

Titre: Proposition et validation d'un essai de laboratoire permettant de déterminer les cinétiques de réaction des roches carbonatées dans le contexte de puits à colonne permanente
Title:

Auteur: Chaymae Loudyi
Author:

Date: 2023

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Loudyi, C. (2023). Proposition et validation d'un essai de laboratoire permettant de déterminer les cinétiques de réaction des roches carbonatées dans le contexte de puits à colonne permanente [Mémoire de maîtrise, Polytechnique Montréal].
Citation: PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/53399/>

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

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/53399/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Benoit Courcelles
Advisors:

Programme: Génie civil
Program:

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

**Proposition et validation d'un essai de laboratoire permettant de déterminer les
cinétiques de réaction des roches carbonatées dans le contexte des puits à
colonne permanente**

CHAYMAE LOUDYI

Département de génie civil, géologique et des mines

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
Génie civil

Mai 2023

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

**Proposition et validation d'un essai de laboratoire permettant de déterminer les
cinétiques de réaction des roches carbonatées dans le contexte des puits à
colonne permanente**

présenté par **Chaymae LOUDYI**

en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*

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

Philippe PASQUIER, président

Benoît COURCELLES, membre et directeur de recherche

Antoine JACQUEY, membre

DÉDICACE

Je dédie ce travail à ma petite famille

REMERCIEMENTS

Ce rapport est le labeur d'un humble effort, en revanche, il est résultat d'une vaste contribution, et ce serait injuste de l'entamer sans rendre hommage aux personnes grâce auxquelles il a été réalisé.

J'aimerais d'abord remercier mon directeur de recherche, Monsieur Benoît Courcelles, qui m'a aidé à développer ce travail. Sa disponibilité et ses conseils ont été d'une grande aide pour moi.

Un grand merci aux membres du jury, Monsieur Philippe Psaquier et Monsieur Antoine Jacquez d'avoir accepté d'évaluer ce travail.

Je tiens également à remercier les techniciens : Samuel Chénier, Éric Turgeon, Jérôme Leroy et Gabriel Saint-Jean pour leur aide durant la réalisation de mes essais en laboratoire, leur sympathie et leurs remarques pertinentes tirées de leur expérience.

Enfin, je voudrais remercier ma famille et mes amis pour leur soutien et leurs encouragements durant ma maîtrise. Et à toute personne ayant contribué de près ou de loin à la réalisation de ce projet, veuillez trouver dans ce travail le symbole de ma profonde reconnaissance.

RÉSUMÉ

Dans le cadre de l'étude des sources d'énergie non conventionnelles pour le chauffage et la climatisation des bâtiments gérés par la Ville de Montréal, un système de puits à colonne permanente (PCP) est prévu à côté du Centre Père-Marquette pour répondre aux besoins de chauffage et de climatisation du bâtiment. Cette technologie innovante vise à réduire la consommation d'électricité en remplaçant le chauffage traditionnel par un chauffage basé sur l'utilisation de l'énergie stockée dans le sous-sol. Ainsi, cette solution vise à réduire l'empreinte carbone en exploitant une énergie verte.

Cependant, cette solution représente un défi en raison des problèmes rencontrés lors de sa mise en œuvre. En effet, les aquifères calcaires caractérisant la plupart des régions du Québec peuvent créer des problèmes de fonctionnement à cause de la dureté de l'eau souterraine. En effet, le système PCP est basé sur la circulation permanente des eaux souterraines et leur contact avec la roche peut provoquer le colmatage des puits en raison des réactions qui se produisent (dissolution et précipitation des minéraux carbonatés). De ce point de vue, ce travail vise à étudier la cinétique des réactions en simulant le PCP par un modèle simple en laboratoire. Ainsi, les résultats obtenus constituent une base pour la modélisation des paramètres géochimiques (surface minérale réactive, cinétique de réaction) et une phase préliminaire pour l'implémentation de ces paramètres dans d'autres modèles de simulation.

Des forages exploratoires ont été réalisés au Centre Père Marquette dans un double but d'explorer la géologie locale et de réaliser un essai pilote de Puits à Colonne Permanente en laboratoire.

Contrairement aux tests conventionnels utilisant de la roche concassée, qui ne sont pas très représentatifs d'un écoulement dans un PCP, une nouvelle approche a été développée au sein du Groupe de recherche en géothermie et hydrogéologie (G2H) de Polytechnique Montréal. Cette approche est basée sur un écoulement autour d'une carotte rocheuse. Ce nouvel outil améliore la connaissance du fonctionnement du PCP dans un environnement carbonaté et constitue un premier pas vers la démocratisation de la technologie au Québec.

ABSTRACT

As part of the study of non-conventional energy sources for the heating and cooling of buildings managed by the City of Montreal, a standing column well (SCW) system is planned next to the Centre Père-Marquette to meet the building's heating and cooling needs. This innovative technology aims to reduce electricity consumption by replacing traditional heating with heating based on the use of energy stored underground. Thus, this solution aims to reduce the carbon footprint by exploiting green energy.

However, this solution is a challenge due to the problems encountered in its implementation. In fact, the calcareous aquifers characterising most regions in Quebec can be problematic because of their hardness. The SCW system is based on the permanent circulation of groundwater and its contact with rocks can cause the clogging of wells due to the reactions that take place (dissolution and precipitation of carbonate minerals). From this point of view, this study aims to investigate the kinetics of these reactions by simulating the SCW by a simple model in the laboratory. Thus, the results constitute a basis for modeling geochemical parameters (reactive mineral surface, reaction kinetics, etc.) and preliminary phase for implementing these parameters in other simulation models.

Exploratory drilling was carried out at the Centre Père Marquette for two purposes, to explore the local geology and to carry out a pilot test of a standing column well in the laboratory based on the sample taken.

Contrary to conventional tests using crushed rock, which are not very representative of a flow in SCW, a new approach was developed within the Geothermal and Hydrogeology Research Group (G2H) of Polytechnique Montreal. This approach is based on a flow around an intact rock core, validated in the context of the implementation of SCW for a sports centre in Montreal. This new tool improves our knowledge of how SCW works in a carbonate environment and is a first step towards the democratization of the technology in Quebec.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	vi
TABLE DES MATIÈRES	vii
LISTE DES TABLEAUX	x
LISTE DES FIGURES	xi
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xiv
LISTE DES ANNEXES	xv
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Mise en contexte	1
1.2 Problématique	1
1.3 Objectif principal	2
1.4 Objectifs spécifiques	2
1.5 Méthodologie	3
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	4
2.1 Différents systèmes géothermiques	4
2.1.1 Systèmes en boucle fermée	4
2.1.2 Systèmes en boucle ouverte	5
2.1.3 Puits à Colonne Permanente	6
2.2 Étude détaillée des Puits à Colonne Permanente	6
2.2.1 Historique	6
2.2.2 Particularités des PCP	7
2.2.3 Facteurs limitatifs de déploiement de PCP	13
2.3 Potentiel géothermique de l'Île de Montréal	13
2.3.1 Contexte géologique de l'Île de Montréal	13

2.3.2	Contexte hydrogéologique de l'Île de Montréal	15
2.3.3	Caractéristiques de conductivité thermique de l'Île de Montréal . . .	16
2.4	Types de colmatage	16
2.4.1	Colmatage physique	17
2.4.2	Colmatage biologique	18
2.4.3	Colmatage chimique	18
2.4.4	Stratégies de suivi du colmatage	21
2.5	Qualité de l'eau souterraine	22
2.5.1	Paramètres physico-chimiques	22
2.5.2	Indices d'entartrage et de corrosion	22
2.6	Classification des réactions chimiques	25
2.6.1	Réactions de cinétique	26
2.6.2	Réactions d'équilibre	27
2.7	Réactions de surface à l'équilibre	27
2.7.1	Isotherme de sorption linéaire	28
2.7.2	Isotherme d'adsorption de Langmuir	28
2.7.3	Isotherme d'adsorption de Freundlich	28
2.8	Carbonates	30
2.8.1	Système ouvert	30
2.8.2	Système fermé	31
2.9	Modèles numériques	32
2.9.1	Modèle de Plummer, Wigley et Parkhurst (PWP) (Plummer, Wigley et Parkhurst)	33
2.9.2	Modèle de Sjöberg et Rickard	36
2.9.3	Modèle de Chou et al.	39
CHAPITRE 3 PRÉSENTATION DU SITE D'ÉTUDE		41
3.1	Situation du Centre Sportif	41
3.2	Contexte géologique local	41
3.3	Potentiel géothermique de la zone d'étude	43
3.4	Matériels et méthodes	45
3.4.1	Échantillonnage des matériaux	45
3.4.2	Échantillonnage des eaux souterraines	46
CHAPITRE 4 MÉTHODOLOGIE		48
4.1	Essai de colonne à flux continu	48
4.1.1	Principe de l'essai	48

4.1.2	Substance de référence	49
4.1.3	Matériel de laboratoire	50
4.2	Protocole expérimental	51
4.2.1	Préparation des échantillons	51
4.2.2	Protocoles de calibrage	52
4.3	Caractérisation de l'échantillon	52
4.4	Débit imposé	54
4.5	Analyses chimiques	55
4.5.1	Analyse des métaux	56
4.5.2	Analyse des anions et cations majeurs	56
4.5.3	Analyse de l'alcalinité	57
CHAPITRE 5 RÉSULTATS ET ANALYSES		58
5.1	Résultats expérimentaux	58
5.1.1	Données exclues	59
5.1.2	Indice de saturation	59
5.1.3	Paramètres physico-chimiques	63
5.2	Approche de la modélisation géochimique	70
5.2.1	Conversion d'échelle	71
5.2.2	Calcul du vecteur de concentration du soluté $\frac{dn}{d\zeta}$	73
5.2.3	Calcul de taux de réaction absolu	74
5.2.4	Évolution de la surface minérale réactive	77
5.2.5	Validation de la surface réactive obtenue	82
5.2.6	Cinétique de réaction	85
5.3	Implication géologique	87
CHAPITRE 6 DISCUSSION GÉNÉRALE		90
6.1	Analyse paramétrique	90
6.2	Modèle thermo-hydro-géochimique	91
CHAPITRE 7 CONCLUSION		94
7.1	Synthèse des travaux	94
7.2	Représentativité de l'essai à colonne	94
7.3	Recommandations	95
RÉFÉRENCES		96
ANNEXES		104

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1	Différents modèles de PCP et leurs caractéristiques	12
Tableau 2.2	Interprétation des indices de saturation de prédiction d'entartrage et de corrosion, tiré de Zai et al. et Kurdi et al. [1,2]	25
Tableau 2.3	Loi de vitesse selon l'ordre de réaction	27
Tableau 3.1	Propriétés thermiques et géologiques de la formation Trenton	43
Tableau 4.1	Pourcentages des oxydes majeurs existants dans l'échantillon étudié .	54
Tableau 5.1	Caractéristiques des essais réalisés en laboratoire	59
Tableau 5.2	Plage de variation de P_{CO_2} et pH selon le type de système : ouvert/fermé sous une température de 15°C, adapté d'Appelo et Postma [3]	67
Tableau 5.3	Valeurs expérimentales de P_{CO_2} et pH obtenues durant les deux essais	68
Tableau 5.4	Réactions chimiques engendrées dans la colonne d'essai	72
Tableau 5.5	Polynômes de régression reliant l'activité thermodynamique des ions a_i , la molalité n_i , à la fraction d'avancement de réaction	73
Tableau 5.6	Valeurs des constantes de réaction utilisées en cm/s selon les deux modèles PWP [4] et Chou et al. [5]	76
Tableau 5.7	Valeurs des constantes de réaction de dolomite utilisées, en cm/s selon le modèle de Busenberg et Plummer [6]	76
Tableau 5.8	Valeurs de taux de réaction absolu ($\text{mol}/\text{cm}^2.\text{s}$) obtenues pour la calcite et la dolomite selon les modèles de PWP [4], de Chou et al. [5] et de Busenberg et Plummer [6]	77
Tableau 5.9	Évolution de la surface minérale réactive de la calcite et la dolomite selon les modèles de PWP [4], de Chou et al. [5] et de Busenberg et Plummer [6] en cm^2/L	78
Tableau 5.10	Différentes valeurs de la surface minérale réactive de calcite selon les trois approches (approche inverse, approche géométrique et méthode BET)	84
Tableau 5.11	Valeurs de la cinétique de réaction de la calcite selon les différents essais réalisés	87
Tableau 6.1	Série d'essais expérimentaux réalisés en laboratoire et in situ pour la caractérisation thermo-hydro-géochimique d'un site d'étude	92

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1	Schéma des systèmes géothermiques en a) boucle fermée et en b) boucle ouverte, tiré d'Eppner [7]	5
Figure 2.2	Schéma d'un puits à colonne permanente, tiré d'Eppner [7]	7
Figure 2.3	Consommation d'énergie pour le chauffage d'une école publique en Nouvelle Angleterre, mesurée en KWh, tirée d'Orio et al. [8]	9
Figure 2.4	Illustration du puits à colonne permanente expérimentale connecté au laboratoire mobile géothermique à Varennes, tiré de Cerclet et al. [9]	10
Figure 2.5	Évolution de pourcentage de la saignée en fonction de EWT, tiré de Croteau [10]	12
Figure 2.6	Séquence stratigraphique des Basses terres du Saint Laurent, tiré de Comeau et al. [11]	14
Figure 2.7	Carte piézométrique de l'Île de Montréal, tiré de Bériault et Simard [12]	15
Figure 2.8	Détermination graphique du MFI, tiré de Boerlage et al. [13]	17
Figure 2.9	Mécanismes de précipitation et dissolution de la calcite au sein d'un puits à colonne permanente, tiré d'Eppner [7]	19
Figure 2.10	Isotherme d'adsorption linéaire	29
Figure 2.11	Isotherme d'adsorption de Langmuir	29
Figure 2.12	Isotherme d'adsorption de Freundlich	29
Figure 2.13	Variation des espèces carbonatées en fonction de pH dans un système ouvert, sous une pression de CO ₂ égale à 10 ⁻² . La ligne en gras indique la somme de ces espèces carbonatées, tiré d'Appelo et Postama [3]	31
Figure 2.14	Variation des espèces carbonatées en fonction de pH dans un système fermé, tiré d'Appelo et Postama [3]	32
Figure 2.15	Taux de réaction en fonction du pH, tiré de Plummer et al. [4]	34
Figure 2.16	Graphiques permettant de calculer les constantes de réaction (a) la constante k_1 , (b) la quantité correspondante à $k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3} + k_3$ et la constante k_4 et (c) les constantes k_2 et k_3 , tiré d'Eppner [7]	35
Figure 2.17	Montage expérimental d'Alkattan et al. [14]	37
Figure 2.18	Distribution des espèces carbonatées en fonction de la variation du pH, tiré d'Appelo et Postma [3]	38
Figure 2.19	Montage expérimental, tiré de Chou et al. [5]	40
Figure 3.1	Localisation du Centre sportif Père-Marquette : (a) tiré de Quartiers de Montréal [15] et (b) tiré de Google Earth Pro [16]	42

Figure 3.2	Simulation de la conductivité thermique du roc présent sur l'île de Montréal et ses alentours. Tiré de Bédard et al. [17]	44
Figure 3.3	Simulation de l'écart-type de la conductivité thermique du roc présent sur l'île de Montréal et ses alentours. Tiré de Bédard et al. [17]	45
Figure 3.4	Carottes prélevées du forage d'exploration réalisé sur le site d'étude .	46
Figure 4.1	Vue schématique de l'écoulement de l'eau souterraine dans le puits de pompage	49
Figure 4.2	Vue schématique de l'essai de colonne à flux continu	50
Figure 4.3	Vue de l'essai réalisé en laboratoire	51
Figure 4.4	Échantillon utilisé dans le protocole expérimental	53
Figure 4.5	Évolution du débit de pompage de la pompe péristaltique en fonction de temps de résidence de l'eau dans l'essai	56
Figure 5.1	Évolution de la concentration des cations majeurs dissous dans la colonne d'essai 1	60
Figure 5.2	Évolution de la concentration des anions majeurs dissous dans la colonne d'essai 1	60
Figure 5.3	Évolution de la concentration des cations majeurs dissous dans la colonne d'essai 2	61
Figure 5.4	Évolution de la concentration des anions majeurs dissous dans la colonne d'essai 2	61
Figure 5.5	Évolution de l'indice de saturation des minéraux en sortie de la colonne du premier essai sous une température de 11°C.	62
Figure 5.6	Évolution de l'indice de saturation des minéraux en sortie de la colonne du deuxième essai, sous les deux températures de 11°C et 22°C. . . .	63
Figure 5.7	Évolution de la température de l'eau sortant de la colonne (Essais 1 et 2)	64
Figure 5.8	Évolution du pH de l'eau sortant de la colonne d'essai (Essais 1 et 2)	65
Figure 5.9	Évolution de la conductivité spécifique de l'eau sortant de la colonne d'essai (Essais 1 et 2)	66
Figure 5.10	Évolution de la pression partielle de CO ₂ en sortie de la colonne en fonction du temps de réaction (Essais 1 et 2)	67
Figure 5.11	Évolution de l'alcalinité de la solution en sortie de la colonne d'essai en fonction du temps de réaction (Essais 1 et 2)	69
Figure 5.12	Évolution de la dureté de la solution en sortie de la colonne d'essai en fonction du temps de réaction (Essais 1 et 2)	69

Figure 5.13	Processus de dissolution des grains de calcite : (a) grains sphériques dont la surface est S_{r0} , (b) dissociation en petits grains, et (c) particules engendrées suite à la réaction de dissolution du minéral dans la solution, adapté de Noiriel et al. (2009) [18]	79
Figure 5.14	Évolution de l'indice de saturation de certains minéraux en sortie de la colonne en fonction du temps (Essai 2)	80
Figure 5.15	Évolution de la surface minérale réactive de la calcite selon le modèle de PWP en fonction du temps de réaction	80
Figure 5.16	Évolution de la surface minérale réactive de la calcite selon le modèle de Chou et al. en fonction du temps de réaction	81
Figure 5.17	Évolution de la surface minérale réactive de la dolomite selon le modèle de Busenberg et Plummer en fonction du temps de réaction	81
Figure 5.18	Variation de la surface minérale réactive de la calcite selon les approches : inverse, géométrique et BET	84
Figure 5.19	Cinétique de dissolution de la calcite dans l'eau sous une température de 22°C, selon le modèle de PWP	85
Figure 5.20	Cinétique de dissolution de calcite dans l'eau sous une température de 22°C, selon le modèle de Chou et al.	86
Figure 5.21	Variation de la cinétique de réaction de la calcite en fonction de l'inverse de température de l'eau souterraine en sortie de PCP	89
Figure 6.1	Proposition de logigramme pour le développement d'un modèle Thermo-Hydro-Géochimique d'un PCP	93
Figure A.1	Diamètres effectifs des différents ions en Angström, tiré d'Appelo and Postma (2005) [3]	104
Figure B.1	Régression polynomiale de la molalité de Calcium dans l'eau	105
Figure B.2	Calcul de l'incertitude de la régression polynomiale de la molalité de Ca	105
Figure B.3	Régression polynomiale de la molalité de Magnésium dans l'eau	106
Figure B.4	Calcul de l'incertitude de la régression polynomiale de la molalité de Mg	106
Figure B.5	Régression polynomiale de la molalité de Sodium dans l'eau	107
Figure B.6	Calcul de l'incertitude de la régression polynomiale de la molalité de Na	107
Figure B.7	Régression polynomiale de la molalité de potassium dans l'eau	108
Figure B.8	Calcul de l'incertitude de la régression polynomiale de la molalité de K	108

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

ATES	Aquifer thermal energy storage (Stockage d'énergie thermique dans l'aquifère)
CaCO_3	Carbonate de calcium
COP	Coefficient of performance (Coefficient de performance)
EWT	Entering water temperature (Température d'entrée de l'eau)
ECS	Échangeur de chaleur souterrain
GES	Gaz à effet de serre
GSHP	Ground source heat pump (Pompe à chaleur géothermique)
H_2CO_3	Acide carbonique
HCO_3^-	Bicarbonate
H_2SO_4	Acide sulfurique
IAP	Ion activity product (Produit d'activité ionique)
LSI	Langelier saturation index (Indice de saturation de Langelier)
MFI	Membrane fouling index (Indice de filtre à membrane)
PAC	Pompe à chaleur
PCP	Puits à colonne permanente
PSI	Puckorius Scaling Index (Indice de saturation de Puckorius)
PWP	Plummer, Wigley et Parkhurst
RQD	Rock Quality Designation (Indice de Qualité du Roc)
RSI	Ryznar saturation index (Indice de saturation de Ryznar)
RMSE	Root mean square error (Erreur quadratique moyenne)
TSS	Total suspended solids (Solides totaux en suspension)
TDS	Total dissolved solids (Solide totaux dissous)

LISTE DES ANNEXES

Annexe A	Diamètre effectif des ions	104
Annexe B	Régression polynomiale des molalités des espèces dissoutes dans l'eau	105

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

1.1 Mise en contexte

L'enjeu climatique actuel nécessite de réduire l'empreinte carbone de la consommation énergétique, en particulier en ce qui a trait aux bâtiments. Ces derniers représentent en effet 13% des émissions de Gaz à Effet de Serre (GES) au Canada, ce qui en fait la troisième source d'émission la plus importante [19]. La principale demande d'énergie est liée au chauffage en raison du climat froid qui y règne. Il s'agit donc d'un secteur prioritaire pour atteindre la carboneutralité à l'horizon 2050 fixée par le gouvernement du Canada [20]. Ainsi, la transition énergétique est un défi important qui implique la recherche de nouvelles solutions énergétiques, écologiques et économiques. Une piste de diminution des GES réside dans l'exploitation de l'énergie géothermique grâce aux Puits à Colonne Permanente (PCP).

Les PCP présentent des avantages importants, notamment en termes de compacité, d'absence d'émissions de gaz à effet de serre lors de leur fonctionnement et de rentabilité à long terme. En combinaison avec une ou plusieurs Pompe À Chaleur (PAC), ils utilisent l'eau souterraine comme fluide caloporteur pour extraire de la chaleur (en chauffage) ou restituer de la chaleur (en climatisation) dans le sol. L'utilisation des PAC dans ces systèmes géothermiques augmente considérablement leur efficacité énergétique. En effet, ces systèmes sont caractérisés par un Coefficient de Performance (COP) de 3 à 4, ce qui est supérieur aux systèmes de chauffage électrique (dont le COP égale à 1) et qui permet de réduire les coûts énergétiques pour des besoins équivalents [21].

Les PCP sont des systèmes peu utilisés malgré leur potentiel élevé, en particulier au Canada. Au Québec, entre 2008 et 2012, 83% des systèmes géothermiques à basse température installés sont des systèmes en boucles fermées [22]. Les freins majeurs à l'adoption des PCP incluent les obstacles liés à l'hydrogéologie et aux réglementations, ainsi qu'un manque de soutien politique [23].

1.2 Problématique

La technologie a été éprouvée à différents endroits du globe, surtout en Amérique du Nord, dans les régions de New-York et de Massachusetts qui sont caractérisées par des roches ignées et métamorphiques très peu solubles [24]. Toutefois, une question persiste concernant leur installation au Québec à cause des aquifères de type calcaire pouvant être l'origine du colmatage des PCP. Généralement, l'eau souterraine est en équilibre avec les roches calcaires

mais la variation de température, de pression, ainsi que le dégazage de CO_2 peuvent engendrer la précipitation ou la dissolution de la calcite [25, 26]. La précipitation des ions présents dans l'eau souterraine peut ainsi provoquer des problèmes fonctionnels dans le système géothermique en colmatant le puits de pompage, les tuyaux et le puits d'injection, ainsi que la PAC. Ces problèmes peuvent potentiellement diminuer l'efficacité du système et empêcher le système géothermique à répondre aux besoins thermiques du bâtiment.

Par ailleurs, comme l'entretien des systèmes géothermiques peut être coûteux et complexe en cas de colmatage, il est essentiel d'étudier les processus géochimiques qui se produisent dans un PCP afin d'évaluer la vitesse de réaction et prévoir les réactions de précipitation et dissolution des ions présents dans l'eau souterraine.

Les essais de cinétique conventionnels ne permettent de répondre que partiellement à la question de vitesse de réaction, car ils utilisent une roche broyée et sont peu représentatifs d'écoulement de l'eau dans un PCP. De plus, les essais les plus courants dans la littérature ont été réalisés sur de la calcite pure, ce qui n'est pas forcément représentatif des conditions de terrain. Il convenait donc d'élaborer un nouveau protocole expérimental, qui soit représentatif des conditions d'exploitation des PCP et qui permette d'évaluer les risques de colmatage. Pour ce faire, un essai pilote a été réalisé pour la mise en place d'un système PCP visant à chauffer et climatiser un centre sportif à Montréal, le Centre Père-Marquette.

1.3 Objectif principal

L'objectif principal de la présente étude est de déterminer les risques de colmatage d'un PCP au droit du Centre Père-Marquette à l'aide d'un essai de laboratoire représentatif des conditions d'exploitation.

1.4 Objectifs spécifiques

L'objectif principal présenté en 1.3 a été divisé en 3 sous-objectifs spécifiques :

1. développer un protocole expérimental représentatif de l'écoulement de l'eau dans un PCP, permettant d'étudier la dissolution de la roche calcaire et de se rapprocher des conditions réelles d'exploitation,
2. déterminer, par une méthode d'approche inverse, la surface minérale réactive des minéraux carbonatés,

3. évaluer la cinétique de réaction de la roche calcaire au droit du Centre Père-Marquette et les risques de colmatage associés.

1.5 Méthodologie

La méthodologie retenue pour ce travail comprend cinq grandes étapes :

Étape 1 : Réalisation d'une revue de littérature

Premièrement, une étude bibliographique sur les différents échangeurs de chaleur existants a été réalisée, soient les systèmes en boucle ouverte, fermée et les PCP. L'analyse s'est ensuite poursuivie en abordant l'historique, le fonctionnement et les types de colmatage engendrés dans un PCP. Par ailleurs, une partie de la recherche bibliographique porte sur le contexte géologique et géothermique de l'Île de Montréal, les paramètres utilisés pour la caractérisation de l'eau souterraine et les types de réactions chimiques, ainsi que les catégories des systèmes carbonatés. Cette première étape s'est terminée en mettant en évidence les modèles numériques publiés dans la littérature.

Étape 2 : Présentation du site d'étude et de la méthodologie

Le troisième chapitre de ce mémoire est consacré à la présentation du Centre Sportif de Père-Marquette où l'installation de PCP est envisagée. Cette partie est suivie d'un quatrième chapitre qui présente l'essai de colonne à flux continu réalisé en laboratoire dans le but d'étudier la dissolution de la roche calcaire prélevée du site d'étude.

Étape 3 : Résultats et analyses

Le cinquième chapitre fait le point sur l'approche inverse utilisée pour l'évaluation de la surface minérale réactive des minéraux carbonatés. Les résultats obtenus ont été interprétés et utilisés pour l'estimation de la cinétique de réaction de la calcite. Cette dernière a été utilisée pour extrapoler les cinétiques de réaction lors du fonctionnement d'un PCP sur le site d'étude.

Étape 4 : Discussion générale

Le sixième chapitre est consacré à une analyse sur les paramètres utilisés pour le développement d'un modèle thermo-hydro-géochimique, permettant la simulation de l'écoulement de l'eau, le transfert de chaleur et les cinétiques de réactions des minéraux.

Étape 5 : Conclusions et recommandations

Le dernier chapitre présente les conclusions obtenues et les différentes suggestions pour poursuivre la recherche et le développement d'un modèle géochimique intégré d'un PCP.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

Ce chapitre présente une revue de littérature de différents travaux de recherche sur les Puits à Colonne Permanente (PCP) et le colmatage potentiel de leurs composants. Ce chapitre permet au lecteur de connaître les différents systèmes géothermiques et de mieux comprendre le fonctionnement des PCP et les difficultés liées à leur installation au Québec en général et sur l'Île de Montréal en particulier. Pour commencer, l'historique de cette technologie, son fonctionnement et ses limitations d'installation sont expliqués. Ensuite, les caractéristiques du contexte hydrogéologie montréalais et les différents types du colmatage à long terme sont abordés et la section se poursuit en discutant la qualité de l'eau et des indices permettant de prédire l'entartrage de PCP. D'un point de vue chimique, les catégories de réactions chimiques potentielles et les types des systèmes géochimiques carbonatés sont également présentés. Finalement, les modèles expérimentaux et numériques décrivant les processus de précipitation et dissolution des carbonates sont expliqués.

2.1 Différents systèmes géothermiques

La géothermie de basse température est basée sur l'exploitation de l'énergie thermique emmagasiné dans le sol. Les systèmes géothermiques sont ainsi composés de trois éléments : un Échangeur de Chaleur Souterrain (ECS), une Pompe À chaleur (PAC) et un système de distribution de chaleur (air pulsé ou planchers radiants). Ces systèmes se distinguent par le type d'ECS implantés dont les différents types sont : les systèmes en boucle fermée, les systèmes en boucle ouverte et les puits à colonne permanente.

2.1.1 Systèmes en boucle fermée

Les systèmes en boucle fermée sont caractérisés par la circulation d'un fluide caloporteur (un mélange d'antigel et d'eau) à l'intérieur de la boucle. En mode chauffage, la récupération de l'énergie emmagasinée dans le sol se fait par la conduction entre la formation géologique environnante et les tuyaux utilisés. Cette énergie se transmet à l'aide d'une pompe à chaleur aux bâtiments afin de satisfaire leurs besoins thermiques. La quantité de chaleur échangée dépend de la résistance thermique équivalente du puits, qui est composée de la conductivité thermique des tuyaux, du matériel de remplissage et la géométrie du puits [7].

À noter que ce type de systèmes ne nécessitent pas la présence d'une nappe phréatique pour fonctionner.

2.1.2 Systèmes en boucle ouverte

Les systèmes en boucle ouverte sont caractérisés par la circulation d'eau souterraine comme fluide caloporteur. Le captage de l'eau se fait à l'aide de puits de pompage, puis elle est transportée vers une PAC afin de répondre aux besoins d'un bâtiment. Après chaque échange thermique, l'eau pompée est réinjectée dans un puits d'injection. La distance entre les puits de pompage et d'injection est critique et doit être importante afin d'éviter l'inversion du gradient hydraulique entre les puits, engendrant potentiellement un court-circuit hydraulique [27]. L'advection est le mécanisme de transfert de chaleur dominant entre l'eau et la formation géologique, ce qui requiert de bonnes conditions hydrogéologiques et un aquifère productif [7].

De plus, l'utilisation de l'eau souterraine directement dans la boucle et la variation de température au niveau de la PAC peuvent engendrer des réactions chimiques comme une précipitation des minéraux, ce qui pourrait rendre l'entretien de ce système difficile. Ainsi, la mise d'un échangeur de chaleur à la sortie de l'eau souterraine est préférable, parce que ce dernier peut être plus facilement entretenu. Par ailleurs, l'utilisation de l'eau souterraine comme fluide caloporteur augmente le rendement thermique du système par rapport aux systèmes en boucle fermée.

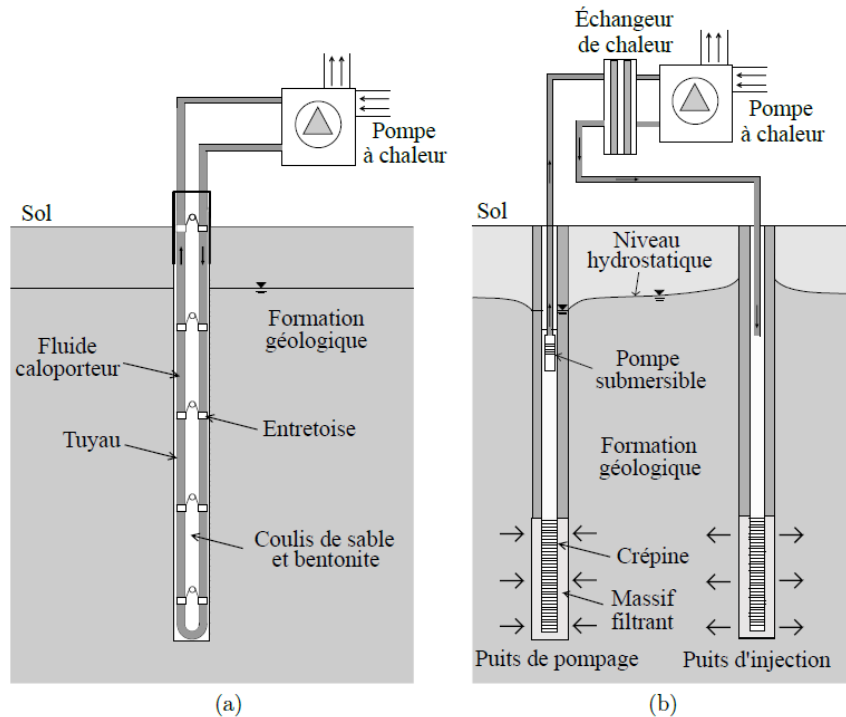


FIGURE 2.1 Schéma des systèmes géothermiques en a) boucle fermée et en b) boucle ouverte, tiré d'Eppner [7]

2.1.3 Puits à Colonne Permanente

Les systèmes de puits à colonne permanente combinent les deux aspects des boucles géothermiques ouverte et fermée. En effet, leur fonctionnement est similaire à celui des systèmes en boucle fermée dans la mesure où l'eau souterraine pompée est réinjectée au sein du même puits d'extraction. Cependant, ils s'apparentent également aux systèmes en boucle ouverte en utilisant directement l'eau souterraine pour l'échange de chaleur. L'eau souterraine est transportée vers un échangeur thermique à l'aide de la pompe submersible situant au sein de tube de prélèvement comme illustré sur la Figure 2.2. En cas de sol peu compétent en surface, leur installation exige la mise en place d'un cuvelage d'acier afin d'éviter les problèmes d'effondrement [28]. Ce type de système ne nécessite pas un aquifère productif puisque son fonctionnement est basé sur la réinjection de l'eau dans le même puits. En ce qui concerne le mode de transfert thermique, il se fait par advection et conduction avec la formation géologique environnante [7].

Par ailleurs, afin de répondre à des besoins thermiques plus importants, une partie de l'eau peut être évacuée à l'extérieur du puits de pompage, pendant les périodes de pointes. L'eau est alors envoyée dans un puits d'injection qui induit un écoulement de l'eau vers le puits de pompage. Cette opération, appelée «saignée», permet la stabilisation de la température, autrement dit, le refroidissement d'eau et le sol environnant pendant le rejet de chaleur en été et leur chauffage pendant l'extraction de chaleur en hiver. Ces opérations ramènent la température d'eau souterraine à une plage de fonctionnement normale [29], ce qui améliore les performances du système en augmentant son coefficient de performance thermique.

2.2 Étude détaillée des Puits à Colonne Permanente

2.2.1 Historique

Le premier concept d'exploitation de la chaleur emmagasinée dans le sol comme une source d'énergie pour une pompe à chaleur géothermique (GSHP) a été trouvé dans un brevet suisse délivré en 1912 par Heinrich Zoelly [30,31].

Après la deuxième guerre mondiale, l'Amérique du Nord et l'Europe sont les premiers à avoir implanté la technologie de la pompe à chaleur géothermique (GSHP) à grande échelle, mais ceci a diminué au début des années 1950 avec l'augmentation de l'utilisation du gaz et du pétrole comme combustibles de chauffage [32]. À cette époque, Ingersoll a proposé une théorie analytique sur la conduction thermique du systèmes GSHP [33], qui a servi de base à leur conception [32].

Après la première crise pétrolière en 1970, les systèmes GSHP ont été privilégiés comme

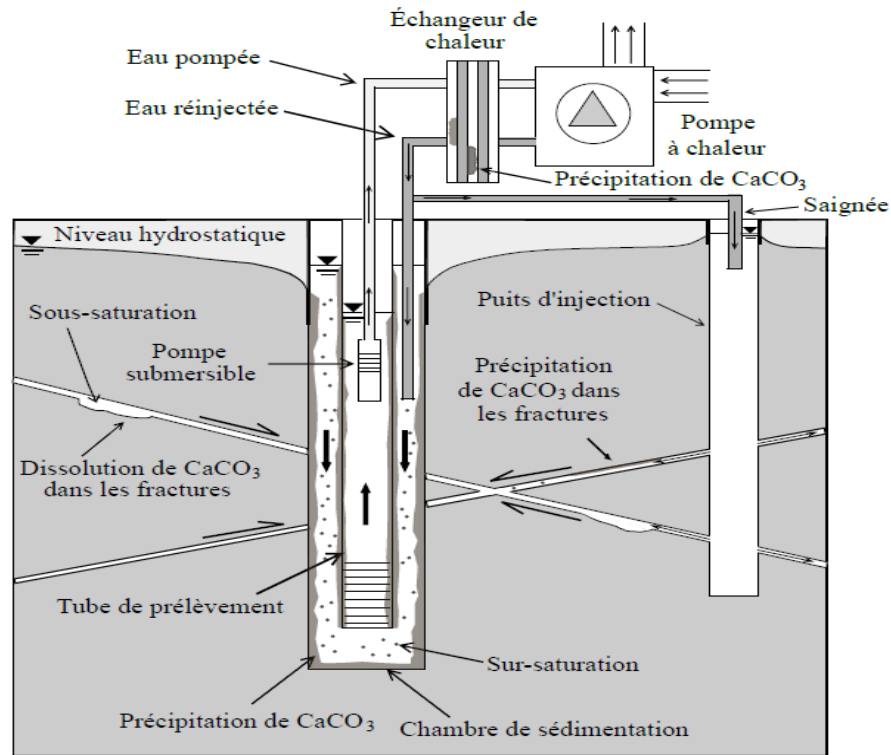


FIGURE 2.2 Schéma d'un puits à colonne permanente, tiré d'Eppener [7]

alternative d'énergie pour le chauffage et le refroidissement des bâtiments, notamment en Amérique du Nord et en Europe, avec des investigations expérimentales. Après cette crise, le développement mondial de l'énergie géothermique est devenu de plus en plus rapide [34], car ces systèmes géothermiques se sont avérés économiquement rentables [35]. Au cours des deux décennies qui ont suivi, des efforts considérables ont été déployés pour établir les normes d'installation et le développement de méthodes de conception pour ces systèmes d'extraction de chaleur [32]. Récemment, les systèmes de GSHP ont attiré de plus en plus d'attention en raison de leur efficacité énergétique et leur respect de l'environnement, notamment grâce à plusieurs projets de démonstration tels que ceux présentés dans la section 2.2.2.

2.2.2 Particularités des PCP

Possibilités d'installation des PCP

Chaque échangeur de chaleur présentés dans la section 2.1 a ses propres caractéristiques qu'il faut prendre en considération avant leur installation. En effet, l'implantation de ces systèmes doit être compatible avec les conditions géologiques, géothermique et hydrogéologique du site. Par ailleurs, les conditions climatiques saisonnières n'ont pas d'impact sur ces systèmes

géothermiques [36].

D'après Laroche [37], il est difficile d'intégrer les systèmes géothermiques en boucle fermée dans une région fortement urbanisée. En effet, ils sont caractérisés par une faible efficacité énergétique [38], ce qui nécessite l'implantation de plusieurs puits et une grande surface au sol pour répondre aux besoins d'un seul bâtiment.

Par ailleurs, les systèmes en boucle ouverte requièrent de bonnes conditions hydrogéologiques, un aquifère productif et un grand site permettant l'installation de deux puits de pompage et d'injection afin d'éviter les perturbations hydrauliques et thermiques entre ces deux puits.

Ainsi, les puits à colonne permanente représentent une alternative intéressante. En effet, ils peuvent être installés dans des régions caractérisées par des conditions hydrogéologiques moins favorables et nécessitent peu d'espace en surface. Il est toutefois préférable que le site d'installation soit un roc compétent permettant d'éviter la mise en place de soutiens structurels lors du forage [24].

Projets de démonstration des PCP

Les PCP attirent de plus en plus d'attention. En effet, les systèmes installés en Nouvelle-Angleterre ont montré une efficacité énergétique élevée [28], notamment parce que les régions d'implantation sont caractérisées par un socle très compétent et une conductivité thermique intéressante permettant l'optimisation de la construction.

Par ailleurs, Orio et al. [8] ont fait des études sur la performance des six PCP implantés dans les systèmes de chauffage d'une école publique en Nouvelle Angleterre. Cette étude a duré de 1997 à 2005 et a permis de présenter des économies annuelles d'énergie consommé de 298484 KWh sur les huit années de chauffage de l'école [8], comme illustré sur la Figure 2.3 qui montre une réduction de l'électricité consommé depuis l'installation du système géothermique en 1997. De plus, de tels systèmes géothermiques ont été installés en Corée du Sud, dans une zone urbaine, où ils ont présenté une efficacité énergétique élevée en présence d'une saignée [39]. Cette dernière contribuant à améliorer le taux de transfert de chaleur dans un PCP.

Comme la grande région de Montréal est caractérisée par des aquifères calcaires (voir section suivante) et des roches très solubles dans l'eau [26], les puits à colonne permanente représentent un ECS intéressant pour une récupération efficace de l'énergie pour le chauffage et le refroidissement des bâtiments résidentiels et commerciaux [37]. Ainsi, une installation expérimentale a été implantée sur le site de Varennes, caractérisé par des conditions géologiques défavorables. Ce site repose sur la formation de Lorraine, marquée par une faible conductivité hydraulique ($5,7 \cdot 10^{-7}$ m/s) et un pourcentage de carbone organique élevé [9, 40]. En

2016, deux puits y ont été forés : un PCP de 300 m de profondeur et un puits d'injection de 150 m de profondeur, espacés d'une distance de 10 m [9]. Ces deux puits sont connectés à un laboratoire géothermique expérimental qui est composé de quatre thermopompes, un échangeur de chaleur à plaques, un chauffe-eau, un système de contrôle et d'acquisition et un système de traitement de l'eau comme illustré sur la Figure 2.4. L'utilisation d'un système de traitement des eaux connecté au PCP joue un rôle primordial dans la réduction des risques de colmatage dans les différentes composantes du système. En effet, il est placé avant l'échangeur de chaleur, permettant le traitement de 20% de l'eau pompée. L'eau ne passant pas dans le système de traitement atteint directement l'échangeur de chaleur mais grâce au fonctionnement en boucle, l'ensemble de la colonne d'eau participant aux échanges thermiques est traité après un certain temps de fonctionnement [9].

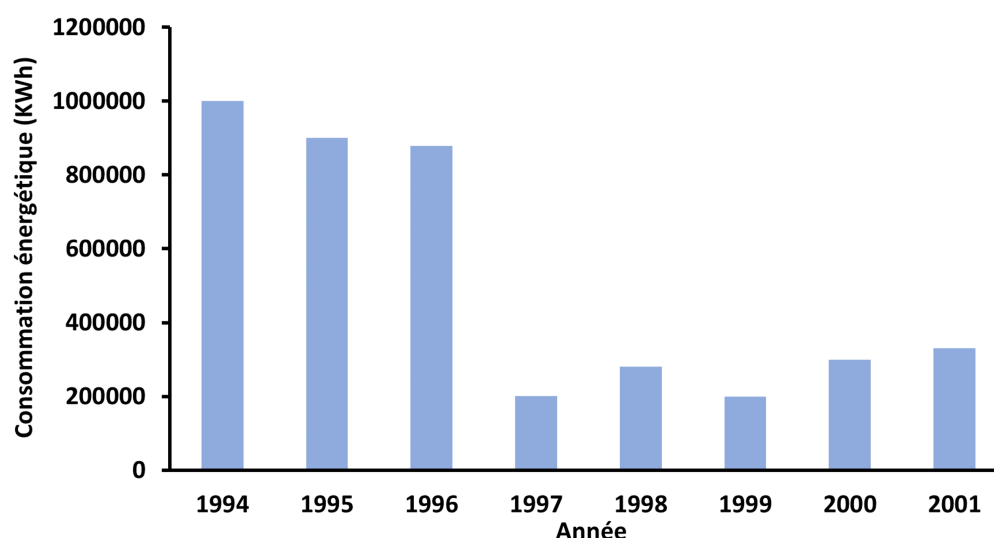


FIGURE 2.3 Consommation d'énergie pour le chauffage d'une école publique en Nouvelle Angleterre, mesurée en KWh, tirée d'Orio et al. [8]

Après deux années de fonctionnement du système pilote à Varennes, les travaux expérimentaux ont montré la précipitation de carbonates sur le débitmètre, mais aucun problème majeur d'entartrage n'a été détecté [9]. Après cet essai, des PCP ont été installés à l'école la Clé-des-Champs, à St-Augustin de Mirabel. Ce site est caractérisé par une nappe phréatique peu profonde, une conductivité thermique et une perméabilité élevées, ainsi que des fractures à la base de la matrice géologique. Ces paramètres sont favorables à l'installation des PCP et le système retenu pour l'école est composé de 5 PCPs et d'un puits d'injection, en plus d'un système auxiliaire, connecté au système géothermique afin d'assurer le besoin de l'école et pallier tout éventuel dysfonctionnement [41]. Un suivi des performances du système et de

l'impact sur la qualité de l'eau est prévu dans le cadre de ce projet de recherche.

Ces deux projets de démonstration contribuent à la validation de la technologie dans le contexte québécois, mais ils restent très coûteux compte-tenu de l'ampleur des travaux. Les travaux réalisés dans le cadre du présent projet de recherche visent donc à donner de nouveaux outils de laboratoire permettant d'anticiper l'éventuel colmatage des PCP.

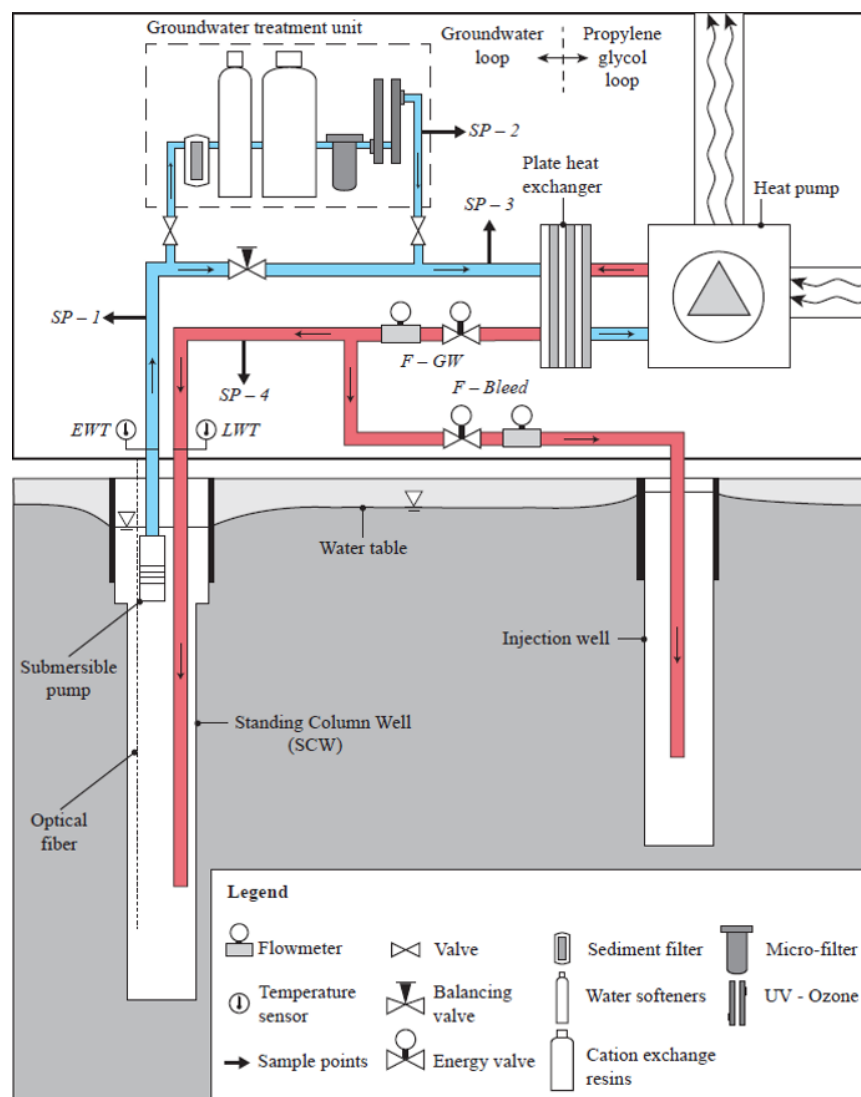


FIGURE 2.4 Illustration du puits à colonne permanente expérimentale connecté au laboratoire mobile géothermique à Varennes, tiré de Cerclet et al. [9]

Exigences des PCP

La performance des systèmes géothermiques dépend généralement de la formation géologique présente sur site, de sa capacité thermique et de l'activité chimique des différentes espèces minérales [42]. La présence d'un aquifère productif ne présente pas une condition primordiale

pour l'installation des PCP puisque l'eau est réinjectée dans le même aquifère, ce qui n'engendre pas de problèmes d'abaissement de la nappe phréatique. Toutefois, leur implantation exige le contrôle de certaines conditions afin d'assurer un bon fonctionnement à long terme. Par exemple, l'installation d'un cuvelage d'acier en tête de forage, au niveau de la paroi du trou, afin d'éviter les problèmes d'effondrement du mort-terrain [28]. De plus, l'équilibrage du débit d'eau recirculé vers les puits de pompage et d'injection est un élément essentiel afin d'éviter le débordement de puits [41]. Finalement, des problèmes de colmatage à long terme liés aux conditions hydrogéochimiques peuvent survenir [27]. Ces derniers seront traités dans la section 2.4.

Caractéristiques des PCP

Le choix du nombre du puits et leur longueur dépend du type de bâtiments et de leurs besoins. Pour répondre aux besoins énergétiques des bâtiments résidentiels, la profondeur varie entre 75 m et 300 m, alors que pour les bâtiments commerciaux, la plage de profondeur varie entre 180 m et 450 m [28]. La construction d'un seul puits peut être suffisante pour le chauffage et la climatisation de bâtiments, mais des besoins plus importants peuvent nécessiter plusieurs puits [7]. En outre, les PCP peuvent être insérés aux structures ou aux établissements déjà construits dans une zone fortement urbanisée [43].

Rôle de la saignée

D'après Rees et al. [44], la saignée réduit la profondeur de puits de pompage pour un taux de transfert donné, ce qui permet de réduire les coûts initiaux et d'améliorer l'efficacité énergétique en modérant la température de l'eau souterraine durant les périodes de pointe. Ainsi, elle protège le système contre le gel pendant la pointe en mode chauffage.

Selon Deng et al. [45], la saignée est active en mode chauffage lorsque la température de l'eau entrant dans l'échangeur à chaleur (EWT pour "entering water temperature") atteint une température de 5,82°C et désactivée lorsque cette température est égale à 8,6°C. En mode refroidissement, la saignée peut être activée lorsque l'EWT augmente à 29,2°C, mais lorsque la température diminue à 26,4°C, il faut la désactiver. De manière générale, la saignée est active lorsque la différence entre EWT et LWT excède 4,6°C, où LWT est l'eau sortant de l'échangeur à chaleur (LWT pour "leaving water temperature"). Par ailleurs, la saignée n'est pas continue et varie selon la température maximale en climatisation et minimale en chauffage afin d'éviter le débordement de puits d'injection et la création d'un problème de court-circuit entre le deux puits [45].

Il existe différents modèles numériques développés afin d'étudier le comportement des PCP en présence d'une saignée; les plus pertinents sont présentés dans le Tableau 2.1.

TABLEAU 2.1 Différents modèles de PCP et leurs caractéristiques

Modèles	Caractéristiques
Deng (2004) [45]	Premier modèle 2D axisymétrique d'un PCP, intégrant le fonctionnement d'une saignée.
Abu-Nda et al. (2008) [46]	Premier modèle 3D de PCP intégrant les variations saisonnières sous forme des conditions frontières.
Croteau (2011) [10]	Modèle basé sur la fonction Heaviside afin de contrôler l'activation brusque de la saignée. La figure 2.5 montre l'évolution du pourcentage de la saignée en fonction d'EWT.
Nguyen et al. (2015) [47]	Ce modèle est caractérisé par l'insertion des fonctions séquentielles permettant le contrôle de l'opération d'activation ou désactivation de la saignée en fonction de la température d'entrée à la thermopompe. Ainsi, le maintien de la plage d'EWT pour un bon fonctionnement.
Eppner et al. (2017) [48]	Ce modèle est caractérisé par le couplage de trois modèles : thermique, hydrique et géochimique afin d'étudier le comportement des PCP et de l'aquifère.

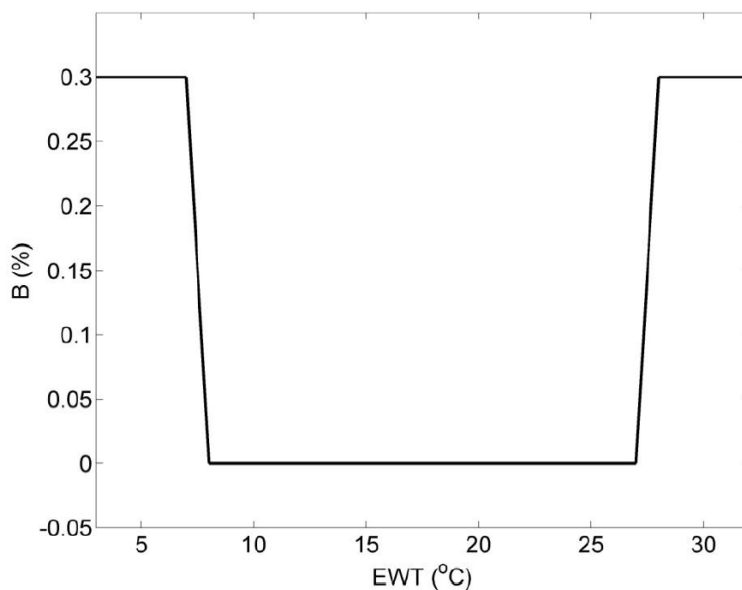


FIGURE 2.5 Évolution de pourcentage de la saignée en fonction de EWT, tiré de Croteau [10]

2.2.3 Facteurs limitatifs de déploiement de PCP

Il existe des lois et des normes protégeant les aquifères exploités par les systèmes géothermiques. Les critères de ces textes réglementaires interviennent comme un facteur limitatif de déploiement de ces systèmes. En effet, au Québec, l'installation de ces systèmes exige le retour de l'eau dans son aquifère d'origine, ce qui nécessite une bonne gestion du fonctionnement de la saignée [49].

En ce qui concerne l'aspect thermique de l'eau souterraine au Québec, il n'y a pas d'exigences traitant le changement de la température de l'eau et le roc environnant causé par l'installation des systèmes géothermiques [50], mais il y a des exigences sur le débit de prélèvement. En effet, d'après la loi sur la qualité de l'environnement, le débit d'eau pour les travaux ne doit pas excéder 75 000 L/jour, à moins de recevoir une approbation préalable du Ministre [49].

Par ailleurs, il n'existe pas de lois qui évaluent les perturbations thermiques et potentielles engendrées lors de l'implantation de plusieurs PCP dans une zone urbaine et dense. Ainsi, le développement de ces systèmes à long terme nécessite la quantification de la quantité maximale d'énergie extraite de sol et les changements de température engendrés sur les eaux souterraines [51].

2.3 Potentiel géothermique de l'Île de Montréal

2.3.1 Contexte géologique de l'Île de Montréal

La zone de Montréal est caractérisée par un socle précambrien composé des roches ignées et métamorphiques, sur lequel repose une séquence des roches sédimentaires des périodes du Cambrien et l'Ordovicien. Ces roches sédimentaires comprennent des grès du groupe de Postdam et une variété de roches sédimentaires (grès, argiles et calcaires) de différentes formations : Beekmantown, Chazy, Black river, Trenton et l'Utica. Cette série est nommée Basses-terres du Saint-Laurent [11] et illustrée sur la Figure 2.6.

Selon Keyser [52], la partie ouest de la Ville de Montréal se caractérise par l'affleurement de la formation Beekmantown, incluant des grès dolomitiques d'une épaisseur d'environ 250 m. La formation de Chazy est rencontrée dans la partie Nord de Montréal, et est caractérisée par des calcaires cristallins d'une épaisseur maximale de 85 m. Le groupe de Black River incluant des calcaires en contact avec des roches dolomitiques est l'unité géologique qui affleure moins largement à Montréal, dont son épaisseur n'excède pas 15 m. Par ailleurs, le groupe de Trenton est la formation la plus présente en surface à l'échelle de l'Île et elle consiste en des calcaires en lits, minces et intercalés de schistes ; cette dernière constitue 75% de la superficie

de l'Île. Finalement, la formation d'Utica est rencontrée le long de la rive sud et sud-est et son épaisseur ne dépasse pas 140 m.

Finalement, le Mont-Royal est singulier par rapport aux autres zones sur l'Île de Montréal. En effet, cette région est constituée des calcaires du formation Trenton, envahis par des roches magmatiques qui se sont formés sous la surface au cours de Crétacé inférieur. Suite à l'érosion, ces masses ignées ont été exposées, laissant apparaître les dykes et filons-couches introduits dans la masse avoisinante [53].

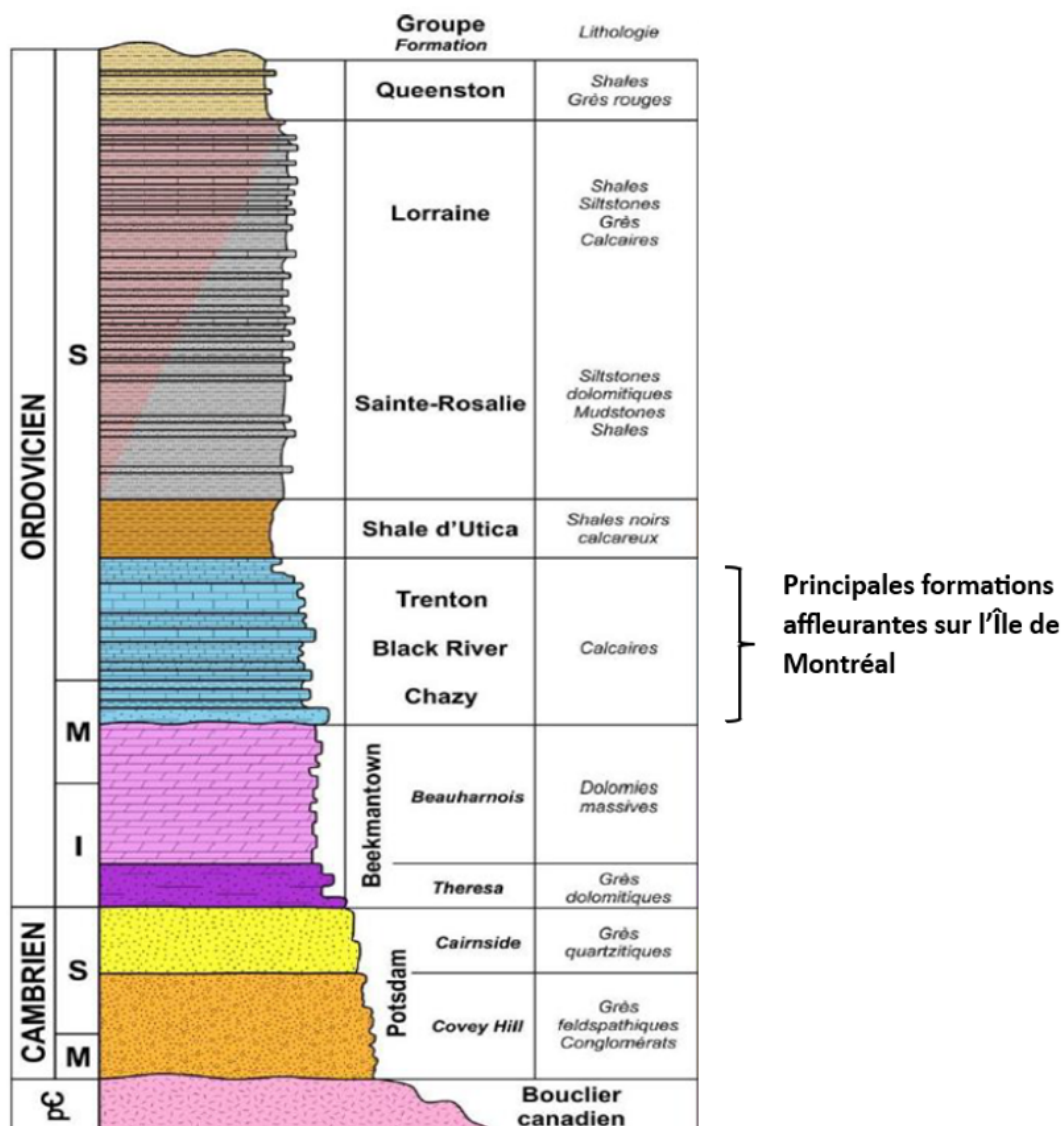


FIGURE 2.6 Séquence stratigraphique des Basses terres du Saint Laurent, tiré de Comeau et al. [11]

2.3.2 Contexte hydrogéologique de l'Île de Montréal

Selon Lepage [53], la topographie et le socle sont les facteurs contrôlant l'écoulement régional de l'eau. L'orientation de ces lignes d'écoulement est radiale, du centre vers le périmètre de l'Île, comme illustré sur la Figure 2.7 qui représente les lignes d'écoulement, les lignes isopièzes, ainsi que les lignes de partage des eaux. La zone du Mont-Royal, se situant au centre de l'Île, est caractérisée par une topographie élevée, avec un sommet à 229 mètres au dessus du niveau moyen de la mer [54], ainsi qu'une élévation de la nappe phréatique, ce qui en fait une zone principale de recharge [53].

Le manque d'information sur la situation de niveau piézométrique conduit à supposer que le niveau de la nappe phréatique reste stable au fil des années. En effet, cette hypothèse est basée sur les facteurs suivants [53] : les précipitations sur l'Île sont constantes au cours des années, le taux d'exploitation de l'eau souterraine par des pompages est faible puisque la plupart de l'eau potable provient de l'eau de surface entourant l'Île [12]. De plus, l'augmentation du phénomène d'urbanisation conduit à la diminution des points de recharge de l'aquifère.

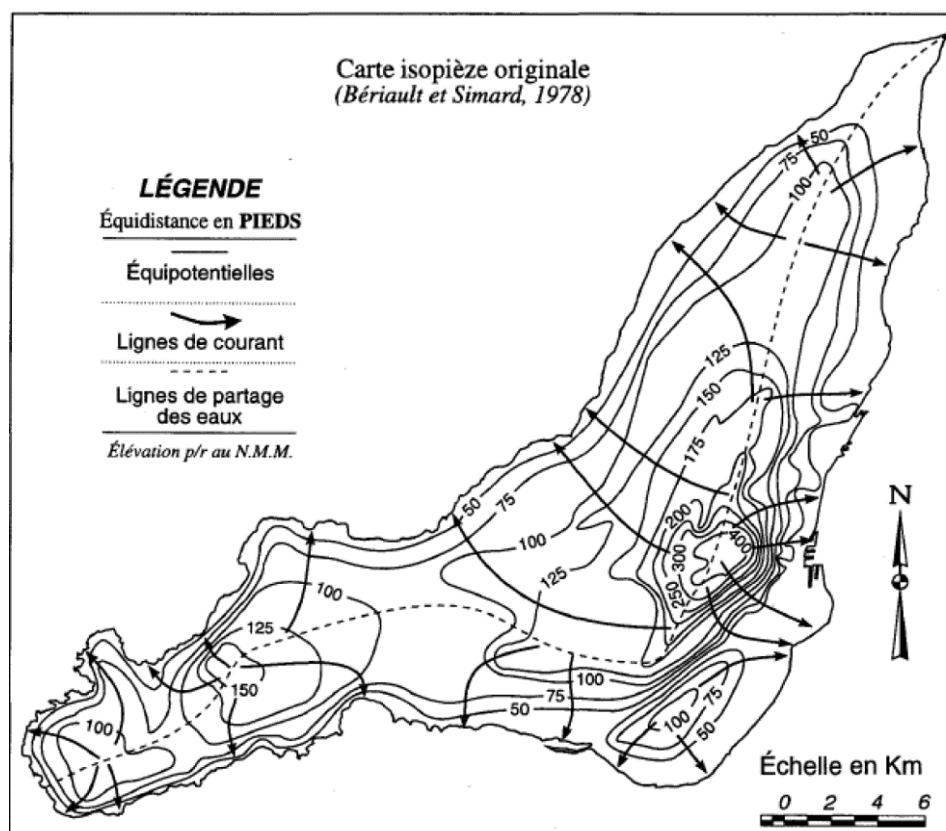


FIGURE 2.7 Carte piézométrique de l'Île de Montréal, tiré de Bériault et Simard [12]

2.3.3 Caractéristiques de conductivité thermique de l'Île de Montréal

Le déploiement des systèmes géothermiques nécessite une étude préalable du site, dont la caractérisation de la conductivité thermique de sous-sol. Cela permet d'évaluer le potentiel d'implantation du système géothermique et de baisser les incertitudes. Bédard et al. [17] ont effectué une modélisation géostatistique de la conductivité thermique du sous-sol de l'Île de Montréal pour des systèmes géothermiques peu profonds ($<150\text{m}$), en se basant sur les différents résultats de tests de réponse thermique (TRT) de différents échantillons de roc, ainsi que sur des analyses de conductivité thermique en laboratoire et des diagraphies de forages.

Les résultats de ces simulations géostatistiques ont montré que la conductivité thermique varie entre $2,5\text{ W/m.K}$ et 3 W/m.K sur l'ensemble de l'Île. Sa distribution varie selon les formations. Les formations de Chazy et Trenton, au Nord, sont caractérisées par une conductivité élevée et un potentiel d'implantation de systèmes géothermiques très intéressant. Également, la formation de Beekmantown dans la partie ouest de l'île est plus conductrice alors que la formation d'Utica sur la Rive-Sud est caractérisée par une conductivité moins élevée par rapport aux autres formations.

2.4 Types de colmatage

Selon Banks et al. [27], la qualité de l'eau souterraine représente un facteur important dans l'installation des systèmes géothermiques, en particulier les systèmes à boucle ouverte et les puits à colonne permanente. L'utilisation directe de l'eau présente à grande profondeur dans les composants de ces systèmes peut engendrer un colmatage dû aux réactions chimiques successives entre les différentes espèces. Un tel colmatage peut également être causé par des particules en suspension ou la croissance microbienne.

Les principaux problèmes liés à l'utilisation d'eau souterraine directement dans les systèmes géothermiques ont été décrits par Rafferty (2004) [55], à savoir, la précipitation des carbonates, la formation du produit corrosif sur les surfaces métalliques utilisées dans le système et la précipitation des dépôts ferreux en présence de bactéries réductrices de fer.

Étant donné que l'entartrage se produit sur des surfaces invisibles par l'opérateur, ces problèmes ne sont souvent pas prévisibles pendant le fonctionnement normal d'un système géothermique. Ainsi, une étude des paramètres hydrogéologiques du site d'implantation est une étape essentielle à la gestion de l'opération et cela permet de prévenir le risque de colmatage.

2.4.1 Colmatage physique

Le colmatage physique se manifeste par la capture des solides en suspension dans la matrice aquifère. L'évaluation de ce type de colmatage est basée sur la détermination de différents paramètres, comme les Solides Totaux en Suspension (TSS) et l'Indice de Filtre à Membrane (MFI) [56]. Dans un test de filtre à membrane, le MFI est calculé graphiquement en déterminant la pente de la partie linéaire de la courbe représentant l'inverse du débit en fonction du volume d'eau passant à travers un filtre de $0.45 \mu\text{m}$, sous une perte de charge constante [13], comme illustré sur la Figure 2.8.

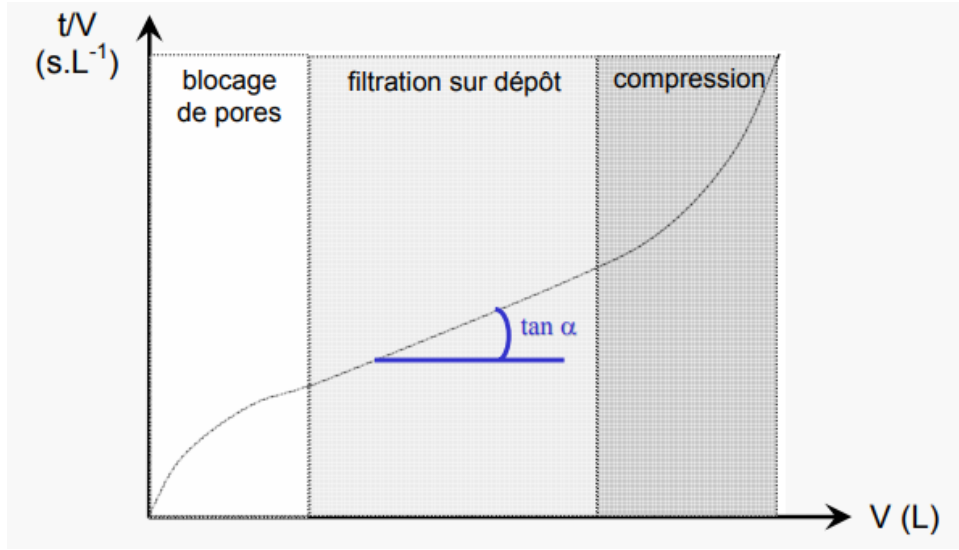


FIGURE 2.8 Détermination graphique du MFI, tiré de Boerlage et al. [13]

Cet indicateur prend en considération les mécanismes successifs suivants : le blocage des pores, la filtration sur dépôt et la compression. Ce paramètre est exprimé comme suit [56] :

$$MFI = \frac{\mu_d \cdot c}{2 \cdot p \cdot A_f^2 \cdot k_c} \quad (2.1)$$

où MFI est exprimé en s/L^2 , μ_d est la viscosité dynamique de l'eau en (Pa.s), c est la concentration de matières en suspension dans l'eau en (mg/L), p est la chute de pression en (Pa), A_f est la surface de la membrane filtrante en m^2 et k_c est la conductivité hydraulique intrinsèque exprimée en m/s.

D'après Rink-Pfeiffer et al. (2000) [57], le niveau des TSS doit être inférieur à 2 mg/l et le MFI de l'eau réinjectée inférieur à 3 s/L^2 [56] afin d'éviter ce type de colmatage. Il est important de noter que ce type de colmatage est peu rencontré dans les systèmes géothermiques et que peu d'études traitent le colmatage physique lors de la réinjection de l'eau dans l'aquifère. Il

ne sera donc pas abordé dans ce travail.

2.4.2 Colmatage biologique

Le colmatage biologique entraîne habituellement l'encrassement des PCP. En effet, l'eau souterraine contient des micro-organismes qui ont un potentiel élevé de croissance dans un environnement riche en nutriments. Ce type de colmatage est caractérisé par le développement des bactéries réductrices, capables de transformer le fer en hydroxyde de fer, un produit moins soluble, qui se précipite facilement [58].

Cette catégorie de bactéries est caractérisée par leur tendance à se développer dans les zones où le débit d'eau est très élevé [10], soit au niveau de la crépine qui constitue une zone attrayante pour la colonisation de bactéries. En effet, cet équipement se caractérise par une vitesse d'écoulement des eaux importante [55], et son colmatage par les bactéries conduit à la diminution du rendement des PCP. De plus, ces bactéries réductrices du fer existent dans des conditions précises [59] :

- une plage de pH entre 6 et 8,
- une concentration en fer supérieure à 0,2 ppm,
- une température entre 5°C et 16°C.

De plus, d'après Orio et al. [24], l'oxygène dissous favorise la précipitation des composés ferreux. La réinjection d'eau en dessous du niveau dynamique est donc une étape souhaitable afin de réduire le niveau d'oxygène. De plus, selon Rebhun et al. [60], les pauses intermédiaires entre le pompage et la réinjection présentent des sources d'oxygénation, favorisant l'accumulation et la croissance bactérienne. Les conditions stagnantes survenant pendant les phases d'arrêt favorisent l'oxygénation, qui à son tour conduit à la diversité microbienne dans le puits d'extraction.

Plusieurs méthodes peuvent être utilisées pour prédire le taux de colmatage potentiel de l'eau réinjectée, notamment, la teneur en carbone organique biodégradable, ainsi que des modèles mathématiques empiriques et analytiques décrivant les processus de bio-colmatage [61].

2.4.3 Colmatage chimique

Ce type de colmatage coïncide souvent avec le colmatage biologique. En effet, les micro-organismes peuvent aussi favoriser la précipitation de minéraux, ce qui rend la distinction entre ces deux catégories de colmatage difficile. En effet, la présence d'oxygène dans un aquifère riche en minéraux de fer et manganèse amène certaines bactéries à transformer ces éléments en oxydes de fer (Fe^{3+}) et manganèse (Mn), qui sont des produits moins solubles

et précipitables.

La variation de température, l'oxygénation de l'eau souterraine et la pression représentent les premiers facteurs de la modification de la composition chimique de l'aquifère [7], ce qui favorise la précipitation des minéraux et par la suite la diminution de rendement du système ou la réduction de la conductivité thermique et hydraulique du socle rocheux.

Le colmatage chimique est le principal problème attendu dans la mise en oeuvre de PCP sur l'Île de Montréal, étant donné que 75% de sa formation géologique comprend des aquifères calcaires comme présenté dans la section 2.3.1. La précipitation des minéraux carbonatés engendre l'augmentation de la dureté de l'eau, ainsi qu'un colmatage potentiel des PCP par accumulation au sein des différents composants du système. La dureté moyenne des eaux souterraines au Québec est 117 mg/L, tandis que la région de Montréal présente des valeurs de dureté très élevée atteignant 259 mg/L de CaCO_3 [62].

Selon Thomas et al. [63], les facteurs contrôlant la solubilité des minéraux carbonatés sont la variation de température et le pH, tandis que la concentration des différentes espèces ioniques présentes et leur cinétique de précipitation exercent une influence moins importante.

Eppner et al. [48] ont montré que la précipitation des minéraux carbonatés se produit à l'entrée du puits d'extraction en été, où l'eau plus chaude est réinjectée, alors que la dissolution de la calcite se produit plutôt en hiver. Ces deux phénomènes peuvent toutefois se manifester en même temps [7] comme illustré sur la Figure 2.9.

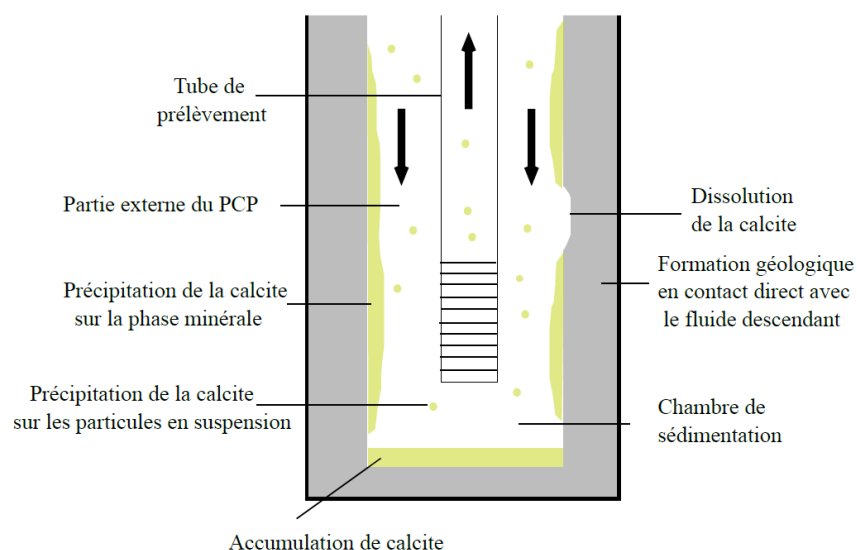
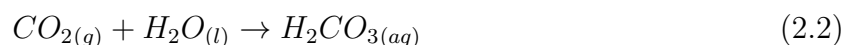


FIGURE 2.9 Mécanismes de précipitation et dissolution de la calcite au sein d'un puits à colonne permanente, tiré d'Eppner [7]

Par ailleurs, lorsque le système est ouvert et la P_{CO_2} est élevée, le dégazage de CO_2 est favorisé. Il faut prendre en considération ce phénomène, car il exerce un impact sur les processus géochimiques en tête du puits. En effet, le dégazage de CO_2 engendre la décroissance de la concentration de H_2CO_3 et l'augmentation du pH, ce qui favorise les conditions de précipitation [7, 64]. L'équation suivante montre la réaction chimique de dégazage du CO_2 :



De plus, le dégazage de gaz carbonique engendre une augmentation de la précipitation de la calcite jusqu'à 33% [7]. Ce phénomène est toutefois inhibé par la présence d'orthophosphates, de magnésium et d'acide organique dans l'eau souterraine [65]. En effet, le magnésium et les orthophosphates peuvent réagir avec le calcium et former un composé peu soluble, cela peut entraîner à une décroissance des ions de calcium disponibles pour la réaction de précipitation de la calcite. Également la présence d'acide organique dans l'eau réduit le pH de la solution, ce qui peut inhiber la précipitation de ce minéral.

Gjengedal et al. [66] ont présenté les principaux composants du système affectés par le colmatage et les ont divisé en deux catégories : les équipements passifs et actifs. L'échangeur de chaleur est qualifié de dispositif actif, permettant le transfert de chaleur entre l'eau souterraine et le fluide secondaire. De même, la pompe submersible est considérée active, puisqu'elle utilise de l'énergie pour pomper l'eau d'un point à un autre. Ces deux équipements sont affectés indépendamment de l'endroit où le colmatage se développe dans le système. Par ailleurs, les puits et les tuyaux sont qualifiés d'équipements passifs. Les problèmes majeurs de colmatage qui peuvent survenir durant le fonctionnement des ces équipements sont les suivants :

- le colmatage du puits de production conduit à la réduction du débit de pompage ; ce qui réduit le rendement de la thermopompe et l'insatisfaction des besoins des bâtiments ;
- le colmatage du puits d'injection entraîne un débordement de l'eau et une capacité d'injection insuffisante ;
- les précipitations dans les tuyaux rétrécissent la zone d'écoulement et induisent des frictions qui rendent la pompe submersible incapable de fournir l'eau d'une façon suffisante à l'échangeur de chaleur ;
- la précipitation des minéraux dans l'échangeur de chaleur crée une isolation, réduisant l'efficacité de transfert de chaleur ;
- le colmatage de l'aquifère est développé par les réactions chimiques entre l'eau souterraine native et l'eau injectée de composition chimique différente. Ce colmatage réduit la conducti-

tivité hydraulique de l'aquifère et affecte la performance de puits de pompage ou de la saignée.

2.4.4 Stratégies de suivi du colmatage

L'utilisation de capteurs permet de contrôler la température et la pression du système, et les débitmètres peuvent aussi surveiller le débit volumique lors du fonctionnement de PCP. En outre, une unité de commande d'entraînement à vitesse variable (VSD) permet d'asservir la vitesse de rotation de la pompe submersible [67].

L'échangeur de chaleur, où la variation de température est importante, représente l'équipement le plus susceptible à l'encrassement chimique, et des capteurs de pression peuvent être installés à l'entrée et à la sortie de l'échangeur de chaleur pour détecter le différentiel de pression.

La performance globale de l'échangeur de chaleur est décrite par la relation suivante [67,68] :

$$U.A.LMTD = P \quad (2.3)$$

où P est la chaleur extraite de sol (W), U est le coefficient de transfert de chaleur global de l'échangeur de chaleur ($\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$), A est la surface totale de transfert de chaleur dans l'échangeur de chaleur en (m^2) et LMTD est le logarithme de la différence de température entre l'eau souterraine et le fluide secondaire.

LMTD est calculé selon les équations 2.4 ou 2.5, où ΔT_a est la différence de température de l'eau souterraine côté source de chaleur et ΔT_b est la différence de température de l'eau souterraine côté charge de l'échangeur [67] :

$$LMTD = \frac{\Delta T_a - \Delta T_b}{\ln(\frac{\Delta T_a}{\Delta T_b})} \quad si \Delta T_a \neq \Delta T_b \quad (2.4)$$

$$LMTD = \frac{\Delta T_a + \Delta T_b}{2} \quad si \Delta T_a = \Delta T_b \quad (2.5)$$

La détection du colmatage est basée sur la surveillance de la valeur de U.A. En effet, la diminution de cette dernière signifie le développement d'un encrassement au sein de l'échangeur de chaleur [66]. Il est important de noter que le coefficient de transfert de chaleur U dépend de débit de pompage [67]. Ainsi, le colmatage des équipements passifs (le puits de pompage et les tubes) affecte indirectement l'échangeur de chaleur par la réduction des débits. Jonsson et al. [69] ont discuté de la possibilité d'implémenter l'algorithme de filtre de Kalman dans la procédure de prétraitement des données afin d'améliorer les estimations des valeurs U.A

correspondant au débit d'eau souterraine.

À noter que ces procédures et les capteurs utilisés n'identifient pas les causes de colmatage mais, en déterminant lesquels des quatre composants est colmaté, une planification de la maintenance peut être effectuée pour le dispositif affecté.

2.5 Qualité de l'eau souterraine

2.5.1 Paramètres physico-chimiques

L'évaluation de la qualité de l'eau est un facteur important pour assurer le bon fonctionnement des systèmes géothermiques et éviter le colmatage à long terme [70]. En effet, la réinjection de l'eau avec une variation des propriétés chimiques engendre la modification de la signature chimique de l'aquifère. D'après Rafferty et al. [55], l'entartrage constitue le problème majeur lors du fonctionnement des systèmes et il est lié aux changements des caractéristiques physico-chimiques de l'eau.

Ainsi, afin de caractériser la zone d'installation des PCP, certains paramètres hydrogéochimiques devraient être évalués. Il s'agit de paramètres quantifiables in situ à l'aide d'une sonde multiparamètres et des paramètres mesurés en laboratoire à l'aide d'une analyse géochimique. Les paramètres mesurables sur le terrain en utilisant une sonde multi-paramètres sont : le pH, le potentiel d'oxydoréduction (ORP) et la température, alors que les autres paramètres qui sont quantifiables à l'aide des techniques et des outils en laboratoire sont le fer (Fe^{2+} , Fe^{3+}), les bicarbonates (HCO_3^-), l'alcalinité totale et la dureté calcique (eq CaCO_3), ainsi que le dioxyde de carbone (CO_2) [10].

2.5.2 Indices d'entartrage et de corrosion

L'entartrage et la corrosion des PCP sont des risques majeurs et l'occurrence de ces problèmes est présentée sous forme de réduction du débit d'eau, blocage partiel ou complet des tubes. Park et al. (2015) [71] ont suggéré différents indices permettant de prédire l'entartrage des carbonates à l'intérieur des systèmes géothermiques : l'indice de saturation de Langelier (LSI) et l'indice de saturation de Ryznar (RSI). Ces deux indices peuvent être calculés comme suit :

$$LSI = pH - pH_s \quad (2.6)$$

$$RSI = 2.pH_s - pH \quad (2.7)$$

où pH est pH de l'eau et pHs exprime la saturation de l'eau en carbonate de calcium. La valeur de pHs est calculé comme suit [55] :

$$pHs = (9,3 + A + B) - (C + D) \quad (2.8)$$

$A = \frac{\text{Log}(TDS)-1}{10}$, TDS présente le total des solides dissous (ppm)

$B = (-13,12 \text{ Log } (T^{\circ}\text{C}-273)) + 34,55$

$C = (\text{Log}(\text{dureté de calcium})) - 0,4$, avec la dureté est en ppm CaCO_3

$D = \text{Log}(\text{alk})$, avec l'alcalinité est en ppm CaCO_3

Zai et al. [1] suggèrent d'autres indices pour la prédiction d'entartrage, dont l'indice de Puckorius (PI). Celui-ci est caractérisé par l'utilisation du pH d'équilibre plutôt que du pH réel de saturation de la solution afin de prendre en considération l'effet tampon de l'eau. Cet indice de Puckorius est plus précis par rapport aux autres indices dans le cas où le pH est supérieur à 8. Selon Zai et al. [1], les indices de Langelier et Ryznar sont plus précis dans l'évaluation du potentiel d'entartrage, alors que l'indice de Puckorius traite mieux de l'aspect corrosion. Cet indice est calculé comme suit :

$$PI = 2pHs - pH_{eq} \quad (2.9)$$

avec :

$$pH_{eq} = 1.456 \text{Log}(\text{Alk}) + 4.54 \quad (2.10)$$

Également, l'indice de Larson (LRI) permet d'étudier la corrosivité d'une eau en présence de tuyaux d'acier et d'acier à faible teneur en carbone [2]. L'équation 2.11 permet de calculer cet indice :

$$LRI = \frac{([Cl^-] + 2.[SO_4^{2-}])}{[HCO_3^-]} \quad (2.11)$$

Où $[Cl^-]$ est la concentration en chlorures, $[SO_4^{2-}]$ est la concentration en sulfates et $[HCO_3^-]$ est la concentration de bicarbonates.

Par ailleurs, Zai et al. [1] ont analysé l'entartrage par des carbonates de calcium dans les systèmes en utilisant l'équation 2.12 pour calculer le pH de saturation. Ils ont obtenu les mêmes résultats que ceux de Langelier et Ryznar avec l'équation 2.12, qui représente une autre formule pour calculer le pH de saturation de l'eau.

$$pH_s = [pk_{a2} - pk_{sp}] + pCa + pAlk \quad (2.12)$$

avec :

$pk_{a2} = -\text{Log}(k_{a2})$; ka_2 est la constante d'équilibre de dissociation de bicarbonate,
 $pk_{sp} = -\text{Log}(k_{sp})$; k_{sp} est le produit de solubilité de dissociation de carbonate de calcium,
 $pCa = -\text{Log}([Ca])$; $[Ca]$ est la concentration de calcium,
 $pAlk = -\text{Log}(Alk)$; $[Alk]$ est la concentration de bicarbonates.

De plus, l'utilisation de l'indice de saturation (SI) permet de prédire la précipitation et la dissolution des différents minéraux dans l'eau. Cet indice dépend de l'activité ionique des espèces et de la constante d'équilibre du minéral. Il est défini comme suit [72] :

$$SI = \text{Log}\left(\frac{IAP}{K}\right) \quad (2.13)$$

Où IAP représente l'activité ionique des espèces, calculée à partir des composants dissous de l'eau souterraine, K est la constante de réaction à l'équilibre, obtenue à partir des données thermodynamiques. IAP et K peuvent être calculés à l'aide du logiciel PHREEQC.

L'indice de saturation des carbonates de calcium est calculé selon l'équation 2.14 :

$$SI = \text{Log}\left(\frac{[CO_3^{2-}].[Ca^{2+}]}{K}\right) \quad (2.14)$$

Plummer et Busenberg [73] ont proposé une constante de réaction de la calcite dépendante de la température comme suit :

$$\text{Log}(K_{Calcite}) = -171,9065 - 0,077993.T + \frac{2839,319}{T} + 71,595.\text{Log}(T) \quad (2.15)$$

Interprétation de l'indice de saturation :

Lorsque $SI < 0$, l'eau souterraine est sous saturée en minéraux, c'est la dissolution des minéraux qui se produit. En revanche, si $SI > 0$, l'eau est sursaturée des minéraux et, par conséquent, il y aura précipitation. Un SI égal à 0 signifie que la réaction est à l'équilibre [71].

TABLEAU 2.2 Interprétation des indices de saturation de prédiction d'entartrage et de corrosion, tiré de Zai et al. et Kurdi et al. [1,2]

Indices	Valeurs	interprétation
Langelier Saturation Index (LSI)	2	Entartrage mais aucune corrosion
	0.5	Léger entartrage et corrosion
	0.02	Possibilité de corrosion
	-0.5	Légèrement corrossif, mais aucun entartrage
	-2	Corrosion grave
Ryznar Saturation Index (RSI)	4-5	Entartrage important
	5 - 6	Entartrage léger
	6 - 7	Formation faible d'entartrage et corrosion
	7 - 7.5	Corrosion significative
	7.5 - 9	Corrosion importante
	>9	Corrosion fortement préjudiciable
Puckorius Scaling Index (PSI)	4.5 - 5.5	Entartrage grave
	5.5 - 6.5	Entartrage léger à prévoir
	6.5 - 7.5	Formation faible d'entartrage ou corrosion
	7.5 - 8	Corrosion significative
	8 - 9	Corrosion grave
	>9	Corrosion fortement préjudiciable
Larson Index (LRI)	$LRI < 0.8$	Corrosion
	$0.8 < LRI < 1.2$	Corrosion légère
	$LRI > 1.2$	Précipitation

2.6 Classification des réactions chimiques

Les réactions entre l'eau souterraine et les roches qui l'entourent peuvent être divisées en deux types : les réactions de cinétique et les réactions à l'équilibre. Dans cette section, nous considérerons uniquement les réactions de dissolution/précipitation, basées sur la dissociation

en ions.

2.6.1 Réactions de cinétique

La théorie de l'état de transition permet d'obtenir la cinétique de dissolution et précipitation des minéraux [74]. Ces phénomènes peuvent être décrits de manière précise grâce aux expériences réalisés en laboratoire [75]. Il existe notamment des facteurs ayant un impact sur la vitesse de réaction, dont la température, la pression et la surface de contact des minéraux [25]. L'équation suivante représente les réactifs et les produits d'une réaction chimique :



Selon Domenico et al. [76], la vitesse de réaction de chaque espèce est exprimée comme suit :

$$R_A = -\frac{d[A]}{dt} = k[A]^p[B]^q \quad (2.17)$$

$$R_B = -\frac{d[B]}{dt} = k'[A]^p[B]^q \quad (2.18)$$

$$R_C = \frac{d[C]}{dt} = k''[A]^p[B]^q \quad (2.19)$$

-[] : la concentration des espèces ;

- R_A et R_B : le taux de disparition de A et B ;

- R_C : le taux de formation de C ;

- k, k', k'' : les constantes de réaction dépendant de la température et d'autres facteurs ; ces constantes sont déterminées expérimentalement ;

- p, q, r : les ordres partiels de la réaction ; l'ordre global d'une réaction étant la somme des ordres partiels des réactifs ($p+q$).

À noter que les solides ne sont pas inclus dans le calcul de la vitesse de réaction, seuls les concentrations des réactifs en phase gazeuse ou aqueuse sont prises en considération dans l'écriture de l'expression algébrique de la loi.

Dans le cas des réactions élémentaires, les coefficients p, q, r de l'équation 2.16 sont les coefficients stoechiométriques.

Les unités de la constante de vitesse dépendent de l'ordre de la réaction, le Tableau 2.3 résume les lois de réaction selon les différents ordres des équations [75].

TABLEAU 2.3 Loi de vitesse selon l'ordre de réaction

Ordre de la réaction	Loi de vitesse	Unité de la constante de réaction
0	$\frac{d[A]}{dt} = k$	$\text{mol.L}^{-1}.\text{s}^{-1}$
1	$\frac{d[A]}{dt} = k. [A]$	s^{-1}
2	$\frac{d[A]}{dt} = k. [A]$ ou $\frac{d[A]}{dt} = k. [A]^2$	$\text{L.mol}^{-1}.\text{s}^{-1}$
3	$\frac{d[A]}{dt} = k. [A]^3$	$\text{L}^2.\text{mol}^{-2}.\text{s}^{-1}$

2.6.2 Réactions d'équilibre

Dans l'état d'équilibre, les concentrations des réactifs et des produits ne changent pas au cours du temps. En effet, il n'existe pas d'énergie chimique pour modifier la distribution de masse entre le produit et les réactifs. Toutefois, si la réaction est en déséquilibre, l'énergie est libérée pour stimuler une réaction spontanée, permettant de rétablir l'état d'équilibre [76].

À l'équilibre, la constante d'équilibre de la réaction 2.16 est définie par l'équation 2.20.

$$K_{eq} = \frac{[C]^c}{[A]^a[B]^b} \quad (2.20)$$

où a, b et c sont les coefficients stoechiométriques utilisés pour équilibrer l'équation. Cette constante d'équilibre K_{eq} dépend de la température du milieu et elle est propre à chaque réaction.

2.7 Réactions de surface à l'équilibre

Dans un système naturel, les réactions de surface entre l'eau traversant l'aquifère et la surface des roches changent la signature ionique de l'eau souterraine. Dans cette section, les phénomènes d'adsorption et les différents modèles représentant l'adsorption seront présentés.

Le phénomène d'adsorption représente la rétention des espèces sur les particules d'un sol ou d'une roche. Il s'exprime par des isothermes d'adsorption, c'est-à-dire les courbes qui montrent la relation entre la concentration d'un métal ou une matière organique en phase solide et en phase liquide, sous un pH et une température données [75]. Il existe trois modèles courants d'isothermes : l'isotherme linéaire, celle de Langmuir et celle de Freundlich.

2.7.1 Isotherme de sorption linéaire

L'isotherme linéaire est le cas le plus simple, caractérisé par un coefficient de partition K_d exprimant la proportionnalité entre la concentration sur le sol et dans l'eau :

$$K_d = \frac{C_s}{C} \quad (2.21)$$

où C_s est la masse de soluté par unité de masse de solide (g de soluté/kg de solide), C est la concentration du soluté dans l'eau à l'équilibre avec le soluté sorbé sur le solide (g/L) et K_d est le coefficient de distribution en (L/kg).

À noter que lorsque les concentrations augmentent, il se peut que tous les sites de liaison sur la roche soient saturés. Dans ces conditions, l'estimation de K_d par une isotherme Linéaire n'est pas représentative et il faut utiliser un autre type d'isotherme, de Langmuir notamment [75].

2.7.2 Isotherme d'adsorption de Langmuir

L'isotherme de Langmuir considère que le nombre de sites d'adsorption est limité [77]. Cette isotherme non-linéaire est donnée par l'équation 2.22 :

$$\frac{C}{C_s} = \frac{1}{\alpha\beta} + \frac{C}{\beta} \quad (2.22)$$

où α est la constante d'adsorption reliée à l'énergie de liaison (L/mg) et β est la quantité maximale de soluté pouvant être absorbée par le solide (mg/Kg), C_s est la masse de soluté par unité de masse de solide (mg de soluté/kg de solide) et C est la concentration du soluté dans l'eau à l'équilibre avec le soluté sorbé sur le solide (mg/L).

L'isotherme de Langmuir peut être exprimée d'une façon plus compacte :

$$C_s = \frac{\alpha\beta C}{1 + \alpha C} \quad (2.23)$$

2.7.3 Isotherme d'adsorption de Freundlich

L'isotherme de Freundlich est très utilisée dans la modélisation de la sorption des métaux et des composés organiques [77]. Cette isotherme considère que le nombre de sites d'adsorption est illimité. Cette isotherme non linéaire est donnée par l'équation suivante :

$$C_s = KC^N \quad (2.24)$$

où N est une constante. L'isotherme de Freundlich peut être exprimée par l'expression suivante :

$$\log C_s = \log K + N \log C \quad (2.25)$$

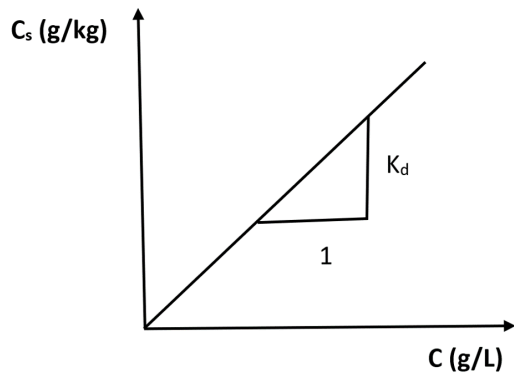


FIGURE 2.10 Isotherme d'adsorption linéaire

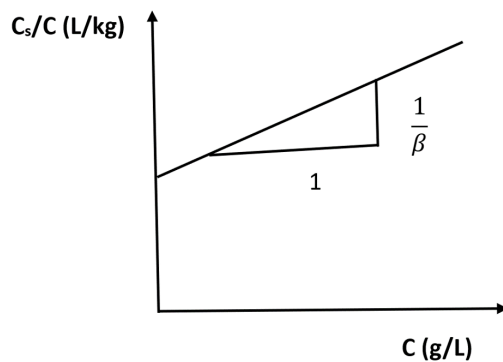


FIGURE 2.11 Isotherme d'adsorption de Langmuir

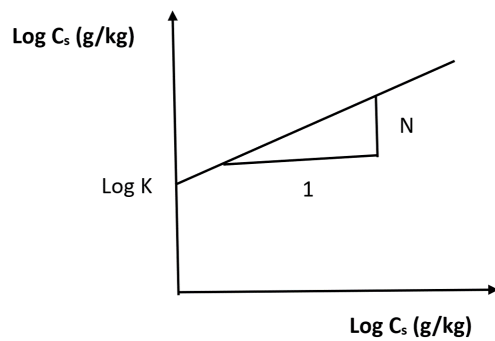


FIGURE 2.12 Isotherme d'adsorption de Freundlich

2.8 Carbonates

Les systèmes fermés et ouverts sont les deux grandes catégories des systèmes géochimiques carbonatés. Ils décrivent la distribution des espèces carbonatées dissoutes, selon le type de contact de l'eau avec le gaz carbonique.

2.8.1 Système ouvert

Dans les systèmes ouverts, il y a un échange entre la solution dans laquelle la calcite est dissoute et l'atmosphère. La calcite est ainsi en équilibre avec le gaz carbonique atmosphérique. La pression partielle de P_{CO_2} reste donc stable et sa valeur dans l'eau souterraine est d'environ $10^{-1,5}$ contre $10^{-3,5}$ dans l'air ambiant [3].

Sous une P_{CO_2} constante, le CO_2 atmosphérique se dissout dans l'eau et devient aqueux et une partie de celui-ci réagit avec l'eau pour former l'acide carbonique (H_2CO_3).



et par la suite :



Selon Appelo et Postama [3], la concentration de CO_2 est 600 fois plus élevée que celle de H_2CO_3 sous 25°C de température. Ils ont par ailleurs adopté une convention de notation selon laquelle les deux espèces sont combinées sous la forme de $H_2CO_3^*$ afin de faciliter le calcul, comme montré dans l'équation 2.28 :



Alors,



où $K_{CO_2} = [H_2CO_3^*] / P_{CO_2}$

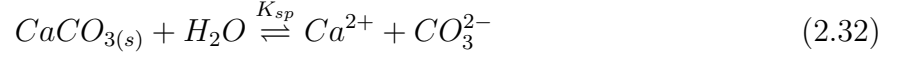
De plus, l'acide carbonique réagit avec l'eau pour former le bicarbonate HCO_3^- comme montré dans l'équation 2.30 :



Ensuite, la dissolution du bicarbonate engendre des ions CO_3^{2-} selon la réaction suivante :



Également, la réaction de dissolution de calcite se produit dans l'eau selon l'équation (2.32) :



La distribution de la concentration des différentes espèces à l'équilibre peut donc être trouvée en utilisant les équations 2.30 à 2.32. La Figure 2.13 représente la distribution des espèces carbonatées dans un système ouvert, selon la variation de pH, sous une pression partielle de CO_2 constante égale à 10^{-2} [3].

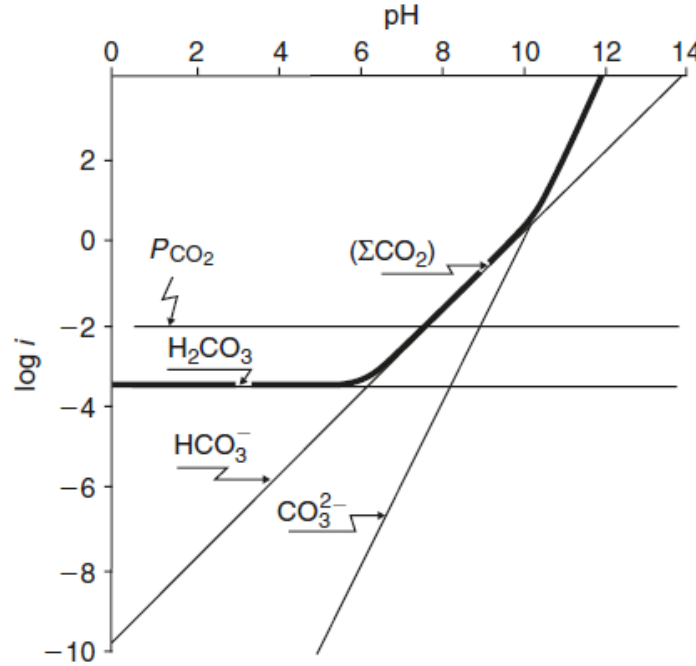


FIGURE 2.13 Variation des espèces carbonatées en fonction de pH dans un système ouvert, sous une pression de CO_2 égale à 10^{-2} . La ligne en gras indique la somme de ces espèces carbonatées, tiré d'Appelo et Postama [3]

2.8.2 Système fermé

Dans les systèmes fermés, la solution n'est pas en contact direct avec l'atmosphère. En effet, il n'y a pas d'échange gazeux ou équilibre entre eux, ce qui rend la pression partielle de

CO_2 variable. Ce système est caractérisé par une somme des espèces carbonatées dissoutes (ΣCO_2) constante. Cette somme est donnée par l'équation du bilan massique 2.33 [3] :

$$\Sigma \text{CO}_2 = m_{\text{H}_2\text{CO}_3^*} + m_{\text{HCO}_3^-} + m_{\text{CO}_3^{2-}} \quad (2.33)$$

La Figure 2.14 montre la variation des activités des espèces carbonatées selon la variation de pH. De la même manière que précédemment, les équations 2.30 à 2.32 peuvent être utilisées pour calculer les activités des différentes espèces, mais sans considérer l'hypothèse d'une P_{CO_2} stable.

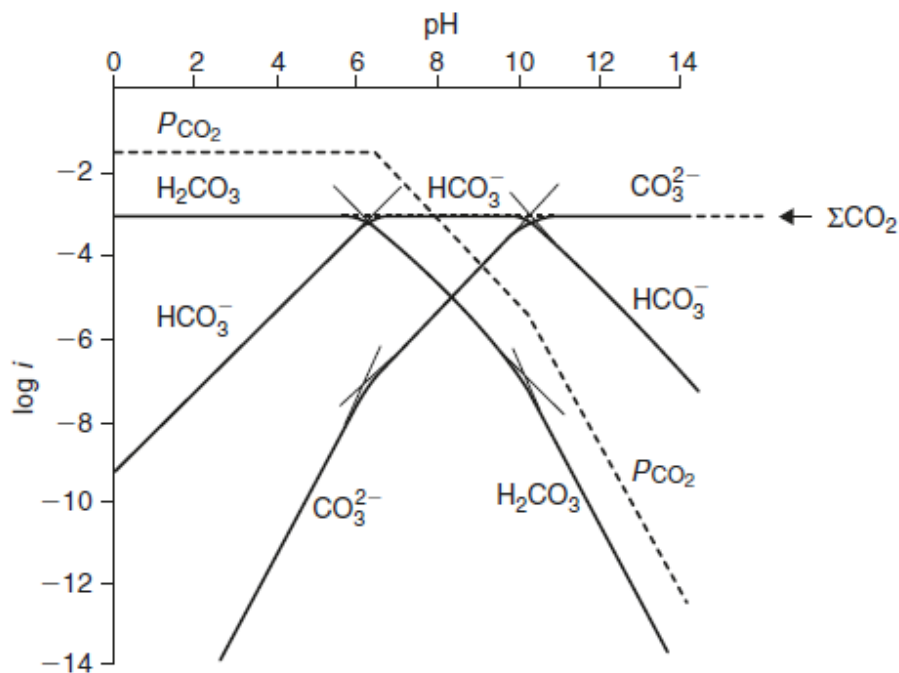


FIGURE 2.14 Variation des espèces carbonatées en fonction de pH dans un système fermé, tiré d'Appelo et Postame [3]

2.9 Modèles numériques

Il est important de noter que ces modèles décrivent les mécanismes de dissolution et précipitation des minéraux carbonatés selon différents protocoles expérimentaux et dans différentes conditions géologiques. Ils ne sont pas applicables dans toutes les configurations de PCP.

2.9.1 Modèle de PWP (Plummer, Wigley et Parkhurst)

Modèle expérimental

Le modèle de Plummer et al. [4] est très répandu. Il est basé sur un protocole expérimental réalisé en laboratoire, permettant d'étudier la dissolution et la précipitation des échantillons de calcite broyés, dont la granulométrie moyenne des particules varie entre 0,063 cm et 0,03 cm. L'élimination des impuretés à la surface des échantillons exige d'immerger les grains dans du HCl (0,01M) pendant 10 secondes et de les rincer en utilisant de l'eau déionisée. L'étape suivante est leur séchage à 100°C et leur conservation à la température ambiante jusqu'à leur usage dans l'essai.

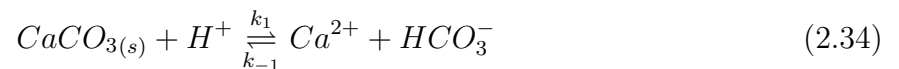
Cet essai est basé sur la mise en place de l'échantillon préparé dans 800 mL d'eau déionisée dans un bécher en polypropylène de 1 000 mL de volume. La température de l'expérience reste constante à l'aide d'un bain-marie. Afin d'assurer un mélange entre les grains et l'eau sans choc, une vitesse d'agitation entre 800 et 2 750 rotations par minute est appliquée.

Par ailleurs, le contrôle des conditions de système fermé pendant l'essai est assuré par l'utilisation d'une plaque de plexiglas étanche pour couvrir le bécher avec des ouvertures uniquement pour la tige d'agitation et le tube d'injection de HCl, si nécessaire. Durant cet essai, les différents facteurs influençant la dissolution de la calcite sont contrôlés, notamment la température et la pression partielle de CO₂. Les auteurs ont établi une relation entre le pH et le taux de dissolution en effectuant des analyses représentant des combinaisons de température, de P_{CO₂}, de pH et de vitesse d'agitation [7], comme illustré sur la Figure 2.15.

Deux méthodes ont été utilisées pour évaluer la dissolution de la calcite pure : "free drift" et "pH-stat". La méthode de "pH-stat" est basée sur l'ajout de HCl afin de maintenir un pH constant durant la réaction sous une température et P_{CO₂} constants, alors qu'avec la méthode de "free drift", la réaction se déroule jusqu'à un quasi-équilibre sous un P_{CO₂} et une température stables, sans addition de HCl. Cette dernière approche est accompagnée d'une mesure du pH en fonction de temps.

Modèle numérique

Le modèle expérimental ci-dessous est basé sur l'étude de ces trois équations réversibles [4] :



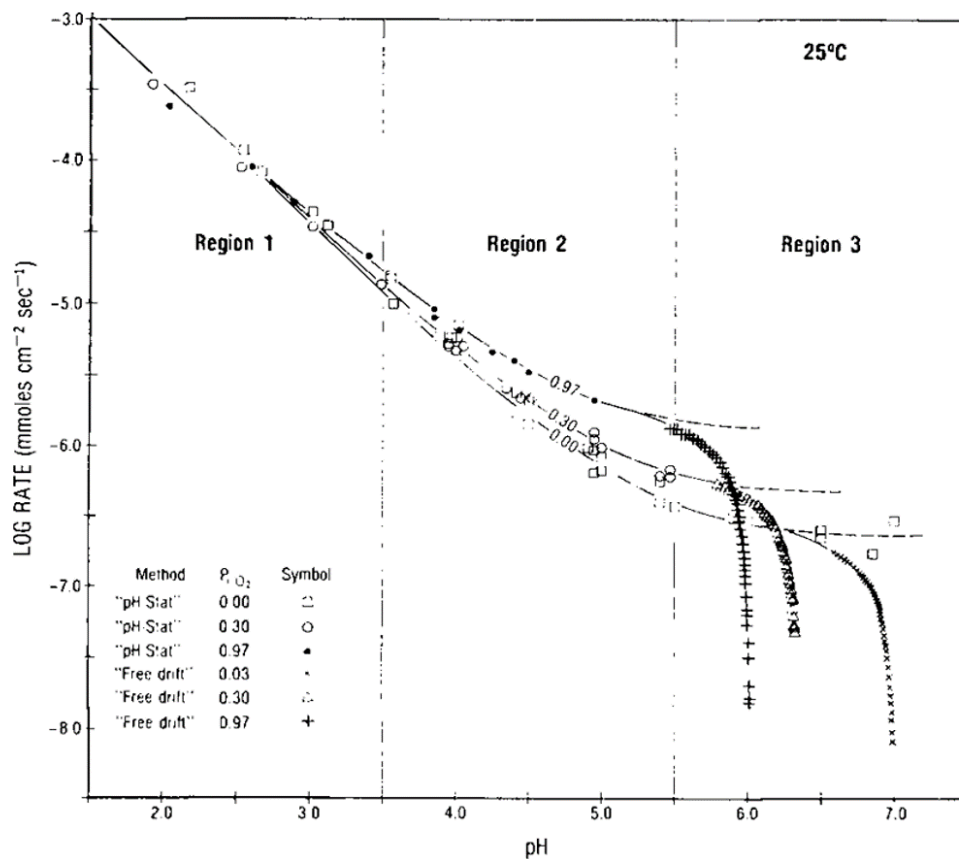
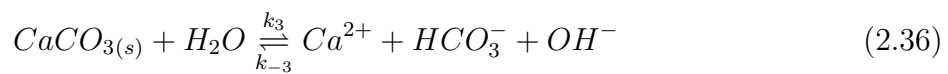
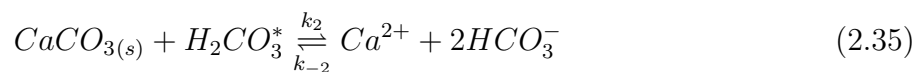
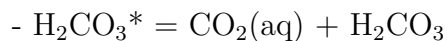


FIGURE 2.15 Taux de réaction en fonction du pH, tiré de Plummer et al. [4]



où :



- k_1, k_2 et k_3 sont les constantes de réaction des équations respectives 2.34, 2.35 et 2.36 en cm/s. Celles-ci sont en fonction de la température selon les relations suivantes :

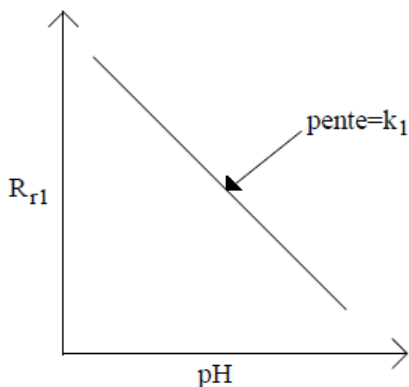
$$\log(k_1) = 0,198 - (444/T) \quad (2.37)$$

$$\log(k_2) = 2,84 - (2177/T) \quad (2.38)$$

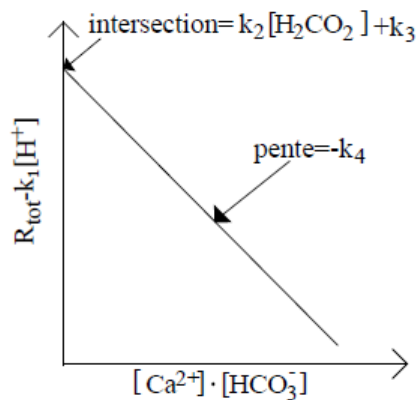
$$\log(k_3) = -5,86 - (317/T) \text{ pour } T < 298.15K \quad (2.39)$$

$$\log(k_3) = -1.10 - (1737/T) \text{ pour } T > 298.15K \quad (2.40)$$

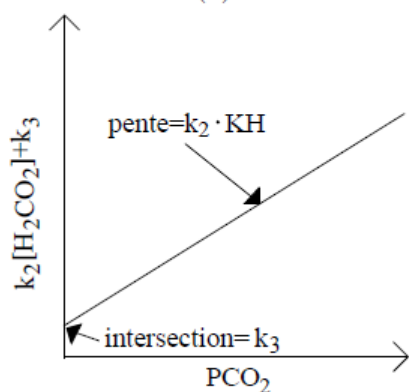
Ces constantes de réaction peuvent également être calculées graphiquement, en utilisant la Figure 2.16.



(a)



(b)



(c)

FIGURE 2.16 Graphiques permettant de calculer les constantes de réaction (a) la constante k_1 , (b) la quantité correspondante à $k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3} + k_3$ et la constante k_4 et (c) les constantes k_2 et k_3 , tiré d'Eppner [7]

Le modèle de PWP divise la dissolution de calcite en trois régions, comme présenté à la Figure 2.15 :

- La région 1 correspond à un pH inférieur à 3.5 et elle est caractérisée par un taux de dissolution indépendant de P_{CO_2} . Le pH est alors contrôlé par l'activité de l'ion H^+ par la relation $pH = -\log(\alpha_{H^+})$. Ainsi, le taux de dissolution de la calcite, exprimé en $mmol/cm^2$ calculé comme suit pour des pH faibles :

$$R = k_1 \cdot \alpha_{H^+} \quad (2.41)$$

- La région 2 dépend à la fois du pH et de la P_{CO_2} . En effet, l'activité de H_2CO_3 dépend de P_{CO_2} par la relation $P_{CO_2} = \alpha_{H_2CO_3}/K_H$, avec K_H est la constante de Henry exprimée en $kg \cdot m^{-3} \cdot atm^{-1}$. Pour une P_{CO_2} égale à 1 atm, le pH varie entre 3.5 et 5.5 et le taux de dissolution est défini par l'équation 2.42 :

$$R = k_1 \cdot \alpha_{H^+} + k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3^*} + k_3 \quad (2.42)$$

- La transition vers la région 3 est définie par un point d'inflexion. Cette zone est caractérisée par les réactions de précipitation pour un pH supérieur à 5.5, selon le taux de réaction global suivant :

$$R_{tot} = k_1 \cdot \alpha_{H^+} + k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3^*} + k_3 - k_4 \cdot \alpha_{Ca^{2+}} \cdot \alpha_{HCO_3^-} \quad (2.43)$$

Où k_4 est la constante de réaction inverse, exprimée en $cm^4 \cdot mmol^{-1} \cdot s^{-1}$. Pour un taux de réaction globale positif, c'est la réaction de dissolution qui va se produire et s'il est négatif, c'est la réaction de précipitation.

D'après Parkhurst et al. [72], il existe une équation alternative 2.44 pour calculer le taux de réaction global, tenant compte de la constante de solubilité des ions.

$$R = (k_1 \cdot \alpha_{H^+} + k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3^*} + k_3 \cdot \alpha_{H_2O}) \cdot [1 - (\frac{\alpha_{Ca^{2+}} \cdot \alpha_{CO_3^{2-}}}{K_{sp}})^{2/3}] \quad (2.44)$$

2.9.2 Modèle de Sjöberg et Rickard

Modèle expérimental

Sjöberg et Richard et al. [78] sont les premiers à avoir utilisé le protocole du disque rotatif pour évaluer les processus de dissolution et de précipitation de la calcite. Ils ont mentionné que les grandeurs du disque utilisé et la vitesse de rotation sont des facteurs ayant des impacts

sur le taux de dissolution de la calcite. Pour cela, un disque rotatif de grandeur très petite a été choisi (diamètre de 2,5 cm). Également, la vitesse de rotation de disque a été limitée à une valeur entre 100 et 10 000 rotations par minute afin d'éviter la turbulence d'eau.

La préparation de l'échantillon est similaire à celle décrite dans la section 2.9.1 qui est basée sur l'utilisation d'acide chlorhydrique (HCl 10%) et le rinçage de l'échantillon avec l'eau déminéralisée. L'étape suivante est la création d'une surface plus uniforme sur l'ensemble du disque rotatif en utilisant un abrasif. L'échantillon est ensuite fixé à un support à l'aide de la résine d'époxy.

Alkattan et al. [14] ont utilisé l'essai de disque rotatif pour évaluer les taux de réaction de la calcite à de faibles pH, sous différentes formes : des cristaux de calcite, de la poudre compressée et des morceaux. Ces taux sont déterminés par la perte de masse des échantillons solides dissous dans une solution composée d'eau déionisée et de HCl.

Par ailleurs, Alkattan et al. [14] ont trouvé que le type des échantillons utilisés n'a pas d'impact sur le taux de dissolution. En effet, d'après les résultats de l'essai de disque rotatif, le taux de réaction reste le même, en tenant compte des erreurs commises durant l'expérience.

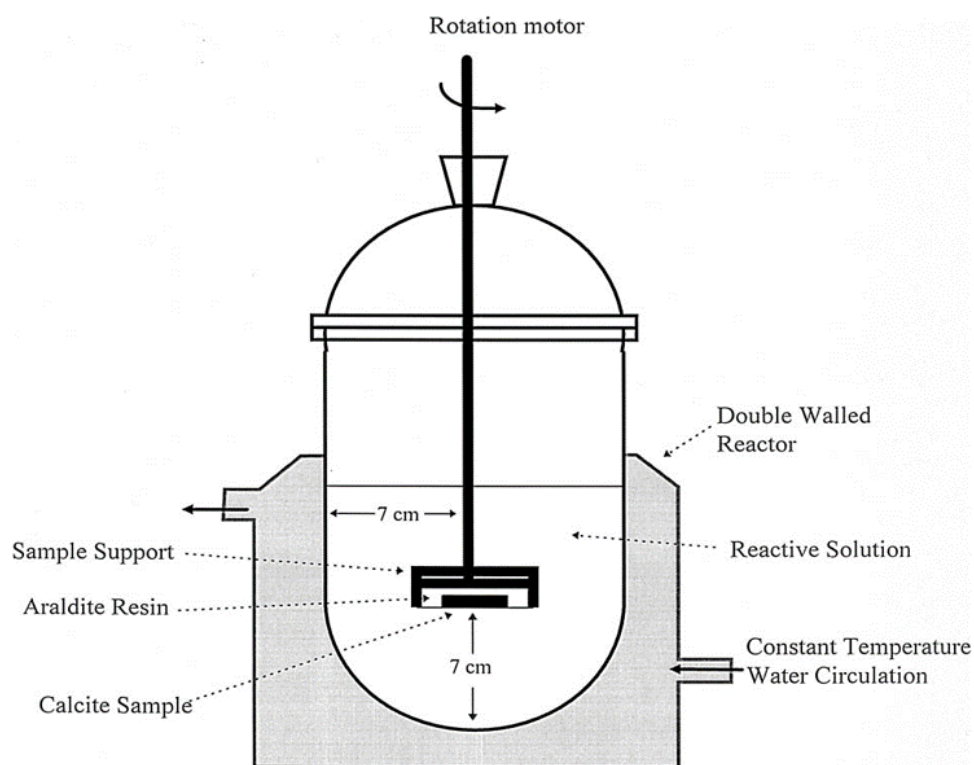


FIGURE 2.17 Montage expérimental d'Alkattan et al. [14]

Modèle numérique

Ce modèle est caractérisé par l'utilisation de l'activité des ions Ca^{2+} et CO_3^{2-} et le produit de solubilité de la calcite pour étudier le taux de dissolution. Il est défini selon l'équation 2.45, pour une plage de pH variant entre 8 et 10.1 :

$$-\frac{d\alpha_{CaCO_3}}{dt} = \frac{d\alpha_{Ca^{2+}}}{dt} = kA(\sqrt{k_{sp}} - \sqrt{\alpha_{Ca^{2+}} \cdot \alpha_{CO_3^{2-}}}) \quad (2.45)$$

La Figure 2.18 montre la distribution des espèces carbonatées en fonction de variation de pH. Pour un pH inférieur à 7.5, l'activité des ions de CO_3^{2-} devient négligeable et le taux de dissolution dépend uniquement de la surface de l'échantillon en contact avec l'eau. Il est décrit comme suit :

$$-\frac{d\alpha_{CaCO_3}}{dt} = \frac{d\alpha_{Ca^{2+}}}{dt} = kA(\sqrt{k_{sp}}) \quad (2.46)$$

où $\frac{d\alpha_{Ca^{2+}}}{dt}$ représente le taux de dissolution exprimé en $\text{mol.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$, k est la constante de réaction, exprimée en $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ et A est la surface de l'échantillon en contact avec l'eau exprimée en cm^2 .

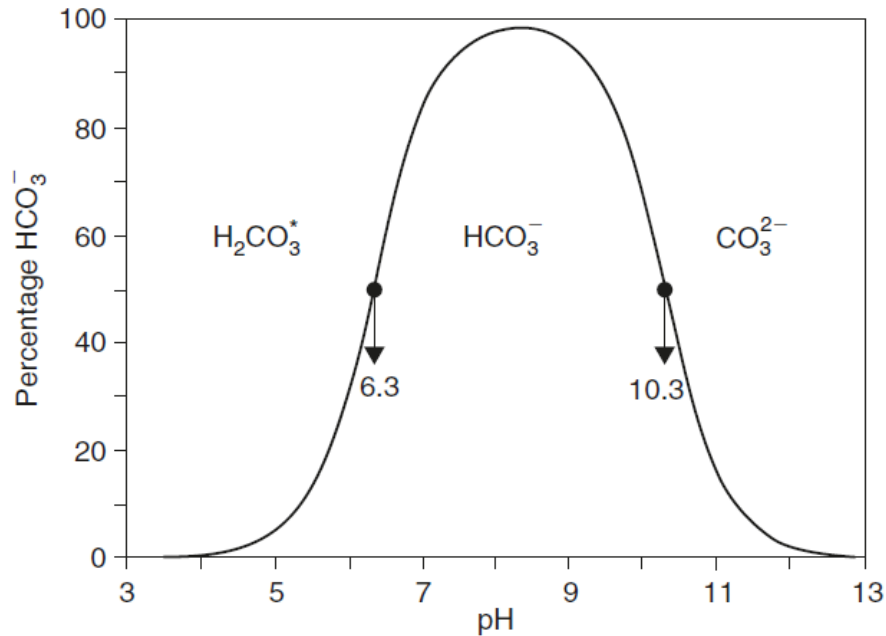


FIGURE 2.18 Distribution des espèces carbonatées en fonction de la variation du pH, tiré d'Appelo et Postma [3]

L'avantage de ce modèle est la prise en considération de la surface en contact avec l'eau ; cet aspect n'est pas considéré dans le modèle PWP. Il est à noter que les équations développées dans ce modèle ne permettent pas d'étudier les cinétiques de réaction d'un système qui n'est pas à l'équilibre [25, 78]. Ainsi, ce modèle permet d'étudier l'eau qui subit de légères fluctuations de pH.

2.9.3 Modèle de Chou et al.

Modèle expérimental

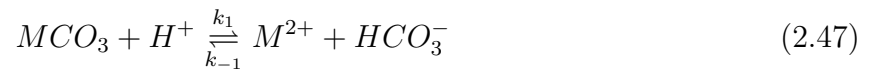
Ce modèle permet d'étudier la dissolution de différents minéraux carbonatés (calcite, aragonite, dolomite, magnésite et withérite) broyés, dont la taille des grains varie de 0.03 à 0.04 cm. Les échantillons sont immergés dans un lit fluidisé, sous une température de 25°C.

Le lit fluidisé n'est pas en contact direct avec l'atmosphère, et le système est donc fermé, ce qui implique une variation de la P_{CO_2} en fonction du temps (cf. Figure 2.19). De plus, le lit fluidisé permet un brassage uniforme des réactifs d'une manière plus performante que la tige agitatrice [25].

L'avantage d'utiliser cette méthode de lit fluidisé est la circulation continue de l'eau dans le protocole expérimental. Cependant, la température de cette expérience n'est pas contrôlée et l'essai est réalisé à la température ambiante (25°C).

Modèle numérique

Le modèle de Chou et al. [5] est caractérisé par sa validité pour l'ensemble des minéraux carbonatés, grâce aux trois équations élémentaires suivantes :



où M représente les espèces ioniques : le calcium, le magnésium ou le baryum.

Suite aux observations expérimentales, Chou et al. [5] ont proposé des taux de dissolution et de précipitation de calcite dépendant de l'activité des ions H^+ , HCO_3^- et H_2CO_3 .

$$R_f = k_1 \cdot \alpha_{H^+} + k_2 \cdot \alpha_{H_2CO_3^*} + k_3 \quad (2.50)$$

$$R_b = k_{-1} \cdot \alpha_{M^{2+}} \cdot \alpha_{HCO_3^-} + k_{-2} \cdot \alpha_{M^{2+}} \cdot \alpha_{HCO_3^-}^2 + k_{-3} \cdot \alpha_{M^{2+}} \cdot \alpha_{CO_3^{2-}} \quad (2.51)$$

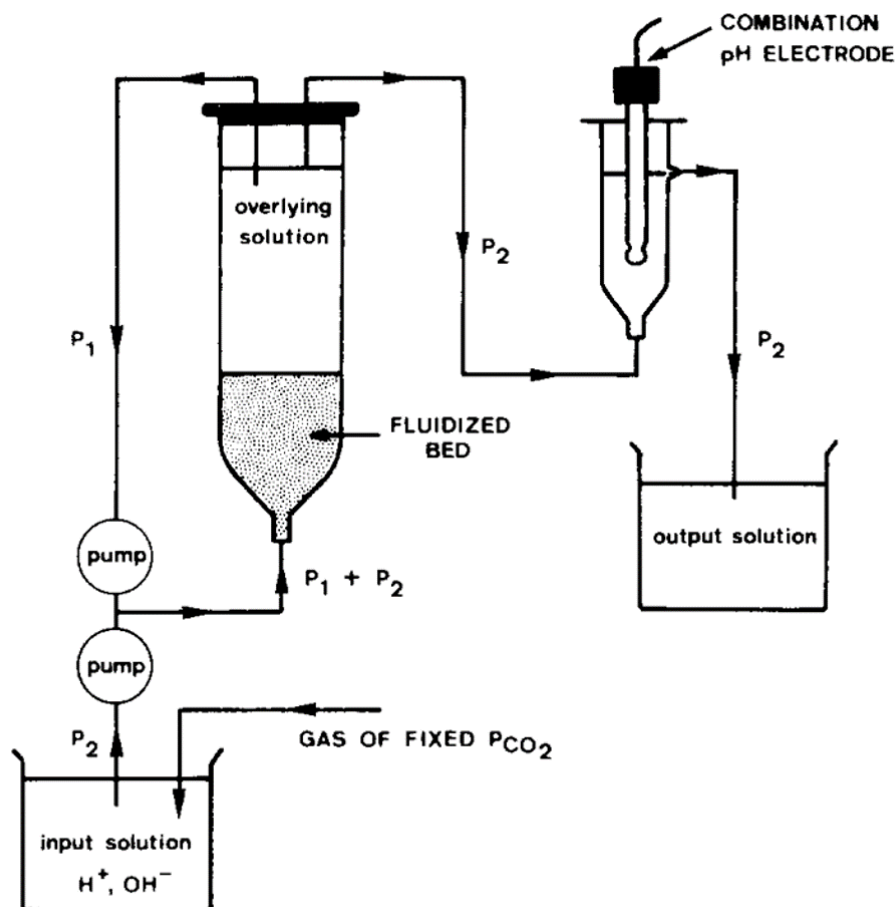


FIGURE 2.19 Montage expérimental, tiré de Chou et al. [5]

Le modèle de Chou et al. [5] n'étudie qu'une seule température et les équations fournies dans ce modèle ne présentent pas la situation pratique. Ce modèle peut toutefois s'adapter aux différentes espèces carbonatées, contrairement au modèle de Plummer et al. [4] qui fournit des constantes de réaction seulement pour la calcite. De manière générale, le modèle de Chou et al. [5] et celui de Plummer et al. [4] sont deux approches semblables.

CHAPITRE 3 PRÉSENTATION DU SITE D'ÉTUDE

Dans le cadre de l'étude des sources d'énergie non conventionnelles pour la Ville de Montréal, il était prévu d'étudier le potentiel d'un système géothermique de basse température constitué de puits à colonne permanente (PCP) pour le Centre Sportif Père-Marquette. Un tel système doit répondre aux besoins de chauffage et de climatisation du bâtiment. Le but du présent chapitre est de localiser la zone d'étude et de présenter les caractéristiques géologiques et géothermiques du sous-sol. Par ailleurs, différents travaux d'investigation réalisés sur le site pour le prélèvement d'échantillons et l'étude de la qualité de l'eau souterraine y sont présentés.

3.1 Situation du Centre Sportif

La zone choisie pour le projet pilote de géothermie exploitant les puits à colonne permanente est le centre sportif Père-Marquette, qui se situe dans l'arrondissement de Rosemont-Petite-Patrie à Montréal (Québec). Cette zone se situe à la latitude de 45°32'28 N et la longitude 73°35'45 W et elle s'étale sur une surface approximative de 25 000 pi² [16]. Le voisinage du bâtiment est constitué d'un espace vert (ancienne carrière convertie en parc) et partiellement boisé; la topographie est relativement plane. La Figure 3.1 présente la localisation du site d'étude.

3.2 Contexte géologique local

Afin d'établir une coupe géologique du site d'étude, un forage exploratoire de 30,84 m de profondeur a été réalisé le 12 février 2022 pour le prélèvement d'échantillons de sol et d'eau afin de les analyser en laboratoire et de relever le niveau de l'eau souterraine. Le forage a été exécuté à l'aide d'une foreuse de modèle CME-55 sur chenillard en utilisant des tarières et tubages enfoncés dans les dépôts meubles par rotation. Un carottier a été utilisé pour l'échantillonnage du roc.

Les sols rencontrés consistent en une couche de remblai de 6,71 m d'épaisseur, suivie d'un dépôt naturel de silt sableux avec un peu d'argile entre 6,71 et 7,32 m de profondeur. Des fragments de roc fracturé dans une matrice de silt sableux correspondant potentiellement à une zone de cailloux et blocs ont été observés au-dessus du roc, soit entre 7,32 et 9,25 m de profondeur [79]. Sous la couche de dépôt naturel, le socle rocheux a été intercepté à une profondeur de 9,25 m au droit du forage et a été carotté jusqu'à une profondeur de 30,84 m. Le roc est principalement composé d'un calcaire avec des lits de shale du Groupe de

Trenton [79]. Les calcaires rencontrés du groupe Trenton sont considérés parmi les principaux groupes de la plate-forme du Saint-Laurent. Ces calcaires ont été formés en milieu marin, de profondeur moyenne, sur une plateforme carbonatée [80].

Le Tableau 3.1 regroupe les propriétés hydrogéologiques et thermiques du groupe Trenton tirées de la littérature.

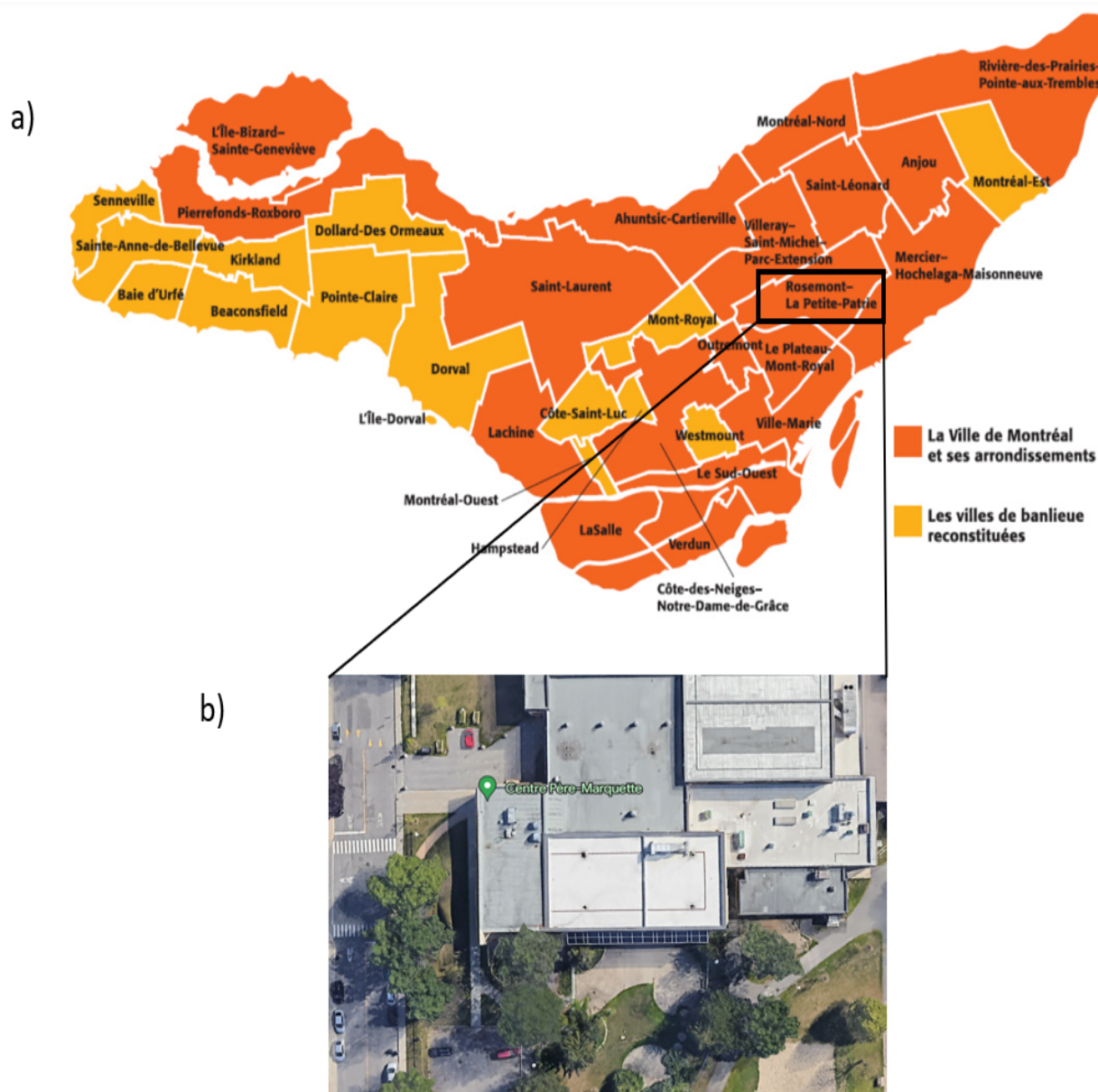


FIGURE 3.1 Localisation du Centre sportif Père-Marquette : (a) tiré de Quartiers de Montréal [15] et (b) tiré de Google Earth Pro [16]

TABLEAU 3.1 Propriétés thermiques et géologiques de la formation Trenton

Propriétés	Unités	Valeurs
Densité (ρ)	kg.m ⁻³	2 700 ¹
Porosité (n)	-	0.034 ¹
Perméabilité (k)	mD	0.25 ²
Emmagasinement spécifique (S_s)	m ⁻¹	1.5e-4 ³
Capacité thermique massique (C_p)	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹	845 ⁴
Conductivité thermique (λ)	W.m ⁻¹ .K ⁻¹	2.85 ⁵

Ces données proviennent de : ¹ Ngoc et al. [81], ² Ngoc et al. [82], ³ Jiao et Zheng [83], ⁴ Bédard et al. [84], ⁵ Naser [85]

3.3 Potentiel géothermique de la zone d'étude

Naser [85] et Bédard et al. [17] ont évalué la conductivité thermique du roc près de la surface des Basses-Terres du Saint-Laurent, en faisant des tests de réponse thermique en laboratoire sur des échantillons de roche, ainsi que des diagraphies en forage. La distribution de la conductivité thermique du roc de l'Île de Montréal est présentée à la Figure 3.2 et la distribution de l'écart type est illustré sur la Figure 3.3.

La formation de Trenton rencontrée au droit du site est caractérisée par une conductivité thermique équivalant à 3 W.m⁻¹.K⁻¹ avec une incertitude 0,67 W.m⁻¹.K⁻¹. Ainsi, cette formation géologique est caractérisée par un bon potentiel thermique.

Bédard et al. [17] ont étudié la conductivité thermique du roc en surface seulement et ils n'ont pas pris en considération les dépôts meubles au-dessus du socle rocheux pour les raisons suivantes [17] :

- l'épaisseur et la composition des dépôts meubles varient selon l'endroit et la seule carte disponible n'est pas précise,
- il n'existe pas de données expérimentales sur la conductivité thermique de dépôts meubles pour toute l'étendue des Basses terres du Saint Laurent, et
- l'épaisseur de dépôts meubles étant inférieure à 20 m, leur effet sur la conductivité thermique globale reste relativement faible.

L'équation 3.1 peut être utilisée pour évaluer la conductivité thermique effective (λ_{TRT}) de la zone d'étude, en prenant en considération l'ensemble des matériaux géologiques présents

le long du forage.

$$\lambda_{TRT} = \frac{(\lambda_{TRT} \cdot (e_{TRT} - e_{DM})) + (1,5 \cdot e_{DM})}{e_{TRT}} \quad (3.1)$$

où :

- $e_{TRT} = e_{roc} + e_{DM}$,

- λ_{roc} : conductivité thermique du roc à l'endroit d'étude, obtenue de la figure 3.2 ($\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)

- e_{DM} : épaisseur des dépôts meubles à l'endroit d'étude (m)

- e_{roc} : épaisseur du roc à l'endroit d'étude (m)

- e_{TRT} : épaisseur globale du test à réponse thermique (m)

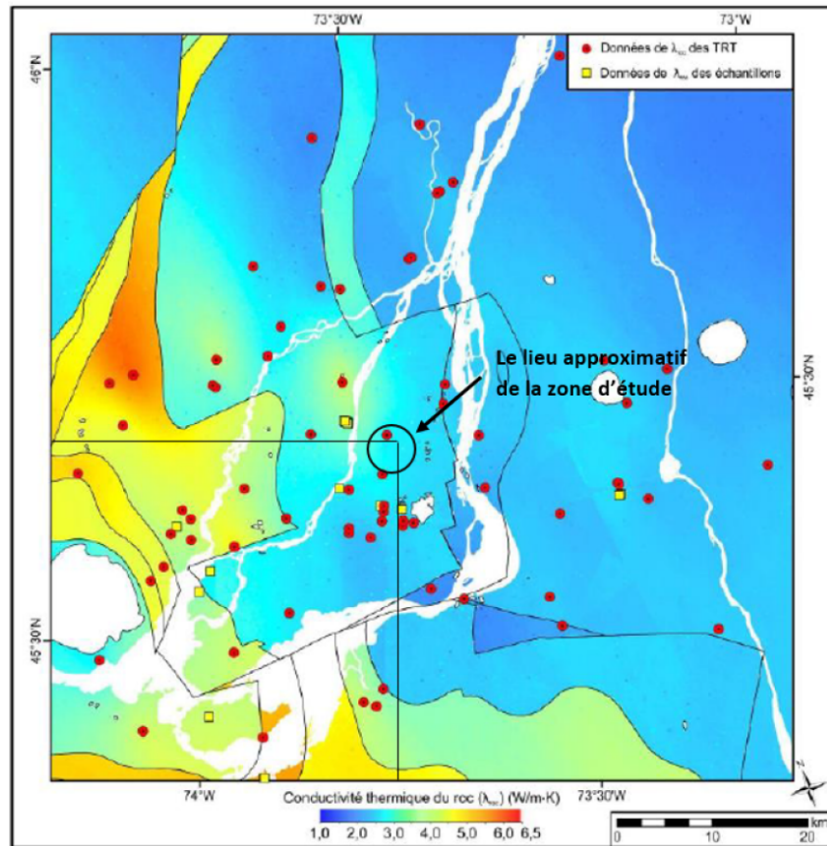


FIGURE 3.2 Simulation de la conductivité thermique du roc présent sur l'île de Montréal et ses alentours. Tiré de Bédard et al. [17]

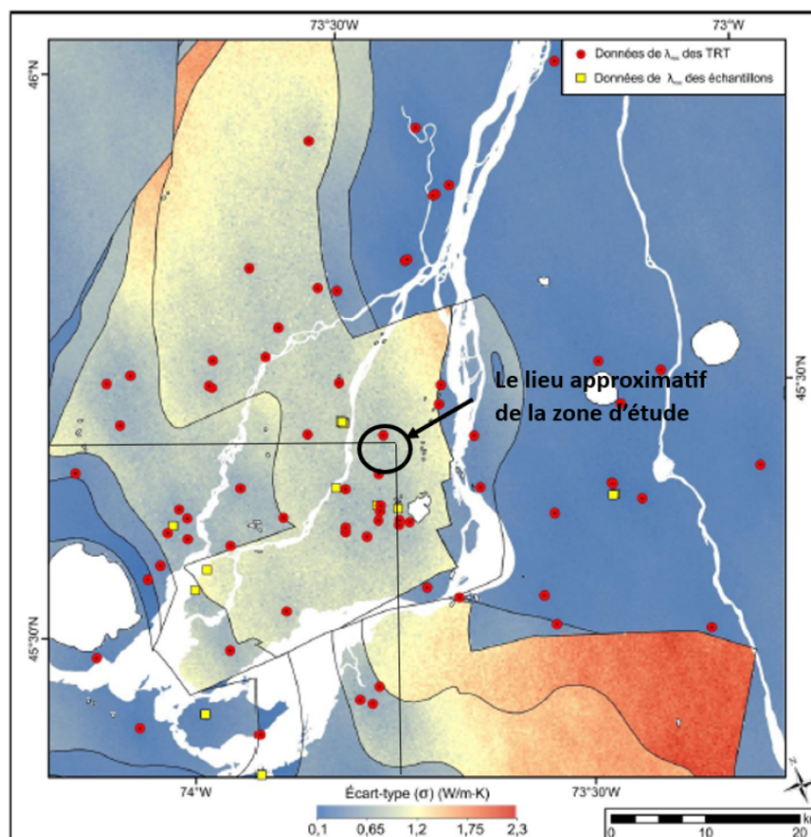


FIGURE 3.3 Simulation de l'écart-type de la conductivité thermique du roc présent sur l'île de Montréal et ses alentours. Tiré de Bédard et al. [17]

3.4 Matériels et méthodes

3.4.1 Échantillonnage des matériaux

Les échantillons de sol remaniés ont été prélevés au moyen de cuillères fendues de calibre «N», de diamètre 63,5 mm et standard de «B» de diamètre 51 mm, enfoncées à l'aide d'un marteau à chute automatique. En ce qui concerne le prélèvement du roc, les échantillons ont été recueillis au droit du forage par le biais d'un carottier de calibre «NQ» de 48 mm de diamètre intérieur, jusqu'à une profondeur de 30,84 m. Le prélèvement des échantillons a été continu.

Lors du forage, le calcul de l'indice RQD (Rock Quality Designation) a été effectué sur place et noté sur la fiche de renseignement du forage. La récupération de la carotte de roc était totale (100%). Le roc est donc qualifié d'excellente qualité, à l'exception du roc prélevé entre 14,3 et 15,8 mètres de profondeur qui est caractérisé par une moyenne qualité avec un «RQD» de 69%. Il est important de noter que l'indice de qualité de roc RQD est une mesure indirecte

du nombre de fractures et l'étendue de l'altération dans un massif rocheux et n'est pas nécessairement représentatif de la résistance du roc. La figure 3.4 présente les carottes prélevées au droit du forage exploratoire réalisé.

Des analyses chimiques ont été réalisées sur les échantillons de sols prélevés dans le dépôt naturel et le remblai. Les résultats montrent que les concentrations sont généralement inférieures au niveau B des critères du Guide d'intervention, sauf l'échantillon CF-1B de 0,30 et 0,61 m de profondeur qui est entre la plage B-C des critères de Guide d'intervention [79, 86]. Ceci montre que la zone d'étude peut être exploitée pour l'installation d'un projet résidentiel, sans avoir un impact environnemental sur les habitants et les ressources naturelles. De plus, les concentrations des substances obtenues sont inférieures aux valeurs-limites du Règlement sur l'enfouissement de sols contaminés (RESC), ce qui montre que le sol n'est pas contaminé par des métaux ou des Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques (HAP) [79].



FIGURE 3.4 Carottes prélevées du forage d'exploration réalisé sur le site d'étude

3.4.2 Échantillonnage des eaux souterraines

Un tube d'observation de 25 mm de diamètre muni d'une crépine a été installé au droit du forage, afin de déterminer ultérieurement la profondeur de l'eau souterraine. La crépine a été confinée au sein d'une lanterne de sable filtrant et isolée à la surface à l'aide d'un bouchon de bentonite. À l'aide d'une sonde à interface, le niveau de l'eau a été mesuré à une profondeur de 5,87 m.

Lors de l'échantillonnage, aucun liquide immiscible léger (LIL) ou dense (LID) ou indice de contamination n'a pas été détecté dans le puits d'observation. Les différentes analyses chimiques effectuées sur les échantillons d'eau souterraine en laboratoire montrent que l'ensemble des paramètres ne dépasse pas les critères de résurgence dans les eaux de surface du Guide d'intervention et les critères de rejet du règlement de la Communauté métropolitaine de Montréal (CMM) (2008-47 et 2013-57) [79]. Ainsi, l'eau souterraine pouvait être utilisée comme fluide caloporteur pour répondre aux besoins thermiques du centre sportif.

CHAPITRE 4 MÉTHODOLOGIE

La plupart des travaux de recherche utilisent des minéraux purs pour évaluer les processus de précipitation et de dissolution dans l'eau ; les plus étudiés sont la calcite (CaCO_3) et la dolomite ($\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$). Ce travail vise à étudier la cinétique de réaction d'une roche calcaire prélevée sur le site d'étude. Pour cela, un essai pilote de colonne à flux continu a été conçu et réalisé en laboratoire de manière à simuler l'interaction eau-roche dans un PCP, et améliorer les connaissances quant aux réactions chimiques lors de son fonctionnement. Par ailleurs, la surface réactive des minéraux carbonatés exposée à l'eau est un facteur important, ayant un effet sur la cinétique de réaction, et la littérature ne fournit que peu de données sur ce paramètre, c'est pourquoi l'approche inverse a été adoptée pour l'évaluation de la surface minérale réactive de la roche calcaire.

4.1 Essai de colonne à flux continu

4.1.1 Principe de l'essai

Le montage expérimental de colonne à flux continu est basé sur la technique développée par Griffioen et Appelo [65], qui ont étudié la précipitation des carbonates dans les Aquifer thermal energy storage (ATES) ; les modifications géochimiques et la variation de température dans ces systèmes étant similaires aux PCP.

Le principe de l'essai est de représenter l'effet d'écoulement de l'eau dans les PCP sur la surface minérale réactive des minéraux carbonatés exposés à l'eau souterraine et de tenir compte de l'effet de la saisonnalité des températures sur la cinétique de réaction des roches calcaires.

La Figure 4.1 illustre l'écoulement de l'eau souterraine dans un PCP. Le cheminement de l'eau en cycle fermé se fait du bas vers le haut de la colonne. Pour reproduire ce fonctionnement au laboratoire, l'essai repose sur l'écoulement de l'eau autour d'une roche intacte prélevée du site d'étude en utilisant une pompe péristaltique, ce qui est plus représentatif des réactions entre l'eau souterraine et la matrice géologique. Le montage expérimental réalisé avec les différents équipements utilisés est illustré sur la Figure 4.2. La roche calcaire prélevée à 30 mètres de profondeur, de 46 mm de diamètre et 160 mm de longueur, a été déposée dans une colonne cylindrique en verre. Cette dernière est caractérisée par un diamètre de 11,4 mm, supérieur à celui de l'échantillon. Un flux d'eau vertical ascendant est généré autour de l'échantillon à l'aide d'une pompe péristaltique. Cette dernière fonctionne en recirculation et

l'eau sortant de la colonne est réinjectée à la base, après passage dans le réservoir tampon. Cet assemblage a été installé au sein d'un bain à température contrôlée afin de maintenir une température constante. Deux types d'essais ont été réalisés dans ce projet : Un essai avec une température maintenue à $11^{\circ}\text{C}\pm 1$, qui correspond à la température de l'eau souterraine, et un essai à température ambiante ($22^{\circ}\text{C}\pm 1$).

Les paramètres physico-chimiques de l'eau sont suivis par une sonde multiparamètres placée en sortie de la colonne, permettant un enregistrement des données toutes les 5 minutes. L'échantillonnage de l'eau est réalisé par une valve, permettant de collecter le volume d'eau voulu pour l'analyse chimique.

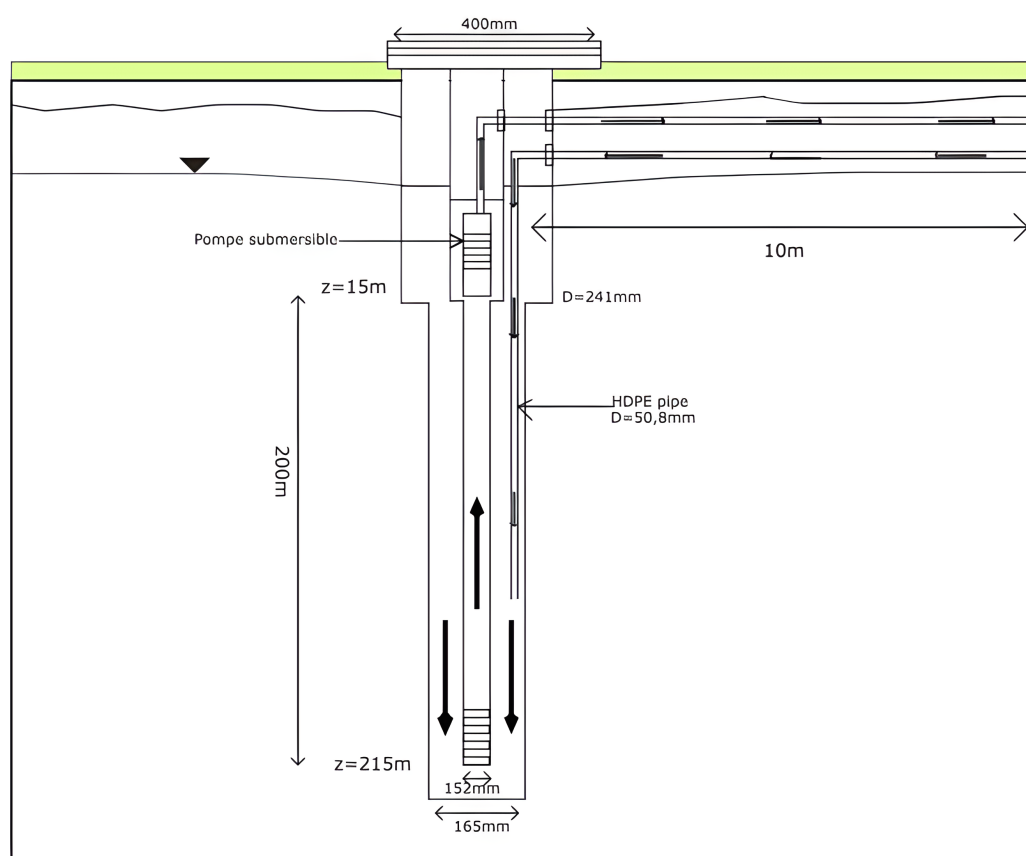


FIGURE 4.1 Vue schématique de l'écoulement de l'eau souterraine dans le puits de pompage

4.1.2 Substance de référence

Les minéraux carbonatés sont des minéraux solubles et leur précipitation dans l'échangeur de chaleur engendre des problèmes fonctionnels dans le système.

Ainsi, afin d'évaluer la cinétique de réaction de ces minéraux, une eau déminéralisée a été

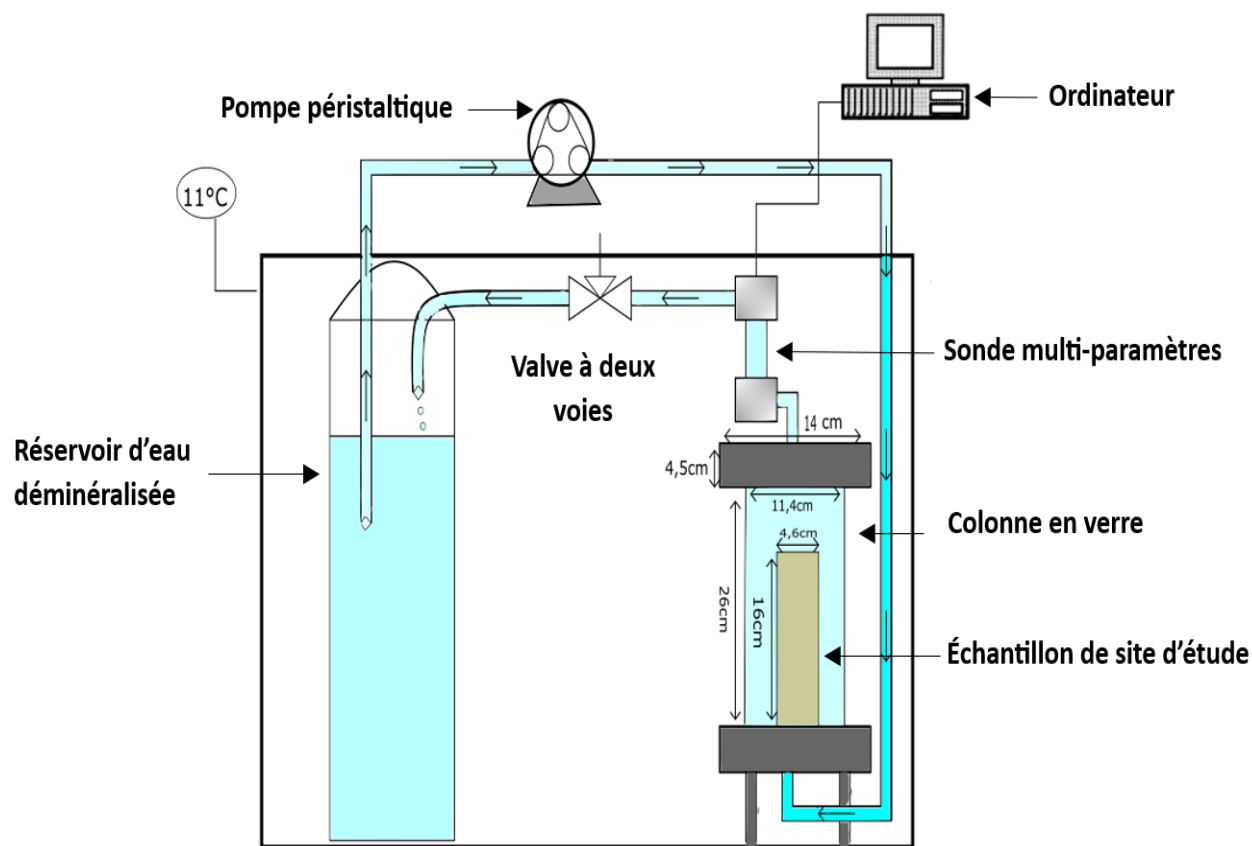


FIGURE 4.2 Vue schématique de l'essai de colonne à flux continu

utilisée comme substance de référence, car elle n'est pas riche en composants chimiques. L'apparition d'espèces dissoutes dans l'eau sortant de la colonne indique qu'elles proviennent de la roche calcaire.

Des analyses chimiques ont été réalisées sur l'eau sortant de la colonne, permettant d'évaluer la concentration des métaux, des cations et des anions majeurs, ainsi que des analyses d'alcalinité sur l'eau.

4.1.3 Matériel de laboratoire

L'assemblage expérimental est constitué des équipements jouant des rôles bien précis dans le montage. Une pompe péristaltique de la marque Longer Pump et de type BT100-2j équipée d'une tête YZII15 a été utilisée afin d'assurer une circulation continue de l'eau déminéralisé dans l'essai. Par ailleurs, l'usage d'un bain à température contrôlée permet de maintenir une température constante dans le système. Également, le dispositif comprend une sonde multi-

paramètres YSI Professional Pro insérée dans une cellule étanche, cette sonde comprend des capteurs permettant le suivi des paramètres physico-chimiques, plus précisément, la conductivité électrique, la température, le potentiel d'oxydo-réduction et le pH. Cette sonde est reliée à un ordinateur à l'aide du logiciel YSI Data Manager, qui permet la récupération régulière des données. Le montage contient aussi une valve, facilitant le prélèvement des échantillons pour l'analyse chimique. La Figure 4.3 montre les différents équipements utilisés dans le montage expérimental.



FIGURE 4.3 Vue de l'essai réalisé en laboratoire

4.2 Protocole expérimental

4.2.1 Préparation des échantillons

Le forage exploratoire réalisé au centre sportif Père Marquette a permis de confirmer la géologie locale et de collecter des échantillons pour le test pilote réalisé en laboratoire. Les carottes prélevées ont été acheminées au laboratoire de géotechnique à Polytechnique Montréal pour

la réalisation de l'essai en colonne. Afin d'éviter toute contamination issue du forage, l'échantillon utilisé a été plongé quelques secondes dans l'acide chloridrique (HCl 10%), puis lavé à l'eau déminéralisée [4]. À la fin de nettoyage, la mesure du pH de la roche, à l'aide de papier tournesol indique une valeur de 7, ce qui confirme l'absence de résidus acides sur l'échantillon. Après cette étape, la roche a subi un séchage à l'air libre durant trois jours.

4.2.2 Protocoles de calibrage

La réalisation d'un essai en laboratoire nécessite le respect des protocoles de calibrage des appareils utilisés afin d'obtenir des résultats expérimentaux précis et fiables. L'équipement le plus sensible dans le montage expérimental est la sonde multiparamètres car cette dernière contient des capteurs qui exigent un entretien régulier. L'étalonnage de cet appareil est effectué avant le début de l'essai et deux fois par semaine durant l'essai, afin de vérifier la fiabilité des mesures affichées sur le logiciel.

La calibration du pH est réalisée en utilisant trois solutions de référence de pH 4, 7 et 10. Par ailleurs, l'étalonnage du capteur de potentiel d'oxydo-réduction (ORP) de l'eau est vérifié en préparant un mélange d'une pointe de spatule de Quinhydrone et d'une solution de pH 4, dans laquelle l'électrode est plongée jusqu'à la stabilisation de son potentiel d'oxydo-réduction à une valeur de 263 mV sous une température de 25°C, conformément à la norme ASTM D1498-14 [87].

De plus, l'étalonnage de la conductivité est réalisé en plaçant le capteur dans une solution préparée dont sa conductivité spécifique est connue.

4.3 Caractérisation de l'échantillon

Une analyse géochimique sur l'échantillon de roche de la Figure 4.4 a permis de déterminer la teneur en oxydes majeurs présents dans la carotte prélevée. Les pourcentages de SiO_2 , Al_2O_3 , CaO , MgO , FeO , Na_2O , K_2O et MnO ont été déterminés par absorption atomique à la flamme, après avoir été broyés et vaporisés. La méthode de spectrométrie infrarouge a été utilisée pour la mesure de la teneur en soufre et en carbone. Le Tableau 4.1 présente les pourcentages en oxydes majeurs.

La perte au feu (LOI) est la méthode adaptée pour quantifier la teneur en matière organique dans l'échantillon. Le protocole de cette méthode utilise des températures plus élevées pour brûler la matière organique présente dans l'échantillon, ce qui permet de déterminer la quantité de carbone organique restante. Cette quantité obtenue est ensuite utilisée pour déterminer la teneur en matière organique dans la roche.

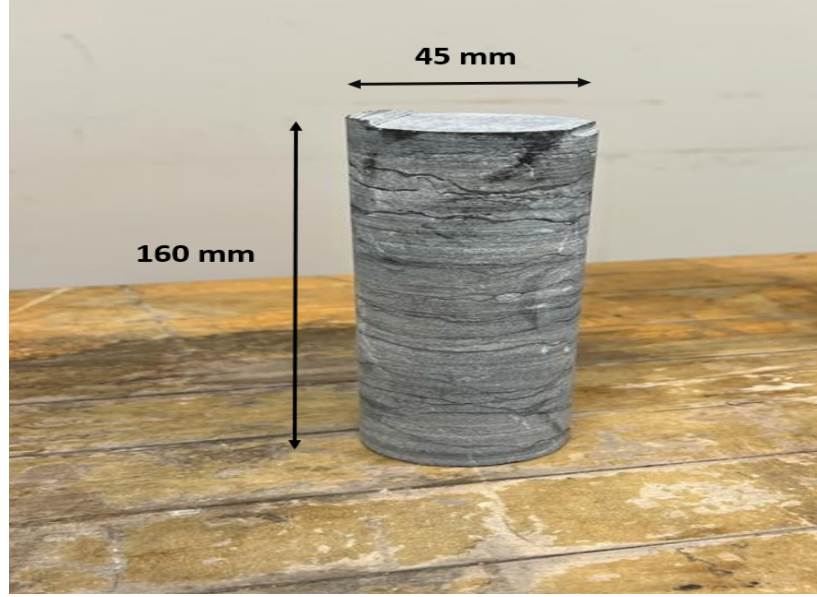


FIGURE 4.4 Échantillon utilisé dans le protocole expérimental

La composition chimique de l'échantillon est caractérisée par un pourcentage important des silicates, avec une concentration élevée en aluminium, ainsi que des teneurs significatives en fer, calcium et magnésium.

Le pourcentage de carbonates de calcium présents dans l'échantillon est calculé suivant l'équation suivante (4.1) [88] :

$$CaCO_3 = \frac{M_{CaCO_3}}{M_{CaO}} \cdot [CaO - (0.0448 \cdot Al_2O_3 - 0.001147)] \quad (4.1)$$

où M_{CaCO_3} et M_{CaO} sont les masses molaires en g/mol. À noter que cette équation est développée pour la géologie des Pays Bas, qui est caractérisée par des roches sédimentaires marines déposées pendant le Quaternaire [88]. L'histoire géologique de Pays-Bas est donc récente par rapport à celui de la région d'étude.

L'évaluation du pourcentage en carbonate de calcium à partir de l'équation 4.1 donne une teneur d'environ 7.8% et la mesure de MgO et de Na₂O dans les oxydes majeurs laisse supposer la présence de dolomite (CaMg(CO₃)₂) et d'halite (NaCl) dans l'échantillon étudié. De plus, l'échantillon contient une quantité significative de pyrite, soit 0,89%. Cette valeur a été obtenue comme suit [88] :

$$FeS_2 = \frac{M_{FeS_2} * 0,5}{M_s * S} \quad (4.2)$$

où M_{FeS_2} et M_S sont les masses molaires en g/mol de la pyrite et de soufre respectivement.

TABLEAU 4.1 Pourcentages des oxydes majeurs existants dans l'échantillon étudié

Oxydes majeurs	Valeurs (%)
SiO ₂	45.4
Al ₂ O ₃	20.7
CaO	5.3
MgO	4.5
FeO	3.96
Na ₂ O	0.45
MnO	0.82
S(tot)	2.10
CO ₂	7.4
PAF	11.6
Carbone total	2.10

4.4 Débit imposé

Les données publiées dans l'article de Cerclet et al. [9] ont été utilisées comme valeurs de référence pour le débit imposé. La plage de variation du débit de pompage dans cet article se situait entre 25 et 189 mL/min. Afin de déterminer le temps de résidence de l'eau souterraine dans le puits de pompage, la vitesse moyenne de l'eau descendante et ascendante a été utilisée. La vitesse de l'eau souterraine descendante (v_d) dans le puits est calculée comme suit :

$$v_d = \frac{Q(1 - \beta)}{A_i} \quad (4.3)$$

où Q est le débit de pompage en m³/s, A_i est la surface annulaire entre la paroi externe et le tube de prélèvement en m², et β est le taux de saignée, variant entre 0 et 1. Lorsqu'il prend une valeur de 0, cela signifie que la saignée n'est pas en opération et la totalité de l'eau pompée est réinjectée dans le puits de pompage. Si $\beta \neq 0$, cela traduit l'activité de la saignée et l'écoulement de l'eau dans l'aquifère en direction du PCP [7].

De plus, la vitesse de l'eau ascendante est exprimée par l'équation suivante :

$$v_a = \frac{Q}{A_0} \quad (4.4)$$

Où A_0 est la surface transversale de tube de prélèvement exprimée en m^2 .

Pour un débit de 189 L/min, la vitesse de l'eau ascendante est de 0,173 m/s et celle descendante est 0,973 m/s. Ces vitesses restent constantes avec l'hypothèse d'un débit de pompage stable. La vitesse moyenne de fluide est ainsi de 0,573 m/s. Le temps de résidence de l'eau souterraine dans le puits est calculé par l'équation 4.5. Pour une longueur de 200 m, le temps de résidence de l'eau souterraine dans le PCP est 5 minutes et 48 secondes.

$$T_{résidence} = \frac{L}{v_{moyenne}} \quad (4.5)$$

Le même calcul est effectué pour un débit de 25 L/min, le temps de résidence de l'eau dans le puits est 47 minutes. Ainsi, le temps entre l'injection de l'eau et son pompage dans un PCP varie entre 2 min 50 secondes et 47 minutes selon le débit appliqué.

Par ailleurs, La pompe péristaltique utilisée fournit une plage de débit variant entre 0,0002 mL/min et 380 mL/min [89]. Des tubes en silicone, de type L/S16 ont été utilisés dans le montage expérimental, permettant le transport de l'eau dans le système. Ils sont caractérisés par un diamètre interne de 16 mm. Le tube utilisé pour pomper de l'eau du réservoir mesurait 2,15 m de longueur, et celui utilisé pour l'injection de l'eau sortant de la colonne dans le réservoir avait une longueur de 2,52 m. Selon la Figure 4.5, lorsque le débit de la pompe péristaltique augmente, le temps de résidence de l'eau diminue.

Il est difficile de maintenir un temps de résidence de cinq minutes dans la colonne d'essai, car cela nécessiterait l'utilisation d'une pompe péristaltique plus grande et des tubes de diamètre plus important à la limite des capacités du matériel à disposition. Il est cependant possible de réaliser un temps de résidence de 47 minutes en laboratoire, similaire à celui observé in situ, pour un débit de 25 L/min. Selon la Figure 4.5, pour atteindre un temps de 47 minutes en laboratoire, un débit de pompage de 77 mL/min est nécessaire.

4.5 Analyses chimiques

Au cours de l'essai en colonne, des analyses chimiques ont été effectuées sur des prélèvements réguliers. Afin de renforcer la fiabilité des résultats obtenus, l'échantillonnage a été réalisé en duplicatas, c'est-à-dire que deux échantillons ont été pris simultanément, dans les mêmes

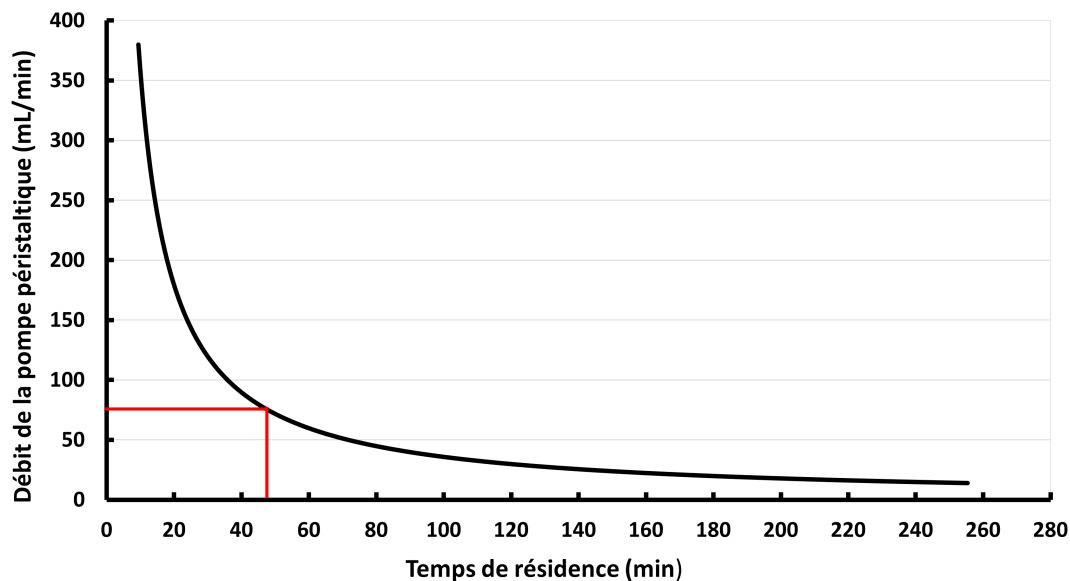


FIGURE 4.5 Évolution du débit de pompage de la pompe péristaltique en fonction de temps de résidence de l'eau dans l'essai

conditions, notamment avec des flacons de prélèvement identiques. Les analyses chimiques des échantillons d'eau ont été réalisées dans trois laboratoires différents, tel que décrit dans les paragraphes suivants.

Un volume de 1,5 ml a été prélevé et filtré dans un filtre de $0,45 \mu\text{m}$ et conservé sous une température de 4°C avant d'être analysés au laboratoire. Également, 50 ml a été collecté pour les analyses de l'alcalinité et 15 ml pour les analyses des métaux existants dans l'eau.

4.5.1 Analyse des métaux

Le fer et manganèse sont le premier groupe d'ions étudiés pendant l'essai, un volume de 15 ml a été prélevé à la sortie de la colonne, et l'analyse chimique de ces métaux a été réalisée dans le Laboratoire de Géochimie Analytique de Polytechnique Montréal en utilisant l'absorption atomique sur une machine Perkin Elmer 200.

4.5.2 Analyse des anions et cations majeurs

Le deuxième groupe d'analyse est constitué des anions et cations majeurs (Lithium, Sodium, Aluminium, Potassium, Magnésium et Calcium, Fluorine, Chlorure, Nitrate, Bromure, Nitrate, Sulfate et Phosphate). Un volume de 1,5 ml d'eau sortant de la colonne a été échantillonné et filtré sur $0,45 \mu\text{m}$ afin d'être analysé par chromatographie ionique sur un appareil

ICS 5000 AS-DP DIONEX Thermo Scientific au Laboratoire d'analyse CREDEAU de Polytechnique Montréal. Ces échantillons ont été conservés sous une température de 4°C jusqu'à ce qu'ils soient analysés dans un délai d'une semaine au maximum.

4.5.3 Analyse de l'alcalinité

L'alcalinité fait partie du troisième groupe d'analyse et est mesurée en utilisant la technique de titration avec l'acide sulfurique (H_2SO_4). Afin de vérifier la fiabilité des appareils utilisés pour mesurer d'alcalinité, une solution de référence de 200 mg/L CaCO_3 a été utilisée comme un contrôle de qualité au début de l'essai. Par la suite, un volume de 50 ml d'eau échantillonnée a été titré avec la solution d'acide sulfurique jusqu'à un pH de 4,5. À noter que les échantillons utilisés dans cet essai ont été conservés sous une température de 4°C avant d'être analysés. Le résultat de l'alcalinité de l'eau est indiqué par le titrateur et exprimé en mg/L CaCO_3 . Il est important de noter qu'entre chaque manipulation, le rinçage de l'agitateur et de l'électrode avec l'eau déminéralisée est nécessaire afin d'obtenir des résultats fiables.

CHAPITRE 5 RÉSULTATS ET ANALYSES

Ce chapitre vise à présenter les résultats chimiques de l'essai en colonne réalisé en laboratoire, ainsi que les étapes suivies pour estimer la surface minérale réactive des minéraux carbonatés : la calcite et la dolomite. Il vise aussi à déterminer la cinétique de réaction par la théorie de l'état de transition (TST) et à comparer les résultats obtenus avec les données publiées dans la littérature.

5.1 Résultats expérimentaux

Tel que présenté au chapitre 3, la concentration des ions majeurs présents dans l'eau sortant de la colonne a été mesurée deux fois par jour durant l'essai sous une température constante à $11^{\circ}\text{C} \pm 1$. Durant cet essai, le fait de prélever des échantillons à plusieurs reprises engendre une diminution d'eau dans le réservoir, empêchant la poursuite de l'expérience sur une longue durée. Afin de valider les résultats du premier essai et de le poursuivre sur une période plus de 11 jours, le premier réservoir utilisé de 2L de volume a été remplacé par un autre de 5L, considéré suffisant pour faire les prélèvements nécessaires sur 22 jours.

Les conditions initiales de température du premier et du second essai étaient identiques (11°C), mais un problème technique dans le bain à température contrôlée nous a obligé de poursuivre l'expérience à la température ambiante du laboratoire (environ 22°C) après 5 jours d'essai. Le tableau 5.1 présente les caractéristiques des deux essais.

Cette section présente le traitement des résultats expérimentaux après l'exclusion des données aberrantes, non représentatives du déroulement de l'essai, afin d'obtenir l'évolution des espèces dissous dans la solution en sortie de la colonne sous deux températures différentes (11°C et 22°C).

TABLEAU 5.1 Caractéristiques des essais réalisés en laboratoire

Caractéristiques	Essai 1	Essai 2
Température	11°C	11°C-22°C
Durée	11 jours	22 jours
Eau utilisée	Eau déminéralisée	Eau déminéralisée
Volume de réservoir utilisé	2 Litres	5 Litres
Analyses chimiques	Analyse des métaux	Analyse des métaux
	Analyse des cations et des anions majeurs	Analyse des cations et des anions majeurs
	Analyse de l'alcalinité	Analyse de l'alcalinité

5.1.1 Données exclues

Les Figures 5.1, 5.2, 5.3 et 5.4 présentent l'évolution des concentrations en cations majeurs (Ca^{2+} , Mg^{2+} , K^+ , Na^+) et anions majeurs (Cl^- , NO_3^- , SO_4^{2-} , Ca^{2+}) dans la solution en sortie de colonne pour les deux essais. Ces concentrations seront utilisées pour déterminer l'état de saturation de l'eau (sursaturation ou sous-saturation). Avant d'utiliser ces données pour la calibration d'un modèle, un traitement est nécessaire pour éliminer les données aberrantes, qui sont loin de la tendance observée et obtenir des figures plus représentatives de l'évolution des concentrations en ions majeurs en sortie de la colonne.

Ces valeurs aberrantes proviennent des erreurs d'échantillonnage ou d'un dysfonctionnement temporaire de l'appareil de mesure. Elles sont indiquées sur la Figure des cations majeurs (5.1) par un marqueur vide et sur la Figure des anions majeurs (5.2) par un marqueur rouge, en opposition aux données retenues et représentées par un marqueur plein. La ligne en pointillés dans les Figures 5.4 et 5.3 sépare les données obtenues sous une température de 11°C et celle de 22°C durant la deuxième expérience.

5.1.2 Indice de saturation

Afin d'évaluer l'état de saturation de l'eau, une simulation à l'aide du logiciel PHREEQC a été effectuée en adoptant la base de données WATEQ4f.dat, qui tient en compte de la pression partielle de CO_2 et de la température de la solution [90].

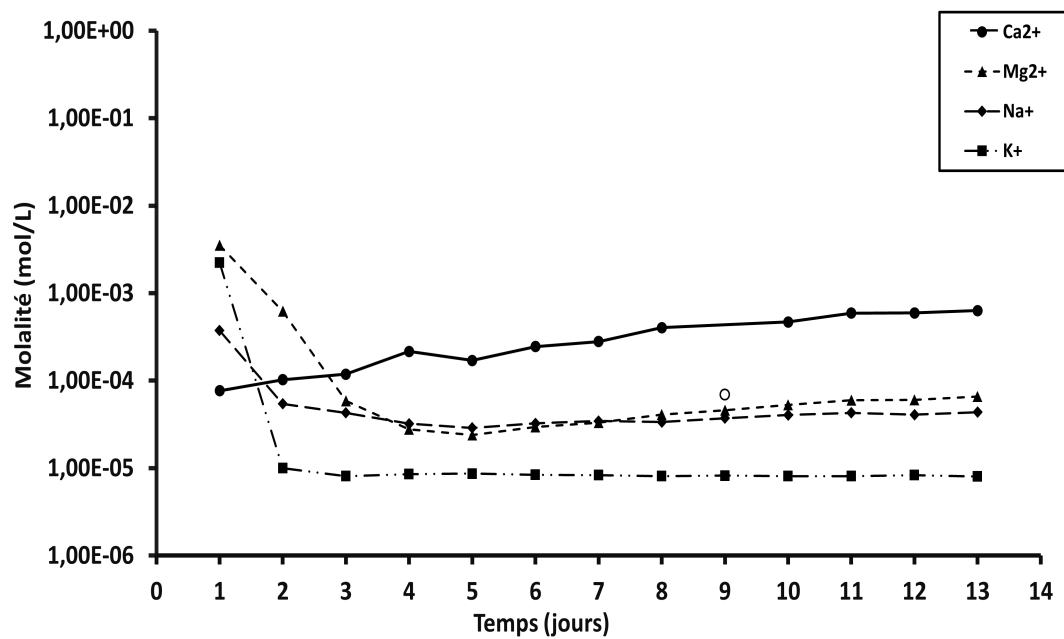


FIGURE 5.1 Évolution de la concentration des cations majeurs dissous dans la colonne d'essai 1

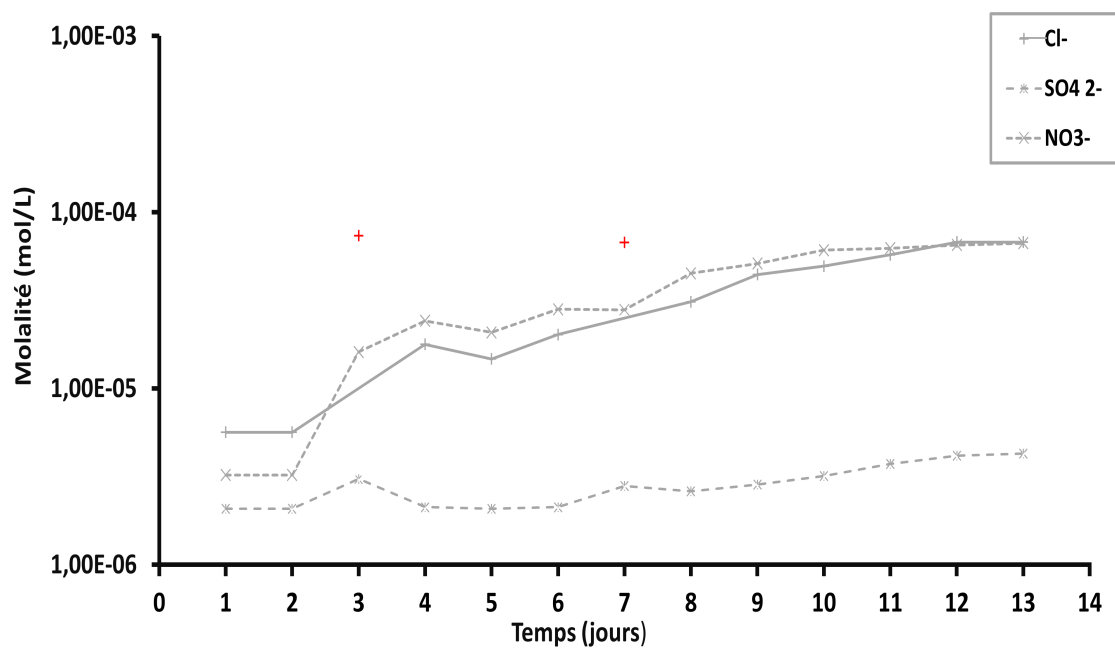


FIGURE 5.2 Évolution de la concentration des anions majeurs dissous dans la colonne d'essai 1

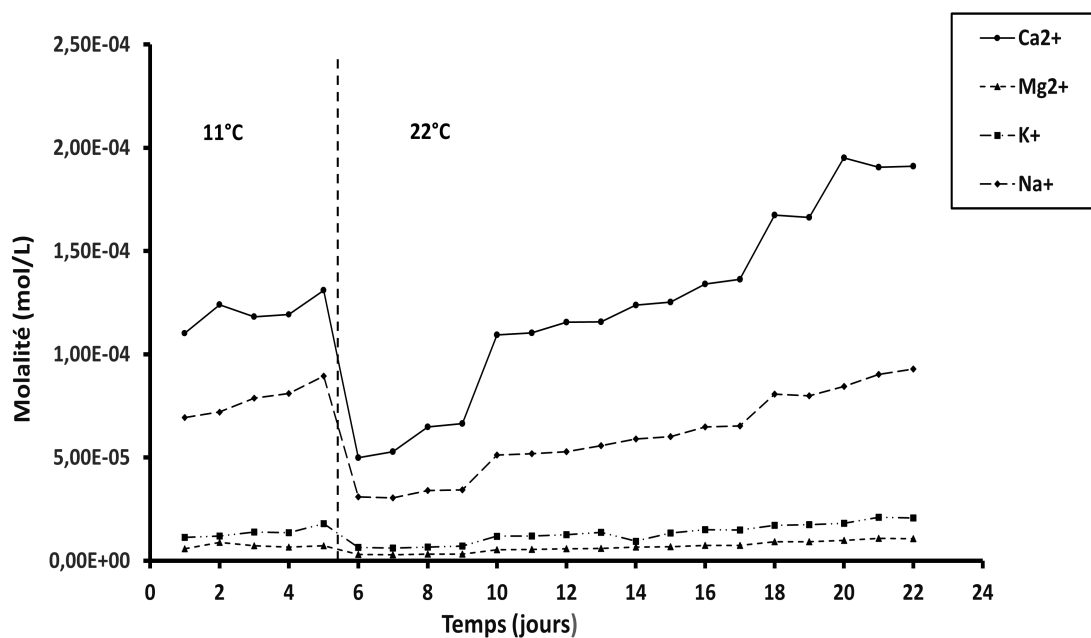


FIGURE 5.3 Évolution de la concentration des cations majeurs dissous dans la colonne d'essai 2

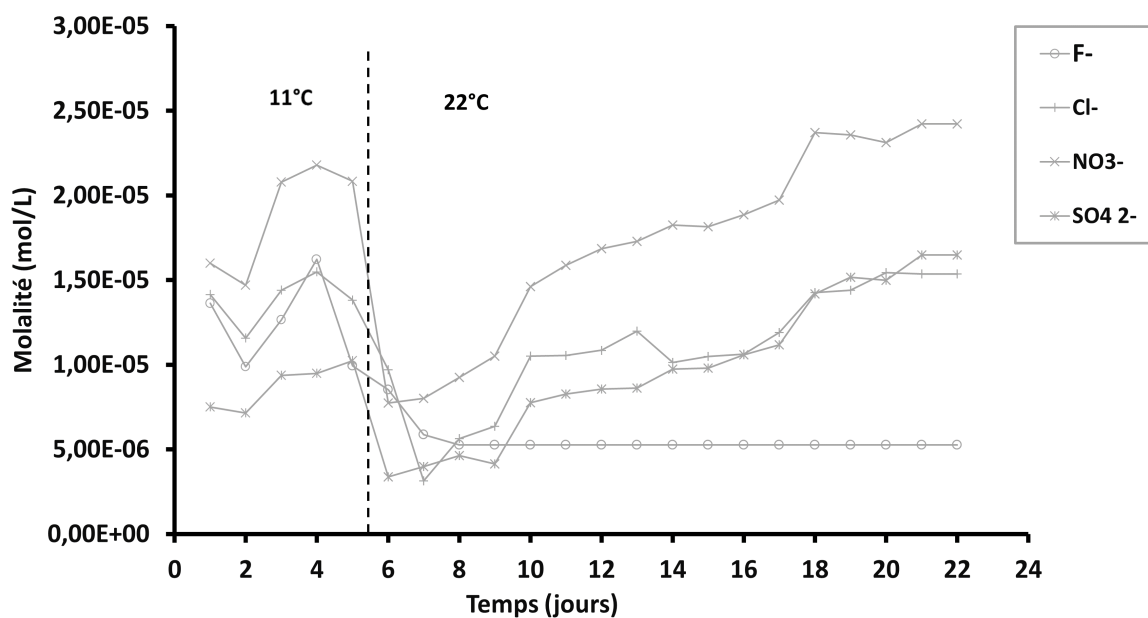


FIGURE 5.4 Évolution de la concentration des anions majeurs dissous dans la colonne d'essai 2

L'indice de saturation exprimé par le logarithme du rapport Ω entre le produit d'activité ionique (IAP) et la constante K permet d'étudier l'équilibre entre le minéral et la solution. Il est calculé comme suit :

$$\Omega = \frac{IAP}{K} \quad (5.1)$$

Langelier a également développé une relation permettant l'évaluation de l'état de saturation des carbonates dans l'eau [1]. Cette relation est connue sous le nom d'indice de Langelier et elle permet de déterminer si l'eau est corrosive ou encrassante en comparant le pH réel de l'eau avec le pH de saturation en calcite. Il est important de noter que les valeurs de pH de saturation peuvent varier selon les conditions expérimentales. Comme le but de cette section est l'étude de l'état de saturation de l'eau et non pas sa qualité, l'évaluation de l'état de saturation est basée sur les valeurs d'indice de saturation obtenues par le logiciel PHREEQC.

Les simulations sur la base des concentrations en ions majeurs à l'aide de PHREEQC pour les deux essais indiquent que la valeur moyenne de l'indice de saturation des minéraux carbonatés correspondant à une sous-saturation et donc à une tendance à la dissolution (cf. Figure 5.5 et 5.6). Ces résultats reflètent la prédominance des ions Ca^{2+} dans l'eau.

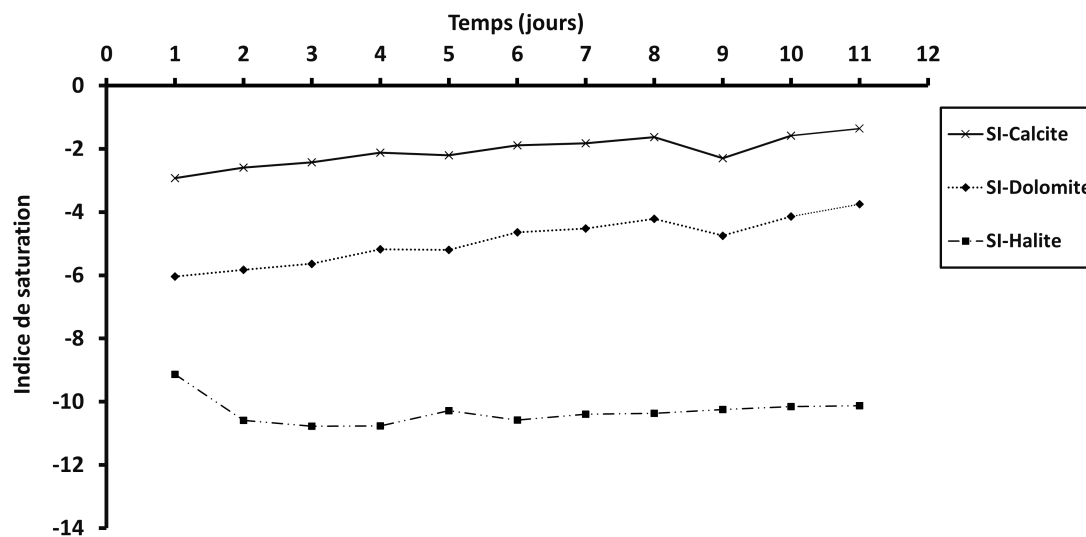


FIGURE 5.5 Évolution de l'indice de saturation des minéraux en sortie de la colonne du premier essai sous une température de 11°C.

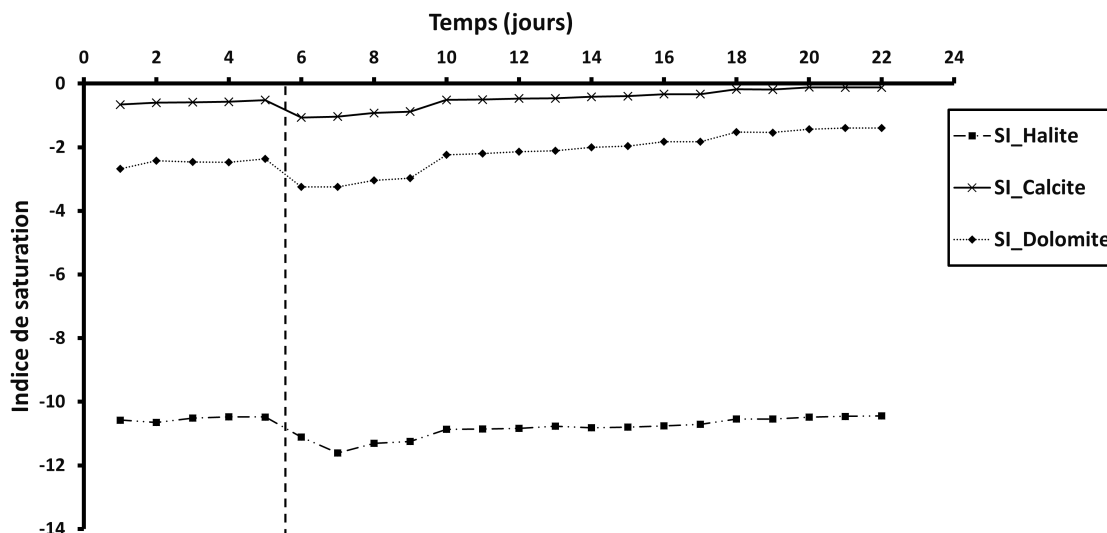


FIGURE 5.6 Évolution de l'indice de saturation des minéraux en sortie de la colonne du deuxième essai, sous les deux températures de 11°C et 22°C.

5.1.3 Paramètres physico-chimiques

Les paramètres physiques mesurés sont la température, pH, la conductivité spécifique, et les paramètres chimiques sont la dureté et l'alcalinité de la solution.

a-Paramètres physiques

- Température

La température est un paramètre physique ayant un effet significatif sur les autres paramètres chimiques dont la densité, la solubilité des minéraux et l'équilibre chimique. D'après la Figure 5.7, la température du deuxième essai était maintenue constante à 12°C, mais suite à une panne technique dans le bain à température contrôlée, coïncidant avec une coupure d'électricité dans le laboratoire, les données n'ont pas été enregistrées dans le logiciel YSI Data Manager et l'expérience s'est poursuivie à la température ambiante du laboratoire, soit 22°C.

- pH

Le pH représente un indicateur d'acidité ou d'alcalinité de l'eau dans la colonne et dépend à la fois de la température et de la pression partielle de CO_2 . Ce paramètre a été évalué en continu durant l'essai, avec une acquisition toutes les 5 minutes par la sonde multi-paramètres. La Figure 5.8 montre la variation du pH de la solution à la sortie de la colonne. Généralement,

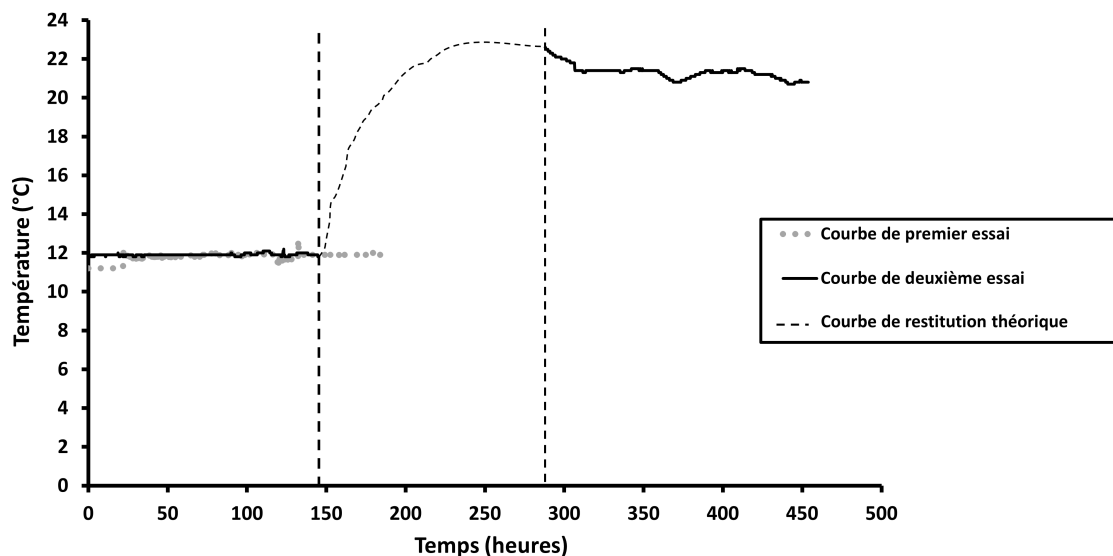
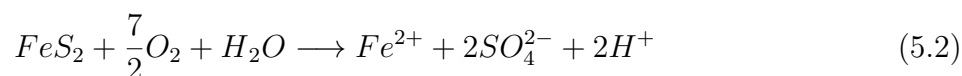


FIGURE 5.7 Évolution de la température de l'eau sortant de la colonne (Essais 1 et 2)

le pH était relativement alcalin durant les deux essais, soit des valeurs moyennes de 8,31 et 9,45, respectivement pour le premier et le deuxième essai. Ces valeurs obtenues indiquent que l'ion bicarbonate (HCO_3^-) est l'espèce dominante dans la colonne, comme illustré sur la Figure 2.18 de la revue de littérature. La présence de bicarbonate dans l'eau s'explique par la dissolution des carbonates (CaCO_3), qui se dissocient en CO_3^{2-} , produisant l'acide carbonique H_2CO_3 , qui se transforme à son tour en HCO_3^- .

Durant les deux essais, une baisse du pH a été observée à certains moments. Cela est dû au protocole d'étalonnage de la sonde multi-paramètres qui nécessitait l'ouverture de sa cellule étanche en sortie de la colonne. Cette ouverture entraînait une augmentation de l'oxygène dissous dans la solution présente dans la colonne et une éventuelle oxydation des sulfures comme la pyrite (FeS_2), (cf. Équation 5.2). Cette réaction d'oxydation produit des protons H^+ , entraînant une baisse du pH.



La chute brusque observée au quatrième jour de la première expérience peut être expliquée par le remplacement du câble reliant la cellule étanche et la sonde multi-paramètres. Pendant l'installation du nouveau câble, le système a été laissé ouvert pendant quelques minutes. Ceci a engendré une oxydation des sulfures et la diminution du pH. Cette erreur a été corrigée lors du deuxième essai, pour lequel la sonde multi-paramètres utilisé a été remplacée.

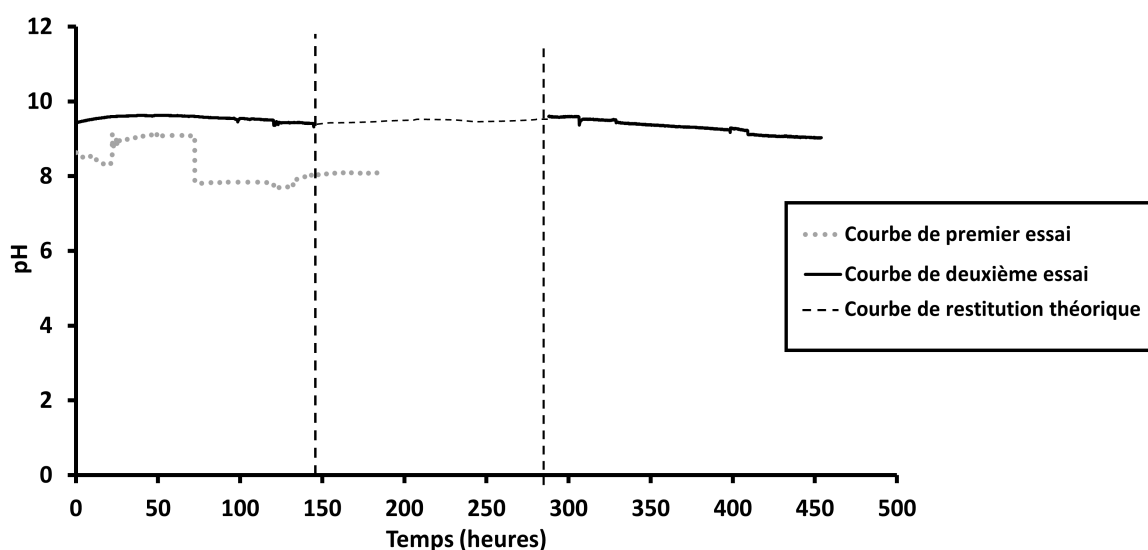


FIGURE 5.8 Évolution du pH de l'eau sortant de la colonne d'essai (Essais 1 et 2)

- Conductivité électrique

La conductivité électrique présente un indicateur important de la qualité de l'eau permettant d'évaluer la quantité d'ions dissous dans la solution, tels que les chlorures, sodium, calcium et magnésium. Ainsi, ce paramètre permet de déterminer la minéralisation globale d'eau. Durant les deux essais, l'augmentation de la conductivité de la solution en sortie de la colonne pouvait s'expliquer par l'augmentation de la concentration en chlorures, provenant de la dissolution de l'halite, comme illustré dans les Figure 5.5 et 5.6 présentant l'état de saturation de l'eau.

Sur la Figure 5.9, les tendances des courbes de conductivité étaient similaires au début des deux essais, lorsque la température de l'eau était à 11°C, mais une augmentation de la conductivité a été induite par la calibration de la sonde multi-paramètres et le remplacement du câble lors du premier essai, après le quatrième jour.

Dans la deuxième expérience, le passage de 11°C à 22°C entraîne à une diminution de la conductivité, puis son augmentation à long terme, traduisant une minéralisation de l'eau. Il est important de noter qu'il existe d'autres facteurs ayant un effet sur ce paramètre physique, dont le temps de séjour de l'eau dans la colonne, ainsi que les processus contrôlant le transport de la solution, tels que l'adsorption et désorption des ions à la surface de la roche.

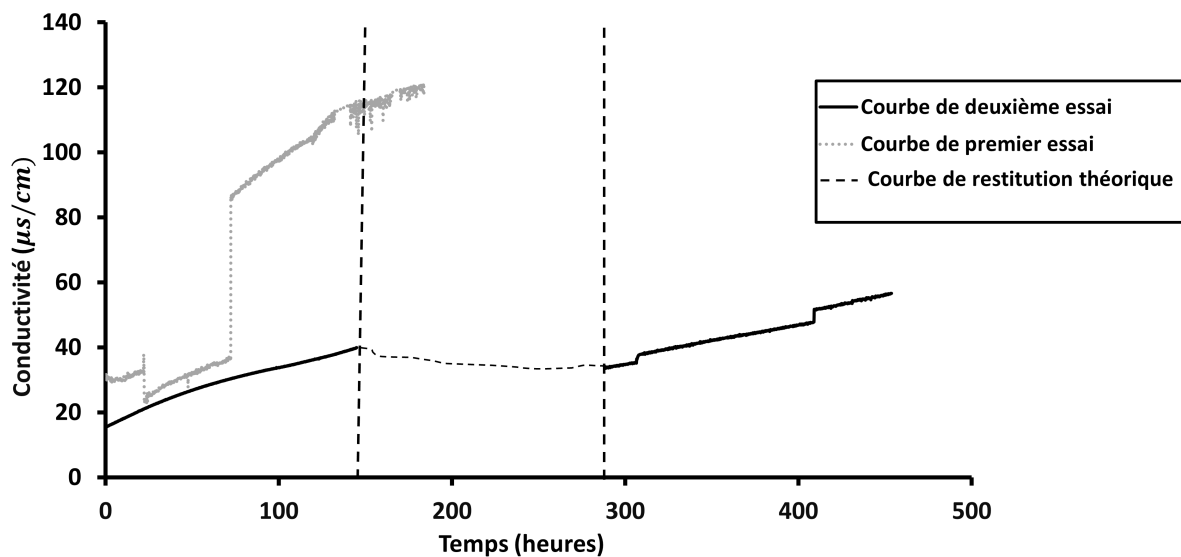
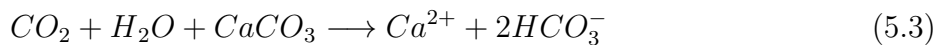


FIGURE 5.9 Évolution de la conductivité spécifique de l'eau sortant de la colonne d'essai (Essais 1 et 2)

- Pression partielle de CO_2

La pression partielle du gaz carbonique (P_{CO_2}) dans la colonne a, quant à elle, été calculée en utilisant le logiciel PHREEQC. D'après la Figure 5.10, la P_{CO_2} augmente dans la solution en fonction de temps, ceci traduit le fait que le CO_2 est l'espèce dominante dans la colonne et qu'il réagit avec l'eau pour former l'acide carbonique. Ce dernier fournit un proton (H^+) qui est associé aux ions CO_3^{2-} , provenant de la dissolution des carbonates de calcium dans l'eau, pour former (HCO_3^-). La relation globale entre CO_2 et H_2O est décrite dans l'équation 5.3 [3]. Le pH témoigne également que HCO_3^- est l'espèce dominante dans la solution. Ainsi, les concentrations des espèces carbonatées (CO_3^{2-} , H_2CO_3 et HCO_3^-) sont déterminées par le pH et la P_{CO_2} .



Appelo et Postma [3] ont présenté l'effet de la variation de la P_{CO_2} et la dissolution de la calcite sur le pH de l'eau pour des valeurs comprises entre $10^{-1,5}$ et $10^{-3,5}$. Le pH obtenu varie de 7 à 8,3 pour la dissolution de la calcite en système ouvert, et de 7,6 à 10,1 pour un système fermé. Le Tableau 5.3 présente les valeurs expérimentales obtenues durant les deux essais, et en comparant les valeurs de P_{CO_2} et de pH aux résultats présentés dans le Tableau 5.2, il a été possible de déterminer le type de système étudié. Durant le premier essai, la

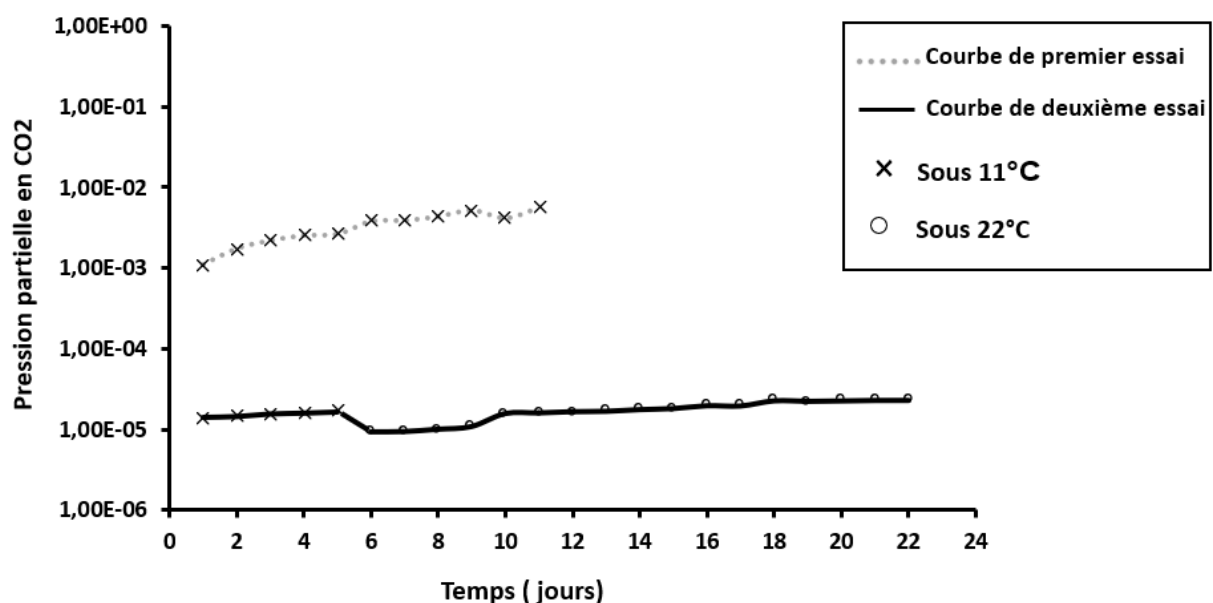


FIGURE 5.10 Évolution de la pression partielle de CO₂ en sortie de la colonne en fonction du temps de réaction (Essais 1 et 2)

P_{CO_2} est supérieure de deux ordres de grandeur à celle du deuxième essai, cela est dû au type de montage expérimental utilisé. En effet, le premier essai est caractérisé par un système hybride, combinant un système ouvert au niveau de réservoir où il y avait une compensation entre le CO₂ et l'atmosphère, et un système fermé au niveau de la colonne dans laquelle l'échantillon est émergé. Alors que durant le deuxième essai, le système était fermé et bien scellé, sans échange avec l'atmosphère.

TABLEAU 5.2 Plage de variation de P_{CO_2} et pH selon le type de système : ouvert/fermé sous une température de 15°C, adapté d'Appelo et Postma [3]

Paramètres	Système ouvert, P_{CO_2} constant	Système fermé, avec P_{CO_2} inconnu
P_{CO_2} Initial	$10^{-1,5} - 10^{-3,5}$	$10^{-1,5} - 10^{-3,5}$
P_{CO_2} Final	$10^{-1,5} - 10^{-3,5}$	$10^{-2,5} - 10^{-6,4}$
pH	6,98 - 8,29	7,62 - 10,06

TABLEAU 5.3 Valeurs expérimentales de P_{CO_2} et pH obtenues durant les deux essais

	Essai 1	Essai 2
P_{CO_2}	$10^{-2,24} - 10^{-2,95}$	$10^{-4,64} - 10^{-5,03}$
pH	7,6 - 9,14	9,02 - 9,62
Type de système	Système hybride	système fermé

b-Paramètres chimiques

- Alcalinité

L'alcalinité de l'eau exprime le niveau de bicarbonates (HCO_3^-), de carbonates (CO_3^{2-}) et d'hydroxydes (OH^-) dans l'eau [91]. Il est important de noter que les flacons utilisés pour le prélèvement de l'eau doivent être bien fermés pour éviter tout dégazage de CO_2 qui pourrait affecter les résultats.

Les résultats de la variation du pH de l'eau à la sortie de la colonne montrent généralement la dominance de l'ion HCO_3^- , ce qui signifie que les concentrations en carbonates et en hydroxydes sont négligeables par rapport à celles en bicarbonates. Ainsi, l'alcalinité obtenue exprime la variation de la concentration en ions HCO_3^- dans la solution.

D'après la Figure 5.11, les variations de température ont un impact sur l'alcalinité de l'eau. Lorsque la température augmente, l'alcalinité diminue et la tendance s'inverse pour une température plus basse.

- Dureté

La dureté est un paramètre important exprimant la qualité d'eau. Elle est liée à la présence des ions calcium, magnésium et parfois des ions de fer, aluminium, manganèse et strontium. Elle est exprimée en mg/l $CaCO_3$ et calculée comme suit [92] :

$$C = ((A - T) \times 2.5) + ((B - T) \times 4,12) \quad (5.4)$$

Où C est la dureté (mg/L $CaCO_3$), A est la concentration en calcium (mg/l), B est la concentration en magnésium (mg/l) et T est la concentration du métal (fer, manganèse, aluminium et strontium) (mg/l). T sera négligé dans le calcul de la dureté de la solution parce que la concentration de ces métaux dans l'eau sont considérée négligeable.

La dureté de l'eau est liée à la dissolution des minéraux carbonatés tels que la calcite et la dolomite. Plus ces minéraux sont présents et dissous dans l'eau, plus la prédominance des ions de Ca^{2+} et Mg^{2+} est importante, c'est-à-dire plus l'eau est dure.

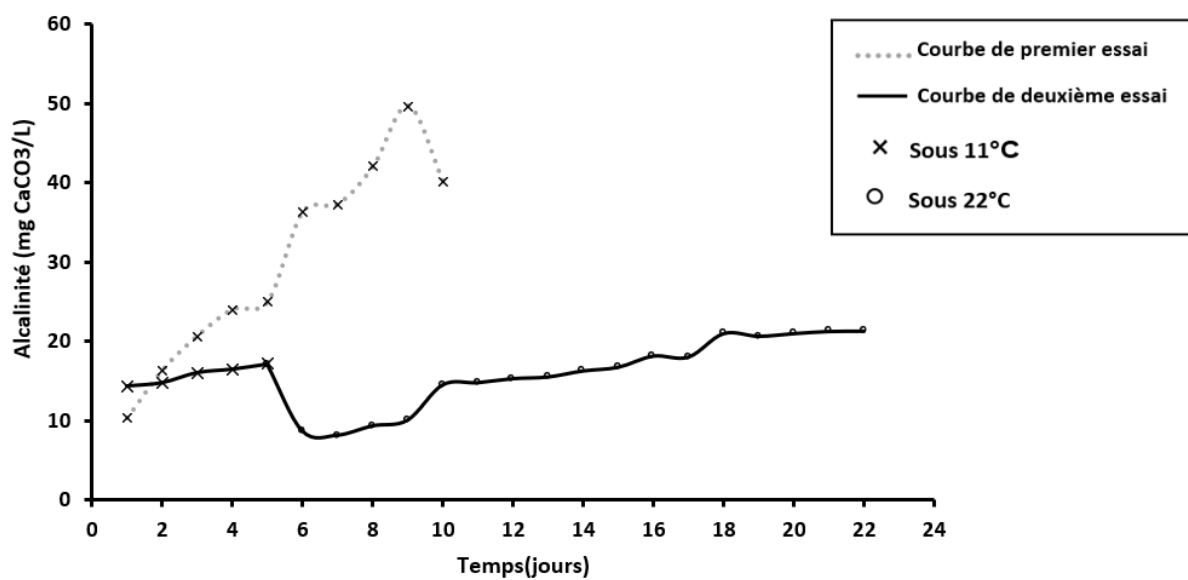


FIGURE 5.11 Évolution de l'alcalinité de la solution en sortie de la colonne d'essai en fonction du temps de réaction (Essais 1 et 2)

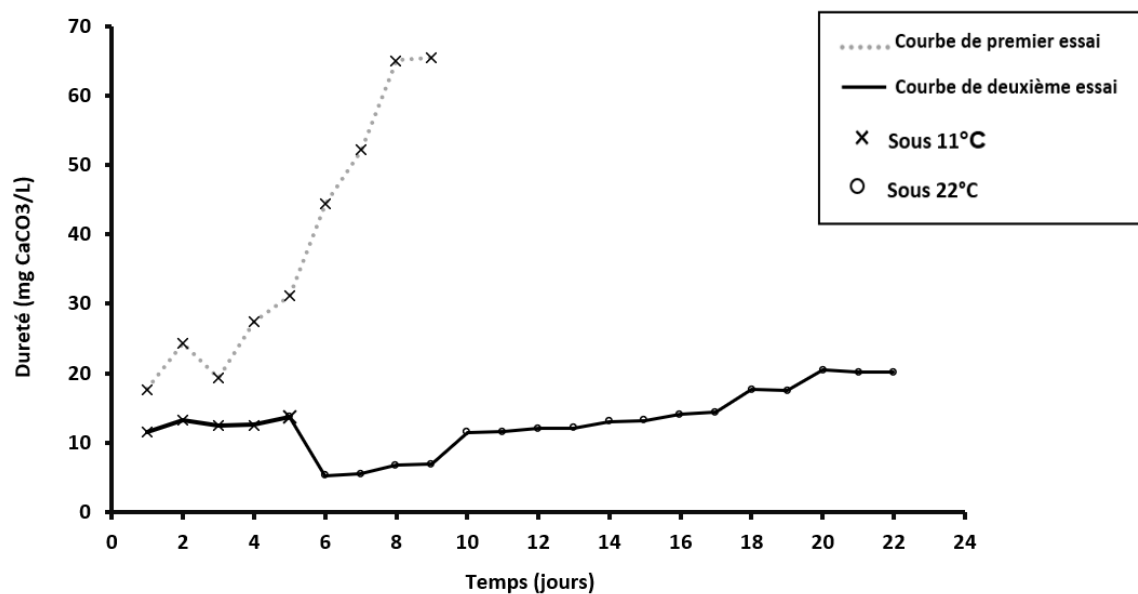


FIGURE 5.12 Évolution de la dureté de la solution en sortie de la colonne d'essai en fonction du temps de réaction (Essais 1 et 2)

Les courbes présentées à la Figure 5.12 montrent comment la dureté de l'eau évolue sous deux températures différentes. Durant le premier essai, les valeurs de la dureté de la solution à 11°C sont proches de celles obtenues lors du deuxième essai, mais lorsque la température devient élevée, la courbe représentant la dureté diminue avant d'augmenter.

5.2 Approche de la modélisation géochimique

Comme il y avait des perturbations liées à la calibration de la sonde multi-paramètres dans l'essai 1, seul l'essai 2 a été utilisé pour estimer la surface minérale réactive.

L'approche retenue pour estimer la surface minérale réactive est une méthode initiée par Marini et al. [93] et la même méthode a été réutilisée dans les travaux de Scislawski et al. [94]. Le lecteur est invité à consulter ces deux références pour plus de détail sur ces travaux.

Ces chercheurs ont établi un système d'équations pour comprendre comment les minéraux présents dans la roche se dissolvent et réagissent lorsqu'ils sont en contact avec l'eau, en quantifiant le taux de dissolution et les surfaces réactives des minéraux. Afin de résoudre ce système, ils ont utilisé l'approche inverse qui est basée sur l'utilisation du degré d'avancement de la dissolution des minéraux, ainsi que sur la limite continue qui stipule que les changements chimiques se produisent de manière continue et graduelle lorsque l'eau est en contact avec la roche.

- Surface minérale réactive

La surface minérale réactive est un paramètre clé contrôlant la cinétique de réaction des minéraux. En effet, cette surface représente les sites réactifs sur le minéral participant activement aux réactions suite à une interaction entre l'eau et l'échantillon. L'estimation de la surface minérale réactive est nécessaire afin de calculer le taux de dissolution/précipitation des différents minéraux et la cinétique de réaction. Fréquemment, la surface spécifique des minéraux est obtenue par le calage des résultats ajustés de la simulation aux données expérimentales obtenues.

Il n'existe pas de méthode universellement acceptée permettant l'estimation de la surface minérale réactive moyenne [95]. Ainsi, différentes approximations ont été développées. L'approche la plus simple est l'évaluation de la surface minérale réactive en tant que surface géométrique, en supposant un diamètre de grain et une géométrie sphérique pour tous les minéraux [95], mais le désavantage de cette approche est l'utilisation d'une géométrie idéale et la non prise en compte de la rugosité de surface. Une autre méthode souvent utilisée est celle de la théorie de Brunaur, Emmet, Teller (BET) [96], permettant la mesure de la surface réactive en laboratoire.

5.2.1 Conversion d'échelle

La loi de cinétique relie la vitesse de réaction d'un minéral aux concentrations des réactifs (voir section 2). En utilisant cette loi, un système d'équation a été établi pour décrire le taux de réaction chimique des minéraux qui se produisent au cours du temps, comme suit :

$$I \frac{dn}{dt} = v.R \quad (5.5)$$

Où I est la matrice d'identité de dimension $(N_{tot} \times N_{tot})$, n est le vecteur de concentration des solutés dissous dans la solution (N_{tot} lignes), R est le vecteur de taux de réaction (N_r lignes) et v est une matrice composée des coefficients stoechiométriques de la réaction de dimension $(N_{tot} \times N_r)$.

Puisque les réactions chimiques qui se déroulent durant l'essai sont des réactions cinétiques et non pas des réactions d'équilibre, le système peut être résolu théoriquement en mode temporel en remplaçant le taux de réaction R par la loi cinétique de réaction obtenue expérimentalement. Cependant, lorsqu'il s'agit d'un réactif minéral solide, la résolution du système d'équations devient complexe en mode temporel, puisqu'il faut attribuer une surface spécifique à chaque réactif minéral. En effet, pour chaque minéral, la loi cinétique de réaction s'écrit comme suit :

$$R_i = S_i \cdot \bar{R}_i \quad (5.6)$$

Où $\bar{R}_i$ est le taux de réaction absolu par unité de surface ($\text{mol.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$) et S_i est la surface réactive minérale en (cm^2).

En réalité, il est difficile de déterminer cette surface de manière précise en mode temporel. Une conversion d'échelle vers une autre échelle basée sur le mode de progression de la réaction a donc été adoptée. Ceci permet d'évaluer le taux de réaction des minéraux en utilisant le degré d'avancement de réaction ζ .

L'évolution chimique de l'eau existant dans la colonne d'essai est caractérisé par un ensemble de réactions hétérogènes (numérotées de 1 à 4 dans le Tableau 5.4) qui sont liées à des équilibres homogènes (numérotés de 5 à 7 dans le Tableau 5.4) et à une réaction hétérogène impliquant le dégazage de CO_2 . Dans ce travail, seuls les espèces dissous dans l'eau (Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , K^+ et CO_3) sont considérées car elles sont liées à la dissolution des minéraux d'intérêt dans notre étude.

TABLEAU 5.4 Réactions chimiques engendrées dans la colonne d'essai

Halite $\text{NaCl} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{Cl}^-$	(1)
Microcline $\text{KAlSi}_3\text{O}_8 + 4\text{H}^+ \rightarrow \text{K}^+ + \text{Al}^{3+} + 3\text{SiO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$	(2)
Calcite $\text{CaCO}_3 \rightarrow \text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	(3)
Dolomite $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2 \rightarrow \text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+} + (\text{CO}_3)_2$	(4)
$\text{HCO}_3^- \rightarrow \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-}$	(5)
$\text{H}_2\text{CO}_3 \rightarrow \text{H}^+ + \text{HCO}_3^-$	(6)
$\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}^+ + \text{OH}^-$	(7)
$\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_{2(g)} \rightarrow \text{H}_2\text{CO}_3$	(8)

Pour une réaction donnée, le taux de dissolution relative d'un tel minéral dans la solution est noté σ_i . Il représente la quantité de minéral libérée et dissoute dans l'eau en fonction du degré d'avancement de la *ième* réaction. Il s'exprime comme suit :

$$\frac{dNa^+}{d\zeta} = \sigma_1 \quad (5.7)$$

$$\frac{dK^+}{d\zeta} = \sigma_2 \quad (5.8)$$

$$\frac{dCa^{2+}}{d\zeta} = \sigma_3 \quad (5.9)$$

$$\frac{dMg^{2+}}{d\zeta} = \sigma_4 \quad (5.10)$$

Le taux d'avancement de réaction ζ est une grandeur sans dimension, exprimant l'évolution des réactions irréversibles présentées dans le Tableau 5.4. Ce paramètre prend une valeur égale à 0 au début de la réaction et égale à 1 à la fin. Ce paramètre est obtenu par la relation suivante :

$$\zeta = \frac{\xi_n}{\xi_{end}} = \frac{n_{Na^+} + n_{K^+} + n_{Ca^{2+}} + n_{Mg^{2+}}}{\xi_{end}} \quad (5.11)$$

Après avoir déterminé le vecteur des concentrations des solutés dissous dans l'eau $\frac{dn}{d\zeta}$, avec la valeur ζ ($0 < \zeta < 1$), la solution du système d'équations 5.5 est trouvée en inversant le problème, c'est à dire en transposant la matrice R, comme indiqué ci-dessous :

$$I \frac{dn}{d\zeta} = v \cdot R_\zeta \quad (5.12)$$

Où R_ζ est le taux de réaction transposé :

$$R_{\zeta,i} = S_i \cdot \bar{R}_i \frac{dt}{d\zeta} \quad (5.13)$$

En insérant par la suite le taux de réaction absolu d'un minéral i dans l'Équation 5.13, la surface minérale réactive de ce minéral est obtenue à chaque point de progression de la réaction. Les étapes suivies pour déterminer le vecteur des concentrations des solutés $\frac{dn}{d\zeta}$ et le vecteur de taux de réaction absolu $\bar{R}_i$ sont présentées dans les sous-sections suivantes.

5.2.2 Calcul du vecteur de concentration du soluté $\frac{dn}{d\zeta}$

L'évolution des molalités des ions dissous dans l'eau est décrite en fonction de degré d'avancement des réactions. Afin d'ajuster ces données expérimentales, une régression polynomiale a été adoptée pour sa facilité à être dérivée (cf. Annexe B). Ceci a permis d'établir les équations présentées dans le Tableau 5.5. Le vecteur des concentrations des solutés est ensuite obtenu par une dérivation partielle en $d\zeta$ des équations du Tableau 5.5, comme suit :

$$\frac{dn}{d\zeta} = f'(\zeta) \times 10^{f(\zeta)} \times \ln(10) \quad (5.14)$$

TABLEAU 5.5 Polynômes de régression reliant l'activité thermodynamique des ions a_i , la molalité n_i , à la fraction d'avancement de réaction

Temps=	20.39012451 ζ -4.19104585
$\log n_{Ca}$	= -3.78128238 ζ^4 + 11.40484761 ζ^3 -12.9059832 ζ^2 +7.08224724 ζ -5.51106851
$\log a_{Ca}$	= -3.7016687 ζ^4 +11.17503392 ζ^3 -12.6551216 ζ^2 +6.93445386 ζ -5.50728395
$\log n_{Mg}$	= -0.61502008 ζ^3 +0.53201162 ζ^2 +0.95129832 ζ -5.8540212
$\log a_{Mg}$	= -0.62371815 ζ^3 +0.56165943 ζ^2 +0.89771655 ζ -5.86417805
$\log n_{Na}$	= -0.31845534 ζ^3 +0.17946116 ζ^2 +0.87059573 ζ -4.77891848
$\log a_{Na}$	= -0.32062521 ζ^3 +0.18688373 ζ^2 +0.85687301 ζ -4.78145439
$\log n_K$	= -0.64341325 ζ^2 +1.55383847 ζ -5.62087575
$\log a_K$	= -0.6402755 ζ^2 +1.54266278 ζ -5.62390472
$\log n_{CO_3}$	= -0.75498609 ζ^2 +1.55251628 ζ -4.54520483
$\log a_{CO_3}$	= -0.74246767 ζ^2 +1.50849162 ζ -4.5573308

5.2.3 Calcul de taux de réaction absolu

- Activité des espèces dissoutes

Avant le calcul du taux de réaction absolu, la détermination des activités des espèces dissoutes dans l'eau est une étape indispensable. L'activité d'un ion est égale à sa concentration molaire multipliée par un facteur appelé coefficient d'activité [97] :

$$\alpha = \gamma m \quad (5.15)$$

où α est l'activité chimique de l'ion, γ est le coefficient d'activité et m est la concentration molaire.

Pour calculer le coefficient d'activité, il faut déterminer la force ionique I de la solution comme suit :

$$I = \frac{1}{2} \sum m_i z_i^2 \quad (5.16)$$

où I est la force ionique, m_i est la molalité de l' i ème ion dans la solution et z_i est la charge de l' i ème ion. Après le calcul de la force ionique de la solution, le coefficient d'activité de l'ion est déterminée par l'équation de Debye-Hückel comme suit :

$$-\log(\gamma_i) = \frac{Az_i\sqrt{I}}{1 + a_iB\sqrt{I}} \quad (5.17)$$

où γ_i est le coefficient d'activité ionique de l'espèce i , A et B sont des constantes qui dépendent de la température. À 22°C, $A = 0,4968$ et $B = 0,3258 \times 10^{10}/\text{m}$ [98]. a_i est le diamètre effectif de l'ion (cf. Annexe A.1).

-Taux de réaction absolu des minéraux

Le taux de réaction absolu exprime la vitesse de dissolution d'un minéral dans l'eau ; il dépend de la quantité dissoutes par unité de temps et de la surface réactive du minéral. Il est calculé en utilisant l'équation suivante [93] :

$$\bar{R}_i = k_i [1 - \exp(\frac{A_i}{\eta RT})] \quad (5.18)$$

où k_i est la constante de dissolution du minéral, η est le nombre stoechiométrique de l' i ème réaction, R est la constante des gaz parfaits, T est la température (K), A_i est l'affinité thermodynamique de réaction calculée comme suit :

$$A_i = -RT \ln\left(\frac{Q_i}{K_i}\right) \quad (5.19)$$

où Q_i est le produit d'activité ionique et K_i est la constante de solubilité du minéral.

Les minéraux étudiés dans ce projet sont les minéraux carbonatés, tels que la calcite et la dolomite. Après simplification, le taux de réaction absolu des minéraux carbonatés s'écrit comme suit :

$$\bar{R}_i = k_i \left[1 - \left(\frac{Q_i}{K_i} \right)^{1/\eta} \right] \quad (5.20)$$

- Calcite

Le taux de dissolution de la calcite est calculé comme suit [99] :

$$\bar{R}_{CaCO_3} = k_i \left[1 - \left(\frac{[Ca^{2+}] \cdot [CO_3^{2-}]}{K_{sp}} \right)^{2/3} \right] \quad (5.21)$$

où [espèce] est l'activité de l'espèce considérée et K_{sp} est la constante de solubilité de la calcite qui se calcule comme suit [4] :

$$K_{sp} = -171,9065 - 0,077993.T + \frac{2839.319}{T} + 71,595 \text{Log}(T) \quad (5.22)$$

En ce qui concerne la constante de réaction k de la calcite, elle est déterminé par l'équation suivante :

$$k_{calcite} = k_1 \cdot [H^+] + k_2 \cdot [CO_2] + k_3 \cdot [H_2O] \quad (5.23)$$

où k_i sont des constantes empiriques (cm/s), dépendant de la température.

Deux modèles ont été utilisés pour déterminer la valeur de $k_{calcite}$, soient le modèle de PWP et de Chou et al. [5]. Le Tableau 5.6 présente les constantes de réactions k_i utilisés pour déterminer le taux de réaction absolue. À noter que la température utilisée dans le modèle de PWP est en Kelvin (K).

TABLEAU 5.6 Valeurs des constantes de réaction utilisées en cm/s selon les deux modèles PWP [4] et Chou et al. [5]

k_i	Modèle de PWP	Modèle de Chou et al.
k_1	$Log(k_1) = 0.198 - \frac{444}{T}$	8.9×10^{-5}
k_2	$Log(k_2) = 2.84 - \frac{2177}{T}$	5×10^{-8}
k_3	$Log(k_3) = -5.86 - \frac{317}{T}$	6.5×10^{-11}

- Dolomite

En ce qui concerne la dolomite, son taux de dissolution absolu $\bar{R}_{CaMg(CO_3)_2}$ en mol/cm².s est calculé par l'équation 5.24 [93].

$$\bar{R}_{CaMg(CO_3)_2} = k_{CaMg(CO_3)_2} [1 - \exp(-\frac{[Ca^{2+}][Mg^{2+}][CO_3^{2-}]^2}{K_{CaMg(CO_3)_2}})] \quad (5.24)$$

où $k_{CaMg(CO_3)_2}$ est la constante de réaction de la dolomite, calculée comme suit :

$$k_{dolomite} = k_{1,CaMg(CO_3)_2} \cdot [H^+]^{0.5} + k_{2,CaMg(CO_3)_2} \cdot [CO_2]^{0.5} + k_{3,CaMg(CO_3)_2} \cdot [H_2O]^{0.5} \quad (5.25)$$

$K_{CaMg(CO_3)_2}$ est la constante de solubilité de dolomite, elle est équivalente à une valeur de $10^{-17.99}$ [93]. Puisqu'il existe moins de travaux de recherche dédiés à la dissolution de la dolomite, un seul modèle a été utilisé pour évaluer le taux de réaction absolu de ce minéral, soit le modèle de Busenberg et Plummer [6]. Le Tableau 5.7 présente les valeurs des constantes empiriques de réaction et le Tableau 5.8 représente les résultats obtenus du taux de réaction absolu de la calcite et la dolomite pour différents degrés d'avancement de la réaction ζ .

TABLEAU 5.7 Valeurs des constantes de réaction de dolomite utilisées, en cm/s selon le modèle de Busenberg et Plummer [6]

k_i	Modèle de Busenberg et Plummer
k_1	3.94×10^{-8}
k_2	4.82×10^{-10}
k_3	1.45×10^{-12}

TABLEAU 5.8 Valeurs de taux de réaction absolu (mol/cm².s) obtenues pour la calcite et la dolomite selon les modèles de PWP [4], de Chou et al. [5] et de Busenberg et Plummer [6]

$\zeta(=\xi/\xi_{end})$	temps (jours)	R_{CaCO_3} (PWP)	R_{CaCO_3} (Chou et al)	$R_{CaMg(CO)_3}$ (Busenberg et Plummer)
0,286	1,65	4,73E-12	3,59E-12	1,28E-12
0,293	1,78	5,12E-12	3,92E-12	1,29E-12
0,345	2,83	2,21E-11	1,99E-11	2,47E-12
0,353	3,01	3,16E-11	2,88E-11	3,28E-12
0,564	7,30	1,42E-10	1,51E-10	7,13E-10
0,570	7,43	1,47E-10	1,57E-10	4,96E-10
0,592	7,89	1,60E-10	1,75E-10	3,42E-09
0,606	8,17	1,63E-10	1,78E-10	5,67E-09
0,631	8,67	1,84E-10	2,07E-10	6,19E-08
0,652	9,10	1,92E-10	2,17E-10	1,80E-07
0,702	10,12	2,23E-10	2,61E-10	1,20E-05
0,710	10,28	2,25E-10	2,64E-10	1,19E-05
0,871	13,56	3,12E-10	3,97E-10	1,19E+02
0,975	15,70	3,54E-10	4,67E-10	1,15E+05
0,992	16,03	3,51E-10	4,61E-10	7,05E+06
1,000	16,20	3,52E-10	4,64E-10	3,91E+06

5.2.4 Évolution de la surface minérale réactive

Le Tableau 5.9 présente les résultats obtenus par l'approche inverse et les Figures 5.15 et 5.17 montrent la variation des surfaces minérales réactives respectives de la calcite et de la dolomite. Les résultats obtenus pour la surface minérale réactive des minéraux carbonatés montrent une variation en fonction du temps de réaction entre la roche et l'eau. Ceci démontre que la surface réactive minérale est un paramètre variable et non stable comme souvent supposé dans certains modèles géochimiques.

- Calcite

TABLEAU 5.9 Évolution de la surface minérale réactive de la calcite et la dolomite selon les modèles de PWP [4], de Chou et al. [5] et de Busenberg et Plummer [6] en cm^2/L

$\zeta(=\xi/\xi_{end})$	temps (jours)	S_{CaCO_3} (PWP)	S_{CaCO_3} (Chou et al)	$S_{CaMg(CO)_3}$ (Busenberg et Plummer)
0,286	1,65	2,57E+06	3,38E+06	9,46E+06
0,293	1,78	2,38E+06	3,11E+06	9,42E+06
0,345	2,83	5,38E+05	5,99E+05	4,82E+06
0,353	3,01	3,73E+05	4,10E+05	3,60E+06
0,564	7,30	6,09E+04	5,71E+04	1,21E+04
0,570	7,43	5,86E+04	5,46E+04	1,73E+04
0,592	7,89	5,30E+04	4,86E+04	2,48E+03
0,606	8,17	5,20E+04	4,75E+04	1,49E+03
0,631	8,67	4,60E+04	4,10E+04	1,37E+02
0,652	9,10	4,46E+04	3,94E+04	4,77E+01
0,702	10,12	4,01E+04	3,43E+04	7,43E-01
0,710	10,28	4,02E+04	3,43E+04	7,58E-01
0,871	13,56	3,43E+04	2,69E+04	9,02E-08
0,975	15,70	2,55E+04	1,93E+04	7,84E-11
0,992	16,03	2,38E+04	1,80E+04	1,18E-12
1,000	16,20	2,24E+04	1,70E+04	2,02E-12

Les courbes représentant la variation de la surface minérale réactive de la calcite selon les modèles de PWP [4] et de Chou et al. [5] ont le même ordre de grandeur. Lorsque le temps de réaction entre la roche et l'eau augmente, la surface réactive de ces minéraux diminue. La variation de cette dernière est interprétée selon deux grandes étapes temporelles. Le premier stade correspond aux trois premiers jours de réaction, le deuxième est compris entre les jours 3 à 17 jours de réaction.

- Durant la première phase de réaction entre la roche et l'eau, la surface minérale réactive de la calcite diminue de manière brusque. Ceci s'explique par l'agressivité de l'eau et le changement de la température du système, qui augmente de $11\pm 1^\circ\text{C}$ à 22°C . Lorsque

l'eau est agressive, elle tend à attaquer la surface de la calcite exposée, ce qui conduit à une altération chimique et la dissolution du calcium dans la solution.

La Figure 5.13 montre l'effet d'agressivité d'eau sur les grains du minéral. Les grains se désolidarisent et leur diamètre diminuent en trois grandes étapes durant le temps de réaction entre l'échantillon et l'eau, jusqu'à la diminution de la surface des grains et l'apparition des petites particules.

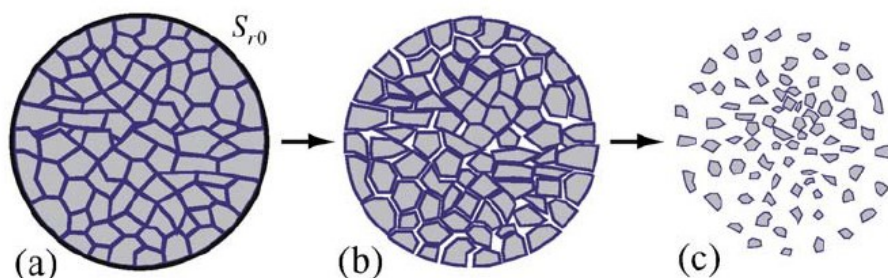


FIGURE 5.13 Processus de dissolution des grains de calcite : (a) grains sphériques dont la surface est S_{r0} , (b) dissociation en petits grains, et (c) particules engendrées suite à la réaction de dissolution du minéral dans la solution, adapté de Noiriel et al. (2009) [18]

- La deuxième phase se déroule de troisième au dix-septième jour de réaction. Pendant cette période, la surface minérale réactive de la calcite diminue lentement. Cela est dû à l'augmentation de la dureté de l'eau qui est liée à la dissolution des ions de calcium et magnésium dans la solution. Lorsque l'eau devient dure, cela entraîne la précipitation d'autres minéraux sur la surface exposée à l'eau. Ce phénomène de précipitation des minéraux est vérifié par le logiciel PHREEQC, qui montre la présence des oxy-hydroxydes de fer dans l'eau, sous forme d'hématite, géotite et magnétite, dont l'indice de saturation est supérieur à 0 (cf. Figure 5.14).

Ainsi, la précipitation de ces minéraux entraîne la formation des phases solides qui attaquent les minéraux carbonatés avoisinants, ralentissant la réaction entre la calcite avec l'eau qui l'entoure.

-Dolomite

La Figure 5.17 montre l'évolution de la surface minérale réactive de la dolomite ($\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$) au cours de l'essai. La tendance de variation de la surface réactive est similaire à celle observée pour la calcite. Ainsi, les mêmes constatations et interprétations peuvent être utilisées à la dolomite.

La surface de la dolomite atteint des valeurs très faibles, voire nulles après 13 jours de réaction ; ceci peut s'expliquer par la précipitation de minéraux d'hydroxydes de fer sur la totalité

de la surface réactive de dolomite. Cette observation est confirmée par les analyses chimiques sur l'eau sortant de la colonne d'essai, qui montrent que la concentration de magnésium présente dans la solution est très faible par rapport aux autres ions majeurs (Voir Figure 5.3).

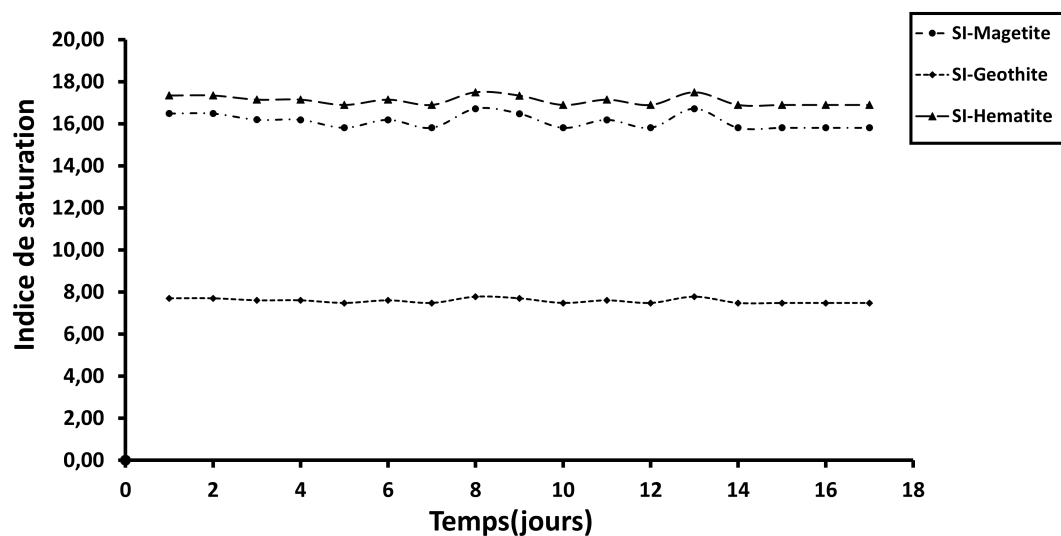


FIGURE 5.14 Évolution de l'indice de saturation de certains minéraux en sortie de la colonne en fonction du temps (Essai 2)

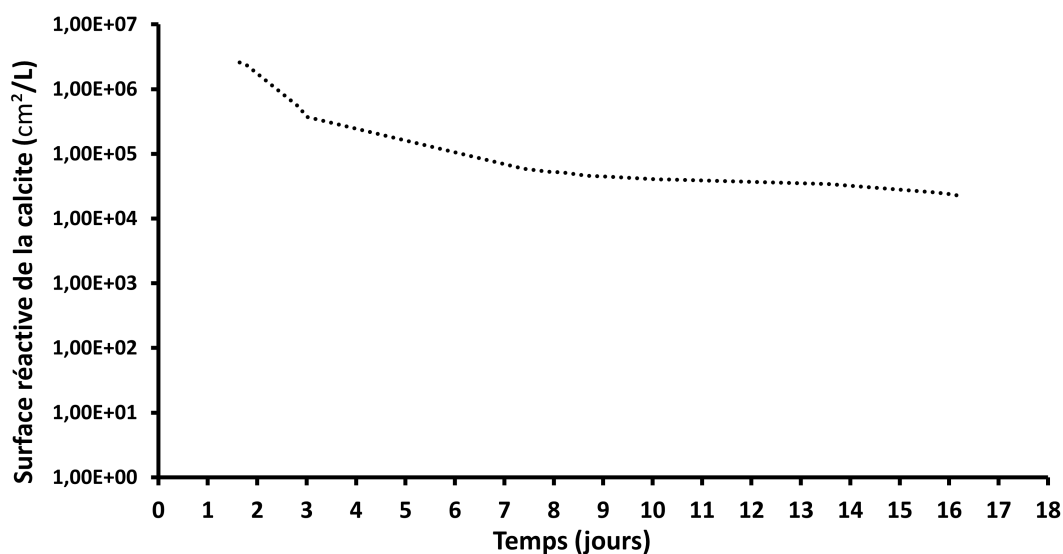


FIGURE 5.15 Évolution de la surface minérale réactive de la calcite selon le modèle de PWP en fonction du temps de réaction

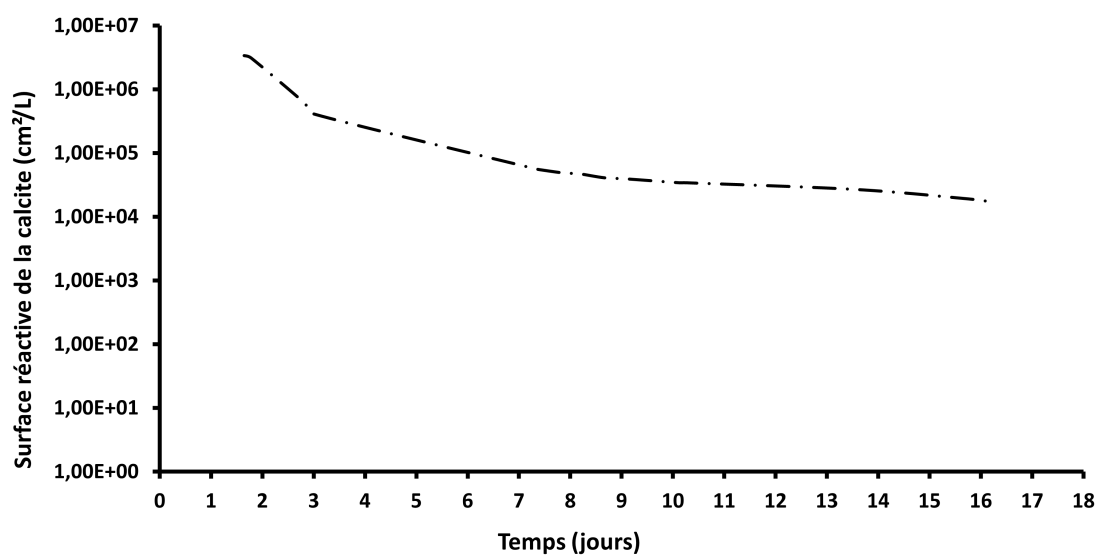


FIGURE 5.16 Évolution de la surface minérale réactive de la calcite selon le modèle de Chou et al. en fonction du temps de réaction

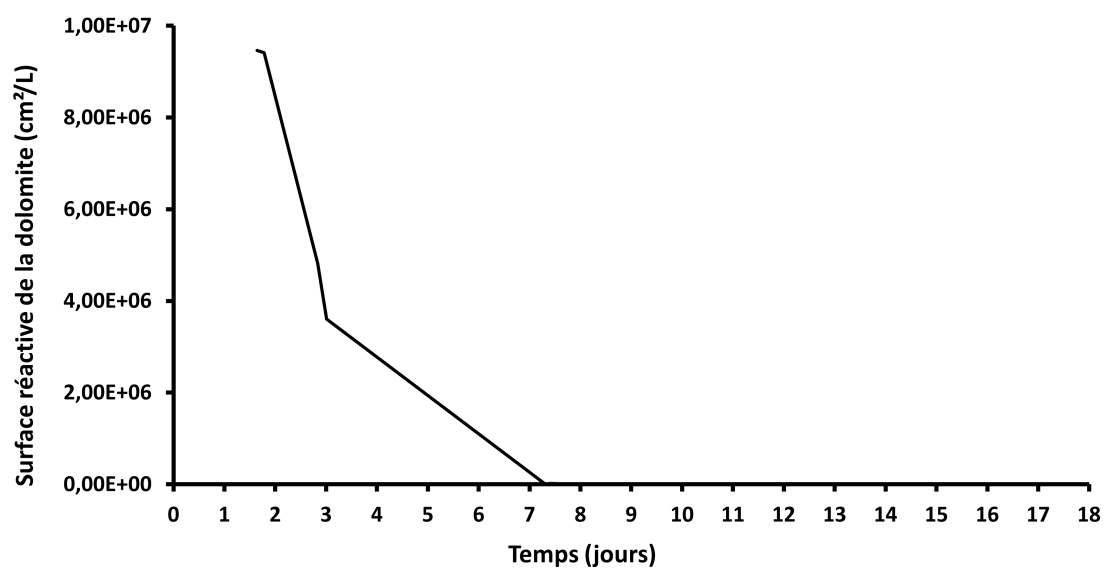


FIGURE 5.17 Évolution de la surface minérale réactive de la dolomite selon le modèle de Busenberg et Plummer en fonction du temps de réaction

5.2.5 Validation de la surface réactive obtenue

Afin de valider l'évolution de la surface minérale réactive des minéraux carbonatés obtenue dans ce travail, les méthodes traditionnelles d'estimation de la surface réactive, notamment la méthode de la surface géométrique ajustée et la méthode BET, sont comparées à l'approche de la modélisation inverse adoptée. Puisqu'il y avait un manque de données publiées autour la surface réactive de la dolomite, cette validation a été effectuée seulement pour la calcite.

Surface géométrique

La première méthode est l'approche la plus simple, basée sur l'estimation de la surface réactive en tant que surface géométrique. Elle consiste en l'évaluation de celle-ci en utilisant une géométrie idéale des grains des minéraux, soit sphérique ou cubique, dont leur diamètre est connu. Le désavantage de cette méthode est la sous-estimation de la surface minérale réactive. Afin de résoudre ce problème, un facteur de rugosité (RF) est pris en considération dans le calcul de la surface. Ce facteur dépend de la matrice géologique et de la méthode de forage utilisée pour l'implantation du système PCP. Typiquement, une valeur de 10 est utilisée dans la littérature [100]. Fréquemment, des facteurs d'échelle (SF, où $SF=10^x$ avec x entre 1 et 3) sont appliqués à la surface spécifique pour tenir compte de la réactivité des sites de surface [95]. La surface géométrique et la surface spécifique réactive sont calculées comme suit [95] :

$$GSA = \frac{A_s}{m} = \frac{4\pi r^2}{4/3\pi\rho r^3} = \frac{3}{r\rho} \quad (5.26)$$

$$SSA = GSA * RF = \frac{3}{r\rho} * RF \quad (5.27)$$

où A_s est la surface totale du grain minéral, m est la masse de la particule, r est le rayon du grain minéral et ρ est la densité du minéral.

Plummer et al. [4], Sjöberg et Rickard [78], et Morse et Mackenzie [26] ont utilisé des roches broyées, avec un diamètre de 100 μm ou moins pour la détermination du taux de dissolution de la calcite [78]. Ainsi, dans cette présente étude, la surface géométrique de ce minéral est calculée en utilisant le diamètre 100 μm , sachant que la densité de la calcite est 2,76 g/cm^3 [101].

BET

Les acronymes de BET proviennent des initiales des trois chercheurs Brunauer, Emmett et Teller qui ont développé une technique pour l'évaluation de la surface spécifique.

Dans cette technique, l'expérience en laboratoire consiste en la mesure de la quantité de gaz inerte (azote) adsorbé sur les particules désagrégées des échantillons de minéraux purs. La surface spécifique de la calcite est déterminée par l'utilisation d'un analyseur BET, permettant de générer la courbe d'adsorption, en mesurant la quantité d'azote adsorbée à différentes pressions d'adsorption. Brunauer. S, Emmett. P. H, et Teller. E ont développé une équation pour déterminer la surface spécifique [96] :

$$C_e = C(P/P_0)^{1/3} = aP + b \quad (5.28)$$

où C_e est la quantité d'azote adsorbé, C est la quantité d'azote adsorbée à saturation, P est la pression d'adsorption, P_0 est la pression de saturation de l'azote, a est une constante liée à la surface spécifique et b est une constante dépendante de la densité de sites sur la surface. La surface spécifique est déterminée en utilisant la pente de la partie linéaire de la courbe d'adsorption, qui représente la constante a dans l'équation 5.28.

Le lecteur est invité à lire les travaux de Brunauer. S, Emmett. P. H, et Teller. E [96] pour mieux comprendre le protocole expérimental réalisé au laboratoire pour l'estimation de la surface réactive d'un tel minéral. Les valeurs de la surface spécifique de la calcite utilisées dans le Tableau 5.10 ont été extraites des études précédemment menées.

Ce tableau représente les différentes valeurs de la surface minérale réactive de la calcite obtenues par les trois approches, soit l'approche inverse développée dans ce travail, l'approche géométrique et l'approche de BET. La Figure 5.18 montre que les valeurs maximales de la surface minérale réactive de la calcite obtenues par l'approche inverse au début de la réaction fluctuent entre les valeurs élevées obtenues par l'approche de surface géométrique (GSA_{RF}) et les valeurs de la méthode BET. Ceci confirme que les valeurs de la surface réactive de la calcite obtenue dans ce travail se situent dans les mêmes ordres de grandeur de celles publiées dans la littérature.

TABLEAU 5.10 Différentes valeurs de la surface minérale réactive de calcite selon les trois approches (approche inverse, approche géométrique et méthode BET)

Approches	Surface minérale (m^2/g)	
Approche inverse selon PWP [4]	Maximale	2,57E-01
	Minimale	2,24E-3
Approche inverse selon Chou et al. [5]	Maximale	3,38E-01
	Minimale	1,70E-3
Approche géométrique	$\text{GSA}_{RF} = \text{GSA} * \text{RF}$	2,25E-01
	$\text{GSA}_{SF} = \text{GSA}_{RF} / \text{SF}$	2,25E-02
BET	Maximale	1,64 ^a
	Minimale	1,39E-02 ^b

Ces données sont collectés de : ^a Cubillas et al. [91] ; ^b Qin et Beckingham [100]

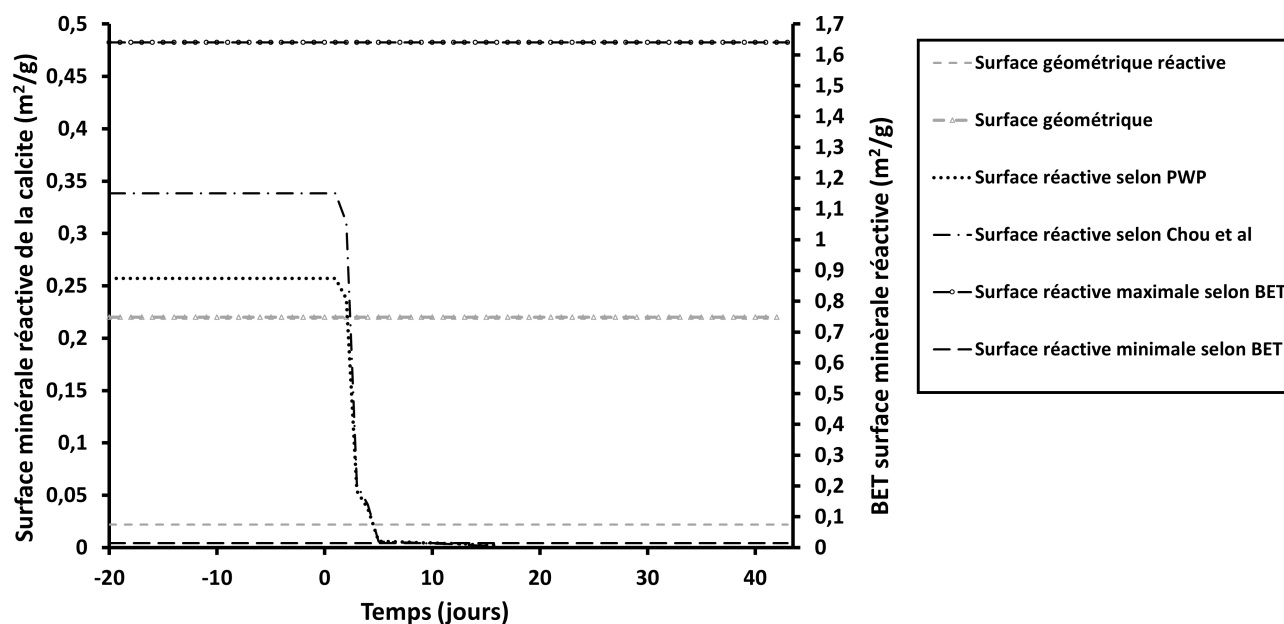


FIGURE 5.18 Variation de la surface minérale réactive de la calcite selon les approches : inverse, géométrique et BET

5.2.6 Cinétique de réaction

La cinétique de réaction est calculée par l'équation déduite de la théorie de l'état de transition [102] :

$$R = -\frac{d[Ca]}{dt} = \frac{A}{V} \times k_c \times (1 - \Omega_{cal})^n \quad (5.29)$$

où R est le taux de dissolution de la calcite (mol/s), $\frac{A}{V}$ est le rapport entre la surface minérale réactive de la calcite et le volume de la solution (m²/L), k_c est la cinétique de réaction (mol/m².L), Ω est l'état de saturation au niveau de calcite et n est l'ordre de réaction. Le terme ($R \frac{V}{A}$) est rassemblé sous un seul terme (R').

La cinétique de réaction est déterminée en dessinant le $\log(R')$ en fonction du $\log(1-\Omega)$. La valeur d'intersection avec l'ordonnée indique la cinétique de réaction k_c , et la pente de la droite fournit l'ordre de réaction n . Les Figures 5.19 et 5.20 illustrent le calcul de la cinétique de réaction selon les modèles PWP et Chou et al. [5].

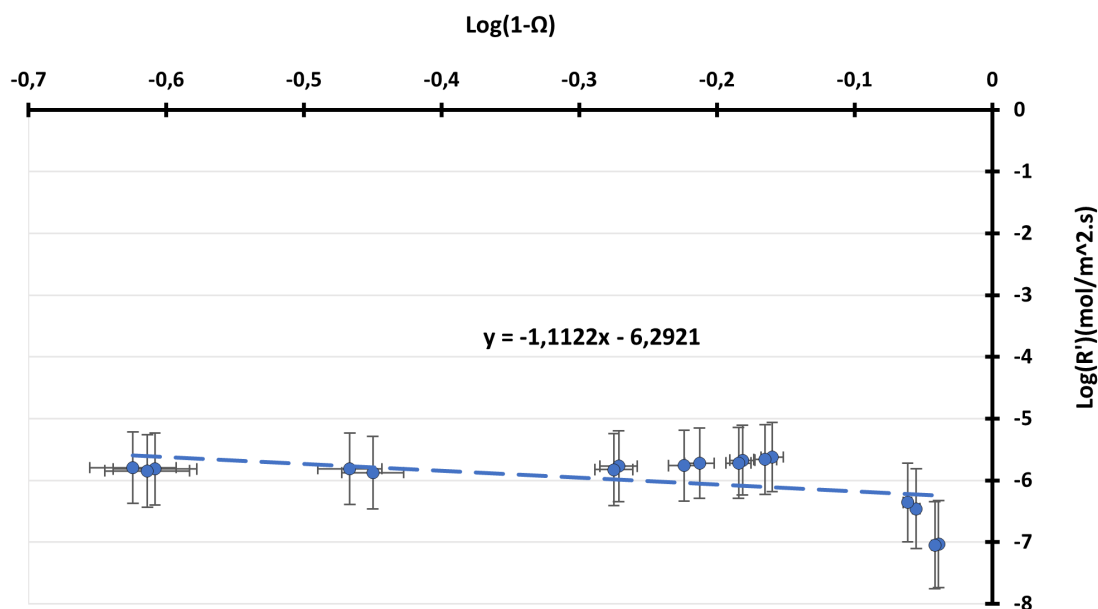


FIGURE 5.19 Cinétique de dissolution de la calcite dans l'eau sous une température de 22°C, selon le modèle de PWP

Il existe dans la littérature des valeurs de cinétique de réaction de la calcite publiées selon des protocoles différents. Palandri et al. (2004) [103] ont publié la cinétique de réaction de 70 minéraux, incluant les minéraux majeurs, dont les silicates, les carbonates et même les minéraux non silicatés sous une température de 25°C, en se basant sur l'équation d'Arrhenius

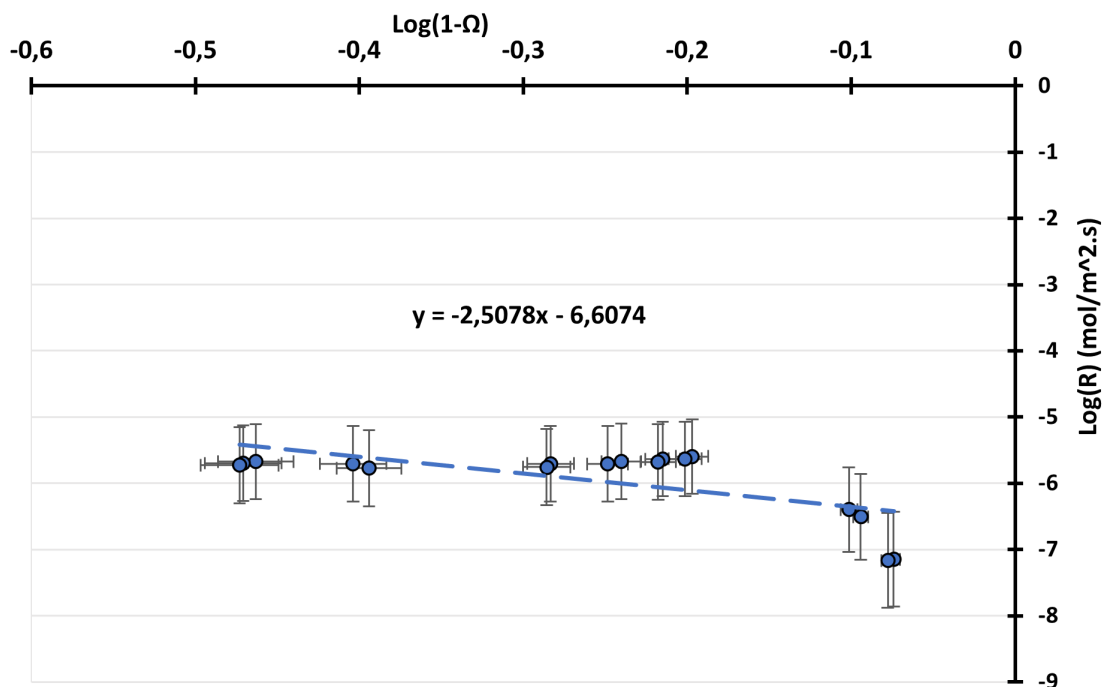


FIGURE 5.20 Cinétique de dissolution de calcite dans l'eau sous une température de 22°C, selon le modèle de Chou et al.

globale du taux de réaction. Ces données ont été utilisées dans un code informatique simulant l'essai en batch. Par ailleurs, Cubillas et al. (2005) [91] ont étudié le taux de dissolution de la calcite, en utilisant l'essai de réacteur mixte. Le Tableau 5.11 présente la cinétique de réaction obtenue dans le présent travail et celles publiées dans la littérature. La cinétique de réaction de la calcite obtenue expérimentalement par l'essai en colonne est inférieure de deux ordres de grandeur à celle obtenue par l'essai en batch, et est également plus élevée de trois ordres de grandeurs que la cinétique de réaction obtenue par l'essai de réacteur mixte.

La différence entre les valeurs de la cinétique de réaction est liée aux spécificités de chaque méthode expérimentale utilisée. Lors de l'essai en batch, toute la surface réactive du minéral est en contact avec la solution, ce qui augmente le taux de dissolution et par conséquent la cinétique de réaction. À l'inverse, dans l'essai en colonne, l'hétérogénéité des grains des minéraux dans l'échantillon implique que seule une fraction de la surface réactive de calcite est exposée à l'eau, ce qui réduit le taux de dissolution et ralentit la cinétique de réaction. Par ailleurs, la technique d'agitation des grains adoptée dans l'essai en batch augmente la cinétique de réaction, en créant des chocs entre les grains permettant aux molécules du minéral et de la solution de réagir plus efficacement. De plus, l'utilisation des minéraux purs

TABLEAU 5.11 Valeurs de la cinétique de réaction de la calcite selon les différents essais réalisés

Essais	$\text{Log}k_c (\text{mol}/\text{m}^2.\text{s})$	n	Références
Essai en batch	-3.48	1	Palandri et al. [103]
Essai de colonne à flux continu réalisé dans la présente étude	-6.39	1	Approche inverse basée sur le modèle de PWP [4]
	-6.6	2	Approche inverse basée sur le modèle de Chou et al. [5]
Essai de réacteur mixte	-9.73	1	Cubillas et al. [91]

dans l'essai en batch, caractérisés par une composition chimique homogène rend le taux de dissolution plus rapide par rapport à celui d'un assemblage minéralogique hétérogène.

La cinétique de réaction de la calcite dans le réacteur mixte est lente puisque les auteurs [91] ont utilisé la surface géométrique pour l'estimation de taux de dissolution et non pas la surface réactive. Ces deux surfaces ne sont pas nécessairement égales, certains minéraux peuvent présenter une surface géométrique faible, mais une surface réactive importante. Comme l'utilisation de la surface géométrique totale sous-estime la valeur réelle de la cinétique de réaction, il est donc important de prendre en compte la surface réactive d'un minéral pour une meilleure évaluation de ce paramètre.

En résumé, il n'existe pas une valeur exacte de la cinétique de réaction de la calcite. Celle-ci varie selon la composition de l'eau, la structure cristalline de minéral, l'état de saturation, la taille des grains, les conditions expérimentales, ainsi que l'existence d'inhibiteurs dans l'échantillon qui peuvent ralentir les réactions.

5.3 Implication géologique

La modélisation du transport réactif de l'eau autour d'un échantillon de roche a permis de déterminer la surface minérale réactive comme un paramètre de calage entre les résultats expérimentaux et les résultats de simulation. Il est important de noter que la surface totale est différente de la surface réactive de chaque minéral et que les valeurs obtenues ne peuvent pas être extrapolées à d'autres sites. La méthodologie expérimentale et la modélisation pourraient toutefois facilement être répliquées.

La méthode de l'approche inverse adoptée dans ce travail a permis l'estimation de la surface minérale réactive en utilisant les concentrations des espèces dissoutes dans l'eau. Cette approche a été limitée aux minéraux carbonatés, tels la dolomite et la calcite puisque leur présence caractérise les roches des basses terres du Saint-Laurent et qu'elles peuvent engendrer des problèmes fonctionnels à long terme pour les PCP. Par ailleurs, l'essai pilote de colonne à flux continu réalisé en laboratoire est proche des conditions d'un système géothermique de type PCP, reproduisant à échelle réduite les processus d'écoulement de l'eau dans un puits à recirculation. Ainsi, la surface minérale réactive obtenue par l'approche inverse pourrait être considérée comme une tendance générale à l'échelle réelle, mais plusieurs caractéristiques du site doivent être prises en considération comme la présence de fractures dans la matrice géologique, qui ont un effet sur la surface minérale réactive.

La détermination de la surface réactive de la calcite conduit à l'obtention de sa cinétique de réaction. Arrhenius a développé une équation permettant d'évaluer la cinétique de réaction en fonction de la variation de température du milieu [3] :

$$K = A.Exp(\frac{-E_a}{RT}) \quad (5.30)$$

Où A est la constante d'Arrhenius, R est la constante des gaz parfaits ($8,314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$), T est la température absolue (K) et E_a est l'énergie d'activation du minéral. Cette dernière égale à 35 KJ.mol^{-1} dans les réactions de dissolution de la calcite [103].

Afin d'évaluer la cinétique de réaction de la calcite in situ, l'équation d'Arrhenius pourrait être utilisée pour déterminer ce paramètre en fonction de la variation de la température de l'eau souterraine sortant du PCP. Puisqu'il y avait un manque de connaissance sur la constante d'Arrhenius A , la cinétique de réaction obtenue en laboratoire a été utilisée comme référence de cinétique. En remplaçant k_c et la température de l'essai dans l'équation 5.30, on obtient :

$$k_c = A.Exp(\frac{-E_a}{RT_{22}}) \quad (5.31)$$

L'équation 5.32 élaborée à partir des équations 5.30 et 5.31 permet d'évaluer la cinétique de réaction de la calcite en fonction de la température de l'eau souterraine sortant de PCP.

$$\frac{K}{k_c} = exp(\frac{-E_a}{R} \cdot (\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{22}})) \quad (5.32)$$

La Figure 5.21 montre que lorsque la température du milieu augmente, la cinétique de réaction des minéraux augmente également. L'équation d'Arrhenius utilisée est considérée comme une

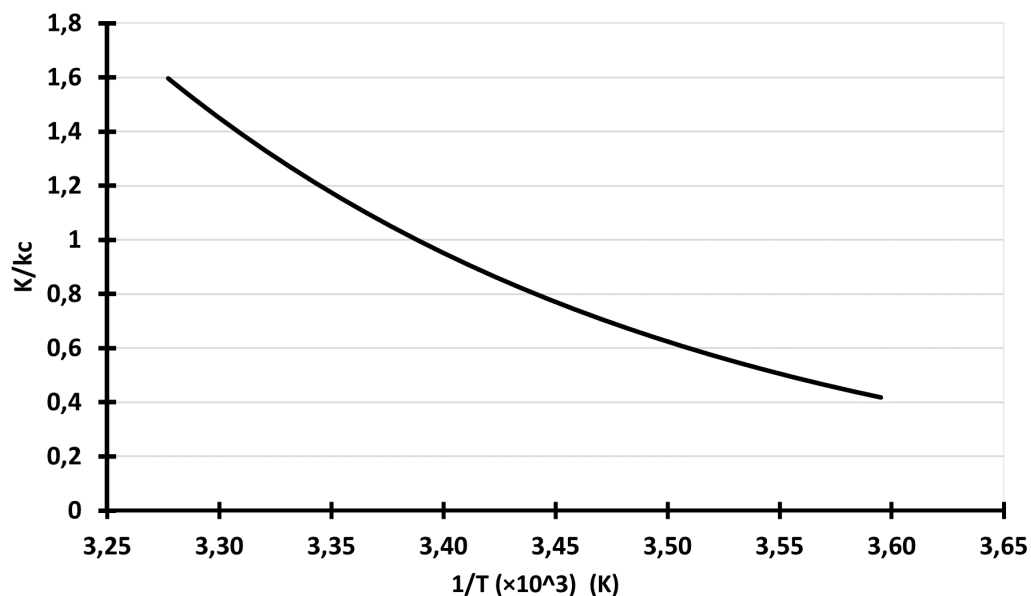


FIGURE 5.21 Variation de la cinétique de réaction de la calcite en fonction de l'inverse de température de l'eau souterraine en sortie de PCP

première approximation pour extrapoler la cinétique de réaction obtenue en laboratoire à des températures différentes, mais il est important de noter qu'il y a une différence entre les conditions expérimentales contrôlables en laboratoire et les conditions réelles. L'équation d'Arrhenius utilisée ne tient pas compte de l'effet de dégazage de CO_2 dans le système, et de la présence des inhibiteurs dans la formation géologique du site qui peuvent ralentir la cinétique de réaction. Ainsi, afin d'adapter les cinétiques obtenues à la Figure 5.21 aux conditions réelles, il est nécessaire d'émettre des hypothèses basées sur le contrôle des facteurs ayant un effet sur les paramètres physico-chimiques de l'eau souterraine.

CHAPITRE 6 DISCUSSION GÉNÉRALE

Ce chapitre présente une étude sur les différents paramètres caractérisant un système géothermique, notamment l'écoulement de l'eau souterraine, le transfert de chaleur et la variation géochimique dans le PCP, ainsi que les essais in situ et en laboratoire réalisés pour les déterminer. Par la suite, l'utilisation de ces paramètres pour le développement d'un modèle Thermo-Hydro-Géochimique (THG) simulant le comportement d'un PCP dans un tel site d'étude est présentée.

6.1 Analyse paramétrique

Le développement d'un modèle THG comprenant les trois processus de fonctionnement d'un PCP, tel que l'écoulement de l'eau souterraine dans le puits et la matrice géologique environnante, l'impact thermique et les mécanismes géochimiques, nécessite la connaissance de chaque paramètre d'influence. Il existe des paramètres locaux et des paramètres liés à la construction et l'opération d'un PCP [21] :

Paramètres locaux :

- Socle rocheux compétent et peu profond ;
- Nappe phréatique peu profonde ;
- Conductivité thermique importante ;
- Conductivité hydraulique moyenne à élevée ;
- Eau souterraine peu réactive.

Paramètres de construction et d'opération :

- Longueur du puits estimée entre 4.3 et 5.3 mètres de forage par kW de charge du bâtiment ;
- Saignée allant jusqu'à 30% du débit pompé.

Le développement d'un modèle d'écoulement de l'eau souterraine dans le puits et l'aquifère dépend de plusieurs paramètres, dont la conductivité hydraulique de la matrice géologique, sa perméabilité, la porosité de l'aquifère et le débit de pompage. Par ailleurs, la présence de fractures dans l'aquifère devrait être prise en considération dans le modèle. En effet, leur existence dans la matrice géologique améliore le fonctionnement du système géothermique, notamment en période de pointe où l'activation de la saignée est importante. Les fractures facilitent l'écoulement de l'eau souterraine vers le puits de pompage, en créant des chemins préférentiels. Par contre, si ces fissures sont proches de la surface, les variations saisonnières

de température peuvent avoir une influence défavorable sur le transport d'eau, notamment en hiver [21, 23].

En ce qui concerne le modèle thermique, la simulation de la variation de la température au sein d'un PCP et de l'aquifère environnant nécessite une étude des propriétés thermiques, y compris la conductivité thermique et la capacité thermique du fluide, des tuyaux et de l'aquifère. Le transfert de chaleur dans le système est gouverné par l'équation de la conservation de l'énergie qui dépend des propriétés thermiques du site, obtenues par des essais in situ ou en laboratoire (Tableau 6.1).

Pour le modèle géochimique, les variations de la température au sein du système géothermique sont considérées comme le facteur majeur, ayant un impact important sur la chimie des minéraux, notamment sur la cinétique de réaction. Si on utilise des logiciels de spéciation chimique comme PHREEQC, il est important de faire attention à la base de données, qui utilise souvent des minéraux purs. Dans le cas de la calcite, le logiciel PHREEQC utilise le modèle de PWP pour le calcul de la cinétique de réaction de ce minéral. L'approche inverse proposée dans la présente étude permet d'estimer la cinétique de réaction de la calcite présente dans la roche carbonatée prélevée sur un site d'étude et donc de donner des simulations plus représentatives des conditions réelles.

Les résultats obtenus montrent que la cinétique de réaction de la calcite présente dans l'échantillon est de deux ordres de grandeur plus lente que celle utilisée dans la base de données du PHREEQC. Cela est dû à l'hétérogénéité de la roche étudiée qui est composée d'un assemblage minéralogique. En effet, l'interaction eau-roche engendre des réactions de dissolution de CaCO_3 dans l'eau et de précipitation d'autres minéraux qui se déposent sur la surface minérale réactive de la calcite, empêchant cette dernière de réagir avec la solution. Ainsi, le taux de réaction de la calcite dans la solution est ralenti. Le Tableau 6.1 résume les différents paramètres nécessaires pour le développement d'un modèle Thermo-Hydro-Géochimique et les essais in situ et en laboratoire pour les déterminer [21].

6.2 Modèle thermo-hydro-géochimique

Dans un système géothermique, le développement d'un modèle numérique décrivant les mécanismes thermique, hydraulique et géochimique permet de se rapprocher de la réalité des mécanismes dans un PCP. Le comportement du système pourrait ainsi être déterminé en tout point du modèle [25]. Par ailleurs, une telle étude numérique permettrait l'évaluation des paramètres favorables à l'installation d'un PCP et sa performance à long terme. Les paramètres d'entrées utilisés pour la simulation sont ceux obtenus par les essais en laboratoire

TABLEAU 6.1 Série d'essais expérimentaux réalisés en laboratoire et in situ pour la caractérisation thermo-hydro-géochimique d'un site d'étude

Essais	Paramètres
Analyse macroscopique des déblais de forage	Nature et profondeur du socle rocheux
Essais de pompage	Profondeur du niveau statique Emmagasinement spécifique Conductivité hydraulique
Profils de température	Gradient géothermique
Essai de conductivité à l'aiguille	Conductivité thermique (laboratoire)
Essai de réponse thermique	Conductivité thermique (in situ)
Essai de colonne à flux continu	Cinétique de réaction des minéraux

et in situ comme indiqué dans le Tableau 6.1.

La Figure 6.1 propose un cheminement d'essais à réaliser et les paramètres obtenus afin de développer un modèle Thermo-Hydro-Géochimique. La partie encadrée en vert a été réalisée dans le cadre de ce travail. Le logiciel PHREEQC pourrait être utilisé pour simuler les processus de précipitation et dissolution de la calcite dans l'eau et créer un modèle cinétique de PCP. Ce logiciel contient des bases de données thermodynamiques sous forme des fichiers, les réactions chimiques contenant le taux de réaction, ainsi que les constantes de réaction des minéraux purs. La surface minérale réactive pourrait ainsi être définie à l'aide du mot clé "KINETICS" et le mot clé "RATE" pourrait être utilisé pour introduire le taux de réaction du minéral étudié.

Il est difficile d'insérer une géométrie complexe dans le logiciel PHREEQC, mais la modélisation de l'écoulement de l'eau est possible selon une seule direction 1D [72]. Ainsi, afin de modéliser l'intégralité d'un PCP, il serait nécessaire de coupler le logiciel PHREEQC avec un logiciel multiphysique de type COMSOL.

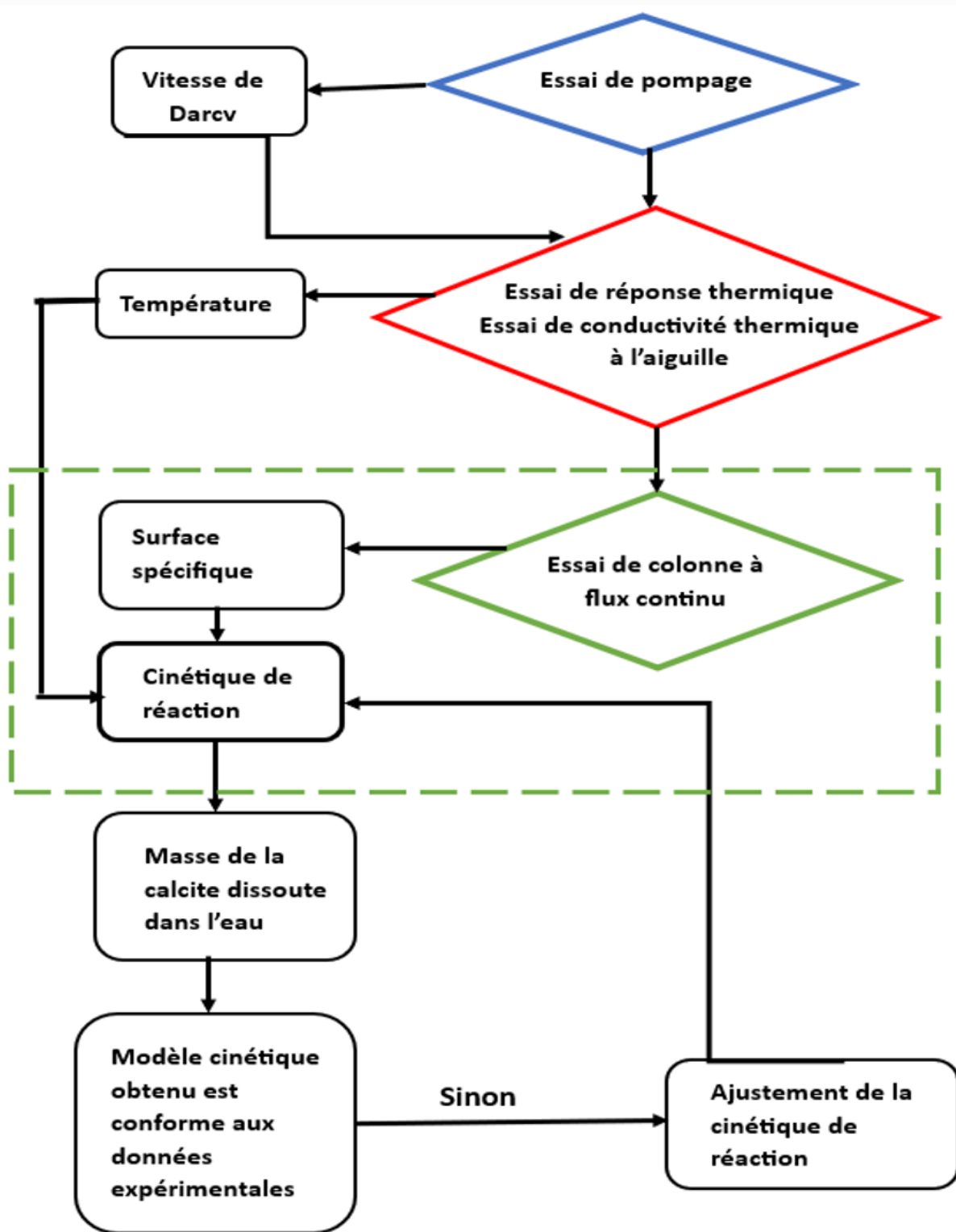


FIGURE 6.1 Proposition de logigramme pour le développement d'un modèle Thermo-Hydro-Géochimique d'un PCP

CHAPITRE 7 CONCLUSION

7.1 Synthèse des travaux

Dans le cadre de ce mémoire de maîtrise, un essai de colonne à flux continu a été réalisé en laboratoire afin d'étudier la dissolution de la roche carbonatée prélevée du site d'étude et évaluer les cinétiques de réaction sous une température de 22°C. Cet essai est considéré plus représentatif par rapport aux autres essais conventionnels utilisés, puisqu'il simule l'écoulement de l'eau souterraine dans un PCP.

En adoptant la méthode de l'approche inverse, la surface minérale réactive des minéraux carbonatés, tels que la dolomite et la calcite a été évaluée en fonction de temps de l'essai en utilisant le modèle de Plummer, Wigley et Parkhurst (PWP) et de Chou et al [5]. À partir des résultats, on constate que la surface réactive n'est pas stable durant le temps de réaction, comme souvent estimé dans la modélisation, et que sa variation démontre la présence de réactions de précipitation d'autres minéraux comme les hydroxydes de fer à la surface de la calcite, empêchant cette dernière de se dissoudre.

Durant l'essai, la cinétique de réaction de la calcite était lente, puisque l'échantillon utilisé était une roche carbonatée et non pas de la calcite pure. Ce paramètre obtenu sous une température de 22°C a été utilisé pour extrapoler les cinétiques de réactions sous différentes températures de l'eau souterraine dans un PCP.

7.2 Représentativité de l'essai à colonne

Il existe des protocoles expérimentaux présentés dans la section de revue de littérature permettant l'étude de la dissolution de la calcite et la dolomite. Dans ce travail, le montage expérimental de colonne à flux continu est considéré comme plus représentatif du système PCP, pour les raisons suivantes :

- Cet essai simule l'écoulement de l'eau dans un PCP en cycle fermé. En effet, l'eau souterraine est pompée puis réinjectée dans le même aquifère. Ce cheminement est représenté dans l'essai par le transport de l'eau du bas vers le haut de la colonne à l'aide d'une pompe péristaltique, puis son retour vers le réservoir tampon utilisé dans le montage expérimental.
- L'essai pilote repose sur l'écoulement de l'eau autour d'une carotte de roche intacte

prélevée du site d'installation prévu d'un PCP, ce qui est plus représentatif que l'utilisation d'une roche broyée.

- Contrairement à l'essai en batch, qui est souvent utilisé pour étudier la dissolution des minéraux, l'essai en colonne permet le couplage des phénomènes géochimiques et le transport hydrodynamique. Ces deux derniers phénomènes sont présents au sein du PCP.

7.3 Recommandations

Ce travail de recherche a permis l'étude de la cinétique de réaction de la calcite, en se basant sur la variation de la surface minéral réactive obtenue par l'approche inverse. Cependant, plusieurs points dans ce projet pourraient être développés :

- La surface minérale réactive de la calcite et de la dolomite a été évalué sous une température de 22°C, en utilisant l'approche inverse. Il serait intéressant d'utiliser cette dernière pour l'étude de la surface réactive pour une plage de température très large, ce qui permettrait de valider les cinétiques de réaction obtenues par l'équation d'Arrhenius.
- Dans ce projet, le minéral étudié est de type calcaire, puisque ce minéral est très soluble et qu'il pourrait engendrer des problèmes opérationnels à long terme dans le système géothermique. Il serait toutefois intéressant d'utiliser l'approche développée dans ce travail pour les minéraux silicatés.
- La surface minérale réactive de la calcite et sa cinétique de réaction obtenues peuvent être intégrées dans un modèle géochimique afin de construire un modèle cinétique capable d'évaluer le comportement d'un PCP face à la dissolution et la précipitation des minéraux carbonatés lors de son fonctionnement.

RÉFÉRENCES

- [1] K. M. ZAI, R. NAWAZ, I. A. Bhatti et H. N. BHATTI, “A phs equation for calcium carbonate scale prediction in cooling water systems,” *Journal of the Chemical Society of Pakistan*, vol. 30, n°. 6, p. 182, 2011.
- [2] M. Kurdi, M. S. Ferdows et A. Maghsoudi, “Sensitivity of corrosion and scaling indices based on ions ; case study iran,” *Water Quality, Exposure and Health*, vol. 7, n°. 3, p. 363–372, 2015.
- [3] C. A. J. Appelo et D. Postma, *Geochemistry, groundwater and pollution*. CRC press, 2004.
- [4] L. Plummer, T. Wigley et D. Parkhurst, “The kinetics of calcite dissolution in co 2-water systems at 5 degrees to 60 degrees c and 0.0 to 1.0 atm co 2,” *American journal of science*, vol. 278, n°. 2, p. 179–216, 1978.
- [5] L. Chou, R. M. Garrels et R. Wollast, “Comparative study of the kinetics and mechanisms of dissolution of carbonate minerals,” *Chemical geology*, vol. 78, n°. 3-4, p. 269–282, 1989.
- [6] E. Busenberg et N. Plummer, “The kinetics of dissolution of dolomite in co2-h2o systems at 1.5 to 65oc and 0 to 1 atm pco2,” *American Journal of Science*, vol. 282, n°. 1, p. 45–78, 1982.
- [7] F. Eppner, “Évolution thermo-hydro-géochimique d’un puits à colonne permanente conduisant à la précipitation et à la dissolution de la calcite,” Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, Montreal (Canada), 2016.
- [8] C. D. Orio, C. N. Johnson et K. D. Poor, “Geothermal standing column wells : Ten years in a new england school/discussion,” *ASHRAE transactions*, vol. 112, p. 57, 2006.
- [9] L. Cerclet, B. Courcelles et P. Pasquier, “Impact of standing column well operation on carbonate scaling,” *Water*, vol. 12, n°. 8, p. 2222, 2020.
- [10] J. É. Croteau, “Évaluation des paramètres influençant les températures d’opération des puits à colonne permanente,” 2011.
- [11] F.-A. Comeau, K. Bédard et M. Malo, “Les régions de nicolet et de villeroy : état des connaissances pour le stockage géologique du co2.” 2012.
- [12] A. Bériault et G. Simard, *Carte hydrogéologique de l’Ile de Montréal et des Iles Perrot et Bizard [Quebec]*. Gouvernement du Québec, Ministère des richesses naturelles, Direction . . . , 1978.

- [13] S. F. Boerlage, M. D. Kennedy, M. P. Aniye, E. Abogrean, Z. S. Tarawneh et J. C. Schippers, “The mfi-uf as a water quality test and monitor,” *Journal of Membrane Science*, vol. 211, n^o. 2, p. 271–289, 2003.
- [14] M. Alkattan, E. H. Oelkers, J.-L. Dandurand et J. Schott, “An experimental study of calcite and limestone dissolution rates as a function of ph from- 1 to 3 and temperature from 25 to 80 c,” *Chemical geology*, vol. 151, n^o. 1-4, p. 199–214, 1998.
- [15] fiatlux.tk. (2023) Quartiers de Montréal-Québec. [En ligne]. Disponible : <https://local.fiatlux.tk/montreal/quartiers>
- [16] Google, “Google Earth Pro,” Mars 2023. [En ligne]. Disponible : <https://www.google.com/earth/versions/>
- [17] K. Bédard, F.-A. Comeau, J. Raymond, E. Gloaguen, G. Comeau, E. Millet et S. Foy, “Cartographie de la conductivité thermique des basses-terres du saint-laurent.” 2018.
- [18] C. Noiriel, L. Luquot, B. Madé, L. Raimbault, P. Gouze et J. van der Lee, “Changes in reactive surface area during limestone dissolution : An experimental and modelling study,” *Chemical Geology*, vol. 265, n^o. 1-2, p. 160–170, 2009.
- [19] Régie de l’énergie du Canada, “Profils énergétiques des provinces et territoires-canada,” 2023. [En ligne]. Disponible : <https://www.cer-rec.gc.ca/fr/donnees-analyse/marches-energetiques/profils-energetiques-provinces-territoires/profils-energetiques-provinces-territoires-canada.html>
- [20] Gouvernement du Canada, “Plan climatique canadien,” 2023. [En ligne]. Disponible : <https://www.canada.ca/fr/services/environnement/meteo/changementsclimatiques/plan-climatique.html>
- [21] P. Pasquier, “GML6113 géothermie de basse température,” 2022, Cours universitaire.
- [22] CCEG, “État de l’industrie canadienne de la géothermie 2011 : Analyse du marché et enquête de l’industrie,” 2012.
- [23] M. Delestre, “Évaluation expérimentale de l’impact de l’opération d’un puits à colonne permanente sur les risques de précipitation minérale dans un aquifère carbonaté,” 2021.
- [24] C. D. Orio, A. Chiasson, C. N. Johnson, Z. Deng, S. J. Rees et J. D. Spitler, “A survey of standing column well installations in north america.” *ASHRAE transactions*, vol. 111, n^o. 2, 2005.
- [25] P. Brunet, “Détermination expérimentale des constantes de réaction influençant la dissolution d’une roche carbonatée à différentes températures,” 2017.
- [26] J. W. Morse et F. T. Mackenzie, *Geochemistry of sedimentary carbonates*. Elsevier, 1990.

- [27] D. Banks, *An introduction to thermogeology : ground source heating and cooling*. John Wiley & Sons, 2012.
- [28] J. D. Spitler, S. J. Rees, Z. Deng, A. Chiasson, C. D. Orio et C. Johnson, “R&d studies applied to standing column well design,” *ASHRAE research project*, 2002.
- [29] K. S. Lee, “Underground thermal energy storage,” dans *Underground Thermal Energy Storage*. Springer, 2013, p. 15–26.
- [30] D. Ball, R. Fischer et D. Hodgett, “Design methods for ground-source heat pumps,” *NASA STI/Recon Technical Report N*, vol. 83, p. 36428, 1983.
- [31] B. Sanner, “Ground source heat pumps–history, development, current status, and future prospects,” dans *12th IEA Heat Pump Conference*, 2017, p. 1–14.
- [32] I. Sarbu et C. Sebarchievici, “General review of ground-source heat pump systems for heating and cooling of buildings,” *Energy and buildings*, vol. 70, p. 441–454, 2014.
- [33] L. R. Ingersoll, “Theory of the ground pipe heat source for the heat pump,” *Heating Piping and Air Conditioning*, vol. 20, p. 119–122, 1948.
- [34] P. Eskilson, “Thermal analysis of heat extraction boreholes,” 1987.
- [35] J. W. Lund et T. L. Boyd, “Direct utilization of geothermal energy 2015 worldwide review,” *Geothermics*, vol. 60, p. 66–93, 2016.
- [36] S. Rees, *Advances in ground-source heat pump systems*. Woodhead Publishing, 2016.
- [37] V. Laroche, P. Pasquier et B. Courcelles, “Integration of standing column wells in urban context : A numerical investigation-case in the city of montreal,” *Sustainable Cities and Society*, vol. 78, p. 103513, 2022.
- [38] D. Banks, “An introduction to thermogeology : Ground source heating and cooling, 1st edn wiley-blackwell,” 2008.
- [39] H.-k. Choi, G.-j. Yoo, K.-b. Lim, S.-h. Lee et C.-h. Lee, “Characteristic analysis of bleeding effect on standing column well (scw) type geothermal heat exchanger,” *Journal of Central South University*, vol. 19, n^o. 11, p. 3202–3207, 2012.
- [40] A. Nguyen, G. Beaudry et P. Pasquier, “Experimental assessment of a standing column well performance in cold climates,” *Energy and Buildings*, vol. 226, p. 110391, 2020.
- [41] P. Pasquier, dans *2020-10-21 Webinaire Puits à colonne permanente_Avancements récents et éléments de conception*. Québec, Canada : Réseau Énergie et Bâtiments, 21 Octobre 2020, Conférence.
- [42] S. Pandey, A. Chaudhuri, H. Rajaram et S. Kelkar, “Fracture transmissivity evolution due to silica dissolution/precipitation during geothermal heat extraction,” *Geothermics*, vol. 57, p. 111–126, 2015.

- [43] P. Pasquier, A. Nguyen, F. Eppner, D. Marcotte et P. Baudron, “Standing column wells,” dans *Advances in ground-source heat pump systems*. Elsevier, 2016, p. 269–294.
- [44] S. J. Rees, J. D. Spitler, Z. Deng, C. D. Orio et C. N. Johnson, “A study of geothermal heat pump and standing column well performance.” *ASHRAE transactions*, vol. 110, n^o. 1, 2004.
- [45] Z. Deng, *Modeling of standing column wells in ground source heat pump systems*. Oklahoma State University, 2004.
- [46] E. Abu-Nada, B. Akash, I. Al-Hinti, A. Al-Sarkhi, S. Nijmeh, A. Ibrahim et A. Shishan, “Modeling of a geothermal standing column well,” *International Journal of Energy Research*, vol. 32, n^o. 4, p. 306–317, 2008.
- [47] A. Nguyen, P. Pasquier et D. Marcotte, “Thermal resistance and capacity model for standing column wells operating under a bleed control,” *Renewable Energy*, vol. 76, p. 743–756, 2015.
- [48] F. Eppner, P. Pasquier et P. Baudron, “A coupled thermo-hydro-geochemical model for standing column well subject to co2 degassing and installed in fractured calcareous aquifers,” *Geomechanics for Energy and the Environment*, vol. 11, p. 14–27, 2017.
- [49] Légis Québec, “Réglement sur le prélèvement des eaux et leur protection,” 2022. [En ligne]. Disponible : <https://www.legisquebec.gouv.qc.ca/fr/document/rc/Q-2.html>
- [50] F.-A. Comeau et J. Raymond, “Revue de la littérature sur les règlements et les normes relatifs aux systèmes de pompes à chaleur géothermique face à la protection des prélèvements d’eau.” 2018.
- [51] S. Haehnlein, P. Bayer et P. Blum, “International legal status of the use of shallow geothermal energy,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 14, n^o. 9, p. 2611–2625, 2010.
- [52] J. Keyser, “La géologie de montréal,” dans *Congrès international de mécanique des sols*, Montréal, 1965.
- [53] N. Lepage, “Modélisation tridimensionnelle régionale et locale de l’écoulement de l’eau souterraine sur l’île de montréal et au centre de tri et d’élimination des déchets de la ville de montréal.” Thèse de doctorat, Université du Québec, Institut national de la recherche scientifique, 1996.
- [54] L. Boyer, A. Bensoussan, M. Durand, R. H. Grice et J. Berard, “Geology of montreal, province of quebec, canada,” *Bulletin of the Association of Engineering Geologists*, vol. 22, n^o. 4, p. 329–394, 1985.

- [55] K. D. Rafferty, “Water chemistry issues in geothermal heat pump systems,” *ASHRAE transactions*, vol. 110, p. 550, 2004.
- [56] H. Y. Jeong, S.-C. Jun, J.-Y. Cheon et M. Park, “A review on clogging mechanisms and managements in aquifer storage and recovery (asr) applications,” *Geosciences Journal*, vol. 22, n^o. 4, p. 667–679, 2018.
- [57] S. Rinck-Pfeiffer, S. Ragusa, P. Sztajn bok et T. Vandev elde, “Interrelationships between biological, chemical, and physical processes as an analog to clogging in aquifer storage and recovery (asr) wells,” *Water Research*, vol. 34, n^o. 7, p. 2110–2118, 2000.
- [58] R. Martin, “Clogging issues associated with managed aquifer recharge methods,” *IAH Commission on Managing Aquifer Recharge, Australia*, p. 26–33, 2013.
- [59] G. Hackett et J. H. Lehr, *Iron Bacteria Occurrence : Problems and Control Methods in Water Wells*. National Water Well Association, 1985.
- [60] M. Rebhun et J. Schwarz, “Clogging and contamination processes in recharge wells,” *Water Resources Research*, vol. 4, n^o. 6, p. 1207–1217, 1968.
- [61] P. Vandevivere, P. Baveye, D. S. de Lozada et P. DeLeo, “Microbial clogging of saturated soils and aquifer materials : Evaluation of mathematical models,” *Water Resources Research*, vol. 31, n^o. 9, p. 2173–2180, 1995.
- [62] J.-P. Gauthier et O. Banton, “Problématique environnementale des pompes à chaleur au québec : bilan de la situation au québec, problématique environnementales et aspects de la réglementation.” 1992.
- [63] D. Thomas et J. Gudmundsson, “Advances in the study of solids deposition in geothermal systems,” *Geothermics*, vol. 18, n^o. 1-2, p. 5–15, 1989.
- [64] S. Chan, H. Rau, C. DeBellis et K. Neusen, “Silica fouling of heat transfer equipment—experiments and model,” 1988.
- [65] J. Griffioen et C. A. J. Appelo, “Nature and extent of carbonate precipitation during aquifer thermal energy storage,” *Applied Geochemistry*, vol. 8, n^o. 2, p. 161–176, 1993.
- [66] S. Gjengedal, R. K. Ramstad, B. O. Hilmo et B. S. Frengstad, “Fouling and clogging surveillance in open loop gshp systems,” *Bulletin of Engineering Geology and the Environment*, vol. 79, n^o. 1, p. 69–82, 2020.
- [67] S. Gjengedal, R. Ramstad, B. Hilmo et B. Frengstad, “Fouling and clogging surveillance in open loop gshp systems. a systematic procedure for fouling and clogging detection in the whole groundwater circuit,” *Bull. Eng. Geol. Environ*, 2019.
- [68] P. Böckh et T. Wetzel, *Heat transfer : basics and practice*. Springer Science & Business Media, 2011.

- [69] G. R. Jonsson, S. Lalot, O. P. Palsson et B. Desmet, “Use of extended kalman filtering in detecting fouling in heat exchangers,” *International journal of heat and mass transfer*, vol. 50, n°. 13-14, p. 2643–2655, 2007.
- [70] K. Rafferty, “Scaling in geothermal heat pump systems,” 1999.
- [71] Y. Park, N. Kim et J.-Y. Lee, “Geochemical properties of groundwater affected by open loop geothermal heat pump systems in korea,” *Geosciences Journal*, vol. 19, n°. 3, p. 515–526, 2015.
- [72] D. L. Parkhurst, C. Appelo *et al.*, “User’s guide to phreeqc (version 2) : A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations,” *Water-resources investigations report*, vol. 99, n°. 4259, p. 312, 1999.
- [73] L. N. Plummer et E. Busenberg, “The solubilities of calcite, aragonite and vaterite in co₂-h₂o solutions between 0 and 90 c, and an evaluation of the aqueous model for the system caco₃-co₂-h₂o,” *Geochimica et cosmochimica acta*, vol. 46, n°. 6, p. 1011–1040, 1982.
- [74] A. C. Lasaga et A. C. Lasaga, *Kinetic theory in the earth sciences*. JSTOR, 1998, vol. 811.
- [75] A. Olivier, *Chimie et pollutions des eaux souterraines*. Lavoisier, 2015.
- [76] P. A. Domenico, F. W. Schwartz *et al.*, *Physical and chemical hydrogeology*. Wiley New York, 1998, vol. 506.
- [77] C. Fetter, T. Boving et D. Kreamer, “Contaminant hydrogeology, 3rd edn upper saddle river,” 2018.
- [78] E. L. Sjöberg et D. Rickard, “The influence of experimental design on the rate of calcite dissolution,” *Geochimica et cosmochimica acta*, vol. 47, n°. 12, p. 2281–2285, 1983.
- [79] FNX-INNOV, “Caractérisation environnementale des sols et de l’eau souterraine,” Montréal, QC, Rapport technique, Février2022.
- [80] Y. Globensky, “Géologie des basses-terres du saint-laurent : Ministère de l’énergie et des ressources,” *Direction générale de l’exploration géologique et minérale, Direction de la recherche géologique, Service de la géologie*, 1987.
- [81] T. D. Tran Ngoc, R. Lefebvre, E. Konstantinovskaya et M. Malo, “Characterization of deep saline aquifers in the bécancour area, st. lawrence lowlands, québec, canada : implications for co₂ geological storage,” *Environmental earth sciences*, vol. 72, n°. 1, p. 119–146, 2014.

- [82] T. T. Ngoc, E. Konstantinovskaya, R. Lefebvre, M. Malo et L. Massé, “Geotechnical characterization of deep saline aquifers for co2 geological storage in the bécancour region, québec, canada,” *Geotechnics for Sustainable Development*, 2011.
- [83] J. Jiao et C. Zheng, “Abnormal fluid pressures caused by deposition and erosion of sedimentary basins,” *Journal of Hydrology*, vol. 204, n°. 1-4, p. 124–137, 1998.
- [84] K. Bédard, F.-A. Comeau, E. Millet, J. Raymond, M. Malo et E. Gloaguen, “Évaluation des ressources géothermiques du bassin des basses-terres du saint-laurent.” 2016.
- [85] M. Nasr, “Évaluation des propriétés thermiques de la plateforme du saint-laurent : mesures au laboratoire et approche diagraphique.” Thèse de doctorat, Université du Québec, Institut national de la recherche scientifique, 2016.
- [86] M. Beaulieu, *Guide d'intervention- Protection des sols et réhabilitation des terrains contaminés*. Ministère de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques, Québec, 2021.
- [87] ASTM D1498-14, *Standard Test Method for Oxidation-Reduction Potential of Water*, Norme, 2020.
- [88] J. Griffioen, J. Klein et P. F. Van Gaans, “Reaction capacity characterization of shallow sedimentary deposits in geologically different regions of the netherlands,” *Journal of contaminant hydrology*, vol. 127, n°. 1-4, p. 30–46, 2012.
- [89] LongerPump, “Precise peristaltic pupm bt100-2j,” 2023. [En ligne]. Disponible : <https://www.longerpump.com/index.php/BasicType/show/10.html>
- [90] D. L. Parkhurst, C. Appelo *et al.*, “Description of input and examples for phreeqc version 3—a computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations,” *US geological survey techniques and methods*, vol. 6, n°. A43, p. 497, 2013.
- [91] P. Cubillas, S. Köhler, M. Prieto, C. Chaïrat et E. H. Oelkers, “Experimental determination of the dissolution rates of calcite, aragonite, and bivalves,” *Chemical Geology*, vol. 216, n°. 1-2, p. 59–77, 2005.
- [92] MELCC-MA.200-Mét.1.2, *Détermination des métaux : méthode par spectrométrie de masse à source ionisante au plasma d'argon*, 7^e éd. Centre d'expertise en analyse environnemental du Québec, Canada, 2020.
- [93] L. Marini, G. Ottonello, M. Canepa et F. Cipolli, “Water-rock interaction in the bisagno valley (genoa, italy) : application of an inverse approach to model spring water chemistry,” *Geochimica et Cosmochimica Acta*, vol. 64, n°. 15, p. 2617–2635, 2000.

- [94] A. Scislowski et P. Zuddas, “Estimation of reactive mineral surface area during water–rock interaction using fluid chemical data,” *Geochimica et Cosmochimica Acta*, vol. 74, n°. 24, p. 6996–7007, 2010.
- [95] L. E. Beckingham, E. H. Mitnick, C. I. Steefel, S. Zhang, M. Voltolini, A. M. Swift, L. Yang, D. R. Cole, J. M. Sheets, J. B. Ajo-Franklin *et al.*, “Evaluation of mineral reactive surface area estimates for prediction of reactivity of a multi-mineral sediment,” *Geochimica et Cosmochimica Acta*, vol. 188, p. 310–329, 2016.
- [96] S. Brunauer, P. H. Emmett et E. Teller, “Adsorption of gases in multimolecular layers,” *Journal of the American chemical society*, vol. 60, n°. 2, p. 309–319, 1938.
- [97] C. Fetter, “Applied hydrogeology, prantice-hall,” *Inc., New Jersey*, 2001.
- [98] C. W. Fetter, *Applied hydrogeology*. Waveland Press, 2018.
- [99] J. W. Morse et R. S. Arvidson, “The dissolution kinetics of major sedimentary carbonate minerals,” *Earth-Science Reviews*, vol. 58, n°. 1-2, p. 51–84, 2002.
- [100] F. Qin et L. E. Beckingham, “The impact of mineral reactive surface area variation on simulated mineral reactions and reaction rates,” *Applied Geochemistry*, vol. 124, p. 104852, 2021.
- [101] ASTM C128-15, *Standard Test Method for Relative Density (Specific Gravity) and Adsorption of Fine Aggregate*, Norme, 2015.
- [102] A. C. Lasaga et R. J. Kirkpatrick, “Kinetics of geochemical processes,” 1981.
- [103] J. L. Palandri et Y. K. Kharaka, “A compilation of rate parameters of water-mineral interaction kinetics for application to geochemical modeling,” Geological Survey Menlo Park CA, Rapport technique, 2004.

ANNEXE A DIAMÈTRE EFFECTIF DES IONS

$\hat{d}/(10^{-10}\text{m})$	Ion
2.5	$\text{Rb}^+, \text{Cs}^+, \text{NH}_4^+, \text{Tl}^+, \text{Ag}^+$
3.0	$\text{K}^+, \text{Cl}^-, \text{Br}^-, \text{I}^-, \text{NO}_3^-$
3.5	$\text{OH}^-, \text{F}^-, \text{HS}^-, \text{BrO}_3^-, \text{IO}_4^-, \text{MnO}_4^-$
4.0–4.5	$\text{Na}^+, \text{HCO}_3^-, \text{H}_2\text{PO}_4^-, \text{HSO}_3^-, \text{Hg}_2^{2+}, \text{SO}_4^{2-}, \text{SeO}_4^{2-}, \text{CrO}_4^{2-}, \text{HPO}_4^{2-}, \text{PO}_4^{3-}$
4.5	$\text{Pb}^{2+}, \text{CO}_3^{2-}, \text{SO}_3^{2-}, \text{MoO}_4^{2-}$
5.0	$\text{Sr}^{2+}, \text{Ba}^{2+}, \text{Ra}^{2+}, \text{Cd}^{2+}, \text{Hg}^{2+}, \text{S}^{2-}, \text{WO}_4^{2-}$
6	$\text{Li}^+, \text{Ca}^{2+}, \text{Cu}^{2+}, \text{Zn}^{2+}, \text{Sn}^{2+}, \text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{2+}, \text{Ni}^{2+}, \text{Co}^{2+}$
8	$\text{Mg}^{2+}, \text{Be}^{2+}$
9	$\text{H}^+, \text{Al}^{3+}, \text{Cr}^{3+}, \text{trivalent rare earths}$
11	$\text{Th}^{4+}, \text{Zr}^{4+}, \text{Ce}^{4+}, \text{Sn}^{4+}$

FIGURE A.1 Diamètres effectifs des différents ions en Angström, tiré d'Appelo and Postma (2005) [3]

ANNEXE B RÉGRESSION POLYNOMIALE DES MOLALITÉS DES
ESPÈCES DISSOUTES DANS L'EAU

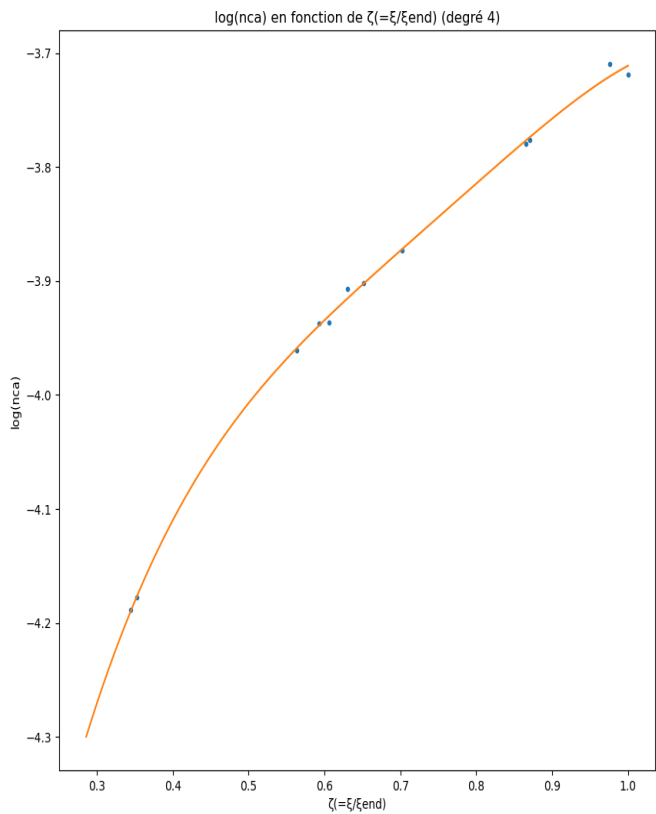


FIGURE B.1 Régression polynomiale de la molalité
de Calcium dans l'eau

degré	RMSE	R ²
1	0,005109	0,902915
2	0,000726	0,986213
3	0,000281	0,994658
4	2,48E-05	0,999529
5	0,005837	0,88909
6	9,76E-05	0,998145

FIGURE B.2 Calcul de l'incertitude de la ré-
gression polynomiale de la molalité de Ca

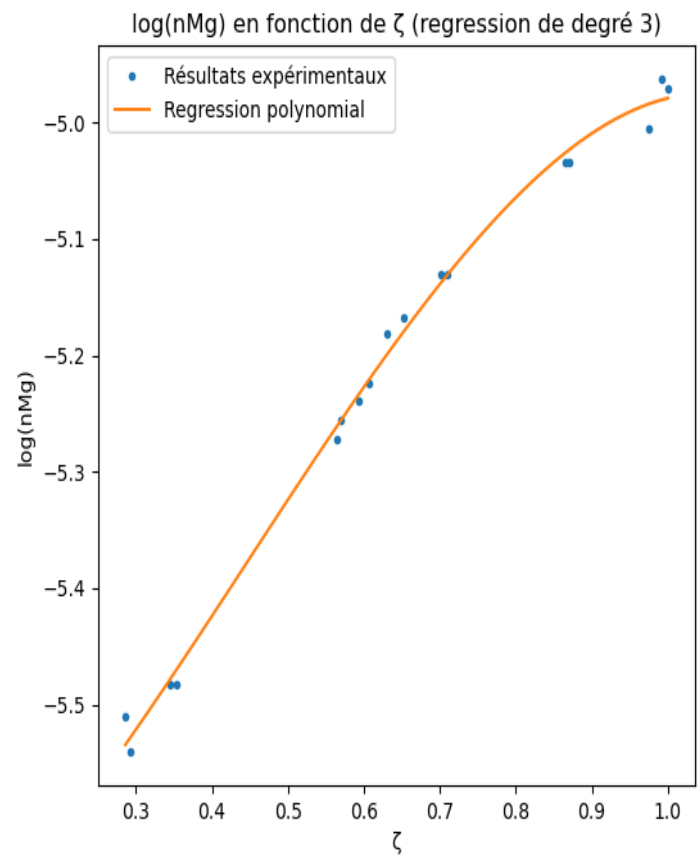


FIGURE B.3 Régression polynomiale de la molalité de Magnésium dans l'eau

degré	RMSE	R ²
1	0,001041	0,978747
2	0,000719	0,985329
3	0,00048	0,990191
4	0,002003	0,959113
5	0,000309	0,993686
6	0,010477	0,786105

FIGURE B.4 Calcul de l'incertitude de la régression polynomiale de la molalité de Mg

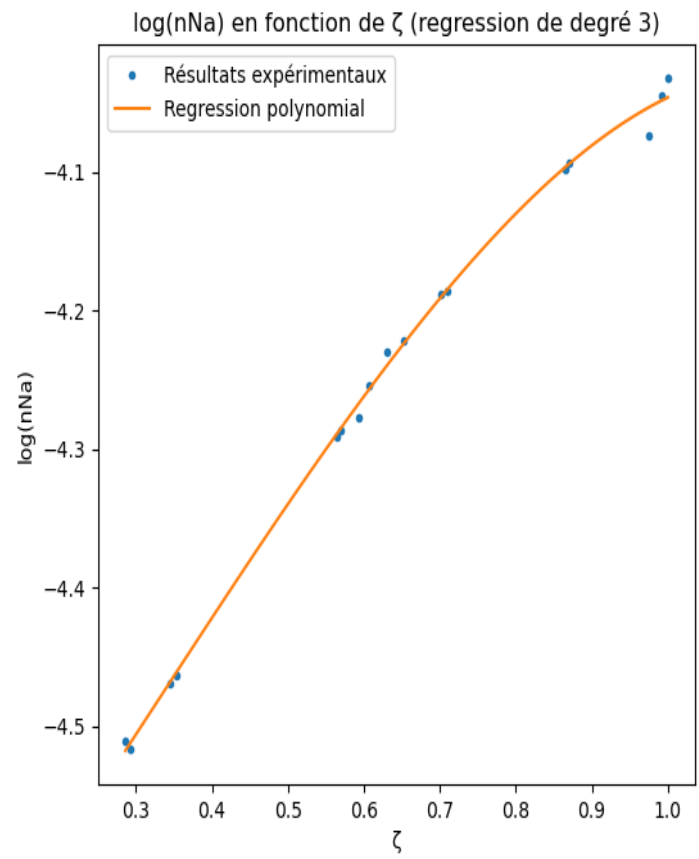


FIGURE B.5 Régression polynomiale de la molalité de Sodium dans l'eau

degré	RMSE	R ²
1	0,000728	0,978491
2	8,13E-05	0,9976
3	3,78E-05	0,998882
4	0,000572	0,983112
5	0,004544	0,865777
6	0,004543	0,865832

FIGURE B.6 Calcul de l'incertitude de la régression polynomiale de la molalité de Na

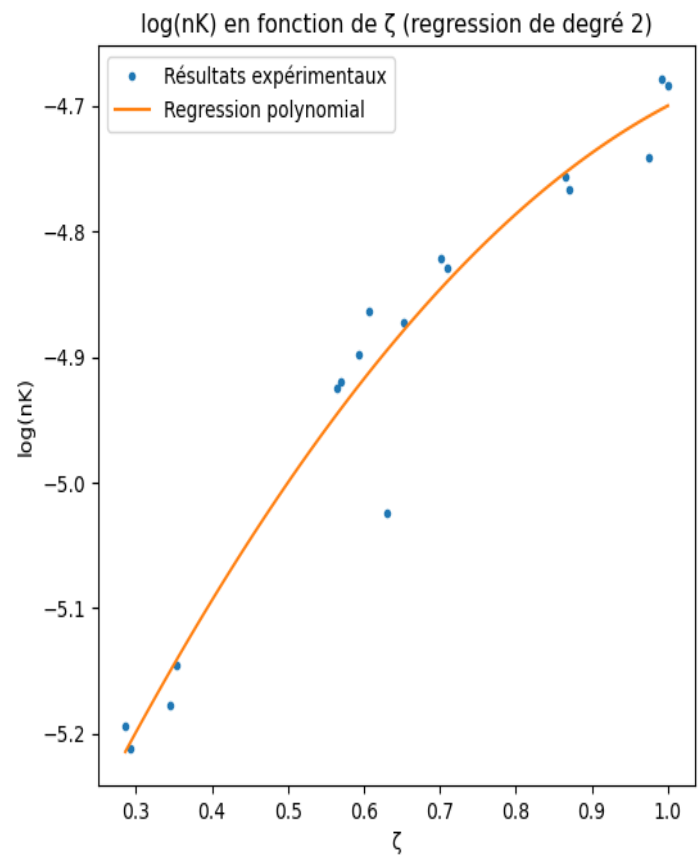


FIGURE B.7 Régression polynomiale de la molalité de potassium dans l'eau

degré	RMSE	R^2
1	0,001656	0,961717
2	0,000646	0,985066
3	0,001051	0,975712
4	0,004219	0,902453
5	0,200985	-3,6466
6	0,073264	-0,6938

FIGURE B.8 Calcul de l'incertitude de la régression polynomiale de la molalité de K