig. 7.14) s'accumule à la base du puits de 0.1016 m de rayon, l'épaisseur de la couche de calcite après une année est de 1.12 cm sans dégazage et de 5.71 cm avec dégazage. Après 25 ans d'opération, la couche de calcite atteindrait 1.4 m dans le puits ouvert à l'atmosphère au sommet. Dans ce cas, la précipitation de la calcite peut être problématique.

Enfin, si la totalité de la calcite précipite dans les équipements hors sol (échangeur de chaleur et pompe à chaleur), ainsi que dans la tuyauterie, la masse est davantage significative en raison des espaces restreints. De ce fait, les équipements peuvent être rapidement colmatés et la précipitation de la calcite pourrait être plus problématique que dans le puits.

7.3.2 Évolution géochimique de l'aquifère

En activant la saignée, l'écoulement de l'eau souterraine au sein de l'aquifère est favorisé et la direction de cet écoulement est présentée à la Fig. 7.16. Le point qui sépare les systèmes d'écoulement inférieur (en direction du PCP) et supérieur (en direction de la paroi latérale du modèle) se situe à 70 m de profondeur, alors qu'il se trouvait à 150 m de profondeur sans saignée (voir Fig. 7.6). Cette variation au niveau du comportement hydrogéologique du puits et de l'aquifère affecte le transport des ions.

La Fig. 7.17 présente la concentration en calcium au sein de l'aquifère, ainsi que la direction du flux total de Ca^{2+} , aux mois de juillet et décembre, avec et sans dégazage. À nouveau, pour des questions de lisibilité, une échelle différente est utilisée pour illustrer la concentration en calcium pour les quatre cas présentés. Lorsque le puits est fermé à l'atmosphère, la direction du flux total est similaire au cas sans saignée (présenté à la section précédente), à la différence que les processus qui se déroulaient entre 0 et 150 m de profondeur sans saignée se produisent entre 0 et 70 m, lorsque la saignée est active (Fig. 7.17 a et b). Cependant, puisque le gradient de la concentration en calcium est plus faible lorsque une partie de l'eau du puits est renouvelée, l'amplitude du flux total est moins importante. Ce comportement est illustré à la Fig. 7.18, présentant l'évolution temporelle du flux total de calcium dans l'aquifère, à 0.5 m du puits et 40 m de profondeur, avec et sans saignée, pour les cas avec et sans dégazage. Les courbes en rouge illustrent le flux total avec saignée et il apparaît clairement qu'il est, la

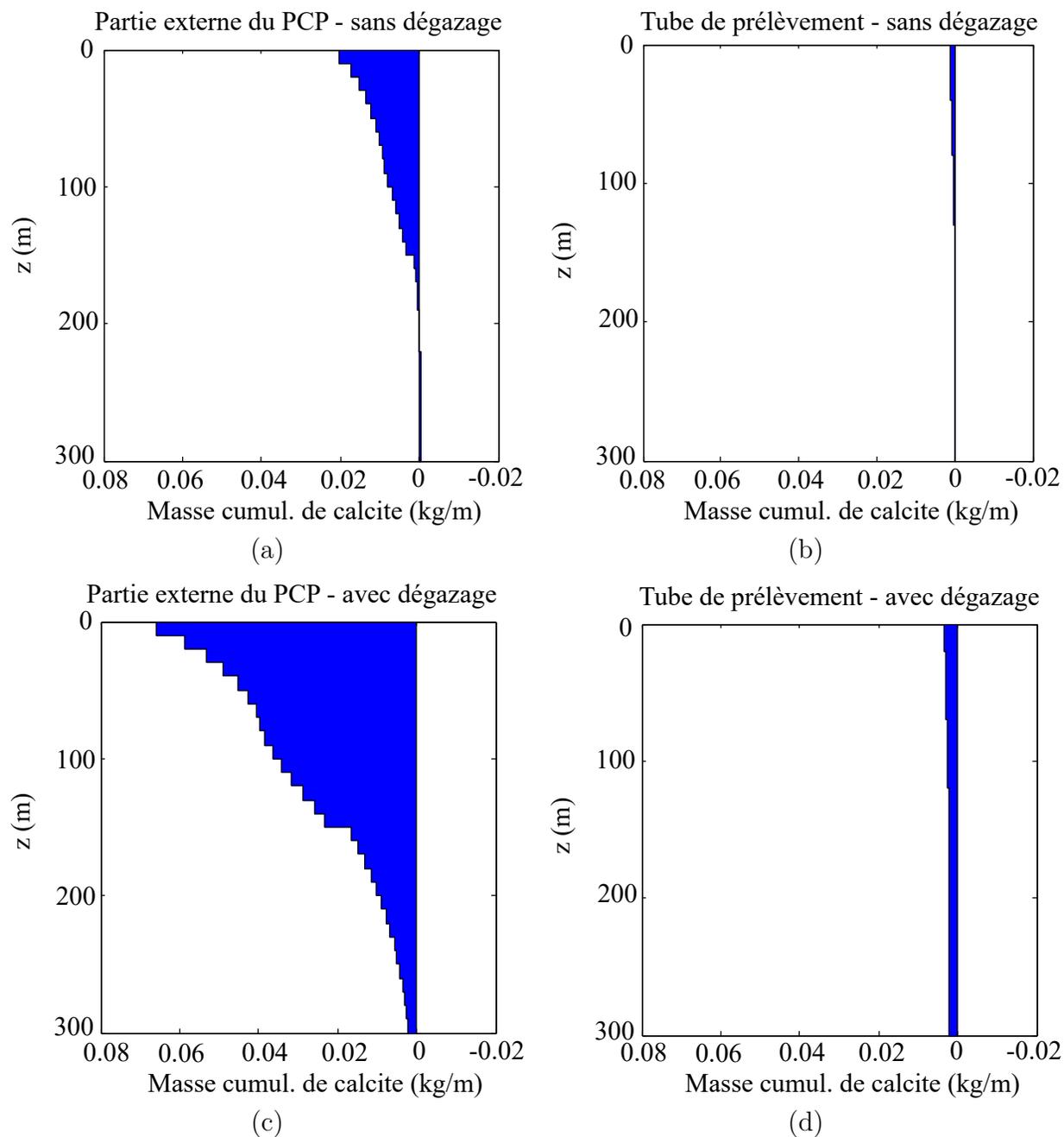


Figure 7.15 Masse de calcite précipitée (valeur positive) ou dissoute (valeur négative) cumulée à la fin de l'année d'opération, dans la partie externe du PCP (a et c) et dans le tube de prélèvement (b et d), sans dégazage (première ligne) et avec dégazage (deuxième ligne), lorsque la saignée est active.

plupart du temps, plus faible dans cette situation.

Lorsque le puits est ouvert à l'atmosphère à son sommet, au mois de juillet, la direction du

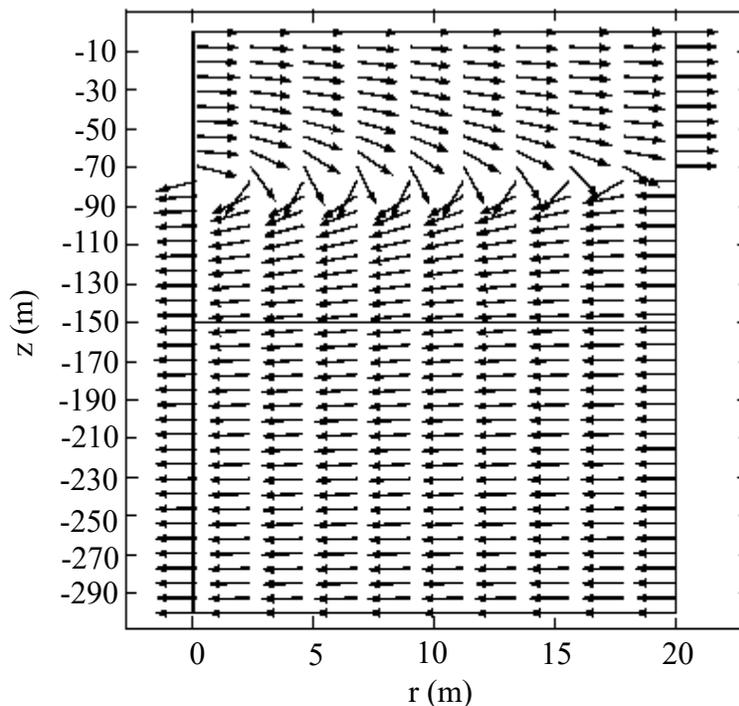


Figure 7.16 Direction de l'écoulement souterrain au sein de l'aquifère, lorsque la saignée est en fonction.

flux est similaire pour les cas avec et sans saignée (à l'exception de la profondeur du point partageant les deux systèmes d'écoulement). Par contre, au mois de décembre, dans la partie supérieure du système, le flux total de Ca^{2+} s'effectue en direction de la paroi latérale du modèle, alors que sans saignée, la direction était inversée (comparer les Fig. 7.5 d et 7.17d). Ce comportement est expliqué par le fait que la concentration en Ca^{2+} au sein du puits augmente à la fin de l'année, à la suite de la baisse de la température. Cette augmentation est davantage marquée lorsque la saignée est en opération (voir les Fig. 7.1 d et 7.11 d). L'hiver, la concentration en Ca^{2+} au sommet du fluide descendant est par conséquent supérieure à la concentration au sein de l'aquifère.

La saignée a donc un impact considérable sur les processus au sein de l'aquifère, puisqu'elle a tendance à réduire le flux total des espèces. En effet, en déchargeant une fraction de l'eau pompée dans un puits d'injection, les fluctuations annuelles de la concentration des espèces sont atténuées. De ce fait, le gradient des concentrations est faible et la composante dispersive et diffusive du flux total réduite.

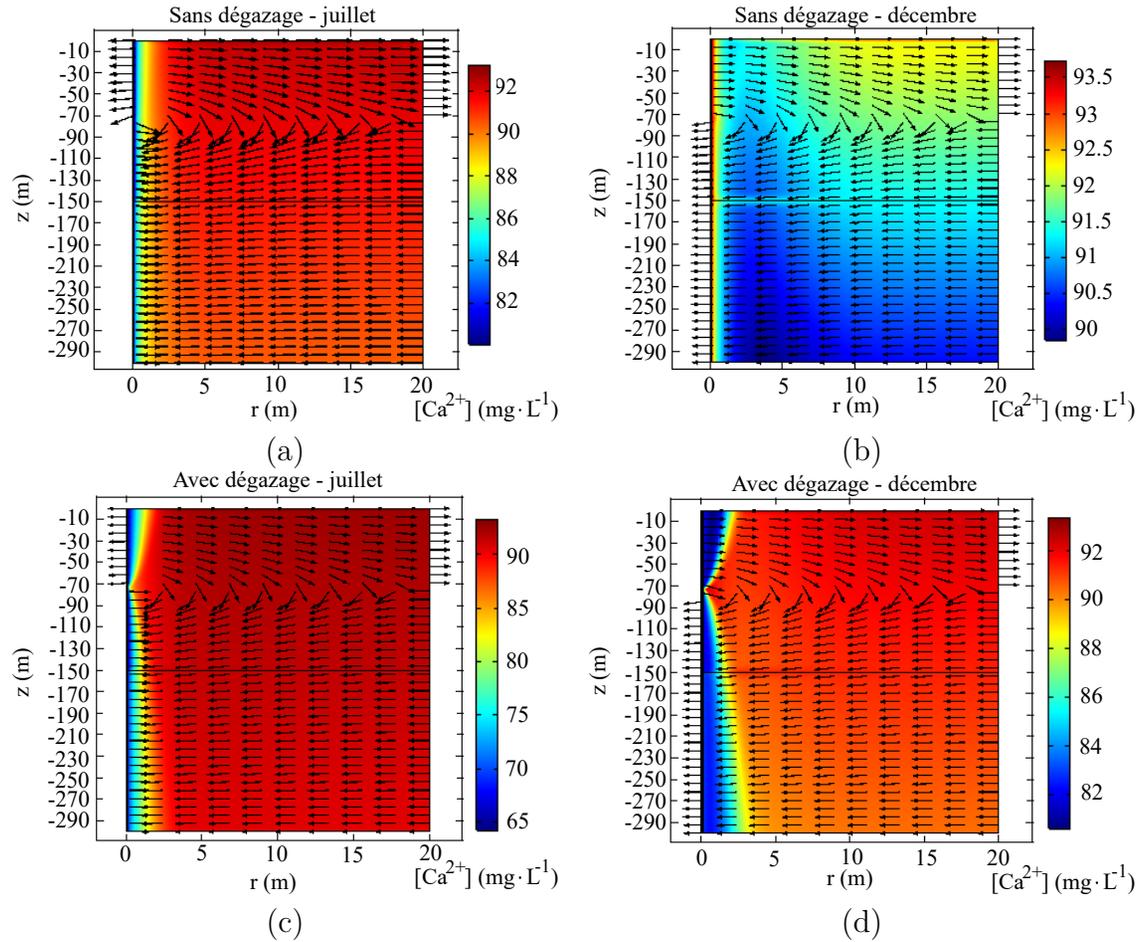


Figure 7.17 Distribution de la concentration en Ca^{2+} dans le puits et l'aquifère fracturé, sans dégazage (a et b) et avec dégazage (c et d), aux mois de juillet (colonne de gauche) et décembre (colonne de droite), lorsque la saignée est active. Les flèches illustrent la direction du flux total de calcium.

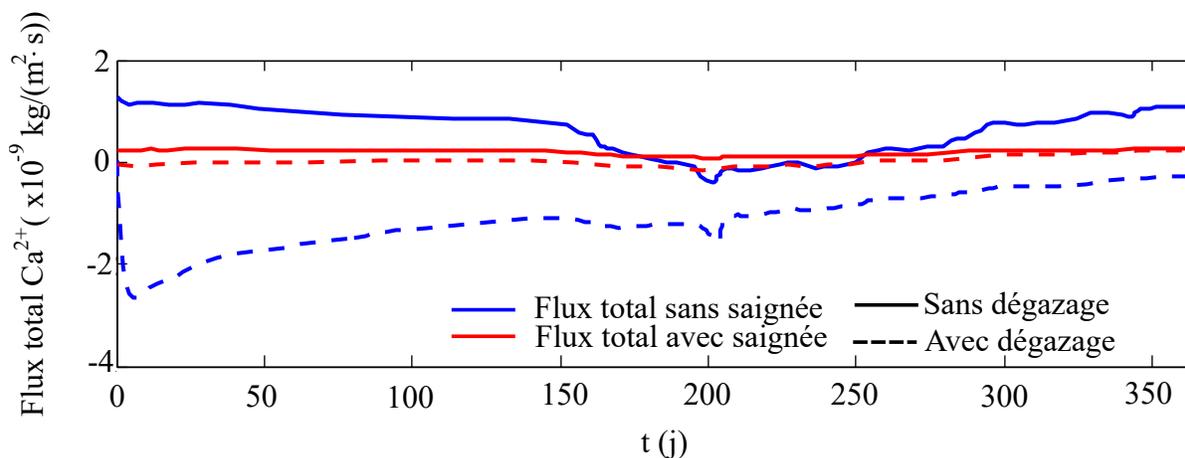


Figure 7.18 Évolution temporelle du flux total de Ca^{2+} dans l'aquifère, à 0.5 m du centre du puits et 40 m de profondeur, avec et sans saignée, pour les cas avec et sans dégazage.

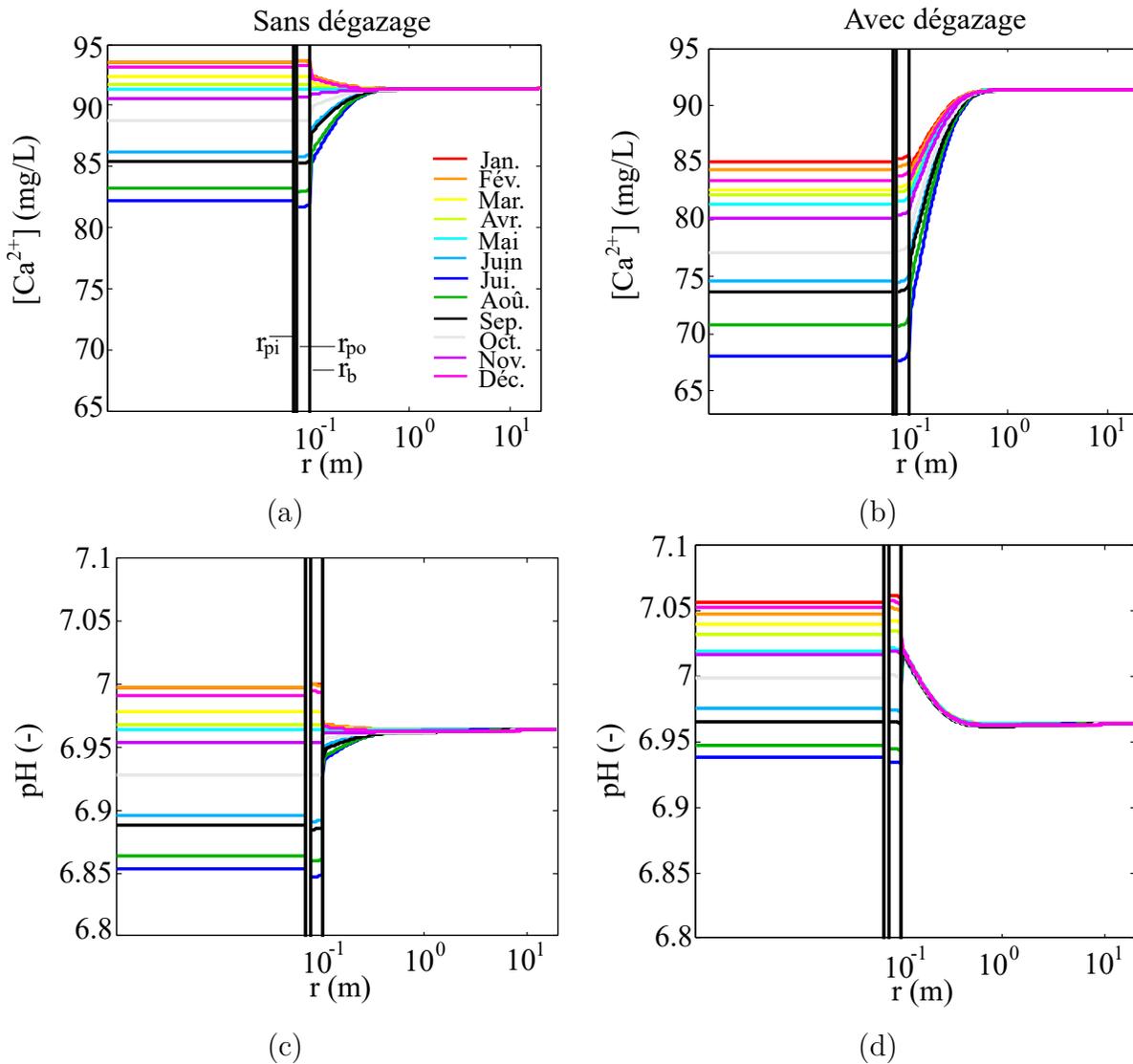
7.3.3 Évolution géochimique de la fracture

L'objectif de cette section est de mettre en évidence l'influence du dégazage au sommet du PCP, sur les processus THG au sein de la fracture, lorsque la saignée est active. Les profils radiaux de la concentration en calcium, du pH, du taux de réaction de la calcite et de l'ouverture de la fracture ont donc été tracés à 150 m de profondeur, pour les cas avec et sans dégazage (Fig. 7.19).

L'évolution temporelle de la concentration en calcium et du pH au sein de la fracture, lorsque le sommet du puits est ouvert et fermé à l'atmosphère, suivent la même tendance avec et sans saignée (comparer les Fig. 7.8 a à d aux Fig. 7.19 a à d). Les variations annuelles de ces deux paramètres sont toutefois atténuées lorsqu'une partie de l'eau du puits est renouvelée. La différence majeure entre les cas avec et sans saignée se situe au niveau du taux de réaction de la calcite, lorsque le puits est soumis aux échanges gazeux. Il a été démontré précédemment que sans saignée, le taux de réaction au sein de la fracture diffère largement pour les cas avec et sans dégazage (voir Fig. 7.8). Cependant, lorsque la saignée est active, la signature chimique de l'eau souterraine au sein de la fracture varie entre les cas avec et sans dégazage, mais de façon nettement moins prononcée que sans saignée. À titre d'exemple, sans saignée, la concentration en calcium au sein de la fracture varie entre 70 et 100 mg/L sans dégazage et entre 5 et 85 mg/L avec dégazage, alors qu'en activant la saignée, elle varie entre 85 et 93 mg/L sans dégazage et entre 70 et 92 mg/L avec dégazage. Le taux de réaction observé au sein de la fracture lorsque la saignée est en opération est donc relativement similaire pour

les cas avec et sans dégazage (Fig. 7.19 e).

Finalement, l'ouverture de la fracture est dictée par la précipitation et la dissolution de la calcite. Après une année d'opération, la fracture est légèrement dissoute proche du puits pour les cas avec et sans dégazage, alors qu'elle est faiblement colmatée à partir d'un mètre du centre du puits et ce, jusqu'à la paroi latérale du modèle (Fig. 7.19 g et h).



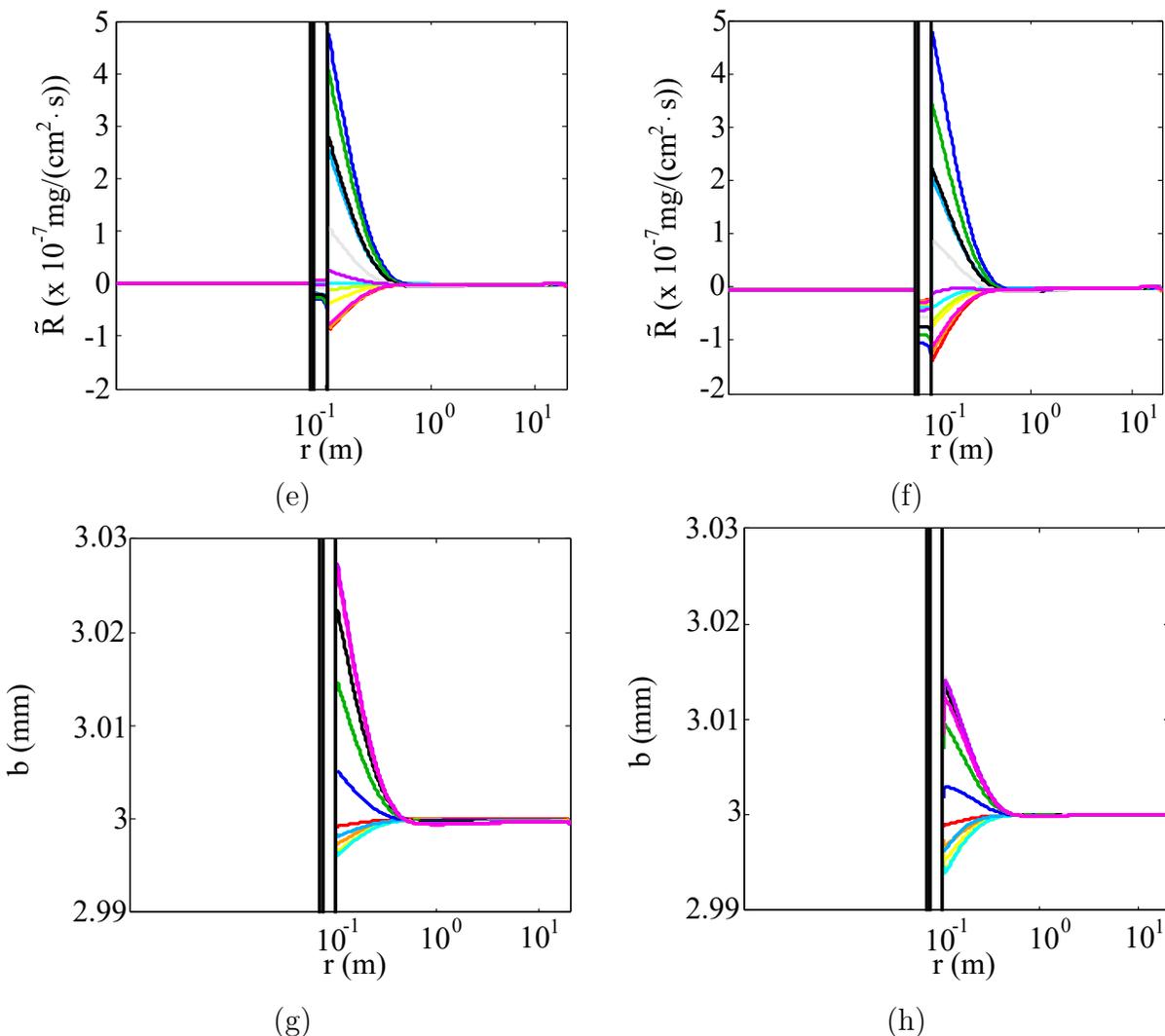


Figure 7.19 Profils radiaux de la concentration en calcium (a et b), du pH (c et d), du taux de réaction de la calcite (e et f) et de l'ouverture de la fracture (g et h), à 150 m de profondeur, sans dégazage (colonne de gauche) et avec dégazage (colonne de droite), lorsque la saignée est active.

7.4 Synthèse

Ce chapitre a permis d'analyser l'impact du dégazage du CO_2 sur les processus géochimiques au sein du puits, de l'aquifère et de la fracture, lorsque l'ouvrage est opéré avec et sans saignée. Les résultats ont clairement démontré que la saignée perd son effet bénéfique sur le taux de réaction de la calcite, lorsque le sommet du puits est ouvert à l'atmosphère. En effet, sans saignée, le dégazage ne pose pas de problème opérationnel au sein du puits, puisqu'au

fil du temps la réserve en CO_2 aqueux s'épuise, diminuant le flux de CO_2 en direction de l'atmosphère. Par contre, en activant la saignée, l'apport continu d'eau souterraine riche en CO_2 dissous via la fracture compense partiellement les pertes par dégazage. Ce comportement a pour effet d'augmenter le dégazage par rapport au cas sans saignée.

L'augmentation du pH, ainsi que la diminution de la concentration en H_2CO_3 à la suite du dégazage favorise la précipitation de la calcite au sein du puits, selon les deux premières réactions de cinétique ($CaCO_{3(s)} + H^+ \rightleftharpoons Ca^{2+} + HCO_3^-$ et $CaCO_{3(s)} + H_2CO_3^o \rightleftharpoons Ca^{2+} + 2HCO_3^-$). Nous avons vu précédemment que, lorsque le puits est parfaitement scellé, elle précipite l'été à l'entrée du puits, en réponse à l'augmentation de la température, puis se dissout l'hiver lorsque de l'eau froide est injectée dans le système. Lorsque le sommet du puits est ouvert à l'atmosphère, la calcite précipite tout au long de l'année à l'entrée du puits, et ce avec et sans saignée. Cependant, lorsque la saignée est active, l'augmentation du taux de précipitation à l'entrée du puits soumis au dégazage durant la saison chaude est davantage marquée, puisque la concentration en calcium est plus importante.

Les masses précipitées et dissoutes dans le tube de prélèvement sont négligeables dans l'ensemble des situations présentées. Par contre, dans la partie externe du PCP, la quantité de calcite qui s'amoncelle est plus conséquente. En considérant qu'elle s'accumule au sommet du puits, entre 0 et 10 m de profondeur, le volume colmaté, après une année d'opération, est compris entre 0.07 % et 0.17 %. Sans saignée, l'accumulation de calcite est légèrement plus importante sans dégazage. Dans ce cas, la dissolution à la base du puits remet des ions Ca^{2+} en solution, augmentant davantage les risques de précipitation. En activant la saignée, la masse précipitée est plus conséquente au sein du puits dont le sommet est ouvert à l'atmosphère, puisque l'apport d'eau maintient un flux de CO_2 élevé au sommet de la colonne d'eau. La saignée est donc désavantageuse en présence d'un puits ouvert à l'atmosphère à son sommet. Par ailleurs, si la calcite précipite uniquement sur les particules en suspension qui vont s'accumuler au fond du puits, l'épaisseur de la couche de $CaCO_{3(s)}$, après une année, varie entre 0.29 cm et 5.71 cm. Sans saignée, la couche minérale est plus épaisse avec dégazage, puisque la base du puits est à l'équilibre chimique. En effet, la masse précipitée n'est donc pas partiellement dissoute dans la partie inférieure de l'ouvrage, contrairement au cas parfaitement scellé. D'autre part, lorsque la saignée est en opération, l'accumulation de calcite à la base du puits ouvert à l'atmosphère à son sommet est la plus importante. Il peut donc être conclu que le dégazage n'est pas inquiétant lorsque la totalité de l'eau pompée est réinjectée dans le PCP. Par contre, en activant la saignée, le dégazage devient davantage problématique. Il est donc important d'améliorer l'étanchéité du puits, si une opération avec

saignée est envisagée.

Le dégazage du CO_2 n'influence pas uniquement les processus au sein du puits. En effet, en augmentant le gradient de la concentration en Ca^{2+} , il favorise le transport dispersif et diffusif de cet ion au sein de l'aquifère. Le déplacement des ions peut de ce fait être contraire à l'écoulement souterrain, si le gradient de la concentration est important et la vitesse de l'écoulement faible. Il a été démontré que dans les zones présentant un gradient élevé, c'est-à-dire proche du puits, le flux dispersif est dominant, alors qu'en s'éloignant de l'ouvrage géothermique, le gradient s'atténue et le flux advectif domine. En activant la saignée, le gradient de la concentration en calcium entre le puits et la formation géologique diminue, réduisant le flux total de calcium dans l'aquifère proche du PCP.

L'équilibre du CO_2 avec l'atmosphère a également un impact sur les processus géochimiques au sein de la fracture. Les résultats ont démontré que la concentration en calcium, ainsi que le pH augmentent l'hiver en s'approchant du puits parfaitement scellé, puis diminuent l'été. Par contre, une réduction de la concentration en Ca^{2+} , ainsi qu'une augmentation du pH sont observées toute l'année, lorsque le puits est soumis aux échanges gazeux. Ce comportement se produit avec et sans saignée. Cependant, les fluctuations annuelles de la concentration des espèces et conséquemment du pH sont atténuées lorsque l'écoulement au sein de la fracture est favorisé par la saignée. Il apparaît donc que le taux de réaction de la calcite diffère largement avec et sans dégazage, lorsque la saignée n'est pas en opération, alors que la différence est minime lorsque 10 % de l'eau pompée sont réinjectés dans un puits d'injection.

CHAPITRE 8 DISCUSSION GÉNÉRALE

Les travaux de cette thèse visaient en premier lieu à comprendre les mécanismes thermo-hydro-géochimiques, conduisant à la précipitation et la dissolution de la calcite au sein d'un puits à colonne permanente, installé dans un aquifère calcaire fracturé. Pour répondre à cette problématique, un modèle numérique de transport réactif multi-espèces dans l'eau souterraine, appliqué aux puits à colonne permanente, a été développé. Cet outil a ensuite été utilisé pour définir l'effet de la saignée sur le taux de réaction de la calcite, lorsque le puits est installé dans un aquifère poreux homogène et fracturé, ainsi que l'impact du dégazage du CO_2 sur les processus THG au sein du puits, de l'aquifère et de la fracture, lorsque le système est opéré avec et sans saignée.

8.1 Modèle thermo-hydro-géochimique

Les phénomènes de précipitation et de dissolution de la calcite dans les PCP et l'aquifère environnant découlent de mécanismes de réactions chimiques complexes, liés à des processus thermiques et hydrauliques. De ce fait, l'outil développé couple un modèle d'écoulement d'eau, un modèle de transfert de chaleur et un modèle géochimique. Premièrement, le modèle hydraulique fournit la vitesse de Darcy dans le puits et l'aquifère environnant, qui est ensuite intégrée dans l'équation du transfert de chaleur, ainsi que dans les équations de transport. Deuxièmement, la température, obtenue par le modèle thermique, est utilisée pour définir les constantes de réaction directes et inverses des réactions de cinétique, ainsi que les constantes d'équilibre des réactions à l'équilibre. Cette opération permet de lier la température aux processus géochimiques. Les constantes de réaction sont ensuite intégrées dans le terme source décrivant les réactions de cinétique, alors que les constantes d'équilibre sont prises en compte dans les six équations non-linéaires permettant de simuler les réactions à l'équilibre. Dans le but de simplifier le processus de simulation et de réduire le temps de calcul, les neuf espèces chimiques sont regroupées en trois espèces totales, permettant de résoudre uniquement trois équations de transport au lieu de neuf. Cette étape était primordiale en vue du nombre considérable de paramètres pris en considération dans le modèle développé. D'autre part, la matrice U , présente dans les trois réactions linéaires permettant de simuler les réactions à l'équilibre, ainsi que dans le terme source, permet de lier les deux types de réaction avec les processus de transport. Après avoir résolu les trois équations de transport (intégrant le terme source associé aux réactions de cinétique), ainsi que les neuf équations (une pour chaque espèce) permettant de simuler les réactions à l'équilibre, les concentrations des neuf espèces

chimiques sont obtenues sur l'ensemble du domaine de simulation. Finalement, les concentrations sont transformées en activités et intégrées dans l'équation du taux de réaction de la calcite fournie par le modèle PWP, permettant de calculer la masse de calcite précipitée ou dissoute par cm^2 de calcite et par seconde.

Dans le but de valider que le couplage entre le transport advectif, dispersif et diffusif des espèces dissoutes, le transfert de chaleur par advection et conduction, ainsi que les réactions chimiques soit correctement effectué, les concentrations obtenues avec le modèle THG ont été comparées avec des concentrations de référence fournies par le logiciel PHREEQC. Les résultats ont démontré une très bonne reproduction des valeurs du logiciel de référence, signifiant que l'impact de la température sur les processus géochimiques est correctement pris en considération.

Dans cette thèse, aucune étude paramétrique n'a été réalisée, car pour ce premier modèle THG appliqué aux PCP, l'aspect développement a été privilégié. Dans les diverses simulations réalisées, certains paramètres ont donc été approximés. Par exemple, le rapport entre l'aire de la calcite et le volume de la solution au sein de l'aquifère fait partie des variables estimées. Dans le but d'utiliser ce modèle dans les processus de dimensionnement et de conception des PCP, une étude paramétrique est inévitable.

Finalement, il est important de spécifier que la simulation d'un PCP est un exemple d'application du modèle développé. La géométrie, ainsi que les conditions frontières peuvent être facilement adaptées pour répondre aux besoins de différentes études, nécessitant le suivi de l'évolution des concentrations des espèces dissoutes dans n'importe quel type d'eau. Les champs d'application de cet outil sont par conséquent multiples et ne se limitent pas exclusivement à la géothermie de basse température.

8.2 Évolution thermo-hydro-géochimique du puits

Deux types de PCP (ouvert à l'atmosphère et parfaitement scellé), pouvant être opérés avec et sans saignée, ainsi que deux types d'aquifère (poreux homogène équivalent et fracturé) ont été simulés. Le premier cas étudié a été simplifié au maximum dans le but de comprendre le comportement thermique, hydraulique et géochimique d'un PCP et d'identifier les interactions entre les différents processus. Le puits investigué était donc fermé à l'atmosphère et

installé dans un milieu poreux homogène équivalent. Les phénomènes pouvant affecter le comportement du puits ont ainsi été limités. Par la suite, le modèle a été complexifié (aquifère fracturé et ajout d'un flux de CO_2 au sommet du puits), afin de définir l'impact de la saignée et du dégazage du CO_2 sur les processus géochimiques et particulièrement sur le taux de réaction de la calcite.

L'évolution THG du puits présentée dans cette étude dépend des paramètres d'entrée utilisés, ainsi que des hypothèses sur lesquelles le modèle repose. Par exemple, le comportement hydraulique du puits diffère en fonction de la perméabilité attribuée à l'aquifère et du débit de saignée. En présence d'un aquifère peu perméable et d'un débit de saignée élevé, un écoulement en direction du puits est observé sur l'ensemble de l'aquifère. Par contre, lorsque la perméabilité de l'aquifère augmente et/ou le débit de saignée diminue, une partie de l'eau réinjectée dans le puits s'infiltre au sommet de l'aquifère. Ce phénomène a pour effet d'engendrer un écoulement opposé au puits dans la partie supérieure de l'aquifère. D'autre part, le transport des espèces au sein de l'aquifère varie en fonction de la dispersivité longitudinale et transversale de l'aquifère, ainsi que de la diffusion moléculaire. Les valeurs choisies correspondent à des valeurs représentatives d'un calcaire fracturé. Cependant, dans la littérature, plusieurs valeurs très différentes ont été trouvées. Il est donc probable que le comportement étudié varie lorsque d'autres valeurs sont utilisées.

De plus, actuellement, le modèle considère que l'aquifère est composé uniquement de calcite pure ($CaCO_{3(s)}$). Cependant, certains ions, tels que Sr et Mg, peuvent modifier les conditions de croissance de la calcite (Nielsen *et al.*, 2013). Lorsque leur concentration est faible, les ions sont intégrés au sein des cristaux de calcite, alors qu'à des concentrations plus élevées, ils inhibent la croissance de la calcite. Ces mécanismes ne sont pas pris en considération dans le modèle. Dans le but de se rapprocher de la réalité, des travaux futurs, visant à intégrer d'autres espèces et d'autres réactions au modèle développé, devront être entrepris. Le système matriciel devra ainsi être modifié et les constantes de réaction directe et inverse devront être valides pour un assemblage minéral et non pas uniquement pour la calcite.

8.3 Impact de la saignée

Un des objectifs de cette étude était d'identifier l'impact de la saignée sur les processus géochimiques au sein du puits. L'hypothèse initiale était que la saignée est capable de réduire le taux de précipitation de la calcite au sein du PCP, puisqu'elle limite les variations de tempé-

rature et qu'elle évacue une partie des ions en solution. Diverses simulations ont permis de vérifier cette hypothèse.

Les résultats ont démontré que l'évolution de la température et de la concentration en calcium au sein du puits est similaire pour les deux types d'aquifère, lorsque la saignée est active. Ces observations sont en désaccords avec les résultats obtenus par Nguyen *et al.* (2015b), mentionnant qu'une zone fracturée a un effet bénéfique sur le coefficient de performance de la pompe à chaleur, lorsque la saignée est active. Concernant l'approche utilisée pour modéliser la saignée, le modèle de Nguyen *et al.* (2015b) est plus fidèle à la réalité, puisqu'elle est activée uniquement lorsqu'elle est nécessaire thermiquement. Cette différence est donc justifiée par le fait qu'une saignée constante de 10 % est utilisée dans les simulations réalisées dans le cadre de cette thèse. En vue de la complexité du modèle développé et pour une première étude THG d'un puits à colonne permanente, une saignée constante a été jugée suffisante.

D'autre part, en réalité, l'impact de la saignée sur les processus géochimiques au sein du puits pourrait être différent des résultats présentés dans cette thèse, puisqu'un aquifère composé d'une seule fracture horizontale n'est pas réaliste. Cependant, il était essentiel d'analyser l'influence d'une seule fracture avant d'investiguer l'effet d'une multitude de fractures. Le modèle peut toutefois être aisément modifié, afin de simuler le nombre de fracture souhaité.

Il a été mentionné que la calcite peut précipiter sur la paroi du forage et/ou sur les particules en suspension qui par advection et/ou gravité vont s'accumuler dans la chambre de sédimentation à la base du puits. Le modèle permet d'identifier dans quelles zones du puits la calcite précipite, mais il ne différencie pas la fraction qui reste sur la paroi du forage de celle qui s'amoncelle à la base du puits. Les deux scénarios ont donc été considérés pour définir dans quelles situations la précipitation de la calcite peut être problématique. Dans tous les cas étudiés, la calcite précipite principalement à l'entrée du puits, entre 0 et 10 m de profondeur, soit entre le tube de prélèvement et la formation géologique. Les résultats ont démontré que lorsque le puits est installé dans un aquifère poreux ou fracturé, le taux de précipitation est plus faible à l'entrée du puits, lorsque la saignée est active. De ce fait, si la calcite s'accumule uniquement sur la paroi du forage, la saignée peut être avantageuse. Cependant, si la totalité de la calcite s'amoncelle dans la chambre de sédimentation, elle peut potentiellement être néfaste, car la base du puits est à l'équilibre chimique. Sans saignée, la calcite se dissout à la base de l'ouvrage, réduisant l'accumulation minérale.

Étant donné que les masses de calcite sont très faibles au sein du puits après une année d'opération, il a été difficile d'illustrer clairement l'effet de la saignée sur le taux de précipitation de la calcite. Cependant, le fait que le taux de précipitation soit plus faible à l'entrée du puits fermé à l'atmosphère, lorsque la saignée est active, suggère que l'accumulation de la calcite au sein des équipements hors sol (échangeur de chaleur, tuyauterie, etc.) pourrait également être plus faible, lorsque la saignée est active. Étant donné que les volumes sont restreints au sein de ces équipements et qu'ils sont plus rapidement colmatables, la précipitation de la calcite pourrait être davantage problématique. De ce fait, la saignée pourrait être bénéfique pour réduire l'accumulation de la calcite au sein des équipements hors sol. Des travaux supplémentaires devront toutefois être entrepris pour valider cette hypothèse.

8.4 Impact du dégazage du CO_2

Pour se rapprocher de la réalité, un flux de CO_2 a été ajouté au sommet du puits. L'impact du dégazage a ainsi pu être analysé, lorsque le PCP, opéré avec et sans saignée, est installé dans un aquifère fracturé. Les résultats ont démontré que l'augmentation du pH, ainsi que la diminution de la concentration en H_2CO_3 à la suite du dégazage favorisent la précipitation de la calcite au sein du puits. Par conséquent, la calcite précipite tout au long de l'année à l'entrée du puits, alors que sans dégazage, elle précipite l'été et se dissout l'hiver. Ce comportement est observé avec et sans saignée. Cependant, sans saignée, ce phénomène n'est pas inquiétant au sein du puits, puisque la réserve en CO_2 aqueux s'épuise au fil du temps, réduisant le dégazage et par conséquent le taux de précipitation.

Les deux cas investigués comprennent une saignée nulle et une saignée constante de 10%. Cependant, en réalité, le débit de saignée est variable et des résultats différents pourraient être observés. Par exemple, il a été démontré qu'en présence d'un dégazage de CO_2 , la calcite précipite au sein de la fracture uniquement lorsque la saignée n'est pas en fonction. L'écoulement d'eau souterraine proche de l'équilibre chimique au sein de la fracture lorsque la saignée est active empêche l'accumulation de la calcite. Des travaux supplémentaires sont nécessaires pour définir si en opérant une saignée variable, la calcite a suffisamment de temps pour précipiter au sein de la fracture lorsque la saignée n'est pas en fonction ou si le cas présentant une saignée variable s'apparente au cas intégrant une saignée constante. De plus une validation expérimentale du flux de CO_2 appliqué au sommet du puits est nécessaire en vue d'utiliser le modèle développé dans les processus de dimensionnement et de conception des PCP.

8.5 Masses précipitées

Les diverses simulations ont présenté des masses précipitées faibles après une année d'opération. Ces résultats vont permettre de rassurer les concepteurs et les utilisateurs des PCP sur les risques géochimiques. Cependant, le modèle n'a pas encore été validé pour s'assurer de la fiabilité des résultats. De ce fait, dans le but de se rassurer sur les masses obtenues, une simulation avec le logiciel PHREEQC, calculant la masse de calcite précipitée dans un réacteur parfaitement mélangé durant une année, a été réalisée. Cette étape a pour but de comparer les ordres de grandeur au niveau des masses précipitées entre le logiciel de référence (PHREEQC) et le modèle THG (Comsol). L'objectif n'est en aucun cas de valider le modèle développé, mais bien d'estimer la fiabilité des résultats obtenus.

Pour définir la composition initiale dans le modèle PHREEQC, la température et la concentration en calcium les plus élevées dans la simulation présentant un aquifère fracturé et un puits fermé à l'atmosphère opéré sans saignée ont été utilisées. Ces valeurs ont été utilisées pour simuler le pire scénario, correspondant à la masse de calcite précipitée la plus conséquente. La solution initiale présente donc une température de 41.6 °C, une concentration en Ca^{2+} de 99.02 mg/L, un pH de 7 et une PCO_2 de $10^{-1.39}$ atm. De plus, une masse initiale nulle de calcite a été spécifiée. Étant donné que PHREEQC ne permet pas simuler le comportement thermique du puits, une température constante est appliquée durant toute la simulation. D'autre part, le taux de réaction de la calcite présent par défaut dans PHREEQC a été utilisé et correspond à une approximation du modèle PWP (Éq. 2.9).

Après une année, la concentration en calcite est de $6.06 \cdot 10^{-5}$ kg/L. En multipliant cette concentration par le volume de la solution présente dans le puits (8850 L), on obtient une masse de 0.54 kg. Dans la simulation (Comsol) présentant un aquifère fracturé et un puits fermé à l'atmosphère opéré sans saignée, une masse de 0.25 kg avait été observée dans la partie externe du PCP, après une année d'opération (voir Fig. 6.15). Dans les conditions simulées, la masse fournie par PHREEQC est également très faible et permet de se rassurer au niveau des résultats obtenus par le modèle développé. Des travaux supplémentaires sont toutefois nécessaires pour procéder à la validation du modèle THG.

Une masse précipitée de 0.25 kg est faible en vue de la taille du puits. Cependant, dans les équipements mécaniques hors sol (pompe à chaleur et échangeur de chaleur), cette masse peut être significative, en vue des espaces restreints. Par conséquent, ces équipements peuvent être

rapidement colmatés et des problèmes opérationnels peuvent apparaître.

8.6 Indications pour l'opération d'un PCP dans un aquifère calcaire

Cette section a pour objectif de donner des indications, afin de limiter l'accumulation de la calcite, lorsque l'installation d'un PCP dans un environnement calcaire est envisagée. Ces indications sont basées sur les résultats obtenus lors des diverses simulations réalisées dans le cadre de cette thèse. Il est toutefois important de préciser que les observations faites sont propres aux paramètres introduits dans le modèle (conductivité hydraulique, débit de pompage, etc.) et que des conditions d'opération différentes pourraient mener à des résultats différents. Des travaux futurs seront nécessaires.

Le tableau 8.1 synthétise les différents cas étudiés, en présentant le volume colmaté dans la partie externe du puits entre 0 et 10 m de profondeur (si la calcite précipite uniquement sur la paroi du forage), ainsi que l'épaisseur de la couche de calcite dans la chambre de sédimentation (si la calcite précipite uniquement sur les particules en suspension), après une année d'opération. Le cas qui présente la plus grande accumulation de calcite est le puits ouvert à l'atmosphère, installé dans un aquifère fracturé et opéré avec une saignée constante de 10 %. Malheureusement, cet exemple représente le cas le plus communément observé en réalité. Après une année d'opération, 0.17 % du volume de la partie externe du puits entre 0 et 10 m de profondeur est colmaté ou l'épaisseur de la couche de calcite dans la chambre de sédimentation est de 5.71 cm. En réalité, il est probable que l'accumulation se fasse en partie sur la paroi du forage et en partie dans la chambre de sédimentation.

Tableau 8.1 Quantification de la masse précipitée au sein du puits pour les différents cas étudiés, après une année d'opération.

Type d'aquifère	Dégazage	Taux de saignée (%)	Volume colmaté entre 0 et 10 m (%)	Épaisseur de la couche de calcite (cm)
Poreux	Sans	0	0.06	0.09
Poreux	Sans	10	0.05	0.39
Fracturé	Sans	0	0.12	0.29
Fracturé	Sans	10	0.07	1.12
Fracturé	Avec	0	0.09	0.94
Fracturé	Avec	10	0.17	5.71

Après une année, cette masse précipitée ne semble pas être problématique pour l'opération du puits. Cependant, après 25 ans, l'épaisseur de la couche minérale à la base du puits pour-

rait atteindre 1.4 m si cette précipitation a lieu. De plus, dans l'échangeur de chaleur, les problèmes opérationnels pourraient être plus importants et subvenir plus rapidement, en raison des espaces restreints. En effet, l'échange de chaleur entre l'eau souterraine et le liquide réfrigérant de l'échangeur de chaleur peut être grandement diminué, alors que les pertes de charges et/ou le différentiel de pression peuvent augmenter. Pour réduire le taux d'accumulation, la saignée peut être désactivée. Le volume colmaté après une année au sommet du puits passe de 0.17 % à 0.09 % ou la couche de calcite de 5.71 cm à 0.94 cm. Cependant, d'un point de vue thermique, cette opération n'est pas avantageuse. Il est donc recommandé de maintenir une opération avec saignée et d'améliorer l'étanchéité du puits. Dans ce cas, le volume colmaté passe de 0.17 % à 0.07 % ou l'épaisseur de la couche de calcite de 5.71 cm à 1.12 cm.

CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

L'exploitation d'un puits à colonne permanente dans des roches sédimentaires peut causer des problèmes opérationnels associés à la précipitation de minéraux. Le manque de connaissance à ce sujet limite la démocratisation de cette technologie, hautement prometteuse pour réduire la consommation énergétique des systèmes de chauffage et de refroidissement des bâtiments. Par conséquent, cette thèse propose des recommandations dans le but de limiter la précipitation de la calcite, lorsque l'installation du puits est envisagée dans un environnement calcaire.

Les recommandations sont basées sur des simulations annuelles réalisées à l'aide d'un modèle couplé THG développé dans le cadre de cette étude, capable de fournir l'évolution des espèces dissoutes au sein du puits et de l'aquifère environnant. Le modèle repose sur une formulation mathématique mixte (équilibre et cinétique), destinée à la simulation du transport réactif multi-espèces dans l'eau. Cette approche a démontré une très bonne corrélation avec des solutions de référence fournies par le logiciel PHREEQC. Subséquemment, le comportement THG d'un PCP a été analysé, ainsi que l'impact de la saignée et du dégazage du CO_2 sur le taux de réaction de la calcite.

Les résultats ont démontré que les processus géochimiques au sein du puits sont fortement influencés par le comportement thermique du système. Lorsque le puits est fermé à l'atmosphère et installé dans un milieu poreux équivalent, la calcite a tendance à précipiter au sommet de la partie externe du puits durant l'été lorsque de l'eau chaude est réinjectée, puis à se dissoudre l'hiver à la suite de l'injection d'eau froide. À la base du PCP, ainsi que dans le tube de prélèvement, le comportement inverse est observé, à cause des variations de la température et de la concentration en calcium avec la profondeur. De ce fait, la précipitation et la dissolution de la calcite sont observées simultanément à différents endroits de l'ouvrage.

La saignée peut toutefois être bénéfique d'un point de vue géochimique, à condition que le puits soit parfaitement scellé et que l'accumulation de la calcite se fasse principalement sur la paroi du forage. Dans ce cas, la masse précipitée à l'entrée du puits est plus faible lorsque la saignée est active. Par contre, en supposant que la calcite s'accumule à la base du puits, le cas sans saignée est bénéfique, puisque la dissolution observée à la base de l'ouvrage réduit l'accumulation.

Le dégazage du CO_2 au sommet du puits est également un phénomène à prendre en considération, car en augmentant le pH et en réduisant la concentration en H_2CO_3 , il augmente les risques de précipitation. Cependant, sans saignée, ce phénomène est peu alarmant, car le dégazage s'estompe au fil du temps. Par contre, lorsque la saignée est active, la réserve en H_2CO_3 au sein du puits est constamment alimentée par le nouvel apport d'eau souterraine en provenance de l'aquifère. Dans ce cas, le dégazage est davantage problématique et la saignée perd son effet bénéfique.

Parmi les simulations réalisées, les résultats ont démontré que l'exemple qui présente le plus grand risque de précipitation est le cas le plus fréquemment observé en réalité, soit un PCP soumis au dégazage du CO_2 , opéré avec saignée et installé dans un aquifère fracturé. Pour réduire les dépôts de calcite, il est donc recommandé de maintenir une opération avec saignée, puisqu'elle est bénéfique d'un point de vue thermique et d'améliorer l'étanchéité du puits. Il est toutefois possible que même en réduisant le dégazage du CO_2 , la calcite cause des problèmes opérationnels au sein de l'échangeur de chaleur et de la tuyauterie. L'utilisation de systèmes de traitement de l'eau n'est donc pas à exclure.

Contribution originale

Cette étude fournit la première évidence numérique que la qualité de l'eau souterraine varie de manière significative au sein d'un PCP. De plus, cette thèse apporte les éléments novateurs suivants :

- étude du comportement thermo-hydro-géochimique d'un PCP ;
- développement d'un modèle numérique de transport réactif multi-espèces dans l'eau souterraine, appliqué aux puits à colonne permanente ;
- investigation de l'effet de la saignée sur le taux de réaction de la calcite ; et
- mise en évidence de l'influence du dégazage du CO_2 sur le taux de précipitation de la calcite.

L'objectif général de cette thèse, qui était de comprendre les mécanismes THG, conduisant à la précipitation et la dissolution de la calcite au sein d'un PCP, installé dans un aquifère calcaire fracturé, ainsi que les objectifs spécifiques ont été atteints. Le modèle développé est capable de reproduire les conditions THG au sein d'un PCP, installé dans un aquifère calcaire fracturé. Les simulations subséquentement réalisées ont permis de mettre en évidence les mécanismes THG, conduisant à la précipitation et la dissolution de la calcite dans un PCP ouvert ou fermé à l'atmosphère, opéré avec ou sans saignée et installé dans un aquifère poreux homogène ou fracturé, ainsi que de définir l'impact de la saignée et du dégazage du

CO_2 sur les processus géochimiques.

Développements futurs

Des travaux supplémentaires peuvent être envisagés dans le but 1) d'améliorer l'approche de modélisation, 2) de perfectionner le choix de certains paramètres, 3) de procéder à la validation expérimentale du modèle développé et, finalement, 4) d'approfondir l'étude.

Les étapes suivantes sont recommandées :

1. pour améliorer l'approche de modélisation :
 - remplacer la calcite composant la matrice rocheuse par un assemblage minéral, signifiant que de nouvelles espèces et réactions chimiques doivent être ajoutées au modèle ;
 - considérer la précipitation de la calcite sur les parois du puits ;
 - modéliser l'échangeur de chaleur dans le but de quantifier la précipitation au sein de celui-ci ;
 - ajouter plusieurs fractures dans la formation géologique ;
 - modifier l'approche utilisée pour simuler le sommet du puits, afin de réinjecter l'eau sous le niveau hydrodynamique et que ce dernier puisse varier au sein du puits ;
 - modéliser la réinjection de l'eau de la saignée dans l'aquifère ; et
 - prendre en considération les variations de la porosité, associées aux processus de précipitation et de dissolution de la calcite dans le puits et l'aquifère et non pas uniquement dans la fracture.
2. pour perfectionner le choix de certains paramètres :
 - améliorer la façon de calculer les rapports A/V dans l'aquifère. Pour l'aquifère poreux, on suppose qu'il est composé de grains de calcite parfaitement sphériques. En réalité, la surface spécifique de la calcite est plus importante ; et
 - modifier les constantes de réaction directes et inverses des réactions de cinétique. Les constantes utilisées sont spécifiques à la calcite et non à un assemblage minéral.
3. pour valider le modèle développé :
 - valider expérimentalement le flux de CO_2 simulé au sommet du puits ; et
 - valider expérimentalement les concentrations fournies par le modèle THG avec des données réelles.

4. pour approfondir l'étude :
 - vérifier si la saignée permet de réduire la précipitation de la calcite dans les équipements hors sol (échangeur de chaleur, tuyauterie, etc.) ;
 - investiguer l'effet d'une fracture sur le taux de réaction de la calcite, lorsqu'un taux de saignée variable est appliqué au lieu d'un débit constant ;
 - étudier l'impact du dégazage du CO_2 , lorsqu'un taux de saignée variable est appliqué au lieu d'un débit constant ;
 - utiliser le modèle développé pour tester des méthodes de mitigation, permettant de limiter la précipitation de la calcite au sein des PCP ;
 - modéliser la biocalcification ; et
 - simuler le puits d'injection, afin de définir si les problèmes opérationnels liés à la précipitation de la calcite se produisent également dans le système d'injection, lorsque la saignée est active.

RÉFÉRENCES

- ABU-NADA, E., AKASH, B., AL-HINTI, I., AL-SARKHI, A., NIJMEH, S., IBRAHIM, A. et SHISHAN, A. (2008). Modeling of a geothermal standing column well. *International Journal of Energy Research*, 32, 306–317.
- AIE (2012). World energy outlook 2012. Rapport technique, Association internationale de l'énergie.
- APPELO, C. A. J. et POSTMA, D. (1993). *Geochemistry, Groundwater and Pollution*. A.A Balkema, Rotterdam, The Netherlands.
- APPELO, C. A. J. et POSTMA, D. (2005). *Geochemistry, Groundwater and Pollution, 2nd ed.* A.A Balkema, Leiden, The Netherlands.
- ARAKAKI, T. et MUCCI, A. (1995). A continuous and mechanistic representation of calcite reaction - controlled kinetics in dilute solutions at 25 °C and 1 atm total pressure. *Aquatic Geochemistry*, 1, 105–130.
- ARNÓRSSON, S., SIGURDSSON, S. et SVAVARSSON, H. (1982). The chemistry of geothermal waters in Iceland. I : Calculation of aqueous speciation from 0 °C to 370 °C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 46, 1513–1532.
- BANKS, D. (2008). *An Introduction to Thermogeology : Ground Source Heating and Cooling*. Blackwell Publishing, Ltd, Oxford, UK.
- BRANTLEY, S. L., KUBICKI, J. D. et WHITE, A. F. (2008). *Kinetics of Water-rock Interaction*. Springer, New York, USA.
- CCEG (2012). État de l'industrie canadienne de la géothermie 2011. Analyse du marché et enquête de l'industrie. Rapport technique, Coalition canadienne de l'énergie géothermique.
- CHOU, L., GARRELS, R. M. et WOLLAST, R. (1989). Comparative study of the kinetics and mechanisms of dissolution of carbonate minerals. *Chemical Geology*, 78, 269–282.
- COMSOL. (2013). Comsol Multiphysics ; Version 4.4. Comsol Inc., Burlington, USA.
- CRIAUD, A. et FOUILLAC, C. (1989). Sulfide scaling in low enthalpy geothermal environments : a survey. *Geothermics*, 18, 73–81.
- CROTEAU, A. (2011). *Évaluation des paramètres influençant les températures d'opération des puits à colonne permanente*. Mémoire de maîtrise, Polytechnique Montréal, Montréal, Canada.
- DENG, Z. (2004). *Modeling of standing column wells in ground source heat pump systems*. Thèse de doctorat, Oklahoma State University, Oklahoma, USA.

- EPPNER, F., PASQUIER, P. et BAUDRON, P. (2015). Development of a thermo-hydro-geochemical model for low temperature geexchange applications. *Proceedings of 2015 Comsol Conference*. Boston, USA.
- EPPNER, F., PASQUIER, P. et BAUDRON, P. (2016). An investigation of thermo-hydro-geochemical processes in a standing column well intersected by a fracture. *Proceedings of 2017 IGSHPA Conference*. Denver, USA.
- EWINGS, S. K. (2008). *Geothermal heat pumps : installation guide*. Stephen K. Ewings.
- FETTER, C. W. (2008). *Contaminant Hydrogeology*. Waveland Press, Long Grove, USA.
- GELHAR, L. W., WELTY, C. et REHFELDT, K. R. (1992). A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers. *Water Resources Research*.
- GUNNLAUGSSON, E. (2012). Scaling in geothermal installation in Iceland. *Proceedings of short course on geothermal development and geothermal wells*. Santa Tecla, El Salvador.
- HOLZBECHER, E. (2005). 12 - Reactive transport – concepts and numerical approaches. Dans D. B. Ingham et I. Pop (Édit.). *Transport Phenomena in Porous Media III*, Elsevier, Oxford, USA. 305 – 340.
- HOLZBECHER, E. (2012). *Environmental Modeling Using Matlab, 2nd ed.* Springer Berlin Heidelberg, Heidelberg, Germany.
- IZGEC, O., DEMIRAL, B., BERTIN, H. et AKIN, S. (2005). Calcite precipitation in low temperature geothermal systems : an experimental approach. *Proceedings of 30th workshop on geothermal reservoir engineering*. Stanford University, Stanford, USA.
- KRISTMANNSDÓTTIR, H. (1989). Types of scaling occurring by geothermal utilization in Iceland. *Geothermics*, 18, 1983–1990.
- LANGMUIR, D. (1997). *Aqueous Environmental Geochemistry*. Prentice Hall, Upper Saddle River, USA.
- LASAGA, A. (1998). *Kinetic Theory in the Earth Sciences*. Princeton University Press., Princeton, USA.
- LIPING, B., XIANJI, M. et THORHALLSSON, S. (1997). The study of an allowable calcite supersaturation in low temperature geothermal systems. *Transactions of Tianjin University*, 3, 60–65.
- LIU, H., ZHANG, J., DIAO, N. et FANG, Z. (2009). Numerical study on heat transfer in a geothermal heat exchanger of SCW system. *Proceedings of power and energy engineering conference*. APPEEC, Asia-Pacific, 1–4.
- LUNARDINI, V. J. (1981). *Heat Transfer in Cold Climates*. Van Nostrand Reinhold Co, Toronto, Canada.

- MA, Z., YAN, H., ZHO, X. et HOU, C. (2012). Impact of carbonate scaling on the efficiency of used geothermal water reinjection from low-middle temperature geothermal fluid in Xianyang porous geothermal field, NW China. *Advanced Materials Research*, 307, 614–615.
- MILLINGTON, R. et QUIRK, J. (1961). Permeability of porous solids. *Transactions of the Faraday Society*, 57, 1200–1207.
- MOREL, F. M. M. et HERING, J. G. (1993). *Principles and Applications of Aquatic Chemistry*. Wiley, Hoboken, USA.
- MORSE, J. W. et BERNER, R. A. (1972). Dissolution kinetics of calcium carbonate in sea water : II. A kinetic origin for the lysocline. *American Journal of Science*, 272, 840–851.
- NANCOLLAS, G. H. et REDDY, M. M. (1971). The crystallization of calcium carbonate. II. Calcite growth mechanism. *Journal of Colloid and Interface Science*, 37.
- NG, B. M., UNDERWOOD, C. P. et WALKER, S. L. (2011). Standing column wells - modeling the potential for applications in geothermal heating and cooling. *HVAC&R Research*, 17, 1089–1100.
- NGUYEN, A. (2015). *Simulation d'un puits à colonne permanente en milieu fracturé à l'aide de la méthode des ondelettes de Haar*. Thèse de doctorat, Polytechnique Montréal, Montréal, Canada.
- NGUYEN, A. et PASQUIER, P. (2015). An adaptive segmentation Haar wavelet method for solving thermal resistance and capacity models of ground heat exchangers. *Applied Thermal Engineering*, 89, 70–79.
- NGUYEN, A., PASQUIER, P. et MARCOTTE, D. (2012). Multiphysics modelling of standing column well and implementation of heat pumps off-loading sequence. *Proceedings of 2012 Comsol Conference*. Boston, USA.
- NGUYEN, A., PASQUIER, P. et MARCOTTE, D. (2013). Development of an ODE model featuring a three bleed control and an off-loading sequence for standing column wells. *Proceedings of BS2013*. Chambéry, France, 26–28.
- NGUYEN, A., PASQUIER, P. et MARCOTTE, D. (2015a). Borehole thermal energy storage systems under the influence of time-varying non-uniform groundwater temperature and groundwater flow. *Soumis à Applied Thermal Engineering*.
- NGUYEN, A., PASQUIER, P. et MARCOTTE, D. (2015b). Influence of groundwater flow in fractured aquifers on standing column wells performance. *Geothermics*, 58, 39–48.
- NGUYEN, A., PASQUIER, P. et MARCOTTE, D. (2015c). Thermal resistance and capacity model for standing column wells operating under a bleed control. *Renewable Energy*, 76, 743 – 756.

- NIELSEN, L. C., YOREO, J. J. D. et DEPAOLO, D. J. (2013). General model for calcite growth kinetics in the presence of impurity ions. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 115, 100–114.
- O'NEILL, Z. D., SPITLER, J. D. et REES, S. J. (2006). Performance analysis of standing column well ground heat exchanger systems. *ASHRAE Transactions*, 112, 633–643.
- ORIO, C. D., JOHNSON, C., REES, S. J., DENG, Z. et SPITLER, J. D. (2005). A survey of standing column well installations in North America. *ASHRAE Transactions*, 111, 109–121.
- PAPIC, P. (1991). Scaling and corrosion potential of selected geothermal waters in Serbia. Rapport technique, UNU Geothermal Training Programme, Orkustofnun - National Energy Authority, Reykjavik, Island.
- PARKHURST, D. L. et APPELO, C. A. J. (1999). *User's guide to PHREEQC (version 2)-a computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations*. U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 99-4259.
- PASQUIER, P., NGUYEN, A., EPPNER, F., MARCOTTE, D. et BAUDRON, P. (2016). 10 - Standing column wells. Dans S. J. Rees (Édit.). *Advances in ground-source heat pump systems*, Woodhead Publishing. 269–294.
- PLUMMER, L. N., WIGLEY, T. M. L. et PARKHURST, D. L. (1978). The kinetics of calcite dissolution in CO_2 -water systems at 5 to 60 °C and 0 to 1 atm CO_2 . *American Journal of Science*, 278, 179–216.
- SAALTINK, M. W., AYORA, C. et CARRERA, J. (1998). A mathematical formulation for reactive transport that eliminates mineral concentrations. *Water Resources Research*, 34, 1649–1656.
- STAFFORD, P., TORAN, L. et MCKAY, L. (1998). Influence of fracture truncation on dispersion : A dual permeability model. *Journal of Contaminant Hydrology*.
- STANASEL, O., GILAU, L. et STANASEL, I. (2001). Types of scaling occurring by geothermal utilization in a low temperature geothermal field. *Proceedings of twenty-sixth workshop on geothermal reservoir engineering*. Stanford University, Stanford, USA.
- STANASEL, O., IOVI, A., KRISTMANNSDOTTIR, H. et STANASEL, I. (2006). Physical-chemistry studies on geothermal waters and scale formations. *Revue Roumaine de Chimie*, 51, 179–185.
- THOMAS, D. M. et GUDMUNDSSON, J. S. (1989). Advances in the study of solids deposition in geothermal systems. *Geothermics*, 18, 5–15.

- VUATAZ, F. D., CZERNICHOWSKI-LAURIOL, I., FOUILLAC, C. et DETOC, S. (1989). Chemical study of a low temperature geothermal fluid in a triassic sandstone aquifer : Scaling potential and fluid treatment (Melleray, France). *Geothermics*, 18, 313 – 320.
- WANNINKHOF, R. (1989). Relationship between wind speed and gas over the ocean. *Journal of Geophysical Research : oceans*, 97, 7373–7382.
- WHITMORE, J. et PINEAU, P. O. (2015). État de l'énergie au Québec 2016. Rapport technique, Chaire de gestion du secteur de l'énergie, HEC Montréal, Montréal, Canada.
- YAHIAOUI, R. et COURCELLES, B. (2013). Hydraulic modeling of soil reinforcement by biocalcification. *Proceeding of GéoMontréal 2013*. Montréal, Canada.
- YAVUZTURK, C. et CHIASSON, A. (2002). Performance analysis of u-tube, concentric tube, and standing column well ground heat exchangers using a system simulation approach. *ASHRAE Transactions*, 108, 7373–7382.
- YEH, G. T. et TRIPATHI, V. S. (1989). A critical evaluation of recent developments in hydrogeochemical transport models of reactive multichemical components. *Water Resources Research*, 25, 93–108.
- YUILL, G. et MIKLER, V. (1995). Analysis of the effect of induced groundwater flow on heat transfer from a vertical open-hole concentric-tube thermal well. *ASHRAE Transactions*, 101, 173–185.

ANNEXE A Code PHREEQC utilisé pour la validation numérique

Un extrait du code PHREEQC utilisé dans le but de valider numériquement l'approche présentée dans la méthodologie est illustré à la Fig. A.1. Les mots clés "SOLUTION", "KINETICS", "RATES" et "TRANSPORT" permettant d'accéder à la base de données de PHREEQC ont été intégrés au code. Les lignes 1 à 6 définissent la composition de la solution entrant au sommet de la colonne, alors que les lignes 8 à 13 déterminent la composition de la solution initialement présente dans la colonne. Le mot clé "KINETICS" est utilisé pour spécifier les paramètres pour le transport réactif et la cinétique de la réaction, tels que la phase minérale, le rapport entre la surface réactive du minéral et le volume de la solution, ainsi que le nombre initial de mol du minéral. Dans la section nommée "RATES", le taux de réaction de la calcite défini par le modèle PWP est introduit. Finalement, les lignes de code 47 à 60 définissent le transport advectif, diffusif et dispersif au sein de la colonne.

```

1 SOLUTION 0
2 units mmol/l
3 pH 7
4 C 1 CO2(g) -2
5 Ca 13.41
6 temp 5
7
8 SOLUTION 1-100
9 units mmol/l
10 pH 7
11 C 1 CO2(g) -2
12 Ca 7.69
13 temp 25
14
15 KINETICS 1-100
16 Calcit2
17 -formula CaCO3
18 -parms 92204.7612 #cm2/l
19 -m0 15.986
20 -tol 1e-12
21
22 RATES
23 Calcit2
24 -start
25 10 k1 = (10^(0.198 - (444.0 / TR))) #cm/s
26 20 k2 = (10^(2.84 - (2177.0 / TR))) #cm/s
27 30 if TC <= 25 then k3 = (10^(-5.86 - (317.0 / TR))) #cm/s
28 40 if TC > 25 then k3 = (10^(-1.1 - (1737.0 / TR))) #cm/s
29 50 KCa=10^(-171.9065-0.077993*TR+(2839.319/TR)+71.595*log10(TR)) #mmol^2/cm^6
30 60 K1=10^(-3.5631*10^-2-6.0904*10^-2*TR+((2.1834*10^4)/TR)+1.2683*10^2*log10(TR)-((1.6849*10^6)/TR^2)) #mmol/cm^3
31 70 Kw = 10^(-283.9710+13323.00/TR)-0.05069842*TR+102.24447*log10(TR)-1119669/TR^2 #mmol^2/cm^6
32 80 K2=10^(-1.0789*10^-2-3.2528*10^-2*TR+((5.1518*10^3)/TR)+3.8926*10^1*log10(TR)-((5.6371*10^5)/TR^2)) #mmol/cm^3
33 90 Keq1=10^(log10(KCa)-log10(K2)) #mmol/cm^3
34 100 Keq2=10^(log10(KCa)+log10(K1)-log10(K2)) #mmol^2/cm^6
35 110 Keq3=10^(log10(KCa)+log10(Kw)-log10(K2)) #mmol^2/cm^6
36 120 k_1=k1/Keq1 #cm^4/s*mmol
37 130 k_2= k2/Keq2 #cm^7/s*mmol^2
38 140 k_3=k3/Keq3 #cm^7/s*mmol^2
39 150 area = PARM(1) #cm^2/l
40 160 rf = k1*(ACT("H+"))+k2*(ACT("CO2"))+k3*(ACT("H2O")) # (cm/s)*(mmol/cm^3) = mmol/(s*cm^2)
41 170 rb = k_1*(ACT("Ca+2"))*(ACT("HCO3-"))+k_2*(ACT("Ca+2"))*(ACT("HCO3-"))^2+
      k_3*(ACT("Ca+2"))*(ACT("HCO3-"))*(ACT("OH-")) # mmol/(s*cm^2)
42 180 rate = area + 1e-3*(rf-rb) #mmol/(1*s)+10e-3=mol/(1*s)
43 190 moles = rate * TIME #mol/l
44 200 SAVE moles
45 -end
46
47 TRANSPORT
48 -cells 100
49 -lengths 100*0.001
50 -time_step 3.333 s
51 -shifts 600
52 -flow_direction forward
53 -boundary_conditions constant flux
54 -dispersivities 100*0.001
55 -diffusion_coefficient 1e-9
56 -correct_disp true
57 -punch_cells 100
58 -print_cells 100
59 -print_frequency 1
60 -thermal_diffusion 2.59 1.716e-6
61
94 END

```

Solution initiale au sommet de la colonne

Solution initiale dans la colonne

Paramètres du transport réactif

Taux de réaction de la calcite

Transport advectif et diffusif dans la colonne

Figure A.1 Extrait du code PHREEQC utilisé pour la validation numérique.