POLYPUBLIE
Polytechnique Montréal

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
UNIVERSITÉ D'INGÉNIERIE

Titre: Title:	Étude numérique de la réduction du transport advectif de contaminants entre les fosses remblayées et l'environnement par l'utilisation de chemins d'écoulements préférentiels
Auteur: Author:	Moïse Rousseau
Date:	2021
Type:	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis
Référence: Citation:	Rousseau, M. (2021). Étude numérique de la réduction du transport advectif de contaminants entre les fosses remblayées et l'environnement par l'utilisation de chemins d'écoulements préférentiels [Thèse de doctorat, Polytechnique Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/9730/

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: PolyPublie URL:	https://publications.polymtl.ca/9730/
Directeurs de recherche: Advisors:	Thomas Pabst
Programme: Program:	Génie minéral

Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie, le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal
This file has been downloaded from PolyPublie, the institutional repository of Polytechnique Montréal

https://publications.polymtl.ca

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

Étude numérique de la réduction du transport advectif de contaminants entre les fosses remblayées et l'environnement par l'utilisation de chemins d'écoulements préférentiels

MOÏSE ROUSSEAU
Département des génies civil, géologique et des mines

Thèse présentée en vue de l'obtention du diplôme de *Philosophiæ Doctor*
Génie minéral

Octobre 2021

© Moïse Rousseau, 2021.

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

Cette thèse intitulée :

Étude numérique de la réduction du transport advectif de contaminants entre les fosses remblayées et l'environnement par l'utilisation de chemins d'écoulements préférentiels

présentée par **Moïse ROUSSEAU**
en vue de l'obtention du diplôme de *Philosophiæ Doctor*
a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de :

Richard SIMON, président
Thomas PABST, membre et directeur de recherche
Éric ROSA, membre
Romain CHESNAUX, membre externe

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de recherche, Thomas Pabst, de m'avoir offert l'opportunité de poursuivre un doctorat sous sa supervision, puis de m'avoir consacré du temps afin de m'aider dans le développement des qualités de chercheur. Je suis aussi reconnaissant du soutien financier offert durant la poursuite de mes études de la part de l'Institut de Recherche en Mines et Environnement (IRME) ainsi que tous ses partenaires industriels. Plus spécifiquement, le support de Calcul Québec (`www.calculquebec.ca`) et de Compute Canada (`www.computecanada.ca`) pour la mise à disposition de serveurs de calcul haute performance utilisés dans ce projet est remercié. Ces travaux n'auraient jamais pu voir le jour dans leur version la plus aboutie présentée ici sans la contribution d'une multitude de développeurs partageant leurs travaux de manière libre et en n'attendant en retour qu'un petit merci sur la page d'un rapport. À défaut de remercier tous ces contributeurs et leurs partenaires, je vais remercier les logiciels en leur nom : Python, SciPy, Numpy, nlopt, matplotlib, Inkscape, Paraview, GNU Parallel et PFLOTRAN.

Je remercie aussi tous mes amis et collègues du laboratoire, particulièrement ceux habitués des traditionnelles réunions du vendredi soir, ceux de l'heure du dîner et ceux des jeux de dés ou de cartes, pour avoir rendu ces années d'études agréables et pleines de belles rencontres. Finalement, je voudrais remercier ma famille de son soutien moral même à longue distance, puis aussi Laura pour avoir supporté et partagé le fardeau de l'écriture de ma thèse durant ces derniers mois.

RÉSUMÉ

L'industrie minière a un rôle prépondérant à jouer dans l'approvisionnement mondial de métaux pour soutenir le développement économique des nouveaux pays industriels, le développement des nouvelles technologies ainsi que la transition énergétique. Cependant, les mines génèrent une grande quantité de rejets solides dont les approches de gestion actuelles, notamment les aires de déposition en surface, posent de nombreux défis en termes de stabilité géotechnique et environnementale. La prise en compte des changements climatiques est de plus susceptible d'amplifier ces problématiques, augmentant les coûts et les incertitudes sur l'avenir de ces approches. La déposition des rejets miniers dans les fosses apparaît donc comme une alternative prometteuse aux méthodes de gestion actuelles. Son principal avantage est qu'elle permet notamment d'isoler physiquement les rejets en les plaçant sous la surface, supprimant alors les risques géotechniques. Néanmoins, de récentes études ont montré qu'une telle approche ne permettait pas toujours de résoudre certaines problématiques environnementales, notamment en raison de l'écoulement de l'eau souterraine dans les rejets remblayés qui pourrait contribuer à disperser d'éventuels contaminants vers l'environnement.

Une approche envisagée pour contrôler l'écoulement de l'eau dans les rejets et limiter leurs interactions avec l'environnement consiste à créer des chemins d'écoulements préférentiels dans et autour des fosses afin de dévier les flux d'eau souterraine des rejets problématiques et d'éviter toute contamination. D'une part, ces chemins d'écoulements préférentiels peuvent être formés par la déposition conjointe dans la fosse de différents types de rejets avec un fort contraste de perméabilité. Néanmoins, les précédentes études sur le sujet ne s'intéressaient qu'à des chemins préférentiels sous la forme d'une enveloppe perméable, sans qu'aucune preuve n'ait été avancée quant à son optimalité. D'autre part, ces chemins préférentiels pourraient se former naturellement dans le roc fracturé grâce à la présence d'une zone endommagée le long des murs des fosses due aux activités d'excavation. Le rôle de cette zone endommagée formant une enveloppe perméable naturelle n'a cependant jamais été étudié et son efficacité nécessitait donc d'être quantifiée. L'objectif général du présent projet de recherche était donc de développer de nouveaux outils numériques pour l'étude des chemins préférentiels d'écoulement dans et autour des fosses puis de proposer des recommandations en vue de réduire le transport de contaminants entre les rejets remblayés et l'environnement par l'utilisation de la zone endommagée ou de chemins préférentiels créés artificiellement.

Une approche numérique en trois dimensions, appuyée par une approche analytique, a été choisie pour mener à bien ce projet. De nouveaux outils ont premièrement été développés

afin de faciliter la création de modèles et l'entrée de jeux de données. Ils comprenaient, entre autres, une interface entre le logiciel de conception assistée par ordinateur Salomé, le mailleur Vorpalite et le code de simulation hydrogéologique PFLOTRAN, et ont permis de rendre la création de modèles numériques plus simple, plus intuitive, mais aussi mieux contrôlée. Le code de simulation PFLOTRAN a en outre été modifié afin de pouvoir simuler l'écoulement de l'eau souterraine dans la zone endommagée et de permettre l'enregistrement de variables liées à la résolution de systèmes adjoints pour l'optimisation des chemins préférentiels. Avec ces nouveaux ajouts, PFLOTRAN est ainsi devenu l'un des premiers logiciels d'écoulement souterrain à proposer la sortie des sensibilités pour la résolution des systèmes adjoints.

Dans un second temps, la justesse de l'approche numérique développée ainsi que les modifications apportées aux codes a été vérifiée. D'une part, l'écoulement et le transport de contaminants dans un modèle physique de laboratoire représentant une fosse remblayée avec une enveloppe perméable (rapporté dans la littérature) ont été simulés numériquement puis comparés aux mesures effectuées. Cette première vérification a permis de montrer que l'approche numérique utilisée dans le projet était en mesure de reproduire les phénomènes essentiels observés dans le modèle physique. Un découplage du transport de soluté dans les chemins préférentiels et dans le roc a aussi été mis en évidence, permettant ainsi de se focaliser sur les processus à l'échelle de la fosse. D'autre part, la capacité du code PFLOTRAN à simuler correctement l'écoulement dans les chemins préférentiels situés dans la zone endommagée a été vérifiée avec succès en comparant les résultats des simulations numériques avec une solution analytique en deux dimensions et spécialement développée .

La déviation de l'eau souterraine dans la zone endommagée autour des fosses a ensuite été quantifiée. L'étude a été menée de manière stochastique sur la base de 124 000 simulations numériques. Cette approche a permis d'observer des tendances générales et de dériver de nouveaux indicateurs d'efficacité génériques. Ces travaux ont notamment contribué à montrer que la zone endommagée pouvait agir comme enveloppe perméable naturelle à condition que celle-ci soit fracturée et large, et que la fosse soit remblayée avec des rejets de faible conductivité hydraulique. Dans ces conditions, les flux d'eau souterraine dans les rejets pourraient être réduits de plus de 90%. En outre, une nouvelle approche permettant de prédire la déviation de l'eau souterraine dans la zone endommagée dans un intervalle de $\pm$ 20% a été proposée avec un modèle semi-analytique invoquant deux propriétés de la Zone Endommagée par Sautage (ZES) facilement mesurables sur le terrain. Ces résultats ont de plus permis de dériver des critères plus précis que ceux de la littérature afin d'assurer que la zone endommagée agisse bien comme une enveloppe perméable naturelle. Cette étude a permis de démontrer le rôle central que peut jouer la zone endommagée dans la réduction des flux d'eau souterraine dans les rejets et transport de contaminants depuis la fosse vers l'environnement.

Enfin, la dernière étape de cette étude consistait à optimiser, au moyen d'une approche topologique, la géométrie des chemins préférentiels construits avec des roches stériles très perméables et placées dans une fosse remblayée avec des résidus contaminés peu perméables. Une proto-librairie Python a spécialement été développée afin de faciliter le développement de l'approche d'optimisation, puis a été utilisée pour optimiser la géométrie de chemin préférentiel permettant de minimiser le flux d'eau souterraine dans des rejets remblayés pour plusieurs formes de fosses. L'optimisation a globalement permis de valider les pratiques actuellement en vigueur en démontrant l'optimalité de l'enveloppe perméable pour la plupart des cas simulés. Elle a aussi contribué à améliorer la position des chemins préférentiels lorsque l'écoulement régional était orienté selon l'axe mineur d'une fosse elliptique. Dans ce cas, des géométries non conventionnelles composées de conduits de roches stériles à l'intérieur des résidus ont permis de diminuer le transport advectif de plus de 40% comparativement à une enveloppe perméable seule.

Les résultats obtenus dans cette étude constituent donc une avancée dans la caractérisation des chemins préférentiels dans la zone endommagée autour des fosses, l'optimisation de la géométrie des chemins disposés dans les fosse, et plus globalement pour la réduction des interactions entre les rejets remblayés et l'environnement. Ces travaux ouvrent aussi la voie à de futurs développements, notamment la validation sur le terrain de l'utilisation de la zone endommagée comme structure de confinement, l'amélioration de l'approche d'optimisation par la considération d'autres contraintes opérationnelles, ou encore son application à d'autres problématiques en environnement minier. Les résultats de ce projet de recherche contribuent à réduire les incertitudes et l'empirisme liés à la déposition des rejets miniers dans les fosses, et devraient permettre d'améliorer l'approche tout en garantissant une meilleure stabilité physique et géochimique des rejets à long terme.

ABSTRACT

Mining industry had a key role to play to support the supply of raw materials needed for the development of new technologies, the economic development of emerging countries and the energy transition. However, mine operations generate a large quantity of solid wastes which raise several geotechnical and geochemical challenges and especially regarding their disposal and management. Projected climate change may also modify the environmental conditions surface storage facilities were designed for, therefore adding further uncertainty to disposal site design and increasing the risks for instabilities. In-pit mine wastes disposal therefore appears as a promising alternative management approach which benefits from many advantages, such as the permanent isolation of mine wastes below ground (thus significantly reducing the geotechnical instability risks), or the improvement of the social acceptance of such projects by the public and regulators. However, geochemical interactions between the wastes disposed in-pit and the surrounding rock are expected and groundwater flow could contribute to disperse contaminants contained in the backfilled wastes in the environment.

One of the common approaches to control the interactions between in-pit disposed wastes and the environment consists in using preferential flow paths in or around the backfilled pit to divert groundwater streamlines from the wastes, thus preventing contamination. Such preferential flow paths can be created using codisposal of different wastes with a significant hydraulic conductivity contrast. Previous studies have, however, only considered preferential flow paths placed to formed a pervious surround, despite the optimality of such a geometry was not proven. An alternate way to create preferential flow paths could be to use the damaged zone along the pit walls created by mining operations. Such an approach was yet never assessed. The objective of this research was therefore to, first, develop new numerical tools to the study the performance of preferential flow paths in and around backfilled pits, and then to propose recommendations to optimize the deviation of groundwater flow from in pit disposed wastes, using either natural or constructed preferential paths.

A three-dimensional numerical approach, supported and validated by an analytical approach, was used in this study. This numerical approach required the development of new tools to facilitate data input and output to numerical models. The computer-aided design software Salomé was thus interfaced and coupled with the subsurface flow and transport code PFLOTRAN and the Vorpalite mesher. This new interface especially aimed to ease and improve control of the creation of numerical models and was actively used during the whole research. The code PFLTORAN was also modified to simulate the groundwater flow in the damaged

zone and to output new variables to enable adjoint problem solving. With these changes, PFLOTRAN became one of the first hydrogeological software to provide the sensitivities required to solve high dimensional optimization problems.

Then, the accuracy of the simulation approach and of the PFLOTRAN code improvements were verified against an experimental model taken from the literature and an analytical solution. Solute transport in a laboratory-sized physical model of a backfilled pit with a pervious surround was first modeled using the numerical approach developed in the present project and was compared to experimental measurements. Comparison showed the numerical approach was able to reproduce the hydrogeological behaviour observed in the physical model. A decoupling of solute transport between the pit and the surrounding rock was also observed, thus suggesting it would be possible to focus on the processes at the pit scale, without requiring a detailed representation of the fractured rock in practice. The capacity of PFLOTRAN to accurately simulate preferential flow paths in the damaged zone was also verified by comparing numerical simulation results with a two-dimensional analytical solution. This second validation demonstrated that PFLOTRAN was able to simulate accurately the water flow deviations in the damaged zone.

The deviation of groundwater in the damaged zone around the pit was then assessed using a stochastic approach based on 124 000 numerical simulations. This approach allowed to determine general trends, and to derive new indicators to evaluate its performance related to groundwater flow in backfilled wastes and advective solute transport reduction. Results showed that the damaged zone could act as a natural pervious surround provided it was sufficiently fractured and thick and the pit was backfilled with low permeability wastes. In this case, the damaged zone was able to reduce waterflow in backfilled wastes by more than 90%. A new approach to evaluate water deviation in the damage zone was also proposed. A semi-analytic model was developped based on two parameters that could be easily determined in the field, and was $\pm 20\%$ accurate. Results also permitted to derive more precise engineering criteria than those available in the literature to ensure that the damaged zone would act as a natural pervious surround. Finally, this study highlighted the potential of the blast damaged zone for reducing groundwater flow contaminants transport from the backfilled pit to the environment.

The last step of this study consisted in optimizing the geometry of preferential flow paths made of inert waste rocks placed in a pit backfilled with potentially contaminating tailings. A topology optimization approach (applied for the first time to a hydrogeological problem) was used to minimize groundwater flow entering the disposed wastes and the advective solute transport from the backfilled pit to the environment. A Python proto-library was created

to prototype and develop the objective function and operational constraints, and improve the optimization process. Overall, results confirmed the good performance of the current practice and proved that the pervious surround geometry was suboptimal for most of the pit geometries considered. Topological optimization also allowed to propose an improved design when the regional flow was oriented along the minor axis of an elliptical pit, in which case unconventional geometries composed of waste rocks conduits through the tailings allowed to decrease the groundwater flow in backfilled tailings by approximately 40% compared to a non-optimized pervious surround alone.

The results obtained in this study therefore provided new knowledge related to the characterization of preferential paths in the damaged zone around the pits, the optimization of pervious surrounds geometry, and more generally to the reduction of groundwater flow in backfilled wastes contaminants transport to the environment. This work also paves the way for future developments, in particular the field-scale validation of the damaged zone role as a containment structure, the improvement of the optimization approach by considering other operational constraints, or its use to other mining environment problems. Finally, the results of this research project contributed to reducing the uncertainties related to mine wastes disposal in open-pits, and to improving the long term physical and geochemical stability of the disposed wastes.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS iii

RÉSUMÉ iv

ABSTRACT vii

TABLE DES MATIÈRES x

LISTE DES TABLEAUX xvii

LISTE DES FIGURES xix

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS xxviii

CHAPITRE 1 INTRODUCTION 1
1.1 Contexte 1
1.2 Problématique 2
1.3 Objectifs de recherche 5
1.4 Contenu de la thèse 6

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE 8
2.1 Gestion des rejets miniers 8
2.1.1 Propriétés des rejets miniers 8
2.1.2 Gestion conventionnelle : parcs à résidus et haldes à stériles 9
2.1.3 Problématiques associées à la gestion des rejets miniers 10
2.1.4 Approches de gestion alternative 12
2.2 Remblayage des fosses 14
2.2.1 Généralités 14
2.2.2 Défis liés au remblayage des fosses 15
2.2.3 Mitigation et prévention des risques géochimiques associés aux rejets déposés dans les fosses 16
2.3 Technique de l'enveloppe perméable 18
2.3.1 Réduction du flux d'eau 18
2.3.2 Réduction du transport de contaminants vers l'environnement 20
2.3.3 Autres structures de confinement 20

2.4 Zone Endommagée par Sautage 21
2.4.1 Influence du sautage sur le roc environnant 21
2.4.2 Influence du sautage sur l'écoulement 22
2.5 Modèles mathématiques décrivant les phénomènes de transport dans les matériaux granulaires et le roc 25
2.5.1 Loi d'écoulement en milieu poreux 25
2.5.2 Écoulement dans une fracture 27
2.5.3 Loi de transport de soluté 28
2.6 Simulations numériques de l'écoulement et du transport en hydrogéologie . . 31
2.6.1 Généralités 31
2.6.2 Codes disponibles 31
2.6.3 PFLOTRAN 33
2.7 Optimisation de géométrie 37
2.7.1 Problème d'optimisation 37
2.7.2 Technique d'optimisation de géométrie 38
2.7.3 Optimisation paramétrique 39
2.7.4 Optimisation de forme 40
2.7.5 Optimisation topologique 40
2.8 Frontière des connaissances 45

CHAPITRE 3 METHODOLOGIE 47
3.1 Approche générale et hypothèses 47
3.2 Approche numérique 50
3.2.1 Choix du code numérique 50
3.2.2 Création des modèles numériques 52
3.2.3 Vérification de la nouvelle approche 55
3.3 Simulation du réseau de fracture de la ZES 55
3.3.1 Modèle conceptuel de la ZES 56
3.3.2 Développement et vérification de la justesse des outils numériques pour simuler l'influence de la ZES 56
3.3.3 Analyse et prédiction de l'influence de la ZES 57
3.3.4 Prédiction des flux entrants dans les rejets 58
3.4 Étude et optimisation de la technique de l'enveloppe perméable 58
3.4.1 Étude analytique de l'enveloppe perméable 58
3.4.2 Approche d'optimisation 58
3.4.3 Calcul de la dérivée totale du gradient hydraulique moyen dans les résidus 61

CHAPITRE 4 DÉVELOPPEMENT DES OUTILS NUMÉRIQUES POUR LA CRÉATION, LE CALCUL, ET LE TRAITEMENT DES MODÈLES NUMÉRIQUES . 63
4.1 Interface entre le code PFLOTRAN et le logiciel de CAO Salomé 63
4.1.1 Vérification de la qualité du maillage 63
4.1.2 Exportation de maillage 66
4.1.3 Exportation de faces pour le calcul de bilan de matière 69
4.1.4 Champs de perméabilité de la ZES 70
4.2 Interface entre le mailleur Vorpalite et Salomé 72
4.2.1 Développement du greffon 72
4.2.2 Comparaison d'un maillage tétraédrique et d'un PVC 73
4.3 Implémentation du procédé d'optimisation topologique 75
4.4 Liste des modifications apportées au code PFLOTRAN 77
4.4.1 Corrections apportées au code 77
4.4.2 Tenseur de perméabilité complet 79
4.4.3 Calcul du flux d'eau souterraine dans les fosses remblayées 80
4.4.4 Entrée des maillages de Voronoï 81
4.4.5 Orthogonalité du maillage 82
4.4.6 Sortie des informations pour l'optimisation topologique 83

CHAPITRE 5 ARTICLE 1 : SIMULATING GROUNDWATER FLOW AND SOLUTE TRANSPORT IN BACKFILLED OPEN-PITS WITH PERVIOUS SURROUND . 88
5.1 Introduction 89
5.2 Methodology 91
5.2.1 Laboratory physical model (Lange, 2003; Lange et Van Geel, 2011) . 91
5.2.2 Approaches for simulating fractured rock 93
5.2.3 Numerical simulation of the tracer tests 96
5.3 Results 98
5.3.1 Model calibration 98
5.3.2 Model verification : sand pervious surround 101
5.3.3 Model verification : gravel pervious surround 105
5.4 Result analysis and discussion 110
5.4.1 Comparison of the numerical models and fractured rock representations 110
5.4.2 Extension to field scale pit backfilling performance assessment 112
5.4.3 Discussion 113
5.5 Conclusion 114

CHAPITRE 6 ARTICLE 2 : ANALYTICAL SOLUTION AND NUMERICAL SIMULATION OF STEADY FLOW AROUND A CIRCULAR HETEROGENEITY WITH ANISOTROPIC AND CONCENTRICALLY VARYING PERMEABILITY 115
6.1 Introduction 115
6.2 Problem description 118
6.3 Analytical solutions for a circular heterogeneity with N layer 120
6.3.1 Head solution 120
6.3.2 Flux continuity between the different domains 123
6.3.3 Flowrate through the different interfaces 124
6.4 Validation of numerical simulations using the developed analytical solution . 125
6.4.1 General approach 125
6.4.2 Case 1 : isotropic layers conductivity 127
6.4.3 Case 2 : anisotropic conductivities 129
6.4.4 Case 3 : radially anisotropic and continuous conductivity 131
6.5 Validation of numerical simulation 132
6.5.1 Validation of PFLOTRAN flow simulation 132
6.5.2 K-orthogonality error 133
6.5.3 Discussion 134
6.6 Summary and conclusion 135
6.7 Appendix A : General solution to the anisotropic Laplace equation 136

CHAPITRE 7 ARTICLE 3 : BLAST DAMAGE ZONE INFLUENCE ON GROUNDWATER FLUXES THROUGH BACKFILLED OPEN-PITS 138
7.1 Introduction 139
7.2 Methodology 140
7.2.1 Blast damage zone (BDZ) model 140
7.2.2 Stochastic sensitivity analysis 143
7.2.3 Numerical model 145
7.3 Results 146
7.3.1 General BDZ influence on flow in backfilled pits 146
7.3.2 BDZ influence in the tailings scenario 147
7.3.3 BDZ influence in the waste rocks scenario 151
7.3.4 Influence of pit geometry 153
7.4 Results analysis 154
7.4.1 Permeability increase and BDZ influence 154
7.4.2 Blast design and pit backfilling 156

7.4.3 BDZ parameters estimation . . . 157
7.4.4 Discussion . . . 158
7.5 Summary and conclusion . . . 159

CHAPITRE 8 ARTICLE 4 : PREDICTION OF THE PERVIOUS SURROUND PERFORMANCE OF BLAST DAMAGE ZONE TO REDUCE GROUNDWATER FLOW IN BACKFILLED OPEN-PITS . . . 161
8.1 Introduction . . . 161
8.2 Methodology . . . 163
8.2.1 General approach . . . 163
8.2.2 BDZ dataset generation . . . 164
8.2.3 Definition of the new parameters . . . 168
8.3 Results . . . 170
8.3.1 Generation BDZ properties and deviation dataset . . . 170
8.3.2 Prediction of the minimum DFI using area ratio . . . 171
8.3.3 Prediction of minimum and maximum DFI using pit wall permeability contrasts . . . 172
8.3.4 Prediction of minimum and maximum DFI using the transmissivity ratio 175
8.3.5 Semi-analytical equation for minimum and maximum DFI prediction 177
8.4 Result analysis . . . 179
8.4.1 Assessing model properties for prediction . . . 179
8.4.2 Assessing minimum and maximum DFI bounds using the new parameters 180
8.4.3 Example application to predict BDZ flow influence . . . 181
8.4.4 Discussion . . . 182
8.5 Summary and conclusion . . . 185
8.6 Appendix A : Derivation of the analytical effectiveness . . . 185
8.7 Appendix B : Effectiveness index as a function of the DFI . . . 187

CHAPITRE 9 ARTICLE 5 : TOPOLOGY OPTIMIZATION OF IN-PIT CODISPOSAL OF WASTE ROCKS AND TAILINGS TO REDUCE CONTAMINANT TRANSPORT TO THE ENVIRONMENT . . . 188
9.1 Introduction . . . 188
9.2 Methodology . . . 191
9.2.1 Formulation of the optimization problem . . . 191
9.2.2 Mathematical formulation . . . 192
9.2.3 Performing the optimization . . . 193
9.2.4 Optimization case studies . . . 194

9.3 Results . . . 196
9.3.1 Conic pit . . . 196
9.3.2 Elliptic pit . . . 200
9.3.3 Real case geometry . . . 205
9.4 Results analysis . . . 207
9.4.1 Optimal waste rocks and tailings codiposal geometry . . . 207
9.4.2 Test of the optimized geometries with transport simulations . . . 209
9.4.3 Limits of the approach and discussion . . . 210
9.5 Conclusion and final remarks . . . 213

CHAPITRE 10 RÉSULTATS COMPLÉMENTAIRES . . . 214
10.1 Analyse de l'efficacité de la technique de l'enveloppe perméable . . . 214
10.1.1 Modèle analytique . . . 214
10.1.2 Définition de l'efficacité . . . 214
10.1.3 Dérivation de l'expression analytique de l'efficacité . . . 215
10.1.4 Conditions requises pour garantir une enveloppe perméable efficace $E_e \geq 0$ . . . 216
10.1.5 Influence de la conductivité de l'enveloppe . . . 219
10.1.6 Influence de l'épaisseur . . . 220
10.1.7 Influence de la conductivité hydraulique des rejets et du roc . . . 221
10.1.8 Exemple d'application pour la détermination des propriétés d'une enveloppe perméable . . . 222
10.2 Prédiction du flux d'eau souterraine à travers les fosses remblayées . . . 224
10.2.1 Contextualisation . . . 224
10.2.2 Correction et normalisation des flux . . . 224
10.2.3 Courbe de flux . . . 225
10.2.4 Applications . . . 226

CHAPITRE 11 SYNTHESE ET DISCUSSION . . . 228
11.1 Approche numérique . . . 228
11.1.1 Développement de l'approche numérique . . . 228
11.1.2 Application de l'approche numérique aux objectifs du projet . . . 229
11.1.3 Limites de l'approche numérique . . . 230
11.2 Optimisation topologique appliquée à l'hydrogéologie . . . 231
11.3 Réduction du flux d'eau souterraine dans les fosses remblayées . . . 233
11.3.1 Utilisation de la ZES . . . 233
11.3.2 Enveloppe perméable . . . 235

11.3.3 Enveloppe perméable optimisée 236
11.3.4 Comparaison, avantages et inconvénients des différentes approches . . 238
11.4 Retour sur les hypothèses et discussion 238

CHAPITRE 12 CONCLUSION 242
12.1 Rappel de la problématique 242
12.2 Avancées dans la caractérisation et l'optimisation des chemins préférentiels . 242
12.3 Recommandations 243
12.4 Perspectives 245
12.4.1 Roche stérile réactive 245
12.4.2 Restauration des conditions hydrogéologiques avant opération 246
12.4.3 Codisposition de roches stériles dans les parcs à résidus 246
12.4.4 Extension à des problèmes transitoires et/ou impliquant du transport réactif 246

RÉFÉRENCES 248

LISTE DES TABLEAUX

2.1 Comparaison non exhaustive de différents codes utilisés pour la modélisation de l'écoulement de l'eau et le transport de soluté dans les milieux poreux. 34

4.1 Description des fichiers de sorties de l'interface Salomé vers PFLOTRAN avec leur extension. 67

4.2 Comparaison du maillage tétraédrique généré avec NETGEN et du Pavage de Voronoï Centré (PVC) généré avec Vorpalite. 75

6.1 Analytical and simulated flowrate through the different interfaces in Case 1 considering isotropic layer conductivity. 129

6.2 Analytical and simulated flowrate through the different interfaces in Case 2 considering anisotropic layer conductivity. 130

7.1 Parameters used and number of simulations carried out in the sensitivity analysis for each of the 11 conic pits modeled. 144

8.1 Range of model properties considered in the stochastic flow deviation simulations. Properties with an asterisk (*) were sampled in logarithm space. 167

8.2 Comparison of the different parameters to predict the minimum and maximum bounds of the simulated DFI. 181

8.3 Value of the effectiveness $E_{i,3D}$ required to obtain the given minimum ($E_{i,3D}$ / Minimum column) and maximum ($E_{i,3D}$ / Maximum column) DFI for conic and non-conic pit. For example, an effectiveness index $E_{i,3D}$ of 0.47 in conic pit give a minimum DFI of 0.4 187

9.1 Comparison of mean head gradient in the tailings, groundwater flowrate, dissimilarity P_d (expressed in %) with the optimal pervious surround geometry, and the mean head gradient reduction compared to the case without pervious surround. SP : Starting Point. 199

9.2 Comparison of mean head gradient in the tailings, groundwater flowrate, dissimilarity P_d (expressed in %) with the optimal pervious surround geometry, and the mean head gradient reduction compared to the case without pervious surround for the elliptic pit with the regional gradient oriented along its major axis. SP : Starting Point. 201

9.3 Comparison of mean head gradient in the tailings, groundwater flowrate, dissimilarity P_d (expressed in %) with the optimal pervious surround geometry, and the mean head gradient reduction compared to the case without pervious surround for the 45° gradient orientation elliptic pit. SP : Starting Point. 204

9.4 Comparison of mean head gradient in the tailings, groundwater flowrate, dissimilarity P_d (expressed in %) with the optimal pervious surround geometry, and the mean head gradient reduction compared to the case without pervious surround for the 90° elliptic pit. SP : Starting Point. 206

9.5 Comparison of mean head gradient in the tailings and of the percentage of dissimilarity P_d considering the different starting points (SP) for the real case pit. 207

11.1 Avantages et inconvénients comparés de l'utilisation de la ZES comme enveloppe perméable naturelle ou de l'ajout de chemins d'écoulements préférentiels (enveloppe perméable) dans la fosse. 239

LISTE DES FIGURES

1.1 Schéma conceptuel du problème étudié : (a) interactions entre l'eau souterraine et les rejets remblayés en l'absence de structure confinement pouvant mener au transport de contaminants en aval de la fosse, (b) déviation probable de l'eau souterraine des rejets par la Zone Endommagée par Sautage, et (c) optimisation de la géométrie de chemins préférentiels d'écoulements dans la fosse pour minimiser les flux d'eau dans les rejets. 5

2.1 Remblayage de la fosse Flambeau Mine et création d'un parc à son emplacement. (a) Avant le remblayage et (b) après le remblayage. Crédits : Département des ressources naturelles du Wisconsin (`https://dnr.wisconsin.gov/`), reproduit avec autorisation. 15

2.2 Principe d'une enveloppe perméable permettant de réduire les flux d'eau dans des rejets remblayés (Matich et Tao, 1986; West *et al.*, 2003). (a) Sans enveloppe perméable, l'eau souterraine (flèches bleues) circule à travers les rejets remblayés et contribue à disperser des contaminants dans l'environnement (flèches rouges) (b) avec enveloppe perméable, l'eau souterraine est déviée et s'écoule dans la couche plus perméable autour des rejets. 19

2.3 Modèle conceptuel du réseau de fractures de la zone endommagée (a) considérant une orientation isotrope et une faible densité initiale et (b) avec une orientation anisotrope et une large densité initiale. Les fractures sont ici représentées par des carrées, mais peuvent également prendre la forme de disque ou d'hexagone. La couleur (gris jusque blanc) indique la distance par rapport au plan $(Ox'y')$. D'après Mourzenko *et al.* (2012), reproduit avec autorisation. 23

2.4 Processus de modélisation depuis la conceptualisation du système étudié jusqu'à sa résolution numérique. D'après Moukalled *et al.* (2016), reproduit avec autorisation. 32

2.5 (a) Condition de biais $|f f'| = 0$ et (b) d'orthogonalité $\theta = 0$ du maillage pour une juste discrétisation de l'opérateur de gradient et de diffusion/-dispersion pour la méthode des volumes finis avec la méthode TPFA. Adapté de Moukalled *et al.* (2016), reproduit avec autorisation. . . . 36

2.6 Les trois techniques d'optimisation de géométrie appliqués à un pont en treillis : (a) optimisation paramétrique, (b) optimisation de forme et (c) optimisation topologique. Le problème initial et la solution optimisée sont présentés respectivement à gauche et à droite. D'après Bendsøe et Sigmund (2004), reproduit avec autorisation. 39

2.7 Évolution de la topologie d'un objet optimisée (à droite) en fonction de l'intégration de l'équation d'évolution : (A) géométrie initiale, (B,C,D) évolution de la géométrie avec l'intégration, et (E) géométrie optimisée. L'objet en question est une pièce mécanique fixée à gauche et avec un chargement à droite. À gauche figure la valeur de la fonction courbe de niveau, avec en noir la courbe de niveau $\Phi = 0$ décrivant la géométrie de l'objet. D'après Wu et Wu (2017), contenu sous licence Creative Commons (CC-BY 4.0). 43

3.1 Organisation du projet de recherche avec les différents axes de recherche, sous-étapes et articles correspondants. Chaque étape est colorée en fonction de chapitre où les résultats y sont décrits. ZES : Zone Endommagée par Sautage. 51

3.2 Approche générale de simulation avec PFLOTRAN et son écosystème : Python est utilisé pour la manipulation et des fichiers d'entrée et des résultats, Paraview pour la visualisation 3D des résultats et Matplotlib pour la réalisation de graphique en 2D. La boucle de rétroaction écrite en Python (en rouge) a permis le développement de méthodes itératives avec PFLOTRAN. 53

3.3 Schéma en deux dimensions du problème d'optimisation de la géométrie des chemins préférentiels dans la fosse (délimitée par $\partial\Omega_p$). En blanc l'espace occupé par le roc Ω_r, en gris les chemins préférentiels Ω_e, et en jaune les rejets Ω_w. L'objectif de l'optimisation est de trouver l'espace Ω_e inclus dans la fosse Ω_p tel que le flux d'eau souterraine à travers l'interface $\partial\Omega_w$ soit minimum. Les flèches indiquent l'orientation du gradient régional. 60

4.1 Interface graphique du greffon pour l'analyse de la qualité du maillage. (1) Outil de sélection, (2) calcul de la qualité du maillage, (3) distribution des angles de non-orthogonalité, (4) distribution des biais, (5) création de groupes pour la visualisation des faces sélectionnées et (6) exportation des angles de non-orthogonalité et des biais au format texte. 65

4.2 Interface graphique du greffon d'exportation de maillage de Salomé vers PFLOTRAN. (1) Sélection du maillage à exporter parmi les objets de SMESH, (2) groupes de mailles disponibles pour l'exportation, (3) ajout ou suppression des groupes à exporter, (4) liste des groupes à exporter, (5) format de maillage et de fichier, (6) sélection du fichier de sortie. 66
4.3 Interface graphique du greffon pour la création de jeux de données de face et pour le calcul des flux d'eau souterraine dans les fosses remblayées. (1) Sélection des groupes de faces à exporter, (2) sélection du format, (3) sélection des fichiers de sorties, (4) option sur la sommation des flux, et (5) inversion de la direction (pour les flux orientés). . . . 69
4.4 Interface graphique du greffon de calcul des propriétés de la ZES. (1) Sélection des objets de SMESH et du fichier de sortie, (2) entrée des propriétés de la ZES, (3) du modèle de calcul de perméabilité équivalente et (4) du couplage avec le roc. 70
4.5 Interface graphique du greffon pour la création de Pavages de Voronoï Centré (PVC) depuis Salomé. (1) Sélection du maillage contenant la frontière de l'objet discrétisé, (2) sélection du maillage contenant les germes à considérer (optionnel), (3) sélection des options à transférer au mailleur Vorpalite, et (4) création de groupe à partir des groupes de points du maillage contenant les germes. 73
4.6 Comparaison d'un maillage tétraédrique et d'un Pavage de Voronoï Centré (PVC) pour la discrétisation d'une fosse remblayée contenant 50 000 volumes (Radzilani, 2015). Les volumes sont colorés en fonction de l'angle moyen de non-orthogonalité. 74
4.7 Distribution (a) des angles de non-orthogonalité et (b) de l'erreur de biais pour le maillage tétraédrique (en rouge) et le Pavage de Voronoï Centré (PVC ; en bleue) 75
4.8 Schéma de l'implémentation de l'approche d'optimisation topologique par densité avec calcul du gradient par la méthode adjointe. Chaque boîte représente un script Python dédié qui effectue une opération, et les ellipses désignent des variables d'entrées-sorties entre ces scripts. . 78

4.9 Comparaison des concentrations simulées (a) avant et (b) après correction de la projection du tenseur de dispersivité calculées avec PFLOTRAN (en rouge) et HydroGeoSphere (en bleu). L'erreur était liée à une mauvaise projection du tenseur de dispersivité aux faces du maillage et à la non-prise en compte du coefficient de dispersivité verticale. Les croix noires correspondent aux concentrations mesurées expérimentalement (voir chapitre 5 pour plus de détails). 79

5.1 Experimental setup for the calibration tracer test seen from the top (a) and from the side (b). Gray color represents the concrete blocks between the fractures (black lines). Black and red squares show respectively the piezometer locations (1 to 5 and 8) and the tracer injection point (I). 93

5.2 Experimental setup of the full physical model where solute transport from the pit to the fractured rock was simulated. Gray color represents the concrete blocks between the fractures (black lines), the yellow area the pervious surround and the orange one the tailings (sandy silt) which were mixed with tracer to conduct transport simulation. A steel drum was placed in the center of the pit to reduce the use of sandy silt in the physical model. Black squares show the piezometer locations. . . 94

5.3 Measured (Lange, 2003) and simulated (this study) tracer concentrations in different piezometers for different models (DFN : Discrete Fracture Network ; DP : Dual Porosity ; EPM : Equivalent Porous Medium) and with two numerical codes (HGS : HydroGeoSphere and PFT : PFLOTRAN). 99

5.4 Measured (Lange, 2003) and simulated (this study) concentrations in the full physical model with a sand pervious surround in different piezometers for different fractured rock representations (EPM : Equivalent Porous Medium ; DP : Dual Porosity ; DFN : Discrete Fracture Network) and with two numerical codes (HGS : HydroGeoSphere and PFT : PFLOTRAN). Red area showed the effect of a ± 1 mm location uncertainty of piezometer position in the pervious surround on the simulated concentrations with PFLOTRAN. Piezometers located in the pervious surround are indicated by an asterisk (*). 106

5.5 Measured (Lange, 2003) concentration in the full physical model with a gravel pervious surround and simulated (this study) concentrations in different piezometers for different fractured rock representation (EPM : Equivalent Porous Medium ; DP : Dual Porosity ; DFN : Discrete Fracture Network) and with two numerical codes (HGS : HydroGeoSphere and PFT : PFLOTRAN). Piezometers located in the pervious surround are indicated by an asterisk (*). Piezometer (18b) not shown for concision, but was still considered in the analysis. 109

6.1 Schematic influence of the blast damage zone (BDZ) on water flow streamlines : (a) without BDZ, some streamlines passe through the backfilled waste, (b) with isotropic BDZ, the fractures contributes to attract streamlines in the waste and (c) with anisotropic BDZ, the enhanced tangential conductivity permits to divert groundwater streamlines from the waste. Effect on solute transport is also shown (d) : at early time, diffusion transport is predominant because of sharp gradient concentration at the interface (see West *et al.*, 2003, for more information), and decreases so that advection becomes predominant at late time (without BDZ, blue curve). Isotropic BDZ only increases advective solute transport so contaminants release rate curve is just translated (red curve). Finally, increased water flow in the vicinity of backfilled waste with the anisotropic BDZ leads to an increased diffusion, but lower advection at late time contributes to maintain longer a contaminant in the waste (green curve). AU : Arbitrary Unit. 117

6.2 Conceptual representation of the continuously varying permeability around a heterogeneity divided in N layers in an infinite homogeneous porous medium. h_x and K_x represent the head and hydraulic conductivity of the heterogeneity (subscript in), the ith layer (subscript i) and the infinite porous medium (subscript ∞). Radius is located at the interface I_i between layer i and $i+1$. 119

6.3 Conceptual models of the simulated cases : (a) Three layers case with isotropic conductivity, (b) three layers case with anisotropic conductivity and (c) radially anisotropic continuous conductivity distribution. K_x : hydraulic conductivity of the considered medium and l_x^2 : squared anisotropy ratio. Infinite medium hydraulic conductivity was $K_{inf} = 1{\times}10^{-7}$ m/s. 127

6.4 Analytically calculated streamlines (blue lines) and head contour (pink to turquoise lines) in the three simulated cases. Streamline thickness is related to the stream velocity (thick lines represent greater velocity). Black circles represent the different interfaces I_0 to I_3 for the two first cases (a and b); while they represent the heterogeneity (inner circle), the radius at which $l > 1$ (middle circle) and at $l \approx 0.2$ (outer circle) in the last case (c) 128

6.5 Error between simulated and the analytically computed heads (see Equation 6.23) for the three considered cases. The black inner circle represents the interface with the heterogeneity (interface I_0) and the outer dotted circle shows the interface with the infinite porous medium (interface I_3). Flow is oriented from the left to right with a 0.01 hydraulic gradient. 129

6.6 Simulated and analytical flowrates in the heterogeneity as a function of the number of layers used to discretize the continuous conductivity in the vicinity of the heterogeneity. 132

6.7 Mesh K-orthogonality error (Equation 6.24). The black inner circle represents the interface with the heterogeneity (interface I_0) and the outer dotted circle shows the interface with the infinite porous medium (interface I_3). 135

7.1 Distribution of the simulated DFI in the tailings scenario (in red) and the waste rock scenario (in blue). Histogram represents the frequency distribution and the dotted line the cumulative distribution. 147

7.2 Calculation and construction of the density ratio map for each model parameter. (a) DFI distribution considering all the BDZ sampled and only a subset where $X = X_0$; (b) corresponding density ratio and color code showing the shift of the DFI distribution; (c) construction of the color map for several values of parameter ($X_i \leq X_j \leq X_k$). Here, increasing parameter X leads to an increase in the DFI (the red zone progressively moves towards greater DFI values). 149

7.3 Influence of the BDZ parameters and pit radius on the DFI for the 3D simulated conic pit in the tailings scenario. Scatter plots are colored according to the density ratio (red : high density ratio, blue : low density ratio ; see text for more details) using 32 discretization segments on each axis. Dashed curves represents the influence of increasing the given parameter on the deviation. 152

7.4 Influence of the BDZ parameters and pit radius on the DFI for the 3D simulated conic pit in the waste rock scenario. Scatter plots are colored according to the density ratio (red : high density ratio, blue : low density ratio) using 25 discretization segments on each axis. Dashed curves represents the influence of increasing the given parameter on the deviation. 154

7.5 Influence of the BDZ parameters and pit radius on the DFI for the 3D simulated conic pit in the waste rock scenario. Scatter plots are colored according to the density ratio (red : high density ratio, blue : low density ratio) using 25 discretization segments on each axis. . . . 155

8.1 Schematic representation of the three pit geometry considered. (a) Parametric conic pits, (b) elliptic pits and (c) real case geometry. 166

8.2 BDZ and pit properties considered to derive the new parameters. The inner surface in blue represents the pit walls ($z = 0$) and outer volume the BDZ (up to $z = L_h$). BDZ radial $\Delta K_{0,r}$ ($\vec{r}$ direction) and tangential ($\vec{t}$ direction) hydraulic conductivity function relative to the pit wall orientation locally are represented on the $K(z)$ plot in blue and red respectively. Pit projected perimeter P_p and area A_p in the direction of the regional flow (shown by the black arrow at the bottom left) figure in violet. 169

8.3 Simulated DFI, pit wall permeability increase $\Delta K_{0,t}$ and hydraulic length L_h. (a) Correlation between the simulated pit wall permeability increase and the hydraulic length. (b) Density distribution of the DFI simulated (blue histogram) and cumulative percentage (dotted curve) for the 15 pit models and considering parameter given in Table 8.1. . 171

8.4 Influence of area ratio $P_p L_h$ over pit projected area A_p ratio on the DFI. Each gray circle represents a data point and the darker the color the higher the number of nearby points. In total, 40429 over 40496 points (99.8% of the simulation results) are located above the 1 :-1 line (indicated in red). 173

8.5 Minimum and maximum DFI as a function of the intact rock to backfilled wastes conductivity ratio and of the increase of BDZ to backfilled pit transmissivity ratio. Data points are colored according to the simulated DFI. Gray color represents DFI between -0.01 and 0.01. 175

8.6 Minimum and maximum DFI as a function of the intact rock to backfilled wastes conductivity ratio and of the increase of BDZ to backfilled pit transmissivity ratio. Data points are colored according to the simulated DFI. Gray color represents DFI between -0.01 and 0.01. 177
8.7 Predicted DFI as a function of the 3D effectiveness index for (a) conic pits and (b) non-conic pits. Red curves represent the empiric functions DFI $= f(E_{i,3D})$ for the minimum and the maximum DFI bounds (value in appendix). 97.5% of the data points are contained between the bounds. 179
8.8 Predicted DFI and its uncertainty range using the semi-analytical equation with the effectiveness index $E_{i,3D}$ and the projected pit and BDZ area ratio. 183
9.1 Optimized pervious surround geometry. (a) Optimal geometry (starting from a random continuous density parameter), (b) starting from the pervious surround, (c) starting from a homogeneous density parameter $p = 0.18$, and (d) from a discrete distribution of waste rocks and tailings in the pit. Only waste rocks are shown, the rest of the volume is occupied by tailings. Black arrows show the regional flow direction, and Δh indicates the head gradient in the tailings. SP : Starting Point. 198
9.2 Optimal pervious surround for the elliptic pit with a 0° gradient orientation. 200
9.3 Optimal pervious surround for the elliptic pit with a 45° gradient orientation showing minimum and maximum width at non-trivial location, a linear waste rocks inclusion aligned with the regional flow direction and with various holes on pit bottom. 203
9.4 Optimal pervious surround for the elliptic pit with a 90° gradient orientation. Black arrows show the gradient orientation (along $\vec{y}$ direction). 205
9.5 Optimal pervious surround geometry for the real case. Black arrows (lower left) shows the regional flow direction. 208
9.6 (a) Percentage of solute remaining in the pit and (b) solute release rate from the tailings to the environment considering no pervious surround (back curves), the constant width reference pervious surround (blue curves), the optimized width pervious surround (red curve) and the addition of conduits (green curves). PS : Pervious Surround 211

10.1 Schéma du modèle analytique d'une fosse de rayon R_p remblayée avec des rejets d'une conductivité hydraulique K_w et en présence d'une enveloppe perméable d'épaisseur e et de conductivité K_e, et située dans un roc fracturé homogène et de conductivité K_r 215

10.2 Conductivité hydraulique minimum requise pour l'enveloppe perméable pour assurer une efficacité positive $E_e \geq 0$ en fonction de son épaisseur et de la conductivité hydraulique des rejets entreposés. La conductivité du roc est considérée constante $K_r = 1{\times}10^{-6}$ m/s. Une conductivité plus haute que celle requise engendre une efficacité positive. 218

10.3 Réduction du débit d'eau volumique dans les rejets par l'ajout d'une enveloppe perméable dans une fosse circulaire considérant un roc et des rejets d'une conductivité hydraulique $K_r = 1 \times 10^{-7}$ et $K_w = 5 \times 10^{-6}$ m/s, respectivement. Les lignes pleines et en tiretés représentent les iso contours de l'efficacité (respectivement positive ou négative) avec un incrément de 8%. 223

10.4 Flux Corrigé Normalisé (FCN) dans différentes formes de fosses (a) coniques (légende : rayon au sommet, profondeur, pente des murs), (b) elliptiques (légende : ratio axe majeur sur axe mineur, axe mineur, profondeur, pente des murs) et (c) réelle, et pour différents gradients (angle par rapport à l'axe majeur) simulées dans le chapitre 6. À noter que le flux a été corrigé d'une partie des erreurs des modèles numériques en ramenant le Flux Corrigé Normalisé (FCN) à 1 pour un ratio unitaire. 227

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

AMD	*Acid Mine Drainage*
BDZ	*Blast Damage Zone*
BREP	*Boundary REPresentation*
CAD	*Computer Aided Design*
CAO	Conception Assistée par Ordinateur
CVT	*Centroidal Voronoi Diagram*
DFI	*Diverted Flow Index*
DFN	*Discrete Fracture Netwrok*
DP	*Dual Porosity*
DMA	Drainage Minier Acide
DNC	Drainage Neutre Contaminé
ESO	*Evolutionary Structural Optimisation*
EPM	*Equivalent Porous Media*
FCN	Flux Corrigé Normalisé
GC-MMA	*Globally-Convergent Method of Moving Assymptote*
HPC	*High Performance Computing*
MPI	*Message Passing Interface*
OFAT	*One Factor A Time*
PEBI	*PErpendicular BIsectrice*
PM	*Process Model*
PVC	Pavage de Voronoï Centré
REV	*Representative Elementary Volume*
SIMP	*Standard Isotropic Material with Penalisation*
TPFA	*Two Point Flux Approximation*
TSF	*Tailings Storage Facility*
ZES	Zone Endommagée par Sautage

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

1.1 Contexte

La demande en ressources minérales et en énergie n'a cessé de croître au cours des 100 dernières années. Cette croissance devrait se poursuivre pour le siècle à venir, notamment en raison de l'augmentation du niveau de vie dans les pays en voie de développement, de l'évolution rapide des technologies et de la transition vers des énergies décarbonées. Ainsi, la quantité de métaux produits à l'horizon 2050 devrait être supérieure aux quantités extraites depuis 100 ans (Vidal *et al.*, 2017; Deetman *et al.*, 2018; Watari *et al.*, 2020). L'industrie minière constituera une source d'approvisionnement essentielle pour répondre à ces besoins futurs (Ali *et al.*, 2017), et en particulier au Québec en raison de la présence de gisements de matériaux stratégiques, d'or, et de minerais de hautes valeurs comme le diamant ou le lithium (Simard, 2018; Gouvernement du Québec, 2020; Ibarra-Gutiérrez *et al.*, 2021).

Les activités d'extraction présentent cependant plusieurs risques pour l'environnement et la société en général, et les nombreux accidents survenus au cours des dernières décennies illustrent les conséquences d'une mauvaise gestion des rejets (Roche *et al.*, 2017). De plus, les mines sont souvent situées dans des zones éloignées et sauvage (Sonter *et al.*, 2020), ce qui accroît la pression sur les écosystèmes et qui peuvent être endommagés irrémédiablement en cas d'accident. Ainsi, il est nécessaire de développer de nouvelles technologies afin de réduire les risques inhérents à l'exploitation minière et d'assurer une exploitation responsable et sécuritaire des ressources naturelles, tout en garantissant la production de minéraux nécessaires et l'acceptabilité sociale des projets miniers (Ali *et al.*, 2017).

Le présent projet de recherche s'inscrit dans ce contexte et aborde en particulier la problématique de la gestion des rejets miniers. En effet, les activités d'extraction sont responsables de la génération de deux principaux types de rejets solides qui constituent la majeure partie du volume de rejets créés : les résidus, issus du traitement du minerai, et les roches stériles, produits pour permettre l'accès au minerai (Aubertin *et al.*, 2002; Blight, 2010). De manière conventionnelle, les résidus et les roches stériles sont traités séparément. Les résidus sont souvent entreposés en surface dans des parcs à résidus ceinturés de digues de rétention et dont la superficie peut dépasser plusieurs centaines d'hectares, et les roches stériles sont généralement entreposées sous forme d'empilements (encore appelés haldes). La stabilité physique des parcs à résidus constitue un aspect critique d'un site minier (Blight, 2010). En effet, le risque de rupture des digues de rétention est environ cent fois plus élevé que pour les digues et barrages hydrauliques (Azam et Li, 2010), et les changements climatiques pourraient modifier

les conditions environnementales pour lesquelles ils ont été conçus, entrainant une augmentation des risques d'instabilités (Pearce *et al.*, 2011; Parhizkar *et al.*, 2016; Labonté-Raymond *et al.*, 2020). Par exemple, environ un quart des ruptures observées au cours des dernières décennies ont été causées par des précipitations extrêmes (Rico *et al.*, 2008; Azam et Li, 2010). Or la récurrence et l'ampleur de ces événements extrêmes tendent à augmenter en raison des changements climatiques (Guinard *et al.*, 2015). Certains ouvrages de rétention actuels pourraient donc être sous-dimensionnés face à l'aléa climatique futur, et l'incertitude entourant la conception des nouveaux parcs (et donc leur coût) est susceptible d'augmenter.

En outre, les résidus et les roches stériles peuvent parfois contenir certains minéraux capables de réagir ou de se solubiliser dans les conditions où ils sont entreposés et générer des composés potentiellement toxiques pour l'environnement (Lottermoser, 2010; Blowes *et al.*, 2014; Nordstrom, 2015). Plusieurs approches de restauration ont été développées afin de prévenir la contamination des milieux naturels, mais elles peuvent être complexes à mettre en place, en particulier dans le cas des roches stériles, dont les volumes et le mode de gestion rendent difficiles les actions atténuatrices (Bussière et Guittonny, 2020). De plus, les objectifs de restauration peuvent être à l'opposé des objectifs de stabilité géotechnique, compliquant significativement la gestion des rejets. Par exemple, la réactivité des rejets peut être limiter en les ennoyant ou en les maintenant à un degré de saturation élevé afin de limiter la diffusion de l'oxygène et donc limiter l'oxydation de minéraux sulfureux (Aubertin *et al.*, 2002, 2016). Néanmoins, une telle approche peut augmenter le risque d'instabilités physiques avec une augmentation du risque de liquéfaction et des contraintes sur les digues, pouvant mener à leur rupture.

De nouvelles stratégies de gestion et d'entreposage des rejets sont donc nécessaires afin d'améliorer la stabilité physique et chimique des aires d'accumulation et réduire leur empreinte environnementale.

1.2 Problématique

Des approches de gestion émergentes, souvent regroupées sous le terme d'approche de gestion intégrée, ont été développées afin de mieux intégrer la restauration des sites miniers aux opérations (concept dit de Gestion pour la restauration ou « *Designing for Closure* » ; Aubertin *et al.*, 2016). Par exemple, la stabilité physique des parcs à résidus peut être améliorée grâce à l'utilisation d'inclusions de roches stériles (James *et al.*, 2013), ou encore, la création d'une couche de contrôle des écoulements dans les haldes à stériles permet de limiter leurs contacts avec l'eau météorique tout en augmentant leur stabilité physique (Broda *et al.*, 2017; Maknoon et Aubertin, 2021). La déposition des rejets dans les fosses constitue une autre approche

de gestion intégrée, et est une alternative prometteuse à la déposition en surface. Le remblayage des fosses permet notamment de limiter la taille et les coûts d'entretien des parcs à résidus et des haldes à stériles, réduit les risques de rupture des digues de rétention, fournit une isolation physique permanente aux rejets entreposés, et permet de résoudre certaines autres problématiques environnementales comme la restauration des lacs de fosses problématiques ou la stabilisation des murs et des pentes. Le remblayage des fosses est de plus perçu comme une bonne pratique par le milieu et est mieux accepté socialement, notamment parce qu'elle permet un retour aux usages d'origine des terrains exploités (Puhalovich et Coghill, 2011; MEND, 2015).

Cependant, la stabilité chimique des rejets entreposés dans les fosses demeure un défi. En effet, même lorsque les rejets sont entreposés dans une formation géologique profonde et peu connectée avec la surface, des interactions avec l'eau souterraine sont attendues (Puhalovich et Coghill, 2011). Par exemple, l'eau souterraine pourrait s'écouler à travers les rejets, favoriser la solubilisation d'éléments chimiques ou entraîner certains contaminants contenus dans l'eau interstitielle des rejets puis les disperser dans l'environnement (McCullough *et al.*, 2013). L'eau souterraine est également susceptible d'apporter dans les rejets des espèces dissoutes qui pourraient contribuer à l'initiation ou à la poursuite de réactions d'oxydation et à la génération de Drainage Minier Acide (DMA) ou de Drainage Neutre Contaminé (DNC) (Santofimia *et al.*, 2013; Villain *et al.*, 2015; Barfoud *et al.*, 2019). Ainsi, sans contrôle adéquat, le remblayage des fosses pourrait avoir des effets néfastes sur la qualité de l'eau souterraine (Figure 1.1a).

Les techniques de contrôle de la contamination dans les fosses suivent généralement deux axes que sont l'atténuation et la prévention. Conformément au premier axe, les effets de l'interaction entre l'eau souterraine et les rejets miniers réactifs peuvent être atténués par la collecte et le traitement de l'eau contaminée avant de la relâcher dans l'environnement (Awoh *et al.*, 2013). Les rejets peuvent aussi être amendés afin de fixer ou de précipiter les métaux ou neutraliser l'acide produit suite à la génération de DNC ou de DMA (Ayres *et al.*, 2012; MEND, 2015). Conformément au second axe, une autre approche consiste à prévenir le contact de l'eau souterraine et des rejets entreposés dans les fosses par la création de chemins d'écoulements préférentiels autour des rejets. Ces chemins préférentiels peuvent par exemple être formés au moyen d'une couche hautement perméable entre les rejets déposés dans la fosse et le roc environnant formant ainsi une enveloppe perméable (Matich et Tao, 1986). Cette enveloppe perméable peut être composée de matériaux d'emprunt ou de roches stériles (Thériault, 2004), ce qui a l'avantage supplémentaire de réutiliser et valoriser des matériaux immédiatement disponibles sur site. La technique de l'enveloppe perméable est notamment utilisée sur plusieurs sites miniers dans le monde, par exemple ceux de Rabbit Lake (Saskat-

chewan, Canada ; MEND, 2015) ou de Langer Heinrich en Namibie (Hore et Luppnow, 2015). Le roc peut également être directement utilisé lorsqu'il est assez perméable (Misfeldt *et al.*, 1999; MEND, 2015) comme à la mine de McClean Lake (Saskatchewan, Canada ; MEND, 2015). De manière générale, l'utilisation de chemins d'écoulements préférentiels autour des rejets permet de réduire les flux d'eau souterraine à travers les rejets (Thériault, 2004), limitant alors les flux advectifs de contaminants depuis la fosse vers l'environnement (Misfeldt *et al.*, 1999; Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Lange et Van Geel, 2011).

Néanmoins, la déviation de l'eau souterraine par des chemins d'écoulements préférentiels n'est que peu documentée dans la littérature, ce qui limite son application en pratique. Par exemple, les précédentes études traitant de l'utilisation du roc fracturé pour la création de ces chemins préférentiels n'ont été conduites qu'en considérant certaines propriétés idéalisées et homogènes du roc, alors que la fracturation engendrée par les activités d'extractions est susceptible d'affecter significativement la déviation (Stacey *et al.*, 2003; McCloskey et Bless, 2005; Poulsen *et al.*, 2017; Foster *et al.*, 2018). De plus, la déviation de l'eau souterraine des rejets n'a été analysée que pour des géométries de fosses idéalisées et pour des chemins préférentiels situés uniquement à la périphérie des rejets (Figure 1.1b ; Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Thériault, 2004; Lange et Van Geel, 2011). Néanmoins, la variabilité des formes de fosses (elliptique ou concave par exemple) laisse présager que cette disposition des chemins préférentiels n'est pas nécessairement optimale pour dévier l'eau souterraine des rejets dans tous les cas (Figure 1.1c). De surcroît, les contraintes de puissance informatique disponible à l'époque ne permettaient parfois pas de simuler correctement l'écoulement et le transport de contaminants entre les fosses remblayées et l'environnement (West, 2001; West *et al.*, 2003; Salama *et al.*, 2002; Lange, 2003; Thériault, 2004). Les précédentes études considéraient aussi des géométries simplifiées de fosses et parfois en deux dimensions (Misfeldt *et al.*, 1999; Salama *et al.*, 2002; Thériault, 2004), limitant donc leurs applications pratiques sur des fosses réelles à géométrie complexe et en trois dimensions. Or, aujourd'hui, l'augmentation des capacités de calcul et la puissance des outils informatiques, qui dépasse de 2500 fois les capacités des dernières études sur les chemins d'écoulements préférentiel en 2004 (TOP500, 2021), permettent la création de modèles hydrogéologiques de plus en plus complexes et précis (Kollet *et al.*, 2010). Ces nouveaux outils pourraient donc mieux répondre aux besoins de caractérisation des chemins préférentiels appliquée à l'échelle du terrain (West *et al.*, 2003; Thériault, 2004).

Ainsi, dans cette recherche, il est supposé d'une part, que les flux d'eau souterraine et le transport de solutés entre les fosses remblayées et l'environnement peuvent être réduits par l'utilisation de chemins d'écoulements préférentiels situés dans le roc. Il est aussi supposé qu'un gain supplémentaire d'efficacité par rapport à une géométrie de type enveloppe per-

méable peut être obtenu par l'optimisation de la géométrie de chemins préférentiels placés dans les fosses. D'autre part, il est fait l'hypothèse que les outils informatiques actuels permettent de simuler adéquatement la déviation de l'eau souterraine par ces mêmes chemins.

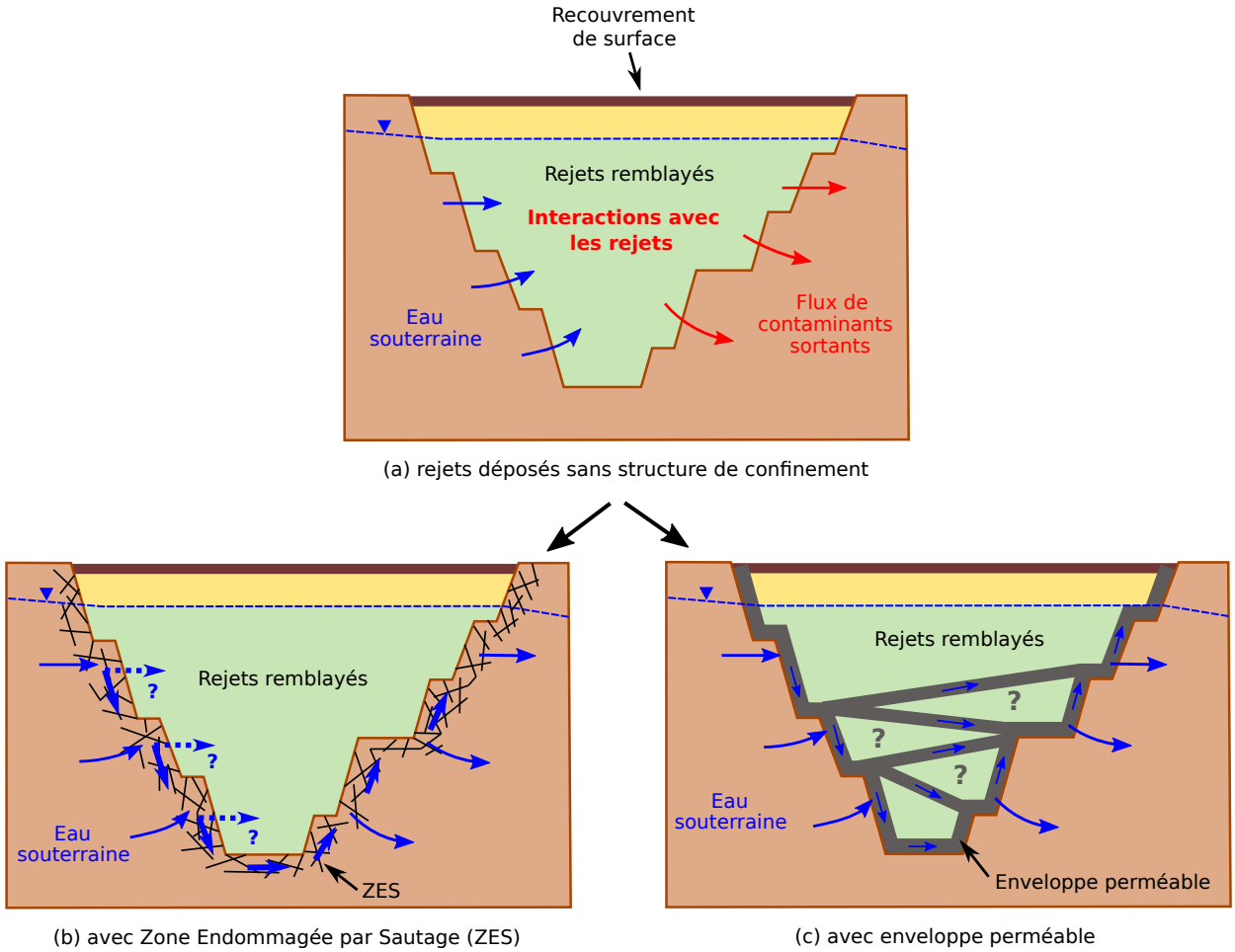


Figure 1.1 Schéma conceptuel du problème étudié : (a) interactions entre l'eau souterraine et les rejets remblayés en l'absence de structure confinement pouvant mener au transport de contaminants en aval de la fosse, (b) déviation probable de l'eau souterraine des rejets par la Zone Endommagée par Sautage, et (c) optimisation de la géométrie de chemins préférentiels d'écoulements dans la fosse pour minimiser les flux d'eau dans les rejets.

1.3 Objectifs de recherche

L'objectif général du présent projet de recherche est de développer de nouveaux outils numériques et de proposer des recommandations en vue de réduire le transport de contaminants entre des rejets remblayés dans les fosses et l'environnement par l'utilisation de chemins d'écoulements préférentiels dans et autour des rejets remblayés. En particulier, le projet s'est

concentré sur deux méthodes pour la création de chemins préférentiels : l'utilisation du roc (fracturé) environnant comme enveloppe perméable naturelle, et la disposition de matériaux plus perméables à la périphérie et dans la fosse (sous forme d'enveloppe perméable ou de géométries plus complexes).

Le projet se divisait en plusieurs objectifs spécifiques :

1. Développer des outils informatiques pour la création des modèles numériques, leur résolution et le traitement des résultats pour la simulation de l'écoulement de l'eau souterraine et le transport de solutés dans le contexte des fosses remblayées.
2. Vérifier la justesse des modèles numériques d'écoulement et de transport autour des fosses par comparaison avec des essais de laboratoire et des solutions analytiques.
3. Quantifier l'influence des opérations de sautage (fracturation) sur la déviation de l'eau souterraine des rejets remblayés dans les fosses.
4. Proposer une approche d'optimisation de la géométrie des chemins d'écoulements préférentiels dans les fosses remblayées pour limiter le flux d'eau souterraine dans les rejets.
5. Optimiser la géométrie de la technique de l'enveloppe perméable pour des géométries de fosse idéalisées (coniques et elliptiques) puis réelles.
6. Mettre à disposition des opérateurs, experts et chercheurs du domaine ces outils en libre accès permettant la simulation et l'optimisation des écoulements dans la zone endommagée autour et dans les fosses.

Les résultats de ces travaux permettront aux opérateurs miniers et aux autres parties prenantes de disposer d'une vision nouvelle des méthodes pour limiter le transport de contaminants entre les rejets et l'environnement par l'utilisation de chemins préférentiels d'écoulement. Cette recherche a également permis de créer des outils numériques de pointe pour la simulation de l'écoulement et du transport de solutés dans le contexte de l'environnement minier, ainsi que pour l'optimisation de la géométrie des chemins préférentiels. Ces outils permettront alors de réduire l'incertitude et l'empirisme de la déposition des résidus en fosse, pour mener finalement à une restauration plus avantageuse des sites miniers.

1.4 Contenu de la thèse

La présente thèse s'articule en 12 chapitres. Le Chapitre 2 après la présente introduction propose une revue critique de la littérature concernant les méthodes de gestion actuelle et émergente des deux types de rejets miniers (roches stériles et résidus), l'influence des activités d'extraction sur les fractures et l'écoulement dans le roc environnant, la modélisation

appliquée au problème d'écoulement de l'eau souterraine et sur les techniques l'optimisation de géométrie. Le Chapitre 3 présente la méthodologie et l'approche générale utilisées pour répondre aux objectifs de recherche. Le coeur de la thèse se décline ensuite en sept parties et dans lesquelles sont présentées l'ensemble des résultats de ces travaux de recherche. La première (chapitre 4) détaille la création d'outils numériques et la personnalisation d'un code de simulation existant pour les besoins du projet de recherche. Les deux suivantes (chapitres 5 et 6) vérifient l'utilisation des modèles numériques pour simuler l'écoulement dans les fosses remblayées en présence de chemins d'écoulements préférentiels dans et autour des rejets. Ensuite, les parties formées par les chapitres 7 et 8 analysent l'influence de la ZES et son utilisation comme enveloppe perméable. Le chapitre 9 s'intéresse à la création de chemins préférentiels d'écoulements dans les fosses remblayées et à leur optimisation au moyen d'une approche d'optimisation topologique. Puis, le chapitre 10 présente une compilation des résultats annexes du projet de recherche et découlant des précédentes sections (efficacité analytique de la technique de l'enveloppe perméable et prédiction du flux entrant dans les fosses remblayées). Enfin, les deux derniers chapitres synthétisent et discutent des résultats et des limitations de la thèse, puis proposent des recommandations en vue de futurs travaux.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

2.1 Gestion des rejets miniers

2.1.1 Propriétés des rejets miniers

Roches stériles

Le terme roches stériles s'applique pour désigner des matériaux sur des critères économiques, et désigne les matériaux sans valeur issus de l'exploitation de mines à ciel ouvert ou souterraines. Ce terme, qui ne repose pas sur des caractéristiques physiques, désigne un ensemble de roches dont les caractéristiques peuvent être très hétérogènes, hétérogénéité qui dépend notamment de la méthode d'excavation des fosses ou des galeries des mines souterraines. Par exemple, le processus de fragmentation de la roche lors d'un sautage ne possède pas de longueur caractéristique, et conduit généralement à une distribution fractale de la granulométrie de la roche sautée (Turcotte, 1986). Les roches stériles ainsi créées par sautage ont généralement une granulométrie étalée, parfois sur plus de 5 ordres de grandeur, et peuvent être composées de particules argileuses de l'ordre du micromètre et de blocs plurimétriques (Peregoedova, 2012; Amos *et al.*, 2015). En plus de l'hétérogénéité granulométrique, la minéralogie des roches stériles peut changer en fonction des séquences de minage (Amos *et al.*, 2015). En effet, une partie d'un gisement peut être riche en pyrite, et donc engendrer des roches stériles potentiellement génératrices de DMA dont la gestion nécessitera des mesures particulières, alors qu'une autre partie peut être moins riche en sulfures ou non réactive.

L'hétérogénéité granulométrique se traduit par la présence de macropores dans les roches stériles qui sont en partie responsables de leur perméabilité et leur porosité élevées. Leur perméabilité in situ varie typiquement entre 4×10^{-13} et 1×10^{-9} m^2 (Amos *et al.*, 2015). Ces valeurs correspondent à des conductivités hydrauliques comprises entre 4×10^{-6} et 1×10^{-2} m/s approximativement (Aubertin, 2013; Bolduc et Aubertin, 2014). La porosité totale des stériles, quant à elle, peut être comprise entre 25% et 50% (Aubertin *et al.*, 2002; Azam *et al.*, 2007; Peregoedova, 2012; Neuner *et al.*, 2013), alors que la porosité efficace (c'est-à-dire la porosité connectée) est généralement proche de 8% pour une dispersivité longitudinale variant entre 10 et 20% de la taille caractéristique de l'écoulement (Peregoedova, 2012; Blackmore *et al.*, 2014).

Résidus

Les résidus miniers sont les matériaux issus du traitement du minerai. Ce sont des matériaux fins de type silteux, avec souvent plus de 70% de particules de diamètre inférieur à 80 µm et une porosité généralement comprise entre 30 et 60% (Aubertin *et al.*, 2002; Bussière, 2007; Hu *et al.*, 2017). La conductivité hydraulique des résidus est typiquement comprise entre 1×10^{-8} et 1×10^{-4} m/s (Bussière, 2007; Hu *et al.*, 2017; Gorakhki *et al.*, 2019) et peut parfois varier au sein d'un même parc à résidus. Ces variations peuvent s'expliquer par les différentes séquences de minage et de traitement du minerai qui entraînent de faibles variations dans la granulométrie des résidus, affectant ainsi leur conductivité hydraulique. La déposition hydraulique des résidus entraîne aussi une ségrégation des particules en fonction de la distance au point de déposition et donc une variation latérale de la conductivité hydraulique jusqu'à deux ordres de grandeur (Soderberg et Busch, 1977; Vick, 1990; L'Écuyer *et al.*, 1993; Williams et Currey, 2002). Cette ségrégation dépend principalement du traitement de concentration, de la densité des grains, et de la densité de la pulpe (Soderberg et Busch, 1977). Enfin, la consolidation des résidus sous leur propre poids entraîne une diminution de la porosité et donc de leur conductivité hydraulique avec la profondeur et au cours du temps (Soderberg et Busch, 1977; Vick, 1990; Blight, 2010).

Plusieurs sources suggèrent également que la conductivité hydraulique des résidus dans les parcs possède un caractère anisotrope (Soderberg et Busch, 1977; Vick, 1990; Blight, 2010), avec une conductivité hydraulique horizontale parfois 2 à 100 fois plus élevée que la conductivité hydraulique verticale. Le phénomène peut être encore amplifié par la présence d'inclusions drainantes (Saleh Mbemba, 2016), qui peuvent engendrer une réorganisation des particules lors du drainage horizontal. Le développement de ce type d'anisotropie peut notamment s'expliquer par une augmentation de la tortuosité lors de la consolidation des résidus (Scholes *et al.*, 2007), ce qui corrobore d'autres mesures de conductivités indiquant que les résidus en surface ne présentent pas d'anisotropie de perméabilité marquée (Soderberg et Busch, 1977).

2.1.2 Gestion conventionnelle : parcs à résidus et haldes à stériles

Les roches stériles et les résidus miniers sont souvent gérés séparément (Blight, 2010). D'une part, les roches stériles sont généralement entreposées dans des haldes à stériles, parfois appelées empilements. Ces dernières peuvent être produites en volume très important, en particulier pour les opérations à ciel ouvert (Aubertin, 2013), ce qui entraîne la création d'ouvrages de grande envergure dont la hauteur peut dépasser 300 mètres et la surface plusieurs dizaines d'hectares, pour des volumes supérieurs à 500 millions de mètres cubes (Bussière, 2007). Les haldes peuvent avoir diverses configurations géométriques qui dépendent des caractéristiques

des sites miniers (Aubertin *et al.*, 2002; Blight, 2010). Le choix de la ou des méthodes de déposition des stériles dans les haldes est réalisé en fonction de la topographie, des équipements disponibles et des caractéristiques des stériles, et conduit à des propriétés hydrogéochimiques spécifiques à chaque halde. Ce choix influence notamment les écoulements d'eau, de gaz et de particules solides dans ces ouvrages (ségrégations et hétérogénéités par exemple ; Amos *et al.*, 2015).

Les résidus, quant à eux, sont souvent entreposés dans des parcs à résidus ceinturés de digues de rétention où ils sont généralement acheminés sous forme de pulpe par des conduites (Aubertin *et al.*, 2002). Les résidus peuvent être également transportés et déposés sous forme de pâte ou de résidus filtrés, appellation qui dépend du ratio du mélange d'eau et de résidus et de l'utilisation d'approches de densification (Blight, 2010). Les digues ceinturant les résidus sont généralement construites avec d'autres rejets miniers (comme des roches stériles ou les résidus eux-mêmes) ou des matériaux d'emprunt. Leurs géométries varient en fonction du site d'entreposage choisi (Aubertin *et al.*, 2002; Blight, 2010; Gowan *et al.*, 2010).

Les résidus peuvent aussi être (en partie) remblayés dans les ouvertures souterraines généralement mélangés avec des liants, ce qui a l'avantage non seulement de permettre la récupération des piliers, mais aussi de diminuer les volumes de résidus devant être entreposés en surface (Blight, 2010; Yilmaz et Fall, 2017; Bussière et Guittonny, 2020).

2.1.3 Problématiques associées à la gestion des rejets miniers

Instabilités physiques des ouvrages de rétention

La stabilité physique des aires d'entreposage des rejets constitue un des principaux défis de l'industrie minière (Blight, 2010). En effet, les ouvrages de rétention de résidus sont plus vulnérables que les ouvrages de rétention d'eau, avec un taux de rupture observé environ cent fois plus élevé que pour les digues et barrages hydrauliques (Rico *et al.*, 2008; Azam et Li, 2010). De nombreux risques nuisent à la stabilité des digues de rétention, parmi lesquels l'érosion de surface ou l'érosion interne, les instabilités statiques et dynamiques des pentes, la liquéfaction des résidus, les attaques physiques ou chimiques, les tassements différentiels ou les submersions (Aubertin *et al.*, 2002; Blight, 2010). Ces risques ont entraîné plus de 200 ruptures (répertoriées) de parcs à résidus entre 1910 et 2010 (Azam et Li, 2010), et environ un quart de ces ruptures étaient dues à des précipitations extrêmes (Rico *et al.*, 2008). Or, la récurrence et l'ampleur de ces événements extrêmes tendent à augmenter en raison des changements climatiques. Par exemple au Québec, la récurrence et l'intensité maximale des précipitations à l'horizon 2071-2100 pourraient augmenter de plus de 40%

par rapport à celles entre 1961 et 1990 (Guinard *et al.*, 2015). Les effets des changements climatiques doivent alors être pris en compte lors la conception des aires d'entreposage et dans le choix des méthodes de réhabilitation, ce qui est susceptible d'occasionner des coûts supplémentaires avec des incertitudes élevées (Pearce *et al.*, 2011; Booshehrian *et al.*, 2020; Labonté-Raymond *et al.*, 2020; Hotton *et al.*, 2020).

Instabilité géochimique des rejets

L'excavation du gisement, la manipulation du minerai et son broyage contribuent à exposer aux conditions environnantes des minéraux avant caché dans la gangue de la roche. Le contact entre ces minéraux et l'environnement est susceptible de conduire à des réactions géochimiques où un nouvel équilibre entre les minéraux et l'environnement s'effectue. L'eau du milieu environnant affectée par ces réactions est appelée drainage minier et selon ses caractéristiques chimiques, le drainage peut être qualifié acide, neutre, contaminé, basique, ou salin (Nordstrom, 2011, 2015). Ces différents types de drainage peuvent être formé quelque soit le type de gisement ou le minéral exploité et représenter un risque pour l'environnement (Othmani *et al.*, 2013; Miller *et al.*, 2019; Liu *et al.*, 2019b; Tomy *et al.*, 2020; Cossey *et al.*, 2021; Nádudvari *et al.*, 2021; Yin *et al.*, 2021).

Au Québec, l'exploitation de gisement d'or dans les mines roches dures génèrent des rejets pouvant contenir des minéraux sulfureux susceptible de s'oxyder au contact de l'oxygène et de l'eau. Cette oxydation peut être responsable de la génération d'eaux acides (DMA) et/ou contaminées (DNC) (Nordstrom, 2015; Bussière et Guittonny, 2020). D'une part, le DMA est caractérisé par un pH faible et des concentrations élevées en métaux et en sulfates (Blowes *et al.*, 2014; Bussière et Guittonny, 2020). L'équation bilan de la réaction chimique conduisant à la formation de DMA par l'oxydation des minéraux sulfureux (comme la pyrite) est (Bussière et Guittonny, 2020) :

$$FeS_2 + \frac{15}{4}O_2 + \frac{7}{2}H_2O \rightarrow Fe(OH)_{3(s)} + 2H_2SO_4 \tag{2.1}$$

En réalité, cette réaction a de nombreux intermédiaires comme le fer II ou et les thiosels (Nordstrom, 2015; Bussière et Guittonny, 2020), ou peut être catalysée par des bactéries acidophiles, notamment *Thiobacillus ferrooxidans* (Nordstrom et Southam, 1997; Nordstrom, 2011). Lorsque le pH devient inférieur à 3,5, le fer III reste principalement sous forme ionique et peut oxyder la plupart des minéraux sulfureux, selon une réaction d'oxydation dite indirecte (Bussière et Guittonny, 2020) :

$$FeS_2 + 14Fe^{3+} + 8H_2O \rightarrow 15Fe^{2+} + 2(SO_4)^{2-} + 16H^+ \tag{2.2}$$

D'autre part, lorsque l'eau de drainage minier possède un pH compris entre 6 et 9, mais que les concentrations de sulfates et de métaux sont élevées, le drainage est appelé DNC (Nordstrom, 2015). Les métaux les plus problématiques sont généralement le cadmium, le cobalt, l'arsenic, le manganèse, le nickel, le plomb, le zinc, l'antimoine et le molybdène en raison de leur mobilité importante à des pH proches de la neutralité (Plante, 2010; Calugaru *et al.*, 2017). Le DNC est formé dans les mêmes conditions que le DMA, c'est-à-dire, par l'oxydation de minéraux sulfureux, mais dont la génération d'acide est tamponnée par des minéraux neutralisants (Othmani *et al.*, 2013), ou lorsque les minéraux sulfureux ne sont pas générateurs d'acide par oxydation directe (comme la sphalérite ou la galène) (Blowes *et al.*, 2014). Le DNC peut également être généré par la lixiviation de certains métaux présents dans les rejets et solubles dans les conditions du milieu (Plante, 2010).

Une des manières de prévenir la génération de DMA ou de DNC consiste à contrôler les réactions d'oxydation à la source en limitant l'accès de l'oxygène et/ou de l'eau aux rejets réactifs (Aubertin *et al.*, 2002, 2016; Bussière et Guittonny, 2020). Par exemple, l'accès à l'eau peut être limité en recouvrant les rejets par une couche de matériaux de basse conductivité hydraulique, ou à l'aide de plusieurs couches pour créer un recouvrement de type stockage et libération (Store-and-Release en anglais) (Bussière et Guittonny, 2020). Cependant, le moyen le plus efficace de prévenir la génération de drainage minier contaminé consiste à limiter l'accès de l'oxygène aux rejets. Une approche efficace en climat humide consiste à garder les rejets ennoyés ou à un degré de saturation élevé afin de limiter la diffusion de l'oxygène, ce qui limite ainsi l'oxydation des minéraux sulfureux (Bussière et Guittonny, 2020). Les différentes approches de restauration sont particulièrement adaptées pour le contrôle de la stabilité géochimique des résidus. Néanmoins, elles peuvent être complexes à mettre en place pour le cas des roches stériles, dont les volumes et le mode de gestion rendent difficiles les actions atténuatrices (Bussière et Guittonny, 2020). De plus, l'augmentation du degré de saturation dans les rejets, par exemple en les gardant ennoyés, peut contribuer à accroître le risque d'instabilités physiques (liquéfaction, contraintes sur les digues). Les approches de contrôle de génération de drainage contaminé (DMA ou DNC) sont donc souvent contradictoires avec les objectifs de stabilité physique.

2.1.4 Approches de gestion alternative

Afin de pallier les problématiques inhérentes à la gestion conventionnelle des rejets décrites plus haut, de nouvelles approches ont été développées et mises en oeuvre sur certains sites. Une première approche permettant de limiter les instabilités physiques des parcs à résidus consiste à déposer les résidus sous forme densifiés à une teneur en eau (massique) plus faible

que les résidus conventionnels en pulpe (Bussière et Guittonny, 2020). Ils peuvent par exemple être déposés épaissis avec une teneur en eau entre 30 et 55%, en pâte (teneur en eau entre 15 et 30%) ou sous forme de gâteau avec moins de 15% d'eau (Martin, 2018).

Une autre approche consiste à codisposer les roches stériles et les résidus dans les aires de déposition, soit de manière séparée et sans mélange, soit sous la forme d'un mélange homogène (mélange total), ou tout autre degré de mélange intermédiaire (Wickland *et al.*, 2006). L'objectif de ces approches de codisposition est d'utiliser les propriétés hydrogéotechniques ou mécaniques différentes des deux types de rejets (résidus et roches stériles) pour améliorer les propriétés des aires d'entreposage (Bussière et Guittonny, 2020). D'une part, les mélanges homogènes comme le Paste Rock (Wilson *et al.*, 2003) utilisent la porosité des roches stériles pour y disposer les résidus. Le ratio de la masse sèche de roches stériles sur celle des résidus permet de caractériser le mélange et peut être compris entre 0.67 et 8 (Wickland *et al.*, 2010). Le ratio optimal de stériles par unité de masse de résidus peut être défini comme le rapport pour lequel les résidus remplissent la totalité de la porosité des stériles (Jehring et Bareither, 2016). Dans ce cas, le mélange ainsi obtenu permet de réduire la taille des aires de déposition des rejets, de diminuer la perméabilité des roches stériles, de renforcer la résistance au cisaillement des résidus, et d'aider à maintenir les stériles saturés pour prévenir la génération de DMA (Wickland *et al.*, 2006, 2010; Antonaki *et al.*, 2018). Néanmoins, les mélanges homogènes de roches stériles et de résidus sont difficiles à obtenir en pratique pour des raisons opérationnelles (Gowan *et al.*, 2010).

La codisposition des roches stériles et des résidus de manière séparée peut être utilisée pour mettre à profit la conductivité hydraulique saturée élevée des roches stériles pour créer des drains à l'intérieur des parcs à résidus. Cette approche permet notamment d'accélérer la dissipation des pressions interstitielles dans les rejets, réduisant donc le temps nécessaire entre deux dépositions et contribuant à augmenter plus rapidement la résistance mécanique des résidus entreposés (Bolduc et Aubertin, 2014; Saleh Mbemba, 2016). La résistance mécanique élevée des roches stériles permet aussi de renforcer les parcs à résidus, et ainsi d'améliorer leur résistance mécanique statique et dynamique (James *et al.*, 2013; Ferdosi *et al.*, 2015; Jahanbakhshzadeh et Aubertin, 2020; Contreras *et al.*, 2020; Zafarani *et al.*, 2020). Cependant, ce type de codisposition est plutôt une amélioration des parcs à résidus existants et ne permet pas d'entreposer toutes les roches stériles qui peuvent être produites en grand volume dans les mines à ciel ouvert. Une autre approche de plus en plus considérée est la déposition des rejets en fosses qui est détaillée dans la section ci-dessous.

2.2 Remblayage des fosses

2.2.1 Généralités

Le remblayage a pour objectif d'utiliser les fosses afin d'y entreposer des rejets miniers (Figure 2.1). La déposition des rejets dans les fosses est une pratique de plus en plus employée, acceptée, et perçue comme une bonne pratique de réhabilitation dans certains secteurs de l'industrie minière et parmi les instances réglementaires (Puhalovich et Coghill, 2011; MEND, 2015). Il s'agit par exemple d'une règle imposée pour la gestion des rejets de mines d'uranium en Saskatchewan (MEND, 2015). Le remblayage des fosses possède de nombreux avantages et constitue une alternative intéressante aux structures d'entreposage en surface (Gammons *et al.*, 2009; Puhalovich et Coghill, 2011; MEND, 2015). Elle permet par exemple et de réduire la surface des structures de déposition en surface, d'immobiliser physiquement et de manière permanente les rejets, et diminue donc les risques associés aux instabilités géotechniques des structures d'entreposage. Elle contribue aussi à diminuer l'empreinte écologique des projets miniers et est souvent mieux acceptée socialement, notamment car elle permet le retour des terrains à leur aspect, voire leur utilisation d'origine (MEND, 2015). De plus, le remblayage des fosses offre l'opportunité d'isoler chimiquement les rejets miniers problématiques de l'atmosphère en les plaçant en contact avec une formation géologique plus profonde, naturellement stable, de faible perméabilité et peu connectée au réseau hydrographique et aux écosystèmes en surface (Puhalovich et Coghill, 2011). La fosse peut être remblayée sur toute sa hauteur, ce qui a l'avantage de maximiser la quantité de rejets entreposés, mais nécessite l'ajout d'un recouvrement pour éviter l'oxydation des rejets au-dessus du niveau phréatique si ceux-ci sont réactifs (Adu-Wusu et Yanful, 2007; Bussière et Guittonny, 2020). Au contraire, le remblayage de la fosse seulement dans la partie située en dessous du niveau phréatique crée naturellement un recouvrement en eau. De plus, lorsque le lac de fosse situé au-dessus des rejets fonctionne comme un piège hydraulique (c'est-à-dire, que l'eau de nappe phréatique est drainé vers la fosse), la migration des contaminants depuis la fosse vers l'environnement est limitée (McCullough *et al.*, 2013). Cependant, à cause du phénomène d'évapoconcentration, la qualité de l'eau peut se dégrader au cours du temps (Castendyk et Eary, 2009). Enfin, le remblayage des fosses peut aussi être vu comme un moyen d'éviter la formation de lacs de fosse dont la qualité de l'eau peut se détériorer au cours du temps et affecter les écosystèmes en aval (Puhalovich et Coghill, 2011).

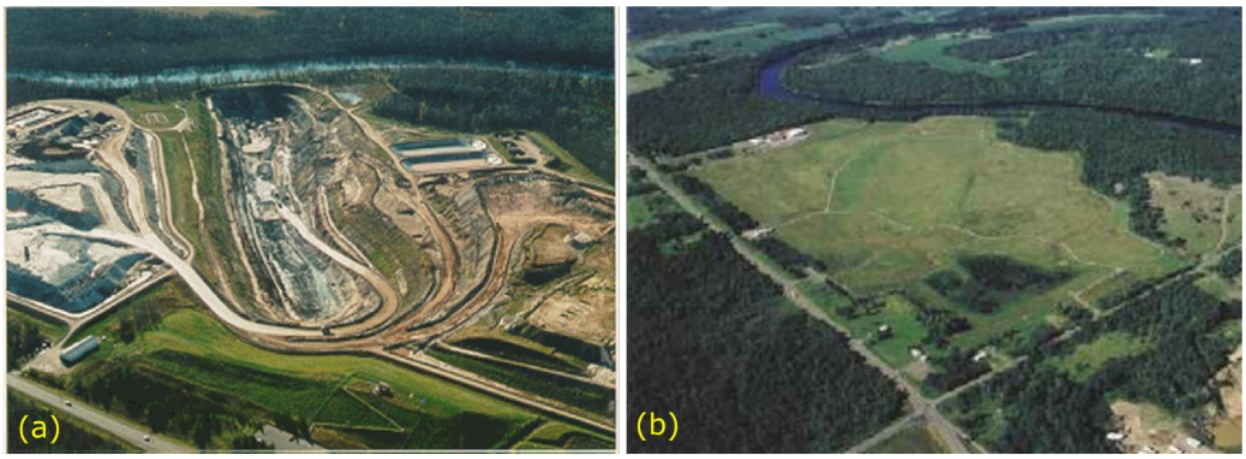


Figure 2.1 Remblayage de la fosse Flambeau Mine et création d'un parc à son emplacement. (a) Avant le remblayage et (b) après le remblayage. Crédits : Département des ressources naturelles du Wisconsin (`https://dnr.wisconsin.gov/`), reproduit avec autorisation.

2.2.2 Défis liés au remblayage des fosses

De nombreux défis techniques et environnementaux compliquent le remblayage des fosses pour les opérateurs miniers. Premièrement, la fosse ne peut être remblayée tant qu'elle est toujours en opération, ce qui nécessite un espace de stockage temporaire et une planification adaptée des séquences de minage pour un remblayage progressif (Puhalovich et Coghill, 2011; MEND, 2015; Rimélé *et al.*, 2018; Bussière et Guittonny, 2020). Le remblayage des fosses risque aussi de « stériliser » la ressource et hypothèque tout développement futur (Puhalovich et Coghill, 2011; MEND, 2015), alors que les nouvelles technologies de minage et de traitement/concentration ainsi que l'augmentation des cours des matières premières pourraient rendre économique des gisements autrefois considérés comme non rentables. Ensuite, en cas de poursuite du minage par opérations souterraines, l'ajout d'une contrainte mécanique supplémentaire formée par le poids des rejets miniers remblayés pourrait affecter la stabilité des piliers de surface et de soutènement (Puhalovich et Coghill, 2011; MEND, 2015). La consolidation des rejets entreposés peut aussi entraîner des tassements différentiels et altérer la performance des recouvrements en surface visant à limiter les interactions avec l'atmosphère (Puhalovich et Coghill, 2011; Bussière et Guittonny, 2020).

Enfin, la stabilité géochimique des rejets entreposés ne peut être garantie. En effet, la déposition de rejets réactifs sous le niveau phréatique et en conditions saturées pourrait entraîner la solubilisation de certain minéraux dans les conditions du milieux générant du DNC (Plante, 2010; Blowes *et al.*, 2014), ou la génération de DMA par réaction avec l'oxygène dissous dans l'eau souterraine (Santofimia *et al.*, 2013; Barfoud *et al.*, 2019). Les rejets situés au-dessus du

niveau phréatique pourraient également être oxydés par l'apport d'oxygène atmosphérique à travers le roc fracturé, et ce même après la fin du remblayage et la construction d'un recouvrement au-dessus des rejets (Nachshon *et al.*, 2011; Villain *et al.*, 2015; Dragila *et al.*, 2015). L'écoulement de l'eau souterraine dans la fosse remblayée pourrait aussi disperser dans l'environnement les solutés contenus dans l'eau interstitielle des rejets (Puhalovich et Coghill, 2011), comme des métaux lourds non extraits (Moldovan *et al.*, 2008; Zhang *et al.*, 2021a) ou des cyanures utilisés pour la concentration de l'or par exemple (Donato *et al.*, 2007; Anning *et al.*, 2019), créant un risque de contamination des écosystèmes en aval de la fosse. Les risques peuvent donc être importants et ont par exemple entraîné l'abandon du remblayage par des roches stériles de la fosse de la mine Stratmat à cause d'un risque de relargage de métaux et de sulfate (MEND, 2015).

2.2.3 Mitigation et prévention des risques géochimiques associés aux rejets déposés dans les fosses

Diverses méthodes d'entreposage des rejets dans les fosses ont été proposées afin de répondre à certaines problématiques d'ordre géochimiques et liées au remblayage. Leurs utilisations dépendent des caractéristiques hydrogéotechniques et géochimiques des rejets ainsi que des spécificités du site. L'objectif de ces méthodes est principalement de conserver les rejets dans des conditions permettant de contrôler la réactivité des rejets entreposés, et/ou de limiter le transport de contaminants depuis la fosse vers l'environnement (MEND, 2015).

Entreposage en conditions sèches

L'entreposage en conditions sèches des rejets dans les fosses est utilisé lorsque la nappe phréatique est suffisamment basse et n'est pas affleurante dans la fosse par exemple. La fosse est remblayée sur toute sa profondeur et une couverture de type barrière à l'oxygène et/ou à l'eau doit être installée afin de prévenir l'oxydation des rejets. Cette technique est notamment employée à la mine Whistle en Ontario (Ayres *et al.*, 2012), où la totalité des 6,4 million de tonnes de roches stériles génératrices d'acide ou de DNC ont été remblayés, puis recouverts par une barrière à l'oxygène et à l'eau de type CEBC et une couche de protection de 1,2 m pour permettre la revégétalisation du site (MEND, 2015). Cette technique est aussi employée à la mine de Kimheden (Suède), où la fosse a été remblayée avec des stériles miniers et recouvert d'une couverture de type barrière à l'oxygène (Villain *et al.*, 2015). Ce type de déposition avec recouvrement fait néanmoins l'hypothèse que les murs de la fosse sont imperméables à l'eau et à l'air. Cette hypothèse a été remise en question à cause de la poursuite de l'oxydation des stériles miniers remblayés à la mine de Kimheden (Villain *et al.*,

2015), que corrobore des observations de circulation d'air atmosphérique dans les massifs rocheux fracturés soumis à aux gradients de température journaliers (Nachshon *et al.*, 2011; Dragila *et al.*, 2015).

Entreposage en conditions saturées

L'entreposage des rejets en conditions saturées peut se faire lorsque la nappe phréatique est suffisamment élevée et affleure dans la fosse. Les rejets peuvent être entreposés sous le niveau phréatique, ou une couverture en eau peut être utilisée afin de limiter la diffusion de l'oxygène (Bussière et Guittonny, 2020). Cette méthode est actuellement utilisée à la carrière de Don Rouyn par exemple, où 700 000 mètres cubes de résidus à forte teneur en pyrite sont recouverts par une hauteur d'eau comprise entre 0,8 et 2,8 m (Awoh *et al.*, 2013).

Amélioration physicochimique des rejets remblayés

L'ajout de chaux ou de calcite peut permettre de stabiliser chimiquement les rejets afin de mitiger la génération de DMA ou de DNC. Par exemple, de la chaux a été mélangée à des roches stériles remblayées à raison 1,8 kg de chaux par tonnes de stériles à la mine de Whistle en Ontario (Ayres *et al.*, 2012). À la mine McClean Lake, les résidus remblayés ont été mélangés à de la calcite afin de neutraliser le DMA et favoriser la précipitation de l'arsenic, et avec du chlorure de baryum pour immobiliser le radon (MEND, 2015).

Les propriétés des rejets peuvent aussi être améliorées en vue de réduire l'impact environnemental du remblayage. Par exemple, les résidus peuvent être déposés à une teneur en eau faible afin de favoriser leur consolidation et ainsi accélérer la diminution de leur conductivité hydraulique (MEND, 2015). Cette technique est notamment utilisée à la mine de McClean Lake où la consolidation des résidus d'un gisement d'uranium a été accélérée en apposant une épaisse couverture de sol et de roche au-dessus de ces derniers afin de réduire leur porosité et donc diminuer leur conductivité hydraulique (Clifton *et al.*, 2002). De cette manière, les flux advectifs d'eau souterraine à travers les rejets étaient réduits et déviés vers le roc environnant, réduisant ainsi l'apport d'oxygène dissous et le transport de contaminants depuis la fosse vers l'environnement (Misfeldt *et al.*, 1999).

Utilisation de structures d'ingénierie

Finalement, des structures d'ingénierie construites à l'intérieur des fosses peuvent être ajoutées pour améliorer les performances environnementales du remblayage. Par exemple, l'utilisation de drains dans les fosses permet d'accélérer la consolidation des résidus et de minimiser

leur conductivité hydraulique réduisant alors le flux d'eau souterraine dans les rejets (MEND, 2015). Les structures d'ingénierie peuvent aussi prendre la forme de structures de confinement, comme la technique de l'enveloppe perméable (Matich et Tao, 1986) dont l'objectif est de réduire la dispersion de contaminants depuis les rejets entreposés dans la fosse vers l'environnement. Les structures de confinement et notamment la technique de l'enveloppe perméable sont plus longuement discutées dans la section suivante.

2.3 Technique de l'enveloppe perméable

La technique de l'enveloppe perméable consiste à placer à la périphérie de la fosse une couche composée de matériau plus perméable que les rejets remblayés afin de réduire les interactions avec l'eau souterraine (Figure 2.2 ; Matich et Tao, 1986; Ben Belfadhel, 2000; Morin et Hutt, 2001). En effet, lorsque le roc environnant est de faible conductivité hydraulique, un matériau hautement perméable possède le même pouvoir d'isolement hydraulique des rejets qu'un matériau faiblement perméable (Strack, 2017). Ainsi, le contraste de perméabilité entre les deux matériaux permet de créer des chemins préférentiels d'écoulement et de dévier les lignes de courant des rejets (Figure 2.2b), constituant un « court-circuit » hydraulique et réduisant le flux advectif d'eau souterraine. Cette méthode permet ainsi de limiter les flux de soluté depuis les rejets remblayés vers l'environnement, et d'augmenter le temps de rétention des solutés dans la fosse (West *et al.*, 2003; Salama *et al.*, 2002). L'enveloppe peut être créée à partir de matériaux d'emprunt comme des graviers (Salama *et al.*, 2002), ou à partir de matériaux disponibles sur site comme des roches stériles non réactives (Thériault, 2004). Cette technique est notamment utilisée à la mine d'uranium de Rabbit Lake (Saskatchewan, Canada), où une double couche de gravier et de sable a été utilisée pour limiter respectivement le flux advectif et diffusif de radionucléides depuis les résidus remblayés vers l'environnement (Ben Belfadhel, 2000; Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; MEND, 2015), ainsi qu'à la mine de Langer Heinrich en Namibie (Hore et Luppnow, 2015).

2.3.1 Réduction du flux d'eau

La technique de l'enveloppe perméable repose sur l'existence d'un contraste de perméabilité entre les rejets remblayés et les matériaux de l'enveloppe afin de dévier les lignes de courant. En effet, plus le ratio entre la perméabilité de l'enveloppe et des rejets est grand, plus la technique de l'enveloppe perméable est efficace pour réduire le flux d'eau dans les rejets remblayés (Ben Belfadhel, 2000; Thériault, 2004; Rousseau et Pabst, 2018). Ainsi, la diminution de la conductivité hydraulique des résidus permet d'augmenter l'efficacité de la technique (Misfeldt *et al.*, 1999). Le contraste de conductivité hydraulique entre les rejets

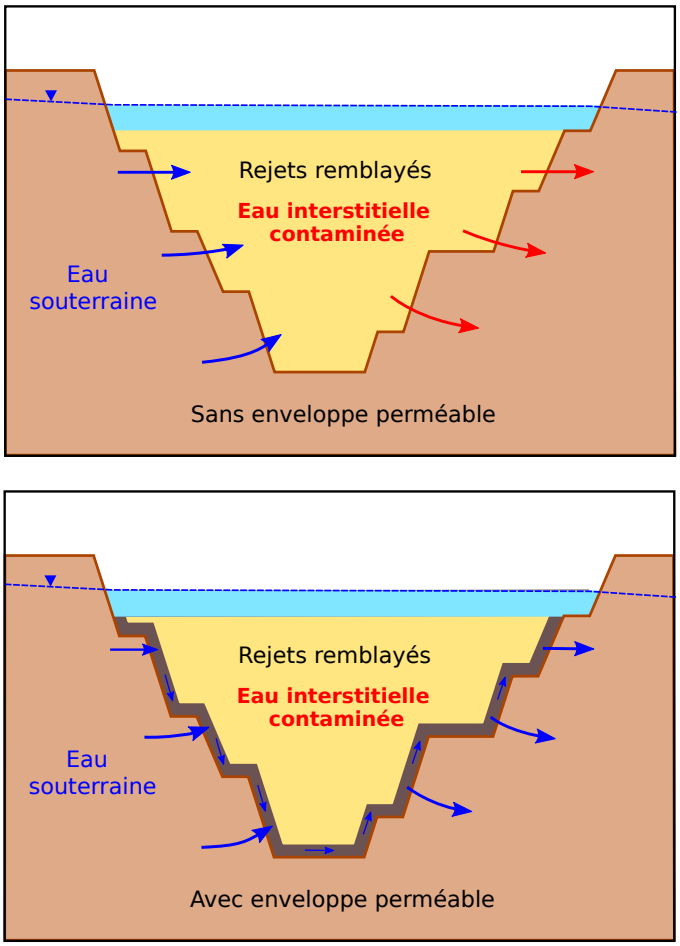


Figure 2.2 Principe d'une enveloppe perméable permettant de réduire les flux d'eau dans des rejets remblayés (Matich et Tao, 1986; West *et al.*, 2003). (a) Sans enveloppe perméable, l'eau souterraine (flèches bleues) circule à travers les rejets remblayés et contribue à disperser des contaminants dans l'environnement (flèches rouges) (b) avec enveloppe perméable, l'eau souterraine est déviée et s'écoule dans la couche plus perméable autour des rejets.

et l'enveloppe perméable devrait toutefois être supérieur à un facteur 10 pour qu'elle puisse dévier efficacement l'eau souterraine des rejets (Misfeldt *et al.*, 1999; Thériault, 2004; Rousseau et Pabst, 2018). Par exemple, lorsque la perméabilité de l'enveloppe est 100 fois plus grande que celle des rejets entreposés, la réduction du flux d'eau peut être conséquente et atteindre plus de 90% (Thériault, 2004; Rousseau et Pabst, 2018). En revanche, lorsque la perméabilité de l'enveloppe est supérieure à celle du roc mais plus faible que celle des rejets ($K_{roc} \leq K_{enveloppe} \leq K_{rejets}$), la technique n'est pas efficace et peut même contribuer à augmenter le flux dans les rejets (Thériault, 2004). Diverses solutions analytiques existent aussi et permettent d'estimer la réduction du flux d'eau souterraine dans les rejets pour des

géométries simplifiées de fosse et en deux dimensions (notamment Kazarin et Obnosov, 2016; Strack, 2017; Kassimov et Obnosov, 2018).

2.3.2 Réduction du transport de contaminants vers l'environnement

L'ajout d'une enveloppe perméable dans une fosse remblayée a un impact immédiat sur le transport de soluté dans les rejets remblayés. En effet, la réduction du flux d'eau permet de réduire d'une même quantité le transport advectif de réactif entrant dans les rejets ou de contaminants en aval de la fosse (Figure 2.2b) (Ben Belfadhel, 2000; Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Lange et Van Geel, 2011). Néanmoins, plus la conductivité hydraulique des matériaux de l'enveloppe perméable est élevée, plus le flux d'eau aux abords immédiats des rejets sera important. Lorsque le transport d'un contaminant depuis la fosse vers l'environnement est étudié, ce plus grand flux d'eau peut entraîner des concentrations plus faibles dans l'enveloppe par dilution, et donc augmenter les gradients de concentration à l'interface entre l'enveloppe et les rejets sont plus élevés (Misfeldt *et al.*, 1999; Ben Belfadhel, 2000; West *et al.*, 2003). Ainsi, une augmentation du transport de contaminants par diffusion est attendue, et la technique de l'enveloppe perméable peut parfois être inefficace à court terme et augmenter le flux de contaminants par rapport à des rejets placés sans confinement dans les fosses (Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Lange et Van Geel, 2011). Cependant, les gradients de concentration à l'interface tendent à diminuer au cours du temps, ce qui garantie son efficacité sur le long terme. Ce phénomène permet donc à l'enveloppe perméable de retenir un contaminant dans une fosse pour une plus longue période de temps. Ce résultat a été démontré à la fois au moyen de modèles physiques de laboratoire et de simulations numériques (Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Lange et Van Geel, 2011). Un moyen de réduire le transport de contaminants à court terme lorsque la technique de l'enveloppe perméable est utilisée est d'introduire une couche de perméabilité intermédiaire entre l'enveloppe et les résidus, ce qui a pour effet de réduire le transport diffusif (Salama *et al.*, 2002). Cette technique de la double enveloppe est actuellement utilisée à la mine Rabbit Lake (MEND, 2015)

2.3.3 Autres structures de confinement

D'autres techniques de confinement permettent de réduire le transport de contaminants depuis les rejets remblayés dans la fosse vers l'environnement, par exemple la technique de l'enveloppe perméable naturelle ou de la cage hydraulique (Misfeldt *et al.*, 1999). La technique de l'enveloppe perméable naturelle (*natural surround*) consiste à utiliser la formation géologique encaissante comme enveloppe perméable. Cette technique n'est efficace que si

la perméabilité du roc environnant est plus élevée que celle des rejets. L'efficacité de cette technique repose donc principalement sur la minimisation de la perméabilité des rejets entreposés, par exemple, en accélérant leur consolidation ou en les densifiant (Misfeldt *et al.*, 1999; MEND, 2015).

La technique de la cage hydraulique consiste à créer un chemin préférentiel dans le roc environnant autour et à une certaine distance de la fosse (Misfeldt *et al.*, 1999). Cette technique est similaire à celle de l'enveloppe perméable, à l'exception que la structure de confinement n'est alors plus dans la fosse, mais située dans le roc et à une certaine distance de la fosse, ce qui peut être créée par exemple au moyen d'une fracturation de la roche par sautage (Begor *et al.*, 1989). Le principal avantage de cette méthode est qu'elle permet de ne pas augmenter le transport de contaminants par diffusion à court terme, comme c'est le cas pour l'enveloppe perméable (Misfeldt *et al.*, 1999).

En pratique, seules les techniques de l'enveloppe perméable et de l'enveloppe perméable naturelle sont utilisées dans l'industrie minière (MEND, 2015). La technique de la cage hydraulique est appliquée par exemple au site de stockage de déchets radioactifs de faible à moyenne activité de Richard en République tchèque (Haverkamp *et al.*, 2005), où les déchets sont d'abord ceinturés par une couche de béton de faible perméabilité puis par une couche de gravier de perméabilité élevée. Elle a aussi été utilisée afin de créer des chemins d'écoulements préférentiels pour attirer de l'eau contaminée vers un puits de pompage pour décontamination (Begor *et al.*, 1989; Gheorghiu *et al.*, 2001; Smerekanicz *et al.*, 2001).

2.4 Zone Endommagée par Sautage

2.4.1 Influence du sautage sur le roc environnant

L'excavation de la fosse à ciel ouvert par sautage peut engendrer une fragmentation du mur ainsi que l'ouverture et la création de nouvelles fractures causées par la pénétration des gaz d'explosif dans la roche environnante (Beale et Read, 2014; Hoek et Karzulovic, 2000). Le sautage est donc susceptible de modifier la perméabilité du roc au voisinage immédiat du mur de la fosse. La zone affectée par le sautage de la roche est appelée Zone Endommagée par Sautage (ZES) ou *Blast Damage Zone* (BDZ) en anglais. Sa taille dépend des caractéristiques de la roche et du sautage, et peut s'étendre sur plus de 100 mètres dans le cas d'un sautage à haute énergie et sans mesure de contrôle (Hoek et Karzulovic, 2000). La taille de la ZES dans les mines à ciel ouvert peut être estimée selon deux méthodes. La première estime la profondeur de la ZES comme la moitié de la distance entre les charges explosives utilisées pour le sautage (Worsey, 1981). La seconde approche utilise la hauteur des bancs et les

caractéristiques du sautage comme critères (Hoek et Karzulovic, 2000). Par exemple, dans le cas d'un sautage contrôlé, la taille de la ZES est estimée égale à la moitié de la hauteur du banc sauté. En pratique, des observations de terrain menées sur plusieurs fosses à ciel ouvert suggèrent une taille caractéristique comprise entre 10 et 20 mètres (Beale et Read, 2014; Poulsen *et al.*, 2017).

La distribution des nouvelles fractures créées par le sautage dans la ZES est hétérogène et dépend de la distance au mur (l'énergie se dissipe avec la distance au point de sautage). Entre 0 et 4 mètres, la densité de fractures est maximale à cause de la proximité au mur de fosse et au sautage (Poulsen *et al.*, 2017). À cet endroit, la densité peut être caractérisée par la longueur cumulée de fractures visibles sur le mur de l'excavation (Tuckey, 2012; Tuckey *et al.*, 2016; Tuckey et Stead, 2016). La densité de fractures décroît ensuite avec la distance au mur. La zone intermédiaire (entre 4 et 15 mètres du mur) est composée d'un mélange de fractures créées par le sautage et par le relâchement des contraintes mécaniques. Au-delà de 15 mètres, seules des fractures par relâchement sont présentes (Poulsen *et al.*, 2017). Des études numériques ont montré que la loi d'évolution de la densité de fractures était de type exponentiel inverse (Siamaki *et al.*, 2018). Ces observations sont similaires à celles menées dans les tunnels dédiés au stockage de déchets radioactifs, où la zone endommagée est aussi composée de plusieurs zones et où la densité de fractures décroît également exponentiellement avec la distance à la face exposée (Bossart *et al.*, 2002; Thovert *et al.*, 2011; Mourzenko *et al.*, 2012; Cho *et al.*, 2013; Tsang *et al.*, 2015).

L'orientation des fractures de la ZES peut être soit isotrope (c'est-à-dire sans orientation préférentielle) soit anisotrope et sub parallèle au mur de fosse, soit conjuguée à des familles de fractures existantes (Siamaki *et al.*, 2018). Néanmoins, aucune observation expérimentale n'a permis de valider ces simulations dans le cas d'une fosse à ciel ouvert. De telles orientations préférentielles ont cependant déjà été observées sur le terrain pour des tunnels de stockage de déchets radioactifs (Bossart *et al.*, 2002; Thovert *et al.*, 2011). Pour ces derniers, des modèles conceptuels de la zone endommagée ont été proposés, et considéraient les fractures comme des plaques parallèles d'une forme régulière (circulaire, carrée, ou polygonale) et séparées d'une distance fixe et placées aléatoirement dans l'espace selon une loi de densité décroissante et potentiellement localement parallèles au tunnel excavé (Figure 2.3 ; Thovert *et al.*, 2011; Mourzenko *et al.*, 2012).

2.4.2 Influence du sautage sur l'écoulement

Les nouvelles fractures de la ZES contribuent notamment à créer des chemins d'écoulements préférentiels pour l'eau souterraine, ce qui peut affecter significativement la migration de

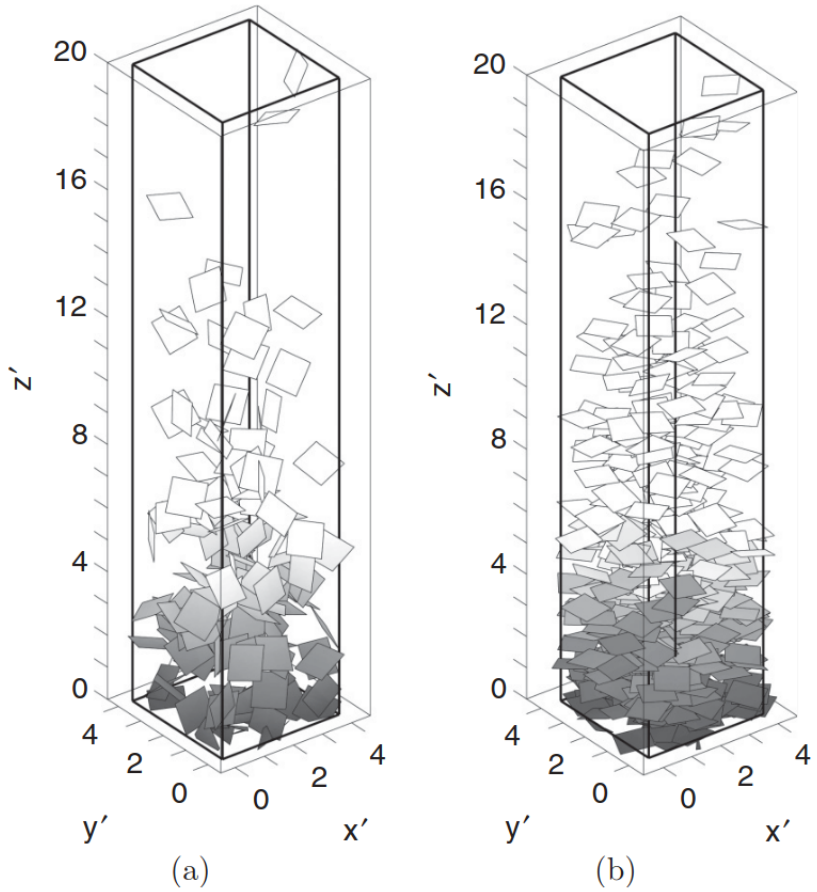


Figure 2.3 Modèle conceptuel du réseau de fractures de la zone endommagée (a) considérant une orientation isotrope et une faible densité initiale et (b) avec une orientation anisotrope et une large densité initiale. Les fractures sont ici représentées par des carrées, mais peuvent également prendre la forme de disque ou d'hexagone. La couleur (gris jusque blanc) indique la distance par rapport au plan ($Ox'y'$). D'après Mourzenko *et al.* (2012), reproduit avec autorisation.

l'eau dans les massifs rocheux dont la perméabilité de la matrice est généralement faible, notamment si la connectivité des fractures est grande (Odling *et al.*, 1999; Berkowitz, 2002). En pratique, les fractures nouvellement créées lors du sautage de la roche et dans les mines à ciel ouvert peuvent être connectées sur une distance d'environ 10 à 15 m (Morth *et al.*, 1972; MEND, 1995; McCloskey et Bless, 2005), permettant la circulation de fluides et de gaz sur de larges distances. Ainsi, elles sont susceptibles d'influer significativement l'écoulement de l'eau souterraine, et de favoriser le développement de chemins préférentiels d'écoulements le long des murs et de la base de la fosse (Stacey *et al.*, 2003; Foster *et al.*, 2018).

L'impact de la zone endommagée sur l'écoulement peut être caractérisé au moyen de la perméabilité équivalente du réseau de fractures (Bossart *et al.*, 2002; Cho *et al.*, 2013). Celle-ci

peut être déterminée en réalisant des essais d'infiltration (Tsang *et al.*, 2015) et en considérant le réseau de fractures comme un milieu poreux homogène où s'applique la loi de Darcy. Cette approche suppose l'existence d'un volume élémentaire représentatif, hypothèse généralement vérifiée pour des réseaux de fractures denses et très connectés (Berkowitz, 2002; Berre *et al.*, 2019), ou lorsque l'écoulement est gouverné par les fractures de faible taille par rapport à celle du domaine modélisé (Darcel *et al.*, 2003; Hadgu *et al.*, 2017). Dans l'approche par milieu poreux équivalent, un seul continuum est considéré, et les propriétés de la roche et des fractures sont prises en compte implicitement dans les propriétés du milieu poreux équivalent (Berkowitz, 2002). Cependant, la définition de propriétés équivalentes du milieu poreux représentatives de l'ensemble du domaine modélisé peut être difficile, notamment lorsque la densité de fractures est faible ou que leur taille moyenne est semblable à celle du domaine (Berre *et al.*, 2019).

L'approche par milieu poreux équivalent peut aussi être généralisée en considérant plusieurs milieux poreux superposés. En particulier, l'approche par double porosité, (Warren et Root, 1963) idéalise le roc fracturé comme la superposition de deux milieux représentant respectivement le roc sain, considéré homogène et isotope (porosité primaire), et les fractures (porosité secondaire). L'écoulement prend place uniquement dans la porosité secondaire (c'est-à-dire dans les fractures), mais des transferts de matière (eau et soluté par exemple) peuvent avoir lieu entre les deux milieux (Sudicky, 1990; Gerke et Genuchten, 1993a,b). La migration de fluides et de solutés dans la première porosité se fait uniquement par diffusion.

Un autre moyen de caractériser l'influence de la ZES sur l'écoulement est de considérer les fractures comme des conduits ayant des propriétés différentes de la roche (Thovert *et al.*, 2011). Cette approche, appelée fracturation discrète ou *Discrete Fracture Network* (DFN) en anglais, permet de prendre en compte les effets individuels de chaque fracture sur l'écoulement, mais nécessite plus de données d'entrée que l'approche par milieu poreux équivalent (Berkowitz, 2002). En effet, un maximum d'informations doivent être recueillies à la surface et dans des forages, afin de générer de manière stochastique plusieurs réseaux de fractures discrets pour obtenir un comportement moyen représentatif (Lemieux *et al.*, 2005; Lepillier *et al.*, 2020). Pour cela, la génération de réseaux de fractures « synthétiques » doit reproduire les caractéristiques des réseaux naturels, comme leur forme complexe dans l'espace (Gertsch, 1995), l'organisation spatiale fractale des réseaux et les interactions entre les fractures (Bour et Davy, 1999; Darcel *et al.*, 2003), la corrélation entre longueur et ouverture (Bang *et al.*, 2012) ou encore les mécanismes de création et d'arrêt de la croissance des fractures (Davy *et al.*, 2010, 2013). En pratique cependant, les fractures sont souvent idéalisées comme circulaires (Wang et Ghassemi, 2011; Bang *et al.*, 2012; Karra *et al.*, 2015; Hadgu *et al.*, 2017), carrées ou hexagonales (Mourzenko *et al.*, 2011a), leur centre placé aléatoirement dans le

domaine via un processus de Poisson (Min *et al.*, 2004; Karra *et al.*, 2015; Wu *et al.*, 2021) et leur ouverture souvent considérée constante. Ces simplifications ont des répercussions sur le comportement hydraulique des fractures. Par exemple, un processus de Poisson engendre des perméabilités 2 à 10 fois plus élevées que celles obtenues avec la méthode cinématique par exemple (c'est-à-dire considérant le mécanisme de croissance et d'arrêt des fractures ; Maillot *et al.*, 2016).

Les approches par milieu équivalent et par fracturation discrète peuvent parfois être complémentaires. Des approches hybrides, où les petites fractures sont incluses dans un milieu poreux équivalent et où les fractures régionales plus importantes sont modélisées explicitement, sont fréquentes (Lee *et al.*, 2001; Jiang et Younis, 2017; Li *et al.*, 2017; Berre *et al.*, 2019). La perméabilité équivalente dans l'approche par milieu continu peut aussi être dérivée à partir d'une modélisation du réseau de fractures par l'approche par fracturation discrète, soit au moyen de modèles numériques (Min *et al.*, 2004; Baghbanan et Jing, 2007; Chen *et al.*, 2008; Lei *et al.*, 2015; Maillot *et al.*, 2016; Young *et al.*, 2019), soit à partir de relations empiriques ou analytiques (Snow, 1965; Oda, 1985; Mourzenko *et al.*, 2011a, 2012; Vu *et al.*, 2013). Parmi les outils analytiques, la théorie de la percolation (Stauffer et Aharony, 1992) est un outil puissant pour relier la perméabilité du réseau de fractures directement à sa densité et à sa connectivité (Alkan, 2009; Mourzenko *et al.*, 2011a, 2012).

2.5 Modèles mathématiques décrivant les phénomènes de transport dans les matériaux granulaires et le roc

2.5.1 Loi d'écoulement en milieu poreux

Écoulements en conditions saturées

La loi de Darcy permet de décrire l'écoulement d'un fluide dans un milieu poreux. Elle est valable pour un écoulement laminaire, isotherme, purement visqueux (sans effet inertiel) et pour les fluides incompressibles et newtoniens (Bear, 1972). Elle s'écrit usuellement sous sa forme locale de la manière suivante :

$$\vec{v} = -\frac{\boldsymbol{k}}{\mu}\,\boldsymbol{\nabla}(P - \rho g z) \tag{2.3}$$

Avec $\boldsymbol{k}$ le tenseur de perméabilité du milieu [L^2], ρ la masse volumique du fluide [$M.L^{-3}$], g l'accélération de la gravité [$L.T^{-2}$], μ la viscosité dynamique du fluide [$M.L^{-1}.T^{-1}$], P le champ de pression hydrostatique [L] et z la coordonnée verticale (orienté dans le sens et la direction du vecteur de gravité). Dans le cas d'un fluide incompressible dans un champ de gravité

constant (i.e. $\rho g = cst$), la charge hydraulique peut être définie comme :

$$h = \frac{P}{\rho g} + z \tag{2.4}$$

conduisant à une nouvelle expression de la loi de Darcy (Bear, 1972) :

$$\vec{v} = -\frac{\boldsymbol{k}\rho g}{\mu}\,\boldsymbol{\nabla} h \tag{2.5}$$

Le terme $\boldsymbol{k}\rho g/\mu$ est appelé tenseur de conductivité du fluide (ou conductivité hydraulique dans le cas de l'eau) et est noté $\boldsymbol{K}$ [L.T^{-1}]. Le terme $\rho g/\mu$ pour l'eau est égal à environ 1,1×10^{-7} m^{-1}.s^{-1} dans les conditions normales de pressions et de températures.

La loi de Darcy est à l'origine une loi empirique établie pour l'écoulement macroscopique de l'eau dans un cylindre rempli de sable (Darcy, 1856). Plus récemment, la loi de Darcy a été validée analytiquement en appliquant un changement d'échelle par moyenne volumique à l'équation de Stokes à partir de l'échelle du pore et pour un écoulement d'une seule phase fluide dans un milieu poreux homogène (Bear, 1972; Whitaker, 1986, 1999; Soulaine, 2012). L'équation de Darcy n'est pas la seule équation qui permette de décrire l'écoulement dans les milieux poreux. D'autres méthodes de changement d'échelle peuvent être utilisées et mènent à d'autres lois d'écoulement (Sochi, 2010; Hunt *et al.*, 2014).

Écoulements en conditions non saturées

Le terme écoulement non saturé désigne en général les écoulements diphasiques air-eau, où l'air est le fluide non mouillant et l'eau est le fluide mouillant. L'équation de Richards est souvent utilisée pour décrire le transport de l'eau dans les matériaux granulaires (Richards, 1931) :

$$\frac{\partial \theta_w(\psi)}{\partial t} - \nabla[\boldsymbol{k_{sat}} k_r(\psi)\boldsymbol{\nabla}(\psi - \rho g z)] = Q_{sp} \tag{2.6}$$

Avec $\theta_w(\psi)$ la teneur en eau [-] fonction de la succion ψ [M.L^{-1}.T^{-2}], $\boldsymbol{k_{sat}}$ la perméabilité du milieu en conditions saturées ($\theta_w(\psi) = 1$) [L^2], $k_r(\psi)$ la perméabilité relative du milieu [-] fonction de la succion et Q_{sp} l'ensemble des termes sources et puits.

La description du transport de l'eau par l'équation de Richards requiert les fonctions $\theta_w(\psi)$ et $k_r(\psi)$, appelées respectivement courbe de rétention d'eau et fonction de perméabilité. Ces deux fonctions peuvent être mesurées ou obtenues par des modèles prédictifs à partir des propriétés du matériau étudié (Brooks et Corey, 1964; Mualem, 1976; van Genuchten, 1980; Aubertin *et al.*, 1998, 2003; Mbonimpa *et al.*, 2006; Maqsoud *et al.*, 2012). L'équation de

Richards fait l'hypothèse que la teneur en eau θ_w et la succion ψ sont toujours à l'équilibre (via la courbe de rétention d'eau) (Vogel *et al.*, 2010) bien que ces conditions ne soient pas toujours remplies en pratique. Par exemple, il a été observé expérimentalement lors d'essais d'infiltration dans des sables que la teneur en eau et la succion pouvaient être découplés et hors équilibre (Wildenschild *et al.*, 2001). De telles conditions sont observées notamment lorsque le matériau présente des hétérogénéités dans sa structure en raison, par exemple, des différentes tailles de grains ou de la présence de macropores et de fractures, qui peuvent engendrer des écoulements préférentiels (Šimůnek *et al.*, 2003). D'autres modèles ont donc été proposés afin de tenir compte de ces hétérogénéités et écoulements préférentiel, par exemple des modèles à double porosités ou à double perméabilités (Gerke, 2007).

2.5.2 Écoulement dans une fracture

L'écoulement de l'eau dans une fracture est un écoulement visqueux causé par une différence de potentiel entre deux points. Dans le cas idéal d'une fracture sans rugosité vue sous la forme de plaques parallèles (Snow, 1965), l'écoulement de l'eau est un écoulement de Stokes contrôlé par une différence de charge de part et d'autre de la fracture. Le débit volumique Q [$L^3.T^{-1}$] est alors relié linéairement au gradient hydraulique ∇h [-] :

$$Q = -\frac{\rho g b^3}{12\mu} H \nabla h \tag{2.7}$$

Avec b [L] l'ouverture de la fracture (distance entre les deux plans parallèles) et H [L] la longueur de la fracture perpendiculaire à l'écoulement. Dans cette vision idéalisée, le débit d'eau dans une fracture est relié au carré de l'ouverture, et la loi régissant l'écoulement est appelée loi cubique (Berkowitz, 2002). La relation précédente entre débit dans une fracture et gradient hydraulique est similaire à la loi de Darcy, et permet de définir une perméabilité de fracture, reliée à l'ouverture b [L] par la relation suivante (Ishibashi *et al.*, 2015) :

$$k_{frac} = \frac{b^2}{12} \tag{2.8}$$

En réalité, les variations d'ouverture et la rugosité des fractures entraînent la formation de chemins préférentiels et l'écoulement de l'eau dans les fractures se fait en chenaux. Ce phénomène a été observé à la fois sur de terrain (Rasmuson et Neretnieks, 1986; Abelin *et al.*, 1994), lors d'essais au laboratoire (Brown *et al.*, 1998; Ishibashi *et al.*, 2012, 2015; Develi et Babadagli, 2015), et a été reproduit par des modèles numériques (Pruess et Tsang, 1990; Ishibashi *et al.*, 2012, 2015). Des résultats de terrain ont montré que plus de 90% du débit à l'intérieur une fracture pouvait se produite sur moins de 20% de sa surface (Rasmuson

et Neretnieks, 1986). La corrélation spatiale de l'ouverture influe aussi sur la répartition en chenaux de l'écoulement. Par exemple, une anisotropie de l'ouverture a tendance à créer des chenaux continus dans une direction donnée, ce qui augmente le débit dans cette direction. C'est le cas notamment dans les zones de failles, où le déplacement de matière de part et d'autre du plan de fracturation induit une anisotropie de perméabilité marquée. Dans ce cas, le débit dans la direction perpendiculaire au cisaillement est souvent beaucoup plus élevé que celui dans la direction parallèle (Gentier *et al.*, 1997; Auradou *et al.*, 2005; Auradou, 2009; Ishibashi *et al.*, 2015). Toutefois, ce phénomène a aussi été observé numériquement et expérimentalement même lorsque la rugosité est isotrope (Méheust et Schmittbuhl, 2000, 2001). Le modèle des plaques parallèles et la loi cubique locale ne permettent donc pas de décrire parfaitement ces observations, et tendent généralement à surestimer les débits dans les fractures (Pruess et Tsang, 1990; Berkowitz, 2002; Ishibashi *et al.*, 2015). Dans ces cas, une autre approche consiste à introduire divers facteurs de correction pour prendre en compte la rugosité (Witherspoon *et al.*, 1980; Lee *et al.*, 2014; Zhang *et al.*, 2015; Wang *et al.*, 2015). Il est aussi possible de recréer une surface de fracturation à partir des propriétés fractales des fractures (Ishibashi *et al.*, 2015), ou à partir de la distribution de l'ouverture et de sa variance spatiale (Wang *et al.*, 2017), puis de simuler l'écoulement en approximant localement la fracture comme une série de plaques parallèles de différentes ouvertures où s'applique localement la loi cubique (Pruess et Tsang, 1990; Ishibashi *et al.*, 2012, 2015).

2.5.3 Loi de transport de soluté

Équation d'advection-dispersion

L'évolution d'un panache de soluté non réactif de concentration C dans un milieu poreux est donnée par l'équation de conservation de la masse suivante (Bear, 1972; Freeze et Cherry, 1979; Whitaker, 1999) :

$$n_e \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla(n_e \vec{v} C) = \nabla(n_e \boldsymbol{D}^* \nabla C) \tag{2.9}$$

Cette équation est appelée couramment l'équation d'advection-dispersion, où t représente le temps [T], n_e la porosité efficace du milieu poreux [-], $\vec{v}$ la vitesse de Darcy, et $\boldsymbol{D}^*$ le tenseur de dispersion hydrodynamique selon la terminologie de Freeze et Cherry (1979). Généralement, ces paramètres varient spatialement et temporellement, et peuvent aussi dépendre de l'échelle d'observation.

Le tenseur de dispersion hydrodynamique peut se décomposer sous la forme d'une somme de deux tenseurs issus de deux mécanismes de transport distincts, soit (Bear, 1972; Bear et

Bachmat, 1990; Whitaker, 1999) :

$$\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}}^{*} = \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A,eff}} + \boldsymbol{D}_{\boldsymbol{m}} \tag{2.10}$$

Avec $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A,eff}}$ le tenseur de diffusion effectif [$L^2.T^{-1}$] dû à la diffusion moléculaire résultant des gradients de concentration de l'espèce A dans la phase considérée, et $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{m}}$ le tenseur de dispersion mécanique (Bear, 1972) [$L^2.T^{-1}$] dû aux différents chemins empruntés par la phase liquide dans le milieu poreux à l'échelle microscopique.

L'équation de transport définie plus haut (2.9) a été présentée dans le cadre du transport d'une espèce dissoute dans l'eau, mais d'autres types de transport, comme le transport de chaleur, de masse, ou de quantité de mouvement peuvent être décrits par la même équation de transport généralisée. L'ajout d'un terme de réaction permet aussi de modéliser le transport d'un soluté réactif (Bear, 1972).

Tenseur de diffusion effectif (diffusion moléculaire)

Le tenseur de diffusion effectif est relié aux propriétés du milieu poreux et s'exprime en fonction de la tortuosité (Bear, 1972; Bear et Bachmat, 1990) :

$$\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A,eff}} = D_A \boldsymbol{T}^{*} \tag{2.11}$$

Avec $\boldsymbol{T}^{*}$ le tenseur de tortuosité à l'échelle macroscopique [-], qui traduit l'élongation du chemin réel de l'écoulement à l'échelle microscopique par rapport au chemin dans la direction de l'écoulement au niveau macroscopique, et D_A le coefficient de diffusion de l'espèce A dans la phase considérée. Le tenseur de tortuosité est souvent considéré isotrope et est réduit à un scalaire, inférieur à 1 (Bear, 1972). Cependant, d'autres auteurs définissent la tortuosité de la manière inverse et dans ce cas, elle peut alors être supérieure à 1 (Grathwohl, 1998; Civan, 2011).

Le coefficient de diffusion D_A est donné par la relation suivante (Whitaker, 1999) :

$$\frac{1}{D_A} = \sum_{B \in M} \frac{x_B}{D_{AB}} \tag{2.12}$$

Avec x_B la fraction molaire de l'espèce B dans le mélange M considéré [-] et D_{AB} le coefficient de diffusion de l'espèce A dans l'espèce B. Lorsque la phase considérée est constituée de 2 espèces, A et B, et que la fraction molaire de l'espèce A est faible ($x_A \ll 1$), le coefficient de diffusion D_A est égal au coefficient de diffusion de l'espèce A dans B (Whitaker, 1999).

Tenseur de dispersion mécanique

Le tenseur de dispersion mécanique est un tenseur de rang 2 qui relie le flux macroscopique d'une espèce dissoute dans chaque direction de l'espace par rapport aux différents chemins pris par l'eau au niveau microscopique (Bear, 1972). Le tenseur de dispersion est généralement caractérisé par trois grandeurs : la dispersivité longitudinale, la dispersivité transversale horizontale et la dispersivité verticale [L] (Gelhar, 1997). Ces grandeurs dépendent généralement des propriétés du milieu poreux considéré, de la direction et de la vitesse de l'écoulement du fluide, mais aussi de l'échelle d'observation (Schulze-Makuch, 2005).

Diverses expressions du tenseur de dispersion mécanique sont proposées dans la littérature. Elles permettent de relier ses composantes aux différents coefficients de dispersivité et à la vitesse et la direction de l'écoulement (Bear, 1972; Burnett et Frind, 1987; Lichtner *et al.*, 2002). En général, les expressions diffèrent selon les hypothèses émises sur les propriétés du milieu poreux. Par exemple, dans le cas d'un milieu poreux isotrope, l'expression suivante est proposée pour les différentes composantes D_{nm} du tenseur de dispersion mécanique (Bear, 1972; Bear et Bachmat, 1990) :

$$D_{nm} = \left(\alpha_T |\boldsymbol{v}| \delta_{nm} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_n v_m}{|\boldsymbol{v}|} \right) f(Pe) \tag{2.13}$$

Avec α_T et α_L les coefficients de dispersivité transversale et longitudinale [L], v_i la composante du vecteur vitesse dans la direction i [L.T^{-1}], $|\boldsymbol{v}|$ la norme du vecteur vitesse [L.T^{-1}] et δ_{nm} le symbole de Kronecker [-]. En pratique, l'expression proposée ci-dessus est couramment utilisée lors de la modélisation du transport de soluté en considérant la fonction $f(Pe)$ égale à 1 (Bear et Bachmat, 1990). Cependant, elle ne permet pas de rendre compte de dispersivités différentes selon les directions horizontale et verticale, et d'autres expressions ont été développées pour des milieux poreux isotropes (Burnett et Frind, 1987) ou axisymétriques (Lichtner *et al.*, 2002).

Les modèles mathématiques décrivant les phénomènes d'écoulement ou de transport présentés dans cette section sont bien souvent complexes à résoudre, aussi bien que des solutions analytiques à leurs équations aux dérivées partielles ne sont connues que dans des cas idéalisés (par exemple : Ogata et Banks, 1961). Dans ce cas, les modèles mathématiques sont souvent résolue de manière numérique. Cette approche est décrite dans la section suivante.

2.6 Simulations numériques de l'écoulement et du transport en hydrogéologie

2.6.1 Généralités

Une des premières étapes lors de la simulation numérique d'un système est la conceptualisation. Un modèle conceptuel consiste en la formulation des hypothèses sur le fonctionnement et l'organisation du système simulé (Figure 2.4 ; Krumbein et Graybill, 1965; Anderson *et al.*, 2015). Son fonctionnement et son organisation sont ensuite exprimés au moyen d'expressions mathématiques contenant des variables, des paramètres et des constantes, et qui représentent mathématiquement les phénomènes auxquels le système est soumis (Krumbein et Graybill, 1965; Konikow et Bredehoeft, 1992). Enfin, le modèle mathématique est résolu afin d'exprimer les variables d'intérêt en fonction des paramètres du modèle. Cette résolution peut se faire analytiquement ou être approximée numériquement. Les solutions analytiques existent souvent pour des problèmes idéalisés, avec des conditions aux frontières et des paramètres simples, mais peuvent ne pas exister lorsque les modèles mathématiques sont plus complexes (Konikow et Bredehoeft, 1992). Les simulations numériques permettent dans ce cas d'approximer la solution aux équations du modèle mathématique.

De nombreuses méthodes numériques existent pour approximer les solutions d'équations aux dérivées partielles du modèle mathématique. Les méthodes employées dépendent généralement du type d'équations à résoudre. Les plus connues et utilisées en hydrogéologie sont les méthodes avec maillage telles que les méthodes par différences finies, éléments finis ou volumes finis. Les méthodes avec maillage utilisent une discrétisation de l'espace et du temps où les variables d'intérêt du problème y sont calculées (Moukalled *et al.*, 2016). Les équations aux dérivées partielles y sont alors discrétisées, ce qui permet d'obtenir des relations entre les différentes variables aux différents points de l'espace. Ces relations forment un système d'équations dont les inconnues sont les variables du problème et dont la résolution permet de simuler le phénomène en question (Figure 2.4).

2.6.2 Codes disponibles

Certains codes de simulation permettent d'établir et de résoudre les systèmes linéaires afin d'obtenir la solution à un modèle mathématique (Multiphysics, 1998; Weller *et al.*, 1998; Alnæs *et al.*, 2015; Permann *et al.*, 2020). D'autres permettent de s'affranchir complètement de cette étape, en se concentrant sur la définition du modèle conceptuel du système à modéliser (Tableau 2.1). Ces derniers ont l'avantage d'être faciles d'utilisation, mais leur usage est plus restreint que les précédents, car ils ne peuvent simuler que les phénomènes prévus par les développeurs. Certains codes, comme HydroGeoSphere (Therrien et Sudicky, 1996)

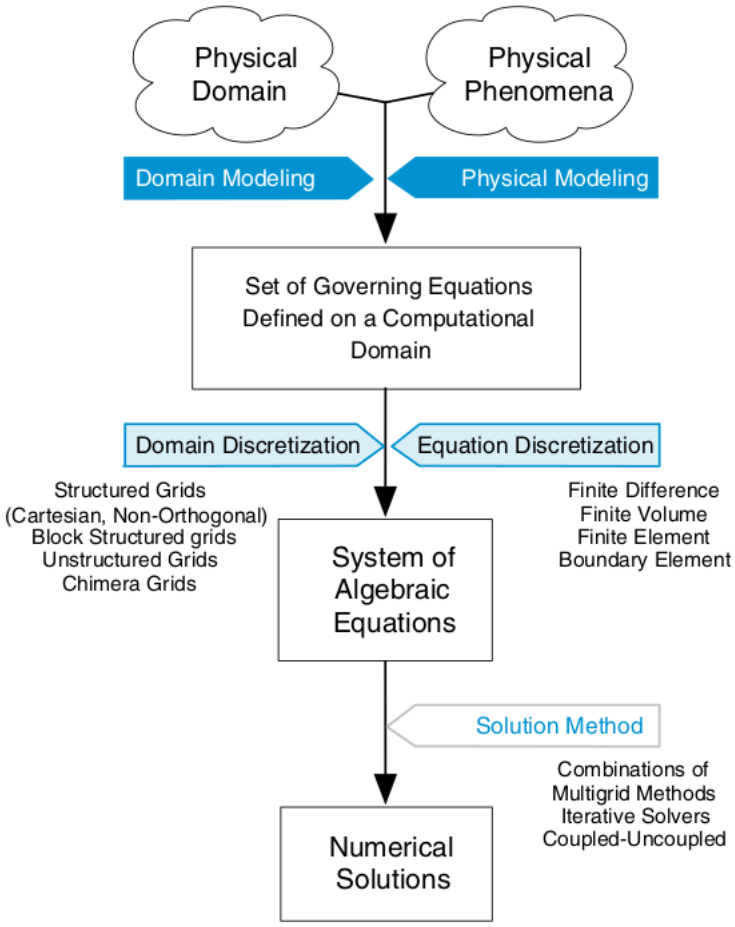


Figure 2.4 Processus de modélisation depuis la conceptualisation du système étudié jusqu'à sa résolution numérique. D'après Moukalled *et al.* (2016), reproduit avec autorisation.

ou ParFlow (Kollet et Maxwell, 2006), sont destinés à la modélisation de l'écoulement de l'eau souterraine et du transport de soluté à l'échelle régionale en prenant en compte les interactions avec l'atmosphère. Certains, comme PFLOTRAN (Hammond *et al.*, 2012) ou OpenGeoSys (Jang *et al.*, 2018), permettent également la modélisation d'écoulements multiphasiques avec une phase gazeuse et une phase liquide. D'autres permettent un couplage géomécanique afin de simuler par exemple l'effet de contraintes mécaniques sur l'écoulement (SEEP/W couplé avec SLOPE/W, OpenGeosys ou PFLOTRAN). Enfin, certains codes ont plutôt vocation à être utilisés comme outils de recherche (par exemple DuMux3 (Koch *et al.*, 2021)) ou comme outils à destination de l'industrie (comme SEEP/W ou HydroGeoSphere). Une description, une comparaison et un historique de développement détaillés des codes de simulations hydrogéologiques sont disponibles dans Steefel *et al.* (2015).

Les capacités des codes à simuler l'écoulement et le transport de contaminants (Hokr *et al.*, 2016), le couplage entre l'écoulement de surface et souterrain (Maxwell *et al.*, 2014; Kollet *et al.*, 2017), ou les réactions de précipitation-dissolution des codes de transport réactif (Poonoosamy *et al.*, 2018) ont déjà été comparées dans la littérature. Les différents codes semblent reproduire les mêmes variations temporelles, mais montrent parfois quelques différences sur les valeurs calculées (Hokr *et al.*, 2016; Kollet *et al.*, 2017; Poonoosamy *et al.*, 2018). Ces différentes peuvent s'expliquer par les différentes méthodes numériques utilisées par les codes (éléments finis contre volumes finis par exemple), les différents modèles conceptuels considérés, ou les différentes implémentations du tenseur de dispersivité (Maxwell *et al.*, 2014; Poonoosamy *et al.*, 2018).

Dans ce projet de doctorat, le code PFLOTRAN a été utilisé afin de simuler l'écoulement et le transport de soluté dans les milieux poreux. Il est décrit plus en détail dans la section suivante.

2.6.3 PFLOTRAN

PFLOTRAN est un code de simulation numérique par volumes finis dont le but est de simuler l'écoulement de l'eau souterraine et le transport réactif de soluté et de chaleur dans les milieux poreux (Hammond *et al.*, 2012). PFLOTRAN permet de résoudre des problèmes numériques avec un grand nombre de degrés de liberté (espace finement discrétisé ou transport réactif impliquant de nombreuses espèces), notamment au moyen de la librairie de fonction PETSc (Balay *et al.*, 2020) et de la communication entre les différents noeuds de calcul par le protocole *Message Passing Interface* (MPI).

Plusieurs équations permettent de simuler le mouvement de l'eau dans PFLOTRAN, comme l'équation de Richards pour l'écoulement en conditions non saturées au moyen d'une approche monophasique (mode RICHARDS), avec la prise en charge du transfert de chaleur et son action sur la viscosité et la densité du fluide (mode TH), et un mode général pour simuler explicitement l'écoulement d'une phase liquide et gazeuse (mode GENERAL). Dans tous les cas, PFLOTRAN résout les équations discrétisées pour la pression P, en considérant les fluides compressibles avec leur masse volumique et leur viscosité liées par une équation d'état à la pression. Le transport de soluté est quant à lui modélisé au moyen de l'équation d'advection-dispersion-réaction et est résolu pour la concentration C de chaque composé primaire. PFLOTRAN a déjà été utilisé, entre autres, pour étudier la restauration de sites contaminés par des composés radioactifs (Yang *et al.*, 2019; Fang *et al.*, 2020; Zachara *et al.*, 2020) ou azotés (Wallace *et al.*, 2020), pour évaluer l'écoulement hydrogéologique lors de

Tableau 2.1 Comparaison non exhaustive de différents codes utilisés pour la modélisation de l'écoulement de l'eau et le transport de soluté dans les milieux poreux.

Code	Discrétisation	Équation gouvernante écoulement	Transport réactif	Interface utilisateur	Source libre	Référence
DuMux3	EF[1], VF[2]	Multiples	Oui	C++	Oui	(Koch *et al.*, 2021)
FEFLOW	EF	Richards	Oui	Graphique	Non	(Diersch, 2014)
HydroGeoSphere	EF	Richards	Non	Pseudo-code	Non	(Therrien et Sudicky, 1996)
Hydrus	EF	Richards	Oui	Graphique	Non	(Šimůnek *et al.*, 2018)
MIN3P	VF	Richards	Oui	Graphique	Non	(Su *et al.*, 2017)
MODFLOW	DF[3], VF	Richards	Oui	Graphique Pseudo-code	Oui	(Hughes *et al.*, 2017)
OpenGeoSys	EF	Richards Multiphasique	Oui	XML	Oui	(Jang *et al.*, 2018)
ParFlow	VF	Richards	Non	Pseudo-code	Oui	(Kollet et Maxwell, 2006)
PFLOTRAN	VF	Richards Multiphasique	Oui	Pseudo-code	Oui	(Hammond *et al.*, 2012)
SEEP/W	EF	Richards	Non	Graphique	Non	`www.geoslope.com`
TOUGH3	DF	Richards Multiphasique	Oui	Pseudo-code	Non	(Jung *et al.*, 2017)

[1] Éléments finis, [2] Volumes finis, [3] Différences finies.

l'inversion de données géophysiques (Tso *et al.*, 2020), ou encore pour caractériser le comportement hydraulique de réseaux de fractures (Romano *et al.*, 2020).

PFLOTRAN emploie la méthode des volumes finis comme méthode de discrétisation spatiale (Moukalled *et al.*, 2016). L'espace est discrétisé (maillé) en cellules au centre desquelles les variables d'intérêt X sont exprimées. L'échange d'eau, de chaleur, ou de soluté entre les cellules du maillage se fait via les faces des cellules. La méthode des volumes finis utilisée dans PFLOTRAN transforme les équations gouvernantes de la forme :

$$\frac{dX}{dt} + \nabla(\vec{v}X + \boldsymbol{D}\nabla X) = Q_{sp} \tag{2.14}$$

où $\vec{v}$ représente le champ d'advection de X et $\boldsymbol{D}$ le tenseur de dispersion de X (comme le tenseur de dispersion hydrodynamique $\boldsymbol{D}^*$, Equation 2.11) par intégration sur un volume donnée. Le terme de transfert (eau, chaleur, soluté) $\nabla(\vec{v}X + \boldsymbol{D}\nabla X)$ est ensuite transformé à l'aide du théorème de Gauss en une somme sur les faces des cellules :

$$\frac{d}{dt}\int_{V_i} X dV + \sum_{j\in\partial i}(\vec{v}X)_{ij}\vec{A_{ij}} + \sum_{i\in\partial i}(\boldsymbol{D}\nabla X)_{ij}\vec{A_{ij}} = Q_i V_i \tag{2.15}$$

Où $j \in \partial i$ représente les voisins de la cellule i et $\vec{A_{ij}}$ le vecteur normal de la face entre les cellules i et j ayant pour norme sa surface. Le gradient à travers la face partageant les cellules i et j est approximé par la méthode à deux points, ou méthode *Two Point Flux Approximation* (TPFA). L'équation semi-discrétisée dans l'espace devient alors (Moukalled *et al.*, 2016) :

$$\frac{d}{dt}\int_{V_i} X dV + \sum_{j\in\partial i}(\vec{v}X)_{ij}\vec{A_{ij}} + \sum_{i\in\partial i}\frac{X_j - X_i}{d_{ij}}\boldsymbol{D}_{ij}\vec{A_{ij}}\vec{r_{ij}} = Q_i V_i \tag{2.16}$$

Où $\vec{r_{ij}}$ représente le vecteur unitaire reliant le centre des cellules i et j. Cette méthode de discrétisation permet d'obtenir un schéma qui n'implique que les voisins immédiats de chaque cellule, conduisant un système d'équations compact et plus facile à résoudre (Moukalled *et al.*, 2016). Cependant, le choix de la discrétisation du gradient par le théorème de Gauss et de l'opérateur de diffusion/dispersion par l'approximation du flux par la méthode TPFA nécessite que deux conditions soient respectées pour la discrétisation spatiale, à savoir (Figure 2.5) :

— Condition de biais (ou *skewness* en anglais) pour l'opérateur du gradient : Le segment reliant les deux centres des cellules partageant chaque face doit passer exactement en son centre (Figure 2.5a).

— Condition d'orthogonalité pour l'opérateur de diffusion/dispersion : Le segment reliant les deux centres des cellules partageant chaque face doit être parallèle à sa normale (Figure 2.5b). Dans le cas où le coefficient $\boldsymbol{D}$ est un tenseur anisotrope, le produit du tenseur et de la normale de la face considérée doit être parallèle au segment reliant les deux centres (Heinemann *et al.*, 1991). Parfois, la condition d'orthogonalité est désignée comme la propriété des bissectrices perpendiculaires, ou *PErpendicular BIsectrice* (PEBI), notamment dans le domaine pétrolier (Palagi et Aziz, 1994; Gunasekera *et al.*, 1997).

Ces conditions sont d'office remplies lorsqu'un maillage cartésien structuré est employé (Moukalled *et al.*, 2016). En revanche, elles peuvent parfois ne pas l'être pour un maillage déstructuré, ce qui peut alors engendrer d'importantes erreurs lors de résolution numérique, et qui ne peuvent être réduites avec la taille du maillage (erreur de type $\mathcal{O}(1)$) ; Heinemann *et al.*, 1991; Jasak, 1996; Moukalled *et al.*, 2016). Diverses méthodes de correction peuvent être employées (Jasak, 1996), mais ces dernières ne sont pas implémentées dans PFLOTRAN. Une autre solution est d'utiliser des Pavage de Voronoï Centré (PVC), encore appelés *Centroidal Voronoï Diagram* (CVT), qui par construction ont l'avantage de produire des maillages PEBI ou orthogonaux (Du *et al.*, 1999; Gärtner et Kamenski, 2019).

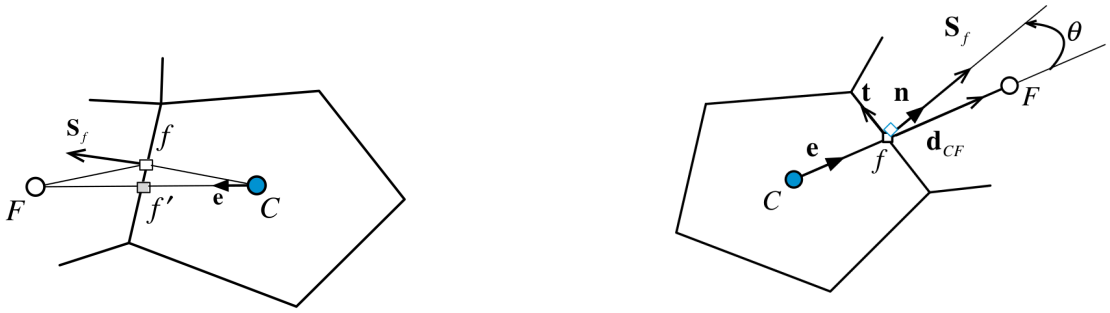


Figure 2.5 (a) Condition de biais $|ff'| = 0$ et (b) d'orthogonalité $\theta = 0$ du maillage pour une juste discrétisation de l'opérateur de gradient et de diffusion/dispersion pour la méthode des volumes finis avec la méthode TPFA. Adapté de Moukalled *et al.* (2016), reproduit avec autorisation.

La discrétisation de l'opérateur de gradient par la méthode TPFA a aussi l'inconvénient de ne pas permettre de simuler trivialement le transport de soluté par mécanisme dispersif, car le maillage n'est en général pas aligné avec les directions principales du tenseur de dispersion hydrodynamique (Équation 2.11 Cirpka *et al.*, 1999b,a). C'est d'ailleurs pour cette raison que PFLOTRAN ne considère qu'un tenseur de dispersivité diagonal, ce qui implique notamment

que seule la dispersion d'un panache dans la direction des axes principaux de la simulation est correctement prise en compte.

La discrétisation temporelle se fait quant à elle au moyen de la méthode des différences finies avec un schéma d'Euler implicite (Hammond *et al.*, 2012) :

$$\frac{X_i^{t+\Delta t} - X_i^t}{\Delta t} + \frac{1}{V_i} \sum_{j \in \partial i} \left[(\vec{v} X^{t+\Delta t})_{ij} \vec{A_{ij}} - \frac{X_j^{t+\Delta t} - X_i^{t+\Delta t}}{d_{ij}} \boldsymbol{D}_{ij} \vec{A_{ij}} \vec{r_{ij}} \right] = Q_i \tag{2.17}$$

Une fois le modèle mathématique discrétisé, le système d'équations non linéaires pour chaque itération est résolu en utilisant la méthode itérative de Newton-Raphson, qui consiste à approximer la solution du système non linéaire par une succession de systèmes linéaires, eux-mêmes résolus par méthodes directes ou itératives (Hammond *et al.*, 2012).

En pratique, les simulations numériques constituent des outils puissants pour décrire et prédire le comportement de phénomènes naturels. Ils sont alors souvent utilisés pour la conception de systèmes d'ingénierie, mais aussi leur optimisation. Ainsi, dans la section suivante, sont décrites les principales techniques d'optimisation de géométrie pour les systèmes d'ingénierie.

2.7 Optimisation de géométrie

2.7.1 Problème d'optimisation

Un problème général d'optimisation peut s'écrire comme suit (Diwekar, 2008) :

$$\min_x F = f(x) \tag{2.18}$$

sujet à ;

$$g_i(x) \leq 0 \tag{2.19}$$

$$h_j(x) = 0 \tag{2.20}$$

Le but d'un problème d'optimisation est de déterminer les variables de décision x qui minimisent la fonction objectif F tout en s'assurant que les limites établies par les contraintes d'inégalité g_i et d'égalité h_j soient respectées.

L'optimisation numérique est basée sur un procédé itératif pour obtenir les variables de décision optimisées. Pour chaque itération, l'optimiseur calcul la fonction objectif F en fonction des variables de décision x du problème, et met à jour les contraintes g et h. Ces informations sont ensuite utilisées pour calculer un nouveau jeu de variables de décision et recommencer

le calcul. Le procédé itératif continue jusqu'à ce qu'un critère d'arrêt soit satisfait (Diwekar, 2008).

Les problèmes d'optimisations englobent une grande diversité de problèmes mathématiques, qui peuvent être classés selon leur complexité et la nature des variables de décision. Par exemple les problèmes d'optimisation peuvent être continus (les variables de décision sont continues), entiers (variables de décision entières), linéaires (la fonction objectif et les contraintes sont linéaires), quadratiques ou non linéaires (Diwekar, 2008). En fonction du type de problème, différentes méthodes numériques sont utilisées. En général, les problèmes d'optimisation impliquant des variables de décision entières sont beaucoup plus difficiles à résoudre que ceux avec des variables continues (Conforti *et al.*, 2014).

Certaines méthodes numériques d'optimisation sont fondées sur la méthode du gradient, qui consiste à calculer la dérivée de la fonction objectif $f(x)$ afin de mettre à jour les variables de décision x. Le gradient peut être obtenu par dérivée analytique, par différences finies, par différentiation automatique (Verma, 2000) ou encore au moyen de la méthode adjointe (Errico, 1997). En particulier, la méthode adjointe est utile pour résoudre des problèmes d'optimisation impliquant un grand nombre de variables de décision (Nemec et Aftosmis, 2005). Cependant, le calcul de la dérivée de la fonction d'optimisation par rapport aux variables de décision peut parfois être complexe ou coûteux à approximer, notamment lorsque les variables de décision sont des paramètres d'entrées d'un modèle numérique. Dans ce cas, l'utilisation de méthodes sans dérivées est parfois préférée. En effet, celles-ci ne requièrent pas l'établissement de la dérivée, et sont donc plus simples et plus rapides à mettre en oeuvre. Par contre, elles nécessitent souvent un plus grand nombre d'itérations et leur résolution est donc plus coûteuse en calcul. De nombreuses méthodes sans dérivées existent, comme la méthode du simplex pour les systèmes linéaires, les méthodes par boîte noire, ou les méthodes génétiques, entre autres (Audet et Hare, 2017).

2.7.2 Technique d'optimisation de géométrie

L'optimisation de géométrie a pour but de déterminer la répartition optimale d'un ou plusieurs matériaux dans un espace donnée afin de maximiser ou minimiser une performance ou une caractéristique de la géométrie étudiée. Plusieurs techniques existent et peuvent être divisées en trois catégories selon la nature des variables de décision du problème d'optimisation : l'optimisation paramétrique, l'optimisation de forme et l'optimisation topologique (Figure 2.6). Ces techniques, pour la répartition d'un ou de deux matériaux dans un espace donné, sont décrites dans les sous-sections suivantes.

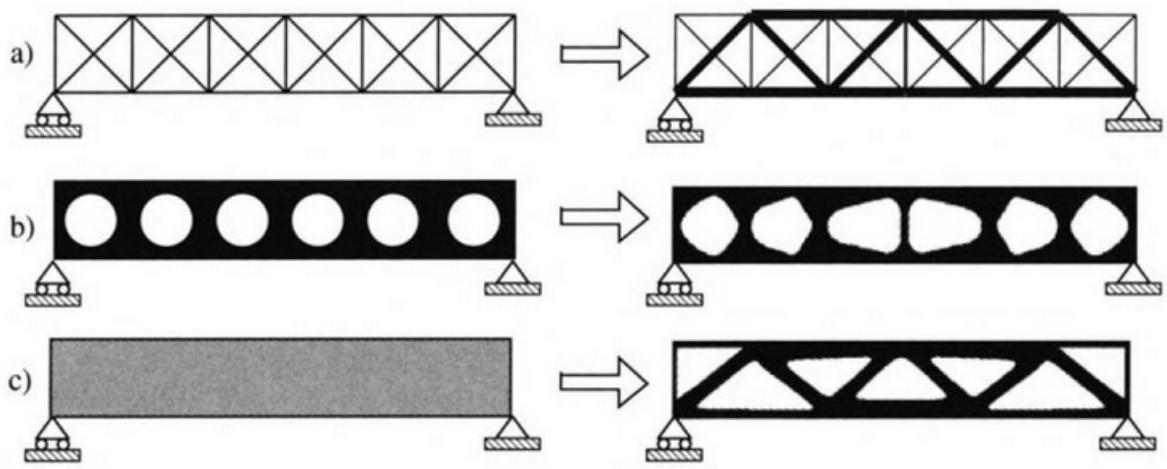


Figure 2.6 Les trois techniques d'optimisation de géométrie appliqués à un pont en treillis : (a) optimisation paramétrique, (b) optimisation de forme et (c) optimisation topologique. Le problème initial et la solution optimisée sont présentés respectivement à gauche et à droite. D'après Bendsøe et Sigmund (2004), reproduit avec autorisation.

2.7.3 Optimisation paramétrique

L'optimisation paramétrique consiste à paramétrer la géométrie de l'objet optimisé et à considérer ces paramètres comme variable de décision du problème d'optimisation. Un objet peut par exemple être paramétré par ses dimensions (internes ou externes ; Tarkian *et al.*, 2008; Li *et al.*, 2009; Kaveh et Talatahari, 2009) auquel cas l'optimisation consiste à trouver les dimensions et l'épaisseur optimales des composants (Figure 2.6a). La forme des frontières de l'objet (au-delà de la paramétrisation), leur nombre et leur connectivité ne sont cependant pas optimisés. Cette technique est souvent utilisée combinée à un modèle de Conception Assistée par Ordinateur (CAO) de l'objet où la géométrie est mise à jour à chaque itération en considérant un nouveau jeu de paramètres décrivant la géométrie de l'objet (Tarkian *et al.*, 2008; Li *et al.*, 2009). Cette approche a l'avantage de produire des géométries optimisées dont la réalisation technique est garantie en imposant des contraintes sur l'optimisation, par exemple en spécifiant des intervalles dont les paramètres décrivant la géométrie doivent être inclus. Ces contraintes peuvent par exemple être des dimensions maximales et minimales à respecter (Tarkian *et al.*, 2008; Li *et al.*, 2009; Kaveh et Talatahari, 2009). Ce type d'optimisation autorise cependant une moins grande variabilité de la géométrie, et la géométrie optimisée peut donc être moins efficace comparée à celle obtenue avec d'autres techniques (voir plus bas). L'optimisation peut se faire de manière automatique au moyen d'algorithmes d'optimisation sans dérivée pour un petit nombre de paramètres (Li *et al.*, 2009; Kaveh et

Talatahari, 2009; Mukesh *et al.*, 2012), ou avec dérivée lorsque le logiciel de CAO le permet (Mykhaskiv *et al.*, 2018).

2.7.4 Optimisation de forme

L'optimisation de forme utilise les frontières internes ou externes de l'objet considéré comme variables de décision. Le nombre de frontières est d'abord fixé, et l'optimisation est libre de changer la forme des frontières pour obtenir une géométrie optimale de l'objet (Figure 2.6b). Néanmoins, la connectivité des frontières n'est pas optimisée, et le nombre de frontières reste le même entre la géométrie initiale et optimisée. Cette approche permet l'exploration de géométries non conventionnelles, mais ne permet pas de contrôler les contraintes géométriques pour la fabrication de tels objets, qui peuvent parfois se révéler impossibles à réaliser (Anand *et al.*, 2018).

Une approche couramment utilisée consiste à discrétiser la frontière d'un objet au moyen d'un nuage de points, et d'interpoler le contour ou la surface par des polynômes, des courbes de Bézier ou des B-splines rationnelles non uniformes par exemple (Peri *et al.*, 2001; de Lima *et al.*, 2011; Anand *et al.*, 2018; Mykhaskiv *et al.*, 2018; Tsiakas *et al.*, 2019). Cette approche peut aussi être vue comme une approche paramétrique, car les coordonnées des points de contrôle (X,Y,Z) constituent en pratique une paramétrisation de la géométrie de l'objet (Bendsøe et Kikuchi, 1988). Cependant, le nombre de variables de décision du problème est généralement beaucoup plus important qu'avec l'optimisation paramétrique, car une interpolation précise de la géométrie nécessite souvent un grand nombre de points, ce qui rend cette technique plus complexe à mettre en oeuvre. L'optimisation peut se faire au moyen d'algorithmes d'optimisation sans dérivée (de Lima *et al.*, 2011), ou avec dérivée, mais où le haut degré de liberté du problème requiert généralement l'utilisation de la méthode adjointe (Nemec et Aftosmis, 2005; Anand *et al.*, 2018; Tsiakas *et al.*, 2019).

2.7.5 Optimisation topologique

Généralité

L'optimisation topologique consiste à optimiser à la fois le nombre, l'agencement et la forme des frontières d'un objet (Figure 2.6c). D'abord utilisée pour optimiser la structure des pièces mécaniques, elle visait à retirer de la matière de la structure d'un objet tout en s'assurant le respect de performances mécaniques minimales (Bendsøe et Sigmund, 2004). L'optimisation topologique peut se faire selon de nombreuses approches, mais les trois principales sont

les approches discrètes, les approches par densité et les approches par courbes de niveau (Sigmund et Maute, 2013; Deaton et Grandhi, 2014).

Toutes ces approches utilisent une géométrie discrétisée de l'objet, et optimisent la répartition de matériaux dans l'espace à travers cette discrétisation. La répartition peut se faire entre plusieurs matériaux ayant différentes propriétés ou entre un matériau solide et du vide. L'optimisation topologique a donc pour caractéristique d'être un problème d'optimisation avec un grand nombre de variables de décision, pouvant parfois atteindre plusieurs millions (Liu *et al.*, 2019a). Ce grand nombre de degrés de liberté rend les algorithmes d'optimisation sans dérivées, et particulièrement les approches génétiques, peu efficaces et très coûteuses (Sigmund, 2011; Deaton et Grandhi, 2014). Les méthodes du gradient (au moyen de la méthode adjointe) sont donc le plus souvent utilisées, ce qui implique que seuls des optima locaux sont obtenus, et donc que la géométrie optimisée dépend du point de départ de l'optimisation (Bendsøe et Sigmund, 1999; Haertel *et al.*, 2018).

Un des grands champs historiques d'application de l'optimisation topologique concerne la conception des structures et pièces mécaniques (Bendsøe et Kikuchi, 1988). Elle a depuis été appliquée à de nombreux autres problèmes d'optimisation, notamment dans les domaines de la mécanique des fluides ou du transfert de chaleur (Deaton et Grandhi, 2014). En géologie, cette technique est parfois appliquée pour optimiser la géométrie de fondations ou le noyau de barrages en remblais (Pucker et Grabe, 2011; Seitz et Grabe, 2016; Kammoun *et al.*, 2019). Certaines optimisations en mécanique des fluides utilisant la loi de Darcy ou de Richards ont aussi été menées (Zhao *et al.*, 2018; Wein *et al.*, 2019; Kambampati et Kim, 2020).

Approches discrètes

Les approches d'optimisation discrètes consistent à déterminer la répartition de matériaux dans l'espace discrétisé et où les variables de décision sont des variables entières représentant différents matériaux (solide, vide ou avec différentes propriétés ; Sigmund, 2011).

Ces approches d'optimisation topologique utilisent des règles heuristiques afin de mettre à jour la répartition de matériau dans l'espace optimisé (Deaton et Grandhi, 2014), et peuvent faire appel ou non, à la dérivée de la fonction objectif choisie. Elles consistaient à leur origine à uniquement enlever du matériau à partir d'une géométrie initiale donnée afin de réduire le volume et le poids de l'objet optimisé. Ces approches, appelées approches d'Optimisation Structurale Évolutionnaire, ou *Evolutionary Structural Optimisation* (ESO) en anglais (Xie et Steven, 1997) ont depuis été remplacées par des approches bidirectionnelles qui permettent d'enlever, mais aussi d'ajouter du matériau au cours de l'optimisation (Querin *et al.*, 1998; Teimouri et Asgari, 2019). Des algorithmes génétiques peuvent aussi être utilisés afin de

résoudre directement ces problèmes d'optimisation discrets (Saad *et al.*, 2018; Mekki *et al.*, 2021)

Un des principaux avantages des approches discrètes est qu'elles sont simples à mettre en oeuvre, car elles ne nécessitent que quelques étapes de prétraitement de la simulation numérique et de post-traitement des résultats (Deaton et Grandhi, 2014). De plus, les géométries optimisées par ces approches sont composées de matériaux bien définis, et ne nécessitent pas de réinterprétation des résultats par rapport aux autres approches. En revanche, certaines de ces approches, notamment les approches sans dérivées, qui ne prennent pas en compte les informations du gradient, sont coûteuses en temps de calcul (Sigmund, 2011), et peuvent parfois engendrer un comportement oscillatoire et ne pas converger (Sigmund et Maute, 2013). Certaines critiques ont aussi été émises à propos du manque de preuves mathématiques quant à leur convergence et le manque d'outils pour prendre en compte plusieurs contraintes à la fois (Sigmund et Maute, 2013).

Approche par courbes de niveau

Dans l'approche par courbes de niveau (*level set*), l'interface de l'objet optimisé est définie implicitement dans l'espace par une fonction scalaire $\Phi : \mathbb{R}^n \longmapsto \mathbb{R}$ où n est la dimension de l'objet optimisé (Allaire *et al.*, 2004; Osher et Sethian, 1988; Wang *et al.*, 2003). La courbe de niveau 0, défini comme $\Phi = 0$, représente les interfaces entre les différents matériaux de l'objet (solide, vide, ou matériaux de propriétés différentes ; Figure 2.7). La fonction de courbe de niveau Φ peut être spécifiée par exemple sur une grille rectiligne et où pour chaque élément, la valeur de Φ est calculée au centre x de l'élément. L'optimisation de géométrie peut alors être réalisée en faisant évoluer la fonction de courbe de niveau $\Phi(x)$ au fur et à mesure des itérations, typiquement en considérant Φ comme une fonction d'un paramètre temporel (c'est-à-dire $\Phi = \Phi(x, t)$). L'évolution temporelle de la géométrie de l'objet peut être décrite au moyen d'une équation d'évolution de type Hamilton-Jacobi (Wang *et al.*, 2003; Sigmund et Maute, 2013) :

$$\frac{\partial \Phi(x,t)}{\partial t} + V|\nabla \Phi(x,t)| = 0 \tag{2.21}$$

Où $V(x)$ est appelée la fonction champ de vitesse et contrôle l'évolution des frontières de l'objet à optimiser. $V(x)$ évalué en $\{x, \Phi(x) = 0\}$ représente la dérivée de la fonction objectif par rapport une translation infinitésimale d'un point x de l'interface dans sa direction normale. En pratique, l'optimisation de la géométrie est conduite par l'intégration de l'équation de Hamilton-Jacobi (2.21) (Figure 2.7).

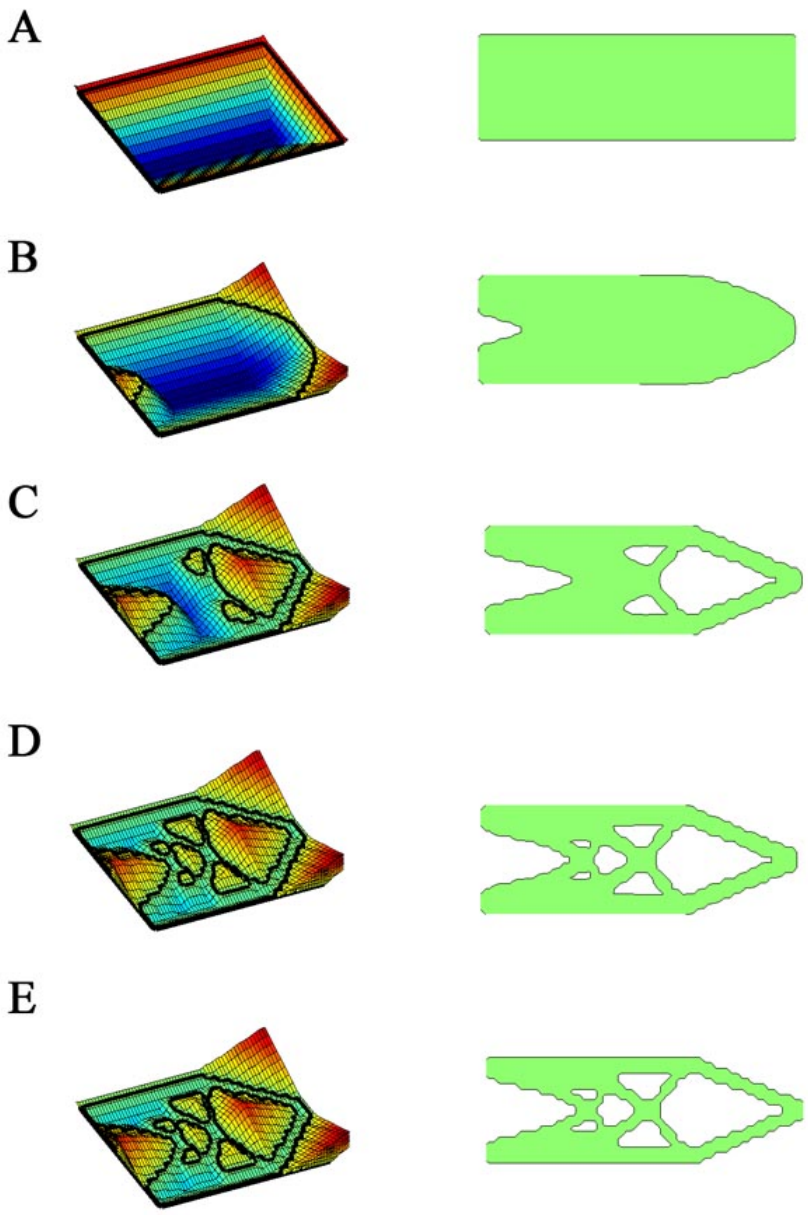


Figure 2.7 Évolution de la topologie d'un objet optimisée (à droite) en fonction de l'intégration de l'équation d'évolution : (A) géométrie initiale, (B,C,D) évolution de la géométrie avec l'intégration, et (E) géométrie optimisée. L'objet en question est une pièce mécanique fixée à gauche et avec un chargement à droite. À gauche figure la valeur de la fonction courbe de niveau, avec en noir la courbe de niveau $\Phi = 0$ décrivant la géométrie de l'objet. D'après Wu et Wu (2017), contenu sous licence Creative Commons (CC-BY 4.0).

L'approche par courbe de niveau permet de définir à chaque itération une géométrie discrète et une interface entre les matériaux à distribuer sur le domaine (Sigmund et Maute, 2013). Cependant, si la formulation initiale permet de modifier et de fusionner les frontières de l'objet

optimisé, elle ne permet pas d'en créer de nouvelles Ainsi, l'approche par courbe de niveau dépend grandement du point de départ de l'optimisation (Sigmund et Maute, 2013; Deaton et Grandhi, 2014). Des changements dans l'équation de propagation (2.21) permettent de résoudre ce problème, par exemple en y ajoutant un terme de réaction (Yamada *et al.*, 2010; Furuta *et al.*, 2017), ou en intégrant des dérivées topologiques (Sokolowski et Zochowski, 1999)

L'approche par courbe de niveau est à l'origine d'autres approches d'optimisation topologique, comme l'approche par champ de phase (*phase field* en anglais) qui utilise une équation de propagation de type Cahn-Hilliard (Wallin *et al.*, 2012).

Approche par densité

Dans l'approche par densité, le problème d'optimisation à variables entières est relaxé par un problème d'optimisation à variables continues, qui a l'avantage d'être mathématiquement beaucoup plus facile à résoudre que le problème non relaxé (Deaton et Grandhi, 2014). Cette approche consiste donc à paramétrer les propriétés de chaque élément i du domaine d'optimisation discrétisé à l'aide d'un paramètre de densité p_i compris entre 0 et 1 qui représente les propriétés de l'un ou de l'autre des matériaux (Bendsøe et Sigmund, 2004). Les paramètres de densité pour tous les éléments du domaine constituent ainsi les variables de décision du problème d'optimisation. Cette approche est relativement simple à mettre en oeuvre, et peut être achevée en seulement une centaine de lignes de code par exemple (Sigmund, 2001; Andreassen *et al.*, 2011; Liu et Tovar, 2014; Ferrari et Sigmund, 2020). Le calcul des propriétés équivalentes des éléments en fonction du paramètre de densité p peut se faire de différentes façons (Bendsøe et Sigmund, 1999; Deaton et Grandhi, 2014), mais la plus commune consiste en une interpolation en loi de puissance appelée *Standard Isotropic Material with Penalisation* (SIMP) (Bendsøe et Sigmund, 2004).

$$X_i = X_0 + (X_1 - X_0)p_i^n \tag{2.22}$$

avec X_i la propriété de l'élément i considéré, $X_{0,1}$ la propriété du matériau désigné par le paramètre de densité $p = \{0, 1\}$ et n la puissance de pénalisation. Le choix de la paramétrisation et de la puissance de pénalisation influe grandement sur la géométrie optimisée (e.g. Bendsøe et Sigmund, 1999). En général, une puissance de pénalisation n de 3 est choisie et permet de converger vers une géométrie quasi exempte d'éléments avec un paramètre de densité intermédiaire ($0 < p < 1$; Bendsøe et Sigmund, 1999; Sigmund et Maute, 2013). Certaines techniques de régularisation visent aussi à transformer le paramètre de densité p en un nouveau paramètre de densité modifié, permettant ainsi de lisser et de projeter les

densités intermédiaires en une distribution quasi discrète 0-1 (Bourdin, 2001; Guest *et al.*, 2004; Xu *et al.*, 2010; Liu et Ma, 2016; Thore *et al.*, 2019).

Un problème récurrent de l'approche par densité est l'effet de damier (ou *checkerboard effect* en anglais), c'est-à-dire la formation d'une géométrie optimisée avec de fortes variations du paramètre de densité sur des éléments adjacents (Bendsøe et Sigmund, 2004; Deaton et Grandhi, 2014). Ce problème apparaît notamment lorsque la simulation numérique utilise une méthode de discrétisation par éléments finis (Bendsøe et Sigmund, 2004). L'utilisation de techniques de régularisation visant à lisser le paramètre de densité ou les sensibilités (Deaton et Grandhi, 2014), ou d'autres méthodes de discrétisation comme celles des volumes finis (Gersborg-Hansen *et al.*, 2006), permet d'éviter ce problème.

L'approche d'optimisation topologique par densité a été utilisée dans ce projet de recherche pour l'optimiser la répartition des chemins préférentiels d'écoulement dans les fosses (voir chapitre 9)

2.8 Frontière des connaissances

L'utilisation des fosses comme sites d'entreposage des rejets miniers présente de nombreux avantages. Elle permet une isolation physique définitive des rejets miniers, réduit les besoins d'entretien et de surveillance des sites restaurés et des aires d'accumulation, améliore l'acceptabilité sociale des opérations à ciel ouvert et pourrait réduire les coûts associés au traitement des rejets (MEND, 2015). Cependant, un des défis majeurs de cette technique concerne la stabilité géochimique des rejets entreposés, notamment à cause des effets potentiels de l'écoulement de l'eau souterraine qui pourrait mener à la génération de DMA par oxydation des minéraux sulfureux avec de l'oxygène dissous (Santofimia *et al.*, 2013; Villain *et al.*, 2015; Barfoud *et al.*, 2019), et à la lixiviation de métaux ou de contaminants et à leur transport vers le milieu environnant (Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003) Les interactions entre les rejets remblayés et le milieu naturel doivent donc être contrôlées afin de minimiser les risques environnementaux.

Diverses méthodes permettent de contrôler la stabilité géochimique des rejets entreposés dans les fosses : déposition conventionnelle et mise en place d'une couverture de type barrière à l'oxygène ou à l'évaporation, rejets traités chimiquement ou physiquement, ou encore création de structure de confinement dans les fosses. L'enveloppe perméable (Matich et Tao, 1986) est une structure de confinement qui met à profit les contrastes de perméabilités entre les rejets, le roc environnant ou des matériaux d'emprunts placés à la périphérie de la fosse afin de créer des chemins préférentiels d'écoulement pour l'eau souterraine et permettre ainsi de limiter

les interactions et le transport de contaminants entre la fosse et l'environnement (Misfeldt *et al.*, 1999; Ben Belfadhel, 2000). Cette technique permet de réduire le transport de soluté en limitant de plus de 90% les flux par advection dans les fosses (West *et al.*, 2003; Thériault, 2004).

La codisposition de roches stériles sous la forme d'inclusions dans les fosses (sur le modèle de l'approche utilisée dans les parcs en surface ; Bolduc et Aubertin, 2014; Saleh Mbemba, 2016), pourrait permettre de créer des chemins d'écoulements préférentiels au sein des résidus remblayés. Cette méthode d'entreposage conjointe permettrait de diminuer le transport de soluté entre les résidus et l'environnement et ainsi de minimiser les risques environnementaux de la technique de déposition dans les fosses. La plupart des études sur la technique de l'enveloppe perméable ont été menées en deux dimensions (Misfeldt *et al.*, 1999; Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Thériault, 2004; Lange et Van Geel, 2011; Kassimov et Obnosov, 2018) et/ou pour des géométries de fosse très simplifiées (cylindrique : Salama *et al.* 2002; West *et al.* 2003; Lange et Van Geel 2011 ; ou pyramidale : Thériault 2004). En outre, ces études n'intégraient pas la zone endommagée due au sautage (Poulsen *et al.*, 2017) qui par sa perméabilité plus élevée (Morth *et al.*, 1972; Cho *et al.*, 2013; MEND, 2015), pourrait contribuer à créer une enveloppe perméable. De surcroît, seule la mise en place d'un matériau plus perméable à la périphérie de la fosse comme structure de confinement a été étudiée pour réduire le transport de soluté. Cependant, cette géométrie ne constitue probablement pas la géométrie optimale pour cet objectif, ou à minima, la preuve n'en a pas encore été avancée. Or il existe aujourd'hui des techniques numériques d'optimisation de forme et de topologie qui permettent de minimiser une fonction objectif, en ajustant la distribution de deux matériaux dans un domaine donné (Bendsøe et Sigmund, 2004). Ces approches permettraient ainsi de déterminer la disposition optimale des inclusions de roches stériles dans les fosses remblayées.

CHAPITRE 3 METHODOLOGIE

Ce chapitre décrit les différentes étapes suivies dans ce projet pour répondre aux objectifs de l'étude (voir aussi section 1.3). L'approche générale et les hypothèses émises sont présentées en détail, puis les différents axes de recherche sont décrits point par point en faisant référence aux chapitres où les résultats correspondants sont présentés. Ce chapitre vise à donner une vue d'ensemble du projet, en mettant en lumière les interconnexions entre les différents chapitres et articles présentés dans la suite de la thèse.

3.1 Approche générale et hypothèses

L'objectif général de la thèse est de développer de nouveaux outils et de proposer des recommandations en vue de réduire les interactions entre les rejets remblayés dans les fosses et l'environnement par l'utilisation de chemins préférentiels d'écoulement dans et autour des rejets remblayés. L'utilisation de chemins d'écoulements préférentiels autour des rejets (tel que la méthode de l'enveloppe perméable, voir section 2.3) permet de réduire le flux d'eau souterraine et le gradient hydraulique dans les rejets (Salama *et al.*, 2002; Thériault, 2004). Le transport de contaminants par le mécanisme advectif est donc aussi réduit, ce qui a pour effet de contenir d'éventuels contaminants dans la fosse plus longtemps (Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003). Néanmoins, ce résultat n'a été démontré que pour des géométries de fosses simplifiées. Or, il pourrait exister certaines géométries de fosses où l'écoulement serait plus complexe, et pour lesquelles la réduction du flux dans les rejets ou du gradient hydraulique moyen pourraient entraîner une augmentation du transport de contaminants par advection. Ainsi, l'hypothèse est faite dans cette thèse que la réduction du flux d'eau et du gradient hydraulique moyen dans les rejets permet de contenir plus longtemps un contaminant dans les fosses. Par conséquent, les travaux réalisés se concentrent uniquement sur l'écoulement dans un premier temps, l'aspect transport de contaminants n'étant abordé que dans un second temps.

Le cas de fosses situées dans des formations géologiques avec des propriétés hydrauliques homogènes et isotropes a été considéré. Aucunes autres restrictions n'a été considérées, si bien que le cas de fosses situées dans des formations peu jusque très perméables a été étudié. Pour certains développements cependant (notamment dans le chapitre 7), l'accent a été porté à des fosses situées dans des formations géologiques ignées. Dans ce cas, le roc à la périphérie de la fosse (hors présence de la zone endommagée) est généralement peu perméable et fracturé, et que l'écoulement et le transport de soluté se font via les fractures et les joints présents

dans le roc (Berkowitz, 2002). En outre, le réseau de fractures a été considéré non fractal (c'est à dire, dont les propriétés ne changent pas selon l'échelle d'observation ; Darcel *et al.*, 2003) et suffisamment connecté (c'est à dire, au-dessus du seuil de percolation) afin que la formation dans son ensemble, puisse être considérée comme un milieu homogène et isotrope (Berkowitz, 2002).

Plusieurs géométries de fosses ont été étudiées, notamment des géométries tridimensionnelles simplifiées comme des formes parfaitement coniques ou elliptiques. Ces dernières ont néanmoins été choisies de manière à ce qu'elles soient réalistes. Les fosses coniques ont été caractérisées par leur rayon au sommet, leur profondeur et l'angle des murs, et les fosses elliptiques par le ratio de l'axe majeur sur l'axe mineur, la largeur de la fosse selon l'axe majeur, leur profondeur et l'angle des murs. Des géométries de fosses plus réalistes et représentatives de cas réels ont également été considérées. Celles-ci incluaient notamment une fosse quasi elliptique avec un angle variable des murs inspirée d'une mine situé en Abitibi (voir chapitres 8 et 9). Les fosses étaient considérées totalement remblayées (c'est à dire jusqu'à la surface) avec un matériau sans contrainte sur sa perméabilité, si bien que des résidus miniers issus du traitement du minerai et/ou roches stériles ont été considérés.

L'hypothèse d'une nappe phréatique élevée dans la fosse et la formation géologique environnante, et proche de la surface a été faite, de telle façon à ce que la majeure partie des rejets entreposés soit située sous la nappe. Les interactions entre les rejets situés au-dessus de la nappe, et l'atmosphère ont cependant été supposées contrôlées au moyen d'un recouvrement isolant (par exemple, un recouvrement de type barrière à l'eau et/ou à l'oxygène). Cette hypothèse implique que la recharge de la nappe au niveau de la fosse était contrôlée par le recouvrement et n'a pas donc été considérée dans le problème étudié. Par simplicité, cette hypothèse a été étendue à tout le modèle (incluant la formation environnante) de manière à ce que l'écoulement dans la zone saturée ne dépende que du gradient hydraulique régional de manière linéaire, qui a donc été considéré unitaire, sauf mention explicite contraire. Ces hypothèses conduisent notamment à la formation d'un écoulement à travers les fosses (de type *flow-through*), par opposition à des régimes d'écoulement de type piège hydraulique (*terminal sink*) ou source (Castendyk et Eary, 2009; McCullough et Schultze, 2018). L'écoulement dans la zone non saturée n'a pas été inclus dans cette recherche, et la nappe phréatique a donc été considérée affleurante dans tout le modèle.

L'écoulement de l'eau souterraine a été simulé au moyen d'une approche numérique, qui a l'avantage d'être plus facile à mettre en place qu'une approche physique (comme des essais de terrain ou de laboratoire), moins coûteuse, et qui donne plus de flexibilité quant aux phénomènes modélisés. Néanmoins, une telle approche ne donne qu'une solution approximée au

problème, et une vérification de la justesse de l'approche est nécessaire pour juger de la véracité des résultats. L'approche numérique a donc été complétée par une approche analytique pour des géométries de fosses simplifiées en deux dimensions, puis l'approche numérique a été utilisée pour proposer des recommandations pour les fosses réelles en trois dimensions. L'approche numérique a aussi été comparée à des modèles physiques de laboratoire issus de la littérature (Lange, 2003; Lange et Van Geel, 2011)

Les rejets remblayés et le roc environnant ont été modélisés comme des milieux poreux avec des propriétés homogènes et isotropes. Si une telle approche est courante pour les résidus, la modélisation des roches stériles comme milieux poreux homogène est parfois contestée, notamment à cause de la présence de chemins d'écoulements préférentiels (Amos *et al.*, 2015; Blackmore *et al.*, 2018), ou de l'absence de volume élémentaire représentatif (Salama *et al.*, 2003). Néanmoins, dans toute cette thèse, le modèle du milieu poreux équivalent a été supposé valide pour l'écoulement dans les roches stériles. De même, la représentation du roc environnant comme milieu poreux est sujette à discussion dans la littérature. En effet, certains auteurs pointent l'incapacité du modèle du milieu équivalent à représenter l'écoulement et le transport dans le roc fracturé (Jørgensen *et al.*, 1998, 2004; Samardzioska et Popov, 2005; Blessent *et al.*, 2014). Cependant, une représentation détaillée de l'écoulement et le transport dans le roc dépassait les objectifs de cette thèse, et aurait nécessité une grande quantité de données de terrain pour pouvoir être réaliste (Berkowitz, 2002). Une telle approche aurait également empêché de généraliser les résultats, car ils auraient été uniquement applicables aux cas particuliers simulés. Ainsi, par simplicité et afin de pouvoir dériver des tendances générales des résultats obtenus, le modèle du milieu poreux équivalent a été retenu pour le roc fracturé.

Le présent projet peut être divisé en 3 axes de recherche (Figure 3.1), bien que de nombreuses connexions existent entre les 3 axes et aucun ne peut être pris indépendamment des autres :

— Le premier avait pour objectif la création d'une approche numérique afin de simuler l'écoulement dans les fosses remblayées et contenant des chemins préférentiels créés dans la fosse ou constitués par les fractures de la ZES. En particulier, cet axe a consisté à choisir le code de simulation ainsi que les logiciels de création des modèles numériques (géométrie et maillage) et de traitement et visualisation des résultats. Il visait aussi à créer les outils nécessaires à la manipulation des entrées et sorties de données entre les différents logiciels et codes, et à la vérification des capacités de l'approche numérique à reproduire l'écoulement dans les fosses remblayées.
— Le deuxième axe de recherche s'intéressait à l'étude de l'influence des fractures de la ZES sur l'écoulement et sur les flux d'eau souterraine entrants dans les fosses rem-

blayées. Le but de cet axe était de déterminer dans un premier temps si la ZES pouvait être utilisée pour dévier l'eau souterraine des rejets, puis dans un second temps, de tenter de prédire la déviation au moyen de propriétés de la ZES facile à quantifier ainsi que le flux dans la fosse.

— Enfin, le troisième axe visait à optimiser la technique de l'enveloppe perméable. L'objectif consistait d'abord à étudier son efficacité en fonction des propriétés hydrogéologiques du roc, des rejets remblayés, des matériaux la constituant et de son épaisseur, puis de déterminer sa géométrie optimale afin de minimiser le flux d'eau dans les rejets.

Ces trois axes sont décrits plus en détail dans les sections suivantes.

3.2 Approche numérique

3.2.1 Choix du code numérique

Le code numérique devait remplir les critères suivants afin de pouvoir répondre aux objectifs du projet de recherche :

1. Simuler l'écoulement et le transport de contaminants.
2. Posséder une documentation extensive pour faciliter l'apprentissage de son utilisation.
3. Être activement développé et posséder une communauté d'utilisateur active.
4. Permettre la manipulation des simulations via un langage de programmation.
5. Utiliser des formats de données d'entrée et de sortie facilement manipulables.
6. Permettre les modifications du code pour le développement de l'approche d'optimisation (par exemple, être disponible en source libre).

Divers codes (listés dans le tableau 2.1) ont été considérés comme choix potentiel. Les codes commerciaux, dont les sources n'étaient pas disponibles en libre accès, ont été exclus, car aucun ne proposait les fonctionnalités nécessaires pour optimiser la géométrie des chemins d'écoulements préférentiels (voir sections 3.4.2 et 4.4.6). Parmi les codes restants, le code PFLOTRAN (`www.pflotran.org` ; Hammond *et al.*, 2012) a donc été retenu pour réaliser les simulations numériques dans ce projet pour sa simplicité d'utilisation et ses capacités. PFLOTRAN est un logiciel de simulations de l'écoulement de l'eau souterraine et du transport réactif de soluté dans les milieux poreux. PFLOTRAN est écrit en Fortran, parallélisé au moyen d'une approche par mémoire distribuée avec le protocole MPI, et dont le code source est disponible en libre accès (`https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/commits/`). Il

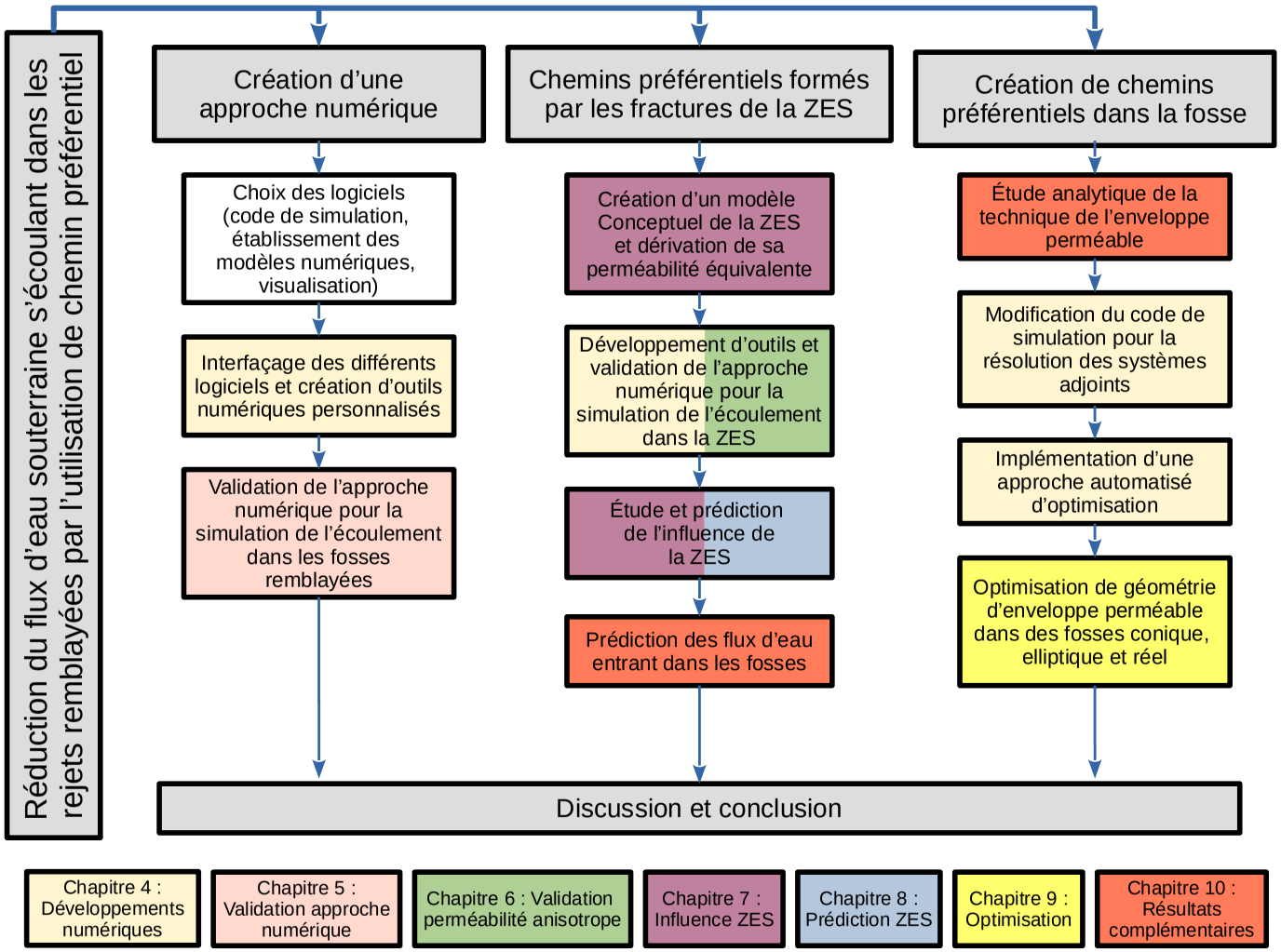


Figure 3.1 Organisation du projet de recherche avec les différents axes de recherche, sous-étapes et articles correspondants. Chaque étape est colorée en fonction de chapitre où les résultats y sont décrits. ZES : Zone Endommagée par Sautage.

utilise la méthode des volumes finis pour discrétiser les équations gouvernant les phénomènes d'écoulement et de transport. L'interface utilisateur utilise des fichiers textes au format ASCII pour l'entrée des données de simulation sous la forme de pseudo-code et organisées en cartes. Chaque carte dans le fichier d'entrée désigne un groupe de commandes pour contrôler différents aspects de la simulation. Par exemple, la carte « GRID » contient les commandes pour entrer la discrétisation de l'espace, alors que la carte « OUTPUT » gère les données de sorties. PFLOTRAN utilise le format de fichier binaire HDF5 (`https://www.hdfgroup.org/solutions/hdf5`) pour les opérations d'entrées sorties (comme les maillages, les jeux de données ou les résultats des simulations). La manipulation des simulations numériques et de leurs résultats a été réalisée au moyen du langage de programmation Python (`https://www.python.org`) et la librairie h5py (Figure 3.2). Ainsi, une boucle de rétroaction entre les données d'entrée et les résultats des simulations numériques a pu être créée afin de mettre en place des approches itératives automatisées, notamment pour réaliser les optimisations de géométrie des chemins préférentiels (section 4.3 et chapitre 9). Finalement, le logiciel Paraview (`https://www.paraview.org`) (Ayachit, 2015) ainsi que la librairie Python matplotlib (`https://www.matplotlib.org`) (Hunter, 2007) ont été utilisés pour visualiser les résultats des simulations numériques (Figure 3.2).

Par défaut, PFLOTRAN ne permet que la simulation de l'écoulement en conditions non saturées au moyen de l'équation de Richards. Ainsi, dans chaque simulation le niveau piézométrique a été considéré de manière à ce que le modèle soit saturé sur toute sa hauteur et à ne pas considérer les propriétés non saturées des matériaux. Le calcul de la charge en fonction de la pression (qui est la variable pour laquelle l'équation de Richards est résolue par PFLOTRAN, voir section 2.6.3) a été réalisé en considérant une masse volumique ρ et une gravité g constantes et égales à 997,16 kg/m^3 et 9,8068 m/s^2, avec comme référence la pression atmosphérique P_{atm} de 101325 Pa. La viscosité dynamique μ a aussi été considérée comme constante et indépendante de la pression et égale à $8.904\,156 \times 10^{-4}$ kg/m/s. De cette manière, le terme $\rho g/\mu$ reliant la perméabilité k [L^2] à la conductivité hydraulique K [L/T] vaut approximativement 1,0982$\times$10^7 m^{-1}s^{-1}.

3.2.2 Création des modèles numériques

Le code de simulation PFLOTRAN par défaut, tout comme la plupart de ses concurrents, n'inclut pas d'outils de pré-traitement avancés, rendant impossible par exemple l'entrée d'un champ de perméabilité complexe, hétérogène et anisotrope (tel que requis pour la simulation de l'influence de la zone endommagée sur l'écoulement de l'eau souterraine autour des fosses ;

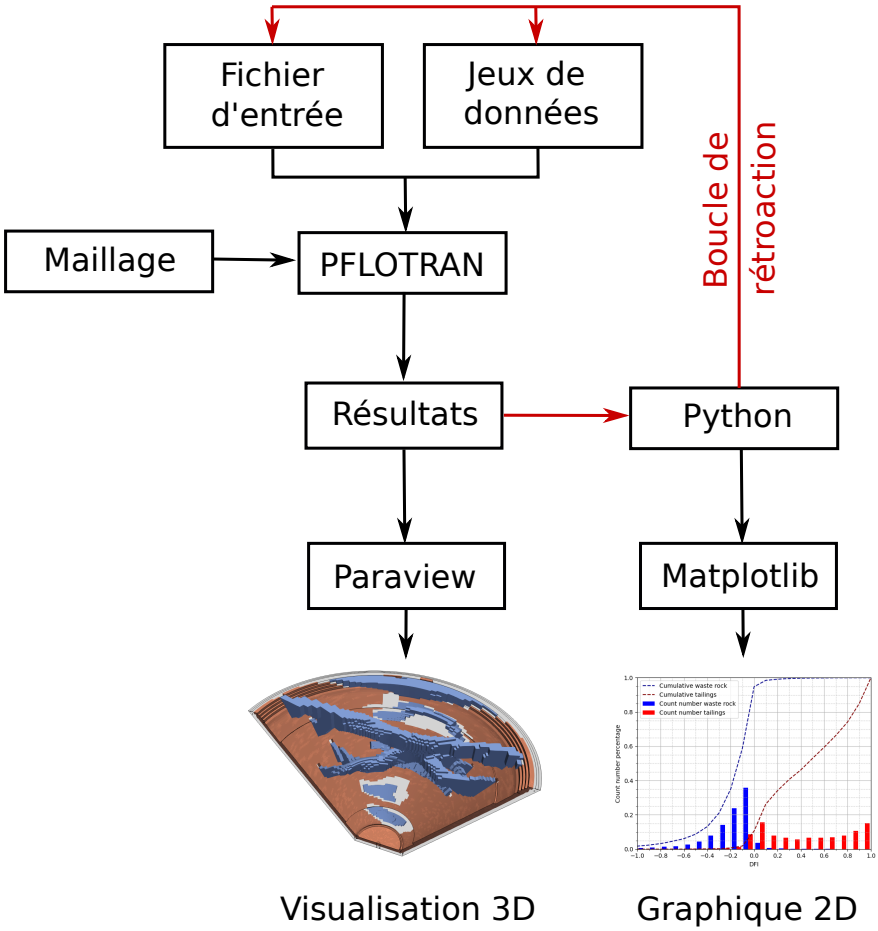


Figure 3.2 Approche générale de simulation avec PFLOTRAN et son écosystème : Python est utilisé pour la manipulation et des fichiers d'entrée et des résultats, Paraview pour la visualisation 3D des résultats et Matplotlib pour la réalisation de graphique en 2D. La boucle de rétroaction écrite en Python (en rouge) a permis le développement de méthodes itératives avec PFLOTRAN.

voir chapitres 7 et 8). En conséquence, il a été nécessaire d'employer un logiciel de CAO à cette fin.

Le logiciel de CAO recherché devait avoir les caractéristiques suivantes :

1. Posséder un modeleur géométrique permettant de modéliser la géométrie des fosses simulées.
2. Permettre la discrétisation spatiale (c'est à dire, le maillage) des modèles géométriques créés précédemment.
3. Posséder une interface pour la création de jeux de données associés aux maillages.
4. Être activement développé et posséder une communauté d'utilisateur active.

Le choix du logiciel de CAO s'est ainsi porté sur Salomé (`www.salome-platform.org`) (Ribes et Caremoli, 2007). Salomé (en version 9.7.0 à la date d'écriture de la thèse) est un logiciel permettant le pré-traitement et le post-traitement des modèles numériques, c'est-à-dire leur création et la visualisation de leurs résultats. Salomé possède une architecture modulaire où chaque module permet de réaliser différentes opérations sur les modèles numériques. Par exemple, le module SHAPER est dédié à la création de modèles de CAO analytiques pour entrer les géométries, SMESH au maillage des géométries de CAO analytiques ou discrétisées, PARAVIS pour la visualisation et YACS pour la création de schémas de calcul et l'interfaçage de différents codes de simulation. Chaque module peut être piloté au moyen de l'interface graphique du logiciel, mais aussi au moyen d'une interface programmable en Python. Salomé a notamment été utilisé comme plateforme de pré- et de post-traitement pour la simulation du comportement de diverses pièces d'ingénieries (Crivoi et Fan, 2019; Gutierrez *et al.*, 2020; Maksimova *et al.*, 2021), de phénomènes thermiques et hydraulique couplés dans les réacteurs nucléaires (Zhang *et al.*, 2021b), ou encore comme base pour la création de modèles de CAO analytiques (Shabayek *et al.*, 2020).

Les modules SHAPER et SMESH en particulier ont été utilisés dans ce projet de recherche afin de respectivement créer les géométries de fosses simulées et de générer la discrétisation spatiale de ces modèles. La géométrie des fosses a été entrée sous Salomé au moyen de modèles de CAO analytiques créés à partir de plans et de relevés topographiques pour les fosses réelles modélisées, ou à partir de primitive (c'est-à-dire, des formes courantes et prédéfinies dans SHAPER) pour celles idéalisées. Les géométries idéalisées ont de plus été paramétrées, c'est-à-dire que ces géométries étaient générées automatiquement à partir des caractéristiques des fosses définies plus haut (profondeur, rayon, axe mineur et majeur par exemple). Les géométries de fosses ont ensuite été exportées au format *Boundary REPresentation* (BREP) pour archivage et réutilisations futures.

Le maillage des modèles de CAO de fosses a ensuite été réalisé au moyen du module SMESH. En particulier, le mailleur NETGEN (Schöberl, 1997) a été utilisé pour la génération de maillages 2D triangulaires ou quadrangulaires puis extrudés en 3D, et parfois pour la création de maillages tétraédriques en dehors des zones d'intérêts (comme pour le maillage du roc). Des PVC ont aussi été générés avec la librairie GeoGram (`http://alice.loria.fr/index.php/software/4-library/75-geogram.html`) et son mailleur Vorpalite lorsque les fosses modélisées possédaient des formes plus complexes et que les phénomènes simulés requéraient une discrétisation exempte d'erreur numérique (comme requis pour l'optimisation de la technique de l'enveloppe perméable, voir chapitre 9). Les maillages étaient ensuite exportés dans un fichier binaire HDF5 et dans le format requis par PFLOTRAN, tout en contenant les informations sur les conditions aux frontières et la répartition des matériaux

(enveloppe perméable, ZES, rejets entreposés et le roc). Cependant, la création de ces PVC et l'exportation des maillages vers PFLOTRAN a nécessité le développement d'outils numériques et qui répondaient à un objectif spécifique de la thèse. Ces développements sont présentés dans le chapitre 4.

3.2.3 Vérification de la nouvelle approche

La nouvelle approche numérique développée ci-dessus a été testée pour vérifier sa capacité à simuler l'écoulement dans les fosses remblayées. La vérification a été effectuée en comparant les résultats de simulations d'écoulement et de transport de contaminants face à ceux d'une expérience sur un modèle physique de laboratoire (Lange et Van Geel, 2011). Le modèle physique en question simulait l'écoulement et le transport de contaminants dans une fosse remblayée en présence d'une enveloppe perméable et d'un roc avec un réseau de fractures orthogonales. La validation de l'approche numérique a été réalisée en deux temps. Les propriétés équivalentes du réseau de fractures orthogonales ont d'abord été calibrées au moyen d'une première expérience, puis les concentrations prédites par l'approche numérique avec PFLOTRAN ont été comparées face aux concentrations mesurées dans le modèle expérimental. Les limites de l'approche par milieu poreux équivalent et du code PFLOTRAN ont aussi été explorées en comparant les concentrations simulées face à une approche par fracturation discrète et face au code HydroGeoSphere. Le détail du modèle physique de laboratoire et les résultats de la validation de l'approche numérique sont présentés dans le chapitre 5.

3.3 Simulation du réseau de fracture de la ZES

Le deuxième axe du projet de recherche visait à étudier le potentiel de déviation de l'eau souterraine autour des rejets remblayés grâce à la présence de chemins préférentiels dans la ZES. En effet, les fractures constituent des chemins d'écoulements préférentiels dans le roc faiblement perméable environnant, et sont donc susceptibles d'influencer grandement l'écoulement autour des rejets (Stacey *et al.*, 2003; Foster *et al.*, 2018). L'influence de ces fractures sur l'écoulement a donc été analysée et quantifiée afin de pouvoir prédire les flux d'eau souterraine entrants dans les fosses remblayées en présence de la ZES. Cette analyse a requis plusieurs étapes (Figure 3.1) :

1. Création d'un modèle conceptuel de la ZES
2. Développement des outils numériques pour simuler l'écoulement dans les fractures de la ZES

3. Analyse et prédiction de l'influence de la ZES sur les flux d'eau souterraine dans des fosses remblayées au moyen de l'approche numérique développée précédemment
4. Prédiction du flux d'eau souterraine entrant dans les rejets remblayés sans la ZES

3.3.1 Modèle conceptuel de la ZES

La première étape consistait à développer un modèle conceptuel de la ZES. En effet, aucun modèle proposé dans la littérature ou utilisé en pratique ne permettait de représenter le réseau de fractures de la ZES dans le contexte des fosses remblayées. Ainsi, un modèle conceptuel de la ZES a été proposé à partir d'observations réalisées sur le terrain dans des fosses à ciel ouvert (Morth *et al.*, 1972; Tuckey et Stead, 2016; Poulsen *et al.*, 2017), et dans des tunnels profonds (Bossart *et al.*, 2002; Thovert *et al.*, 2011). Dans ce modèle, les fractures étaient circulaires, d'ouverture constante, placées aléatoirement dans l'espace avec une densité décroissante et potentiellement sub-parallèle au mur de fosse. Le réseau de fractures de la ZES a été considéré dans l'approche numérique au moyen du modèle du milieu poreux équivalent comme pour le roc fracturé et les roches stériles. La perméabilité équivalente du réseau de fracture de la ZES a donc été dérivée du modèle conceptuel proposé au moyen d'outils fournis par la théorie de la percolation et décrit dans Mourzenko *et al.* (2012). Le modèle conceptuel de la ZES et la dérivation de ses propriétés équivalentes sont décrits dans le chapitre 7.

3.3.2 Développement et vérification de la justesse des outils numériques pour simuler l'influence de la ZES

Le modèle conceptuel de la ZES décrit dans le chapitre 7 tenait en compte l'orientation préférentielle potentielle des fractures créant alors un réseau anisotrope et localement parallèle au mur de fosse (voir section 2.4.1). Cette orientation préférentielle des fractures engendrait un tenseur de perméabilité anisotrope pour le milieu poreux équivalent, avec des directions principales de perméabilité variables et en général non alignées avec les axes de la simulation, créant ainsi un tenseur non diagonal. La simulation de l'écoulement dans une telle configuration était un défi, car d'une part, le code PFLOTRAN ne permettait pas la simulation de l'écoulement avec un tenseur de perméabilité complet, et d'autre part le calcul et l'entrée des neuf composantes du tenseur de perméabilité pour chaque élément du modèle numérique était un problème non trivial. Ainsi, la deuxième étape constituait à d'abord implémenter la simulation de l'écoulement avec un tenseur de perméabilité complet dans PFLOTRAN, et à créer un outil pour entrer les données du tenseur de perméabilité à partir du modèle géométrique de la fosse. La modification de PFLOTRAN ainsi que l'entrée des données sont présentées en détail dans le chapitre 4. La précédente implémentation du tenseur de per-

méabilité complet demandait une vérification de la justesse de la solution numérique pour s'assurer que l'anisotropie du réseau de fracture de la ZES était bien prise en compte. Une solution analytique a donc spécialement été développée pour le cas présent et pour un problème simplifié. Le problème en question représentait une fosse circulaire bidimensionnelle vue en plan, et entourée d'un nombre arbitraire de couches de conductivité hydraulique constante et anisotrope et avec un gradient uniforme à l'infini. Le développement de la solution analytique et la vérification du code PFLOTRAN dans le cas présent sont présentées dans le chapitre 6.

3.3.3 Analyse et prédiction de l'influence de la ZES

La troisième étape de l'étude de l'influence de la ZES sur l'écoulement consistait à utiliser l'approche numérique, le code PFLOTRAN modifié ainsi que les outils d'entrée des données pour simuler les flux d'eau souterraine dans les rejets remblayés, avec (Q_{avec}) et sans la ZES (Q_{sans}). Ainsi, l'influence de la ZES sur l'écoulement a été quantifiée au moyen du *Diverted Flow Index* (DFI), qui représentait l'augmentation ($DFI \leq 0$) ou la réduction ($DFI \geq 0$) relative du flux d'eau souterraine entrant dans la fosse remblayée face au cas négligeant la ZES :

$$DFI = 1 - \frac{Q_{avec}}{Q_{sans}} \tag{3.1}$$

Cette étude avait aussi pour objectif de déterminer si en pratique, la ZES pouvait être utilisée pour créer des chemins d'écoulements préférentiels autour des rejets. Une étude de sensibilité a aussi été menée afin de déterminer les paramètres de la ZES qui influaient le plus l'écoulement et la déviation (c'est-à-dire le DFI). Ces résultats sont présentés dans le chapitre 7.

Cependant, les simulations de l'influence de la ZES sur l'écoulement menées dans le chapitre 7 nécessitaient beaucoup d'informations sur ses propriétés, comme par l'exemple, le rayon moyen des fractures, leur ouverture équivalente, ou encore leur orientation préférentielle. Ces paramètres pourraient être difficiles à mesurer en pratique. Ainsi, dans un second temps, le but était de déterminer de nouveaux paramètres de la ZES qui permettrait de prédire la déviation de l'eau souterraine par la ZES. Les nouveaux paramètres investigués étaient notamment la conductivité hydraulique (tangentielle et radiale) équivalente de la ZES au niveau du mur de la fosse et la longueur sur laquelle les fractures de la ZES sont connectées entre elles. Le chapitre 8 décrit en détail les nouveaux paramètres et la prédiction de la déviation en détail.

3.3.4 Prédiction des flux entrants dans les rejets

La dernière étape de l'étude de l'influence de la ZES consistait à tenter de prédire les flux d'eau dans les fosses remblayés. En effet, les nombreuses simulations effectuées dans le cadre de cet axe de recherche constituaient un important jeu de donnée contenant les flux dans les fosses remblayées avec et sans ZES et pour des conductivités hydrauliques variées des rejets et du roc environnant. L'étude s'est concentrée sur les flux sans la ZES car ils dépendaient de moins de variables (en détail, la géométrie de la fosse ,et la conductivité des rejets et du roc) et étaient donc plus faciles à prédire. En outre, la connaissance de ce flux sans ZES permettait d'obtenir le flux avec la ZES à partir de l'influence prédite au moyen des abaques et des résultats présentés dans le chapitre 8. En particulier, les flux dans les fosses remblayées en l'absence de la ZES ont été prédits au moyen d'une approche graphique dont les détails figurent à la section 10.2.

3.4 Étude et optimisation de la technique de l'enveloppe perméable

3.4.1 Étude analytique de l'enveloppe perméable

Une étude de la technique de l'enveloppe perméable a été réalisée afin de déterminer l'influence de la conductivité hydraulique de l'enveloppe, du contraste de conductivité avec celle du roc et des résidus et de son épaisseur sur son efficacité. L'étude a été conduite sur un modèle simplifié en deux dimensions avec une fosse circulaire et pour laquelle l'efficacité de l'enveloppe définie comme la réduction du flux d'eau souterraine dans les rejets divisée par leur volume a été dérivée à partir de la solution analytique développée dans le chapite 6. Entre autres, la conductivité hydraulique minimale pour garantir une efficacité positive à l'enveloppe (c'est-à-dire que l'enveloppe réduit bien le flux volumique dans les rejets) a été recherchée, ainsi que l'influence de la conductivité des rejets sur l'efficacité a été analysée.

3.4.2 Approche d'optimisation

L'étude de la technique de l'enveloppe perméable ne considérait qu'une enveloppe d'épaisseur constante. Ainsi, dans un second temps, l'optimisation de la géométrie de l'enveloppe perméable pour maximiser son efficacité et réduire le flux dans les rejets remblayés a été considérée. Dans cette étape, les fosses étaient considérées remblayées avec des résidus possédant une faible conductivité hydraulique et l'enveloppe perméable était formée par des roches stériles souvent plusieurs ordres de grandeur plus perméables que les résidus. Les roches stériles étaient considérées non réactives, et par conséquent, le but recherché était de proposer

une procédure pour l'optimisation de la géométrie d'une l'enveloppe perméable constituée de roches stériles pour limiter le flux d'eau souterraine dans les rejets réactifs. Ce problème d'optimisation a, dans un premier temps, été formulé de la manière suivante (Figure 3.3) :

$$\underset{\Omega_e}{\text{minimiser}} \qquad Q_w = \oiint_{\partial\Omega_w} K_e \|\vec{\nabla} h \cdot d\vec{S}\| \tag{3.2a}$$

$$\text{sujet à} \qquad \nabla(K_i \vec{\nabla} h) = 0, \begin{cases} K_i = K_w \text{ dans } \Omega_w \\ K_i = K_e \text{ dans } \Omega_e \\ K_i = K_r \text{ dans } \Omega_r \end{cases} \tag{3.2b}$$

$$\lim_{\infty} \vec{\nabla} h = \frac{\vec{I}}{K_r} \tag{3.2c}$$

$$\Omega_w \cup \Omega_e = \Omega_p \tag{3.2d}$$

$$V_{\Omega_e} \leq \alpha V_{\Omega_p} \tag{3.2e}$$

Avec Q_w le flux dans les rejets remblayés, K_i la conductivité hydraulique des différents matériaux (indice e pour l'enveloppe, w pour les résidus remblayés et r pour le roc environnant), $\Omega_{e,r,w}$ l'espace occupé par les matériaux correspondants, Ω_p l'espace occupé par la fosse, et $\partial\Omega_w$ l'interface entre les résidus et les autres matériaux (enveloppe et roc). La première et la deuxième contrainte (équations 3.2b et c) du problème d'optimisation représentaient la solution de l'écoulement de l'eau souterraine dans les différentes régions $\Omega_{w,e,r}$ sous l'effet d'un gradient hydraulique rectiligne et uniforme à l'infini. La troisième contrainte (équation 3.2d) statuait que l'enveloppe perméable devait être contenue dans la fosse, tandis que la dernière contrainte (équation 3.2e) reflétait finalement la fraction maximum α du volume de la fosse V_{Ω_p} pouvant être occupée par les chemins préférentiels. En pratique, le volume maximum de résidus et de stériles est fixé par les opérateurs miniers en fonction des contraintes opérationnelles et/ou de la quantité de résidus qu'ils souhaitent déposer dans la fosse pour réduire la taille des parcs à résidus en surface.

Une approche d'optimisation topologique a été retenue, et plus particulièrement l'approche par densité (section 2.7). Cette approche est notamment applicable pour toutes les géométries de fosses, et pour toutes les propriétés des matériaux considérés (roc environnant, enveloppe perméable - faite de roche stérile ou non - et les rejets entreposés dans la fosse). L'optimisation topologique consistait tout d'abord à discrétiser spatialement le domaine d'optimisation formé par la fosse remblayée Ω_p, et à déterminer si chaque cellule était, soit des roches stériles (créant ainsi des chemins préférentiels), soit des rejets. Néanmoins, les problèmes d'optimisations sous forme discrète s'avèrent difficiles à résoudre mathématiquement (Bendsøe et Sigmund, 2004; Conforti *et al.*, 2014). La recherche des matériaux pour chaque cellule a donc été réalisée en

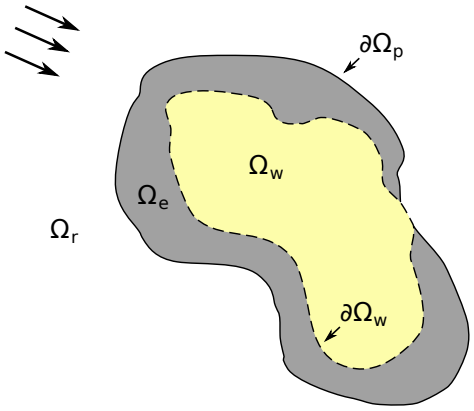


Figure 3.3 Schéma en deux dimensions du problème d'optimisation de la géométrie des chemins préférentiels dans la fosse (délimitée par $\partial\Omega_p$). En blanc l'espace occupé par le roc Ω_r, en gris les chemins préférentiels Ω_e, et en jaune les rejets Ω_w. L'objectif de l'optimisation est de trouver l'espace Ω_e inclus dans la fosse Ω_p tel que le flux d'eau souterraine à travers l'interface $\partial\Omega_w$ soit minimum. Les flèches indiquent l'orientation du gradient régional.

introduisant un paramètre de densité continue $p \in [0, 1]$ défini pour chaque cellule, et qui représentait soit des résidus ($p = 0$), soit des roches stériles ($p = 1$), soit un mélange des deux ($0 < p < 1$) (Bendsøe et Sigmund, 2004). Cette étape revient en pratique à relaxer le problème d'optimisation depuis des variables discrètes (chaque cellule est soit des résidus ou des roches stériles) en des variables continues, beaucoup plus faciles à résoudre, et est appelée approche par densité (voir 2.7.5). De cette manière, la conductivité hydraulique de chaque cellule de la fosse était fonction du paramètre de densité $K_i = f(p_i)$ (voir par exemple (Bendsøe et Sigmund, 1999)). Cependant, un des inconvénients d'une telle approche est que les interfaces entre les deux régions (soit les chemins préférentiels, soit les rejets) devenaient diffuses, et ne permettaient pas de calculer directement le flux à travers les rejets. L'optimisation a donc porté sur la réduction du gradient hydraulique moyen dans les rejets (noté $(\nabla h)_m$), plutôt que directement sur les flux. De même, la contrainte de volumes a été reformulée afin de prendre en compte que certaines cellules pouvaient être composées d'un mélange de roches stériles et de résidus et l'écoulement et la distribution de la charge dans le domaine ont été calculés au moyen de l'approche numérique décrite plus haut avec PFLOTRAN (voir section 3.2). Le calcul numérique de la charge et de l'écoulement a été représenté sous la forme d'une fonction implicite $g(h, K) = 0$. En pratique, la fonction g peut être vue comme le résidu du système linéaire discrétisé résolu par PFLOTRAN, c'est à dire, $g(h, K) = A(K)h - B$ où la matrice $A(K)$ contient les informations sur le maillage et les propriétés des matériaux et où le vecteur B contient celles sur les conditions aux frontières. Ainsi, rechercher $g = 0$

pour la charge h revient à déterminer la charge dans le domaine qui est solution de l'équation différentielle régissant l'écoulement, et traduit donc la réalisation de la simulation numérique.

L'optimisation de la géométrie des chemins préférentiels dans les fosses (équation 3.2) traitée avec une approche topologique par densité a ainsi pu être réécrite :

$$\begin{aligned} \underset{p}{\text{minimiser}} \quad & (\nabla h)_m = \sum_i \frac{(1-p_i)V_i\|\nabla h_i\|}{\sum_i (1-p_i)V_i} \\ \text{sujet à} \quad & 0 \leq p_i \leq 1 \\ & g(h, K(p)) = 0 \\ & \sum_i p_i V_i \leq \alpha V_{\Omega_p} \end{aligned} \tag{3.3}$$

Le problème d'optimisation discrétisé ci-dessus a été résolu par une approche d'optimisation basée sur le gradient, qui est une méthode itérative mettant à jour la géométrie des chemins préférentiels (paramétrée par le paramètre de densité p) en fonction de la dérivée du gradient hydraulique moyen par rapport au paramètre de densité $d(\nabla h)_m/dp$.

3.4.3 Calcul de la dérivée totale du gradient hydraulique moyen dans les résidus

La dérivée totale du gradient moyen dans les rejets dépendait à la fois de la charge hydraulique dans les rejets et du paramètre de densité p, et pouvait donc s'écrire :

$$\frac{d(\nabla h)_m(h,p)}{dp} = \frac{\partial(\nabla h)_m}{\partial p} + \frac{\partial(\nabla h)_m}{\partial h}\frac{dh}{dK}\frac{dK}{dp} \tag{3.4}$$

Dans l'équation précédente 3.4, la quantité dh/dK représentait la variation de la charge dans le domaine en fonction de la variation de la conductivité hydraulique (elle même fonction du paramètre de densité p) et pouvait s'avérer difficile à calculer. Néanmoins, cette quantité peut être éliminée en utilisant la méthode adjointe (Errico, 1997), qui permet d'obtenir la dérivée du gradient moyen pour toutes les cellules du domaine d'optimisation discrétisé, en résolvant un système linéaire de la même taille (nombre d'inconnues et d'équations) que celui résolu par PFLOTRAN pour simuler l'écoulement. Le Lagrangien $\mathcal{L}(h, p, \lambda)$ du problème d'optimisation, avec λ le vecteur des multiplieurs de Lagrange, a tout d'abord été défini :

$$\mathcal{L} = (\nabla h)_m(h,p) + \lambda^T g(h, K(p)) \tag{3.5}$$

Or, par construction, la fonction $g(h, K)$ est nulle lorsque la charge respecte l'équation gouvernant l'écoulement, et donc, $\mathcal{L} = (\nabla h)_m$. Par ailleurs, le vecteur λ de l'équation (3.5) peut être choisi librement et l'égalité précédente sera toujours respectée.

La dérivée totale du lagrangien $d\mathcal{L}/dp$ s'écrit :

$$\frac{d\mathcal{L}}{dp} = \frac{\partial(\nabla h)_m}{\partial p} + \frac{\partial(\nabla h)_m}{\partial h}\frac{dh}{dK}\frac{dK}{dp} + \lambda^T\left(\frac{\partial g}{\partial K}\frac{dK}{dp} + \frac{\partial g}{\partial h}\frac{dh}{dK}\frac{dK}{dp}\right) \tag{3.6}$$

et peut être réarrangée de la façon suivante :

$$\frac{d\mathcal{L}}{dp} = \frac{\partial(\nabla h)_m}{\partial p} + \left(\frac{\partial(\nabla h)_m}{\partial h} + \lambda^T\frac{\partial g}{\partial h}\right)\frac{dh}{dK}\frac{dK}{dp} + \lambda^T\frac{\partial g}{\partial K}\frac{dK}{dp} \tag{3.7}$$

Ainsi, le terme dh/dK difficile à calculer peut être éliminé en posant le système adjoint :

$$\frac{\partial g}{\partial h}^T\lambda = -\frac{\partial(\nabla h)_m}{\partial h}^T \tag{3.8}$$

et la dérivée du gradient hydraulique moyen dans le domaine devient alors :

$$\frac{d(\nabla h)_m(h,p)}{dp} = \frac{\partial(\nabla h)_m}{\partial p} + \lambda^T\frac{\partial g}{\partial K}\frac{dK}{dp} \tag{3.9}$$

Les quantités $\frac{\partial g}{\partial h}$ et $\frac{\partial g}{\partial K}$ représentaient respectivement la dérivée du système linéaire résolu par PFLOTRAN par rapport à sa solution (c'est-à-dire le Jacobien), et celle par rapport à la conductivité hydraulique (encore appelée sensibilité). Ces deux quantités ne faisaient pas partie, par défaut, des sorties du code PFLOTRAN, et ont donc dû être implémentées. Les détails de cette implémentation sont présentés dans le chapitre 4, où est aussi présentée l'implémentation de l'approche itérative pour optimiser les chemins préférentiels.

CHAPITRE 4 DÉVELOPPEMENT DES OUTILS NUMÉRIQUES POUR LA CRÉATION, LE CALCUL, ET LE TRAITEMENT DES MODÈLES NUMÉRIQUES

4.1 Interface entre le code PFLOTRAN et le logiciel de CAO Salomé

Le logiciel de CAO Salomé et le code PFLOTRAN ont été utilisés dans ce projet de recherche pour créer la géométrie et le maillage, puis résoudre les modèles numériques, respectivement. Cependant, par défaut, les sorties de Salomé et les entrées de PFLOTRAN ne possèdent aucun format de fichier commun. De plus, aucune librairie et aucun programme tiers ne permettait l'exportation du maillage défini avec Salomé vers PFLOTRAN. Une interface a donc été spécifiquement développée afin de convertir les fichiers de sorties de Salomé vers le format d'entrée de PFLOTRAN. Cette interface prenait la forme de divers greffons dans le module SMESH de Salomé. Chaque greffon créé a été doté d'une interface graphique, afin d'assurer une prise en main intuitive et rapide et de mettre à la portée d'utilisateurs non-initiés, les capacités des outils de CAO de Salomé pour l'ingénierie géologique. L'interface proposée peut se comparer aux logiciels BUILD3D et SEEP3D de la suite GeoStudio (`www.geoslope.ca`) utilisés dans l'industrie. Le téléchargement des greffons et leur installation sont détaillés dans le dépôt GitHub suivant : `https://github.com/MoiseRousseau/Salome-PFLOTRAN-Interface`.

Pour les besoins du projet, quatre greffons ont été créés afin de réaliser les opérations suivantes :

- Vérification de la qualité du maillage, notamment le respect de la condition d'orthogonalité et de biais (voir section 2.6.3).
- Exportation de la discrétisation spatiale vers les formats d'entrées de PFLOTRAN.
- Création d'un jeu de données pour le calcul de flux à travers les faces du maillage.
- Création de jeux de données de distance et de normale à une surface donnée (mur de la fosse notamment) et calcul de la perméabilité représentant une ZES.

Les quatre greffons sont appelés dans Salomé à partir du module SMESH, et sous le menu « Mesh/SMESH Plugins/Salome-PFLOTRAN-Interface/ ». Les quatre greffons, leur utilisation et leur fonctionnement sont présentés plus en détail ci-dessous.

4.1.1 Vérification de la qualité du maillage

PFLOTRAN utilise la méthode TPFA pour la discrétisation de l'opérateur de diffusion (associé au Laplacien présent dans l'équation de Richards utilisée pour modéliser l'écoulement) et le

théorème de Green-Gauss pour l'opérateur de gradient (présent dans l'équation d'advection-dispersion pour le transport ; section 2.6.3). La discrétisation spatiale du domaine doit donc répondre aux conditions d'orthogonalité et de biais (Moukalled *et al.*, 2016). Ces conditions sont d'office remplies lorsque la discrétisation spatiale est formée par un maillage cartésien de l'espace, mais ne l'est pas nécessairement pour un maillage déstructuré (comme dans ce projet de recherche). Il était donc nécessaire ici de quantifier la qualité du maillage afin de s'assurer que les erreurs numériques demeuraient limitées. Les outils de vérification de la qualité du maillage intégrés dans Salomé ne permettaient cependant pas de quantifier la condition d'orthogonalité et de biais et un greffon a donc été développé. Ce greffon incluait divers outils d'analyse, de visualisation et d'exportation de la qualité du maillage (Figure 4.1).

En pratique, le greffon opérait en plusieurs étapes. À chaque étape, des tableaux NumPy ont été utilisés et permettaient de manipuler les données entre les différentes étapes et de vectoriser les différentes opérations mathématiques pour garantir de meilleures performances au greffon. La première étape consistait à sélectionner le maillage sous le module SMESH de Salomé, puis à le décomposer pour extraire les connexions entre ses différentes faces internes. Ensuite, le centre de chaque élément, puis le centre C_f, la normale $\vec{n_f}$ (unitaire) et le vecteur reliant les centres des deux éléments partageant la même face $\vec{R_f}$ étaient calculés. La troisième étape consistait à calculer pour chaque face, deux quantités représentant l'une le respect de la condition d'orthogonalité et l'autre celle de biais. La première quantité a été définie comme l'angle de non-orthogonalité α_{no}, c'est-à-dire l'angle entre la normale $\vec{n_f}$ de la face et le vecteur reliant les deux centres des éléments $\vec{R_f}$:

$$\alpha_{no} = \arccos \frac{\vec{n_f} \cdot \vec{R_f}}{\|\vec{R_f}\|} \tag{4.1}$$

L'erreur de la condition de biais (E_{biais}), a été définie comme la distance entre le centre de la face et le point résultant de l'intersection I_f de la face et du vecteur reliant les deux éléments, divisée par la longueur de ce dernier vecteur :

$$E_{biais} = \frac{\|I_f - C_f\|}{\|\vec{R_f}\|} \tag{4.2}$$

La dernière étape consistait à afficher les informations à l'utilisateur au moyen de l'interface graphique (Figure 4.1, étapes 3 et 4). D'autres statistiques étaient directement affichées dans le terminal, comme les angles de non-orthogonalité et les erreurs de biais moyens et maximaux. Ces quantités permettaient de comparer la qualité relative de deux maillages. Par exemple,

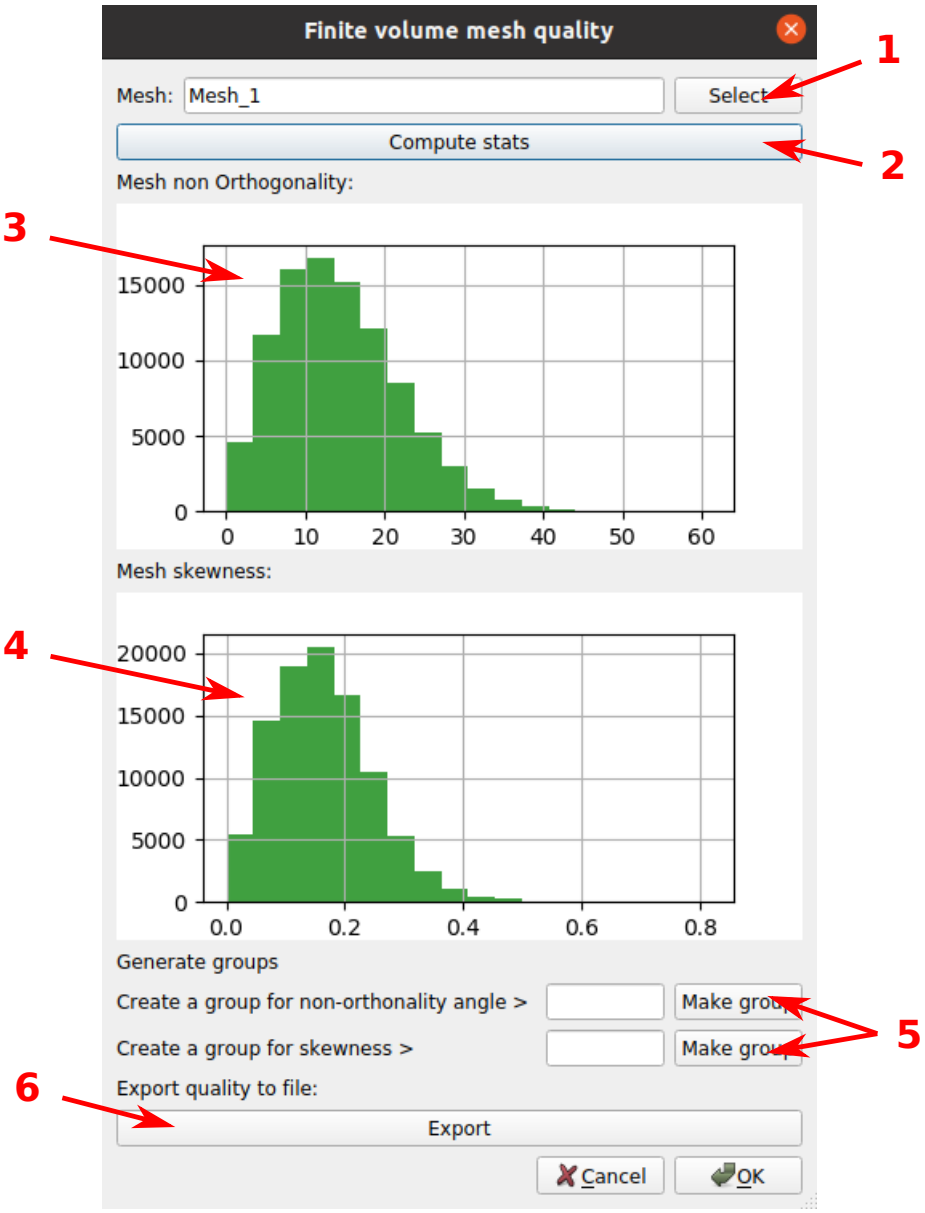


Figure 4.1 Interface graphique du greffon pour l'analyse de la qualité du maillage. (1) Outil de sélection, (2) calcul de la qualité du maillage, (3) distribution des angles de non-orthogonalité, (4) distribution des biais, (5) création de groupes pour la visualisation des faces sélectionnées et (6) exportation des angles de non-orthogonalité et des biais au format texte.

un maillage avec de plus grands angles de non-orthogonalité serait susceptible d'engendrer des erreurs numériques plus grandes.

4.1.2 Exportation de maillage

L'exportation des maillages créés avec Salomé dans un format lisible par PFLOTRAN n'était pas implémentée dans les deux logiciels. Un deuxième greffon a donc été développé dans ce but. L'interface graphique du greffon permettait à l'utilisateur de sélectionner le maillage à exporter parmi les objets de SMESH, de choisir les groupes d'éléments à exporter (par exemple les différents matériaux), le format de sortie de fichier (binaire ou texte), le format du maillage (explicite ou implicite) et le fichier de destination (Figure 4.2). Le comportement du greffon s'adaptait alors selon les différentes options choisies pour le format de fichier et de maillage, et créait les fichiers de sorties destinés à être entrés dans PFLOTRAN (Tableau 4.1).

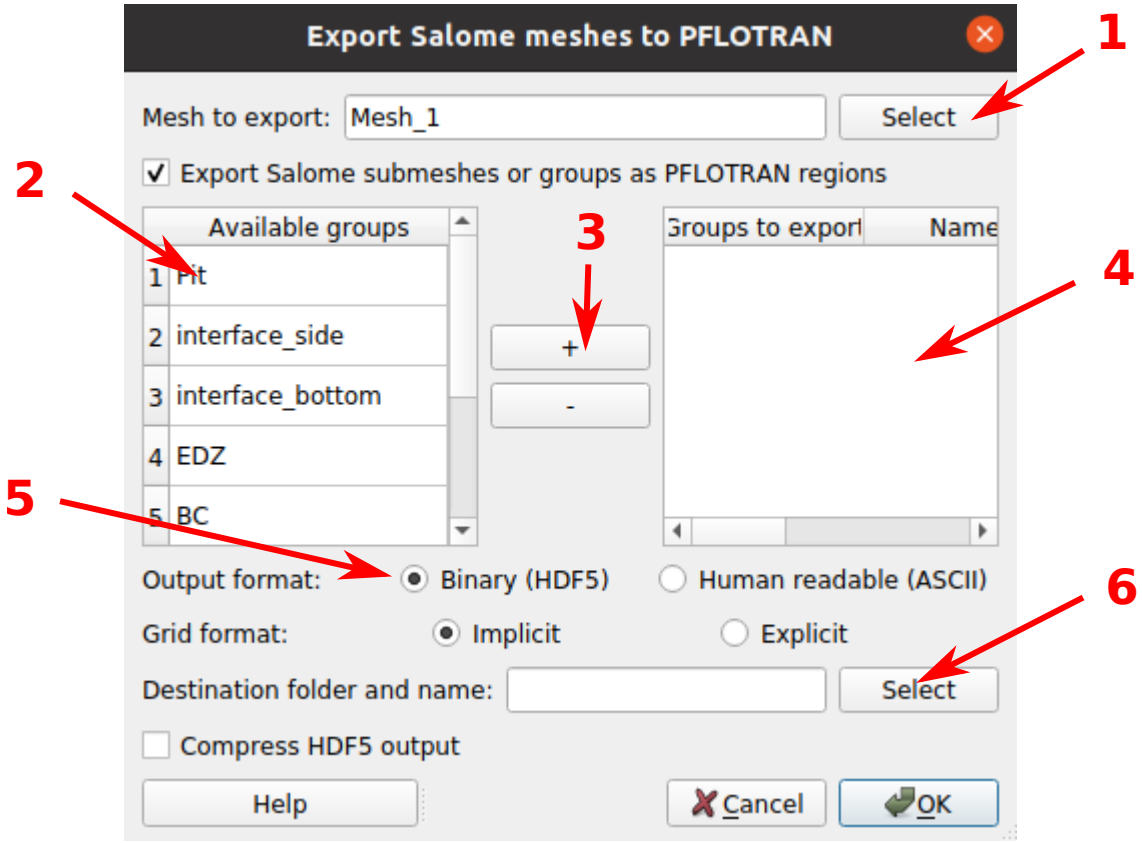


Figure 4.2 Interface graphique du greffon d'exportation de maillage de Salomé vers PFLOTRAN. (1) Sélection du maillage à exporter parmi les objets de SMESH, (2) groupes de mailles disponibles pour l'exportation, (3) ajout ou suppression des groupes à exporter, (4) liste des groupes à exporter, (5) format de maillage et de fichier, (6) sélection du fichier de sortie.

Tableau 4.1 Description des fichiers de sorties de l'interface Salomé vers PFLOTRAN avec leur extension.

Extention	Description	Commentaire
**.h5*	Maillage au format binaire (explicite ou implicite)	Format de maillage défini selon la structure du fichier HDF5, peut aussi contenir des groupes volumiques ou surfaciques
**.ugi*	Maillage implicite au format texte	-
**.uge*	Maillage explicite au format texte	-
**.vs*	Groupe volumique au format texte	Un fichier par groupe
**.ss*	Groupe surfacique au format texte (maillage implicite)	Un fichier par groupe
**.ex*	Groupe surfacique au format texte (maillage explicite)	Un fichier par groupe

Exportation au format implicite

Le format implicite définissait le maillage en fonction des coordonnées de ses noeuds et d'une suite de nombres entiers désignant les noeuds constituant ses éléments. Plus concrètement, l'ordre d'entrée des noeuds définissait leur indice dans le maillage. Par exemple, le premier noeud défini dans les fichiers de sortie (texte ou binaire) portait l'indice 1, le deuxième l'indice 2, et ainsi de suite. Ensuite, les éléments étaient définis au moyen d'une lettre désignant leur type (T : Tétraèdre, P : Pyramide, W : Prisme et H : Hexaèdre), et la liste des indices de noeuds les constituant. Par exemple, l'élément défini par le code « T 1 2 3 4 » désignait un tétraèdre défini par les quatre premiers points du maillage. Cependant, l'ordre des points des éléments dans PFLOTRAN devait respecter la règle de la main droite, ce qui impliquait un réarrangement de l'ordre des points de Salomé. L'ordre d'entrée des éléments dans le fichier d'entrée définissait leur indice dans le maillage (de manière similaire aux points) : le premier élément entré recevait l'indice 1, le deuxième l'indice 2, et ainsi de suite. Finalement, selon le format de fichier, ces informations étaient soit écrites dans un fichier texte (d'abord les coordonnées des noeuds, puis les éléments définis par leurs points), soit dans un fichier HDF5 sous un groupe *Domain/Vertices* pour les noeuds et *Domain/Cells* pour les éléments.

Exportation au format explicite

Le maillage au format explicite n'est plus défini implicitement par les noeuds et les éléments, mais en formulant explicitement les caractéristiques de chaque élément nécessaire pour la formulation de la méthode des volumes finis. Ce format de maillage permet une plus grande

flexibilité et permet par exemple, d'entrer des éléments polyédriques, ou des éléments factices pour simuler une double porosité. Ainsi, le volume et le centre de chaque élément étaient tout d'abord spécifiés, suivis par la surface, le centre et le voisinage de chaque face des éléments. Ces informations étaient enregistrées, selon le choix de l'utilisateur, directement dans un fichier texte (volume et centre des éléments d'abord, puis informations sur les faces ensuite), ou dans un fichier HDF5 qui enregistrait les données suivantes :

— *Domain/Cells/Centers* le centre des éléments,
— *Domain/Cells/Volumes* leur volume,
— *Domain/Connections/Cell Ids* la connectivité des faces,
— *Domain/Connections/Areas* leur aire,
— et *Domain/Connections/Centers* leur centre.

L'ordre des éléments dans le fichier de maillage définissait l'indice des éléments. Plus de détails sur chaque format de fichier et de maillage sont disponibles dans la documentation de PFLOTRAN (`https://www.pflotran.org/documentation/user_guide/cards/subsurface/grid_card.html` et `http://doc-dev.pflotran.org/user_guide/cards/subsurface/grid_card.html`).

Exportation des groupes

Les différents groupes choisis par l'utilisateur étaient traités après exportation du maillage principal. Le greffon procédait différemment selon les options de format de fichier et de maillage, mais aussi du type de groupes (éléments volumiques pour définir des matériaux, ou éléments surfaciques définissant des conditions aux frontières par exemple). Les groupes volumiques (c'est-à-dire, avec des éléments volumiques) étaient exportés comme une liste contenant les indices des éléments du groupe. Par exemple, un groupe volumique constitué par le premier, le troisième et le sixième élément définis dans le fichier de maillage (explicite ou implicite) était codé par les indices 1, 3, et 6. Selon le format de fichier, les groupes volumiques étaient ensuite enregistrés au format texte (à raison d'un élément par ligne), ou au format binaire HDF5 sous *Regions/Nom-du-groupe/Cell Ids*.

Le format d'exportation des groupes surfaciques dépendait du format du maillage (implicite ou explicite). Pour un maillage au format implicite, chaque face du groupe était caractérisée par l'indice des noeuds la composant et par une lettre pour le type de face (T : triangle, Q : quadrilatère). Au format explicite, l'aire de chaque face, son centre et son appartenance à un élément étaient spécifiés. Le groupe était par la suite enregistré dans un fichier texte (maillage explicite ou implicite) ou dans un fichier binaire dans *Regions/Nom-du-groupe/Face Ids* (maillage implicite seulement). D'autres détails sur les formats d'entrée des groupes dans

PFLOTRAN peuvent être trouvés dans la documentation (`http://doc-dev.pflotran.org/user_guide/cards/subsurface/region_card.html`)

4.1.3 Exportation de faces pour le calcul de bilan de matière

Le calcul du flux d'eau souterraine entrant ou sortant des fosses remblayées a été calculé avec PFLOTRAN en utilisant la carte *INTEGRAL_FLUX*, et en définissant les faces sur lesquelles sommer le flux (typiquement, l'interface entre le roc environnant et les rejets remblayés). Les informations sur ces faces devaient donc être exportées depuis le modèle numérique sous le module SMESH de Salomé vers PFLOTRAN, et au format requis par la carte. Ainsi, un troisième greffon a été créé pour réaliser cette opération. Le greffon pouvait traiter plusieurs groupes de faces à la fois, les exporter dans plusieurs formats et activer différentes options de sommation. Le détail des formats et des options de sommation de flux sont disponibles dans la documentation de la carte (`https://www.pflotran.org/documentation/user_guide/cards/subsurface/integral_flux_card.html`) et à la section 4.4.3 de la thèse. À la fin de l'exportation, le greffon générait un fichier texte décrivant le contenu de la carte *INTEGRAL_FLUX* pour pouvoir être intégré directement au fichier d'entrée de PFLOTRAN avec la carte *EXTERNAL_FILE* (voir `https://www.pflotran.org/documentation/user_guide/cards/utility_cards/external_file_card.html`).

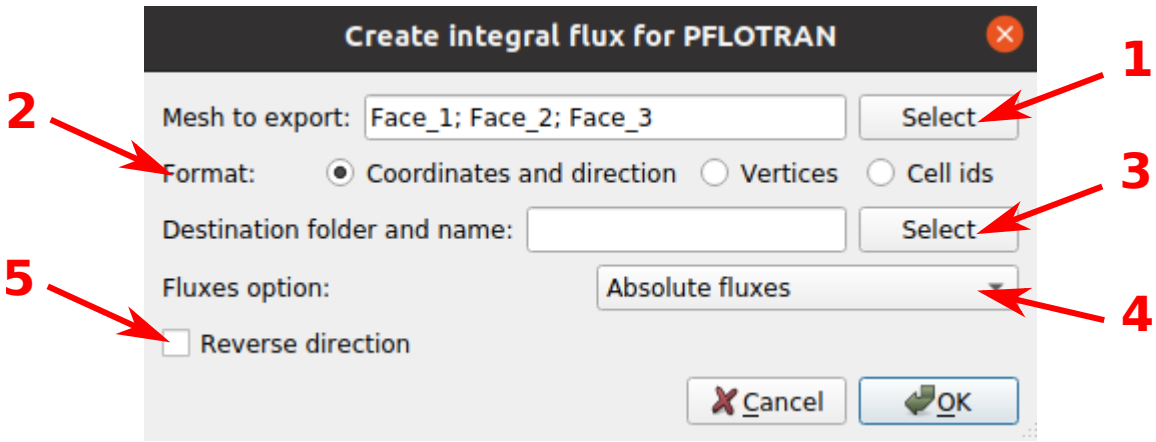


Figure 4.3 Interface graphique du greffon pour la création de jeux de données de face et pour le calcul des flux d'eau souterraine dans les fosses remblayées. (1) Sélection des groupes de faces à exporter, (2) sélection du format, (3) sélection des fichiers de sorties, (4) option sur la sommation des flux, et (5) inversion de la direction (pour les flux orientés).

4.1.4 Champs de perméabilité de la ZES

Le calcul de la perméabilité équivalente de la ZES nécessitait plusieurs informations géométriques sur la position des éléments par rapport aux murs de fosse, comme leur distance et le vecteur reliant le centre de l'élément aux murs. Ce dernier était nécessaire notamment pour calculer l'orientation locale des fractures de la ZES. Un greffon a donc été réalisé afin de calculer et exporter ces quantités, puis de déterminer les composantes du tenseur de perméabilité équivalente de la ZES à partir des paramètres de la ZES entrés par l'utilisateur. L'interface graphique permettait de choisir interactivement dans Salomé un groupe d'éléments pour lesquels calculer les informations géométriques, la surface discrétisée d'intérêt, le fichier de sortie, les informations de la ZES pour calculer la perméabilité équivalente du réseau de fracture, et le type de couplage hydraulique entre le roc et le réseau de fractures (Figure 4.4).

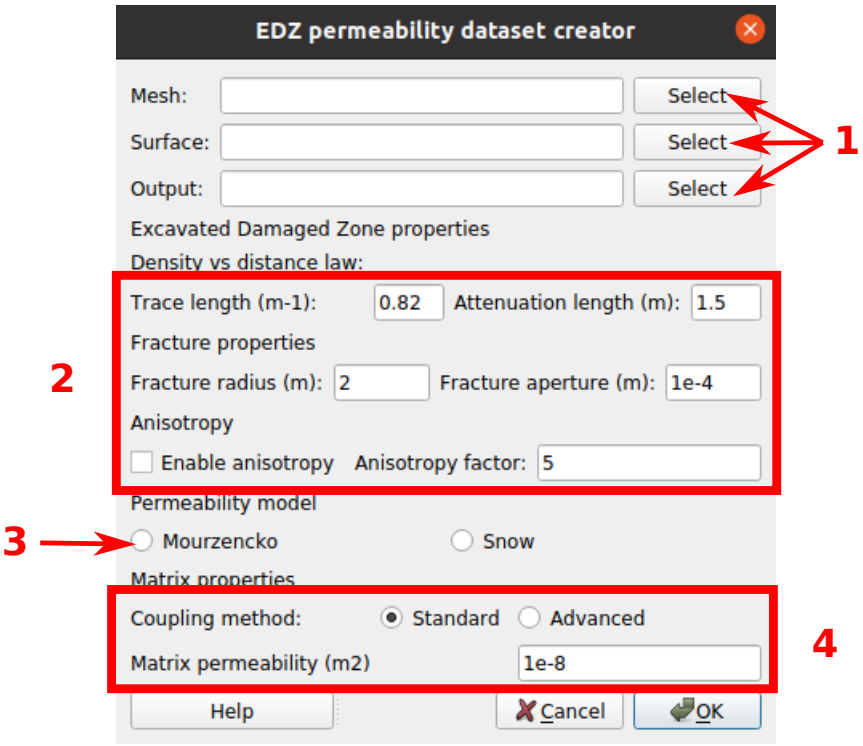


Figure 4.4 Interface graphique du greffon de calcul des propriétés de la ZES. (1) Sélection des objets de SMESH et du fichier de sortie, (2) entrée des propriétés de la ZES, (3) du modèle de calcul de perméabilité équivalente et (4) du couplage avec le roc.

À l'exécution, le greffon procédait tout d'abord au calcul de la distance des centres des éléments à la surface considérée (c'est-à-dire le mur de fosse). Le calcul était réalisé pour chaque élément dans le groupe considéré au moyen de la méthode *GetMinDistance()* du mo-

dule Python *smeshBuilder* de Salomé (voir `https://docs.salome-platform.org/latest/gui/SMESH/smeshBuilder.html`). Ainsi, la complexité du calcul de la distance était de type $\mathcal{O}(pn)$ où p est le nombre de faces dans la surface discrétisée et n le nombre d'éléments dans le groupe à exporter. Ceci impliquait que pour une surface finement discrétisée et un grand nombre d'éléments dans le groupe, le temps de calcul pouvait être conséquent. Par exemple, pour des surfaces discrétisées composées d'environ un millier de faces et un groupe composé de 300 000 éléments, le calcul se faisait en environ une heure avec un processeur Intel Core i7-6820HQ.

Par la suite, le calcul de la perméabilité équivalente du réseau de fractures de la ZES pouvait être réalisé à partir des informations calculées plus haut. Cette étape utilisait notamment une classe Python dédiée qui enregistrait les propriétés de la ZES ainsi que les choix de l'utilisateur (modèle de perméabilité, couplage avec le roc), et dérivait la perméabilité de la ZES à partir du modèle proposé dans le chapitre 7 (voir section 8). Un autre modèle de perméabilité basé sur le modèle de Snow (Snow, 1969) a aussi été implémenté à des fins de tests. Ce modèle dérivait la perméabilité équivalente d'un réseau de fractures isotrope $\hat{k_f}'$ en fonction de la densité de fracture ρ' à partir de la relation suivante (voir section 7.2.1 pour plus d'information) :

$$\hat{k_f}'(\rho') = \frac{2}{3\pi}\rho' \tag{4.3}$$

Enfin, pour une orientation anisotropique du réseau de fracture de la ZES, la projection du tenseur de perméabilité $\boldsymbol{k}_{local}$ depuis le référentiel local (c'est-à-dire parallèle au mur de fosse) dans le référentiel de simulation $\boldsymbol{k}_{sim}$ était réalisée au moyen de la transformation suivante (Borghi *et al.*, 2015) :

$$\boldsymbol{k}_{sim} = R^{sim}_{local}\ \ \boldsymbol{k}_{local}\ \ (R^{sim}_{local})^T \tag{4.4}$$

avec R^{sim}_{local} la matrice de rotation de la base locale vers la base de la simulation. Cette matrice de rotation était constituée des coordonnées des vecteurs unitaires dans la base locale $(\vec{u}, \vec{v}, \vec{n})$ exprimées dans la base de simulation $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ (Borghi *et al.*, 2015) :

$$R^{sim}_{local} = (\vec{u}, \vec{v}, \vec{n}) \tag{4.5}$$

avec $\vec{u}$ et $\vec{v}$ deux vecteurs orthogonaux et tels que $\vec{u}\cdot\vec{v} = \vec{n}$. Les composantes k_{ij} du tenseur de perméabilité $\boldsymbol{k}_{sim}$ (équation 4.4) pouvaient alors se réécrire de la manière générale suivante :

$$k_{ij} = u_i u_j\ k_\perp + v_i v_j k_\perp + n_i n_j k_\parallel \tag{4.6}$$

Avec $k_\perp$ et $k_\parallel$ les perméabilités dans les directions respectivement perpendiculaire et parallèle à la normale du mur de fosse (voir chapitre 7).

Ces différentes opérations mathématiques nécessaires au calcul de la perméabilité de la ZES et conduites sur des discrétisations fines contenant beaucoup d'éléments pouvaient être particulièrement longues à calculer. Ainsi, les précédentes opérations ont toutes été réalisées en opérant directement sur des tableaux NumPy au moyen d'opérations vectorisées permettant ainsi de meilleures performances.

Les composantes du champ de perméabilité de la ZES ont finalement été enregistrées sous la forme de jeux de données au format binaire contenant la perméabilité de chaque élément du maillage avec la structure suivante :

- *Cell ids* : indice des cellules de 1 à N avec N le nombre de cellules dans le maillage.
- *Distance* : distance de la cellule à l'interface sélectionnée.
- *Normal* : composantes du vecteur unitaire reliant le centre de la cellule à son point le plus proche appartenant à l'interface.
- *PermeabilityIJ* : perméabilité dans la direction IJ pour chaque cellule.

Le champ de perméabilité était ensuite importé dans PFLOTRAN au moyen de la carte *DATASET*.

4.2 Interface entre le mailleur Vorpalite et Salomé

4.2.1 Développement du greffon

Le module de maillage de Salomé, SMESH, est principalement destiné à créer des maillages pour des codes utilisant la méthode des éléments finis, pour laquelle des éléments tétraédriques sont appropriés. Ainsi, Salome intègre nativement plusieurs mailleurs pour la création d'éléments tétraédriques comme NETGEN (Schöberl, 1997) ou Gmsh (Geuzaine et Remacle, 2009). Cependant, PFLOTRAN est un code par volumes finis, et utilise notamment la méthode TPFA pour la discrétisation de l'opérateur de diffusion présent dans l'équation de Richards, rendant les maillages tétraédriques plus susceptibles aux erreurs de discrétisation à cause du non-respect de la condition d'orthogonalité. En revanche, l'utilisation de PVC, par construction, permet la création de faces perpendiculaires tout en respectant la condition d'orthogonalité (Du *et al.*, 1999). Certains logiciels, tels que le programme VoroCrust (Abdelkader *et al.*, 2020), ou la librairie GeoGram, permettent la création de tels maillages, mais aucun n'est intégré dans le module SMESH de Salomé. Ainsi, une interface entre le mailleur Vorpalite de la librairie GeoGram et Salomé a été développée pour permettre la création et l'exportation de PVC adaptés à la méthode de discrétisation employée dans PFLOTRAN.

L'interface a pris la forme d'un greffon doté d'une interface graphique (Figure 4.5), et calcule le PVC à partir des frontières discrétisées du modèle et de l'emplacement des germes (*seeds*) ou leur nombre à générer, le cas échéant. L'interface graphique permettait de sélectionner interactivement les frontières discrétisées (c'est-à-dire un maillage formé d'éléments bidimensionnels représentant les frontières du modèle 3D) et les germes du PVC à partir des points d'un maillage dans SMESH (optionnel), et de spécifier les options à passer au mailleur Vorpalite (par exemple, l'option *nb_pts=X* qui permet de spécifier le nombre de cellules de Voronoï désirées). Ensuite, le greffon exportait les frontières et les germes dans un format lisible par Vorpalite, appelait le mailleur, puis importait à nouveau les résultats dans le module SMESH de Salomé. Le téléchargement du greffon et son installation sont détaillés dans le dépôt GitHub suivant : `https://github.com/MoiseRousseau/Salome-Voronoi`.

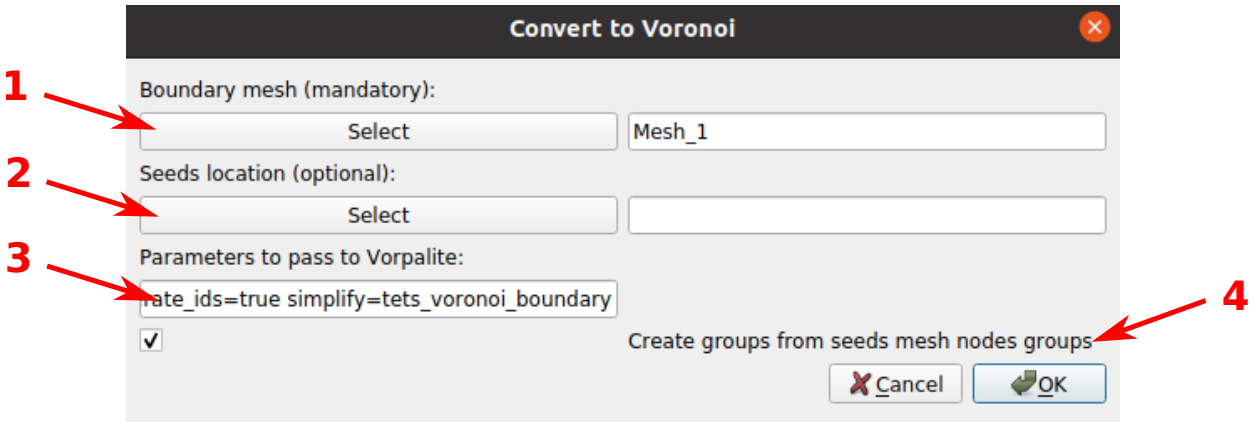


Figure 4.5 Interface graphique du greffon pour la création de Pavages de Voronoï Centré (PVC) depuis Salomé. (1) Sélection du maillage contenant la frontière de l'objet discrétisé, (2) sélection du maillage contenant les germes à considérer (optionnel), (3) sélection des options à transférer au mailleur Vorpalite, et (4) création de groupe à partir des groupes de points du maillage contenant les germes.

4.2.2 Comparaison d'un maillage tétraédrique et d'un PVC

La qualité des PVC générés au moyen du mailleur Vorpalite a été comparée à celle des maillages tétraédriques. Un modèle représentant une fosse remblayée avec une forme concave, large de 250 mètres, longue de 400 mètres, profonde de 60 mètres environ et inspirée d'une géométrie réelle (Radzilani, 2015) a été considéré pour illustrer la qualité des deux types de maillage (Figure 4.6). Le maillage tétraédrique dans ce cas a été créé au moyen de l'algorithme NETGEN implémenté nativement dans Salomé. La qualité du maillage a été estimée

au moyen de l'erreur de biais E_{biais} (équation 4.2) et de l'angle de non-orthogonalité α_{no} (équation 4.1) définis et calculée via le greffon présenté plus haut (section 4.1.1).

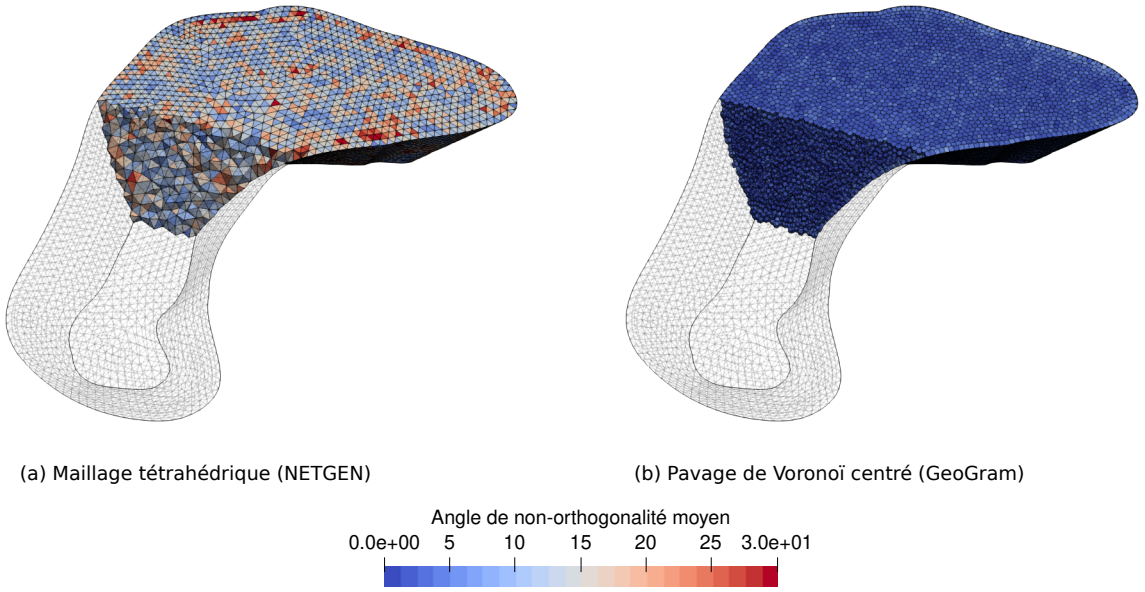


Figure 4.6 Comparaison d'un maillage tétraédrique et d'un Pavage de Voronoï Centré (PVC) pour la discrétisation d'une fosse remblayée contenant 50 000 volumes (Radzilani, 2015). Les volumes sont colorés en fonction de l'angle moyen de non-orthogonalité.

Le maillage tétraédrique généré avec le mailleur NETGEN présentait 50 391 éléments, avec un angle de non-orthogonalité moyen et maximum d'environ 14° et 62° respectivement, et l'erreur de biais était de 0,16 en moyenne et 0,82 au maximum (Tableau 4.2). La discrétisation utilisant un PVC présentait pour sa part 50 000 éléments avec un angle de non-orthogonalité moyen et maximum environ quatre fois plus faible (2,6° et 17° respectivement), et une erreur de biais (moyenne et maximum) deux fois plus faible (0,06 et 0,42 ; Tableau 4.2). En théorie, l'erreur de non-orthogonalité pour les PVC devait être nulle par construction, mais ceci n'est vérifié que lorsque le germe de la cellule de Voronoï correspond à son centre, ce qui, en pratique, n'est pas toujours le cas, engendrant donc de (faibles) erreurs d'orthogonalité. Les PVC apparaissaient donc plus adaptés que les maillages tétraédriques pour simuler l'écoulement avec PFLOTRAN et ont donc été utilisés dans le projet (voir notamment le chapitre 9).

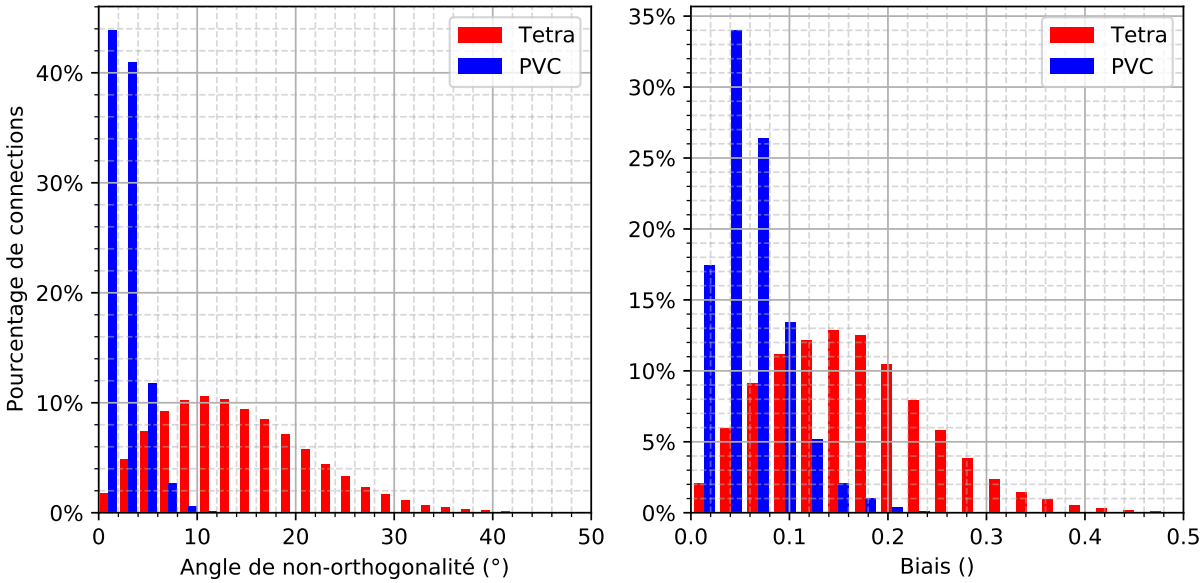


Figure 4.7 Distribution (a) des angles de non-orthogonalité et (b) de l'erreur de biais pour le maillage tétraédrique (en rouge) et le Pavage de Voronoï Centré (PVC ; en bleue)

Tableau 4.2 Comparaison du maillage tétraédrique généré avec NETGEN et du Pavage de Voronoï Centré (PVC) généré avec Vorpalite.

Maillage	Tétrahédrique	PVC
Nombre d'éléments	50 381	50 000
Nombre de connexions internes	95 973	328 441
Angle de non-orthogonalité moyen	14°	2,6°
Angle de non-orthogonalité maximum	62°	17°
Biais moyen	0,16	0,06
Biais maximum	0,82	0,42

4.3 Implémentation du procédé d'optimisation topologique

L'optimisation de la géométrie de la codisposition des roches stériles et des résidus dans les fosses remblayées par l'approche topologique a nécessité la création d'outils personnalisés pour établir et résoudre les simulations numériques et calculer la dérivée via la méthode adjointe (voir aussi section 3.4.3). L'optimisation a été réalisée de manière totalement automatisée au moyen du langage de programmation Python, qui servait d'interface entre les différentes étapes du processus. De multiples scripts ont été écrits, et mis sous la forme d'une proto-librairie (`https://github.com/MoiseRousseau/TopOpt-inpits-WRI`), ce qui avait pour avantage de favoriser le débogage, la réutilisation de morceau de code et la li-

sibilité de ces derniers. En particulier, chaque script visait à résoudre une étape spécifique du processus d'optimisation topologique (Figure 4.8) :

1. La première étape du processus d'optimisation consistait à dériver la conductivité hydraulique de chaque cellule du domaine en fonction du paramètre de densité p. La conductivité pouvait être directement calculée à partir de ce dernier, ou en utilisant une version modifiée de celui-ci, notée $\bar{p}$, après filtrage et projection. Le paramètre de densité modifié a notamment été utilisé pour imposer une contrainte de taille minimum d'inclusion de roches stériles dans les résidus (Bourdin, 2001). Le premier script Python était donc dédié au filtrage et à la projection du paramètre de densité p en $\bar{p}$, puis au calcul de la dérivée $d\bar{p}/dp$.
2. La conductivité hydraulique était ensuite calculée via un second script qui convertissait le paramètre de densité modifié $\bar{p}$ en un champ de conductivité hydraulique K, toujours en enregistrant la dérivée $dK/d\bar{p}$.
3. Par la suite, un script Python se chargeait de convertir le champ de conductivités hydrauliques en un jeu de données HDF5 (via la librairie h5py) et au format requis par PFLOTRAN. Le code PFLOTRAN était ensuite appelé pour simuler l'écoulement et retourner la pression (charge hydraulique) à chaque élément du domaine. Le même script Python lisait ensuite les sorties de PFLOTRAN, comme la charge dans le domaine, des informations sur le maillage (volumes des éléments ou propriété des faces par exemple), le Jacobien et les sensibilités du système linéaire par rapport à la pression et à la perméabilité.
4. Ces informations étaient ensuite transférées à un nouveau script dont l'objectif était de calculer la fonction à optimiser, c'est-à-dire le gradient hydraulique moyen dans les rejets, sa dérivée partielle par rapport à la charge $\partial(\nabla h)_m/\partial h$, et sa dérivée partielle par rapport au paramètre de densité modifié $\partial(\nabla h)_m/\partial\bar{p}$.
5. En parallèle, les précédentes informations (point 3) étaient aussi transférées à un script chargé de calculer la contrainte de volume et sa dérivée par rapport au paramètre de densité modifié $dV_e/d\bar{p}$.
6. Suite à l'étape 4, les sensibilités requises pour résoudre le système adjoint étaient collectées dans un nouveau script, puis le système était résolu à l'aide de la librairie SciPy.optimize (`www.scipy.org`) afin de déterminer le vecteur adjoint λ.
7. Un autre script compilait toutes les dérivées calculées par les précédents scripts ainsi que le vecteur adjoint afin de déterminer la dérivée totale du gradient moyen par rapport au paramètre de densité $d(\nabla h)_m/dp$.

8. Finalement, un dernier script recevait les informations de la contrainte de volume et de sa dérivée (étape 5), du gradient hydraulique moyen dans les rejets (étape 3), ainsi que de sa dérivée totale (étape 7) pour déterminer un nouveau champ du paramètre de densité mis à jour, ou arrêter l'optimisation si les conditions de convergence étaient remplies. La mise à jour du paramètre de densité était notamment réalisée au moyen de l'algorithme des asymptotes mobiles globalement convergent, ou *Globally-Convergent Method of Moving Assymptote* (GC-MMA) en anglais (Svanberg, 2002), implémenté dans la librairie Python nlopt (`https://github.com/stevengj/nlopt`) (Johnson, 2020).

L'enchainement des diverses étapes présentées ci-dessus était contrôlé à partir d'un script Python maître, où l'utilisateur spécifiait le paramètre de densité initial p^0 et qui permettait d'obtenir, à la fin du processus, le paramètre de densité optimisé p^{opt}.

Une attention particulière a aussi été apportée à la performance de l'orchestration du procédé d'optimisation afin d'utiliser judicieusement les ressources informatiques disponibles. Par exemple, le couplage entre les différentes étapes du procédé d'optimisation s'opérait sur des tableaux NumPy de taille fixe et mise à jour au cours des itérations, tout en tirant bénéfices de la vectorisation des opérations sur lesdits tableaux. La résolution du système adjoint, qui représente l'opération la plus coûteuse en temps de calcul avec la résolution du problème considéré, a notamment été parallélisée au moyen de la librairie SciPy, et préconditionnée avec une approche de Jacobi pour une meilleure convergence. En l'état actuel et avec les choix de logiciels et de librairies effectués, l'approche d'optimisation peut être utilisée efficacement sur des machines parallèles à mémoire partagée. Des problèmes jusqu'à un million de degrés de liberté ont notamment été résolus en moins d'une journée sur une station de travail portable (dotée d'un processeur Intel Core i7-6820HQ et 32 Go de mémoire vive).

4.4 Liste des modifications apportées au code PFLOTRAN

4.4.1 Corrections apportées au code

Des vérifications préalables du code PFLOTRAN ont été réalisées afin de valider les résultats des simulations en les comparant à un autre code (HydroGeoSphere - voir chapitre 5) et des solutions analytiques (chapitre 6). Ces vérifications (Figure 4.9a) et l'examen du code source de PFLOTRAN a révélé une erreur dans le calcul de la projection du tenseur de dispersion mécanique pour des maillages déstructurés. En effet, la dispersion transversale verticale n'était pas correctement prise en compte, ce qui entraînait que les concentrations simulées étaient indépendantes de ce paramètre. De plus, PFLOTRAN faisait l'hypothèse

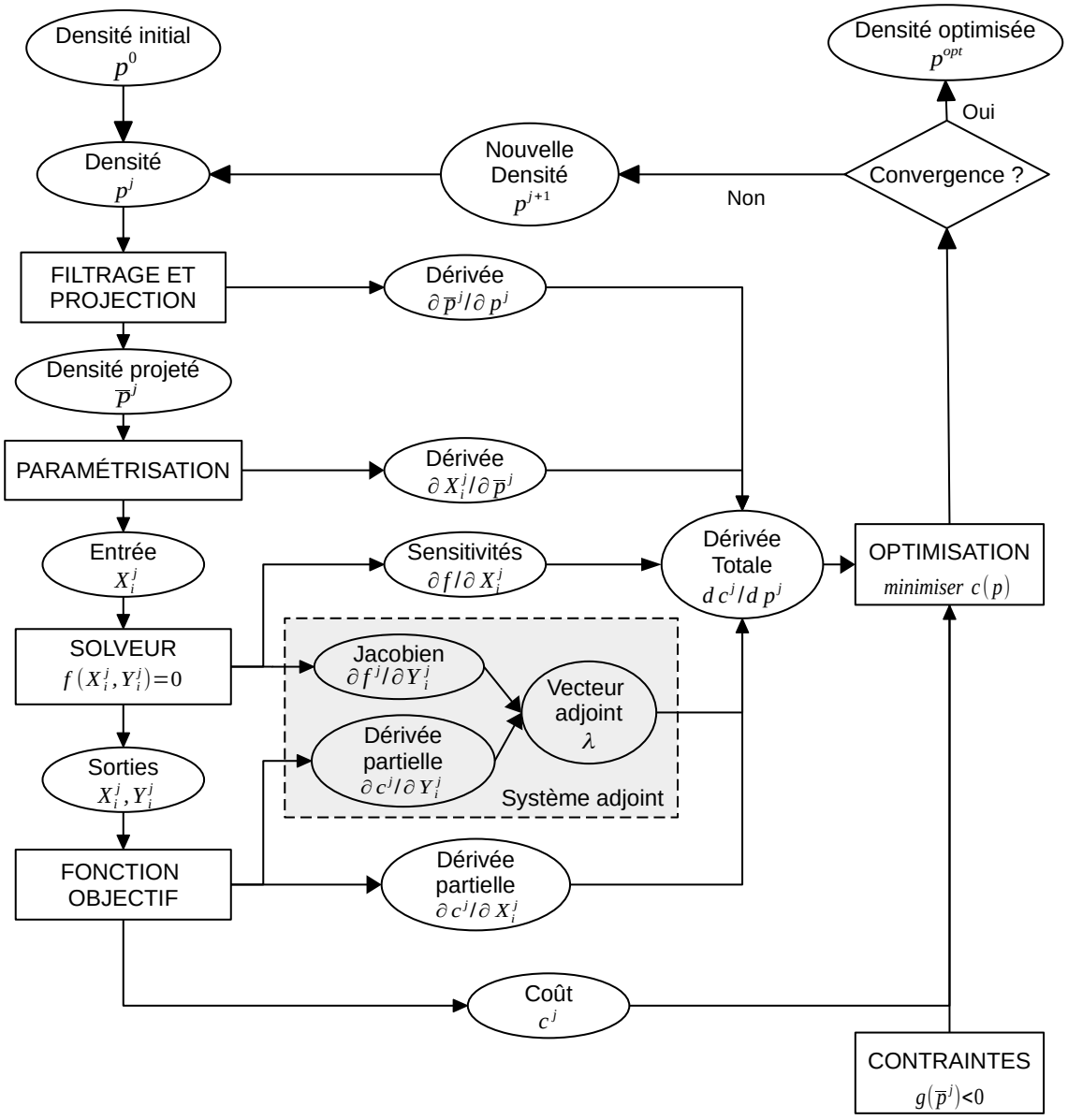


Figure 4.8 Schéma de l'implémentation de l'approche d'optimisation topologique par densité avec calcul du gradient par la méthode adjointe. Chaque boîte représente un script Python dédié qui effectue une opération, et les ellipses désignent des variables d'entrées-sorties entre ces scripts.

d'un maillage structuré pour la projection du tenseur sur les faces du maillage, ce qui conduisait à des valeurs erronées pour les faces non orientées selon les axes principaux du maillage. Cette erreur pouvait aussi être à l'origine de certaines différences relevées entre PFLOTRAN et d'autres logiciels de simulation (Hokr *et al.*, 2016). L'erreur a été corrigée en mai 2019

(voir `https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/pull-requests/144`), et a été validée par comparaison avec le code HydroGeoSphere (Figure 4.9b).

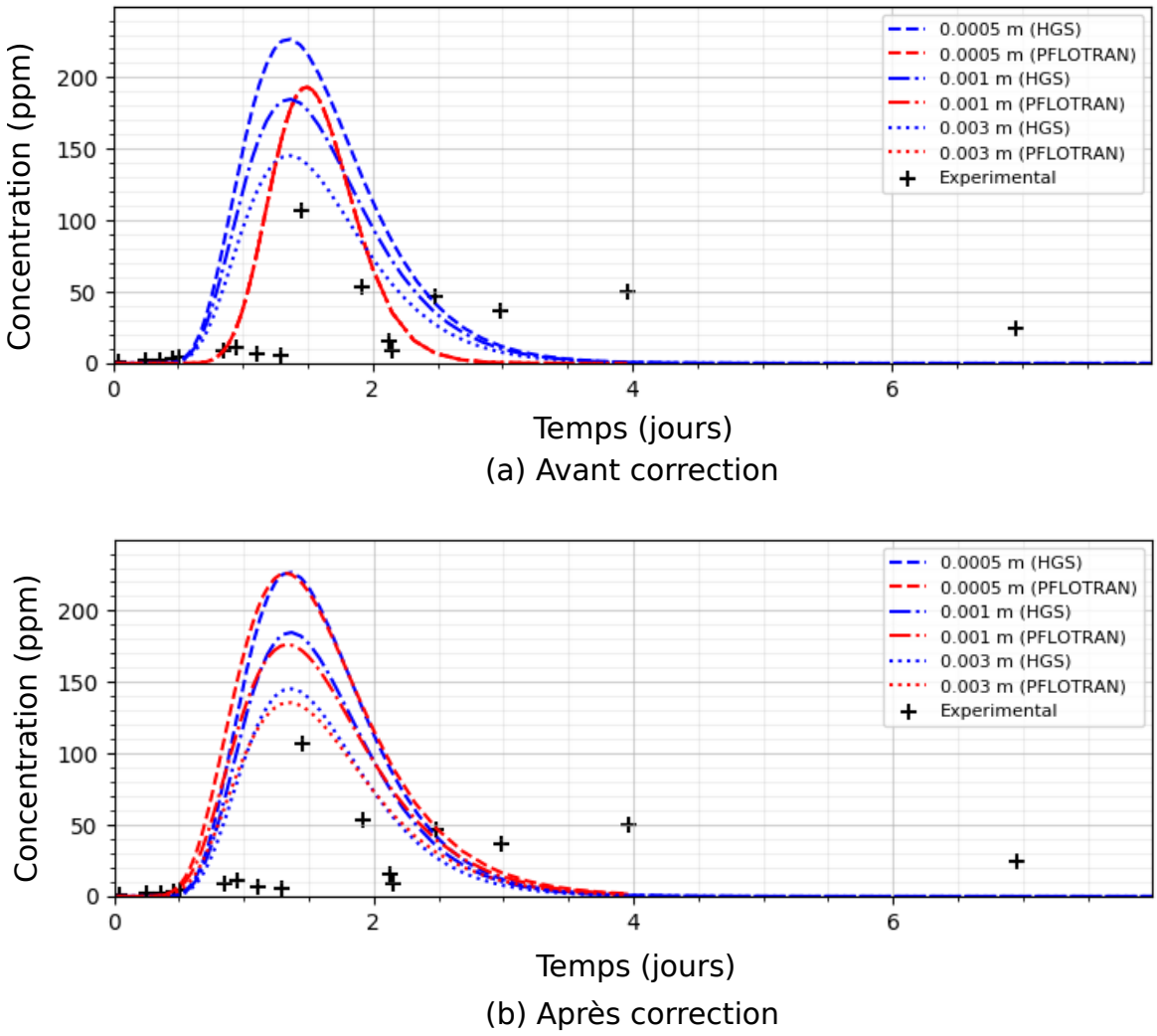


Figure 4.9 Comparaison des concentrations simulées (a) avant et (b) après correction de la projection du tenseur de dispersivité calculées avec PFLOTRAN (en rouge) et HydroGeoSphere (en bleu). L'erreur était liée à une mauvaise projection du tenseur de dispersivité aux faces du maillage et à la non-prise en compte du coefficient de dispersivité verticale. Les croix noires correspondent aux concentrations mesurées expérimentalement (voir chapitre 5 pour plus de détails).

4.4.2 Tenseur de perméabilité complet

La simulation de l'influence de la ZES sur l'écoulement en considérant l'anisotropie d'orientation des fractures conduit à la création d'un tenseur de perméabilité anisotrope avec des composantes non diagonales. Initialement, PFLOTRAN ne considérait que des tenseurs de

perméabilité anisotrope diagonaux. Par conséquent, les fonctions calculant la projection du tenseur de perméabilité sur les faces des éléments ainsi que la carte permettant d'obtenir les propriétés des matériaux (*MATERIAL_PROPERTY*) ont été étendues afin de prendre en compte les composantes non diagonales. La validation de l'implémentation a été réalisée au moyen de tests automatisés dans PFLOTRAN (voir `https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/src/master/regression_tests/default/materials/full_tensor/`), et aussi de manière plus détaillée dans le chapitre 6. L'ensemble des modifications au code source sont disponibles à la demande de fusion suivante : `https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/pull-requests/280`.

L'activation de la projection du tenseur de perméabilité complet se faisait en deux étapes. Premièrement, l'utilisateur devait spécifier à PFLOTRAN d'utiliser une projection prenant en compte un tenseur de perméabilité complet en réglant la commande *PERM_TENSOR_TO_SCALAR_MODEL* (localisé sous la carte *GRID*) sur l'option *FLOW_FULL_TENSOR*. Ensuite, l'utilisateur devait entrer les composantes non diagonales du tenseur via la commande *PERMEABILITY* de la carte *MATERIAL_PROPERTY*. Les options *ANISOTROPIC* et *FULL_TENSOR* devaient notamment être activées pour chaque matériau dont la perméabilité était anisotrope. Les valeurs des composantes pouvaient alors être soit renseignées au moyen des sous-commandes *PERMEABILITY_IJ* pour une perméabilité homogène dans le matériau considéré, soit via des jeux de données avec la carte *DATASET* pour une perméabilité hétérogène. Des exemples d'utilisation et de plus amples informations sont disponibles dans la documentation de PFLOTRAN mise à jour avec les nouvelles fonctionnalités (`http://doc-dev.pflotran.org/user_guide/user_guide.html`).

4.4.3 Calcul du flux d'eau souterraine dans les fosses remblayées

Dans ce projet de recherche, le flux d'eau souterraine entrant ou sortant des fosses remblayées devait fréquemment être calculé. Dans l'approche numérique, cela revenait à sommer le flux à travers les faces décrivant l'interface entre le roc environnant et les rejets. En pratique, PFLOTRAN permettait ce calcul en utilisant la carte *INTEGRAL_FLUX*, en définissant les faces par les points les composants et leur orientation (pour calculer les flux entrants ou sortants). Néanmoins, cette manière de sélectionner les faces ne s'appliquait pas au cas des maillages explicites. De plus, par défaut, PFLOTRAN ne permettait pas de sommer séparément les contributions des flux entrants ou sortants, impliquant que le flux total à travers toutes surfaces fermées en régime permanent et en l'absence de terme source était nul. Le calcul du flux entrant devait donc être réalisé uniquement à partir des faces où l'eau souterraine entrait dans les rejets remblayés, ce qui n'était pas connu *a priori*. Il a donc

été nécessaire de modifier le code source de la carte *INTEGRAL_FLUX* pour ajouter des options quant au calcul du flux. Une nouvelle commande *FLUXES_OPTION* a été ajoutée permettant de renseigner trois options pour le calcul du flux, à savoir :

- *SIGNED_FLUXES* qui somme tous les flux en prenant en compte l'orientation de la face et la direction de l'écoulement quel que soit leur orientation respective (par défaut),
- *POSITIVE_FLUXES_ONLY* qui somme uniquement les flux positifs calculés de la même manière que précédemment,
- et *ABSOLUTE_FLUXES_ONLY* qui somme la valeur absolue des flux, c'est à dire, sans tenir compte de l'orientation de la face.

Ainsi, les flux à travers les fosses remblayées pouvaient être calculés avec l'option *POSITIVE_FLUXES_ONLY* en considérant toutes les faces de l'interface de la fosse et du roc.

Un nouveau format d'entrée des faces a aussi été implémenté afin de simplifier l'exportation de faces depuis Salomé et de considérer les maillages au format explicite. Le nouveau format est activé à partir de la commande *CELL_IDS* dans la carte *INTEGRAL_FLUX*. Il permet de sélectionner les faces d'après les éléments qui les partagent. L'utilisateur doit spécifier une liste de doublets d'éléments pour définir la surface. Les modifications du code source sont disponibles à la demande de fusion suivante : `https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/pull-requests/267` ; et celles apportées à la documentation sous : `https://www.pflotran.org/documentation/user_guide/cards/subsurface/integral_flux_card.html`.

4.4.4 Entrée des maillages de Voronoï

Les discrétisations spatiales composées d'éléments polyédriques nécessitent obligatoirement un format de maillage explicite dans PFLOTRAN. Par défaut, l'entrée des maillages au format explicite ne pouvait se faire qu'au moyen d'un fichier ASCII. Bien que le format texte permette une lecture plus facile des informations de maillage pour l'utilisateur ou l'utilisation des logiciels de gestion de révisions, ce format de fichier occupe plus d'espace disque pour la conservation du maillage, possède de faibles performances en lecture et n'est pas parallélisable. Pour des maillages contenant plusieurs millions de connexions internes, l'opération de lecture du maillage seule pouvait parfois être plus longue que le reste de la simulation. Il a donc été décidé d'implémenter la lecture des maillages explicites sous le format de fichier HDF5 selon la structure suivante :

— *Domain/Cells/Centers* un tableau 2D de taille $(N, 3)$ contenant les coordonnées X, Y et Z des centres des éléments (nombre à virgule flottante) avec N le nombre d'éléments dans le maillage.
— *Domain/Cells/Volumes* un tableau de taille N avec le volume de chaque élément (nombre à virgule flottante).
— *Domain/Connections/Cell Ids* un tableau 2D de taille $(M, 2)$ définissant les faces à partir des indices des deux éléments la partageant (nombre entier) avec M le nombre de face dans le maillage.
— *Domain/Connections/Areas* un tableau de taille M contenant l'aire de chaque face (nombre à virgule flottante).
— et *Domain/Connections/Centers* un tableau de taille $(M, 3)$ enregistrant les coordonnées X, Y et Z du centre de chaque cellule (nombre à virgule flottante).

La structure du fichier HDF5 est détaillée dans la documentation de PFLOTRAN mise à jour (`http://doc-dev.pflotran.org/user_guide/cards/subsurface/grids/unstructured_explicit_grid.html#unstructured-explicit-grid-card`). Le code source peut être trouvé ici : `https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/pull-requests/383`.

La commande *COORDINATE* de la carte *REGION*, qui permet de sélectionner un élément à partir d'une coordonnée, a aussi été étendue pour les maillages explicites (par défaut, seuls les maillages implicites étaient supportés). Pour les maillages implicites, l'élément contenant le point de coordonnées spécifiées est sélectionné. Pour les maillages explicites, il a été choisi de sélectionner plutôt l'élément dont le centre et le plus proche du point, car la géométrie des éléments n'est pas connue à priori. Les détails de l'implémentation sont disponibles ici : `https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/pull-requests/429`.

4.4.5 Orthogonalité du maillage

Une métrique additionnelle a été ajoutée comme variable de sortie dans PFLOTRANT afin de caractériser la qualité du maillage et en complément du greffon de qualité du maillage implémenté dans Salomé (section 4.1.1). Cette métrique *K_ORTHOGONALITY_ERROR* ($E_{K,i}$) permet de prendre en compte le tenseur de perméabilité pour s'assurer que le maillage respecte la condition de K-orthogonalité (Heinemann *et al.*, 1991) (voir aussi `https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/pull-requests/335`) :

$$E_{K,i} = \frac{\sum_{f \in \partial i} \| \vec{n}_f^T \boldsymbol{K}_i - \frac{\vec{n}_f^T \boldsymbol{K}_i r_f}{\|\vec{R}_f\|^2} \vec{R}_f^T \|}{\sum_{f \in \partial i} \| \vec{n}_f^T \boldsymbol{K}_i \|} \tag{4.7}$$

où $f \in \partial i$ désigne la somme sur toutes les faces de l'élément i, et $\boldsymbol{K}_i$ le tenseur de perméabilité. Pour rappel $\vec{n}_f$ est le vecteur unitaire normal à face f et $\vec{R}_f$ le vecteur reliant les deux centres des éléments partageant la face (voir aussi section 4.1.1). L'erreur de K-orthogonalité $E_{K,i}$ est calculée pour tous les éléments du maillage et peut être visualisée au moyen du logiciel Paraview.

Aussi, par défaut, PFLOTRAN projette toujours l'aire de la face dans la direction définie par le vecteur reliant le centre des deux éléments partageant la face pour le cas des maillages implicites. Néanmoins, cette approche de projection n'est pas documentée dans la littérature, et l'aire non projetée de la face est utilisée à la fois pour l'opérateur de diffusion et pour l'opérateur de gradient (Moukalled *et al.*, 2016). Une nouvelle commande *IMPLICIT_GRID_AREA_CALCULATION* a donc été ajoutée sous la carte GRID *GRID* (`https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/pull-requests/382`) permettant à l'utilisateur de choisir de projeter ou non l'aire des connexions internes du maillage avec les options *TRUE_AREA* (non projetée) ou *PROJECTED_AREA* (projetée).

4.4.6 Sortie des informations pour l'optimisation topologique

La résolution du système adjoint utilisé pour l'optimisation de la codisposition des roches stériles et des résidus dans les fosses (section 3.4.3) nécessitait de nombreuses informations en provenance du solveur PFLOTRAN. En particulier, certaines informations définies aux faces (aires, distance entre les centres, fraction amont, perméabilité projetée par exemple) devaient être connues, en plus des sensibilités du résidu du système linéaire calculées pour la pression (c'est à dire, le Jacobien) et pour la perméabilité. Ces informations ne sont généralement pas directement disponibles et le code source de PFLOTRAN a donc été modifié pour extraire ces informations des simulations.

Sorties des informations liées aux faces

L'identification des différentes faces du maillage (connections internes et les frontières), indépendamment du format du maillage (implicite ou explicite) était nécessaire pour indexer les propriétés relatives à ces dernières. Il a été choisi de les caractériser au moyen d'un doublet représentant les deux éléments partageant la face pour les connexions internes, et par un élément et un nombre négatif pour les frontières. Cet identifiant était sauvegardé dans le fichier de sortie de PFLOTRAN sous le groupe *Domain/Connection Ids* en spécifiant l'option *PRINT_CONNECTION_IDS* sous la commande *SNAPSHOT_FILE* dans la carte *OUTPUT*.

Ensuite, le calcul des variables d'intérêts aux faces a été implémenté au moyen d'une fonction spécifique, appelée au même endroit et de la même manière dans le code source que le calcul des variables liées aux éléments. Un test permettait alors de choisir l'une ou l'autre des fonctions (sorties aux faces ou aux éléments) en fonction de la variable à enregistrer. Les nouvelles variables de sorties aux faces étaient ainsi toujours spécifiées à partir de la commande *VARIABLES* sous la carte *OUTPUT*, et étaient désignées par :

- *FACE_AREA* pour l'aide des faces.
- *FACE_PERMEABILITY* pour la perméabilité projetée sur la face.
- *FACE_NON_ORTHO_ANGLE* pour l'erreur de non-orthogonalité (c'est à dire $1 - \vec{n} \cdot \vec{r}$).
- *FACE_DISTANCE_BETWEEN_CENTER* pour la distance entre les deux centres des éléments partageant la face.
- *FACE_UPWIND_FRACTION* pour la fraction de la précédente distance dans le premier élément identifiant la face.
- *FACE_CELL_CENTER_VECTOR_X,Y,Z* pour le vecteur reliant les deux centres des éléments partageant la face (unitaire).
- *FACE_NORMAL_X,Y,Z* pour le vecteur normal à la face (unitaire).

Les précédentes informations étaient requises notamment pour calculer la fonction objectif (voir chapitre 9). La sortie des informations calculées aux faces tait finalement implémentée au format HDF5. En pratique, les informations sont enregistrées dans le même fichier de sortie de PFLOTRAN et sous la même structure que pour les informations liées aux éléments, c'est-à-dire dans un groupe *Time : XXX/Variable [unité]*.

Ces développements ne sont pas encore intégrés à la branche maître du développement de PFLOTRAN. Ils sont néanmoins disponibles dans une branche de développement en cours de fusion (`https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/pull-requests/404`).

Sortie des sensibilités

La sortie des sensibilités a nécessité la création d'un nouveau *Process Model* (PM) et de trois nouveaux modules dans le code source de PFLOTRAN pour un total d'environ 2600 lignes de code. La structure du code a été validée avec l'équipe de développeurs de PFLOTRAN. Le nouveau PM a été nommé *SENSITIVITY_ANALYSIS* et est codé dans le module *PM_Sensitivity_Analysis_class*. La sortie des sensibilités se faisait tout d'abord en activant ce dernier dans la carte *SIMULATION* et sous la commande *PROCESS_MODEL* au début du fichier d'entrée de PFLOTRAN. Plusieurs options permettent de choisir l'équation gou-

vernante pour le calcul des sensibilités. Cependant, pour le moment, seul le support pour l'équation de Richards a été ajouté via l'option *SENSITIVITY_FLOW*.

Ensuite, une nouvelle carte, nommée *SENSITIVITY_FLOW* et jumelée au nouveau PM, a été créée. L'utilisateur y spécifie notamment les options associées au calcul et à l'enregistrement des sensibilités :

- Le format de fichier de sortie via la commande *SENSITIVITY_OUTPUT_FORMAT* et les options *HDF5*, *ASCII*, *BINARY* ou *MATLAB*. Seule la première a été validée et utilisée dans ce projet de recherche.
- L'activation et le taux de compression pour les sorties au format HDF5 avec *HDF5_COMPRESSION_LEVEL*.
- Les temps pour lesquels les sensibilités devaient être enregistrées avec la commande *OUTPUT* et l'option *PERIODIC_TIMESTEP*.
- Les variables par rapport auxquelles les sensibilités doivent être calculées et enregistrées avec la commande *VARIABLES* et parmi les options *PRESSURE* et *PERMEABILITY*.

Par exemple, la carte détaillée ci-dessous enregistre les sensibilités par rapport à la pression et à la perméabilité, à tous les pas de temps et au format HDF5 :

```
SENSITIVITY_FLOW
  SENSITIVITY_OUTPUT_FORMAT HDF5
  VARIABLES
    PRESSURE
    PERMEABILITY
  /
  OUTPUT
    PERIODIC_TIMESTEP 1
  /
END
```

Le nouveau PM avec l'option *SENSITIVITY_FLOW* utilisé pour le calcul des sensibilités de l'équation de Richards a été couplé au PM de l'écoulement, c'est à dire, qu'à chaque simulation de l'écoulement, le PM *SENSITIVITY_ANALYSIS* est immédiatement appelé à sa suite. À chaque appel, le PM vérifie le pas de temps en cours afin de déterminer si la sortie est requise ou non (via l'option *PERIODIC_TIMESTEP*), et procède au calcul le cas échéant.

Le calcul des sensibilités a été codé au moyen d'un deuxième module indépendant nommé *Sensitivity_Richards_module*. PFLOTRAN incluait déjà une routine pour calculer le Jacobien du système linéaire discrétisé de l'équation de Richards, et était notamment utilisée par les algorithmes itératifs de résolution du système linéaire et par la méthode de Newton pour le système non linéaire. Elle a donc pu être utilisée telle quelle pour le calcul de la sensibilité par rapport à la pression. La structure de cette routine a été réutilisée et adaptée pour le calcul de la sensibilité par rapport à la pression.

Finalement, l'enregistrement des sensibilités a été codé dans un troisième module séparé et nommé *Sensitivity_Output_module*. Lorsque le format de sortie HDF5 est sélectionné, toutes les sensibilités sont enregistrées dans un même fichier binaire au format HDF5 sous le nom *pflotran-sensitivity-flow.h5* avec la structure suivante :

- *Mat Structure/Column Indices* et *Mat Structure/Row Indices* contient les indices des valeurs non nulles de la matrice creuse.
- *Time : XXX* contient les sensibilités calculées au temps indiqué, avec un sous-groupe par sensibilité (actuellement *Permeability []* et *Pressure []*).

La reconstruction des matrices creuses de sensibilité pouvait être réalisée se faire avec Python et sa librairie SciPy.sparse.

Le code source du nouveau PM développé, ainsi que tous ses modules sont disponibles dans la branche suivante : `https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/branch/moise/make_optimization_v2`.

Modification du système de test automatisé

Le système de test automatisé a été utilisé afin de garantir que chaque modification apportée à PFLOTRAN n'avait pas de répercussions sur d'autres sections du code. Le système de test automatisé est constitué de nombreuses courtes simulations (encore appelé test de régression) dont le résultat est comparé à un résultat standard validé. Chaque modification apportée au code doit passer ces tests de validation, mais doit aussi être accompagnée de nouveaux tests validant les modifications effectuées. Or, les deux dernières modifications du code détaillées ci-dessus (c'est-à-dire, la sortie des données aux faces et des sensibilités) ont entraîné la création de nouveaux fichiers de sortie dont la structure n'était pas prise en compte par le système de test automatisé. Le système de test automatisé a donc aussi été modifié afin de pouvoir exécuter des scripts Python après la conduite des tests, mais avant leur validation. Ces scripts Python peuvent notamment convertir les sorties non prises en compte par le

système de test vers un format supporté. Ces modifications apportées au système de test sont disponibles ici : `https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/pull-requests/389`.

CHAPITRE 5 ARTICLE 1 : SIMULATING GROUNDWATER FLOW AND SOLUTE TRANSPORT IN BACKFILLED OPEN-PITS WITH PERVIOUS SURROUND

Par Moïse Rousseau et Thomas Pabst.

Article soumis dans la revue *Canadian Geotechnical Journal*.

Abstract

Pit backfilling constitutes an alternative mine wastes management approach which has gained attention in the last years because of its numerous advantages regarding the geotechnical stability of the disposed wastes. Its environmental performance (especially contaminant transport) was also extensively studied using numerical models. However, they were carried out nearly 20 years ago when computers were significantly less powerful than today's standards, and considered thus several simplifications of the reality because of computational constrains, which limit the applicability of their prediction. The objective of this research was thus to reevaluate with nowadays tools the potential of numerical models to accurately simulate flow and solute transport near backfilled open pit. To this end, a three-dimensional numerical model was built to compare simulated flow and solute transport against measurement taken from laboratory physical experiments from the literature, and representing a backfilled pit and a pervious surround within a fractured rock. Two codes (PFLOTRAN and HydroGeoSphere) and three conceptual representations of the rock (namely the equivalent porous medium, dual porosity and discrete fracture network) were calibrated on a first independent experiment, and prediction of numerical models were then compared to flowrate and transport measured in two other experiments. Overall, results showed that high resolution numerical models were able to capture the long-term solute transport processes occurring between the pit and the environment. They have also shown that long-term solute transport could be decoupled between the pit and the rock, which thus allowed to focus on processes at the pit scale. For real case performance assessment of backfilled pit reclamation technique for which few data on the fractured rock is known, it is thus recommended to focus on long-term solute exchange in the pit rather than downgradient concentrations which could be difficult to predict.

5.1 Introduction

Mining operations generate large quantities of solid wastes, including tailings (ore processing wastes) and waste rocks (under-grade blasted rock). Management and long-term storage of these wastes represent a major challenge for the industry (Aubertin *et al.*, 2002, 2016). In particular, tailings are traditionally disposed of in *Tailings Storage Facility* (TSF) often subject to geotechnical instabilities which sometimes lead to failure (Azam et Li, 2010) with harmful consequence for the environment and the societies (Roche *et al.*, 2017). Also, tailings can contain minerals that can interact with their environment and generate mine drainage, which can be either acidic, contaminated, circumneutral, basic or saline (Nordstrom, 2015). Several methods were proposed to control mine drainage generation after mine site closure (Bussière et Guittonny, 2020) and to improve TSF geotechnical short and long-term stability (e.g. James *et al.*, 2013). New disposal and management strategies, often referred to as integrated mine waste management approaches, are also being considered to minimize geotechnical and geochemical risks during operations (Designing for Closure concept ; Aubertin *et al.*, 2016).

Pit backfilling is one of the promising alternative disposal approaches to conventional TSF (Puhalovich et Coghill, 2011; MEND, 2015). The technique has the main advantage to provide a permanent isolation of tailings with no dams required thus deleting the geotechnical instability risks, but also to stabilize pit walls and provide better site aesthetics at closure (MEND, 2015). Pit backfilling also contributes to control exchanges between potentially reactive wastes and the atmosphere or the hydrographic system, thus reducing the risk of contamination of surface ecosystems (Puhalovich et Coghill, 2011). However, tailings disposed in pits are in direct contact with the surrounding rock, and interactions between the waste and the environment are expected to occur. For example, groundwater could flow in the wastes and contributing to disperse contaminants contained in the wastes pore water into the environment (Puhalovich et Coghill, 2011; McCullough *et al.*, 2013), solubilizing heavy metal, metalloid or rare earth elements (Miller *et al.*, 2019; Tomy *et al.*, 2020; Yin *et al.*, 2021), and even contributing to *Acid Mine Drainage* (AMD) generation (Santofimia *et al.*, 2013; Villain *et al.*, 2015; Barfoud *et al.*, 2019). Interactions and exchanges between the backfilled wastes and the groundwater should therefore be controlled to avoid environmental risks.

Several technics exist to control solute exchange between mines wastes and groundwater (Misfeldt *et al.*, 1999; MEND, 2015). The pervious surround method is such a technique (Matich et Tao, 1986; Ben Belfadhel, 2000), and relies on the diversion of groundwater streamlines from the reactive wastes by the creation of preferential flow paths made of permeable material

placed along the pit walls. The pervious surround effectiveness to divert groundwater from backfilled wastes was addressed in several studies using analytical solutions in two dimensions, numerical simulations in two and three dimensions, and considering various representations of the fractured rock around the pit (Misfeldt *et al.*, 1999; Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Thériault, 2004; Lange et Van Geel, 2011; Strack, 2017; Kassimov et Obnosov, 2018; Rousseau et Pabst, 2018). These studies mainly showed that the pervious surround is an effective technique that could reduce groundwater flow in the backfilled tailings by more than 90%. Results also suggested that the advective solute transport from the pit to the environment was significantly decreased, which results in an increase of the retention time of a contaminant in the pit.

Numerical simulation is a key tool to assess the performance of mine reclamation techniques before large-scale application in the field (Misfeldt *et al.*, 1999; Moldovan *et al.*, 2008; McDonald et Lane, 2010; Su *et al.*, 2013). Accurate simulations of flow and transport near backfilled pits is therefore required to optimize the pervious surround technique and develop its use in practice. Such models require three-dimensional simulations with a fine discretization of the numerical model, especially in the pervious surround (Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Rousseau et Pabst, 2018). However, for various reasons (and especially computational limitations), previous studies modeling the effectiveness of the pervious surround technique used several simplifications (e.g. two-dimensional models and low mesh resolution). These simplifications induce some significant limitation, and did not allow their verification by laboratory-sized physical model (West, 2001; Lange, 2003), or the extrapolation to field scale application (West *et al.*, 2003; Thériault, 2004; Moldovan *et al.*, 2008).

Such simplifications were, however, necessary, as most significant contributions to the field were indeed carried out about 20 years ago, when computers were significantly less powerful than today's standard. In fact, today average computing power of the TOP500 supercomputers are nearly 2500 times more powerful than those back in 2004 when most of the pervious surround numerical simulations were carried out (TOP500, 2021). Therefore, the objective of this research is to reevaluate with nowadays tools the potential of numerical models to accurately simulate flow and solute transport near backfilled open pit. To this end, the present study aimed to predict the solute concentration measured in several experiments conducted in physical models representing a backfilled pit with a pervious surround and embedded in an orthogonal fractured rock (Lange, 2003; Lange et Van Geel, 2011). Three common conceptual models to represent the orthogonal fractures network of the physical model were also compared, namely the *Equivalent Porous Media* (EPM), the *Dual Porosity* (DP) and the DFN models (Berkowitz, 2002). The following sections first summarize the physical model and the laboratory experiments carried out (Lange, 2003; Lange et Van Geel, 2011), then detail the

numerical models and the calibration strategy used in this study, and finally compare the ability of numerical models to assess flow and solute transport in the context of backfilled open pit by comparing measured and simulated solute concentrations.

5.2 Methodology

5.2.1 Laboratory physical model (Lange, 2003; Lange et Van Geel, 2011)

General setup

Experimental data were obtained from tracer tests conducted in laboratory scale physical models representing a fractured rock and a cylindrical pit backfilled with mine tailings (Lange, 2003; Lange et Van Geel, 2011). Three tracer tests were carried out in the physical model. The first was conducted during the construction of the physical model (i.e. without a pit) to assess the properties of the fractured rock, while the two others were conducted with the full model to assess solute transport from backfilled pit to the environment with two different pervious surrounds.

The physical model consisted of a steel casement of $x = 2.3$ m long, $y = 1.45$ m large and $z = 0.72$ m deep filled with concrete blocks of $(x, y, z) = 0.19 \times 0.09 \times 0.058$ m representing the rock with its orthogonal fractures network. The concrete blocks were characterized by a very small hydraulic conductivity, and were considered impervious. Diffusion coefficient in the block was estimated around 4×10^{-12} m^2/s with a mean porosity of 0.05. Block interstices representing the fractures were filled with a sand of 0.3 mm mean grain size diameter and 1×10^{-5} m/s hydraulic conductivity to maintain an aperture of approximately 2 mm between the blocks. A total of 11×14×12 fractures were formed. A cylindrical hole centered at $x = 0.675$ m and $y = 0$ m (i.e. along the centerline of the model) and of 0.91 m in diameter and 0.405 m in depth was dug in the fractured rock to represent the pit in the physical model.

A 0.025 m wide pervious surround was installed at the side and at the bottom of the pit, and made of either sand or gravel material depending of the experiment conducted and respectively of 1×10^{-4} m/s and 6×10^{-2} m/s hydraulic conductivity and porosity of 0.35 in both cases. The rest of the pit was filled with a sandy silt with 1×10^{-7} m/s hydraulic conductivity and 0.4 porosity representing the backfilled tailings. A solid steel drum of 0.76 m diameter and 0.405 m depth was placed at the center of the pit to reduce the mass of sandy silt needed (see below for a sketch of the model).

A hydraulic gradient was applied in the length (x) direction using of two tanks placed at each side of the model.

Calibration tracer tests

The first tracer test was carried out during the construction of the model after four layers of concrete blocks were placed in the steel casement. The objective of this test was to assess the equivalent properties of the fractured rock represented by the concrete blocks and the fractures. In this experiment, 3 mg of fluorescein dye at a concentration of 1 g/L was injected during a short period at the start of the experiment in an injection piezometer I, located 0.23 m from the left border of the physical model, 0.18 cm from the bottom, and at the centerline of the model ($\{x, y, z\} = \{0.23, 0, 0.18\}$; Figure 5.1). A gradient of 0.004 was imposed through the model, which corresponded to a 1 cm head difference between the model borders. Fluorescein transport was monitored using 6 piezometers (piezometers 1, 2, 3, 4, 5 and 8) installed throughout the model (Figure 5.1) and for a period of 20 days.

Full model tracer tests

The two other tracer experiments were conducted with the full physical model with either the sand or the gravel pervious surrounds (Figure 5.2). The objective of these tests was to assess the influence of the permeability of the pervious surround on the solute transport from the backfilled pit to the surrounding rock. In both experiments (sand and gravel experiments), the sandy silt (representing the backfilled wastes) between the solid steel drum and the pervious surround (orange area in Figure 5.2, also see general description of the setup above) was mixed with fluorescein dye and water to obtain a homogeneous initial concentration of 12 300 ppb in the entire backfilled materials. A total of 24 piezometers were installed in the pervious surround and in the fractured rock (black squares in Figure 5.2), and from which water was regularly sampled and the fluorescein concentration analyzed. More specifically, 10 piezometers were located in the rock and along the centerline of the model (piezometers 1 to 5 and piezometers 10 to 12), three were placed at some distance from the centerline (piezometers 6, 7 and 8), 2 were close to the pit (14 and 15) and nine were installed in the pervious surround (piezometers 16 to 20a). Note that for convenience, the names of the piezometers are the same as in the original publication (Lange, 2003). Sand and gravel experiments lasted respectively 40 days and 28 days. A hydraulic gradient of 0.004 was applied in the length direction between 0 and 24 days (sand experiment) and between 0 and 16 days (gravel experiment). It was afterward doubled (0.009) until the end on the experiments.

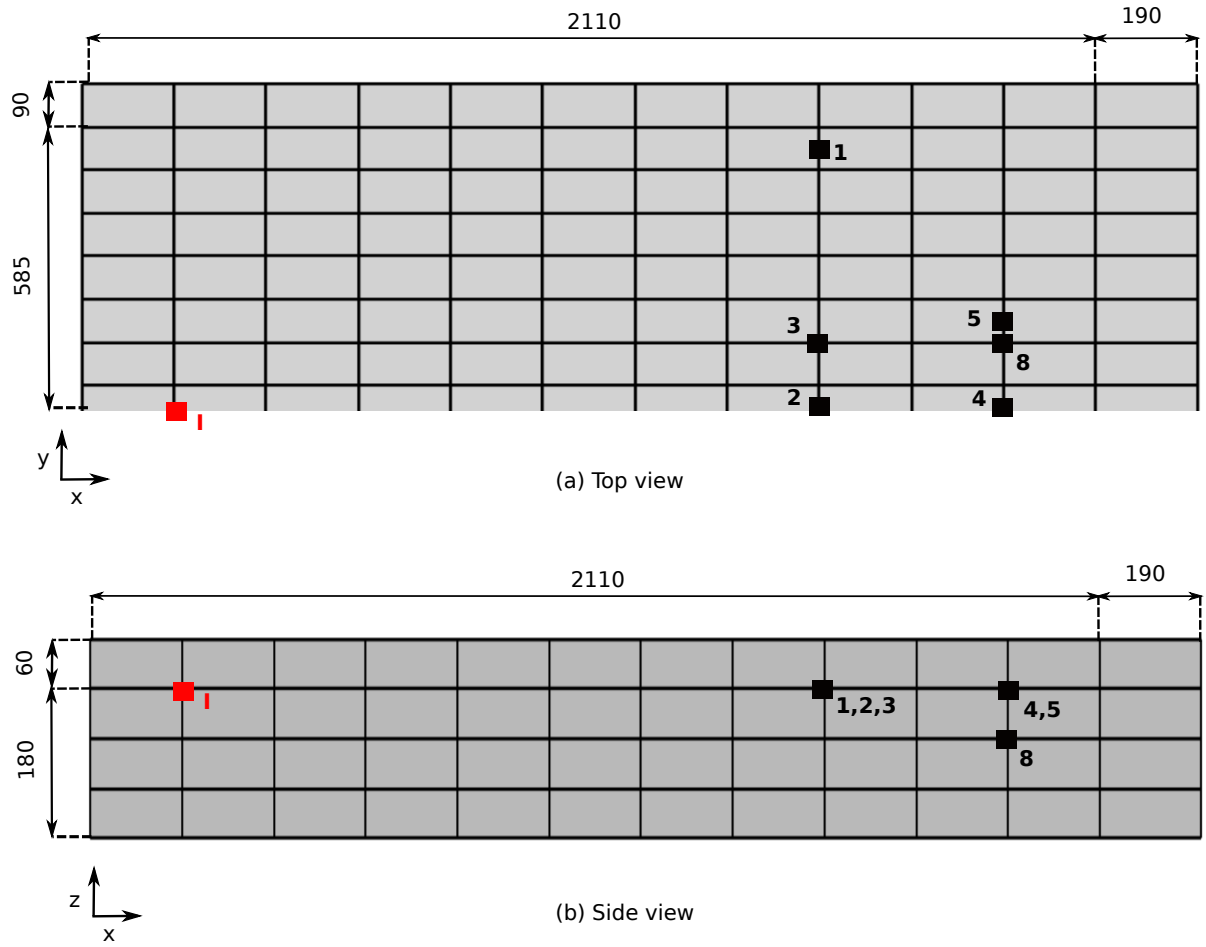


Figure 5.1 Experimental setup for the calibration tracer test seen from the top (a) and from the side (b). Gray color represents the concrete blocks between the fractures (black lines). Black and red squares show respectively the piezometer locations (1 to 5 and 8) and the tracer injection point (I).

5.2.2 Approaches for simulating fractured rock

Three commonly used conceptual models for representing flow and solute transport were considered in this study to model the fractured rock, namely, the EPM, DP and DFN approaches. These three conceptual models and their assumptions are described in detail below, and their influence on the solute transport prediction was compared in this study.

First, the EPM model considers rock and fractures as a unique porous medium where properties (such as hydraulic conductivity, porosity and transport properties) are averaged in a *Representative Elementary Volume* (REV) which exhibit properties that are independent of its size, shape, and location (Bear, 1993). This approach is often valid for dense networks of highly interconnected fractures similar to those considered in this study (Berkowitz, 2002).

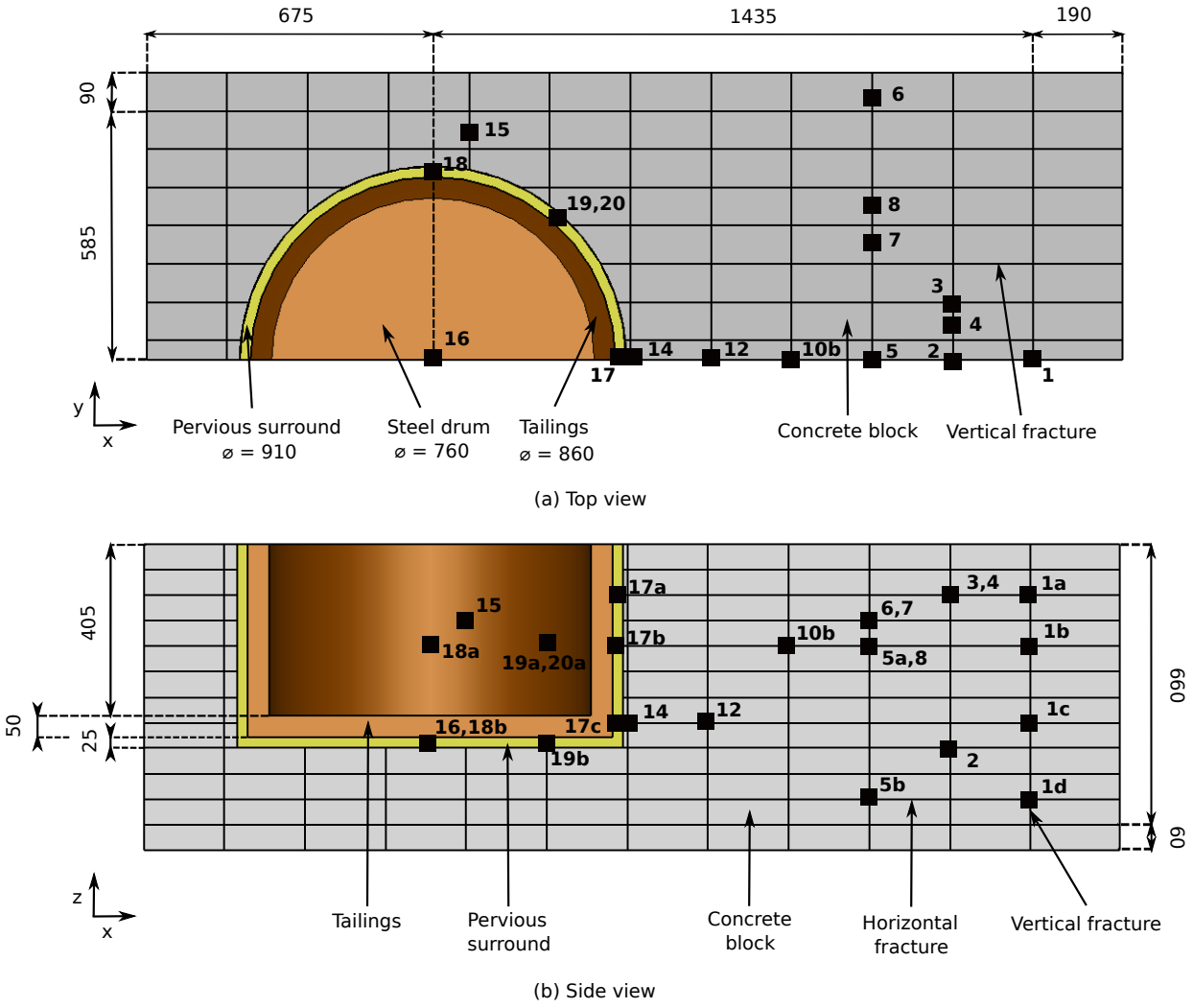


Figure 5.2 Experimental setup of the full physical model where solute transport from the pit to the fractured rock was simulated. Gray color represents the concrete blocks between the fractures (black lines), the yellow area the pervious surround and the orange one the tailings (sandy silt) which were mixed with tracer to conduct transport simulation. A steel drum was placed in the center of the pit to reduce the use of sandy silt in the physical model. Black squares show the piezometer locations.

Groundwater flow in the EPM model is simulated using the Darcy equation, and advection and dispersion mechanism are allowed for solute transport. The EPM model was successfully used to simulate regional flow and solute transport in karst aquifer (Scanlon *et al.*, 2003; Ghasemizadeh *et al.*, 2015), regional flow in fractured rock at an abandoned mine site (Garzonio *et al.*, 2014; Tomiyama *et al.*, 2020), or flow and transport in deep crystalline rock (Sykes *et al.*, 2009; Trinchero *et al.*, 2016, 2017).

Dual porosity models are similar to EPM models, but also consider another continuum superimposed to the first one to simulate the roles and interactions between fractures and the matrix (Berkowitz, 2002). The first continuum, or mobile continuum, represents the connected network of fractures, in which groundwater flow and solute transport by diffusion, dispersion and advection is allowed. The second continuum, or immobile continuum, aims to represent the unconnected fractures and the rock matrix, where only mass transport (either water or solute) by molecular diffusion is considered. In the present study, since the whole model was considered saturated, the DP models accounted only for tracer storage in the matrix and matrix-fracture interaction using the classical first-order theory (Sudicky, 1990) :

$$\Omega_{imm} = \alpha_{imm}(C - C_{imm}) \tag{5.1}$$

Where Ω_{imm} is the solute mass exchange rate between the immobile and mobile continuum, α_{imm} the first order mass exchange coefficient, and C C_{imm} the concentration in the mobile and immobile continuum respectively. DP models have been used in many engineering applications, such as geothermal energy production and CO_2 geological sequestration (March *et al.*, 2018; Tao *et al.*, 2019) and to simulate transport in fractured media (Rotter *et al.*, 2011; Abdelaziz et Zambrano-Bigiarini, 2014; Reiche *et al.*, 2016).

Finally, DFN models explicitly simulate flow and transport in the fractures modeled as two-dimensional objects and considering head and solute concentration are uniform across the fracture width. Flow and transport in the fractures are still modeled using Darcy's law and considering the advective and dispersive mechanism, but restricted to two dimensions in the fracture plane. Flow and solute transport can also take place at the same time in the concrete block modeled with the EPM approach. Such DFN models have been extensively used to simulate contaminant transport in nuclear waste disposal (Tsang *et al.*, 2015). They were also used to simulate flow, transport and geochemical reaction in fractured aquifer (Klint *et al.*, 2004; Chapman *et al.*, 2013; Makedonska *et al.*, 2018; Normani et Sykes, 2018; Wu *et al.*, 2019; Nagare *et al.*, 2019). In this study, fractures were approximated as highly conductive planes characterized by a permeability, a width and a porosity. This approach allows to simulate the water flow and the transport of tracer at the same time, while the classical parallel plate model cannot (Tsang, 1992).

5.2.3 Numerical simulation of the tracer tests

Numerical approach

The *Computer Aided Design* (CAD) software Salomé (Ribes et Caremoli, 2007) was used in this study as a pre- and post-processor to generate analytical CAD models and meshes and to visualize results. The HydroGeoSphere software (revision 1982 from December 2018), a proprietary control volume finite element code (https://www.aquanty.com/) was used to simulate flow and transport using the EPM, DP and DFN approaches. Also, the open-source finite volume code PFLOTRAN in its version 3.0 (Hammond *et al.*, 2012) was used to simulate flow and solute transport using the EPM approach and to cross-validate the simulation results obtained with HydroGeoSphere.

In both codes, flow was modeled using Darcy's law and solute transport was simulated according the classical advection-dispersion equation (Bear, 1993) :

$$n\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla(n\vec{v}C) = \nabla(n\boldsymbol{D}\nabla C) + Q_c \tag{5.2}$$

with n the equivalent porous medium or fracture porosity, $\vec{v} = K\nabla h$ the Darcy velocity with hydraulic conductivity K and head h, $\boldsymbol{D}$ the effective diffusion coefficient accounting for diffusion and dispersion mechanism and Q_c representing source-sink terms (for example the exchange coefficient in the DP model Ω_{imm} or tracer injection in the calibration tracer test).

Calibration tracer test was simulated with PFLOTRAN and HydroGeoSphere using a three-dimensional structured discretization composed of 0.01 m wide hexahedrons, for a total of almost 400 000 volumes/elements. Injection of the 3 mg of fluorescein dye solution at 1 g/L concentration was simulated as a 0.3 mL/s constant flux of water during 10 seconds at the very start of the simulation. The system was assumed fully saturated at all time. Constant head boundary conditions were applied at the left and right boundaries of the numerical domain ($x = 0$ and $x = 2.3$ m) to reproduce experimental setup (also see test description above). Background concentration in the model was set to 0.1 ppb (i.e. negligible). Right boundary, where water exited the numerical model was assigned a zero-gradient transport condition in both codes to allow for free exit of the tracer.

The full model was discretized using unstructured mesh in the (Oxy) plane and structured in the z direction. The mesh was composed of 3.5 million mixed elements (hexahedrons and prisms) for PFLOTRAN, with 1.2 million radially oriented elements 0.25 mm wide in the pervious surround, 250 000 in the tailings and 1.8 million in the rock. HydroGeoSphere

used a different mesh which was composed of nearly 9 million prisms and 4.5 million nodes. 4.5 million of these prisms were located in the pervious surround, 1 million in the tailings and 3.5 million in the rock. Prisms were approximately 1.2 mm wide in the pervious surround, giving approximately 20 to 25 nodes over its width thus respecting the minimum discretization size (Salama *et al.*, 2002).

For both the sand and the gravel pervious surround experiments, the tailings and the pervious surround were modeled as single continuum porous mediums and their hydraulic conductivity and porosity were considered isotropic, homogeneous and equal to their experimentally measured value (see above). An initial tracer concentration of 3.7×10^{-5} mol/L was simulated in the sandy silt in the pit, corresponding to the 12.3 mg/L (i.e. 12300 ppb) of fluorescein dye. A unique dispersivities triplet (longitudinal α_L, transverse horizontal α_T^H, and transverse vertical α_T^V) for both the gravel and the sand pervious surrounds and for the backfilled tailings was considered, and dispersivities were determined based on their size in the physical model (Schulze-Makuch, 2005), i.e. respectively 0.005 m, 0.001 m and 0.001 m. Simulations of the full-model tracer tests were also conducted in fully saturated conditions.

Prediction performance of these numerical models was afterward tested considering a two-step approach including a calibration step to determine the properties of the different fractured rock representation (see above), and a verification step where predicted concentrations were compared to measured ones by Lange (2003).

Fractured rock models calibration

The equivalent flow and transport properties of the fractured rock models (using either EPM, DP and DFN approaches) were calibrated using the experimental calibration tracer test results (see above). Fractured rock (equivalent) properties were determined based on the global flowrate measured in the physical model and the tracer concentration profiles obtained at the different piezometers (Lange, 2003). Models parameters (described below) were adjusted iteratively to fit the experimental concentration measured in the piezometers.

A total of five parameters were fitted in the EPM model, including the hydraulic conductivity, the porosity and the three dispersivity coefficients (longitudinal, and transverse horizontal and vertical). Hydraulic conductivity and porosity were estimated using the flowrate through the model, and the peak concentration time measured in piezometer 2 (see Figure 5.1), while the dispersivities were adjusted to match as precisely as possible the concentration variations measured in the piezometers. DP model parameters were the same as in the EPM model, but also included an immobile porosity characterizing the quantity of tracer stored in the matrix, and a solute exchange coefficient to characterize the interaction between the immobile conti-

nuum (matrix) and the mobile continuum (fractures). These two parameters were adjusted to match the decrease of the concentration after the peak. In total, seven parameters were fitted in the DP model. Lastly, the DFN model was adjusted by fitting six parameters : the concrete block porosity, the fracture hydraulic conductivity, aperture, porosity and longitudinal and transverse dispersivities. Concrete blocks were considered impervious in the DFN models and therefore characterized by a very small hydraulic conductivity of 1×10^{-10} m/s.

Verification

The calibrated models were then tested by simulating the full model tracer tests (with a gravel and a sand pervious surround) and comparing the flowrate and concentration predicted with the measurements obtained in the laboratory experiments conducted by Lange (2003). The fractured rock properties calibrated above were directly extrapolated to the full-model experiment without any modifications, at the difference of original study for which some model parameters (longitudinal and transverse dispersivity) were adjusted to fit measured data (Lange, 2003) Therefore, the concentration simulated in the full-model experiments were predicted as it can be done when assessing field scale performance of pit backfilling. Based on the results of this prediction, the relevance of numerical models to simulate flow and transport near backfilled pit was concluded.

5.3 Results

5.3.1 Model calibration

Experimental data (Lange, 2003)

Measured concentration curves (black cross in Figure 5.3) showed similar trends in all piezometers : concentrations were initially zero, and quickly increased when the tracer passed the piezometer. The arrival time in each piezometer defined as the time between the beginning of the tests (i.e. tracer injection) and the increase of concentration varied depending on the distance to the injection well, but were usually shorter than 12 hours. The concentration peak was reached after around 1.25 days for piezometers located in the same fracture than the injection point ($z = 0.18$ m, i.e. piezometers 1 to 5) and around 1.5 days for piezometer 8 ($z = 0.12$ m), in the fracture below. Amplitude of the peak also depended on the piezometer location. For example, maximum concentration in piezometer 2 (located in the center of the physical model) was 370 ppb while it did not exceed 10 ppb in piezometer 1 (located on the side of the model ; Figures 5.1 and 5.3a). After reaching a peak, concentrations decreased un-

til a residual concentration was reached. Decrease time seemed to be relatively similar for all piezometers and lasted around 1 day. The residual concentrations were never exactly zero but were around 25 to 50 ppb after 8 days of experiment for piezometers close to the centerline (2 to 8). This concentration represented up to 25% of the peak concentration (piezometer 3, 4, 5 and 8). Measurements were relatively noisy at piezometers 5 and 8, resulting in quick variations of the fluorescein concentrations.

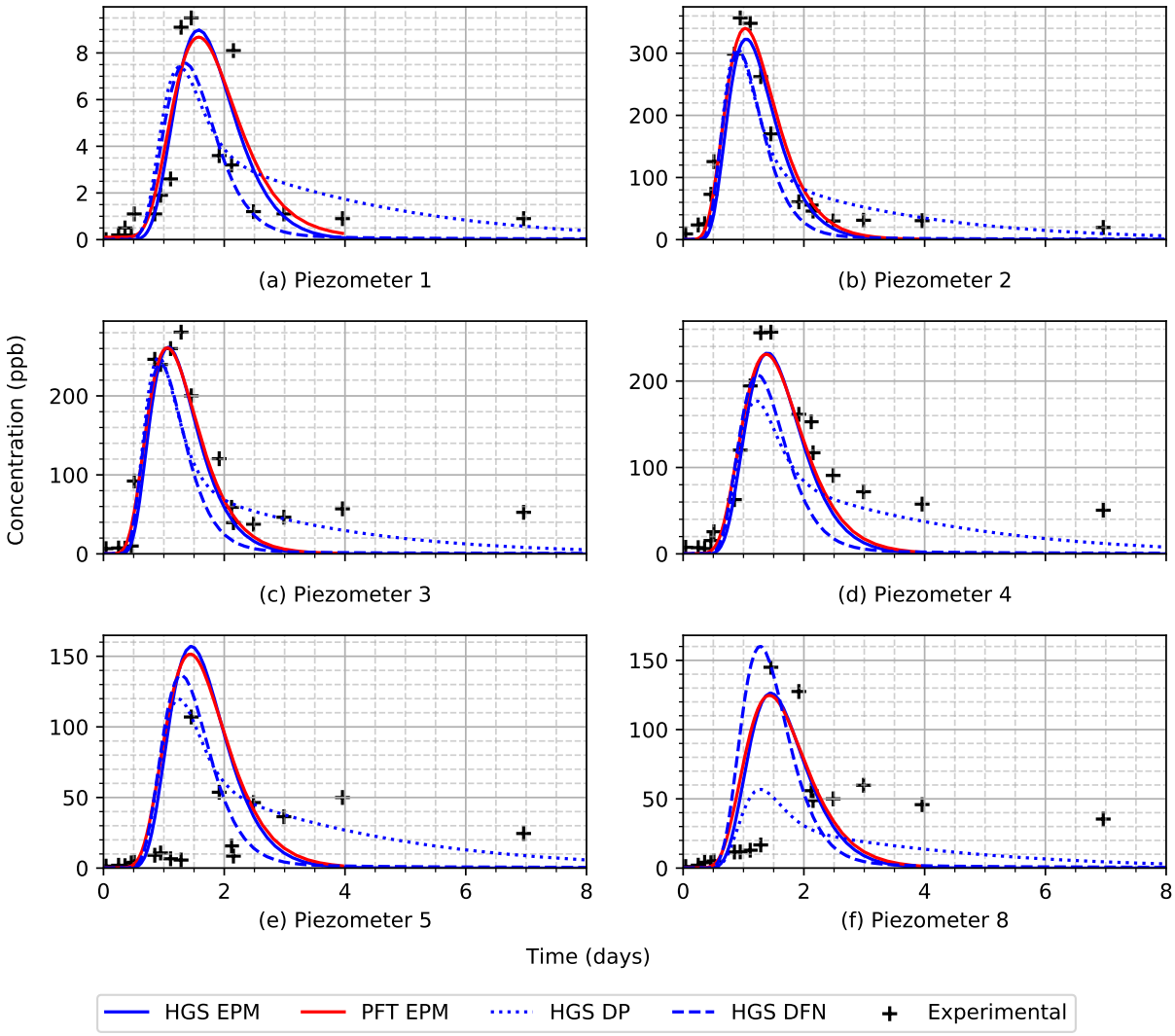


Figure 5.3 Measured (Lange, 2003) and simulated (this study) tracer concentrations in different piezometers for different models (DFN : Discrete Fracture Network ; DP : Dual Porosity ; EPM : Equivalent Porous Medium) and with two numerical codes (HGS : HydroGeoSphere and PFT : PFLOTRAN).

EPM model

The calibrated hydraulic conductivity, equivalent porosity and dispersivity triplet of the EPM model were respectively 2.7×10^{-4} m/s, 0.095 and $0.09\times0.015\times0.002$ m. The simulated flowrate was around 23 mL/min, which was close yet slightly lower than the measured flowrate during the physical experiment (between 24 and 28 mL/min – (Lange, 2003)). The simulated concentrations matched measurement fairly well, especially the concentration increase, peak and peak time (Figure 5.3). Differences between simulated and measured peak concentrations were usually smaller than 10%, except for piezometer 5 where simulated concentrations overestimated laboratory measured by approximately 50%. Tracer arrival times were also similar to those measured in all piezometers, with a difference never exceeding 3 hours (i.e. less than 10% of the peak time). However, the residual concentration simulated by the EPM model reached 0 ppb after 4 days of experiment while measured concentrations remained between 1 and 60 ppb until the end of the experiment. Modifying the model parameters to better match the measured residual concentrations resulted in a less accurate modeling of the peak concentration and times, indicating that another phenomenon was occurring in the physical model that the EPM model was not able to catch.

PFLOTRAN and HydroGeoSphere simulation results (red and blue plain curve in Figure 5.3) showed good agreements, with a maximum concentration difference between the two codes of less than 10% of the peak concentration at all times. These slight differences were explained by the different timesteps used in both codes (PFLOTRAN has its own automatic time stepping), and by the fact that the injection point and the piezometers in PFLOTRAN were not exactly located at the same place as in HydroGeoSphere (PFLOTRAN calculates concentrations at cell centers while HydroGeoSphere calculates concentrations at the nodes).

DP model

The fitted hydraulic conductivity in the DP model was the same as that in the EPM model (2.7×10^{-4} m/s), which was expected since both models are very similar except for solute transport. Calibrated mobile porosity was 0.082, i.e. smaller than in the EPM model and the adjusted dispersivity triplet was $0.07\times0.016\times0.0005$ m. Fitted immobile porosity was approximately 0.10, which was more than 25% greater than the measured concrete block porosity (between 0.065 and 0.08 ; (Lange, 2003)), and calibrated mass exchange coefficient was around 8×10^{-7} s^{-1}. Calibrated DP model matched relatively well the slow decrease of the concentration and the residual concentration observed in piezometers located in the same fracture than the injection point (piezometers 1 to 5 ; Figure 5.3). However, the simulated peak concentrations were approximately 5 to 30% lower than those measured, and the peak

times were nearly 2 to 3 hours (i.e. 10%) too early in the same piezometers. Moreover, simulated concentrations for piezometer 8 (located in the fracture directly below the injection point, Figure 5.1) were underestimated by 60%. An increase of the vertical dispersivity would have contributed to improve the simulation of concentration at piezometer 8, but to the detriment of the other piezometers. This might indicate that a too large amount of tracer had been stored in the matrix to match the residual concentration, thus causing the discrepancy observed between calibrated and measured peak concentration. This hypothesis was verified during the simulation of the full-tracer experiments (see below).

DFN model

Calibrated fracture aperture and hydraulic conductivity were 5 mm and 2.0×10^{-3} m/s respectively, and the flowrate simulated by the DFN model was around 22 mL/min, which was relatively close to the experimental results (between 24 and 28 mL/min, (Lange, 2003)). Calibrated fracture porosity was set to 0.45 which allowed to match the peak concentration time relatively well, and the dispersivity doublet and concrete block porosity were adjusted to 0.08 m, 0.023 m and to 0.1. Simulated concentrations overall matched fairly well the measurements and were similar to those obtained with the EPM model. However, peak concentrations and peak times were generally underestimated by 20% in most of the piezometers, while the slow decrease of concentration after the peak was not well simulated by the DFN model (similarly to the EPM model). Values of the fracture aperture and hydraulic conductivity were respectively twice as large and two orders of magnitudes greater than the design value in the experiment. Such difference may be explained by the relatively large mean grain size of the sand placed in the fractures compared to the fracture size, which may not allow to define a REV at this scale, thus inducing large variability in the sand permeability.

5.3.2 Model verification : sand pervious surround

In this section and for concision, results were presented for only 17 of the 25 piezometers installed in the models (see Figure 5.4), sometimes because no measured concentrations were reported (piezometer 1a, 4, 7, 17b and 20a), or because some piezometer showed unrealistic concentrations regarding the problem studied (piezometer 5a, 5b and 10b). For example, concentration measured at piezometers 5a and 5b were non-consistent as concentrations in piezometer 5a (maximum concentration 100 ppb) were much lower than 5b (maximum concentration 400 ppb), despite being located at lower depth and closer to the backfilled pit. Also, piezometer 10b was located closer to the pit, but showed a peak concentration lower

than those in piezometer 1b located further, and a peak time greater than piezometer 1c located even further.

Experimental data (Lange, 2003)

Most of the piezometers showed similar measured concentration curves (black cross in Figure 5.4) : concentrations were initially zero, then increased quickly when the tracer passes the piezometer and decreased slowly toward zero concentration again. Peak concentration and peak time varied a lot depending on the piezometers relative position to the backfilled pit. For the piezometers located farther away from the tailings sources, peak concentrations were generally smaller and tended to decrease with the distance from the pit (12 and 1c), from the centerline (5a and 7 after 24 days, and 6 and 8) and with the depth (1a to 1d). For example, peak concentration at piezometer 6 (which was located approximately 60 cm away from the centerline) was 10 ppb, while concentration at piezometer 18b (located in the pervious surround) exceeded 4000 ppb at its maximum. Peak times were typically under 2 days for piezometers located in or close to the pervious surround (piezometers from 12 to 19b), but over 2 days and up to 7 days for piezometers located outside (piezometers 1b to 8).

Simulated flowrate

Simulated flowrates in the EPM (simulated with both PFLOTRAN and HydroGeoSphere) and the DP models were equal, with 26.9 and 53.8 mL/min before and after the gradient change, respectively. The flowrates simulated with the DFN model were somewhat smaller than with the other models, and around 21.4 and 42.8 mL/min, before and after the gradient change, respectively. Simulated flowrates were therefore approximately two times smaller than the measured flowrate before gradient change for all models. However, flowrates after the gradient change were much more accurately simulated by the EPM and DP models, yet still 20% lower with the DFN model (experimentally measured values were 49 mL/min and 54 mL/min before and after the gradient change on average ; Lange, 2003). The discrepancy between simulated and measured flowrates before the gradient change at day 24 could be explained by the inaccuracy of the gradient measurements in the full physical model. Indeed, as explained by Lange (2003) in the original paper, applying a 1 cm head difference in such a large setup was challenging.

Simulated concentration in the pervious surround

Simulated concentrations for piezometer located in the pervious surround were characterized by a short arrival time and elevated tracer concentrations, similar to those measured in the experiment. However, peak concentrations in the pervious surround varied a lot, depending on the position of the piezometer. For example, simulated concentrations in piezometer 17a (located on the side of the pervious surround) reached almost 6000 ppb, while piezometer 19b (located at the bottom of the pervious surround) did not exceed 400 ppb. Because of this large variability, it was difficult to precisely predict the measured concentrations in these piezometers. Concentrations were underestimated by up to one order of magnitude (300 vs. 2500 ppb in piezometer 18a) or overestimated by a factor 6 (1600 vs. 250 ppb at piezometers 16), and peak time could be sometimes overestimated by one order of magnitude (for example, it was 10 days late in piezometer 17a). Despite these discrepancies, models simulated well the variations of tracer concentrations in 2 of the 7 piezometers located in the pervious surround (17c and 19a), for which the simulated and measured peak concentration and arrival time differed by less than 20%, and concentrations remained close ($< 30\%$ difference) at all times. The reasons of the large variation between the measured and simulated concentration are discussed more in detail in the discussion section below.

Intermodel comparison of the predicted concentration showed that the concentrations simulated by the different models (EPM, DP and DFN) were similar for most of the piezometers located in the pervious surround. Peak concentrations predicted by the DFN model tended to be slightly overestimated by up to 50% compared to EPM and DP models (piezometer 16 for example). Peak time simulated by the DFN model was also up to two times late compared to the other models. The concentrations predicted by the EPM and the DP models were very similar ($< 5\%$ difference at all times) for 4 of the 7 piezometers located in the pervious surround (17a, 18a, 18b and 19a), and relatively close ($< 20\%$ difference) in the 3 others (16, 17c and 19b). In other words, considering a second porosity in the rock did not significantly affect the tracer concentrations in the pervious surround. In general, PFLOTRAN and HydroGeoSphere simulated concentrations were similar in 3 of the 7 piezometers in the pervious surround (piezometers 17a, 17c and 18b). At other piezometers, PFLOTRAN simulated concentrations were generally higher than those simulated with HydroGeoSphere, with up to 30% concentration differences and peak times delayed of up to a 2 factor.

Simulated concentration in the fractured rock

Simulated (or predicted) tracer concentrations in the piezometers located in the fractured rock (piezometer 1a to 14, Figure 5.4), followed the general trend observed in the laboratory

experiment, with a peak time increasing and a peak concentration decreasing with the distance to the backfilled pit. For example, peak concentrations and peak times simulated with the EPM model along the centerline of the pit was 440 ppb and 3.1 days for piezometer 10b (located 40 cm from the pit), and 350 ppb and 4.0 days for piezometer 1b (located 1 m from the pit).

In general, the EPM and the DFN gave similar simulated concentrations with less than 25% difference between both models in almost all the piezometer (except piezometer 1c). Peak times predicted by the DFN model was always somewhat longer (by up to maximum two times) compared to the EPM model. In addition, concentrations simulated by the EPM and DFN models were relatively close to measured values ($< 30\%$ difference) for 4 of the 10 piezometers located in the fractured rock (piezometers 1c, 2, 8 and 12). At other piezometers, measured peak concentrations were generally not reproduced by the numerical model, as they were overestimated by both models (EPM and DFN) by at least 30% (piezometer 1b) and up to 500% (piezometer 6).

Contrary to the two other models, the DP model did not predict satisfactorily the tracer concentrations for the piezometers located in the rock. Concentration peaks simulated with the DP model arrived 5 times too late compared to measurements (for example peak time was 20 days instead of 4 days in piezometer 1b). These results indicate that the DP model (see "Model calibration" section above) did not catch the real behavior of the system, and that the decrease of concentrations (Figure 5.3) could not be caused by the retention of tracer in the concrete blocks. Another explanation could also be the DP model was overfitted to the tracer test experiment. Overfitting is indeed a common risk when trying to calibrate numerical models on too many data (e.g. Kim et Han, 2017; Arsenault *et al.*, 2018).

Overall, PFLOTRAN simulated concentrations for piezometer in the rock using EPM model were significantly different than those simulated with HydroGeoSphere. Peak concentrations in PFLOTRAN were generally lower and arrival time was longer compared to HydroGeoSphere simulations. For example, at piezometer 3, PFLOTRAN model simulated a peak concentration of approximately 200 ppb after 7 days, while HydroGeoSphere EPM model simulated a peak concentration of 320 ppb (+55%) after 3.5 days (-50%). Simulated concentrations decreases after the peak were, however, similar for both codes, even though the simulated concentrations by the end of the experiment still showed up to 30% difference. The probable cause for these differences between the two codes is discussed in detail in discussion below.

Other remarks

The gradient change after 24 days of experiment (gradient increase from 0.004 to 0.009, see above) resulted in a quick decrease of the concentration in the EPM and DFN models, but a somewhat slower decrease in the DP model. Simulated concentrations in the EPM and DFN models after the gradient change were approximately divided by two (e.g., from 50 ppb at 24 days to 25 ppb at 30 days for piezometer 12).

The different models and the two codes converged to a nearly constant concentration after 30 days of experiment, in agreement with the measured trends also observed in the laboratory. In practice, this indicates that the physical and the numerical models entered a pseudo-steady state which consisted of a slow and nearly constant solute release from the tailings in the pit. In other words, all the numerical models, independently of the fractured rock representation, were able to capture this slow release of solute from the tailings as well as the groundwater flow in the pervious surround and the rock.

5.3.3 Model verification : gravel pervious surround

Model verification was also carried out using the gravel pervious surround experiment. In this case, the pervious surround, made of gravel, was more than 2 orders of magnitude more permeable than the sand used in the previous experiment, and 5 orders of magnitude more permeable than the backfilled tailings. For this experiment, only the flowrates and the concentrations results in 21 of the 25 piezometers are again presented and discussed in this study (see Figure 5.5) as concentrations for other piezometers (4, 15, 19b, 20a) were not reported by Lange (2003).

Measured flowrate was 68 mL/min in average before the gradient change, and 82 mL/min after the gradient change (i.e. after day 16). Flowrates simulated with the EPM and the DP models were equal (the same hydraulic conductivities were considered in both models), with 46 (-33% compared to the measured flowrate) and 92 mL/min (+10%) before and after the gradient change, respectively. DFN flowrates were somewhat smaller with 37 and 74 mL/min (i.e. -50% and -10% compared to measured flowrates).

Simulated concentrations in the pervious surround

Measured tracer peak concentrations in all the piezometers were generally in the order of few hundreds at the bottom of the pervious surround, to thousands of ppb in the side typically (black cross in Figure 5.5). Peak concentrations were also reached very quickly and within

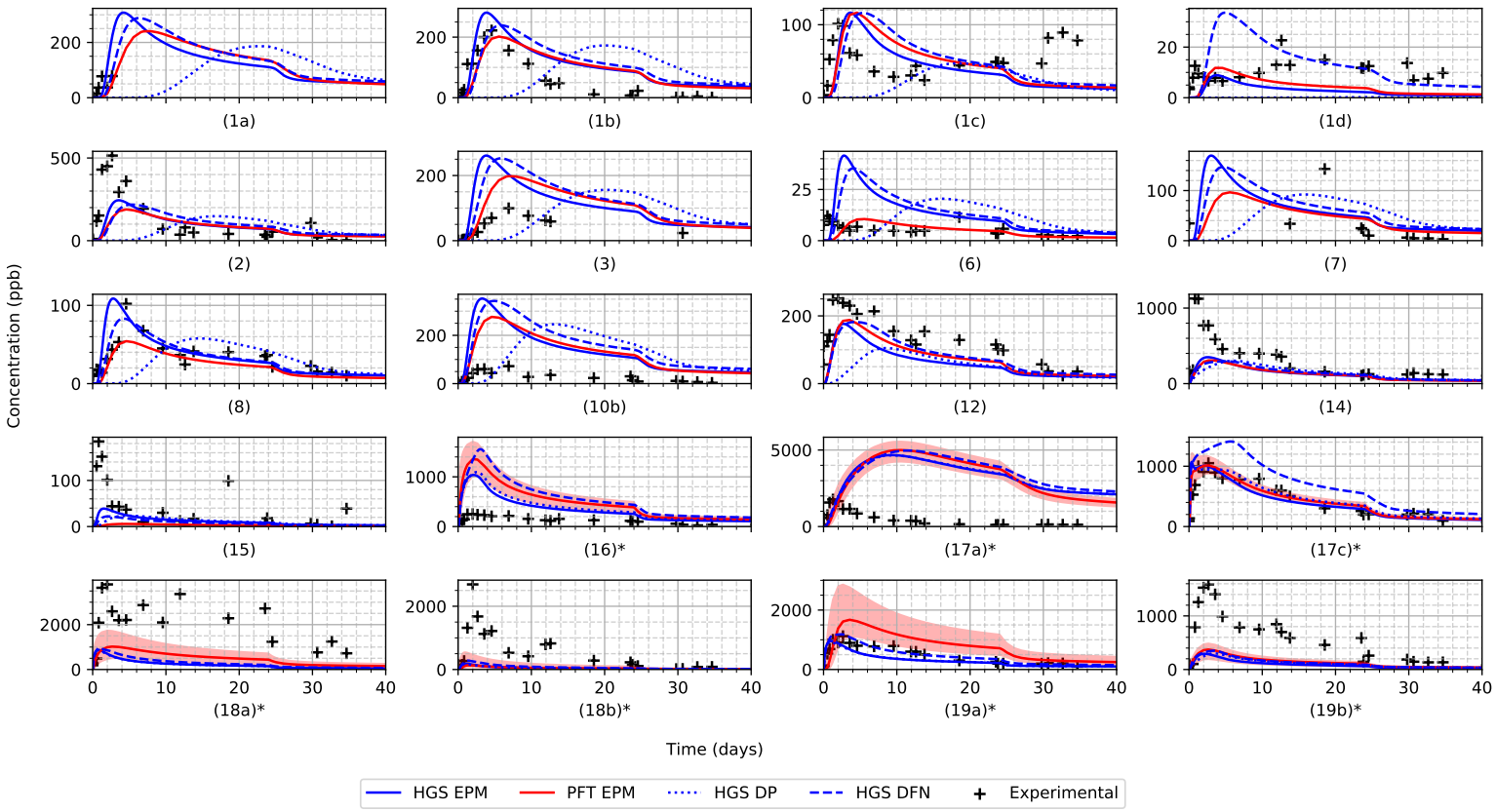


Figure 5.4 Measured (Lange, 2003) and simulated (this study) concentrations in the full physical model with a sand pervious surround in different piezometers for different fractured rock representations (EPM : Equivalent Porous Medium ; DP : Dual Porosity ; DFN : Discrete Fracture Network) and with two numerical codes (HGS : HydroGeoSphere and PFT : PFLOTRAN). Red area showed the effect of a ± 1 mm location uncertainty of piezometer position in the pervious surround on the simulated concentrations with PFLOTRAN. Piezometers located in the pervious surround are indicated by an asterisk (*).

few hours after the start of the experiment, and then decreased quickly to reach their residual concentration after approximately 2 days of experiment.

Simulated concentrations for piezometers located in the pervious surround increased rapidly at the beginning of the experiment, and peak concentrations were generally reached during the first hour of the simulation, in agreement with the measurement (curves on Figure 5.5). Peak measured and simulated concentrations were also in the same order of magnitude (i.e. simulated peak concentrations were comprised between 0.5 and 2 times the measurements) for all the piezometers in the pervious surround. Overall, numerical models were able to predict tracer concentrations in the gravel pervious surround satisfactorily for 2 of the 6 piezometers (piezometer 17a and 17b), and for which the differences between simulated and measured concentration were below 30%. At the other piezometers, concentrations after the peak were generally underestimated by a factor between 3 and 4, resulting in an overall poor agreement.

Intermodel comparison showed all the models (EPM, DP and DFN) simulated similar concentrations curves in the pervious surround, both in terms of peak concentration, peak time and residual concentration. Concentration decrease simulated by the DP model was faster than in the (HydroGeoSphere) EPM model, which was also faster than in the DFN model. In particular, tracer concentrations in the pervious surround simulated by the EPM and the DP models tended rapidly toward the same residual concentration after 2 days, while the concentrations simulated by the DFN models remained approximately 30% higher. Small numerical oscillations were also observed at the start of the simulation for piezometers 17b, 17c and 19a, and at the end of the simulations for piezometers 18a and 19a.

Simulated concentrations in the fractured rock

For most of the piezometers located in the fractured rock, tracer peak concentrations were typically in the order of few hundreds of ppb, and varied with the distance to the pervious surround (piezometer 1a to 14 ; black cross in Figure 5.5). For example, for piezometers located closest to the pervious surround (piezometers 10b, 12 and 14), the measured peak concentrations were approximately 500 ppb, while those located further were in the 200 ppb range. Peak concentrations were reached few hours after the start of the experiment or within two days depending on to the distance to the pervious surround, and then slowly decreased toward a residual concentration of approximately a tenth the peak concentration.

Overall, simulated concentration curves agreed well with the measurements (Figure 5.5). Indeed, simulated concentrations in the fractured rock increased quickly after the start of the experiment, reached a peak concentration within one day, and then slowly decreased toward

a residual concentration of 10% the peak concentration. Simulated peak concentrations were between one and several hundreds of ppb depending of the distance to the pervious surround, and matched fairly those measured, especially for piezometers 1b, 1c, 1d, 3, and 6 for which the difference was below 20%. An acceptable visual match considering the EPM and DFN models was observed for half the piezometers located the fractured rock (piezometers 1b, 1d, 3, 5a, 5b, 6 and 10b).

EPM and DFN models gave similar simulated concentration curves ($< 20\%$ difference at all the times) for most of the piezometers located in the fractured rock, but in general, peak times simulated by the DFN model were approximately 0.3 days later than with the EPM model. However, similarly to the sand pervious surround case, the DP model was not able to precisely predict concentrations in the fractured rock in the gravel experiment. Concentrations simulated using the DP model slowly increased to reach a peak concentration around 100 ppb after 2.5 to 7 days, while measured peak concentrations were in the 200 to 500 ppb range and reached within 2 days. Predicted concentrations were thus too small and too late.

Other remarks

In most of the piezometers (both in the rock and in the pervious surround), EPM model peak concentrations simulated with PFLOTRAN were lower than those simulated with HydroGeoSphere by up to a 2.5 factor at piezometer 16 for example, and were late by nearly 0.25 days. However, concentrations in both models became similar after approximately 2 days of experiment with differences smaller than 3% for the rest of the experiment, especially for piezometers located in the rock. This observation was consistent with the sand pervious surround experiment and is analyzed in more details below.

Gradient change after 16 days had, in general, no significant influence on the measured concentrations in most piezometers (also not enough data were recorded to precisely capture the concentrations changes). Simulated concentrations were, however, divided by two in all piezometers following the gradient change. The decrease was generally quick (< 0.3 days for the EPM and the DFN models, and < 3 days for the DP model) in both the pervious surround and the fractured rock. The experiment duration was too short to observe a decrease of the concentration down to 0 ppb, but a quasi-steady state regime was reached after approximately 10 days of experiment. Final simulated concentrations depended of the rock model and the code used, but were in general relatively similar, and were precisely predicted ($< 20\%$ difference) in nearly all the away from the tailings source. Numerical models were therefore able to capture the slow and quasi-steady release of tracers from the tailings in the pit, and its transport through the physical model.

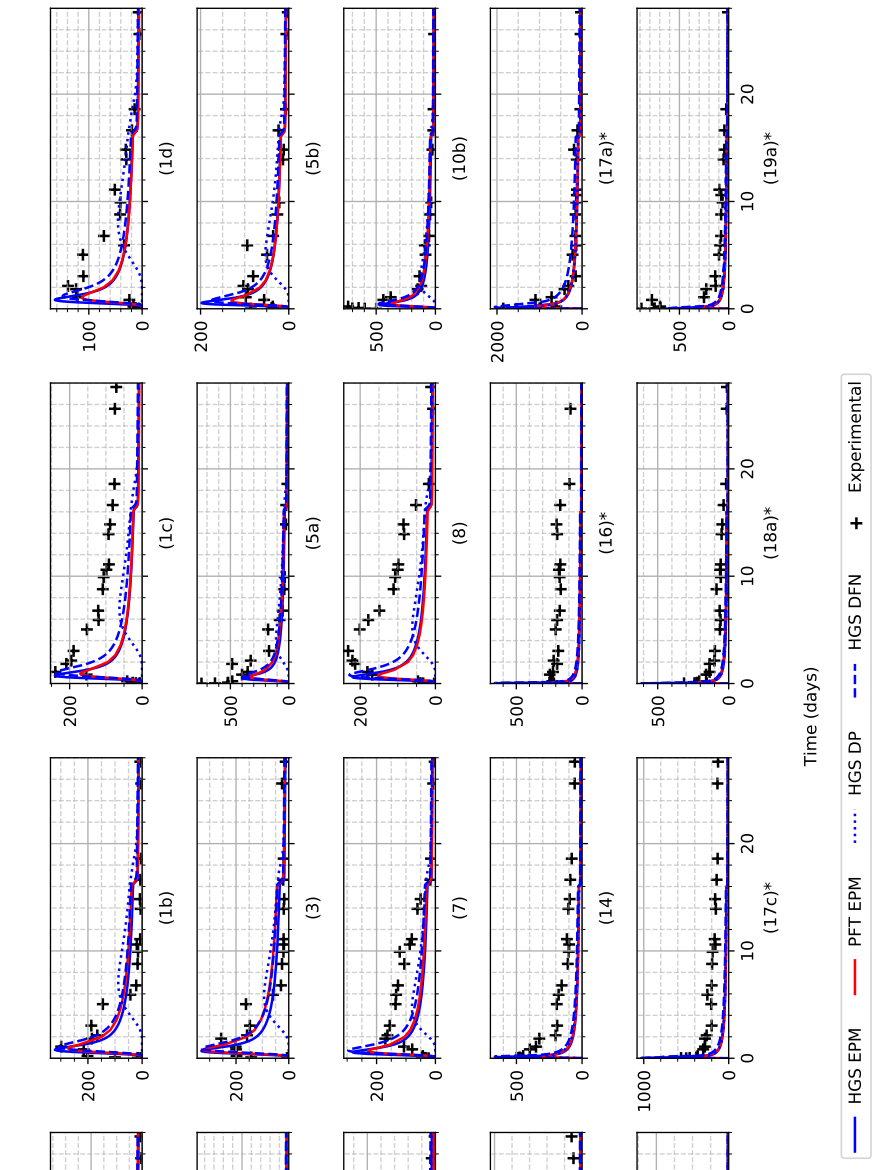


Figure 5.5 Measured (Lange, 2003) concentration in the full physical model with a gravel pervious surround and simulated (this study) concentrations in different piezometers for different fractured rock representation (EPM : Equivalent Porous Medium ; DP : Dual Porosity ; DFN : Discrete Fracture Network) and with two numerical codes (HGS : HydroGeoSphere and PFT : PFLOTRAN). Piezometers located in the pervious surround are indicated by an asterisk (*). Piezometer (18b) not shown for concision, but was still considered in the analysis.

5.4 Result analysis and discussion

5.4.1 Comparison of the numerical models and fractured rock representations

Tracer concentrations simulated using the EPM and the DFN models were similar in both experiments (sand and gravel pervious surround), even though DFN model predicted slightly greater peak concentrations and peak times. For both EPM and DFN models, peak concentration order of magnitude (from few ppb to several thousand ppb) was accurately predicted for most of the piezometer in the fractured rock and the sand and the gravel pervious surround experiment. In addition, simulated concentration curves matched well measurements in the fractured rock for 4 of 10 piezometers in the sand experiments, and for 7 of 14 piezometers in the gravel experiment (Figures 5.4 and 5.5). The discrepancies between measured and simulated results for other piezometers in the fractured rock could be explained by the presence of preferential flow paths or channeling in the physical model which was not considered by numerical models and the fractured rock representation. Therefore, even with simplified fractured rock representation, results suggest that numerical models were in general able to simulate correctly the groundwater flow and solute transport near backfilled pits in a fractured rock mass.

A good match was also observed for 2 of the 7 piezometers located in the pervious surround in the sand experiment, and for 2 of the 6 piezometers in the gravel experiment, both for the EPM and the DFN models. However, additional simulations carried out with PFLOTRAN on the full physical model indicated that the concentrations simulated in the pervious surround were very sensitive to the piezometer position, especially for the sand pervious surround experiment. For example, a 1 mm change of their position in the 2.5 cm pervious surround resulted in a modification of the concentrations by a factor of 2 (Figure 5.4). This could explain why the match between simulation and measurement was sometimes poor. In practice, accurate prediction of the solute transport in the pervious surround would require a precise knowledge of the piezometer position.

The (calibrated) DP model was, however, unable to predict the tracer concentrations measured in both experiments, unlike previous simulations (Lange et Van Geel, 2011). The calibration was probably overfitted, which means the parameters of the model were too specific to one experiment and could not reproduce other conditions (Kim et Han, 2017; Arsenault *et al.*, 2018). Another explanation could be that the tracer was not stored in the matrix (i.e., the concrete blocks) as supposed (by construction) in the DP model. Nevertheless, this does not mean the DP model cannot be used to model fractured rock in practice, but only that calibration should be conducted on more results and possibly consider other phenomena. For

example, DP model was successfully used to simulate solute transport in fractured aquifer in Abdelaziz et Zambrano-Bigiarini (2014).

All the numerical models (EPM, DP and DFN) were also able to capture the constant release of solute from the tailings toward the end of the experiment, despite the different models showed different residual concentrations in both the sand and the gravel pervious surround experiments. Further analysis indicated that this residual concentration measured in the fractured rock piezometers was inversely proportional to the flowrate (with approximately $C_{EPM}/C_{DFN} \approx F_{DFN}/F_{EPM}$ for almost all the piezometer with C the tracer concentration and F the flowrate through the model). In other words, results reported to the simulated flowrate therefore indicate that the mass release rate was equal for the three models. The representation of the fractured rock therefore appears to not influence the solute transport from the tailings source to the pervious surround. This supports the fact that the long-term solute transport in the pit and the surrounding rock can be decoupled, as already suggested by (West *et al.*, 2003) for example.

Overall, the simulated concentrations matched better the measured data in this study that in the previous simulations carried out by Lange, back in 2003 (Lange, 2003) The improvement was especially significant for the sand pervious surround experiment (Figure 5.4). For example, the peak concentration at piezometer 1c was not matched in previous work and the decrease at piezometer 17c was too fast, while in this study (considering also independently calibrated parameters, see Verification section above), both the peak concentration and decrease were matched by the EPM or the DFN models. Unfortunately, simulated concentrations for other piezometers were not presented in (Lange, 2003) so a detailed comparison of the numerical model performance could not be conducted here.

Finally, discrepancies in the concentrations simulated by the PFLOTRAN and HydroGeoSphere codes (both using the EPM model) might indicate a greater diffusion in PFLOTRAN model as shown bu the lower and delayed peak concentration simulated. The higher diffusion in PFLOTRAN could be explained by the numerical method used by the code, which required a locally orthogonal mesh parallel to the flow to accurately simulate dispersive solute transport mechanism (Cirpka *et al.*, 1999a,b). However, flow oriented grids are in general very complex to generate in 3D as no software are readily available (which was also the reason why a semi-structured mesh was used in this study). The non-respect of the local orthogonality for semi-structured mesh tends to introduce error in the discretization of the diffusion term in the transport equation (5.2), and thus contributes to introduce artificial dispersion in the model proportionally to the concentration gradient Moukalled *et al.* (2016). Thus, discrepancies were particularly visible at the beginning of the tracer test where concen-

tration gradients were high. Then, as the time went, solute gradient decreased and so did the numerical errors, and simulated concentrations tended to become more similar in both codes at the end of the experiment (Figures 5.4 and 5.5). The latter also showed that even without a strictly flow orthogonal grid, PFLOTRAN remains valid for modeling groundwater flow and long-term solute transport for which concentration gradient are low and providing the EPM representation of the fractured rock is realist. Utilization of iterative deferred correction scheme (Jasak, 1996; Moukalled *et al.*, 2016) could contribute to improve the representativeness of PFLOTRAN code in the short term also, but at a high computational cost as it required to restart multiple times the transport simulation at each iteration.

5.4.2 Extension to field scale pit backfilling performance assessment

In this study, results showed that EPM and DP model were equally able to predict simulated concentration in the fractured rock using the laboratory-sized model. Several authors also compared the performance of the EPM, the DP and DFN models for simulating flow and transport (Jørgensen *et al.*, 1998, 2004; Berkowitz, 2002; Samardzioska et Popov, 2005; Blessent *et al.*, 2014; Hadgu *et al.*, 2017). In general these studies concluded the three approaches could be successfully calibrated to reproduce the experimental measurement, which support the finding of this study (see section 5.3.1). Yet, some argued recalibration for EPM and DP models were needed if experimental, initial or boundary conditions were changed. Else, they would not be able to accurately simulate the phenomenon under studies. Even if it was true for the DP model, the change of experimental setup (calibration vs full model experiments) and of the pervious surround hydraulic conductivity did not significantly give different concentrations for the EPM and DFN models. However, this was probably caused by the fact the fractures network was well connected (Berkowitz, 2002), at the opposite of the aforementioned studies. In practice, at field scale, the regional fractures network would have a complex structure, and thus, the EPM and the DP models might not be appropriated without a careful calibration in such case. This implied, for example, that, the properties an EPM or a DP fractured rock representation at the field scale calibrated before the pit backfilling could be significantly different than those after the backfilling.

Under the hypothesis that representative fractured rock properties could be defined, this study showed that numerical models were accurate enough to conduct performance assessment of several backfilling scenario and to obtain the order of magnitude of downgradient concentrations. However, if a more precise model of flow and solute transport near backfilled pits and with a fractured surrounding rock is sought, this would require a precise knowledge of the fractures network, for which information is rarely available. Also, even with such de-

tailed information about the fractures location and properties as in this study, and with a well-controlled environment, predicting the concentration in the fractured rock was challenging, and still imperfect, despite the improvement made between this study and the previous ones (West *et al.*, 2003; Lange, 2003; Lange et Van Geel, 2011). This suggests that in practice, only the order of magnitude of downgradient concentration could be obtained. In these cases, there is no gain to use synthetically generated DFN models, and EPM model should therefore be privileged for the sake of simplicity.

Results of this study at laboratory scale also suggest that the long-term tracer transport between the pit and the fractured rock could be decoupled, and that all the numerical models were able to capture the quasi-steady release of tracer from the tailings. This is particularly important for studying long-term contaminant transport from backfilled pit to the environment, as in allowed to focus on only the processes occurring in this pit without needed a detailed representation of the fractured rock. At field scale, such a quasi-steady release of contaminants from the tailings might also be observed, despite it might occur not after a couple of days but rather in a couple of months or years because of scale effect (e.g. Rousseau et Pabst, 2020). Using this quasi-steady release rate as an objective criterion to evaluate, design and select backfilling strategies may be thus more recommended.

Finally, piezometers located in the backfilled wastes or in the pervious surround might be used to follow the contaminants migration in the pit and in the rock. The laboratory tests and their simulation yet concluded that predicting concentrations in the pervious surround was highly sensitive to piezometers location. Changing the scale of the problem (from the laboratory to the field) might, however, change this conclusion, as the material dispersivity is known to be scale-dependent (Schulze-Makuch, 2005), and might promote concentrations homogenization and solute mixing over the pervious surround width. Thus, further works are needed in this direction to allow following solute migration at the pit scale.

5.4.3 Discussion

The present study used high resolution numerical models to simulate tracer tests in a large physical model. A detailed mesh sensitivity analysis could have been carried out to ensure the numerical simulations do not exhibit error because of a too coarsely defined mesh, or to validate the numerical models converged toward the mathematical solution of the solute transport. However, the mesh used in HydroGeoSphere simulations was as least as refined in the pervious surround as in Rousseau et Pabst (2018) for which a convergence of the flowrate was observed, which somewhat indirectly validated the mesh quality. Also, both PFLOTRAN and HydroGeoSphere meshes respected the criterion proposed by Salama *et al.*

(2002) to ensure solute transport in the pervious surround was not overestimated. In addition, another PFLOTRAN simulation with a mesh composed of only 1 million elements (vs. 3.5 million in the results presented above) was conducted and predicted similar concentrations (i.e. with a difference of maximum 20%), which showed the actual results might be converged.

Recent computers allowed to create the high resolution numerical models used in this study which contained between 25 and 70 times more elements than the pervious numerical model (Lange, 2003). The present work used mainly desktop computers to perform the numerical simulations, which were conducted in a decent amount of time (i.e. less than one day). Also, few simulations using PFLOTRAN were carried on *High Performance Computing* (HPC) hardware, which allows to decrease even more the computation time to about an hour. Such hardware and highly parallelized simulation code could be used advantageously in practice to increase even further the resolution of the numerical models or to perform many simulations in parallel to conduct stochastic sensitivity or uncertainty analysis for field-scale performance assessment. High resolution geochemical simulation with reactive transport could also be conducted using HPC, which could be used to more realistically model contaminant transport in the environment (Hammond *et al.*, 2012).

5.5 Conclusion

The present study reevaluated experiments on groundwater flow and solute transport near backfilled pit using nowadays numerical tools. Tracer concentrations in a physical, laboratory-scale model were simulated (first calibrated and then validated) using several models to represent the fractured rock. In general, simulations were in good agreement with the measured concentrations, with sometimes an improved prediction compared to previous simulations made back in 2003. Yet, predicting concentrations in the pervious surround was still challenging, especially because they were particularly sensitive to piezometer positions. In all the simulated cases, numerical models were also able to capture the long term quasi-steady state solute transport from the pit to the rock, independently of its numerical representation.

This study showed that numerical models could be used to conduct performance assessment of solute transport between a backfilled pit and the environment. Downgradient concentrations could be predicted relatively well at the condition an accurate representation of the fractured rock (using either a EPM, DP or DFN model) is provided. In any case, long-time solute exchange processes in the pit and in a pervious surround was shown to be decoupled from those in the rock, therefore being independent from the fractured rock representation. For real case performance assessment with few data on the fractured rock, it is recommended to focus on long-term solute exchange in the pit rather than on downgradient concentrations .

CHAPITRE 6 ARTICLE 2 : ANALYTICAL SOLUTION AND NUMERICAL SIMULATION OF STEADY FLOW AROUND A CIRCULAR HETEROGENEITY WITH ANISOTROPIC AND CONCENTRICALLY VARYING PERMEABILITY

Par Moïse Rousseau et Thomas Pabst.

Article accepté dans la revue *Water Ressources Research.*

Abstract

Accurately simulating flow to assess the environmental impact of backfilled mine open-pit with hazardous waste is challenging. Excavation and blasting during mining operations often result in the creation of new fractures with preferential orientation, which leads to a variable and anisotropic permeability field around the excavation. Numerical simulations are often used to study such problems, but experimental data are scarce and analytical solutions for this configuration are not available in the literature, which makes the code validation difficult and uncertain. Therefore, the present study aimed to address the numerical code validation by developing a new closed form head solution of a steady flow with a radially anisotropic and continuously varying permeability distribution around a heterogeneity. Numerical flow simulations using the finite volume code PFLOTRAN were then compared to the analytically calculated heads and flowrates on three cases of increasing complexity. Results showed a good agreement between analytical and simulated flowrates and heads, with a maximum absolute error not exceeding 3.5% on flowrates and 1.8% on heads. Errors were actually mainly caused by boundary effects and by the non-respect of the K-orthogonality condition in the computational mesh. This study opens the way for accurate evaluation of the blast damage zone influence on groundwater flow in and around open pits backfilled with hazardous wastes.

6.1 Introduction

Blasting operations used to create openings in the rock generally cause disturbances in the vicinity of the excavation and result in the creation of new fractures and the extension of existing discontinuities. For large openings located in hard rock, such as open-pits in surface mining, the altered zone could extend up to 40 m deep and includes a severely damaged rock mass close to the pit wall, with fracturing decreasing with distance (Poulsen *et al.*,

2017). Orientation of blast induced fractures is often anisotropic, and fractures tend to be subparallel to the excavation wall (Bossart *et al.*, 2002; Jaeger *et al.*, 2007; Stacey *et al.*, 2003) or conjugate to existing fractures or bedding (Bossart *et al.*, 2002; Siamaki *et al.*, 2018). Fracture anisotropy tends to promote preferential flow paths around and under excavations and also develop channeling of water flow in particular directions, while limiting flow in others (Stacey *et al.*, 2003; Foster *et al.*, 2018). This flow channeling may influence the regional groundwater flow and solute transport around the opening.

The influence of these new fractures could be critical, particularly in the case when the opening is filled (i.e. backfilled) with hazardous wastes (e.g. Salama *et al.*, 2002; Tsang *et al.*, 2005, 2015, ; Figure 6.1). They could either increase the groundwater flowrate inside wastes and increase the transport of contaminants to the surrounding environment (Rousseau et Pabst, 2020, ; Figure 6.1b), or contribute to create a natural pervious surround (Matich et Tao, 1986; Misfeldt *et al.*, 1999; MEND, 2015, ; Figure 6.1c) and divert the regional groundwater streamlines, thus enhancing contaminant retention within backfilled wastes by decreasing advective solute fluxes (West *et al.*, 2003; Rousseau et Pabst, 2020, Figure 6.1d). The effect of blast induced fractures, and especially the influence of their anisotropy, needs therefore to be evaluated to properly assess the groundwater flow near the backfilled open-pit and to design hazardous waste backfilling. To do so, numerical simulations with anisotropic permeability tensor which principal directions are not aligned with the simulation axis are required to account for the variation of fractures preferential orientation. A few numerical codes have implemented this feature, including FEFLOW (DHI), or OpenGeoSys (Jang *et al.*, 2018). Recently, the finite volume code PFLOTRAN (Hammond *et al.*, 2012) was modified by the authors with the help of PFLOTRAN core developers to handle full permeability tensor flow simulations which is now incorporated in the development version of the code (master branch). However, validation of numerical simulations in such a particular setup is a challenge because of the lack of experimental or field data, and the absence of analytical solutions.

Analytical solutions for similar problems were proposed in the literature for hydrodynamic flow (Batchelor, 2001; Milne Thomson, 1962), heat transport (Carslaw et Jaeger, 1959), and in electrostatic and electrodynamic studies especially for invisibility and cloaking applications (Kettunen *et al.*, 2013; Fleury *et al.*, 2015; Xuan *et al.*, 2019; Batool *et al.*, 2020b,a). Back to hydrogeology, a two domains groundwater flow problem with a circular heterogeneity submitted to a uniform hydraulic gradient in an infinite domain and with source/sink was first solved in two dimensions by Wheatcraft and Winterberg (1985). Waste insulation problem considering an annulus of low or high conductivity around wastes was analyzed (Strack, 2017), and a generalization to a n-layers problem surrounding the heterogeneity was proposed by (Kazarin et Obnosov, 2016). Groundwater flow in elliptic heterogeneity in two and

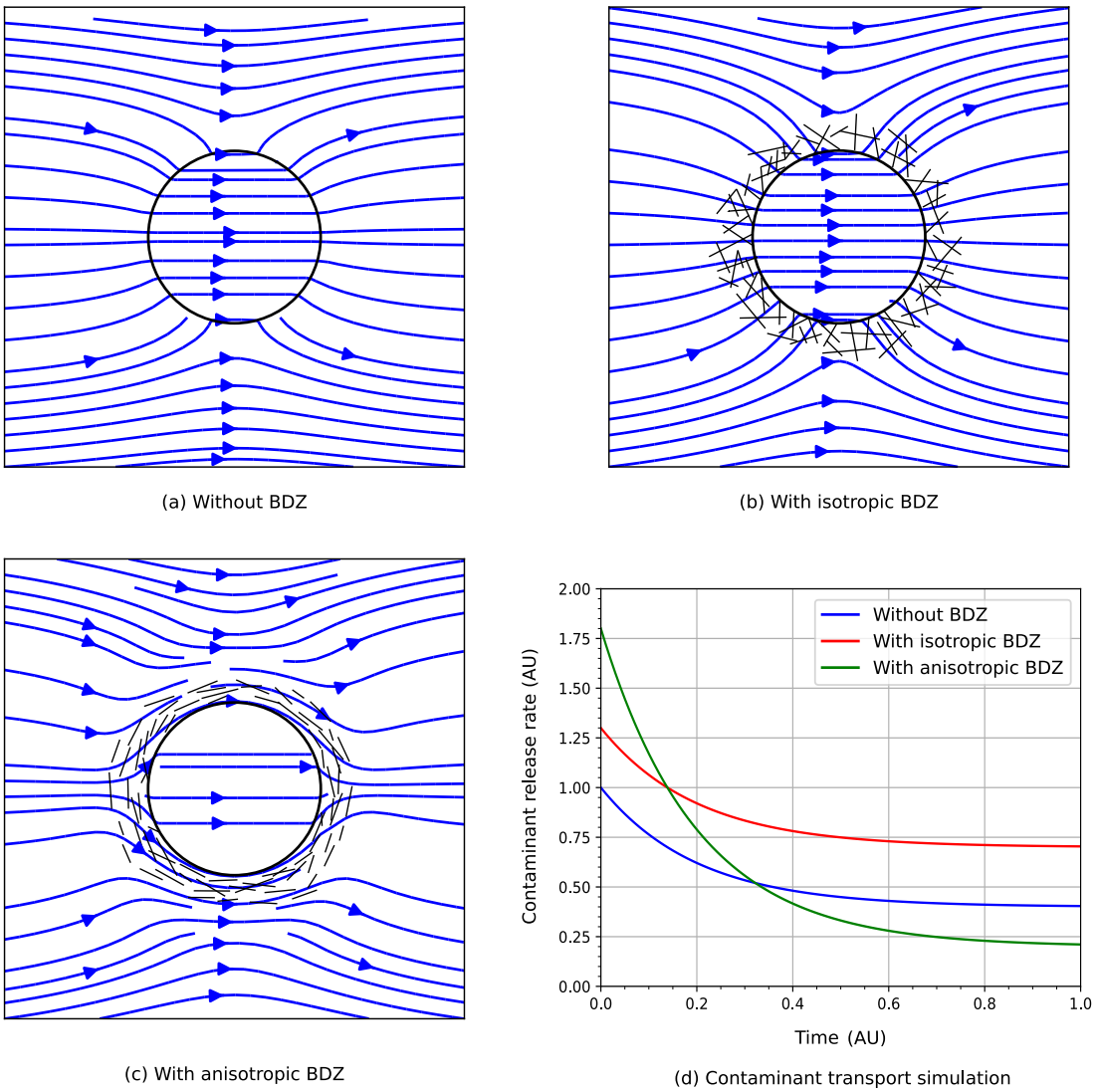


Figure 6.1 Schematic influence of the blast damage zone (BDZ) on water flow streamlines : (a) without BDZ, some streamlines passe through the backfilled waste, (b) with isotropic BDZ, the fractures contributes to attract streamlines in the waste and (c) with anisotropic BDZ, the enhanced tangential conductivity permits to divert groundwater streamlines from the waste. Effect on solute transport is also shown (d) : at early time, diffusion transport is predominant because of sharp gradient concentration at the interface (see West *et al.*, 2003, for more information), and decreases so that advection becomes predominant at late time (without BDZ, blue curve). Isotropic BDZ only increases advective solute transport so contaminants release rate curve is just translated (red curve). Finally, increased water flow in the vicinity of backfilled waste with the anisotropic BDZ leads to an increased diffusion, but lower advection at late time contributes to maintain longer a contaminant in the waste (green curve). AU : Arbitrary Unit.

three dimensions and with a elliptic confocal annulus were also solved (Kassimov et Obnosov, 2018; Fadeev, 2013; Dagan *et al.*, 2003; Janković et Barnes, 1999). Also, Craig (Craig, 2015) represented the radially symmetric permeability distribution through a complex polynomial and solved analytically the steady flow problem. However, all of these studies in hydrogeology considered only isotropic permeability distribution around the heterogeneity or in the continuously varying polynomial permeability.

The objectives of the present study were therefore to (1) develop a 2D analytical solution for groundwater flow through a heterogeneity (representing a backfilled pit for example) circled by an arbitrary number of layers with anisotropic permeabilities (representing the blast damage zone) and submitted to a uniform hydraulic gradient in an infinite domain (the intact rock) ; and (2) validate numerical simulations carried out with the finite volume open-source code PFLOTRAN (Hammond *et al.*, 2012) using the new full-permeability tensors capability.

The problem considered is first presented, followed by the derivation of the analytical solution for the flow in a heterogeneity surrounded by n anisotropic layers. The numerical simulations using PFLOTRAN are then presented and the resulting flowrate and head are compared with the analytical solution. Finally, a detailed error analysis is presented to evaluate the ability of PFLOTRAN code to simulate flow in backfilled open pits. Errors arising from the computational domain discretization, and in particular, from the non-respect of the K-orthogonality condition, are also addressed.

6.2 Problem description

The problem consisted of a 2D plan fully saturated and steady state flow, with a circular heterogeneity of radius R_0 characterized by an isotropic hydraulic conductivity K_in, in an infinite homogeneous and isotropic porous medium of hydraulic conductivity K_∞ (Figure 6.2). A uniform flow field of hydraulic gradient I (Figure 6.2) at infinity was considered. The continuously varying permeability was divided into N circular layers around the heterogeneity numbered from 0 to $N-1$. Hydraulic conductivity of the ith layer was considered constant and anisotropic, with $K_{i,r}$ and $K_{i,\theta}$ the hydraulic conductivities oriented along the radial and the tangential directions, respectively. Each ith layer extends between inner radius R_i and outer radius R_{i+1}. The ith interface noted I_i designated the interface at radius R_i between layers $i-1$ and i. Interface 0 corresponded to the interface between the heterogeneity and the first layer (i.e. the excavation wall for example), and interface N was the interface between the most external layer ($N-1$) and the infinite homogeneous porous medium (i.e. the intact rock mass, which was not affected by blasting). The hydraulic head inside the heterogeneity,

in the layer i and in the infinite medium were noted h_{in}, h_i and h_∞ and were functions of the radial distance r and the angle θ.

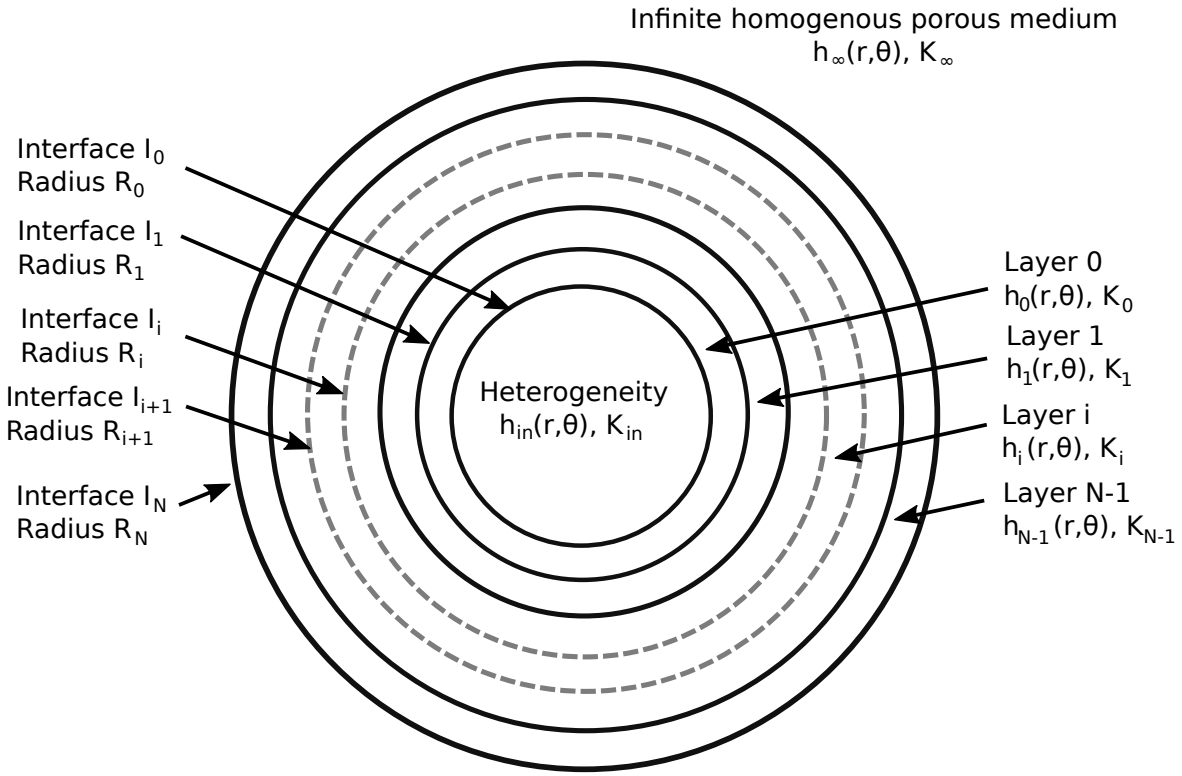


Figure 6.2 Conceptual representation of the continuously varying permeability around a heterogeneity divided in N layers in an infinite homogeneous porous medium. h_x and K_x represent the head and hydraulic conductivity of the heterogeneity (subscript in), the ith layer (subscript i) and the infinite porous medium (subscript ∞). Radius is located at the interface I_i between layer i and $i+1$.

A cylindrical coordinate system (r, θ) was used. The center O was placed at the center of the heterogeneity and the $\theta = 0$ axis was aligned with the flow direction. The law of conservation of mass (no sources and sinks) under steady state conditions can be written :

$$\nabla \vec{v} = \frac{v_r}{r} + \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} = 0 \tag{6.1}$$

With v_r and v_θ the Darcy velocities along the radial and the tangential directions. Velocity could be written as a function of the radial K_r and tangential K_θ hydraulic conductivity using Darcy law :

$$\vec{v} = -\boldsymbol{K}\nabla h = \begin{pmatrix} -K_r \frac{\partial h}{\partial r} \\ -\frac{K_\theta}{r}\frac{\partial h}{\partial \theta} \end{pmatrix} \tag{6.2}$$

Combining equations (6.1) and (6.2) led to the following Laplace equation for the head h :

$$\nabla\vec{v} = \nabla\left(-\boldsymbol{K}\nabla h\right) = K_r\frac{\partial^2 h}{\partial r^2} + \frac{K_r}{r}\frac{\partial h}{\partial r} + \frac{K_\theta}{r^2}\frac{\partial h}{\partial \theta^2} \tag{6.3}$$

General solution to the Laplace equation (6.3) is (also see Appendix 6.7 for more details) :

$$h(r,\theta) = \sum_n = 0^\infty \left(\alpha_n r^{ln} + \beta_n r^{-ln}\right)\cos n\theta \tag{6.4}$$

With α_n and β_n two integration constants. Head and flux continuity between any two regions noted A and B could be expressed as :

$$h_A(R,\theta) = h_B(R,\theta) \tag{6.5a}$$

$$-\boldsymbol{K}_A\nabla h_A(R,\theta)\vec{n} = -\boldsymbol{K}_B\nabla h_B(R,\theta)\vec{n} \tag{6.5b}$$

with R the radius of the interface between the two regions A and B and $\vec{n}$ the interface normal vector. For a circular interface like in this study, $\vec{n} = \vec{r}$. The flow was assumed unperturbed at infinity with a regional gradient I oriented along the $\theta = 0$ axis by convention, and head at the center of the heterogeneity was noted h_0, so :

$$\lim_{r\to\infty} h_\infty(r,\theta) = I(\cos\theta\vec{r} + \sin\theta\vec{\theta}) \tag{6.6a}$$

$$h_{in}(r=0,\theta) = h_0 \tag{6.6b}$$

6.3 Analytical solutions for a circular heterogeneity with N layer

6.3.1 Head solution

Solution in the heterogeneity

Hydraulic head in the heterogeneity h_{in} was the solution to the Laplace equation (6.3) in the domain restricted to $r \leq R_0$ and constrained by the head continuity at the interface I_0 (i.e. the interface between the heterogeneity and the first layer) :

$$h_{in}(R_0,\theta) = A_0(\theta) \tag{6.7}$$

with A_0 a pair function representing the head potential at the interface I_0. h_{in} was defined everywhere in the heterogeneity which implied $\beta_n = 0$, and boundary condition (6.6b) implied

$\alpha_0 = h_0$. Equation (6.4) then becomes :

$$h_{in}(r,\theta) = h_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n r^n \cos(n\theta) \tag{6.8}$$

h_{in} was a function of r^n since the heterogeneity was considered isotropic (contrary to the N layers). A_0 (Equation 6.7) was then expressed using a Fourier series :

$$A_0(\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} A_{0,n} \cos(n\theta) \tag{6.9}$$

Combining equations (6.7) to (6.9) led to :

$$h_{in}(r \leq R_0, \theta) = h_0 + \sum_{n=1}^{\infty} A_{0,n} \frac{r^n}{R_0^n} \cos(n\theta) \tag{6.10a}$$

$$A_0, 0 = h_0 \tag{6.10b}$$

Solution in the infinite domain

Hydraulic head in infinite domain h_∞ was the solution to the Laplace equation for $r \geq R_N$ (i.e. outside the N layers). The following boundary conditions applied :

$$h_\infty(R_N, \theta) = A_N(\theta) \tag{6.11a}$$

$$\lim_{r\to\infty} = I\cos\theta\vec{r} - I\sin\theta\vec{\theta} \tag{6.11b}$$

with A_N a pair function representing the head at the interface I_N (i.e. between the infinite domain and the layer $N-1$). Boundary condition (6.11b) represented the far field condition (Equation 6.6b) where the flow is uniform and undisturbed and with I the regional hydraulic gradient. Similarly to the heterogeneity, A_N was expressed using its Fourier series to relate the integration constant of equation (6.4) to the head at the interface N :

$$\alpha_n R_n^n + \beta_n R_n^{-n} = A_{N,n} \tag{6.12}$$

where $A_{N,n}$ are the Fourier coefficients of A_N. Also, equation (6.11b) (far field boundary condition) could be written for the $\vec{r}$ component :

$$\lim_{r\to\infty} \sum_{n=2} n\alpha_n r^{n-1} \cos(n\theta) = (I - \alpha_1)\cos\theta \tag{6.13}$$

The left-hand side of equation (6.13) is polynomial in r and thus tends toward infinity if one of the coefficients $\alpha_{n\geq 2}$ is non-null. Consequently, it implies $\alpha_1 = I$ and $\alpha_{n\geq 2} = 0$. Hydraulic head h_∞ in the infinite porous medium (i.e. the rock) could therefore be written :

$$h_\infty(r \geq R_N, \theta) = \left(r - \frac{R_N^2}{r}\right) I \cos\theta + \sum_{n=0}^{\infty} A_{N,n} \cos n\theta \frac{R_N^n}{r^n} \tag{6.14}$$

This solution was also a function of r^n similarly to equation (6.8) since infinite domain was considered isotropic.

Solution in layer i

Hydraulic head in ith layer, with $0 \leq i \leq N-1$, was the solution to the Laplace equation within the domain restricted by $R_i \leq r \leq R_{i+1}$ and constrained by the two following boundary conditions :

$$h_i(R_i, \theta) = A_i(\theta) \tag{6.15a}$$

$$h_i(R_{i+1}, \theta) = A_{i+1}(\theta) \tag{6.15b}$$

where head h_i was given by :

$$h_i(R_i \leq r \leq R_{i+1}, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\alpha_{i,n} r^{l_i n} \beta_{i,n} r^{-l_i n}\right) \cos n\theta \tag{6.16}$$

with $l_i = \sqrt{K_{i,\theta}/K_{i,r}}$. Boundary conditions (6.15a) and (6.15b) were expanded using their Fourier series and by identification with equation (6.16) led to :

$$\alpha_{i,n} R_i^{l_i n} + \beta_{i,n} R_i^{-l_i n} = A_{i,n} \tag{6.17a}$$

$$\alpha_{i,n} R_{i+1}^{l_i n} + \beta_{i,n} R_{i+1}^{-l_i n} = A_{i+1,n} \tag{6.17b}$$

Equations (6.17) implied $A_{i,0}$ and $A_{i+1,0}$ coefficients were equal, which also indicated by recurrence that all $A_{i,0}$ were equal to h_0 (Equation 6.6b) for $0 \leq i \leq N-1$. Equations (6.17a) and (6.17b) could therefore be rewritten to express coefficients α_n and β_n :

$$\alpha_{i,n} = \frac{R_{i+1}^{l_i n} A_{i+1,n} - R_i^{l_i n} A_{i,n}}{R_{i+1}^{2 l_i n} - R_i^{2 l_i n}} \tag{6.18a}$$

$$\beta_{i,n} = \frac{R_{i+1}^{-l_i n} A_{i+1,n} - R_i^{-l_i n} A_{i,n}}{R_{i+1}^{-2 l_i n} - R_i^{-2 l_i n}} \tag{6.18b}$$

6.3.2 Flux continuity between the different domains

The head function at each interface I_i was determined by coupling the head solutions of the different domains (see above). In total, $N+1$ sets of Fourier series coefficients were determined for the N layers problem, corresponding to the $N+1$ interfaces. Flux continuity (Equation 6.5b) expressed at each interface led to the following conditions on Fourier coefficients $A_{i,n}$ with $n \geq 1$ at interface i :

$$0 = K_{0,r} l_0 (2\alpha_{0,n} R_0^{l_i n} - A_{0,n}) - K_{in} A_{0,n} \tag{6.19a}$$

$$2K_\infty R_N I = K_{N-1} l_{N-1} (2\alpha_{N-1,1} R_N^{l_{N-1}} - A_{N,1}) + K_\infty A_{N,1} \tag{6.19b}$$

$$0 = K_{N-1} l_{N-1} (2\alpha_{N-1,1} R_N^{l_{N-1} n} - A_{N,n}) + K_\infty A_{N,n} \text{ for } n \geq 2 \tag{6.19c}$$

$$0 = K_{i,r} l_i (2\alpha_{i,n} R_{i+1}^{l_i n} - A_{i+1,n}) - K_{i+1,r} l_{i+1} (2\alpha_{i,+1n} R_{i+1}^{l_{i+1} n} - A_{i+1,n}) \tag{6.19d}$$

Equation (6.19a) represented the flux continuity at the interface I_0 between the heterogeneity (i.e. the excavation) and the first layer and equations (6.19b) and (6.19c) both represented the flux continuity at the interface I_N between the infinite medium (i.e. the undisturbed rock mass) and layer $N-1$. Equation (6.19d) represented the flux continuity between two layers. The above system was expanded using the expressions of $\alpha_{i,n}$ in equation (6.18a) and the different $A_{i,n}$ terms were collected to form a linear system of $N+1$ equations for each nth Fourier coefficient $A_{i,n}$ with $n \geq 1$. The resulting systems were then expressed as a sparse matrix vector product :

$$\begin{pmatrix} v_{0,n} & w_{0,n} & & & 0 \\ u_{1,n} & v_{1,n} & w_{1,n} & & \\ & u_{2,n} & v_{2,n} & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & w_{N-1,n} \\ 0 & & & u_{N,n} & v_{N,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{0,n} \\ A_{1,n} \\ A_{2,n} \\ \vdots \\ A_{N,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ B_{N,n} \end{pmatrix} \tag{6.20}$$

with $B_{N,1} = 2IR_N$ and $B_{N,n\geq 2} = 0$. Solving the above sparse matrix vector product for $A_{i,n\geq 2}$ give $A_{i,n\geq 2} = 0$ since the right-hand side was null. The remaining $A_{i,1}$ coefficients could be obtained using forward elimination and backward substitution method, for example. The

corresponding matrix coefficients for $n = 1$ are given by :

$$v_{0,1} = \frac{1}{R_0^{l_0}\ R_1^{l_0}} \left(\frac{K_{in}}{l_0 K_{0,r}} \left(R_1^{2l_0} - R_0^{2l_0} \right) + R_0^{2l_0} + R_1^{2l_0} \right) \tag{6.21a}$$

$$w_{0,1} = -2 \tag{6.21b}$$

$$u_{i,1} = -2\ l_{i-1}\ \frac{K_{i-1,r}}{K_{i,r}} \left(\frac{R_i^{l_{i-1}} R_{i-1}^{l_{i-1}}}{R_i^{2l_{i-1}} - R_{i-1}^{2l_{i-1}}} \right) \tag{6.21c}$$

$$v_{i,1} = l_i - \ \frac{K_{i-1,r}}{K_{i,r}} l_{i-1} + 2\ \left(\frac{l_i R_i^{2l_i}}{R_{i+1}^{2l_i} - R_i^{2l_i}} + \frac{K_{i-1,r}}{K_{i,r}} \frac{l_{i-1} R_i^{2l_{i-1}}}{R_i^{2l_{i-1}} - R_{i-1}^{2l_{i-1}}} \right) \tag{6.21d}$$

$$w_{i,1} = -2\ l_i \frac{R_i^{l_i} R_{i+1}^{l_i}}{R_{i+1}^{2l_i} - R_i^{2l_i}} \tag{6.21e}$$

$$u_{N,1} = -2\ l_{N-1} \frac{K_{N-1,r}}{K_\infty} \frac{R_N^{l_{N-1}}\ R_{N-1}^{l_{N-1}}}{R_N^{2l_{N-1}} - R_{N-1}^{2l_{N-1}}} \tag{6.21f}$$

$$v_{N,1} = l_{N-1} \frac{K_{N-1,r}}{K_\infty} \frac{R_N^{2l_{N-1}} + R_{N-1}^{2l_{N-1}}}{R_N^{2l_{N-1}} - R_{N-1}^{2l_{N-1}}} + 1 \tag{6.21g}$$

Once the linear system (6.20) is solved, the head potentials in the heterogeneity h_{in} (Equation 10), in the N layers $h_{i\in[0,N]}$ (Equation 6.16), and in the infinite domain (Equation 6.14) are fully specified. The proposed analytical solution differs from previous publications in hydrogeology especially because the N layers surrounding the heterogeneity were considered anisotropic – the most related publication from (Kazarin et Obnosov, 2016) considered isotropic permeability. The same problem was also solved by Batool *et al.* (2020b), however, they were more interested by the equivalent permittivity (i.e. hydraulic conductivity) of the N layers system than the electric potential in the whole domain, while in the present study, the (head) potential is fully specified.

6.3.3 Flowrate through the different interfaces

Total flowrates Q_i^+ (exiting the ith layer through the interface I_{i+1} of radius $r = R_{i+1}$) and Q_i^- (entering the ith layer through interface I_i of radius $r = R_i$) [L^2.T-1] were derived to be compared to the numerically simulated ones, and were obtained by integrating the elementary flux $dF = \vec{v} \cdot \vec{n} dC$ between $\theta = -\pi/2$ and $\theta = \pi/2$. The following expressions were deduced,

depending on the considered interface :

$$Q_{in} = \left| \int_{-\pi/2}^{\pi/2} K_{in} \nabla h_{in}(R_0, \theta) \vec{r} R_0 d\theta \right| = 2A_{0,1} K_{in} \tag{6.22a}$$

$$Q_i^- = \left| \int_{-\pi/2}^{\pi/2} K_i \nabla h_i \left(R_i, \theta\right) \vec{r} R_i d\theta \right| = 2K_{i,r} l_i \left(\alpha_{i,1} R_i^{l_i} - \beta_{i,1} R_i^{-l_i} \right) \tag{6.22b}$$

$$Q_i^+ = \left| \int_{-\pi/2}^{\pi/2} K_i \nabla h_i \left(R_{i+1}, \theta\right) \vec{r} R_{i+1} d\theta \right| = 2K_{i,r} l_i \left(\alpha_{i,1} R_{i+1}^{l_i} - \beta_{i,1} R_{i+1}^{-l_i} \right) \tag{6.22c}$$

$$Q_\infty = \left| \int_{-\pi/2}^{\pi/2} K_\infty \nabla h_\infty \left(R_N, \theta\right) \vec{r} R_N d\theta \right| = 2K_\infty \left(2IR_N - A_{N,1}\right) \tag{6.22d}$$

With Q_{in} the flowrate in the heterogeneity and Q_∞ the total flowrate through the N layer system. Flux continuity between both side of the interfaces (Equation 6.5b) implied $Q_{in} = Q_0^-$, $Q_i^+ = Q_{i+1}^-$ and $Q_{N+1}^+ = Q_\infty$.

6.4 Validation of numerical simulations using the developed analytical solution

6.4.1 General approach

The previously developed analytical solution was used to validate numerical simulations carried out using PFLOTRAN subsurface flow and reactive transport code (Hammond *et al.*, 2012). As mentioned above, numerical simulations of flow around heterogeneities can be difficult to validate because of the anisotropic permeability tensor with off-diagonal component and the lack of experimental field data. Here, anisotropic full tensor permeability flow simulations were validated by comparing three different head and flowrate simulations (see below) with the analytical solution developed in this study. The three cases considered in this study were specifically chosen to represent particular configurations of increasing complexity with isotropic (case 1), anisotropic (case 2) and concentrically varying permeability conditions (case 3) around the heterogeneity. The two first cases aimed to validate the implementation of the full permeability tensor in PFLOTRAN considering 3 layers around the heterogeneity, and the third case aimed to investigate the influence of the number of layers used to discretize the zone of variable permeability on the simulated flowrates. In each case, the simulated and analytical heads and flowrates through the interfaces were compared, and a head error Δh_j was calculated at each mesh cell j as follow :

$$\Delta h_j = \frac{\left| \left(h_{\text{sim}}\right)_j - \left(h_{\text{th}}\right)_j - h_{\text{ref}} \right|}{\max\left(h_{\text{th}}\right) - \min\left(h_{\text{th}}\right)} \tag{6.23}$$

With h_{sim} and h_{th} the simulated and analytical head, respectively, and h_{ref} the head at the reference cell (i.e. the one containing the center of the heterogeneity). Comparison of the head error and the flowrates differences between analytical and numerical simulation, as well as comparison of these errors and differences between each case were the basis of the validation carried out in this paper.

Analytical flowrates were computed using equations (6.22), and heads using equations (6.10a), (6.14) and (6.16). Coefficients $A_{i,1}$ were obtained by solving equations system (20) using a python script and the library SciPy (Jones *et al.*, 2001). The python scripts are provided as supplementary material in the data repository at `https://doi.org/10.5281/zenodo.4047035`.

Numerical simulations were carried out with the code PFLOTRAN which uses the finite volume method to discretize the flow via the Richards equation and the TPFA method for the diffusion operator (Moukalled *et al.*, 2016). The computational mesh was generated using Salome open-source CAD software (Ribes et Caremoli, 2007). A total of 60,000 elements were generated with 43,200 concentrically oriented quadrilaterals surrounding the heterogeneity (120 layers in the radial and 360 in the tangential directions, with a cell area around 0.5 m^2) and triangles elsewhere. Accuracy of the TPFA method depends on the quality of the mesh which must be K-orthogonal, i.e. the permeability tensor product with each cell face normal should be aligned with the line defined by the two cells' centers (Heinemann *et al.*, 1991). Mesh quality was therefore assessed by computing the K-orthogonality error E_j for each mesh element j (Gunasekera *et al.*, 1997) :

$$E_j = \frac{\sum_{f\in\partial j} \left\| a_f^T \mathbf{K_j} - \frac{a_f^T \mathbf{K_j}\ r_f}{\left\|r_f\right\|^2}\ r_f^T \right\|}{\sum_{f\in\partial j} \left\| a_f^T \mathbf{K_j} \right\|} \tag{6.24}$$

With a_f^T the face area vector, $\boldsymbol{K}_j$ the hydraulic conductivity tensor and r_f the vector linking the two cell centers that shared the considered face f, and $f \in \partial j$ states for all faces of the considered cell j. K-orthogonality error ranges from zero (no error) to one.

Steady state conditions in absence of sources and sinks implied that fluxes integral on a closed surface were null, and thus flowrates entering and exiting each interface were equal. Therefore, simulated flowrates were calculated by summing the absolute value of the fluxes across the considered interface divided by two. Head distribution was directly outputted from PFLOTRAN simulations.

6.4.2 Case 1 : isotropic layers conductivity

The first case considered in this study was a 75 m radius circular heterogeneity in an infinite domain (Figure 6.3a). The conductivity of the heterogeneity and the infinite medium was considered homogeneous and isotropic with $K_{in} = 1\times10^{-5}$ m/s and $K_{inf} = 1\times10^{-7}$ m/s, respectively. Three layers (indexed from 0 to 2) were considered around the heterogeneity. Each layer had the same width (25 m) and interfaces I_0, I_1, I_2 and I_3 were located at radial distance r = 75, 100, 125 and 150 m from the center of the heterogeneity, respectively. The conductivity of the three layers 0, 1 and 2 was $K_0 = 1\times10^{-4}$, $K_1 = 1\times10^{-5}$ and $K_2 = 1\times10^{-3}$ m/s, respectively (Figure 6.3a). These hydraulic conductivities were especially chosen to create preferential flow paths in the layers and near the heterogeneity that can be predicted qualitatively. For example, a layer of higher hydraulic conductivity than the two adjacent ones (like layer 0) would create a flow oriented tangentially to the layer, else it would be radially oriented. A constant hydraulic gradient of 0.01 was applied. Simulated and analytical flowrates were compared at each interface and head error was calculated at each mesh cell.

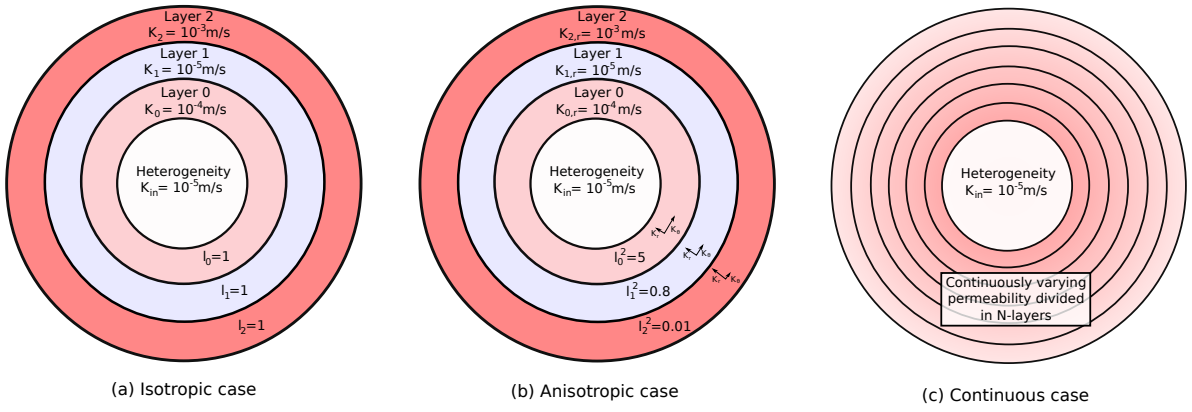


Figure 6.3 Conceptual models of the simulated cases : (a) Three layers case with isotropic conductivity, (b) three layers case with anisotropic conductivity and (c) radially anisotropic continuous conductivity distribution. K_x : hydraulic conductivity of the considered medium and l_x^2 : squared anisotropy ratio. Infinite medium hydraulic conductivity was $K_{inf} = 1\times10^{-7}$ m/s.

The presence of the heterogeneity and the three layers resulted in a local modification of the uniform flow and a diversion of the groundwater streamlines in the vicinity of the three layers and the heterogeneity (Figure 6.4a). Simulated and analytical streamlines were directed toward the heterogeneity which was more permeable than the surrounding infinite medium. Streamlines were either crossing or following (i.e. flowing around the heterogeneity) each of the three layers, depending on their respective conductivity. Head error (equation 6.23)

was non-symmetric, and always smaller than 1.8% (Figure 6.5a), which corresponded to an absolute head difference smaller than 40 cm for 20 m total head difference. Approximately 90% of the cells in the model showed a head error $\Delta h \leq 0.1\%$, mainly located in a diagonal crossing the simulation domain from the bottom left to the top right, and in the quadrilateral elements (located between dotted and solid circle on Figure 6.5) and in the heterogeneity. Head errors obtained in the heterogeneity were typically very low ($< 0.01\%$, i.e. absolute head difference < 2 mm). Greatest errors ($\Delta h \geq 0.6\%$) were observed at the upper boundary and where the boundary conditions were applied (red color in Figure 6.5a) which indicate that the computation domain in the numerical simulations might have been slightly too small.

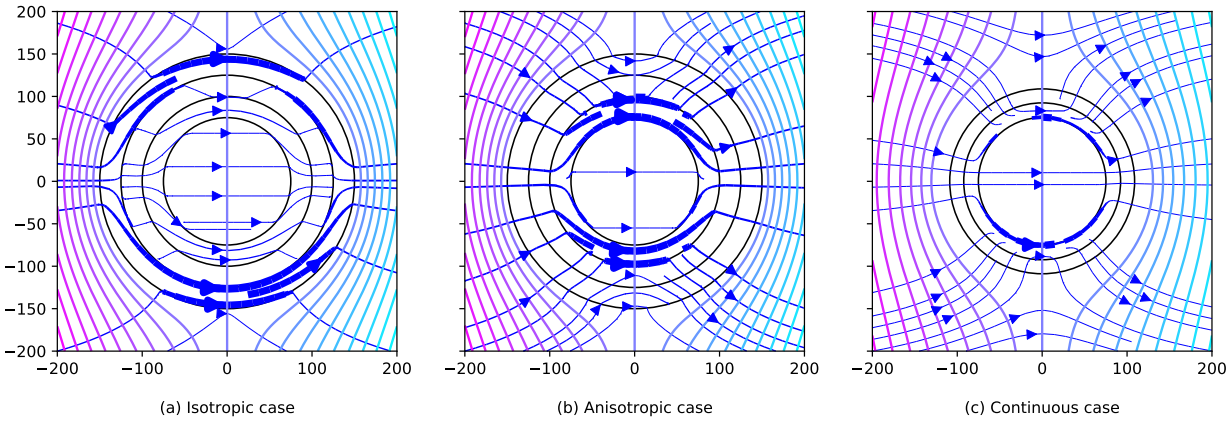
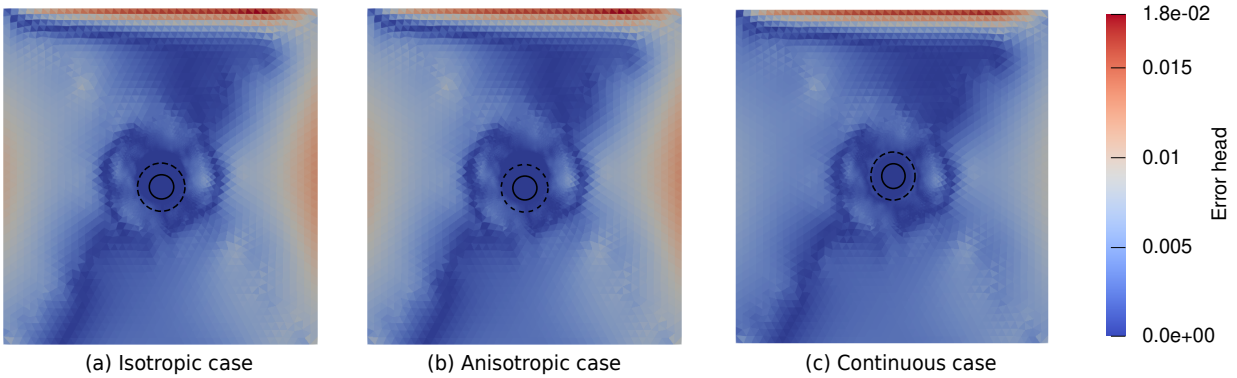


Figure 6.4 Analytically calculated streamlines (blue lines) and head contour (pink to turquoise lines) in the three simulated cases. Streamline thickness is related to the stream velocity (thick lines represent greater velocity). Black circles represent the different interfaces I_0 to I_3 for the two first cases (a and b) ; while they represent the heterogeneity (inner circle), the radius at which $l > 1$ (middle circle) and at $l \approx 0.2$ (outer circle) in the last case (c)

Errors between analytical and simulated heads across the different interfaces also resulted in some differences in the calculated flowrates. Inflow to layer 2 (through interface I_3) was approximately 19 m^2/y with the analytic solution (Equations 6.22) and 19.5 m^2/y with the numerical simulations (Table 1). As expected, streamlines mainly followed layers with greater hydraulic conductivity, and approximately 90% (i.e. 17 m^2/y and 17.5 m^2/y) of this flow remained in layer 2 and flowed around layer 1 (and the heterogeneity). The remaining 10% (i.e. 2.0 m^2/y) crossed interface I_2 to layer 1 which was two orders of magnitude less conductive than layer 2. From this, both analytic solution and simulations showed that almost 95% (i.e. 1.9 m^2/y) ran to layer 0 (which was 10 times more permeable than layer 1). Finally, flowrate entering the heterogeneity was estimated to approximately 0.5 m^2/y both using analytical and numerical approaches. Simulated flowrates through the three different interfaces were

therefore close to those evaluated using the analytical solution (Table 6.1). However, numerical simulations tended to overestimate the fluxes by around 3%. This error tended to increase with radial distance, from 2.8% at interface I_0 to 3.3% at interface I_3 (Table 6.1).



(a) Isotropic case (b) Anisotropic case (c) Continuous case

Figure 6.5 Error between simulated and the analytically computed heads (see Equation 6.23) for the three considered cases. The black inner circle represents the interface with the heterogeneity (interface I_0) and the outer dotted circle shows the interface with the infinite porous medium (interface I_3). Flow is oriented from the left to right with a 0.01 hydraulic gradient.

Tableau 6.1 Analytical and simulated flowrate through the different interfaces in Case 1 considering isotropic layer conductivity.

Interfaces	Flowrate calculated with analytical solution (m3/y/m)	Simulated flowrate (m3/y/m)	Difference
I_0	0.4636	0.4766	+2.8%
I_1	1.835	1.892	+3.1%
I_2	1.992	2.055	+3.1%
I_3	18.93	19.54	+3.3%

6.4.3 Case 2 : anisotropic conductivities

The second case was based on the same geometry as the first case, except that the three layers hydraulic conductivities were considered anisotropic (Figure 6.3b). Radial conductivity remained unchanged compared to the isotropic case, but different anisotropy ratios were introduced for each layer : $l_0^2 = 5$ for layer 0, $l_1^2 = 0.8$ for layer 1, and $l_2^2 = 0.01$ for layer 2 (Figure 6.3b). The objective of choosing different anisotropies was to validate the implementation of the full permeability tensor in PFLOTRAN. Other model properties, including

hydraulic conductivities of the heterogeneity and infinite medium, as well as hydraulic gradient at the boundaries, remained unchanged.

Heads and flowrates through each interface were calculated using both analytical solution (Equations 6.22) and numerical simulations with PFLOTRAN. The general hydrogeological behavior in the model was similar to Case 1. Anisotropic conductivity mainly modified head distribution and flowrates around and inside the three layers (Figure 6.4b). Head error in case 2 (Figure 6.5b) was very similar to those obtained in Case 1, with a maximum head error difference between those two cases of only 0.005% maximum for all mesh cells. Analytical flowrate through layer 2 was similar to those in Case 1, but its low tangential conductivity (100 times inferior to its radial conductivity) limited the tangential flow and streamlines were mainly directed toward layer 1 (Figure 6.4b). Consequently, approximately 95% of the flow entering layer 2 flowed into layer 1 (compared to 10% in case 1 ; Table 6.2). Conductivity ratio in layer 1 was smaller than 1 which promoted again radial flow over tangential flow. As a result, 95% of the flow entering layer 1 (17.3 m^2/y in the simulations and 18 m^2/y with analytical solution) flowed to layer 0, corresponding to a 5% increase compared to case 1. Finally, almost 6% of the flow entering in layer 0 flowed to the heterogeneity (approximately 1 m^2/y). The great tangential conductivity in layer 0 (5×10^{-4} m/s vs 1×10^{-4} m/S in Case 1) contributed to increase the diverted flow around the heterogeneity to almost 95% (compared to 75% in Case 1). Generally, simulated flowrates through the different interfaces were close to the analytical values, with differences lower than 3.5% (Table 6.2). Numerical simulations tended to slightly overestimate flowrates compared to the analytical solution, like in case 1, with a similar yet slightly increased error. The flowrate difference also tended to increase with the radial distance (from 3.0% at interface I_0, to 3.5% at interface I_3).

Tableau 6.2 Analytical and simulated flowrate through the different interfaces in Case 2 considering anisotropic layer conductivity.

Interfaces	Flowrate calculated with analytical solution (m3/y/m)	Simulated flowrate (m3/y/m)	Difference
I_0	1.044	1.075	+3.0%
I_1	17.35	17.94	+3.4%
I_2	17.93	18.54	+3.4%
I_3	18.88	19.54	+3.5%

6.4.4 Case 3 : radially anisotropic and continuous conductivity

A continuously varying anisotropic conductivity in the vicinity of the heterogeneity was considered in Case 3 (Figure 6.3c). The heterogeneity had the same radius as in Cases 1 and 2. Radial and tangential hydraulic conductivities decreased exponentially with the distance z to the heterogeneity and according to the following law $K = K_0 e^{-z/\lambda} + K_{\text{inf}}$ where the doublet (K_0,λ) equaled (10^{-3} m/s, 5 m^{-1}) for the radial and (10^{-2} m/s, 3 m^{-1}) for the tangential conductivity and K_{inf} the infinite medium conductivity. The squared anisotropy factor l^2 decreased from 10 at the interface with the heterogeneity, was nearly 1 at radial distance $r = 92$ m (middle circle on Figure 6.4c), and decreased to approximately 0.2 at radial distance $r = 108$ m (outer circle on Figure 6.4c) and then increased towards 1 at large distance from the heterogeneity (in practice, at radial distance $r = 150$ m). Hydraulic conductivities of the heterogeneity and of the infinite medium, as well as the hydraulic gradient at the boundaries were the same as in the two previous cases. The continuously varying conductivity was discretized in n layers (instead of only 3 in the two previous cases), each one with a constant conductivity equal to the conductivity at the center of the layer.

The change of conductivity around the heterogeneity modified the head distribution and streamlines around it (Figure 6.4c), but also slightly modified the head error (Figure 5c). For $n = 120$ layers, maximum head error was 1.7% (compared to 1.8% in other cases), but approximately 90% of the cells had an error $\Delta h \leq 0.1\%$, like in Cases 1 and 2. Great errors ($\Delta h \geq 0.5\%$) were still observed at the upper boundary of the domain, and where the boundary conditions were applied, but head errors at the left and right boundaries (0.8%) were smaller than in Cases 1 and 2 (1.2%), indicating less pronounced boundary effects. Lower errors ($\Delta h \leq 0.01\%$) were also found in the quadrilaterals (i.e. between solid and dotted circles in Figure 5c) and in the diagonal from the bottom left to the top right. A slight increase of head error at the outer quadrilateral elements was also observed (near the black dotted circle in Figure 5c). Overall, the head error pattern remained similar to those obtained in the two other cases.

Increasing the number of layers n in the vicinity of the heterogeneity allowed for a fine discretization of the continuously varying hydraulic conductivity and permitted the analytical solution to converge. Consequently, the analytically calculated flowrate stabilized as the number of layers increased with a value around 0.376 m^2/y for $n = 300$ layers (Figure 6.6). Increasing further the number of layers (up to 100 000) gave an analytical flowrate of approximately 0.375842 m^2/y, which was close to those obtained with only 300 layers. In other words, the number of layers required to reach the converged flowrate with an acceptable error ($< 1‰$) was reasonably small. Simulated flowrates were also calculated with

PFLOTRAN. Increasing the number of layers n (up to 300 layers) resulted in a decrease of the simulated flowrates toward 0.385 m^2/y (Figure 6.6). Difference between the simulated and analytically calculated flowrates varied quickly with a low number of layers, but tended towards a constant difference of approximately +2.2% for $n = 300$ layers and above. This difference was again comparable to, yet slightly lower than, the flowrate difference obtained in Cases 1 and 2 (+2.8% and 3% respectively).

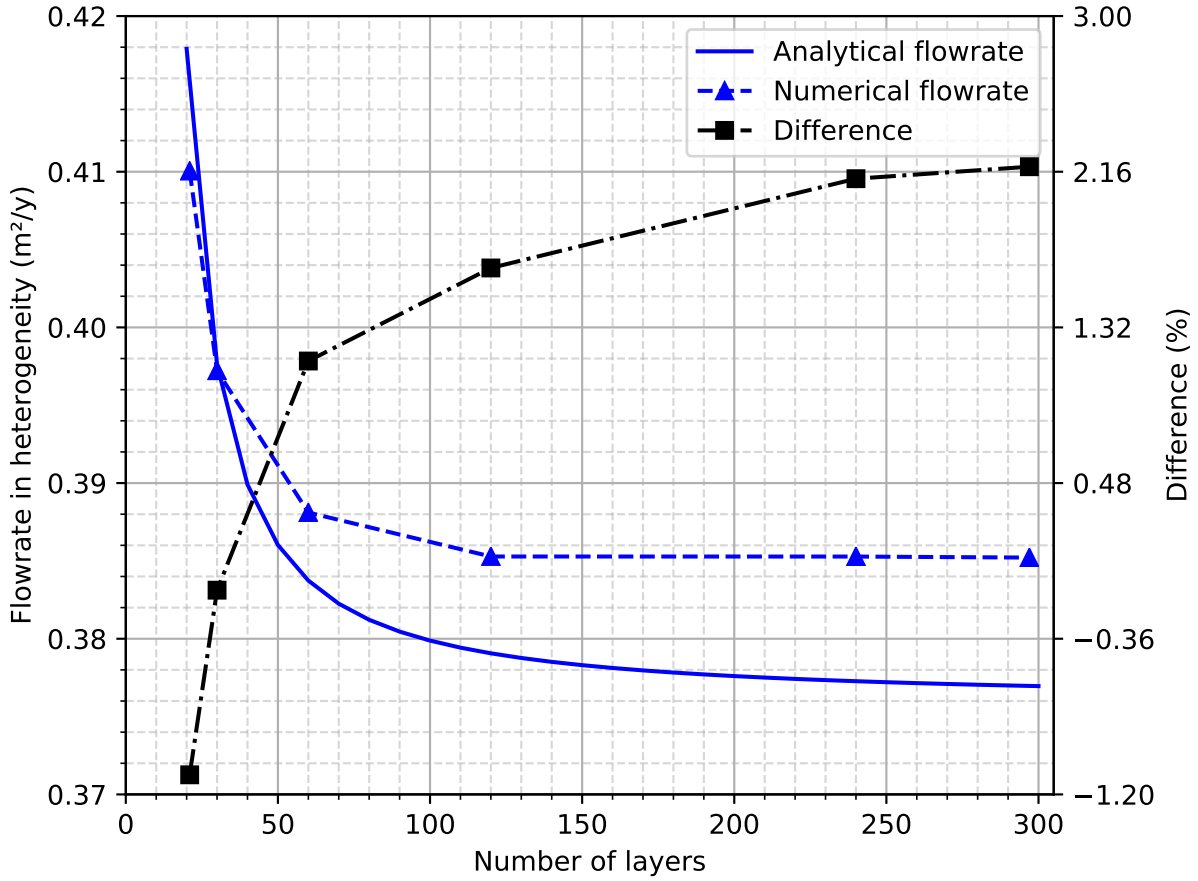


Figure 6.6 Simulated and analytical flowrates in the heterogeneity as a function of the number of layers used to discretize the continuous conductivity in the vicinity of the heterogeneity.

6.5 Validation of numerical simulation

6.5.1 Validation of PFLOTRAN flow simulation

Validation of PFLOTRAN full permeability tensor flow simulation was carried by comparing the head error and flowrate differences between Cases 1 and 2. Head error only differed by

less than 0.005% between the two cases. Also, the constant flowrates difference increase from Case 1 to Case 2 (+0.2% at each interface) was independent of the layer anisotropy (5 in layer 0, 0.8 in layer 1 and 0.01 in layer 3, see section 4.3). The differences between simulated and analytical error appeared therefore to be mainly caused by the model construction, and not by the anisotropy. Consequently, these two observations showed that the full tensor flow implementation in PFLOTRAN is correct and did not introduce a significant error in the numerical solution. Case 3 also showed that the increase of the number of layers used to discretize the zone of continuously varying conductivity resulted in a stabilization of both the simulated and the analytically calculated flowrates. The flowrate difference calculated at the heterogeneity (+2.2%) was comparable to the two other cases (+2.8% for case 1 and +3.0% for case 2), and the head error was similar to those obtained in the two other cases. Additional simulations (results not shown here) were carried out with the same setup as case 3, using random values for the two doublets ($K_{0,t}$,λ_t) and ($K_{0,r}$,λ_r) and for the heterogeneity and the infinite domain hydraulic conductivities K_{in} and K_{∞}. Results also showed a 2% mean error on the flowrate. However, some of the simulations sometimes resulted in a significantly greater error (up to 50% in a few rare cases), especially when the product $K_{0,t}\lambda_t$ was greater than 1×10^{-3} m^2/s. These errors were caused by a too small number of layers around the heterogeneity in the numerical simulations (120 layers), and increasing the number of layer in these cases (up to 300) decreased the error to less than 2% as for the other cases. This therefore indicates that PFLOTRAN code did not introduce significant errors when simulating flow using a full-permeability tensor and in continuously varying conductivity distribution around a circular interface.

6.5.2 K-orthogonality error

For the three simulations carried out in this study, the head error had approximately the same distribution and the same maximal error. These similarities in head error could be explained by a common source of error that could arise from the spatial discretization and the mesh K-orthogonality requirements. In absence of correction, the non-respect of the K-orthogonality condition could lead to discretization error in the diffusion term, and therefore greater solution errors (Jasak, 1996; Moukalled *et al.*, 2016). The K-orthogonality error computed on the mesh used in this study (Figure 6.7 ; Equation 6.24) was non-symmetric, and ranged from a negligible value inside the quadrilaterals (between solid and dotted circles in Figure 6.7) to 33% on the upper boundary of the domain. Quadrilateral element used to discretize the layers tended to have a very low K-orthogonality error, with approximately 99.9% of them having an error $E \approx 0.5\%$ (Equation Equation 6.24), while triangular element in the rest of the domain had a much higher error with approximately 75% of the triangle having an error $E \geq 5\%$. Cells

with high K-orthogonality error were located near the upper boundary of the domain, at its center, and around the two diagonals. In general, locations where high K-orthogonality error was observed corresponded somehow to high variation of the head error. For example, high variation of the head error was located at the upper boundary of the domain where the head error went from below 0.5% to 1.8% over 10 elements with a K-orthogonality error $E \geq 20\%$. The K orthogonality error could thus be responsible for the differences observed between the simulated and the analytical head, and could explain why the head error was non-symmetric. Nevertheless, the non-respect of the K-orthogonality condition did not introduce significant errors in the head solution, since a 33% orthogonality error led to less than 2% error on the head. The error observed in flowrates could also result partially from the head error as the head distribution was used to compute the hydraulic gradient across the considered interfaces. By extension, the non-respect of the K-orthogonality conditions which could be responsible of the head error, could also induce some of flowrates errors. Similar errors on heads and flowrates were reported in the literature with non-orthogonal mesh, and in these cases the flowrate error could reach 20% to 50% for highly deviated mesh (Antonio *et al.*, 2013; Wu et Parashkevov, 2005). Finally, other sources of error could also have an influence on the difference in flowrate and head error, such as mesh element size or mesh skewness for example (Jasak, 1996). These other sources of error were not investigated in this study though.

6.5.3 Discussion

In this study, the ability of the PFLOTRAN finite volume code to simulate flow in a circular heterogeneity surrounded by an arbitrary number of layers with radially and tangentially anisotropic conductivities was validated based on the fact the error between the analytical and the simulated flowrate and head distribution remained approximately the same when considering an isotropic permeability problem and an anisotropic with a full permeability tensor problem. However, a rigorous validation would also have needed that the error remained negligible for the various simulated cases. This would have required a perfectly orthogonal mesh, such as a Centroidal Voronoi Tesselation (CVT) of the computational domain outside the layer (Gärtner et Kamenski, 2019) which was difficult to obtain. Actually, meshing tools were made available only recently (e.g. Abdelkader *et al.*, 2020) and were not used in this study. Nevertheless, the error obtained in the three simulations remained limited compared to other typical errors observed in hydrogeological modeling such as the uncertainty of the model input (e.g. Nilsson *et al.*, 2007), and also showed that a perfect mesh for TPFA code is not necessarily needed to carry out flow simulations. Finally, the validation of the full tensor

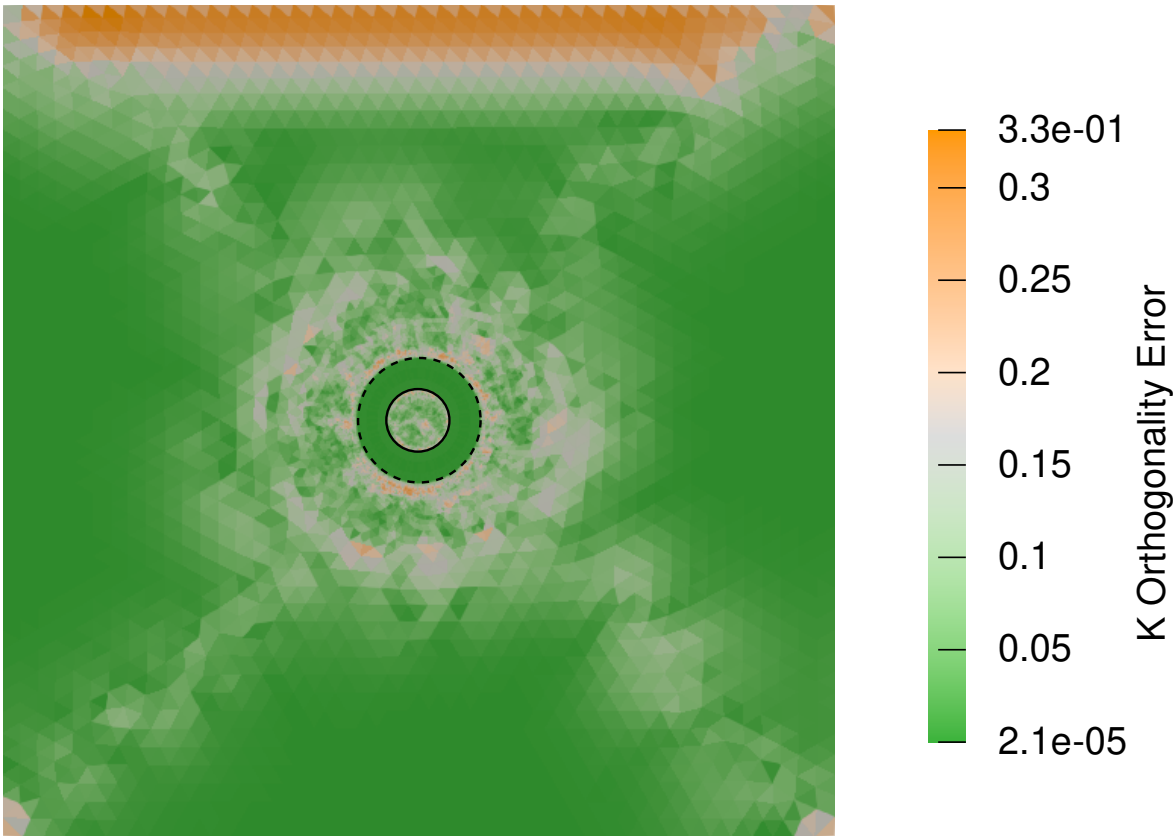


Figure 6.7 Mesh K-orthogonality error (Equation 6.24). The black inner circle represents the interface with the heterogeneity (interface I_0) and the outer dotted circle shows the interface with the infinite porous medium (interface I_3).

implementation was only carried in 2D in this study, and further validation would be needed for 3D applications.

6.6 Summary and conclusion

Closed form solutions for head distribution and groundwater flowrates though circular interfaces were obtained for a system of N radially anisotropic layers surrounding a heterogeneity and submitted to a uniform flow at infinity. These solutions were obtained using real analysis only and by solving the anisotropic Laplace flow equation (6.3) in cylindrical coordinates in the different regions (the heterogeneity, the layers and the infinite medium) using Fourier series. Head and flux continuity expressed at each interface led to develop a linear system of equations (Equation 6.20) which can be solved using forward elimination and backward sub-

stitution method for example to obtain the Fourier coefficient of each interface head function, and thus fully specified the solutions.

Analytical head and flowrates were afterward compared to numerical simulations using the finite volume code PFLOTRAN with a modified implementation of the anisotropic permeability calculation available in the development version. Analytical and simulated flowrates through the different interfaces were consistent and differed of maximum 3.5%, while the maximal error on the head was 1.8%. These errors could arise from discretization error introduced by the mesh and the non-respect of the K-orthogonality condition at certain elements, and by some boundary effects. This study proved the ability of the code PFLOTRAN and the finite volume method with the TPFA approximation to simulate the flow considering a continuously varying anisotropic permeability with off diagonal component.

Finally, the developed analytical expression could also be used to quantify the influence of a two-dimensional blast damage around a circular excavation, such as idealized backfilled pit in mining. The blast damage zone could be modeled as an equivalent porous medium, and therefore forming a continuously varying permeability around a heterogeneity as the third example validation case presented here. Validation of the PFLOTRAN code also allows for simulating flow in more complex geometry including three-dimensional models to further assess the influence of the blast damage zone in real shaped open-pit backfilled with hazardous waste.

6.7 Appendix A : General solution to the anisotropic Laplace equation

Anisotropic Laplace equation (6.3) was solved for the head h using variable separation method, i.e. $h(r,\theta) = R(r)\Theta(\theta)$, to led to :

$$\frac{K_r}{K_\theta}\frac{r^2R''(r) + rR'(r)}{R(r)} = -\frac{\Theta''(\theta)}{\Theta(\theta)} \tag{6.25}$$

The left and right-hand sides in equation (6.25) were function of two independent variables (i.e. radial distance r at the left and the angular coordinate θ at the right). The equation could be satisfied only if these two sides were constant. Moreover, in this study, a cylindrical coordinate system was used, and so a θ-periodic solution was expected, which implied that the two constant sides needed to be positive. This constant was noted k^2 with $k \in \mathbb{R}$. Two

ordinary differential equations (ODE) were thus obtained :

$$r^2 R_k''(r) + r R_k'(r) - \frac{K_\theta}{K_r} k^2 R_k(r) = 0 \tag{6.26a}$$

$$\Theta''(\theta) + k^2 \Theta(\theta) = 0 \tag{6.26b}$$

Solving these two ODEs led to :

$$R_k(r) = \alpha_k r^{lk} + \beta_k r^{-lk} \tag{6.27a}$$

$$\Theta_k(\theta) = \gamma_k \cos k\theta + \delta_k \sin k\theta \tag{6.27b}$$

With α_k, β_k, γ_k, δ_k four integration constant and $l = \sqrt{K_\theta / K_r}$. The head h was necessarily single valued, i.e. the head was unique at one given point in the domain, which implied that the $\Theta(\theta)$ function was 2π periodic and thus $k \in \mathbb{N}$. Moreover, $h(r, \theta) = h(r, -\theta)$, because head gradient was considered parallel to $\theta = 0$ line, which indicated a symmetry along this line. As a consequence, $\delta_k = 0$. Using the superposition principle, any linear combination of $R_k(r)\Theta_k(\theta)$ for $k \in \mathbb{N}$ were also solution to equation (6.3), giving a general solution to equation (6.3) :

$$h(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\alpha_n r^{ln} + \beta_n r^{-ln} \right) \cos n\theta \tag{6.28}$$

Data availability

Python scripts used to realize analytical computations as well as PFLOTRAN simulation input files are provided in the following repository : `https://doi.org/10.5281/zenodo.4047035`.

CHAPITRE 7 ARTICLE 3 : BLAST DAMAGE ZONE INFLUENCE ON GROUNDWATER FLUXES THROUGH BACKFILLED OPEN-PITS

Par Moïse Rousseau et Thomas Pabst

Article soumis dans la revue *Canadian Geotechnical Journal*

Abstract

Backfilling mine wastes in open-pits permits to overcome many problems associated with above ground disposal facilities, such as the elimination of potential release of solid in the environment, better site aesthetics at closure and a better social acceptance, for example. However, interactions between the groundwater and the backfilled wastes disposed below the water table can contribute to disperse in the environment contaminants contained in the wastes. The risks can even increase when considering the potential impact of the Blast Damage Zone (BDZ) resulting from blast operations and excavation of the pit and which contains new fractures that could influence the groundwater flow near the pit. The objective of this research was therefore to assess the influence of the BDZ on the flowrate through the backfilled wastes. A conceptual model of the BDZ was proposed with circular fractures of constant size and aperture, locally sub-parallel to the pit wall and with a decreasing density with the distance to the excavation. Model parameters were derived from the literature. A stochastic parametric analysis was then carried out to assess the influence of BDZ model parameters on the flowrate. A total of 16 500 numerical simulations were conducted for 11 different conic pits. The results of this study showed that the BDZ generally contributes to reduce the groundwater flow through backfilled tailings (by up to 3 orders of magnitude), while it can contribute to increase it considering backfilled waste rocks (up to 250% more). In practice, high power blasts which result in thick and heavily fractured BDZ would tend to create strong perturbations of the flow in the surroundings of the backfilled pit, especially when the pit is small. These perturbations can be desirable to achieve hydraulic insulation of backfilled tailings (natural pervious envelope). But in the case of backfilled waste rocks, this could contribute to significantly increase the flow in the backfilled wastes. In other words, low energy blasts may be recommended if the plan is to backfill waste rocks at the end of the operations.

7.1 Introduction

Mining operations generate large quantities of solid wastes whose storage is a major challenge for the industry (Aubertin *et al.*, 2002, 2016). Tailings and waste rocks, which are the two types of wastes, are usually disposed of in surface facilities in impoundments (for tailings) or pile (for waste rocks). Surface disposal of mine wastes present high risks of geotechnical instabilities and contaminant release in the environment (Aubertin *et al.*, 2002; Plante *et al.*, 2008; Azam et Li, 2010; Roche *et al.*, 2017). Pit backfilling constitutes an alternative disposal approach to conventional waste storage facilities which benefits from many advantages, including the elimination of the risk of accidental release of mine wastes in the environment, the reclamation of pit lake with a poor water quality, the reduction of long-term maintenance, the stabilization of pit walls, an improved social acceptability and better site aesthetics at closure (McCullough *et al.*, 2013; MEND, 2015; Newman *et al.*, 2020). Once backfilled and covered by water (i.e. pit lake), mine wastes are in theory isolated from the atmosphere. However, interactions with the surrounding rock are expected to occur. For example, regional groundwater could flow in the pit and through the wastes, and contribute to the dispersion of potentially contaminated water in the environment with large concentrations of sulfate, chloride and ammonia from process water (Allen, 2008), or from the solubilization of wastes mineral containing heavy metal, metalloid or rare earth elements for example (Moldovan *et al.*, 2008; Othmani *et al.*, 2013; Tomy *et al.*, 2020; Yin *et al.*, 2021). Also, the influx of dissolved oxygen or ferric ions from regional groundwater could contribute to start or to pursuit the generation of acid mine drainage (AMD) if the backfilled wastes contain sulfides (Santofimia *et al.*, 2013; Blowes *et al.*, 2014; Barfoud *et al.*, 2019).

Several previous studies quantitatively addressed the problem of flow and contaminant transport between the backfilled wastes and the environment (Misfeldt *et al.*, 1999; Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Thériault, 2004; Moldovan *et al.*, 2008; Rousseau et Pabst, 2018). In particular, they showed that the addition of a containment structure within the pit (i.e. a layer of material along the pit wall for example), or sometimes the surrounding rock if permeable enough, can reduce the flowrate through the disposed wastes by more than 90%, therefore reducing the overall solute release rate of contaminants contained in the wastes' pore water. These studies usually considered the rock mass surrounding the pit as a homogeneous material with constant properties. However, if this hypothesis is often acceptable at some distances of the pit, the modification of the rock properties near the excavation can significantly influence water and solute transport (Stacey *et al.*, 2003; Foster *et al.*, 2018). In particular, blasting operations usually result in the creation of new fractures and the extension of existing discontinuities in the rock by the penetration of explosive gases (Beale et

Read, 2014). The extent of the disturbed rock is called the "blast damage zone" (BDZ), and in the case of large uncontrolled blasts, this zone can extend to as much as 100 m beyond the blasting hole (Hoek et Karzulovic, 2000). BDZ fractures can sometimes develop connected networks as suggested by field observations (Morth *et al.*, 1972; MEND, 2015), thus increasing the rock permeability near the pit. The influence of this permeability increase on the groundwater flow near the wastes was not yet studied, while it can provide the required permeability increase to create a containment structure, for example.

The objective of this study was therefore to quantitatively assess the influence of the BDZ on groundwater flow in backfilled open-pits. A conceptual model of the BDZ fractures network was first developed and used to derive the equivalent conductivity of the BDZ based on the equivalent porous medium model and the percolation theory. The influence of the permeability increase in the BDZ was then assessed using 3D numerical simulations, and the flowrate in the backfilled wastes was compared to the case neglecting the BDZ. A stochastic parametric analysis was realized to assess the influence of the different BDZ parameters and of the pit shape on the flowrate though the backfill, with a total of 16500 numerical simulations carried out with 11 different pit geometries and in two different scenarios (pit backfilled with tailings or waste rock). The link between the blast condition and the BDZ influence on the flow was finally analyzed, and the limitations of the study were addressed at the end the paper.

7.2 Methodology

7.2.1 Blast damage zone (BDZ) model

Conceptual model

Fracture networks are generally characterized by fractures density, size, aperture and orientation distributions. In this study, fractures were defined as two parallel disks of constant radius noted R [L] and separated by a constant aperture noted b [L] (the parallel plane model ; (Snow, 1965)). Fracture orientations were considered anisotropic and locally sub-parallel to the pit walls, with a random distribution around the wall tangent plane pole, described using a Fisher distribution of parameter κ (Mourzenko *et al.*, 2012) :

$$F(\theta) = \frac{\kappa \sin\theta}{2\sinh\theta} e^{\kappa\cos\theta} \tag{7.1}$$

With $0 \leq \theta \leq \pi$ the angle between the fracture normal and the pit wall tangent pole. $F(\theta)d\theta$ represents in practice the number of fractures whose normal lies in the range $[\theta, \theta + d\theta]$.

Isotropic orientation of fractures could also be considered using the above distribution by assuming $\kappa \to 0$.

BDZ fracture density is usually heterogenous and decreases with the distance from the pit wall (Poulsen *et al.*, 2017). The density distance relation was thus expressed according to an exponential distribution law as follow (adapted from Mourzenko *et al.*, 2011b, 2012) :

$$\rho(z) = \frac{4B_{21}}{\pi^2 R^2 \phi_c(\kappa, l_0/R)} e^{-z/l_0} \tag{7.2}$$

With $\rho(z)$ the fracture density [L^{-3}] at distance z from the pit wall [L], B_{21} the cumulative trace length of blast fractures per unit surface [L^{-1}], which corresponds to the total length of blast fractures divided by the pit wall surface area (Tuckey, 2012; Tuckey et Stead, 2016), l_0 the fracture attenuation length which characterizes the thickness of the damage zone [L] and ϕ_c a function accounting for the fracture orientation anisotropy. The form of equation 1 was tested both experimentally (for example for excavated damaged zones around tunnels ; Thovert *et al.*, 2011; Mourzenko *et al.*, 2012), and numerically (especially for blast energy propagation ; Siamaki *et al.*, 2018).

Equivalent permeability calculation

The flow in the rock and the BDZ was modeled using the equivalent porous medium model, and the equivalent permeabilities k_{eq} [L^2] of the fractured pit wall were defined as the sum of the permeability of the equivalent BDZ fracture network k_f and of the rock k_r (i.e. $k_{eq} = k_f + k_r$). The equivalent permeability of the BDZ was derived using the percolation theory (Stauffer et Aharony, 1992), which statistically relates the macroscopic permeability and connectivity of fracture networks to a density parameter of the global network (e.g. Davy *et al.*, 2006). Flow is possible when the fracture network is connected enough, i.e. when the percolation parameter is above a certain threshold. Percolation theory was for example used to estimate the equivalent conductivity of fractured rock formation at field scale (Malinouskaya *et al.*, 2014) or around excavations (Alkan, 2009). In the present study, the BDZ fracture network equivalent permeability k_{eq} was calculated as follow (Mourzenko *et al.*, 2012) :

$$l_0' = \frac{l_0}{R} \tag{7.3a}$$

$$\rho'(z) = \pi^2 R^3 \Phi(\kappa, l_0') \rho(z) \tag{7.3b}$$

$$k_f = \frac{b^3}{12R} k_f' \tag{7.3c}$$

with $\rho'(z)$ and k'_f the dimensionless density and permeability of the fractures network [-], and $\Phi(\kappa, l'_0)$ a correcting function accounting for anisotropic fracture orientation (see below). The dimensionless equivalent permeability of the BDZ is given by the following relationship (Mourzenko *et al.*, 2005) :

$$k'_f(\kappa, \rho', l'_0) = \frac{\hat{k_f}'(\rho')}{\Phi(\kappa, l'_0)} \begin{pmatrix} \psi_\perp & 0 & 0 \\ 0 & \psi_\perp & 0 \\ 0 & 0 & \psi_\parallel \end{pmatrix} \tag{7.4}$$

where $\hat{k_f}'(\rho')$ is the dimensionless equivalent permeability of the same but isotropic fracture network (i.e. when $\kappa \to 0$ which was approximated by the following heuristic model (Mourzenko *et al.*, 2011a) :

$$\hat{k_f}'(\rho') = \frac{\alpha(\rho' - \rho'_c)^2}{1 + \beta(\rho' - \rho'_c)} \tag{7.5}$$

With $\alpha = 0.0370$, $\beta = 0.155$ (Mourzenko *et al.*, 2011a) and ρ'_c the dimensionless fracture density at percolation threshold [-]. Percolation threshold is defined statistically as the density at which the probability that the fracture network is connected is at least of 50%. For circular fracture $\rho'_c = 2.4$ (Mourzenko *et al.*, 2005).

Matrix components $\psi_\perp$and $\psi_\parallel$ in equation (4) are given by the following relation (Mourzenko *et al.*, 2011b) :

$$\psi_\perp = \frac{3}{2}\left(1 + \frac{1 - \kappa \coth \kappa}{\kappa^2}\right) \tag{7.6a}$$

$$\psi_\parallel = \frac{3}{\kappa^2}\left(\kappa \coth \kappa - 1\right) \tag{7.6b}$$

$\psi_\perp$ and $\psi_\parallel$ account respectively for the tangential and radial permeability of the BDZ fractures network (i.e. in the direction parallel and perpendicular to pit wall) but for homogeneous (constant density) fracture network. In this study, they were also considered valid for heterogenous networks such as for the BDZ model used (this hypothesis is discussed in detail below).

Finally, the $\Phi(\kappa, l'_0)$ correcting function cannot be expressed analytically, but a good fit for heterogenous anisotropic network (such as a BDZ with varying fracture density and fractures preferentially oriented parallel to the pit wall) is provided by the following function

(Mourzenko *et al.*, 2011b, 2012) :

$$\Phi(\kappa \gg 1, l_0') \approx \Phi(\kappa, \infty) \left(\frac{\psi_c(\kappa, l_0')}{\psi_c(\kappa, \infty)} \right)^2 \tag{7.7a}$$

$$\Phi(\kappa, \infty) = \frac{2}{\sinh^2 \kappa} \left[I_0(2\kappa) - \frac{1}{\kappa} I_1(2\kappa) \right] \tag{7.7b}$$

$$\psi_c(\kappa, \infty) = \frac{2}{\sinh \kappa} I_1(\kappa) \tag{7.7c}$$

$$\psi_c(\kappa, l_0') = \frac{2\kappa}{E \sinh^2 \kappa} \left[I_1\left(\frac{E+\kappa}{2}\right) I_0\left(\frac{E-\kappa}{2}\right) + I_0\left(\frac{E+\kappa}{2}\right) I_1\left(\frac{E-\kappa}{2}\right) \right] \tag{7.7d}$$

Where I_0 and I_1 are the modified Bessel functions.

7.2.2 Stochastic sensitivity analysis

The stochastic sensitivity analysis carried out in this study aimed at evaluating the impact of BDZ model parameters (i.e. the attenuation length l_0, the trace length per unit area B_{21} and the fracture aperture b, anisotropy κ and radius R) on the flowrate through the pit wall considering two backfill scenarios. In the first scenario, the pit was considered backfilled with tailings and in the second scenario with waste rocks. Saturated hydraulic conductivity of the tailings and waste rocks were considered lying between $K_w = 1{\times}10^{-7}$ and $1{\times}10^{-5}$ m/s, and between $K_w = 1{\times}10^{-4}$ and $1{\times}10^{-2}$ m/s respectively (Table 7.1 ; Bussière, 2007). Both scenarios considered a low permeable surrounding rock with a hydraulic conductivity between $K_r = 1{\times}10^{-8}$ and $1{\times}10^{-6}$ m/s.

A total of 11 different conic pits were considered, and were characterized by their top radius R_p (i.e. the radius of the pit at the surface), their top radius to pit depth ratio R_p/d and by their wall slope. Top radius ranged between 50 and 300 m, depth ratio between 0.3 and 0.8 (i.e. from 40 to approximately 205 m depth) and slope between 1 :1 and 3 :1 (i.e. a slope angle between 45° and 72° ; Wyllie *et al.*, 2004). The properties were representative of real pit geometries, yet small. In all cases, the pits were considered fully backfilled (i.e. to the surface).

BDZ model parameters in the stochastic analysis were selected to consider a broad, yet realistic, range of configurations (Table 1). In particular, BDZ trace length B_{21} per unit area was between 0.1 and 20 m^{-1}, which corresponded to an almost not fracture pit wall to a highly fractured wall respectively, BDZ attenuation length l_0 varied from 1 to 10 m to simulate thin to thick BDZ, fracture radius and aperture was comprised between 0.1 and 5 m and between 10 and 250 µm, respectively and the concentration parameter κ was chosen between 0.1 and 100 to correspond to an anisotropy factor between 1 and 50 (i.e. an isotropic fracture network

and an anisotropic fracture network with tangential permeability 50 times greater than radial permeability) with nearly 50% of them having a anisotropy factor above 2. BDZ parameters used in this parametric analysis were chosen based on the literature (Worsey, 1981; Hoek et Karzulovic, 2000; Lupogo *et al.*, 2014; Ishibashi *et al.*, 2015; Tuckey et Stead, 2016) and their representativeness is discussed below. BDZ properties were also considered homogeneous all along the pit walls.

Model parameters for the stochastic sensitivity analysis (wastes and rock hydraulic conductivities and BDZ parameters) were sampled randomly in the selected interval (Table 1) using the Latin Hypercube Sampling method. This approach had the advantage of capturing the interactions between the different BDZ model parameters compared to a One-Factor-at-a-Time (OFAT) approach where one parameter is changed at a time while others are kept constant (Czitrom, 1999). Also, the entire parameter space is tested, therefore accounting for all parameters and uncertainties at once. A total of 750 model parameters (BDZ and hydraulic conductivities) per scenario were generated (Table 7.1) for each of the 11 conic pits, leading to a total of 16500 cases to simulate (750 samples $\times$ 11 pits $\times$ 2 scenarios).

For each simulation, the Diverted Flow Index (DFI) was determined to quantify and compare the volume of water entering the backfilled wastes in steady state conditions when considering the BDZ compared to a reference simulation where the BDZ was neglected :

$$\mathrm{DFI} = 1 - \frac{Q_{with}}{Q_{without}} \tag{7.8}$$

Tableau 7.1 Parameters used and number of simulations carried out in the sensitivity analysis for each of the 11 conic pits modeled.

Parameters	Waste rock scenario	Tailings scenario
Wastes hydraulic conductivity K_w (m/s)	1×10^{-4} to 1×10^{-2}	1×10^{-7} to 1×10^{-5}
Rock hydraulic conductivity K_r (m/s)	1×10^{-8} to 1×10^{-6}	1×10^{-8} to 1×10^{-6}
Trace length per unit area B_{21} (m^{-1})	0.1 to 20	
Attenuation length l_0 (m)	1 to 10	
Fracture radius R (m)	0.1 to 5	
Aperture b (µm)	50 to 250	
Concentration parameter κ	0.01 to 100 (in logarithm space)	
Number of samples (per scenario and pit)	750	

With Q_{with} the flowrate entering the pit considering the BDZ and $Q_{without}$ the flowrate in the hypothetical case without a BDZ. A positive DFI indicates that the BDZ diverts groundwater from the backfilled materials, while a negative DFI indicates that the BDZ contributes to increase the volume of water which enters the pit.

7.2.3 Numerical model

Calculation of the DFI required the flowrate in the different 3D pit geometries in the two cases where the BDZ was considered and neglected and for which no analytical solutions exist. Therefore, numerical models were used to simulate the groundwater flow and calculate the different flowrates through the backfilled wastes to assess the DFI. Model geometry and meshing were created using Salome open source software (Ribes et Caremoli, 2007) and numerical simulations were carried out with the open-source subsurface flow modeling code PFLOTRAN (Hammond *et al.*, 2012). PFLOTRAN solves the groundwater flow using the Richards equation (even if fully saturated condition were considered in this study) discretized using the finite volume method and the Two Point Flux Approximation (TPFA). However, accuracy of the TPFA method on anisotropic media depends on the quality of the mesh which is required to be K-orthogonal (Heinemann *et al.*, 1991). In other words, the permeability tensor product with face normal should be aligned with the line defined by the two cells' centers. Therefore, mesh in the BDZ was composed of radially oriented 0.5 m width hexahedron on a distance of 50 m in the direction normal to the pit wall (on which 99% of the simulated BDZ had their permeability increase in) to respect the K-orthogonality condition. For such meshes, PFLOTRAN was proven to handle the permeability anisotropy and to simulate correctly the groundwater flow (Rousseau et Pabst, 2021a). The rest of the domain (pit and intact regional rock) was discretized using prisms and hexahedrons. Approximately 300 000 control volumes were generated for each of the 11 pit numerical models. Simulations were carried in steady state mode and considering fully saturated conditions. Flow at infinity (i.e. at the boundary of the simulated domain in practice) was considered undisturbed by the backfilled pit and submitted to a uniform gradient of 0.01. Simulated domain included a cylindrical volume around the pit of 1000 m radius and 750 m depth and selected so that the boundary conditions applied did not have an influence on the simulation results. Permeability in the BDZ was assigned on a cell-per-cell basis and was computed at the center of the cell.

7.3 Results

7.3.1 General BDZ influence on flow in backfilled pits

The general BDZ influence on the flowrate through backfilled pits was first assessed by comparing the relative increase or decrease of the flowrate (i.e. the DFI) in backfilled tailings and waste rocks (Figure 7.1). Most of the time, the BDZ generally contributed to increase the flowrate in the pit when backfilled with waste rock (DFI $\leq$ 0), while it contributed to decrease the flowrate in the pit when it was backfilled with tailings (DFI $\geq$ 0).

In the tailings scenario (i.e. when the pit was backfilled with tailings ; red histograms and red dotted line in Figure 7.1), the lowest simulated DFI was approximately -0.6 (which corresponded to an increase of the flowrate in the backfilled pit by 60%), while the maximum simulated DFI exceeded 0.999 (which corresponded to a decrease of the flowrate by more than 3 orders of magnitude). In particular, the BDZ contributed to increase the flow in the backfilled tailings in approximately 10% of the simulated cases. However, in 80% of these cases (corresponding to 8% of all simulations), the flowrate increase was less than 10% (i.e. 0.1 $<$ DFI $<$ 0) which was considered negligible. A significant increase of the flowrate (DFI $<$ -0.1) was observed in only 2% of the cases. To the contrary, the BDZ contributed to decrease the flowrate in the backfilled wastes (DFI $>$ 0) in nearly 90% of the simulated cases, whose 60% significantly (DFI $>$ 0.1), and even contributed to reduce the flowrate by more than 70% in 20% of the cases. In other words, the BDZ influence on the flow can be significant when the pit is backfilled with tailings, and in most of the simulated cases, it contributed to decrease the groundwater flowrate in the pit.

In the waste rock scenario (i.e. when the pit is backfilled with waste rocks, which are typically more permeable than the intact rock), the minimum and maximum DFI were respectively -2.5 and 0.82, corresponding to an increase and a decrease of the flowrate in backfilled waste rocks of 250% and 80%, respectively (blue histograms and blue dotted line in Figure 2). In more than 96% of the simulated cases, the DFI was negative, indicating that the BDZ generally contributed to increase the flowrate in the backfilled waste rocks. This increase was often significant, with nearly 60% of the cases showing a DFI $<$ -0.1, with 1% having a DFI $<$ -2. The BDZ contributed to decrease the flowrate in less than 4% of the cases, and in nearly 80% of these cases, the DFI was between 0 and 0.1, indicated that the reduction of flowrate in the backfilled pit was in fact negligible. In conclusion, the BDZ almost always contributed (often significantly) to increase the flowrate in pits backfilled with waste rock.

The general influence of the BDZ on the groundwater flow depicted in this section was done without consideration of the BDZ parameter and the pit size which can impact its influence. Their influence was therefore analyzed in detail for each scenario in the sections below.

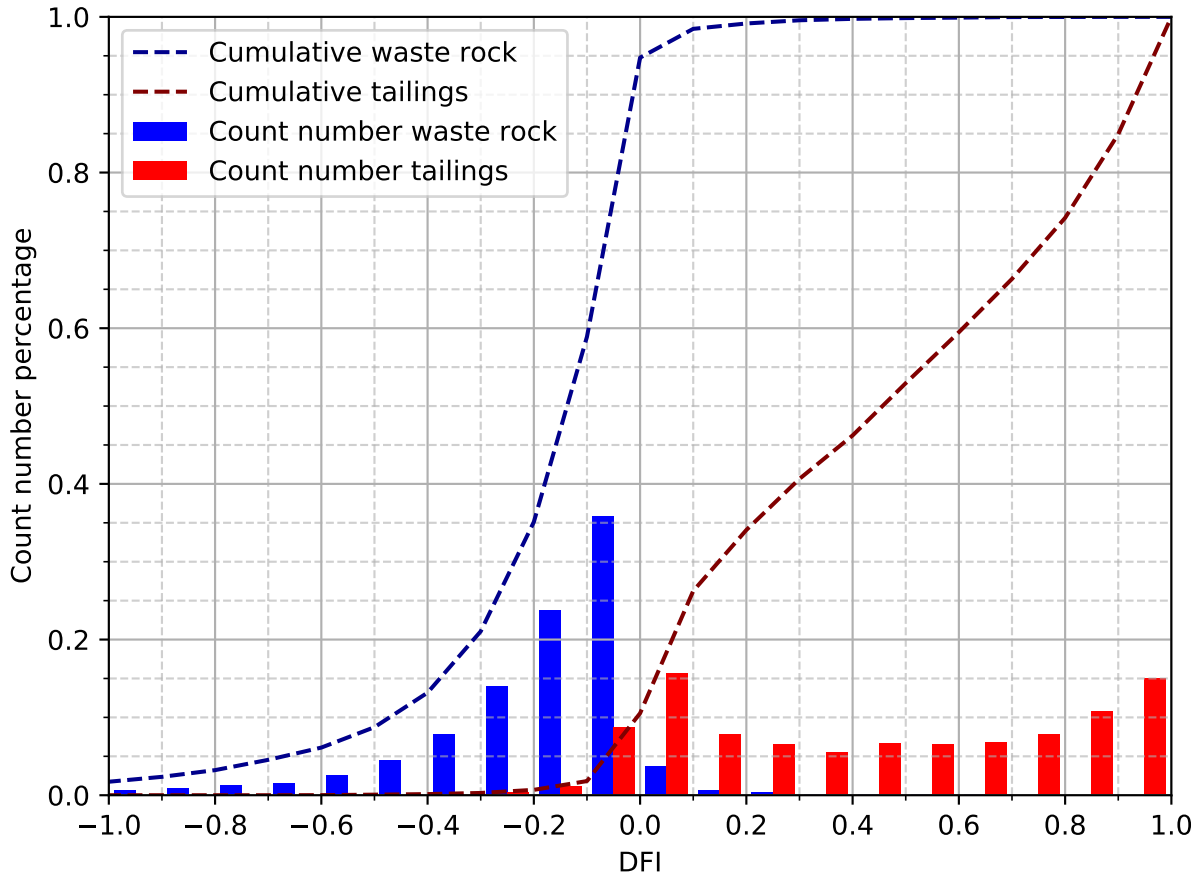


Figure 7.1 Distribution of the simulated DFI in the tailings scenario (in red) and the waste rock scenario (in blue). Histogram represents the frequency distribution and the dotted line the cumulative distribution.

7.3.2 BDZ influence in the tailings scenario

Visualization approach

Influence of the pit radius and of the attenuation length, fracture radius, aperture and concentration parameter (fracture anisotropy) of the BDZ on the DFI was first evaluated for the tailings scenario. The influence of each parameter was assessed individually by considering the modification of the DFI distribution caused by fixing the value of the studied parameter. For example, let's suppose that fixing a parameter X to a particular value X_0 leads to a gene-

ral increase of the DFI (Figure 7.2a). This influence can be quantified using the density ratio, which is defined as the ratio of the modified DFI distribution density considering $X = X_0$ to the original DFI distribution density (Figure 7.2b). A density ratio greater than 1 at a given DFI indicates that fixing the parameter X at a value X_0 tends to increase the probability the BDZ have the given DFI compared to the original DFI distribution. On the contrary, a density ratio lower than 1 shows lower probability of having the given DFI. Or, in other words, fixing the parameter X at X_0 shifts the DFI distribution from DFI with a density ratio lower than 1 toward DFI with density ratio higher than 1. In the following, a color code was applied to better visualize the value of the density ratio : red indicating a density ratio greater than 1 and blue a density ratio smaller than 1 (Figure 7.2b). The darker the color, the greater the density ratio. Pale colors indicate a somewhat unchanged DFI distribution (density ratio around 1).

Density ratios are then calculated for several values of parameter X (in this example, X_i, X_j and X_k ; Figure 7.2c). For example, fixing $X = X_i$ induced an increase of the number of simulations showing a DFI around -0.1 (as shown by the red color around this value) and fewer simulations with a DFI around 0.5 (as shown by the blue color) compared to the original DFI distribution (i.e. using all the possible values of X). As a consequence, fixing the parameter $X = X_i$ preferentially contributed to increase the flow in the waste by 10% (DFI = -0.1). Two more examples : fixing $X = X_j$ and $X = X_k$ induced an increase of the simulations resulting with a DFI around 0 and 0.3 respectively. In practice, this would indicate that the BDZ have a greater probability to have a DFI near 0 and 0.3 considering $X = X_j$ and $X = X_k$ compared to the original DFI distribution respectively. In the first case, it would mean that fixing $X = X_j$ tended to nullify the BDZ influence, while in the latter case, fixing $X = X_k$ would contribute to decrease the flow in the backfilled wastes by 30% on average. Also, considering these three examples together with $X_i < X_j < X_k$, it can be seen that the DFI distribution was shifted toward higher and higher DFI as the parameter X increase. Therefore, it means that increasing the parameter X would lead in general to an increase of the DFI. Overall, presenting the density ratio as a function of parameter X and DFI can be used to characterize the general influence of the parameter X of the BDZ on the flow.

The advantage of this visualization approach coupled with the LHS sampling method is that observed trends are general and valid independently of all the other parameters, while using an classical OFAT approach provides trends which are valid only near the reference point. Also, interactions between parameters are considered. For example, when using an OFAT approach, increasing one parameter could have no influence on the DFI, which could wrongly lead to conclude that it does not have an influence on the flow, while in reality, it could

be caused by another fixed parameter which inhibits or compensates for the variation of the DFI. The proposed stochastic approach considers this particular case, as well as many others, therefore avoiding generalizing particular cases. In addition, reliable maximum and minimum DFI could also be addressed using this method, since the whole parameter space is sampled. This visualization approach was used for all parametric analyses in the following.

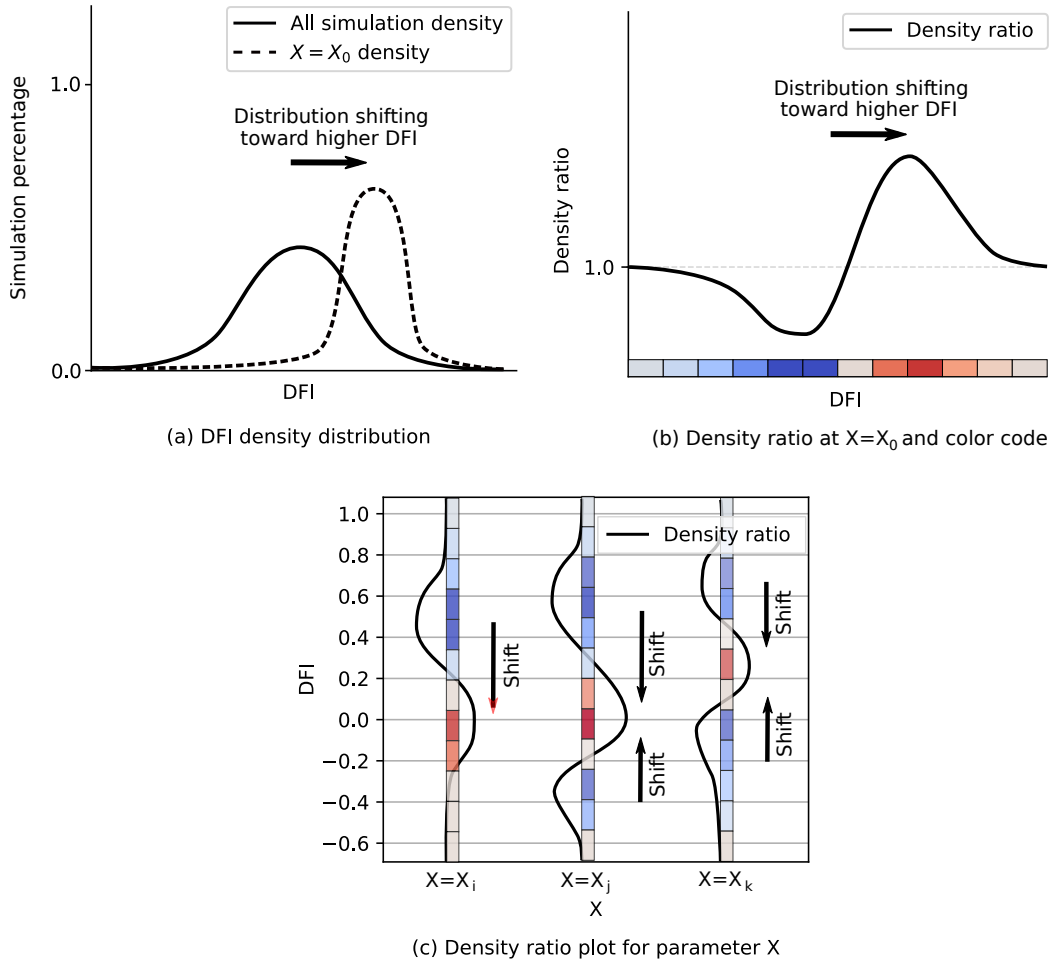


Figure 7.2 Calculation and construction of the density ratio map for each model parameter. (a) DFI distribution considering all the BDZ sampled and only a subset where $X = X_0$; (b) corresponding density ratio and color code showing the shift of the DFI distribution; (c) construction of the color map for several values of parameter ($X_i \leq X_j \leq X_k$). Here, increasing parameter X leads to an increase in the DFI (the red zone progressively moves towards greater DFI values).

Parametric analysis

The trace length per unit area B_{21} had a significant impact on the simulated DFI. In general, low trace length per unit area ($B_{21} < 5$ m^{-1}) induced DFI close to 0, and increasing the trace length also increased the DFI (Figure 7.3a). For example, the density ratio was near 3 for a trace length $B_{21} < 2$ m^{-1} and at a DFI between -0.1 and 0.1 (red area on Figure 7.3a). This density ratio at this particular DFI means in fact that 75% of the simulation considering $B_{21} < 2$ m^{-1} had a DFI between -0.1 and 0.1, compared to 25% considering all the simulation in the tailings scenario (see Figure 7.1). Therefore, a low fractured BDZ (i.e. with small values of B_{21}) would not significantly affect the flow in the backfilled pit. Increasing the trace length ($B_{21} > 5$ m^{-1}) tended to increase the DFI as the high-density ratio zone (red area in Figure 7.3a) tended to move towards DFI = 1. For example, the density ratio for $B_{21} = 10$ m^{-1} was near 1.3 for $0.3 <$ DFI < 0.7 (i.e. 33% of the simulation considering $B_{21} = 10$ m^{-1} had a $0.3 <$ DFI < 0.7 vs 25% considering all the simulations), and around 1.5 for a DFI > 0.7 and for $B_{21} > 15$ m^{-1} (50 vs 33%). In practice, these results indicate that the more fractured the pit wall is, the more the BDZ would contribute to decrease the flow in backfilled tailings.

The density ratio was also calculated and used to quantify the influence of the other BDZ parameters. Similar trends like those for the trace length were also observed for the fracture aperture b (Figure 7.3e) and, to a lesser extent, for the attenuation length l_0 and the fracture radius R (Figure 7.3b and c). For example, the density ratio for the attenuation length l_0 was approximately 1.3 for $0 <$ DFI < 0.1 and for $l_0 < 4$ m (i.e. 21% of simulation considering $l_0 < 4$ m had a DFI in the range 0 and 0.1 compared to 16% considering all the simulations), and remained mainly superior to 1 on a diagonal from DFI = 0 and $l_0 = 0$ m to DFI = 1 and $l_0 = 10$ m (Figure 7.3b). Therefore, the greater the fracture aperture, the attenuation length and the fracture radius, the most likely the BDZ would contribute to reduce the flowrate through the backfilled tailings (Figure 7.3a, b, c and e). All these parameters influence the hydraulic conductivity near the pit wall, and contribute to favor preferential paths for the groundwater around the backfilled pit when they increase. Fracture aperture and trace length affected strongly the DFI (as shown by the high variation of the density ratio), which showed they were the most important parameters that influence the flow in backfilled tailings. This could be explained by the fact that fracture aperture directly cubes the BDZ equivalent permeability (Equation (3c) and the trace length was linearly linked to fracture density (Equation (2)). Small values of fracture radius R usually indicates that fractures were disconnected from each other, therefore limiting the BDZ influence on the groundwater flow. For example, 40% of the simulations with a fracture radius $R = 0.5$ m had a negligible DFI compared to 25% considering all the simulation (density ratio of 1.7, Figure 7.3c).

Negative DFI in the tailings scenario (i.e. BDZ contributing to increase the flow in backfilled tailings ; 10% of the simulated cases) were aminly obtained when considering small fracture apertures ($b < 150$ µm ; Figure 7.3e) or BDZ fractures without significant preferential orientation (i.e. concentration parameter $\kappa < 40$; Figure 7.3d). The smallest DFI value (DFI = -0.6) was obtained for the smallest fracture apertures ($b = 50$ μm) and orientation ($\kappa \approx 0.2$). In addition, 40% of the BDZ with thin fractures ($b < 80$ µm) and an isotropic orientation ($\kappa < 1$) at the same time contributed to increase the flowrate in the pit, of which 10% significantly (compared to 10% and 1% respectively for all the simulation). This showed the fracture aperture and orientation seemed to control the increase of flowrate in the backfilled tailings. For example, for $\kappa > 40$ or $b > 150$ µm, an increase was most unlikely.

Finally, very small pit characterized by a small top radius $R_p < 100$ m showed an increased density ratio for extreme DFI values (density ratio above 1 for DFI > 0.7 and above 3 for DFI < -0.2 ; Figure 7.3f). For larger radius (100 m $< R_p <$ 250 m), the density ratio was around 1 everywhere, suggesting a limited effect of the pit radius in this range. However, large pit radius with $R_p > 250$ m tended to show density ratios near 1.2 between 0 < DFI < 0.5, which suggests that a large pit tended to decrease the BDZ influence on the flow. Also, the lower was the pit radius, the lower was the minimum DFI obtained. For example, for $R_p < 100$ m, the minimum DFI was below -0.5, while for $R_p > 250$ m it was strictly above -0.1. In other words, the smaller the pit radius the higher the influence (either positive or negative) of the BDZ on the flow in the backfilled tailings.

In conclusion, a BDZ with a relatively low fractured pit wall ($B_{21} < 5$ m^{-1}), a thin BDZ ($l_0 < 4$ m), and/or a BDZ with small and disconnected fractures ($R < 1$ m) would more probably have a negligible influence on the flowrate through backfilled tailings (i.e. -0.1 < DFI < 0.1). A BDZ with thin or clogged fractures ($b < 100$ µm) and no preferential orientation ($\kappa < 5$) would contribute to increase the flow in the backfilled tailings, especially in small pits ($R_p < 150$ m). On the contrary, a BDZ with a heavily fractured wall ($B_{21} > 15$ m^{-1}) and wide opened fractures ($b > 200$ µm) would contribute to significantly increase the flow in the backfilled tailings.

7.3.3 BDZ influence in the waste rocks scenario

The influence of the BDZ parameters were also assessed in the case the pit is backfilled with waste rock. The trace length per unit area B_{21}, the attenuation length l_0 and the fracture radius R had a similar and strong influence on the DFI (Figure 7.4a to c). First, they all constrained the DFI value between a maximum and a minimum. For example, the DFI simulated for low trace lengths ($B_{21} < 4$ m^{-1}), low attenuation lengths ($l_0 < 4$ m) and/or

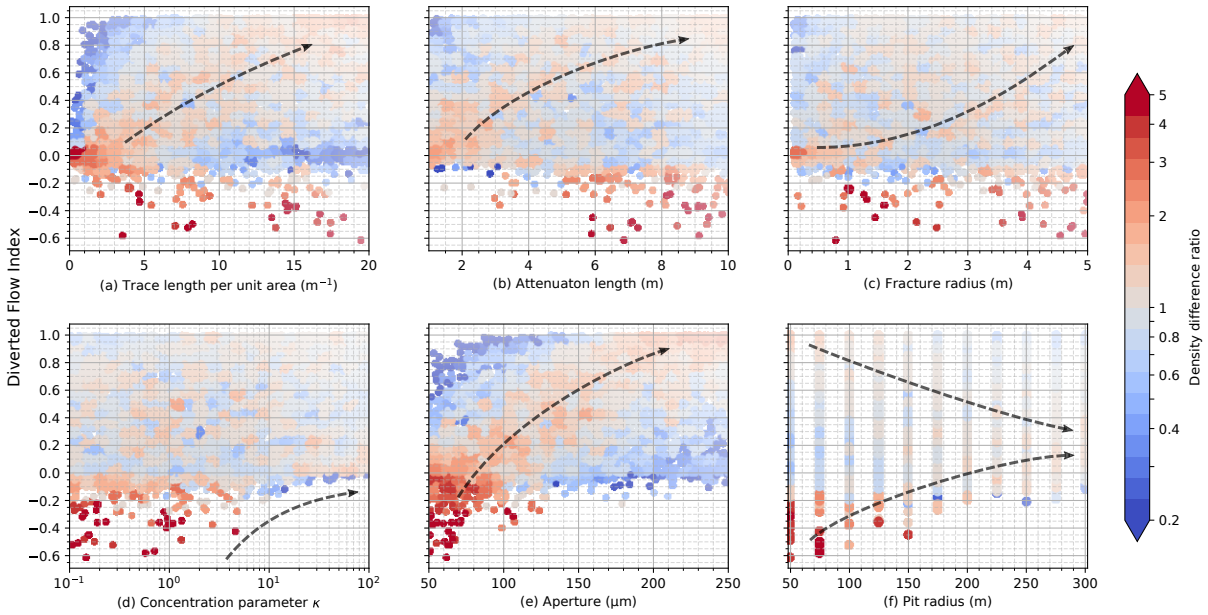


Figure 7.3 Influence of the BDZ parameters and pit radius on the DFI for the 3D simulated conic pit in the tailings scenario. Scatter plots are colored according to the density ratio (red : high density ratio, blue : low density ratio ; see text for more details) using 32 discretization segments on each axis. Dashed curves represents the influence of increasing the given parameter on the deviation.

small fracture radii ($R < 0.5$ m) were all comprised between -1 and 0, indicating an increase of the flowrate in the backfilled waste rocks between 0 and 100%. Then, as these three parameters increased, both the minimum and maximum DFI increased. For example, the minimum and the maximum DFI seemed linearly correlated to the attenuation length with $\mathrm{DFI}_{\min} = -0.25\ l_0$ for the minimum DFI and $\mathrm{DFI}_{\max} = 0.08\ l_0$ for the maximum DFI. The BDZ flow influence in the waste rock scenario seemed therefore to be constrained by either its extent, the fracturing and/or the fractures size (which was not previously observed in the tailings scenario). In addition, these three parameters also influenced the DFI as shown by the variation of the density ratio (Figure 7.4a to c). A thin BDZ ($l_0 < 4$ m) and/or a BDZ characterized by small ($R < 1$ m) or few fractures ($B_{21} < 4$ m^{-1}), i.e. a BDZ with a small equivalent hydraulic conductivity, would induce an increase of the flowrate through the waste often negligible as shown by the density ratio of approximately 2 for -0.1 < DFI < 0 (i.e. 70% of the simulation vs 35% considering all ; Figure 7.4a to c). Also, increasing trace length, attenuation length and fracture radius tended to shift the DFI toward more extreme values (either positive or negative), indicating that, in general, the influence of the BDZ on the flow (increasing or decreasing flowrate) would increase as the fracturing of the pit wall,

the BDZ extent and the fracture radius increase. For example, as the attenuation length l_0 increased from 1 to 10 m, the density ratio near DFI = 0 continuously decreased from 2 to 0.5 (Figure 7.4b), which indicate that the percentage of simulation having a negligible DFI decrease from 78% to 17%.

Concentration parameter also had a significant impact on the simulated DFI (Figure 7.4d). The DFI was usually negative for small concentration parameter ($\kappa < 1$), suggesting that a BDZ with no preferential orientation of its fractures would contribute to increase the flowrate in the pit. On the contrary, large concentration parameters ($\kappa > 40$, indicating BDZ fractures were subparallel to the pit wall) resulted in BDZ with either a low influence on the flow or which contribute to decrease the flowrate in waste rocks by up to 60% (DFI > -0.1). The lowest and highest DFI (-2.5 and 0.6) were respectively obtained for the lowest and highest concentration parameter. Results therefore suggest that the more the BDZ fractures were parallel to the wall, the higher the BDZ was prone to decrease the flow in the backfilled waste rock. Indeed, fractures subparallel to the pit wall were characterized by a greater hydraulic conductivity parallel to the pit, therefore facilitating the diversion of the groundwater streamlines along the pit wall and around the backfilled wastes.

Finally, low to medium pit radius ($R_p < 150$ m) tended to increase the influence of the BDZ on the flowrate (Figure 7.4e). The highest and lowest DFI simulated in the waste rock scenario were also obtained in the case of the pit with the smallest radius ($R_p = 50$ m). Then, as the pit radius increased, the minimum and maximum DFI formed an envelope which tended toward DFI_{min} = -0.5 and DFI_{max} = 0.2 at a pit radius $R_p = 300$ m. Also, density ratios tended to increase around DFI = 0 as the pit radius increased. This indicates that large pits ($R_p > 150$ m) tended to lower the BDZ influence on the flow.

In conclusion, results of the parametric study in the waste rock scenario showed that the orientation of the fractures had a critical impact on the flowrate in the backfilled wastes : fractures subparallel to the pit wall will contribute to decrease the flowrate in the backfilled waste, while an isotropic orientation will contribute to increase it. Other characteristic such as the pit radius, trace length per unit area, attenuation length or fracture radius do not significantly change the behavior of the BDZ on the flow (concentrating or diverting the flow), but rather participate to increase its influence.

7.3.4 Influence of pit geometry

The influence of the pit slope and depth ratio on the DFI were investigated using 11 conic pit geometries (see above for more details) in both the tailings (Figure 7.5a and b) and waste rock scenario (Figure 7.5c and d). In general, no trends were observed for both the pit depth

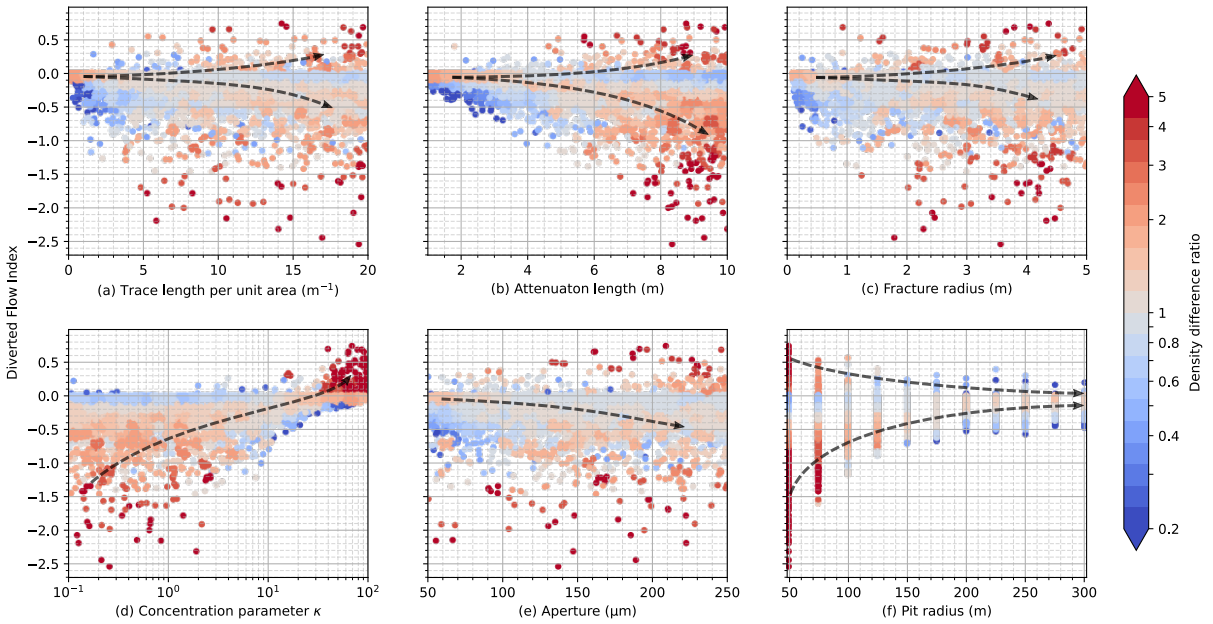


Figure 7.4 Influence of the BDZ parameters and pit radius on the DFI for the 3D simulated conic pit in the waste rock scenario. Scatter plots are colored according to the density ratio (red : high density ratio, blue : low density ratio) using 25 discretization segments on each axis. Dashed curves represents the influence of increasing the given parameter on the deviation.

ratio and the slope. Density ratio as well as minimum and maximum DFI did not show continuous variation that would indicate a clear shift of the DFI distribution. For example, the large minimum and maximum DFI simulated for a depth ratio of 0.8 (Figure 7.5c) or a slope of 2.2 (Figure 7.5d) was mostly caused by the small radius of the pit (also see Figure 7.4f). Therefore, these simulations suggested that the depth ratio or the pit slope did not have a significant impact on the water flow in backfilled (conic) pits.

7.4 Results analysis

7.4.1 Permeability increase and BDZ influence

The parametric study presented above has shown the influence of the BDZ parameters on the flow. However, these parameters also have a direct effect on the hydraulic conductivity increase near the pit wall. The median hydraulic conductivity in the BDZ was approximately 1×10^{-5} m/s, which is at least one order of magnitude greater than the tailings hydraulic conductivity considered in this study. Previous studies showed that a conductivity contrast between the wastes disposed in pits and the surrounding rock greater than 10 can contribute

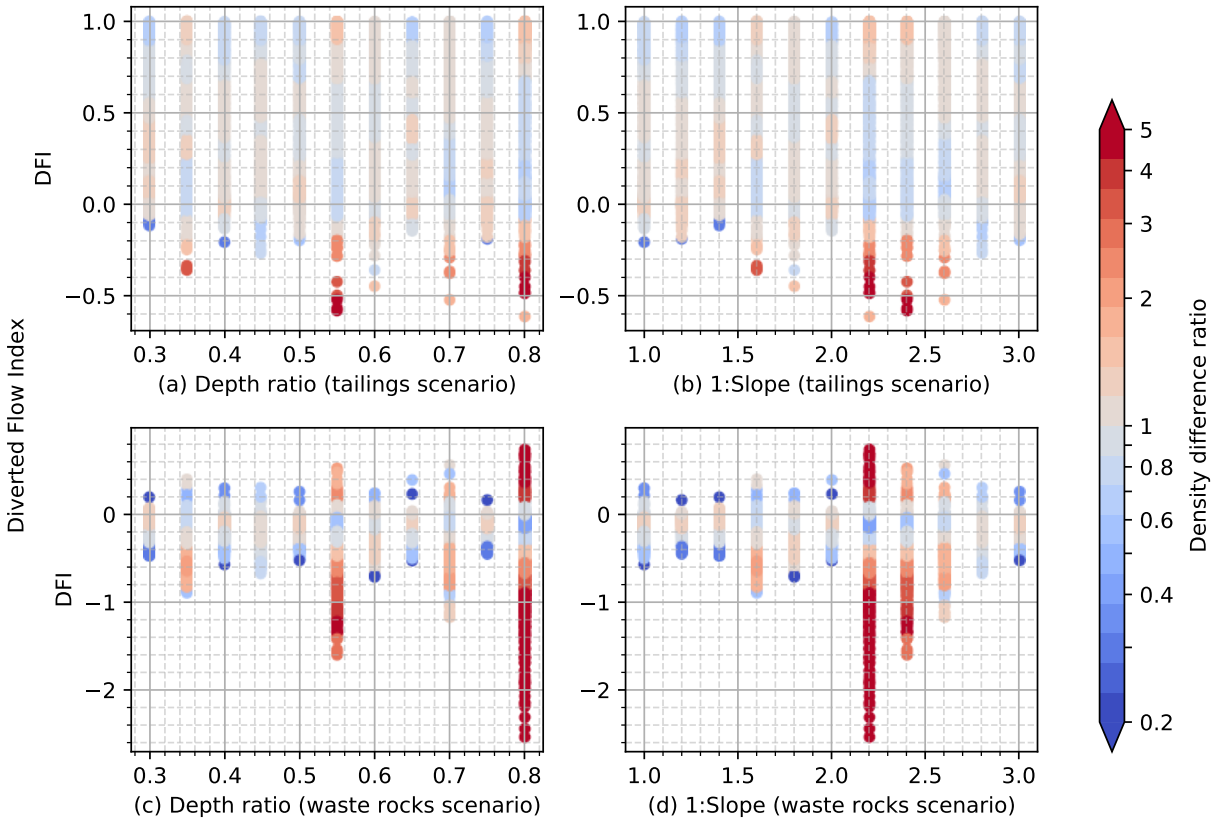


Figure 7.5 Influence of the BDZ parameters and pit radius on the DFI for the 3D simulated conic pit in the waste rock scenario. Scatter plots are colored according to the density ratio (red : high density ratio, blue : low density ratio) using 25 discretization segments on each axis.

to create a pervious surround and reduce the groundwater flow in the wastes (Misfeldt *et al.*, 1999; Thériault, 2004; Rousseau et Pabst, 2018), which is what has been observed in this study. To the contrary, in the waste rock scenario, the median BDZ hydraulic conductivity near the pit wall was comprised between the hydraulic conductivity of the rock (1×10^{-7} m/s) and of the waste rocks (1×10^{-3} m/s). Previous studies showed that a layer of intermediate conductivity placed between backfilled wastes and the surrounding rock could increase the flowrate in the waste by up to 40% (Thériault, 2004), in accordance with the presented results where maximum increase considering the same pit radius (R_p = 75 m) reached 150% in this study. These results tend to indicate that the contrast of hydraulic conductivity between the BDZ and the backfilled wastes also governs the BDZ influence. Actually, further analysis of the influence of the BDZ hydraulic conductivity on the DFI showed that a decrease of

the flowrate in either the waste rocks and the tailings scenarios was systematically achieved when the hydraulic conductivity of the BDZ near the pit wall (defined as $\frac{1}{3}K_{0,r} + \frac{2}{3}K_{0,t} + K_r$) was at least 3 times above the wastes permeability. However, a complete description of the influence of the hydraulic conductivity of the pit wall on the groundwater flow (and the DFI) is beyond the scope of this study but will be addressed in a future paper.

7.4.2 Blast design and pit backfilling

The Latin Hypercube Sampling strategy used in the parametric analysis generated independent sets of BDZ parameters. However, in practice, the BDZ size, fracturing and length are correlated, and all depend on the blast energy. High power (uncontrolled) blast would result in high damage to the rock mass that could extend far behind the pit wall (Hoek et Karzulovic, 2000, up to 100 m ;), therefore leading to a large BDZ, with a heavily fractured pit wall with large fractures. In both simulated scenarios, a large trace length (wall fracturing), attenuation length (large BDZ size) and fracture radius associated with a low pit radius ($R_p < 150$ m) tended to increase significantly the influence of the BDZ on the flow, by decreasing the flowrate in backfilled tailings by more than 90% or increasing the flowrate in backfilled waste rock by 250%. Thus, large blast in small pit is susceptible to create a BDZ with a high influence. On the contrary, small and controlled blasts would result in a thin BDZ with a low fracture density and would not affect significantly the flow in the backfilled wastes.

High power blast (relative to the lithology) could therefore be beneficial in the case it is planned to backfill the pit with tailings. In this case, the BDZ would most probably contribute to decrease the flow in the tailings. The significant decrease of the flowrate through backfilled tailings obtained in some cases suggested that the BDZ itself could be used as a containment structure, by acting similarly to the pervious surround technique (Matich et Tao, 1986). However, fractures also constitute conduits for the penetration of atmospheric gases in the rock (Dragila *et al.*, 2015) and high power blasts could therefore also facilitate the access of atmospheric oxygen to the backfilled wastes above the water table and contribute to initiate AMD generation. High power blast can also be beneficial in the waste rock backfill scenario if the objective is to contain a contaminant in their pore water, but at the condition the blast fractures are parallel to the pit walls. However, controlling the blast fracture orientation may be complex and highly uncertain, therefore increasing the risk to observe a significant increase of the flowrate and of the dispersion of contaminants.

7.4.3 BDZ parameters estimation

Some of the BDZ model parameters used in this study were arbitrarily chosen (see methodology section) because they are difficult to measure in the field and rarely reported in the literature. In practice, the only parameter which easy to assess is the blast fracture trace length per unit area B_{21}, which could be characterized by mapping the surface of the pit wall *in situ*. Reported value of B_{21} ranged between 1 to 10 m^{-1} (Tuckey, 2012; Tuckey et Stead, 2016). Other parameters such as fracture radius R and aperture b, attenuation length l_0 and concentration parameters κ were estimated based on available data in the literature.

Fracture radius was estimated on value used in previous studies in similar context. For example, Lupogo *et al.* (2014) used a 2 m fracture radius when studying open pit slope stability. Also, similar fracture radius (1.5 m) was used to model the fracture network around an underground mine excavation (Yin et Chen, 2020). Therefore, stochastic fracture radius in this study was between 0.1 and 5 m. Attenuation length was estimated using two different criteria. First, the empirical relationship of Worsey (1981) estimates the heavily damaged rock size as half the main blasting holes spacing. Using a blasting hole spacing of 5 m (e.g. Wyllie *et al.*, 2004; Chen *et al.*, 2020), a probable attenuation length was estimated to approximately 2.5 m. The second criterion used was the bench size and the blasting conditions (Hoek et Karzulovic, 2000; Hoek, 2012). For a well-controlled blast, the BDZ size is usually equal to half the bench size. Then, based on equation (7.2) and considering that a fracture density increase below 5% was negligible with $\rho(3l_0) = 0.05$, fracture attenuation length could be estimated using bench size as $l_0 = B/6$. Therefore, for a typical bench size of 30 m (Diavik mine ; Tuckey, 2012), the second criterion give a probable attenuation length of approximately 5 m. Attenuation lengths were thus chosen in the range 0 to 10 m in the stochastic analysis. Estimation of the equivalent hydraulic fracture aperture in the BDZ model was derived from laboratory measurements on real and simulated fractures and was between 10 and 250 µm (Ishibashi *et al.*, 2015). Finally, no available values of Fisher concentration parameter κ for blast damage zone near open-pit were found in the literature. The parameter was therefore chosen between 0.1 (nearly isotropic fracture network) and 100 (giving a tangential to radial conductivity ratio around 50). However, this parameter can significantly influence the flow in the BDZ since it is linked to the tangential permeability. In the case this parameter cannot be measured in practice, considering an isotropic BDZ fracture network ($\kappa \to 0$) could contribute to underestimate the DFI.

7.4.4 Discussion

In this study, the influence of the BDZ on the flowrate through backfilled mining wastes (either waste rocks or tailings) was evaluated. However, some hypotheses were made in the model development. For example, expressions of $\psi_\perp$ and $\psi_\parallel$ (6a) are in theory strictly valid for a homogeneous fracture network (i.e. with a constant density with $l_0 \to \infty$; Mourzenko *et al.*, 2011b). Exact expressions for $\psi_\perp$ in heterogeneous fracture networks (finite attenuation length l_0) was available in Mourzenko *et al.* (2011b), however, no analytic expression was reported for $\psi_\parallel$. Thus, the homogeneous expressions were chosen for both $\psi_\perp$ and $\psi_\parallel$ for consistency. An a-posteriori error estimation on $\psi_\perp$ was conducted, revealing this choice could lead to an underestimation of $\psi_\perp$ for isotropic BDZ when the adimensional attenuation length $l_0^{'} = l_0/R$ was below 1. This was particularly the case when the BDZ was thin and with large fracture radius. In this study, the lowest adimensional attenuation length was $l_0^{'} = 0.2$, which give an underestimation of the tangential permeability by a factor of up to 5. The simulated DFI could therefore have been underestimated in the particular cases of low attenuation length, high fracture radius and low concentration parameter. However, this was just the case in a few specific cases. Also, the curve fitting for ϕ (equation 7.7) was normally only valid for anisotropic network with $\kappa \gg 1$ (Mourzenko *et al.*, 2011b), and ϕ could therefore be underestimated by a factor up to 2 when $l_0/R < 1$. However, non-respecting this hypothesis did not induce a significant error in the estimation of the hydraulic conductivity of the BDZ, which in most of the case, was below 5% range for 99.4% of the simulated cases. Also, hydraulic conductivity near the open-pit was considered as the sum of both the intact rock and the BDZ hydraulic conductivity. This method did not consider any coupling between the two media, and could therefore have resulted in an underestimation of the *in situ* permeability (Mourzenko *et al.*, 2011a). Other coupling method between the fractures networks and the rock matrix could be used to overcome this issue (Mourzenko *et al.*, 2011a; Ebigbo *et al.*, 2016). Finally, the model considered in this study used the connectivity of the BDZ fracture network to derive its equivalent permeability, which therefore does not work for BDZ with disconnected fractures (i.e. for BDZ with $\rho_0^{'} < \rho_c^{'}$) and lowly connected ($\rho_0^{'} \approx \rho_c^{'}$). A discrete fracture network (DFN) approach would be necessary in this case.

Another simplification used in this study was that the BDZ fractures network considered fractures with constant radius and aperture, and homogeneous properties all along the pit. In reality, fractures tend to have complex 3D shape, variable length, and a non-uniform aperture which can result in preferential flow in the fracture plane (Berkowitz, 2002), with properties varying possibly all along the pit wall. Thus, the results presented in this study and in particular the influence of the different BDZ parameters on the flowrate through backfilled

wastes should be seen statistically as general trends, which is also one of the reasons for the stochastic approach used for the parametric analysis. Another hypothesis was to consider a homogeneous rock and BDZ properties along the pit depth, while some studies showed permeability of rock formation could be depth dependent because of increased mechanical constraints with the depth, despite contested (Ranjram *et al.*, 2015). This permeability depth relation could also have an impact of the BDZ flow influence, especially considering the pit depth (Figure 7.5).

7.5 Summary and conclusion

The present study explored the influence of the BDZ on groundwater flow around backfilled open pits using 3D numerical simulations for various conic pit sizes. Two scenarios were considered depending of the backfill material : tailings or waste rocks. The BDZ fracture network was modeled as circular fractures of constant radius and aperture, with a variable density decreasing with the distance from the pit wall. Preferential orientations of the fractures were also considered. The equivalent permeability of the BDZ was calculated using model parameters estimated from the literature, and flow simulations were carried out with and without the BDZ to assess its influence on the flowrate through the backfilled wastes. A parametric analysis was then realized to analyze the effect of the different BDZ parameters on the flow. A novel stochastic approach was developed that permitted to capture general trends and interactions between the different parameters using a total of 16 500 simulations.

Results showed that the BDZ could have a significant impact on the flow, for example by reducing flowrate through the pit by more than two orders of magnitudes or increasing it by 250%. When the pit is backfilled with tailings, the BDZ often contributes to decrease significantly (i.e. $> 10\%$) the flowrate through the pit, while, in the case of waste rocks, the BDZ nearly always contribute to increase the flowrate. In general, a thick and heavily fractured BDZ tended to have a significant impact on the flow, especially when the pit radius is small ; while a thin or a lowly fractured BDZ would have a negligible one. Fracture orientations was found to play a critical role in both scenarios, as fractures sub-parallel to pit wall (with an anisotropy ratio above 20) nearly ensure the BDZ decreased the flowrate through the pit, and despite it might be one of the hardiest properties to assess. In practice, high power blasts which result in thick and heavily fractured BDZ would tend to create strong perturbations of the flow in the surroundings of the backfilled pit. These perturbations can be desirable to achieve hydraulic insulation of backfilled tailings (natural pervious envelope). But in the case of backfilled waste rocks, this could contribute to significantly increase the

flow in the backfilled wastes. In other words, low energy blasts may be recommended if the plan is to backfill waste rocks at the end of the operations.

Future works should aim to explore the influence of the hydraulic conductivity of the BDZ and of others derived parameters on groundwater flow in backfilled wastes and to develop approach to estimate and predict the DFI using measurable properties. Also, in this study, only conic shaped pits and homogeneous BDZ properties were considered, but analyzing the effect of other pit geometries (including elliptic and more realistic geometries) on the flow deviation would be of interest for practical application of these results. Several of these aspects will be the addressed in future publications.

CHAPITRE 8 ARTICLE 4 : PREDICTION OF THE PERVIOUS SURROUND PERFORMANCE OF BLAST DAMAGE ZONE TO REDUCE GROUNDWATER FLOW IN BACKFILLED OPEN-PITS

Par Moïse Rousseau et Thomas Pabst.

Article soumis dans la revue *International Journal of Mining, Reclamation and Environment.*

Abstract

Groundwater flow reduction in backfilled open-pit to limit contaminant transport to the environment often relies on the creation of preferential flow paths around the disposed wastes in the form of a pervious surround. The blast damage zone (BDZ), which consist of an enhanced permeability zone near the pit walls, could naturally contribute to create such preferential flow and divert groundwater from backfilled wastes, thus maximizing the available volumes for wastes deposition. However, prediction of the BDZ flow deviation is difficult, and often requires advanced numerical simulations and properties not easily available. Therefore, the objective of this research was to propose new parameters that could easily be used in practice to predict the deviation and evaluate if the BDZ would be sufficient or if a pervious surround is required to reduce solute transport. 40 500 numerical simulations of 15 pit geometries with random (but realistic) BDZ properties were carried out. They allowed for deriving three abacus and one semi-analytical equation that could be used in practice to bounds the flow deviation between a minimum and a maximum, and based only on the BDZ size and pit wall permeability. Using both properties, deviation could be constrained in a 20% range without prior assumption on the waste or rock permeability. Several criteria were also derived that ensure the BDZ would act as a natural pervious surround. The results of these study should help mining operators and regulatory agencies to assess the BDZ effect on groundwater flow.

8.1 Introduction

In-pit disposal is increasingly seen as a good practice by mining operators and governmental agencies for mine wastes disposal (Puhalovich et Coghill, 2011; MEND, 2015). The approach benefits from many advantages compared to conventional storage facilities (e.g. tailings impoundments and waste rock piles) such as the stabilization of pit walls, a better site aesthe-

tics at closure and the elimination of potential accidental release of solids in the environment (MEND, 2015). Pit backfilling also contributes to control exchanges between potentially reactive wastes and the atmosphere or the hydrographic system, thus reducing the risk of contamination of ecosystems (Puhalovich et Coghill, 2011). In-pit disposed wastes are, in addition, less susceptible to climate change effects compared to surface storage facilities which may be (strongly) affected by the increase of the temperatures and precipitations (Pearce *et al.*, 2011; Booshehrian *et al.*, 2020; Hotton *et al.*, 2020; Labonté-Raymond *et al.*, 2020). Despite these numerous advantages, the application of the technique at field scale raises concerns and uncertainties regarding the geochemical stability of the wastes disposed, and particularly considering the interactions with the groundwater which are expected to occur. For example, groundwater can flow in the pit and through the wastes, therefore contributing to the dispersion of potentially contaminated water in the environment (McCullough *et al.*, 2013). Also, geochemical reaction of wastes mineral with the regional groundwater could contribute to contaminated neutral drainage (CND, e.g. Othmani *et al.*, 2013) or to acid mine drainage (AMD) generation with the influx of dissolved oxygen or ferric ions (Barfoud *et al.*, 2019). Interactions between backfilled wastes and the environment must therefore be controlled and minimized for the in-pit disposal technique to be an efficient and sustainable mine wastes management approach.

Several technics have been proposed to isolate backfilled mine wastes. For example, the pervious surround method (Matich et Tao, 1986) consists of placing a more permeable material between the wastes and the pit walls to create preferential flow paths and divert groundwater streamlines from the wastes. The pervious surround was shown to be effective when the hydraulic conductivity of the permeable material was at least one order of magnitude greater than that of the disposed waste, and can reduce the groundwater flux through the backfill by up to 90% (Misfeldt *et al.*, 1999; Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Thériault, 2004; Rousseau et Pabst, 2018). This technique can, however, be difficult to implement, because of the large quantities of permeable materials required to build the envelope (sometimes from a borrow pit), while the envelope reduces the space available for the wastes.

The so-called natural pervious surround method is based on the same principle (i.e. creating preferential flow paths for groundwater around the pit), but relies directly on the surrounding rock (Misfeldt *et al.*, 1999; MEND, 2015). The permeability contrast between the backfilled wastes and the surrounding rock is again one of main factor governing the effectiveness of the technique, which should be at least of one order of magnitude in the favor of the rock to prevent contamination of the surrounding environment (Misfeldt *et al.*, 1999). The performance of the natural surround technique is therefore limited by the natural permeability of the rock mass around the pit.

In practice, however, pit excavation, and especially blasting, can create a more permeable zone directly around the pit. The so-called BDZ is characterized by new fractures near the excavation and an opening of existing cracks (Beale et Read, 2014), which both tend to increase the rock permeability near the pit walls. Actually, core drilling and water injection tests performed on pit walls revealed that the permeability in the BDZ can be two orders of magnitude greater than that of the regional and undisturbed rock mass (Radian, 1997; McCloskey et Bless, 2005), while several observations indicate that the BDZ can be 10 to 15 meters wide (Morth *et al.*, 1972; Radian, 1997; McCloskey et Bless, 2005; MEND, 2015; Poulsen *et al.*, 2017). In the most favorable cases, the BDZ could therefore act a pervious surround and contribute to significantly reduce the flowrate in the backfilled wastes. However, the effect of the BDZ could also be the opposite as it could increase the flow in backfilled pit by 250% (Rousseau et Pabst, 2020, 2021b). Therefore, the influence of the BDZ must be carefully assessed during the environmental evaluation of pit disposal, to realistically evaluate the risk of contaminants transport from the backfilled wastes to the environment. However, such assessment requires the characterization of the BDZ fractures network (such as the fracture density, aperture and anisotropy) which can be difficult to measure in practice (Rousseau et Pabst, 2021b). The objective of the present research was therefore to propose new parameters to predict the influence of the BDZ using properties which are typically readily available in the field, such as hydraulic conductivities of the backfilled wastes, pit wall and rock, the pit shape, the regional gradient direction, and the BDZ length. Over 91 000 three-dimensional numerical simulations of the flowrate through 15 backfilled pits of various geometries with randomly generated BDZ properties were carried out in this study to create a large dataset of BDZ influence for testing the prediction performance of new parameters proposed. Based on these results, three abacus and a semi-analytical model were proposed to help predict the BDZ flow deviation between a minimum and maximum bounds and to help mining operators to design in-pit disposal using the surrounding rock as a natural pervious surround. The following details the approach used to develop and test the new parameters, and present a application example.

8.2 Methodology

8.2.1 General approach

Predicting the BDZ influence on the groundwater flow through backfilled pits first required a metric which could represent the flow deviation in the BDZ. Flow deviation in the BDZ was thus characterized using the Diverted Flow Index (DFI) which represented the relative change of flowrate entering the backfilled wastes with the BDZ (Q_{with}) compared to a reference case

without ($Q_{without}$) (Rousseau et Pabst, 2021b) :

$$DFI = 1 - \frac{Q_{with}}{Q_{without}} \tag{8.1}$$

A positive DFI ($0 \geq$ DFI ≥ 1) indicated that the BDZ diverted groundwater from the backfilled materials by the given percentage, while a negative DFI indicated that the BDZ contributed to increase the volume of water which entered the pit. In other words, the greater the DFI, the smaller the risk the pit would contaminate the environment.

Then, several numerical models of backfilled pit (described below) were created to assess the DFI considering various BDZ with randomly, yet realistic, generated properties. This stochastic approach to model properties generation allowed for considering a large variability of BDZ and on which the DFI would be predicted, thus prediction would be valid for most of case encountered in the field. The objective of this study was thus to find a set of new parameters, function of BDZ, rock, wastes and pit properties easy to assess, that could predict the DFI within a minimum and a maximum bounds. In the following, every quantity named *properties* refer to quantities that could be directly measured in the field (such as backfilled waste hydraulic conductivity, hydraulic gradient and its orientation, BDZ length or pit shape for example), while those named *parameters* refer to the new quantities introduced to predict the maximum and minimum bounds of the DFI.

8.2.2 BDZ dataset generation

Case considered

Several pit geometries were considered in this study, including conic pits (11 models), elliptic pits (3 models), and a more realistic geometry inspired from a real mine (1 model), giving a total of 15 simulated pits (Figure 8.1).

Simulated conic pits were characterized by their top radius R_p, the top radius to pit depth ratio d/R_p and their wall slope s (benches were not simulated). Simulated top radius R_p were between 50 and 300 m, depth ratio between 0.3 and 0.8 and slope between 1 :1 and 3 :1. Elliptic pits were characterized by the half-top minor axis a_p (between 50 and 150 m), the ellipse ratio e_r defined as the top major axis divided by the minor axis (between 1.5 and 2.4), the depth to minor axis ratio d/a_p (between 0.4 and 0.8) and the slope s (between 1 :1 and 2.4 :1). Finally, the real shaped pit (inspired from an existing mine) was asymmetric and had a nearly elliptical shape with a half-minor axis of approximately 175 m, a half-major axis of

500 m (i.e. an ellipse ratio around 2.5), a depth of 175 m (depth ratio of approximately 1), and a variable slope of overall 1 :1.7 (Figure 8.1, also see Figure 8.2 below).

For the non-conic shaped pits (i.e. without revolution symmetry), the influence of the BDZ on the flow could be, a priori, dependent of the gradient orientation. Therefore, 4 gradient orientations were considered in each simulation. For elliptic pits, a 0° angle between the gradient and pit major axis (i.e. the hydraulic gradient was parallel to the pit major axis), a 90° angle (i.e. gradient and major axis were perpendicular) and 2 intermediary angles of 30° and 60° were considered. For the real shaped pit, simulated gradient angles were -35°, -5°, 25° and 55°. Each pit was considered backfilled with homogeneous mine wastes characterized by an isotropic hydraulic conductivity K_w. The intact rock mass (i.e. not affected by blasting) was also considered homogeneous and isotropic, and was modeled using the equivalent porous medium approach (Berkowitz, 2002), with an equivalent hydraulic conductivity noted K_r.

BDZ conceptual model and permeability function

BDZ equivalent permeability followed an equivalent porous medium approach and was based on previous works made by Mourzenko *et al.* (2012) and Rousseau et Pabst (2021b). BDZ fractures network consisted of circular fractures of constant radius R and aperture b and placed randomly in space following an inverse exponential density distribution with the distance from the pit wall z. Fractures were also considered preferentially subparallel to pit wall following a Fisher distribution of parameter κ. The inverse exponential function was characterized by an attenuation length l_0 and an initial density linked to the blast fractures trace length per unit area B_{21} (Tuckey et Stead, 2016). The equivalent permeability tensor of the BDZ noted $\boldsymbol{k}_f$ could be written as a function of the distance from the pit wall z and of the five previous BDZ model properties R, b, κ, l_0, and B_{21} (Mourzenko *et al.*, 2012; Rousseau et Pabst, 2021b) :

$$\boldsymbol{k}_f(z) = \frac{\alpha b^3 \Delta\rho'(z)^2}{12R\Phi(1+\beta\Delta\rho'(z))} \begin{pmatrix} \psi_\perp & 0 & 0 \\ 0 & \psi_\perp & 0 \\ 0 & 0 & \psi_{||} \end{pmatrix} \tag{8.2a}$$

$$\Delta\rho'(z) = \frac{4R\Phi B_{21}}{\psi_c} e^{-z/l_0} - \rho'_c \tag{8.2b}$$

$$\psi_\perp = \frac{3}{2}\left(1 + \frac{1-\kappa\coth\kappa}{\kappa^2}\right) \tag{8.2c}$$

$$\psi_{||} = \frac{3}{\kappa^2}(\kappa\coth\kappa - 1) \tag{8.2d}$$

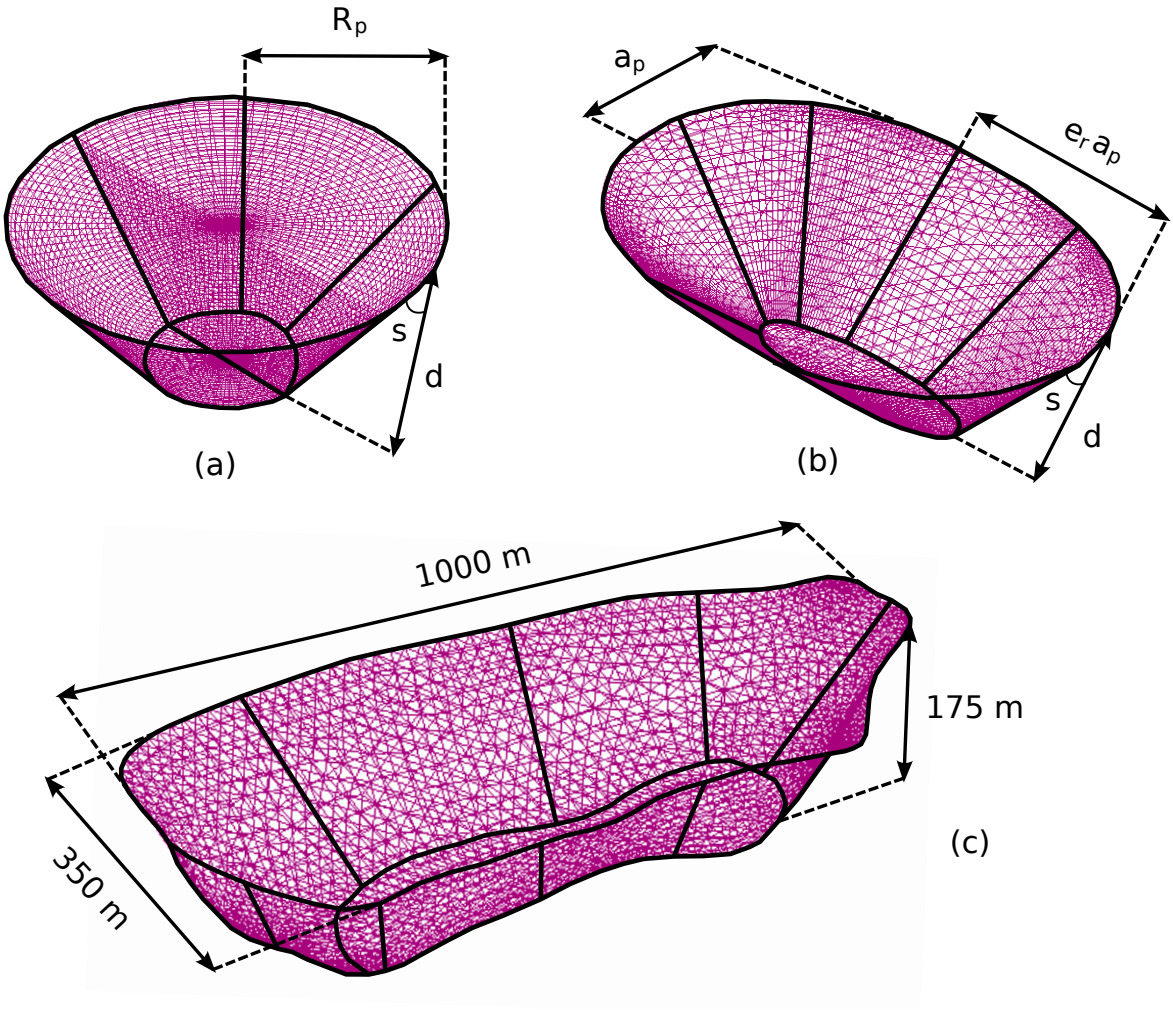


Figure 8.1 Schematic representation of the three pit geometry considered. (a) Parametric conic pits, (b) elliptic pits and (c) real case geometry.

where Φ and ψ_c are two functions accounting for the fracture orientation anisotropy (see Mourzenko *et al.*, 2011a; Rousseau et Pabst, 2021b, for more detail) and ρ'_c the percolation threshold (= 2.4 for circular fracture ; Mourzenko *et al.*, 2005)). The equivalent hydraulic conductivity of the fractured rock mass near the pit wall $\boldsymbol{K}_{eq}(z)$ considering the BDZ was defined as the sum of the undisturbed rock hydraulic conductivity and of the BDZ equivalent hydraulic conductivity :

$$\boldsymbol{K}_{eq}(z) = K_r \boldsymbol{I} + \frac{dg}{\mu} \boldsymbol{k}_f(z) \tag{8.3}$$

With d the water density (997.16 kg/m^3), g the gravity (9.8068 m^2/s), and μ the water dynamic viscosity (8.90416×10^{-4} Pa/s).

Model properties

The dataset of BDZ influence on the flowrate through backfilled pits was created according to the BDZ model developed above. For each pit and gradient orientation considered (27 models in total), 1500 different models with unique BDZ properties (l_0, R, b, B_{21} and κ), rock mass K_r and backfilled wastes K_w hydraulic conductivities were generated, for a dataset totalizing 40 500 different models. Model properties were sampled randomly in a realistic range of value using a Latin Hypercube sampling strategy and considering realistic intervals of variation for each property (Table 8.1 ; Rousseau et Pabst, 2021b). BDZ properties and permeability function were considered homogeneous over the pit perimeter and over its depth. The DFI (equation 8.1) was then calculated for each of these models using a numerical approach described below.

Tableau 8.1 Range of model properties considered in the stochastic flow deviation simulations. Properties with an asterisk (*) were sampled in logarithm space.

Property	Range
*Rock hydraulic conductivity K_r (m/s)	1×10^{-8} ; 1×10^{-2}
*Backfilled wastes hydraulic conductivity K_w (m/s)	1×10^{-8} ; 1×10^{-2}
Trace length per unit area B_{21} (m^{-1})	0.1 ; 20
Attenuation length l_0 (m)	1 ; 10
Fracture radius R (m)	0.1 ; 5
Aperture b (µm)	50 ; 250
*Concentration parameter κ	0.01 ; 100

Numerical approach

Flowrates with and without the BDZ were assessed using numerical models. In total, 91000 numerical simulations were carried out, i.e. two per dataset points, one to calculate the flux with the BDZ and second for the flux without the BDZ (see equation 8.1). Models' geometry and mesh were created using the Salome open source software (Ribes et Caremoli, 2007) and numerical simulations were carried out with the open-source subsurface reactive transport modeling code PFLOTRAN (Hammond *et al.*, 2012). Mesh in the BDZ was composed of radially oriented hexahedron 0.5 m thick on a distance of 50 m to respect the K-orthogonality condition of the two-point flux approximation (TPFA) used by PFLOTRAN to discretize the Richards equation (Rousseau et Pabst, 2021a). The rest of the domain (backfilled wastes and intact regional rock mass) was discretized using prisms and hexahedrons for conic and elliptic pit geometries, and tetrahedrons for real shaped pit. Between 300 000 to 900 000 control volumes were generated for each numerical model. Domain size was selected so that it did

not have an influence on the simulation results. Simulations were carried out in steady state and fully saturated conditions and with a uniform head gradient applied at the boundaries of the simulated domain. Permeability in the BDZ given by equation (8.3) was assigned on a cell-per cell basis where the variable z represented the distance between the center of the considered cell and the discretized pit interface.

8.2.3 Definition of the new parameters

Model properties considered to calculate new parameters

The new parameters derived in this study to predict the DFI bounds were based on 5 properties which are supposed to be known. These 5 properties were : (1) the backfilled wastes hydraulic conductivity K_w, (2) the undisturbed rock hydraulic conductivity K_r, (3) the orientation of the hydraulic gradient relative to the pit, which allows to calculate the projected perimeter P_p and projected area A_p of the pit in the direction perpendicular to the flow direction, (4) the hydraulic length of the BDZ L_h and (5) the pit wall permeability increase because of the BDZ $\Delta\boldsymbol{K}_0$ (Figure 8.2).

In particular, the BDZ hydraulic length L_h represented the length over which the BDZ fractures were connected and the permeability increased compared the undisturbed regional rock permeability (Figure 8.2). Using the BDZ permeability model described by equation (8.2), it was defined as :

$$\Delta\rho'(z = L_h) = 0 \tag{8.4}$$

Also, the pit wall permeability increase because of the BDZ $\Delta\boldsymbol{K}_0$ was defined as the permeability of the BDZ taken aside (equation 8.3) :

$$\Delta\boldsymbol{K}_0 = \boldsymbol{K}_{eq}(z = 0) - K_r\boldsymbol{I} = \frac{dg}{\mu}\boldsymbol{k}_f(z = 0) \tag{8.5}$$

The two components of the permeability increase were treated separately in this study. However, it was latter found that the hydraulic conductivity in the tangential direction gave better prediction on the DFI bounds than using the hydraulic conductivity in the radial direction. Therefore, only the BDZ tangential hydraulic conductivity $\Delta K_{0,t} = \Delta\boldsymbol{K}_0 \cdot \vec{t}$ was considered in the rest of this study (Figure 8.2).

The practical determination of these five properties is discussed more in detail in the "Result analysis" section below.

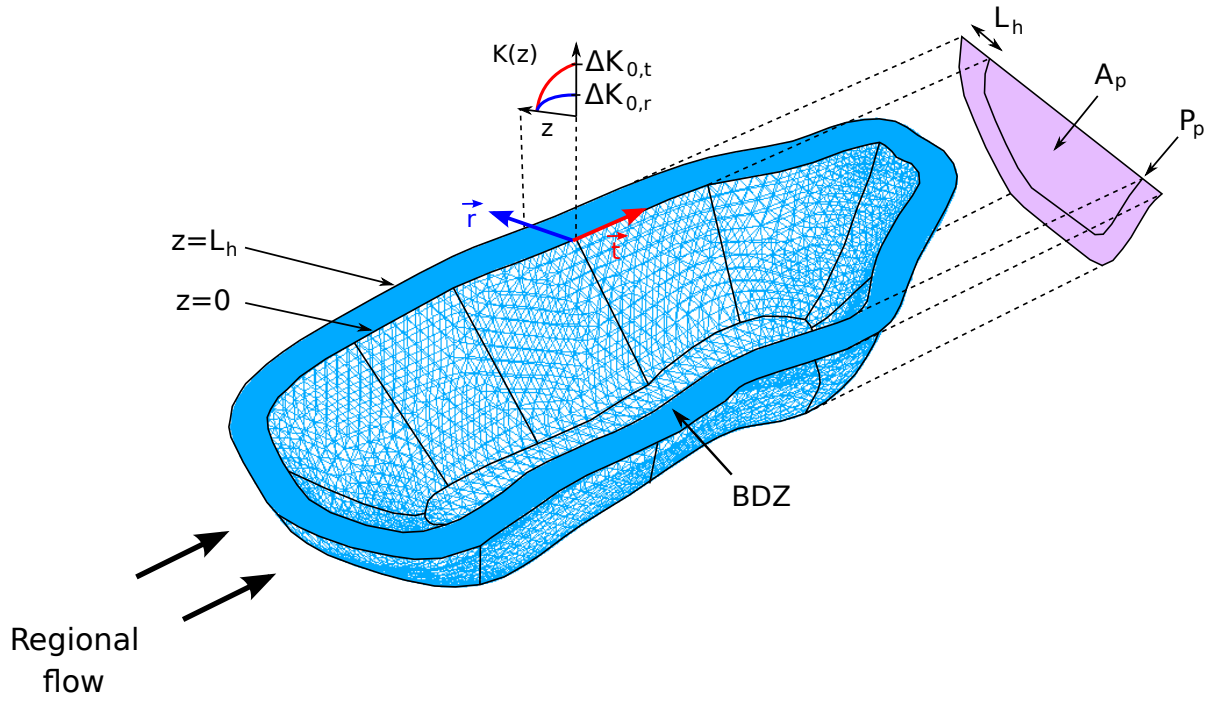


Figure 8.2 BDZ and pit properties considered to derive the new parameters. The inner surface in blue represents the pit walls ($z = 0$) and outer volume the BDZ (up to $z = L_h$). BDZ radial $\Delta K_{0,r}$ ($\vec{r}$ direction) and tangential ($\vec{t}$ direction) hydraulic conductivity function relative to the pit wall orientation locally are represented on the $K(z)$ plot in blue and red respectively. Pit projected perimeter P_p and area A_p in the direction of the regional flow (shown by the black arrow at the bottom left) figure in violet.

New parameters for DFI prediction

The previous model properties ($\Delta K_{0,t}$, L_h, gradient orientation giving the pit projected perimeter P_p and area A_p, and the wastes K_w and rock hydraulic conductivity K_r) were then arranged to introduce 4 new parameters to characterize the deviation in the BDZ. These four new parameters were :

1. The (projected) areas ratio defined as the projected BDZ area divided by the pit projected area in the direction perpendicular to the flow $P_p L_h / A_p$.
2. The pit wall permeability ratios which represented the (tangential) permeability contrast between the pit wall and the undisturbed rock $(\Delta K_{0,t} + K_r)/K_r$ and the permeability contrast between the pit wall and the wastes disposed in the pit $(\Delta K_{0,t} + K_r)/K_w$.

3. The transmissivity ratio defined as the transmissivity increase in the pit wall because of the BDZ ΔT_{BDZ} divided by the equivalent transmissivity of the backfilled pit T_{pit} :

$$\frac{\Delta T_{BDZ}}{T_{pit}} = \frac{\Delta K_{0,t}\, P_p\, L_h}{A_p\, K_w} \tag{8.6}$$

4. And finally, the 3D effectiveness index $E_{i,3D}$ which was derived heuristically from the analytical expression of the two-dimensional flow reduction in a circular backfilled pit surrounded by a layer of constant width and of isotropic hydraulic conductivity (see Appendix A for derivation) :

$$E_{i,3D} = 1 - \frac{2}{\sqrt{1 + x_{3D}^2 + \frac{(1-x_{3D}^2)}{K_r+K_w}\left[\frac{K_r K_w}{K_r+\Delta K_{0,t}} + K_r + \Delta K_{0,t}\right]}} \tag{8.7}$$

The following sections analyzed the minimum and maximum bounds of DFI predicted by these 4 parameters.

8.3 Results

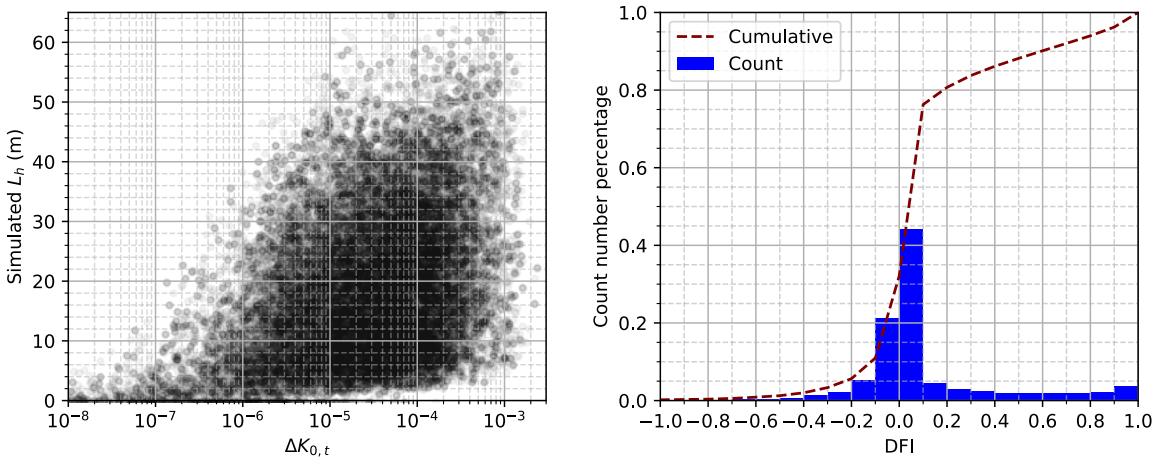
8.3.1 Generation BDZ properties and deviation dataset

The pit wall hydraulic conductivity increase and the hydraulic length of the BDZ introduced in section "Model properties considered to calculate new parameters" were first characterized in the dataset generated. Pit wall hydraulic conductivity increase was generally comprised between 1×10^{-8} and 2×10^{-3} m/s, which could represent a hydraulic conductivity increase of the undisturbed rock of over 5 order of magnitude (based on the lowest hydraulic conductivity considered for the rock). Hydraulic length simulated ranged between 0 and 60 m, i.e. a practically inexistent BDZ to a very thick BDZ. The underlying conceptual model also created a positive correlation between the two properties, as large hydraulic length tended to be associated to a large pit wall hydraulic conductivity increase (Figure 8.3a). In other words, heavily fractured BDZ was generally associated with a large extension, as it would be expected on the field with large energy blast.

Numerical simulations of the DFI carried out for the 40 500 cases converged for 40496 models, and the four unconverged simulations were therefore discarded and not considered in this study. Minimum and maximum simulated DFI ranged between -2.15 and 0.9995, i.e. the BDZ contributed to increase the flowrate in backfilled wastes by 215%, or to reduce it by more than 3 orders of magnitude (Figure 8.3b). In over half of the simulated cases, the BDZ did not significantly affect the flow near backfilled wastes, with nearly 65% of the simulation

showing a DFI between -0.1 and 0.1, and in 40% of them, the BDZ did not have any effect on the DFI at all ($-0.01 \leq \text{DFI} \leq 0.01$). In nearly 25% of the simulations, the BDZ contributed to decrease the flowrate in backfilled wastes (DFI > 0.1), and for 20% of these cases (5% of all the simulations), the decrease was significant and above 80%. To the contrary, approximately 10% of the simulations indicated an increase of the flowrate in the backfilled pit because of the BDZ (DFI < -0.1), but the increase remained limited to 60% (i.e. DFI > -0.6) in more than 90% of these cases.

The objective of this study was therefore to bound the flow deviation in the BDZ between a minimum and a maximum for the 60% of the cases where the DFI was non-negligible (i.e. $-0.01 \leq \text{DFI} \leq 0.01$) and using the 4 new parameters described above.



(a) Correlation between simulated $\Delta K_{0,t}$ and L_h

(b) DFI distribution

Figure 8.3 Simulated DFI, pit wall permeability increase $\Delta K_{0,t}$ and hydraulic length L_h. (a) Correlation between the simulated pit wall permeability increase and the hydraulic length. (b) Density distribution of the DFI simulated (blue histogram) and cumulative percentage (dotted curve) for the 15 pit models and considering parameter given in Table 8.1.

8.3.2 Prediction of the minimum DFI using area ratio

Characterization of the minimum and maximum bounds of the DFI was first assessed with the area ratio. Simulated DFI were thus expressed as a function of the area ratios (i.e. DFI $= f(P_p L_h / A_p)$), and bounds were determined based on the minimum and maximum DFI according to a given areas ratio. Simulations were somehow dispersed into the DFI and areas ratio plane (Figure 8.4), but they were all limited to the space above the line defined by the opposite of the areas ratio (i.e. DFI $> -P_p L_h / A_p$). Therefore, it appeared that the DFI was always superior to the opposite of the areas ratio, defining thus a minimum bound

for the DFI :

$$\mathrm{DFI}^{\min} \geq -P_p L_h / A_p \tag{8.8}$$

Actually, more than 99.8% (40429 over 40496) of the total simulations respected the criterion (8.8). In practice, this means that the maximum groundwater flow increase in the wastes because of the BDZ could be assessed by a geometrical factor of the pit and the BDZ length. Therefore, small pits, which are usually characterized by a relatively large projected perimeter over area ratio, could have a lower minimum DFI than large pit usually characterized by a low area ratio. In other words, it means that deposition in small pit can be more hazardous as the BDZ could contribute to increase the flowrate in backfilled wastes more than in large pit. For example, considering a 15 m wide BDZ around a pit 150 m in diameter, 50 m depth and with 45° slope angle, could increase the flowrate in backfilled wastes by up to 60%. To the contrary, a pit 400 m in diameter, 150 m depth and with 45° slope angle, could increase the flowrate in backfilled wastes by only up to 20%. Yet, there was still 67 simulations which failed to respect criterion (8.8), and were especially obtained considering the real pit geometry with various gradient orientation. This indicated that, despite this criterion was validated for conic and elliptic pits, it might not be straightforwardly generalized to more complex geometry.

The maximum DFI bound could not be assessed with the areas ratio, as maximum deviation ($DFI \rightarrow 1$) were obtained for low as well as high areas ratio. The lack of bound on the maximum DFI thus showed the BDZ could still deviate groundwater flow from the wastes by more than one order of magnitude ($\mathrm{DFI}^{\max} > 0.9$) either in small and in tall pits.

In practice, these results showed that the area ratio was effective to constrain the maximum groundwater flow increase in backfilled wastes because of the BDZ, and by requiring only the BDZ hydraulic length L_h and the gradient orientation if the pit is non-symmetric by rotation.

8.3.3 Prediction of minimum and maximum DFI using pit wall permeability contrasts

Prediction of the minimum and maximum bounds on the DFI were then assessed using the two pit wall permeability contrasts $(\Delta K_{0,t} + K_r)/K_r$ and $(\Delta K_{0,t} + K_r)/K_w$ simultaneously. Prediction was achieved by the means of a two-dimensional abacus on which the minimum DFI bound (Figure 8.5a) and the maximum DFI bound (Figure 8.5b) were plotted as a function of the permeability contrast between the pit wall and the wastes $(\Delta K_{0,t} + K_r)/K_w$

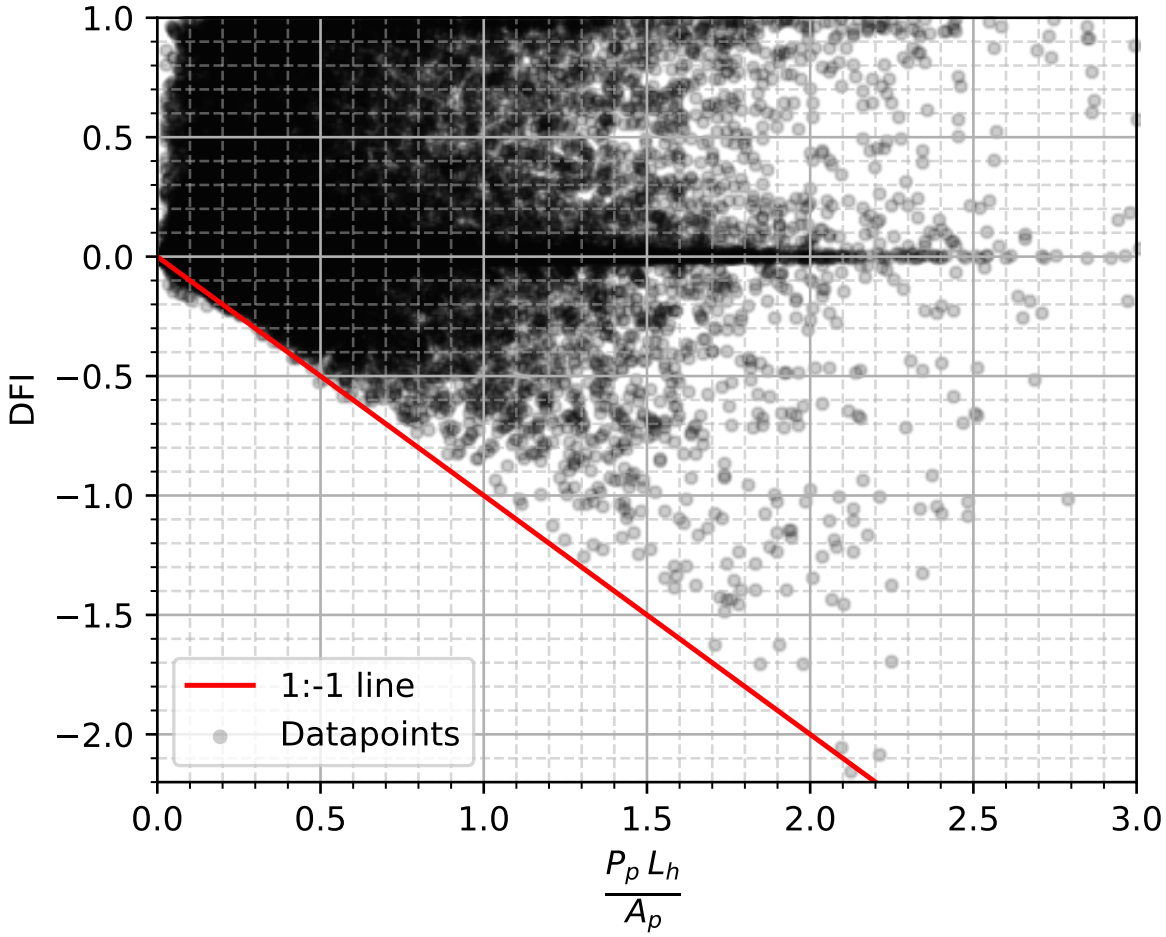


Figure 8.4 Influence of area ratio $P_p L_h$ over pit projected area A_p ratio on the DFI. Each gray circle represents a data point and the darker the color the higher the number of nearby points. In total, 40429 over 40496 points (99.8% of the simulation results) are located above the 1 :-1 line (indicated in red).

and of the permeability contrast between the pit wall and the undisturbed rock $(\Delta K_{0,t} + K_r)/K_r$ (Figure 8.5).

In general, minimum and maximum DFI bounds expressed as function of these two contrasts showed several zones where the bounds were piecewise-constant, and which can be used to derive criteria to predict the BDZ flow influence. For example, the minimum DFI bound was, in 97.5% of the case simulated, positive in the area defined by $(\Delta K_{0,t} + K_r)/K_w > 5$ (Figure 8.5a). Thus, it implies that for most of the case simulated, a permeability contrast between the pit wall and the wastes above 5 ensured the DFI was positive. In other words, a pit wall five times more permeable than the wastes disposed in the pit would ensure the BDZ would

decrease groundwater flow in the wastes and act as a pervious surround :

$$K_{0,t} + K_r > 5K_w \quad \Rightarrow \quad \mathrm{DFI}^{\min} \geq 0 \tag{8.9}$$

Another example can be given by identifying doublet of permeability contrasts for which the BDZ contributed to significantly decrease groundwater flow in backfilled wastes by at least 80%, i.e. the area on the abacus where $\mathrm{DFI}^{\min} \geq 0.8$. From the abacus, this area was defined by the doublet of permeability contrasts such as (Figure 8.5a) :

$$\log\left(\frac{K_{0,t} + K_r}{K_w}\right) \geq 6 - \log\left(\frac{K_{0,t} + K_r}{K_w}\right) \; ; \; \frac{K_{0,t} + K_r}{K_w} \geq 100 \tag{8.10}$$

This means an increase of the pit wall hydraulic conductivity because of the BDZ $\Delta K_{0,t}$ above one thousand times the geometric mean of the rock and the backfilled wastes conductivity ensure a groundwater flow reduction of at least 80% by the BDZ :

$$K_{0,t} \geq 1000\sqrt{K_r K_w} \; ; \; K_{0,t} \geq 100 K_r \quad \Rightarrow \quad \mathrm{DFI}^{\min} \geq 0.8 \tag{8.11}$$

Influence of the wastes hydraulic conductivity K_w on the DFI could also be predicted using the permeability contrasts. In fact, decreasing the wastes hydraulic conductivity decreased both the minimum and maximum DFI bounds simulated, and thus contributes overall to increase the deviation by the BDZ. For example, reducing by one order of magnitude waste conductivity from a pit wall to waste permeability contrast of 10 ($(\Delta K_{0,t} + K_r)/K_w = 10$) and a pit wall to rock contrast of 1000 ($(\Delta K_{0,t} + K_r)/K_r = 1000$), increased the minimum DFI bound from 0 to 0.4 and the maximum DFI bound from 0.4 to 1 (i.e. the mean DFI jumped from 0.2 to 0.7 ; Figure 8.5).

The bounds were, however, sometimes lose on certain cases, for example when both the pit wall to wastes and rock permeability contrasts were around 100, and for which the DFI was in the 0.2-1 range (i.e. from a low flow reduction of 20% and up to several order of magnitude). Also, prediction of the bounds was sometimes subject to some uncertainty, as clear condition for defining a bound was sometimes difficult (for example, the 0.2 minimum DFI bound ; Figure 8.5a). However, despite its limited precision, this prediction is independent of the BDZ hydraulic length L_h and does not require the regional gradient orientation. It can therefore be particularly useful when little information is available.

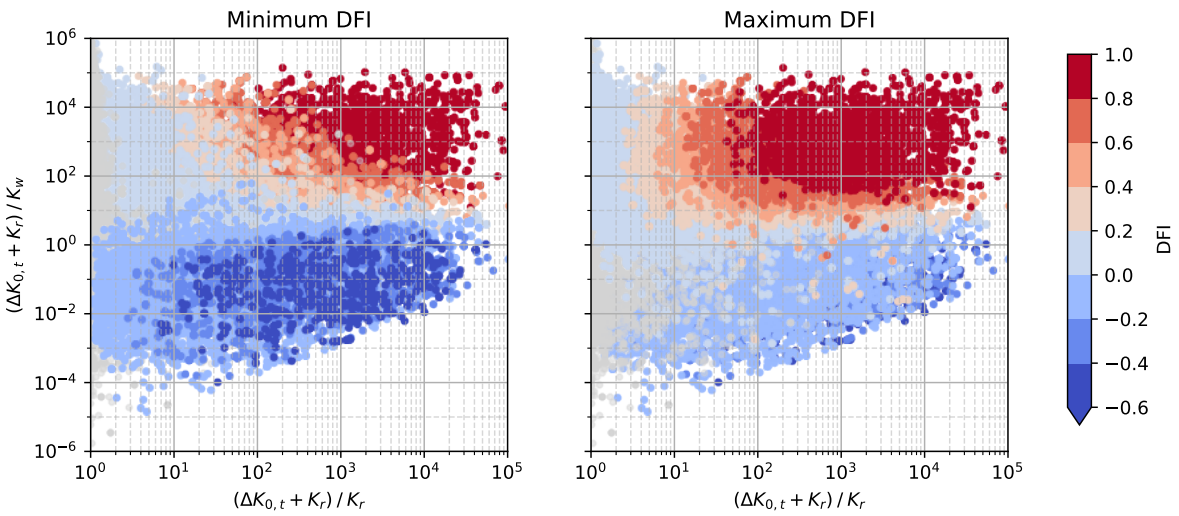


Figure 8.5 Minimum and maximum DFI as a function of the intact rock to backfilled wastes conductivity ratio and of the increase of BDZ to backfilled pit transmissivity ratio. Data points are colored according to the simulated DFI. Gray color represents DFI between -0.01 and 0.01.

8.3.4 Prediction of minimum and maximum DFI using the transmissivity ratio

Prediction of the minimum and maximum DFI bounds was also assessed using the transmissivity ratio $\Delta T_{BDZ}/T_{pit}$. As above, the prediction was achieved by the means of abacuses where the minimum and the maximum DFI bounds were plotted as two functions depending both on the transmissivity ratio and the rock to wastes permeability ratio (Figure 8.6) :

$$\mathrm{DFI}^{\{\min,\max\}} = f(\Delta T_{BDZ}/T_{pit}\,, K_r/K_w) \tag{8.12}$$

In general, minimum and maximum DFI varied smoothly according to the transmissivity ratio $\Delta T_{BDZ}/T_{pit}$ and the wastes to rock permeability ratio K_r/K_w (Figure 8.6). This allowed to determine range of transmissivity ratio and wastes to rock permeability ratio guaranteeing that the minimum or the maximum DFI bounds were either above or below a given value. Typically, this permitted to bound the simulated DFI in a $\pm 20\%$ interval for most of the doublet of transmissivity ratio and rock to wastes permeability ratio simulated. For example, for a BDZ 100 times more transmissive than the pit ($\Delta T_{BDZ}/T_{pit} \approx 100$) and a rock 10 times more permeable than the wastes ($K_r/K_w \approx 10$), simulated DFI were all comprised between 0.2 (minimum bound ; Figure 8.6a) and 0.6 (maximum bound ; Figure 8.6b). However, bounding the DFI using the transmissivity ratio and the rock to wastes permeability ratio was less successful when the BDZ contributes to increase the flowrate in the wastes ($\mathrm{DFI}^{\max} \leq 0$

area in Figure 8.6). For example, for a transmissivity ratio of 0.1 with wastes 4 order of magnitudes more permeable than the rock ($K_r/K_w \approx 0.0001$), the minimum DFI simulated was below -0.6 while the maximum was near 0, i.e. the bounds were above 0.6 distant.

Transmissivity and permeability ratios also allowed to derive conditions to ensure the BDZ would act as a pervious surround. Actually, a BDZ transmissivity increase at least 2 times higher than the transmissivity of the pit ($\Delta T_{BDZ}/T_{pit} \geq 2$), or a rock more permeable than the wastes ($K_r/K_w \geq 1$; Figure 8.6) gave for most of the simulation (99.6%) a positive DFI. Thus, it can be conjectured that either one or the other previous conditions are needed to ensure the BDZ contributed to decrease the groundwater flowrate in backfilled wastes :

$$\Delta K_{0,t} P_p L_h \geq 2\ A_p K_w \ \text{ or } \ K_r \geq K_w \quad \Rightarrow \quad \text{DFI}^{\min} \geq 0 \tag{8.13}$$

The latter condition ($K_r \geq K_w$) could be explained because the surrounding rock already act as a natural pervious surround and the BDZ just contributed to increase its effect.

The abacuses also allowed to derive multiple conditions for the minimum or maximum DFI bounds to be superior to a given value. Actually, positive minimum and maximum DFI bounds seemed to be constant either for a conductivity ratio K_r/K_w below 0.2 and for a transmissivity ratio linearly linked to the conductivity ratio, thus :

$$\begin{cases} \Delta T_{BDZ}/T_{pit} \ \geq \ \alpha \\ \Delta T_{BDZ}/T_{pit} \ \geq \ \beta(\alpha)\ K_r/K_w \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \text{DFI}^{\min,\max} \geq \gamma(\alpha) > 0 \tag{8.14}$$

With α, $\beta(\alpha)$ and $\gamma(\alpha)$ three interdependent constants. For example, simulations leading to a DFI of at least 0.8 ($\text{DFI}^{\min} \geq 0.8$; Figure 8.6a) was obtained considering the transmissivity increase of the BDZ was at least 2 orders of magnitude higher than the transmissivity of the pit, and when the transmissivity ratio was approximately 200 times higher than the conductivity ratio :

$$\begin{cases} \Delta T_{BDZ}/T_{pit} \ \geq \ 100 \\ \Delta T_{BDZ}/T_{pit} \ \geq \ 200\ K_r/K_w \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \text{DFI}^{\min} \geq 0.8 \tag{8.15}$$

Finally, the abacuses could also be used to assess the influence of changing several model properties on the flow deviation. For example, decreasing backfilled wastes hydraulic conductivity K_w had the effect to decrease the minimum and maximum DFI bound, especially when the wastes were more permeable than the rock (i.e. $K_r/K_w \leq 1$; Figure 8.6). In practice, this indicates for example that backfilled wastes consolidation when $K_r \leq K_w$ should be favored since it resulted in a higher deviation of the flow in the BDZ (Figure 8.6). However, when the

wastes conductivity became negligible compared to those of the intact rock ($K_r/K_r \geq 10$), the DFI bounds became rather linearly linked to the transmissivity ratio (diagonal isocontours in Figure 8.6). In this case, decreasing more the wastes conductivity would have no effect of the natural pervious surround effect of the BDZ, indicating a maximum flow deviation in the BDZ was reached. Another practical example using the transmissivity and conductivity ratios was the prediction of the influence of the pit shape. Small pits (characterized by a relatively high projected perimeter versus projected area) would result in higher DFI bounds, and therefore a BDZ with higher impact on the flow (either positive or negative) than large pit with the same backfilled wastes, rock or BDZ properties.

Overall, the main advantage of the using the transmissivity ratio to characterize the minimum and maximum DFI bounds was that it combined all the model properties to create a narrow interval of possible DFI to predict the groundwater flowrate in backfilled wastes.

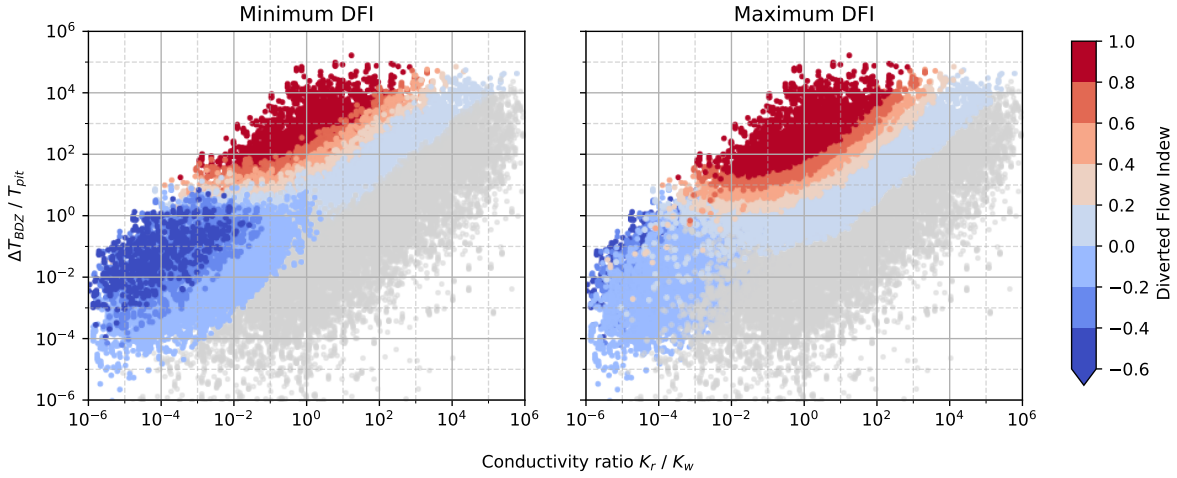


Figure 8.6 Minimum and maximum DFI as a function of the intact rock to backfilled wastes conductivity ratio and of the increase of BDZ to backfilled pit transmissivity ratio. Data points are colored according to the simulated DFI. Gray color represents DFI between -0.01 and 0.01.

8.3.5 Semi-analytical equation for minimum and maximum DFI prediction

The effect of the effectiveness index parameter $E_{i,3D}$ on the minimum and maximum DFI bound was lastly investigated. This time, the minimum and maximum DFI bounds were assessed by representing the DFI as a single variable function of the effectiveness index (i.e. DFI = $f(E_{i,3D})$), plotted either for conic pit geometries and non-conic pit geometries (Figure 8.7a and b, respectively). Overall, the effectiveness index $E_{i,3D}$ derived from the

model properties measured on site could be used to predict the DFI in a ±0.15 in conic or ±0.2 range in non-conic pits, and to derive condition guaranteeing the BDZ would act as a natural pervious surround.

The effectiveness index $E_{i,3D}$ calculated for all the models considered were all comprised between -0.91 and 0.98, and the DFI as a function of the effectiveness index showed the same trends for both conic and non-conic pits. In general, the higher was the effectiveness index calculated from the model properties, the higher was the DFI simulated. The effectiveness index also permitted to bounds the simulated DFI between a minimum and a maximum. These two bounds were typically distant from ±0.15 in conic pit and ±0.2 in non-conic pits, especially if the effectiveness index $E_{i,3D}$ calculated was higher than -0.5. As an example, minimum and maximum deviation simulated for a calculated effectiveness index of 0.2 were 0.25 - 0.55 for conic pits, while they were 0.05 - 0.45 for non-conic pits. These minimum and maximum DFI bounds were also strictly increasing with the effectiveness index. For example, considering a 3D effectiveness index of 0 and 0.6, the simulated deviation for conic pits ranged between 0.1 - 0.3 and 0.5 - 0.8 respectively. The effectiveness index, however, failed to bound the maximum increase in the backfilled wastes in both pit geometry in a narrow interval, as an effectiveness index of -0.8 gave simulated DFI between -1 and 0 (i.e. no increase or a flowrate doubled).

The bounds imposed by the effectiveness index $E_{i,3D}$ on the DFI also allowed to derive condition for which the BDZ acted as a pervious surround. For example, a 3D effectiveness index $E_{i,3D} \geq 0.1$ for non-conic pits and $E_{i,3D} \geq -0.15$ for conic pits ensured a positive DFI ($\text{DFI}^{\text{min}} \geq 0$), and thus that the BDZ would deviate flow from the wastes. High flow deviation by the BDZ ($\text{DFI}^{\text{min}} \geq 0.8$) was also obtained for an effectiveness index above 0.75 in conic pits or 0.85 in non-conic pits. At the contrary, an effectiveness index $E_{i,3D}$ below -0.5 would indicate that the BDZ would contribute to increase the flowrate in the backfilled wastes for both conic and non-conic pit.

One of the most important advantages of this new parameter was that it permitted, since the minimum and maximum deviation by the BDZ were strictly increasing, to define an empiric bijective function $\text{DFI}^{\text{min,max}} = f(E_{i,3D})$ that relates the effectiveness index calculated from model properties to the DFI (red curves on Figure 8.7). The effectiveness index and the empiric bijective function constituted thus a semi-analytic model to bound the DFI between a minimum and a maximum. Control points used to fit the empirical function to the data for conic and non-conic pits are given in Appendix B. Prediction using this method was, however, subject to a small incertitude, as 2.5% of the simulation in dataset used were lying outside the minimum and maximum DFI function.

Overall, the effectiveness index $E_{i,3D}$ proposed in this section is a convenient and easy way to assess the minimum and maximum deviation of the flow by the BDZ knowing its hydraulic length L_h, the enhanced pit wall conductivity ($\Delta K_{0,t} + K_r$), the backfilled wastes and rock hydraulic conductivity (K_w and K_r) and some geometrical quantities related to the pit shape and gradient orientation.

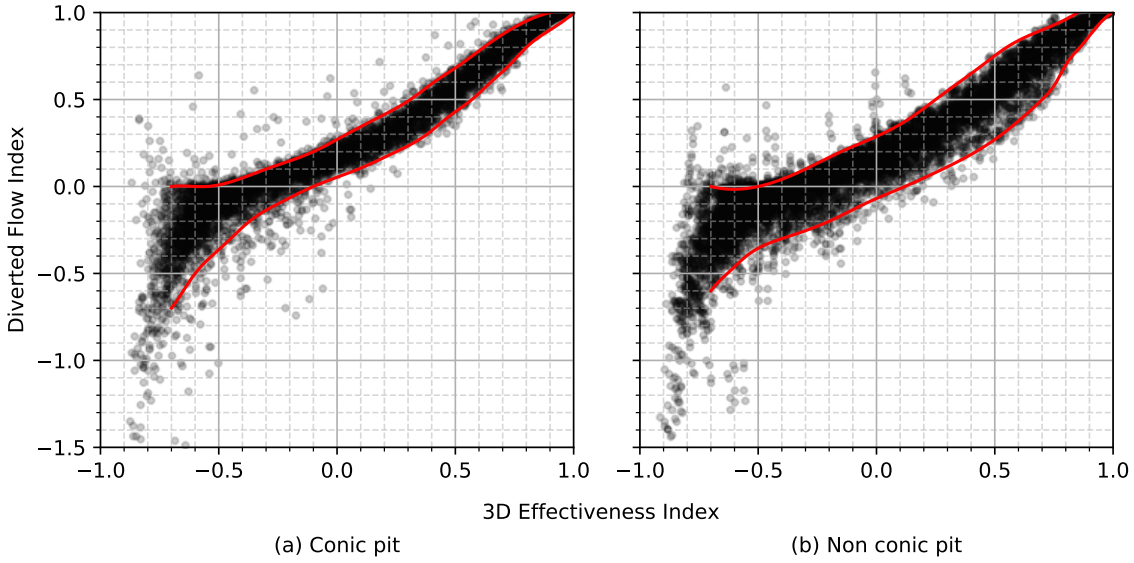


Figure 8.7 Predicted DFI as a function of the 3D effectiveness index for (a) conic pits and (b) non-conic pits. Red curves represent the empiric functions DFI $= f(E_{i,3D})$ for the minimum and the maximum DFI bounds (value in appendix). 97.5% of the data points are contained between the bounds.

8.4 Result analysis

8.4.1 Assessing model properties for prediction

The model properties used to derive the new parameters and to predict the minimum and maximum DFI bounds were selected based on their facility to be assessed on the field. In practice, hydraulic conductivity of the wastes K_w is routinely assessed by mining operators or is supposed to be the variable being seek, while the rock hydraulic conductivity K_r could be derived from dewatering well tests. Gradient orientation (if the pit is non-symmetric by rotation) could also be assessed using site's hydrogeological studies, and the pit shape required to calculate the projected parameter P_p and area A_p (Figure 8.2) is often already digitalized or could be assessed with land survey. BDZ hydraulic length L_h could be measured using various approaches. It can be estimated first with empirical relations using bench size and

blast conditions (Hoek et Karzulovic, 2000; Hoek, 2012) or using the distance between blasting hole (Worsey, 1981) as described in Rousseau et Pabst (2021b). It can also be estimated using pit wall excavation (Morth *et al.*, 1972; MEND, 1995), or with pit wall drilling and water infiltration tests (McCloskey et Bless, 2005). Typical hydraulic length of the BDZ was in general comprised between 5 and 15 m (Morth *et al.*, 1972; MEND, 1995; McCloskey et Bless, 2005). Finally, the hydraulic conductivity increase of the pit wall because of the BDZ could also be assessed using pit wall drilling and water injection tests as for the hydraulic length L_h (McCloskey et Bless, 2005). This method would, however, lead to an averaged permeability between the radial and the tangential permeability of the BDZ, while only the tangential permeability increase $\Delta K_{0,t}$ is required. Yet, the conceptual model of the BDZ used in this study considered fracture oriented tangentially to the pit walls, thus leading to a permeability in the tangential direction higher than those in the radial direction ($\psi_\perp \geq \psi_\parallel$; equation 8.2). Without information on the BDZ fracture network directional anisotropy, the measured hydraulic conductivity using water injection tests constitutes therefore a lower-bound estimation of the real tangential hydraulic conductivity which could be used to assess BDZ flow deviation, adding however higher uncertainty on the predicted bounds.

8.4.2 Assessing minimum and maximum DFI bounds using the new parameters

The present study presented the results of the characterization of the flow deviation from backfilled pit by the BDZ using various new parameters (areas ratio, permeability contrasts, transmissivity ratio and effectiveness index). These new parameters permitted to put bounds on the minimum and maximum DFI simulated, or to determine criteria to ensure the BDZ acted as a natural pervious surround ($\text{DFI}^{\text{min}} \geq 0$), deviated a significant part of the flow from backfilled wastes ($\text{DFI}^{\text{min}} \geq 0.8$), or to determine the maximum flowrate increase (Table 8.2).

Some parameters also allowed to put narrower minimum and maximum DFI bounds than others (Table 8.2). In general, parameters which use more information about the BDZ (i.e. the transmissivity ratio and the effectiveness index) led to narrower bounds and were therefore more precise. For example, he BDZ flow deviation in every simulated model could be predicted within 40% using effectiveness index and the transmissivity ratio, within 80% using the permeability contrasts, while the area ratio only permitted to assess the minimum DFI bound. Yet, all the prediction of the minimum and maximum DFI bounds by the different parameter could be combined together to even better constrain the DFI bounds. In this case, the minimum DFI predicted would be the maximum minimum DFI given by all the parameters, and the maximum DFI the minimum maximum given. For example, the inability of

the effectiveness index to predict the maximum flowrate increase in backfilled waste because of the BDZ could be corrected by using the areas ratio which better constrain the increase. In particular, the effectiveness index coupled with the areas ratio was an effective way to bound the BDZ flow influence in a narrow range. In practice, if all model properties are known (gradient orientation and pit shape, wastes, rock and pit wall hydraulic conductivity and BDZ hydraulic length), the two previous parameters are sufficient to predict the BDZ flow deviation from backfilled pits.

Tableau 8.2 Comparison of the different parameters to predict the minimum and maximum bounds of the simulated DFI.

Parameters	Areas ratio	Permeablity contrast	Transmissivity ratio	Effectiveness index
Typical variation interval ($DFI^{max} - DFI^{min}$)	NA	80%	40%	Down to 20% (conic pit), 40% (other pit shape)
Condition to deviate flow	NA	Equation (8.9)	Equation (8.13)	$E_{i,3D} \geq -0.15$ (conic pit) ; $E_{i,3D} \geq 0.1$ (non conic pit)
Condition for deviation $\geq 80\%$	NA	Equation (8.11)	Equation (8.15)	$E_{i,3D} \geq 0.75$ (conic pit) ; $E_{i,3D} \geq 0.85$ (non conic pit)
Maximum flowrate increase	Equation (8.8) [1]	NA	NA	NA
Properties needed	${L_h}^2$, gradient orientation[3]	$\Delta K_{0,t}$, K_r, K_w	All five	All five

[1]Might only work for conic and elliptic pit geometries, [2]Typically 5 to 15 m (Morth *et al.*, 1972; McCloskey et Bless, 2005; Poulsen *et al.*, 2017), [3]Only for pits non-symmetric by revolution.

8.4.3 Example application to predict BDZ flow influence

The findings of this study were applied to the prediction the BDZ flow influence in a example case of a pit with a projected perimeter and area of 1000 m and 80 000 m^2 whose shape can be approximated by a cone, embedded in geological formation of 1×10^{-7} m/s undisturbed hydraulic conductivity and with BDZ 10 m thick and a pit wall 200 times more permeable than the undisturbed formation. Mining operators would like to use this pit to dispose of

reactive mine wastes, either waste rock and tailings, and would assess if the BDZ alone could be sufficient to create a containment structure to limit groundwater flow in the backfilled pit.

The maximum disposed wastes hydraulic conductivity allowed to ensure the BDZ would act a natural pervious surround could be derived from equation (8.9), and was approximately 4×10^{-6} m/s. Waste rock backfilling, usually with a permeability orders of magnitude higher than 4×10^{-6} m/s, should thus be avoided in this case since the BDZ would not act as a natural pervious surround and would increase groundwater flowrate in the pit. Despite, the maximum increase was rather small and of maximum 12% (equation 8.8 ; Figure 8.8).

If the pit was intended to be backfilled with tailings, the groundwater flow reduction could be assessed invoking the semi-analytical expression linking the DFI and the effectiveness index DFI $= f(E_{i,3D})$ (Figure 8.8). In this case, the maximum deviation of groundwater flow by the BDZ ranged between 50 and 80% for tailings hydraulic conductivity lower than 1×10^{-6} m/s. Thus, it was recommended to dispose of tailings with a hydraulic conductivity below 1×10^{-6} m/s to maximize the deviation of the flow by the BDZ.

8.4.4 Discussion

The minimum and maximum bounds proposed in this study to constrain the DFI were obtained considering a broad range of wastes and rock hydraulic conductivities, thus embracing many possible backfilling scenarios such as waste rock in low conductivity fractured rock, or tailings in highly permeable formation, along with various BDZ permeability function and pit shapes. The high variability of cases considered allowed therefore to derive reliable criteria to ensure the BDZ would act as a natural pervious surround or to predict the DFI within a minimum and a maximum bounds. These criteria and predictions could thus be used in practice to assess the BDZ influence on groundwater flow near backfilled open-pit. The validity of the prediction was, however, subjected to some hypothesis on the pit shape and the BDZ properties. Actually, the prediction of the DFI bounds was extensively studied for conic pits, elliptic pits with various gradient orientation, and in one real quasi-elliptic pit geometry. Thus, for pit geometries significantly different from those tested, the BDZ influence might be different from the results presented here and the prediction might fail. In particular, prediction of the maximum flowrate increase in backfilled pit also seemed to fail if the pit differs even slightly from conic or elliptic pit. Conducting the same analysis in other geometries could permit to generalize the present results to more other general pit shapes.

Prediction were also based on a unique BDZ model which created a correlation between two of the model properties used in to derive the prediction ($\Delta K_{0,t}$ and L_h). This implies that the deviation predicted using the hydraulic length and/or the pit wall permeability increase

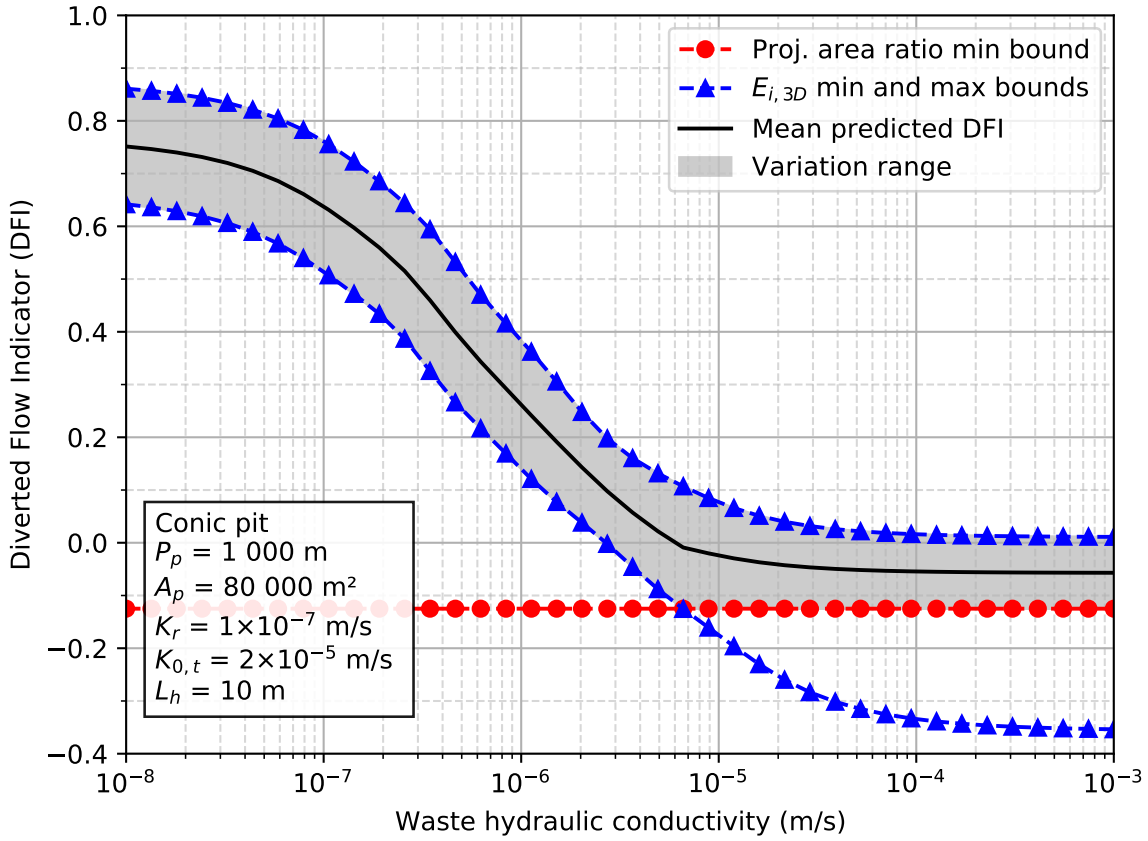


Figure 8.8 Predicted DFI and its uncertainty range using the semi-analytical equation with the effectiveness index $E_{i,3D}$ and the projected pit and BDZ area ratio.

might only be valid for sampled doublets in the dataset (see Figure 8.3b), and that prediction of the deviation for BDZ with a parameters doublet outside the range tested might not be accurate. This also implies that predictions using only partial information on the BDZ (i.e. using the areas ratio, or the permeability contrasts) must suppose the other BDZ parameters lies in the validity range. However, the cases lying outside the validity range might not be typical in practice, since high energy blasts in general tend also to create a positive correlation between the thickness and the fracturation of the BDZ, as captured by the model considered. Moreover, a unique BDZ permeability function was considered in this study, which linked the permeability of the BDZ to the distance by a inverse-exponential like function. Despite such decrease was observed for energy blast propagation (e.g. Siamaki *et al.*, 2018), conducting the same analysis using a different conceptual model and permeability function of the BDZ would be beneficial to validate further the prediction emitted here.

Bounds of the BDZ flow influence proposed in this study were also derived from simplified 3D flow models, such as fully saturated conditions under steady state, with no recharge, and with pits located in flat terrain. However, in practice, the backfilled pit could not be fully saturated on its whole depth, and projected perimeters P_p and areas A_p need thus to be estimated according to the saturated depth of the backfill for example. Moreover, only pits embedded in homogenous rock formation and submitted to a uniform gradient were considered for simplicity. Other cases, such as pits located in mountainous regions, or pits located in complex geological setting intersecting multiple formations with different hydrogeologic properties could introduce complex far field conditions and hydraulic gradient near the pit, and therefore, the results obtained in this study could not be representative of these field conditions.

Finally, this study derived condition for which the BDZ could act a natural pervious surround. However, when the BDZ alone is inadequate to provide a sufficient containment structure for in-pit wastes disposal, alternative scenario that still rely on the BDZ could be still considered. A new blasting of the surrounding rock could be for example considered after backfilling. This would have the effect to create new fractures in the BDZ and thus increase connectivity and conductivity of the network, therefore increasing its hydraulic conductivity. This technic was already used in groundwater remediation where preferential flow paths were created in a crystalline rock to increase the conductivity by order of magnitude and to collect contaminated groundwater up to a pumping well (Begor *et al.*, 1989; Smerekanicz *et al.*, 2001; Smerekanicz, 2004). Another scenario would be to include beforehand higher energy blasts during the last wall pushbacks. This approach would be an example application of the *Design for Closure* concept for mine life planning (Aubertin *et al.*, 2016). A last scenario but no more relying on the BDZ is to add a pervious surround in the pit (e.g. West *et al.*, 2003; Thériault, 2004; MEND, 2015; Hore et Luppnow, 2015). However, addition of a new highly permeable layer next to the BDZ is likely to change the flow deviation. Actually, the equivalent conductivity of the wastes in the pit will increase, which will result in a decrease of the DFI. Therefore, adding a pervious surround could be counterproductive if it does not balance the updated BDZ deviation considering the new equivalent backfilled wastes hydraulic conductivity. In all the cases, trying to lower tailings conductivity might worth double, because it first contributes to decrease the raw flowrate in the pit without considering the BDZ, and second, because it also contributed to increase the flow deviation by the BDZ.

8.5 Summary and conclusion

Prediction of the BDZ flow deviation was carried out in this study by constraining the flow deviation between a minimum and a maximum using various parameters derived from model properties. Several pit geometries (conic, elliptic and a more realistic) and gradient orientation were considered, along with many different BDZ properties and permeability functions, giving a total of 40 500 cases on which the deviations were predicted.

Results showed the deviation of the flow by the BDZ could be bound using only two properties relative to the BDZ which are its size and the pit wall hydraulic conductivity. In general, the BDZ would start to act as a natural pervious surround when the pit walls are 5 times more permeable than the wastes disposed in the pit. However, if the latter condition is not fulfilled, the BDZ could contribute to increase flowrate in backfilled wastes up to a maximum given by the pit geometry and the BDZ size. In this case, deposition in large pits should be favored as the groundwater flow increase would be smaller than in small pits. Also, a particular parameter (the effectiveness index) allowed to derive a semi-analytical model able to predict the BDZ flow deviation within a 20 to 40% range depending of the pit geometry (conic vs non-conic). Efficient deviation of the flow by the BDZ ($\geq$ 80%) were especially obtained for an effectiveness index higher than 0.75 in conic and than 0.85 in general pit geometries. In all the cases, trying to lower wastes hydraulic conductivity (e.g. consolidation) contributes to increase BDZ flow deviation. However, in the case the BDZ is not sufficient to reduce groundwater flow in the waste, care should be taken when adding a pervious surround in the pit, as the updated effect of the BDZ could contribute to increase the flow in the pit, and therefore counterbalance the effect of the containment structure.

In practice, results of the present study could be used to support the analysis of the environmental impact of mine wastes disposal in open-pit, and to characterize the BDZ flow influence.

8.6 Appendix A : Derivation of the analytical effectiveness

Following Rousseau et Pabst (2021b), the reduction R_{2D} of the flowrate through a 2D circular backfilled pit of radius R_p^{2D} and surrounded by a layer of width l and a hydraulic conductivity K_l can be analytically derived starting from

$$Q_{wl} = 2A_0K_w \tag{8.16a}$$

$$Q_{wol} = \frac{4K_wK_rR_pI}{K_w + K_w} \tag{8.16b}$$

With Q_{wl} and Q_{wol} the flowrate in the backfilled pit with and without the layer, I the regional hydraulic gradient and A_0 a coefficient given by :

$$\begin{cases} v_0 A_0 + w_0 A_1 = 0 \\ u_1 A_0 + v_1 A_1 = 2I(R_p + l) \end{cases} \tag{8.17}$$

with A_1 a instrumental coefficient and v_0, w_0, u_1 and v_1 given by :

$$v_0 = \frac{1}{R_p(R_p + l)} \left(\frac{K_w}{K_l}(2R_p l + l^2) + 2R_p^2 + 2R_p l + l^2 \right) \tag{8.18a}$$

$$w_0 = -2 \tag{8.18b}$$

$$u_1 = -2\frac{K_l}{K_r}\frac{(R_p + l)R_p}{2R_p l + l^2} \tag{8.18c}$$

$$v_1 = -\frac{K_l}{K_r}\frac{2R_p^2 + 2R_p l + l^2}{2R_p l + l^2} + 1 \tag{8.18d}$$

Solving the system leads to the following expression for the fowrate reduction R_{2D} :

$$R_{2D} = 1 - \frac{Q_{wl}}{Q_{wol}} = 1 - \frac{2}{1 + x_{2D}^2 + \frac{(1-x_{2D}^2)}{K_r + K_w}\left[\frac{K_r K_w}{K_l} + K_l\right]} \tag{8.19}$$

with $x_{2D} = 1 - l/R_p^{2D}$ representing the ratio of the radius of the wastes disposed in the pit divided by the pit radius. By analogy, the three-dimensional ratio x_{3D} was defined as the ratio of the projected area of the pit to the projected area of the pit and the BDZ :

$$x_{3D} = \frac{A_p}{A_p + L_h P_p} \tag{8.20}$$

And similarly, the 3D effectiveness index $E_{i,3D}$ was defined as :

$$E_{i,3D} = 1 - \frac{2}{\sqrt{1 + x_{3D}^2 + \frac{(1-x_{3D}^2)}{K_r + K_w}\left[\frac{K_r K_w}{K_r + \Delta K_{0,t}} + K_r + \Delta K_{0,t}\right]}} \tag{8.21}$$

The squared root was added compared to the 2D case to allow for a more accurate visualization of the bounds when the index tend toward 1 ($E_{i,3D} \to 1$).

8.7 Appendix B : Effectiveness index as a function of the DFI

Tableau 8.3 Value of the effectiveness $E_{i,3D}$ required to obtain the given minimum ($E_{i,3D}$ / Minimum column) and maximum ($E_{i,3D}$ / Maximum column) DFI for conic and non-conic pit. For example, an effectiveness index $E_{i,3D}$ of 0.47 in conic pit give a minimum DFI of 0.4

Effectiveness index $E_{i,3D}$				DFI
Conic pit		Non-conic pit		
Minimum	Maximum	Minimum	Maximum	
-0.70		-0.74		-0.7
-0.65		-0.70		-0.6
-0.60		-0.63		-0.5
-0.53		-0.55		-0.4
-0.45		-0.40		-0.3
-0.37		-0.20		-0.2
-0.25		-0.05		-0.1
-0.1	-0.55	0.12	-0.50	0.0
0.09	-0.30	0.28	-0.30	0.1
0.25	-0.10	0.42	-0.15	0.2
0.38	0.04	0.53	0.02	0.3
0.47	0.18	0.62	0.15	0.4
0.57	0.31	0.70	0.25	0.5
0.65	0.41	0.76	0.35	0.6
0.73	0.52	0.80	0.45	0.7
0.80	0.62	0.86	0.55	0.8
0.90	0.73	0.92	0.70	0.9
1	0.90	1	0.85	1

CHAPITRE 9 ARTICLE 5 : TOPOLOGY OPTIMIZATION OF IN-PIT CODISPOSAL OF WASTE ROCKS AND TAILINGS TO REDUCE CONTAMINANT TRANSPORT TO THE ENVIRONMENT

Par Moïse Rousseau et Thomas Pabst.

Article soumis dans la revue *Computational Geosciences*.

Abstract

The pervious surround method is an effective approach to reduce solute transport from contaminated mine wastes backfilled in open-pits to the environment. The technique consists in placing a permeable material (typically waste rocks) along the pit walls to divert the groundwater flow around the in-pit disposed tailings. However, the method suffers from a lack of general guidelines for conception of its geometry, and an improper design of the permeable surround could result in a reduction of the available space for the tailings, increased costs, or even poor performance. In this study, a topology optimization approach was proposed to assess the optimal pervious surround geometry to minimize the solute transport between contaminated tailings and the environment. This approach was applied for the design of a pervious surround in a conic, an elliptic and a real case pits, and for various gradient orientations. Results proved that a constant width pervious surround was close to optimality for pits where major axis formed less than a 45° angle with the regional flow. In this case, optimized surround geometries with variable widths only performed 5% better than conventional design. However, for a gradient oriented along the minor axis, the topology optimization results indicated that several linear inclusions of waste rocks could be placed within the pit to reduce advective solute transport by nearly 40%. This paper presents the formulation of the optimization approach and its numerical implementation, details its application to five different pit geometries, to finally discuss the optimal geometry, the performance of the approach and its limitations.

9.1 Introduction

Surface mining operations typically generate two types of solid wastes : coarse grained waste rocks excavated to access ore, and fine-grained tailings produced by ore milling and treatment (Bussière et Guittonny, 2020). These two solids waste are usually disposed of separately on the surface, in either impoundments confined by retaining dikes or waste rock piles, respectively

(Blight, 2010). Surface storage facilities raise various challenges and are particularly exposed to geotechnical instabilities. In fact, the risk for tailings impoundments failure is around 100 times greater than that of water retention dams (Azam et Li, 2010), and can directly be the cause of important environmental damages and even loss of life (Roche *et al.*, 2017). Projected climate changes may also modify the environmental conditions mine wastes storage facilities were designed for, therefore adding further uncertainty to disposal site design and increasing the risks for instabilities (Pearce *et al.*, 2011; Parhizkar *et al.*, 2016; Labonté-Raymond *et al.*, 2020).

Backfilling open pits with mine wastes is an alternative disposal method which has many advantages over traditional surface storage facilities. In-pit backfilling contributes to physically isolate the wastes by placing them underground, therefore canceling the risk associated with impoundment failure (MEND, 2015). In pit backfilling also improves reclamation performance (mine wastes can be more easily maintained saturated), and increase social acceptance of mining projects (Puhalovich et Coghill, 2011; MEND, 2015). However, despite the wastes being isolated in the pit, interactions with the groundwater are expected through the fractured rock. As a consequence, influx of dissolved ferric ion or oxygen could contribute to initiate acid mine drainage (AMD) generation , and contaminants contained in the waste pore water (either natural, such as radionuclides, or originating from ore processing treatment, such as cyanides) or resulting from geochemical reactions (e.g. Moldovan *et al.*, 2008; Santofimia *et al.*, 2013; Villain *et al.*, 2015; Barfoud *et al.*, 2019; Tomy *et al.*, 2020) could be dispersed into the environment (Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Thériault, 2004; Lange et Van Geel, 2011; Ben Abdelghani *et al.*, 2015). Interactions between in-pit backfilled wastes and the groundwater must therefore be controlled.

Several methods were proposed to limit the groundwater flow through backfilled wastes (MEND, 2015). For example, the pervious surround method consists in placing a more permeable layer of material around the wastes to create preferential flow paths for the groundwater (Matich et Tao, 1986). The pervious surround can be built using gravel or reusing materials immediately available on-site such as waste rocks if these are not reactive (Thériault, 2004). The pervious surround technique can contribute to reduce the groundwater flowrate in backfilled tailings by more than 90% (Thériault, 2004; Rousseau et Pabst, 2018), therefore limiting the advective solute transport between the pit and the environment (Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003). The size of the pervious surround, and the permeability contrast between the waste and the envelop are two of the main factors governing its effectiveness (Misfeldt *et al.*, 1999; Salama *et al.*, 2002; Thériault, 2004; Lange et Van Geel, 2011; Rousseau et Pabst, 2018).

Previous studies only considered a pervious surround with a constant width (Misfeldt *et al.*, 1999; Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Thériault, 2004; Lange et Van Geel, 2011; Rousseau et Pabst, 2018), and the influence of its shape was not assessed in detail. However, Thériault (2004) and Rousseau et Pabst (2018) numerically observed that groundwater flow velocities were varying within the envelope, thus indicating the pervious surround size could be thinner in the areas with low-flow velocities and wider (to increase the pervious surround transmissivity) where high flow velocities were simulated. Optimizing the geometry of the pervious surround could therefore contribute to improve its effectiveness, maximize the volume of wastes disposed in the pit, reduce the use of borrowed materials, and reduce the overall costs associated with the pervious surround construction. The objective of this research was thus to determine the optimal geometry for pervious surrounds in backfilled open pits. However, studying the optimal placement for various specific pit geometries may rapidly become tedious. For examples, open pits often have elliptic or non-convex complex shapes. In such cases, the optimal design of the pervious surround may depend on the pit geometry, but also on the flow orientation (either aligned with the pit main axis, orthogonal to it, or in any intermediate direction) and on the properties of geological formation the pit is embedded in. The objective of this research was therefore to develop a rather methodology that could be applied to all types of pit geometries, geological setups and flow orientations.

A topology optimization approach (Bendsøe et Sigmund, 2004; Sigmund et Maute, 2013) was chosen to carry out this study. This approach has the advantage of being flexible enough to optimize the pervious surround geometry for any pit shapes, without prior assumptions on the properties of the wastes nor the surrounding rock. Also, the topology optimization approach produces optimized geometries that are not constrained by a predetermined design, at the opposite of parametric optimization often used in hydrogeology (Kimmel *et al.*, 2003; Kiecak *et al.*, 2017; Grajales-Mesa *et al.*, 2020; Singh *et al.*, 2020). In other words, all options were considered using this approach, and were not limited to a continuous surround nor placed only along the sides of the pit. Since topology optimization was introduced in 1988 (Bendsøe et Kikuchi, 1988) for structural compliance problems, the method had been widely applied in the industry to build lighter mechanical parts (Pang et Fard, 2020; Manca et Pappalardo, 2020), develop more efficient heat exchangers (Haertel *et al.*, 2018), and improve geotechnical engineering foundation design (Pucker et Grabe, 2011; Seitz et Grabe, 2016; Kammoun *et al.*, 2019). However, this is the first time, to the authors' knowledge, that the topology optimization approach is applied to a hydrogeological problem.

This paper first presents the formulation of the topology optimization problem applied to the co-disposal of non-reactive waste rocks (forming the pervious surround) and contaminated tailings in a backfilled pit, followed by the numerical implementation of the solving approach.

Then, the optimization approach was applied to two theoretical cases with a conic and an elliptic pit geometries, and was extended to a (significantly) more complex real pit geometry. It finally discusses some results of the optimization of the pervious surround geometry to minimize groundwater flow in backfilled tailings for the selected pit geometries.

9.2 Methodology

9.2.1 Formulation of the optimization problem

The optimization problem consisted of co-disposing contaminated tailings and inert waste rocks in open pits such as groundwater flow in the contaminated tailings was minimized. Several constrains (inspired by real operational constraints on mine sites) were considered during the optimization. For example, too thin (< 6 m wide) waste rocks inclusions in the tailings were considered too difficult to build in practice and unrealistic for operational considerations. Therefore a minimum length scale constraint to control the width of each geometrical features including minimum width of the pervious surround was first considered. Another constrain was also imposed to control the maximum volume of waste rocks disposed in the pit, so that operators can adjust the available volume for tailings disposal in the pit (depending on the type of operations, the ratio between waste rocks and tailings can be different ; e.g. Blight, 2010).

The optimization problem was solved using a density-based topology optimization approach. It consists in searching the repartition of waste rocks and tailings respecting the two above constrains using a meshed representation of the pit and on which each volumic cell was made of either waste rocks, tailings, or a mix of both (Bendsøe et Sigmund, 2004; Sigmund et Maute, 2013). The main advantage of the density-based approach (which allows such material mixing in the cells) is purely computational, because optimization problems expressed in a continuous form are significantly easier to solve than those using discrete variables (Bendsøe et Sigmund, 2004). A continuous material density parameter $0 \leq p \leq 1$ was therefore introduced for each cell of the meshed pit. A cell with a density parameter $p = 0$ corresponded to tailings, while $p = 1$ corresponded to waste rock. Hydraulic conductivity K_i of each cell i was derived from the density parameter ($K_i = f(p_i)$). The objective of the optimization therefore equated to finding the distribution of the continuous material parameter p in the pit respecting the minimum length scale and maximum waste rock volume constrains, so the groundwater flow in backfilled tailings was minimized.

9.2.2 Mathematical formulation

The minimum pervious surround size constraint was first applied implicitly by using an averaged version of the density parameter $\bar{p}$ instead of the raw density parameter p directly. Averaged density parameter $\bar{p}$ was calculated as a weighted mean of the density parameter p in a given volume (Bourdin, 2001) :

$$\bar{p_i} = \frac{RV_i p_i + \sum_{j \in \partial i_R}(R - d_{ij})V_j p_j}{RV_i + \sum_{j \in \partial i_R}(R - d_{ij})V_j} \tag{9.1}$$

where R is the radius on which to search for the neighboring cell centers for averaging the density parameter, and $j \in \partial i_R$ stands for cell j those center to center distance $d_{ij} \leq R$.

The maximum amount of waste rocks disposed in the pit (noted α_{max}) was expressed considering the averaged density parameter $\bar{p}$ as :

$$V_{wr}(\bar{p}) = \sum_{i}^{n} V_i \bar{p}_i < \alpha_{max} V_{pit} \tag{9.2}$$

with n the number of cells in the discretized optimization domain (the pit), V_i the volume of the cell i and V_{pit} the volume of the (discretized) pit.

Minimizing the groundwater flux through the backfilled tailings was achieved by minimizing the mean head gradient in the tailings (parametrized by $\bar{p} = 0$). As a consequence, the cost function $c(h, p)$ was defined as :

$$c(h, p) = \frac{\sum_i^n V_i(1 - \bar{p}_i)(\nabla h)_i}{\sum_i^n (1 - \bar{p}_i)V_i} \tag{9.3}$$

with h_i and $(\nabla h)_i$ respectively the hydraulic head and the head gradient at the center of the cell i. The head gradient was calculated as a function of the former according the Green-Gauss gradient scheme :

$$\nabla h_i = \frac{1}{V_i} \sum_{j \in \partial i} A_{ij} \frac{h_j - h_i}{d_{ij}} \tag{9.4}$$

where $j \in \partial i$ is the immediate neighbors j of the cell i and A_{ij} the area of the shared face between cell i and j.

Hydraulic head h in the equations (9.3) and (9.4) was solved based on the distribution of the hydraulic conductivity K in the pit expressed as an equality constrain :

$$g(h, K) = 0 \tag{9.5}$$

Where g is an implicit function and represents the residual of a discretized linear system solved during the numerical simulation of the head (see below).

Finally, the hydraulic conductivity K_i at cell i was linked to the density parameter according to the Standard Isotropic Material with Penalization (SIMP) scheme (Bendsøe et Sigmund, 1999) :

$$\log K_i(\bar{p_i}) = \log K_t + [\log K_{wr} - \log K_t]\, \bar{p_i}^n \tag{9.6}$$

where K_{wr} and K_t are the hydraulic conductivities of waste rocks and tailings, respectively, and n a penalization power. A penalization power $n = 3$ was applied in the present study to force the optimization to converge towards nearly discrete design where each cell is made of either purely waste rocks or purely tailings (Sigmund et Maute, 2013), so no mixing (with $0 \leq \bar{p} \leq 1$) was allowed in the final designs.

Minimizing the groundwater flux in backfilled tailings with a pervious surround made waste rocks could therefore be written :

$$\begin{aligned}
\underset{p}{\text{minimize}} \quad & c(p) = \frac{\sum_i^n V_i(1-\bar{p_i})(\nabla h)_i}{\sum_i^n (1-\bar{p_i})V_i} \\
\text{subject to} \quad & \bar{p_i} = \frac{RV_i p_i + \sum_{j\in\partial i_R}(R-d_{ij})V_j p_j}{RV_i + \sum_{j\in\partial i_R}(R-d_{ij})V_j}\,, \\
& \log K_i(\bar{p_i}) = \log K_t + [\log K_{wr} - \log K_t]\, \bar{p_i}^n\,, \\
& g(h,K) = 0\,, \\
& V_{wr}(\bar{p}) < \alpha_{max} V_{pit}
\end{aligned} \tag{9.7}$$

9.2.3 Performing the optimization

The optimization problem (Equation 9.7) was solved using the globally convergent version of the method of moving asymptote (GC-MMA) gradient descent algorithm (Svanberg, 2002). For each iteration, the groundwater flow (i.e. solving $g(h, K) = 0$, equation 9.5) was simulated numerically using the finite volume open-source code PFLOTRAN (Hammond *et al.*, 2012) with the RICHARDS mode. Density parameter distribution p was updated considering the total derivative of the objective function dc/dp calculated using the chain rule and the adjoint method (Errico, 1997) :

$$\frac{dc}{dp} = \frac{\partial c}{\partial \bar{p}}\frac{d\bar{p}}{dp} + \lambda\,\frac{\partial g}{\partial K}\,\frac{dK}{d\bar{p}}\,\frac{d\bar{p}}{dp} \tag{9.8a}$$

$$\frac{\partial g}{\partial h}^T \lambda = -\frac{\partial c}{\partial h}^T \tag{9.8b}$$

where λ is the adjoint vector, and $\partial g/\partial h$ and $\partial g/\partial K$ the derivative of the residual of the finite volume linear system solved by PFLOTRAN relative to the head and the hydraulic conductivity (i.e. the sensitivities). Sensitivities were not available in the public version of PFLOTRAN. The code was therefore modified by the authors to add a new process model called SENSITIVITY_ANALYSIS, which calculated these sensitivities by finite difference and saved them in HDF5 binary format. The modifications are available at the following repository : https://bitbucket.org/pflotran/pflotran/branch/moise/make_optimization_v2. Adjoint equation (9.8b) was solved using the BiCGSTAB algorithm (van der Vorst, 1992) and with a point Jacobi preconditionner.

Cost function calculation, update of the density parameter p, derivation of the hydraulic conductivity in the domain and PFLOTRAN simulation at each iteration were carried out automatically using custom Python scripts. The Python libraries NumPy (Harris *et al.*, 2020), nlopt (Johnson, 2020) and SciPy (Jones *et al.*, 2001) were used to manipulate the data array during the optimization process, update the density parameter according to the GC-MMA algorithm and solve the adjoint equation, respectively. The whole process was conducted in eight steps :

1. Initialize the density parameter
2. Average the density parameter
3. Calculate the hydraulic conductivity of each cell according to the averaged density parameter
4. Conduct numerical simulation
5. Calculate objective function and constrains
6. Solve adjoint equation and calculate derivatives
7. Improve the density parameter
8. Repeat steps 2 to 7 until the number of iterations (400) was reached or when the relative change in the cost function between two consecutive iterations was less than 1×10^{-6}.

At the end of the optimization process, the final geometry of the pervious surround was derived from the averaged density parameter $\bar{p}$. Cells with an averaged density parameter $\bar{p} \leq 0.5$ were considered as waste rocks, and cells with $\bar{p} > 0.5$ were considered as tailings.

9.2.4 Optimization case studies

The above topology optimization approach (which was developed to be applicable to any pit geometry and wastes properties) was used to assess the optimal shape of a pervious

surround made of waste rocks to minimize the groundwater flow in backfilled tailings for two idealistic pit geometries. The first example consisted of a conic pit with a top radius of 250 meters, a bottom radius of 50 meters and a depth of 250 meters with a global 1.2 :1 pit wall slope, representing therefore a volume of nearly 10 million cubic meters. The second example consisted of an elliptic pit characterized by a top-major and minor axis of 450 and 150 meters, a bottom-major and minor axis of 350 and 50 meters, and a depth of 150 meters (pit wall slope of 1.5 :1), for a volume of approximately 21 million of cubic meters. In the elliptic case, the flow and the pervious surround geometry may depend on the gradient orientation. Therefore, three gradient orientations were considered : perpendicular to the minor axis, perpendicular to the major axis, and with a 45° orientation. A last example considered a real pit geometry, which consisted of a roughly elliptical pit, 1000 meters long, 300 meters wide and 175 meters deep, with a mean wall slope of 1 :1.7 and a volume of 3.44×10^7 m^3 (see below for a illustration of the pit geometry). Regional groundwater flow in this case formed an angle of 35° with the pit major axis.

Pit geometries were modeled and discretized using the open-source CAD software Salome (Ribes et Caremoli, 2007) using built-in geometrical object for both the conic and the elliptic pit, and from a topographic map in the real case. Pit walls were simplified and a unique slope was considered (i.e. the benches were not modeled). Conic pit was discretized using an axis-symmetric mesh composed of hexahedron and prisms with approximately 264 000 cells (including 189 000 in the pit), and the elliptic and the real pits used a Centroidal Voronoi Tesselation composed of 500 000 cells (418 000 in the pit) for the elliptic case, and 640 000 (500 000 in the pit) for the real one.

In all the cases tested, backfilled tailings were considered reactive and pre-oxidized, while the pervious envelope was made of inert waste rocks. A maximum volume fraction of waste rocks equal to 20% of the pit volume ($\alpha = 0.2$ in equation 9.2) was considered (this value could be adjusted depending on operational constraints). Tailings and waste rocks were considered to have a hydraulic conductivity of 5×10^{-7} m/s and 5×10^{-4} m/s, respectively (which are typical values for in hard rock mines ; Aubertin *et al.*, 2002; Bussière, 2007)). The rock surrounding the pit was considered homogenous with a hydraulic conductivity of 1×10^{-7} m/s (e.g. Sykes *et al.*, 2009; Zharikov *et al.*, 2014; Cahyadi *et al.*, 2017). Topography around the pits was considered planar and groundwater flow was submitted to a unitary regional head gradient. Fully saturated conditions were considered at all times.

The gradient based algorithm used by the topology optimization problem only can find local optimum, and the solution of the optimization process thus depends of the starting point. Several starting points were therefore considered in this study to search for better optimized

geometries and included (1) a homogeneous distribution of the density parameter $p = 0.18$ in the pit, (2) a discrete distribution approaching the theoretical pervious surround (i.e. the density parameter p was set to 1 if the cell belonged to the pervious surround, and $p = 0$ otherwise), (3) several continuous distributions of the raw density parameter in the range $p \in [0.001, 0.4]$ to respect the volume fraction α_{max} of 0.2, and (4) several discrete distributions of waste rocks and tailings in the domain (p was either 0 or 1 randomly). Starting from the pervious surround (case 2) ensured that the optimized geometry would have at least the same performance as the reference pervious, while random starting points (cases 3 and 4) could initiate the emergence of non-conventional geometries. In the rest of the paper, the geometry reducing the most the mean head gradient in the tailings was called the *optimal* geometry, to clearly differentiate it from other geometries still optimized but less efficient. It is reminded, however, that the *optimal* geometry determined in this study did not necessarily correspond to the global optimum for the reasons explained above.

The difference between the optimal (best) geometry and the others optimized geometries was evaluated by calculating the volume of waste rock lying outside the optimal geometry noted P_d (for percentage of dissimilarity). The smaller the percentage of dissimilarity P_d, the higher the considered geometry is similar to the optimal one. The performances of the optimized geometries were also compared to the case where the pit was backfilled with tailings only, and with a homogeneous pervious surround of constant width (i.e. 15 and 12 meters in the conic and the elliptic pit, respectively).

9.3 Results

9.3.1 Conic pit

Optimized geometry

Topology optimization of waste rocks and tailings codisposal was first assessed in the conic pit. Among the various starting points, the optimal geometry was obtained starting from a random continuous distribution ($p \in [0.001, 0.4]$) in the pit (Table 9.1). The optimization process preferentially placed waste rocks all along the pit wall, therefore forming a pervious surround (Figure 9.1a). The width of the pervious surround was, however, not constant, and varied radially and with the pit depth. The optimal geometry was also quasi-symmetric respective to the plane perpendicular to the flow direction and passing through the pit center. The symmetry was, however, not exactly perfect, probably because of the non-symmetric starting point. The waste rock width was varying significantly close to the top of the pit, and was approximately 9 meters wide where the pit walls were perpendicular to the regional flow

direction (i.e. 6 meters finer than the reference pervious surround of 15 meters), and up to 34 meters where they were parallel (i.e. 19 meters wider than the reference pervious surround). Elsewhere (i.e. in the slopes and on the pit bottom), the optimal width of the pervious surround was 9 meters in average and 6 meters thinner than the reference regular pervious surround. A bulge was also observed between 200 and 220 meters depth (i.e. in the lower 1/5 of the pit) where the pit wall was parallel to the gradient direction (Figure 9.1a). With this optimal geometry, the mean head gradient in the tailings was approximately 4.32×10^{-3}, i.e. 99 times lower compared to case without pervious surround (4.28×10^{-1}), and 1.9% lower than the reference constant-width pervious surround (4.40×10^{-3} ; Table 9.1).

Groundwater streamlines entering the tailings were nearly linear, aligned with the simulated regional flow direction, and had a constant velocity. The total flowrate of groundwater entering the tailings was therefore estimated by multiplying the flow velocity by the projected area of the tailings in the plane perpendicular to the flow. The total flowrate entering the tailings was thus approximately 4240 m^3/y, which corresponded to a 6% decrease compared to the constant width pervious surround (4420 m^3/y), and approximately 120 times lower compared to the case without pervious surround (506 000 m^3/y, Table 9.1).

This first example therefore showed that simple modifications in the pervious surround geometry can contribute to reduce the mean head gradient and the groundwater flux in backfilled tailings, and therefore slightly improve the performance of the technique.

Impact of starting point on optimized geometry

Similar mean head gradient and flowrate through the tailings were also obtained with the optimized geometries emerging from other starting points considered. Indeed, mean head gradient for the other optimized cases (i.e. originating from different starting points) were all comprised between 4.35×10^{-3} and 4.60×10^{-3}, which was approximately between 0.75 and 6.6% greater than considering the optimal geometry, while flowrate were between 4300 and 4540 m^3 (1.7 to 7.0% greater ; Table 9.1).

Starting from the pervious surround (Figure 9.1b), the optimization gave an optimized geometry which was very close to the starting point and the constant width pervious surround. The width of the pervious surround was essentially modified at the top of the pit and was wider (respectively thinner) of 8 meters compared to reference pervious surround where the pit walls were perpendicular (respectively parallel) to the regional flow direction. Also, starting from a homogeneous distribution $p = 0.18$ everywhere in the pit (Figure 9.1c), the optimized geometry was similar to the optimal case. The pervious surround was essentially larger at the top of the pit where it was up to 10 meters larger where the pit walls were parallel to the

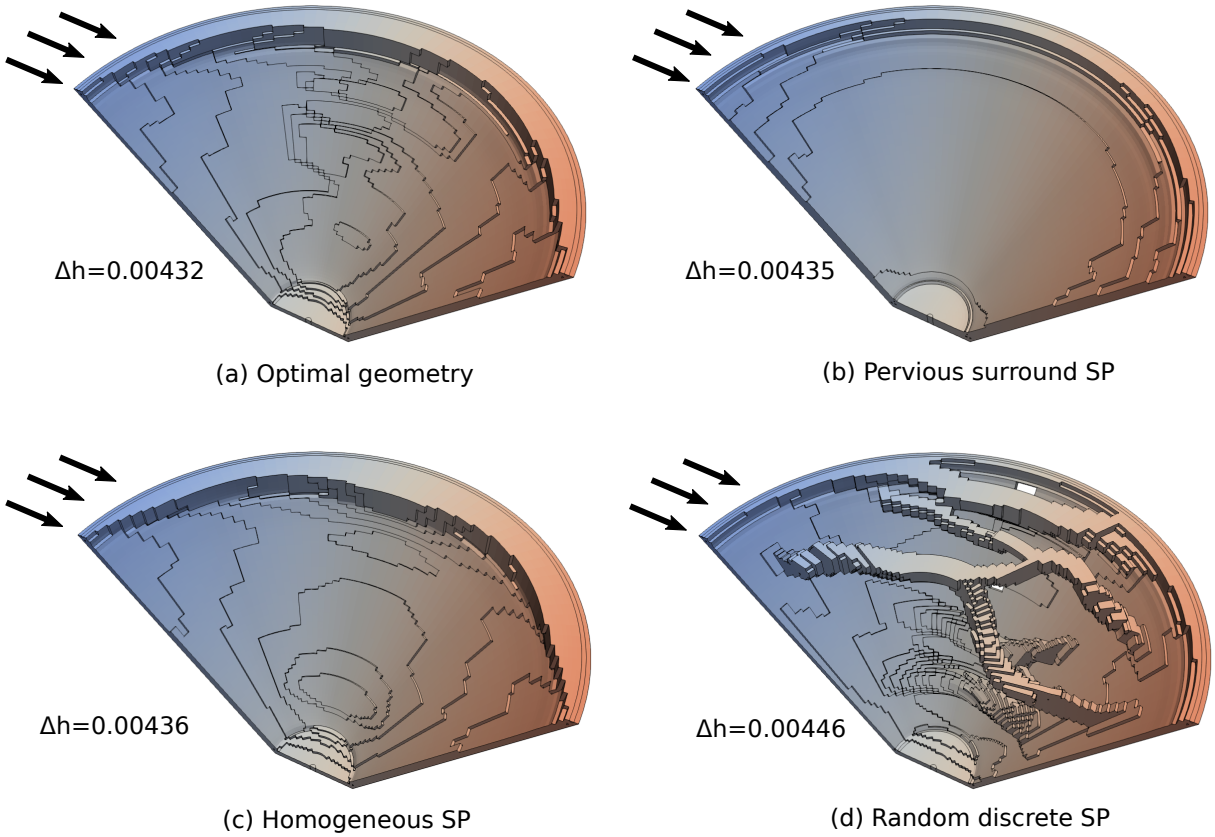


Figure 9.1 Optimized pervious surround geometry. (a) Optimal geometry (starting from a random continuous density parameter), (b) starting from the pervious surround, (c) starting from a homogeneous density parameter $p = 0.18$, and (d) from a discrete distribution of waste rocks and tailings in the pit. Only waste rocks are shown, the rest of the volume is occupied by tailings. Black arrows show the regional flow direction, and Δh indicates the head gradient in the tailings. SP : Starting Point.

regional flow, and slightly finer elsewhere. The same bulge as in the optimal geometry was also obtained. Lastly, random discrete starting points (three runs) generally created conduit of waste rocks through the tailings (Figure 9.1d). They approximately had the form of arches which intercepted each other to form larger conduits in the center of the pit. These arches represented between 30 and 35% of the total waste rocks volumes in the pit, and their shapes and locations depended on the initial random distribution considered, but with some similarity. For example, all the runs created a pervious surround with a conduit at nearly the same location of the bulge than the optimal case.

Starting point sensitivity analysis showed that all the geometry included a pervious surround which was larger where the pit walls were parallel to the regional flow direction, thinner when perpendicular, and for most of them, the same increased width/conduits on the lower fifth of

Tableau 9.1 Comparison of mean head gradient in the tailings, groundwater flowrate, dissimilarity P_d (expressed in %) with the optimal pervious surround geometry, and the mean head gradient reduction compared to the case without pervious surround. SP : Starting Point.

Simulation	Mean gradient	P_d (%)	Gradient reduction	Flowrate (m^3/y)
Tailings only	4.28×10^{-1}		Ref.	506000
Reference pervious surround	4.40×10^{-3} (+1.9%)	14%	97	4490 (+5.9%)
Optimal geometry (Random Continuous SP)	4.32×10^{-3} (Ref.)	Ref.	99	4240 (Ref.)
Pervious surround SP	4.35×10^{-3} (+0.75%)	13%	98	4420 (+4.3%)
Homogeneous SP	4.36×10^{-3} (+1.0%)	7%	98	4300 (+1.7%)
Random Continuous SP, run 2	4.50×10^{-3} (+4.2%)	12%	95	4410 (+4.1%)
Random Discrete SP, run 1	4.50×10^{-3} (+4.2%)	30%	95	4450 (+5.0%)
Random Discrete SP, run 2	4.46×10^{-3} (+3.3%)	28%	96	4440 (+4.7%)
Random Discrete SP, run 3	4.60×10^{-3} (+6.6%)	32%	92	4540 (+7.0%)

the pit. These similarities between optimized and optimal geometries showed both features (pervious surround of a variable width and the bulge) were robust local optimum and contributed to reduce the mean head gradient in the tailings compared to the reference constant width pervious surround. The similar mean head gradient in each optimized case also showed that significant changes in the pervious surround design did not drastically modify its hydraulic performance (the relative changes of mean head gradient and flowrate were lower than 2% and 5%, respectively) In practice, this allows for some flexibility in pervious surround design and construction. The three optimized geometries starting from random discrete distribution of the density parameter p constitute also example of how topology optimization can create non-conventional designs. However, in conic pits, performance of such non-conventional designs were between 3.3% to 6.6% lower than the optimal pervious surround in terms of mean head gradient. This therefore indicates that the addition of conduits through the tailings was a-priori not necessary and less efficient than a pervious surround only.

9.3.2 Elliptic pit

Flow parallel to the main axis (0° gradient orientation)

Optimization of the waste rock placement was then carried out for the elliptic pit geometry and considering first a regional gradient parallel to the pit major axis (0° gradient). The optimal geometry consisted of a pervious surround and was obtained with the pervious surround starting point (Figure 9.2), but other starting points also converged to a similar geometry. The surround width somewhat varied radially, but less than with the conic pit, and was up to 14 meters wide (+2 meters compared to the constant width pervious surround) where the pit wall was parallel to the regional flow direction and 9 meters close to walls perpendicular to the regional flow direction (-3 meters compared to the constant width pervious surround). On the pit floor, the waste rock width was constant and around 12 meters (like in the reference case). This optimal geometry was therefore very close to the reference case with a constant width pervious surround, ($< 4\%$ dissimilarity with the reference case ; Table 9.2).

These small dissimilarities were, however, sufficient to reduce the mean head gradient in the tailings by 3.9% compared to the reference case (Table 9.2), and by a 60 times factor compared to the case with tailings only. The optimal geometry also contributed to effectively divert the groundwater streamlines towards the sides and the bottom of the pit, and flowrate entering the tailings was also significantly decreased to approximately 4800 m^3/y, i.e. 71 times lower than in the case with tailings only and 5.5% lower than in the constant width pervious surround case (Table 9.2). Small modifications of the pervious surround width along the wall could therefore lead to a significant reduction of the flowrate through the tailings (and thus of the risk of contamination).

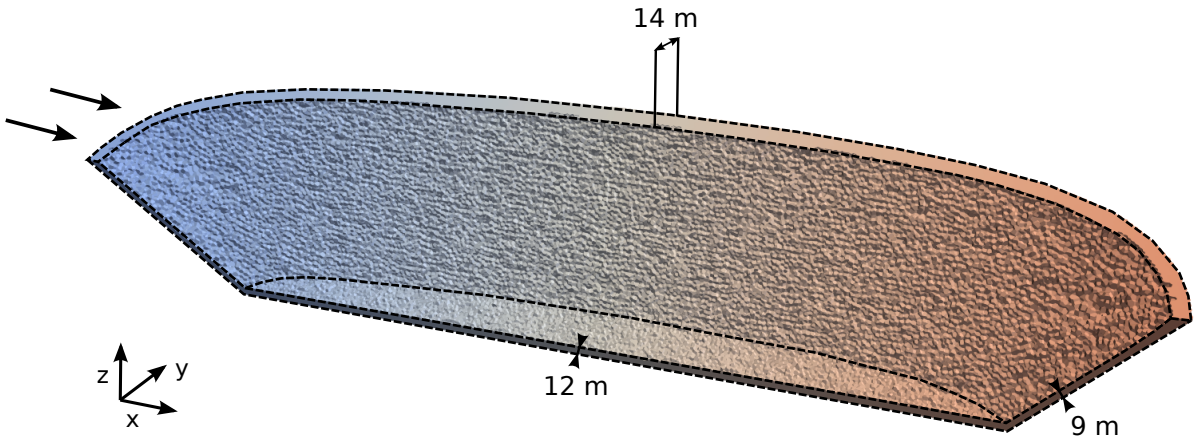


Figure 9.2 Optimal pervious surround for the elliptic pit with a 0° gradient orientation.

Tableau 9.2 Comparison of mean head gradient in the tailings, groundwater flowrate, dissimilarity P_d (expressed in %) with the optimal pervious surround geometry, and the mean head gradient reduction compared to the case without pervious surround for the elliptic pit with the regional gradient oriented along its major axis. SP : Starting Point.

Simulation	Mean gradient	P_d (%)	Gradient reduction	Flowrate (m^3/y)
Tailings only	7.10×10^{-1}		Ref.	346000
Reference pervious surround	1.24×10^{-2} (+3.9%)	4.3%	57	5060 (+5.5%)
Optimal geometry (pervious surround SP)	1.19×10^{-2} (Ref.)	Ref.	60	4800 (Ref.)
Homogeneous SP	1.20×10^{-2} (+0.7%)	11%	59	4880 (+1.7%)
Random Continuous SP (run 1)	1.22×10^{-2} (+2.0%)	12%	58	4880 (+1.8%)
Random Continuous SP (run 2)	1.20×10^{-2} (+1.5%)	12%	59	4870 (+1.5%)
Random Continuous SP (run 3)	1.21×10^{-2} (+1.2%)	15%	59	4830 (+0.7%)
Random Discrete SP (run 1)	1.22×10^{-2} (+2.6%)	15%	58	5000 (+4.2%)
Random Discrete SP (run 2)	1.25×10^{-2} (+4.6%)	18%	57	4950 (+3.3%)
Random Discrete SP (run 3)	1.23×10^{-2} (+3.2%)	16%	58	4960 (+3.4%)

45° oriented flow

The optimal geometry of the pervious surround in an elliptic pit with a regional gradient oriented 45° with the pit major axis consisted of an axis-symmetric pervious surround and a rectilinear inclusion located in the middle of the pit and on the top of the tailings (Figure 9.3). The width of the pervious surround was mainly constant in the slopes (9 meters in average, -3 meters compared to the reference constant width pervious surround), but varied radially at the top of the pit. The pervious surround width was maximal (up to 27 meters) where the groundwater in the rock flowed tangentially to the pit walls, and minimal (9 meters) where groundwater flowed radially to them (Figure 9.3). The planes tangential to the pit walls at these locations respectively formed an angle of -26° and 78° with the gradient orientation (in the trigonometric direction ; Figure 9.3). The rectilinear inclusion, located on the top of the tailings and in the pit center was approximately 60 meters wide, 12 meters high, and oriented in the regional flow direction. The pervious surround on the pit bottom showed an

alternation of eyes-shaped holes letting tailings directly in contact with the surrounding rock, and of pseudo-inclusion up to 22 meters high. These inclusions and holes were preferentially aligned with the vertical plane joining the two sides of the pit where the pervious surround width was maximal.

The mean head gradient in the tailings with the optimal waste rocks and tailings geometry was approximately 9.21×10^{-3}, which was 60 times lower than in the case with tailings only and 4% better than considering the constant width pervious surround (Table 9.3). The optimized geometry also contributed to divert the groundwater streamlines towards the bottom of the pit. The few groundwater streamlines still entering the tailings flowed with an angle of -26° with the regional gradient direction, and were also parallel to the plane tangential to the pit walls at the maximum pervious surround width.

Sensitivity analyses performed using other starting points showed that some of the other optimized geometries had very similar performances to the optimal one, with a mean head gradient less than 0.6% greater than the optimal case (Table 9.3). These geometries were, however, significantly different from the optimal one, with a percentage of dissimilarity of around 15%. The main difference between these geometries and the optimal one described above was the absence of the linear waste rocks inclusion at the surface of the tailings in the middle of the pit, thus indicating that in practice, this only marginally contributed to reduce the mean head gradient in the tailings. However, minimum and maximum pervious surround width location were still at the same place than in the optimal geometry described above.

90° gradient orientation optimization

Considering a gradient orientation parallel to the pit minor axis (90° gradient orientation), the optimal geometry was obtained starting from a random discrete distribution of waste rocks within the tailings. The optimal geometry consisted of a pervious surround, with various waste rocks conduits through the tailings or lying on the pit bottom (Figure 9.4). In this case, the pervious surround width along the pit walls was approximately constant and 8 meters wide (-4 meters compared to the reference case). There were a total of 5 conduits through the tailings located at variable depth but usually in the top half of the pit (between 0 and 75 meters depth). They were also quasi-linear for most of them, usually 25 meters wide in diameter, and distant from each other by approximately 50 meters. Conduits lying on the pit bottom were approximately 20 meters high and separated by several elliptic holes with a variable width along the pit major (12 to 30 meters) and a nearly constant size along the minor axis (30 meters). The pit wall parallel to regional flow direction also showed a bulge between 50 and 70 meters depth and nearly 20 meters high (Figure 9.4).

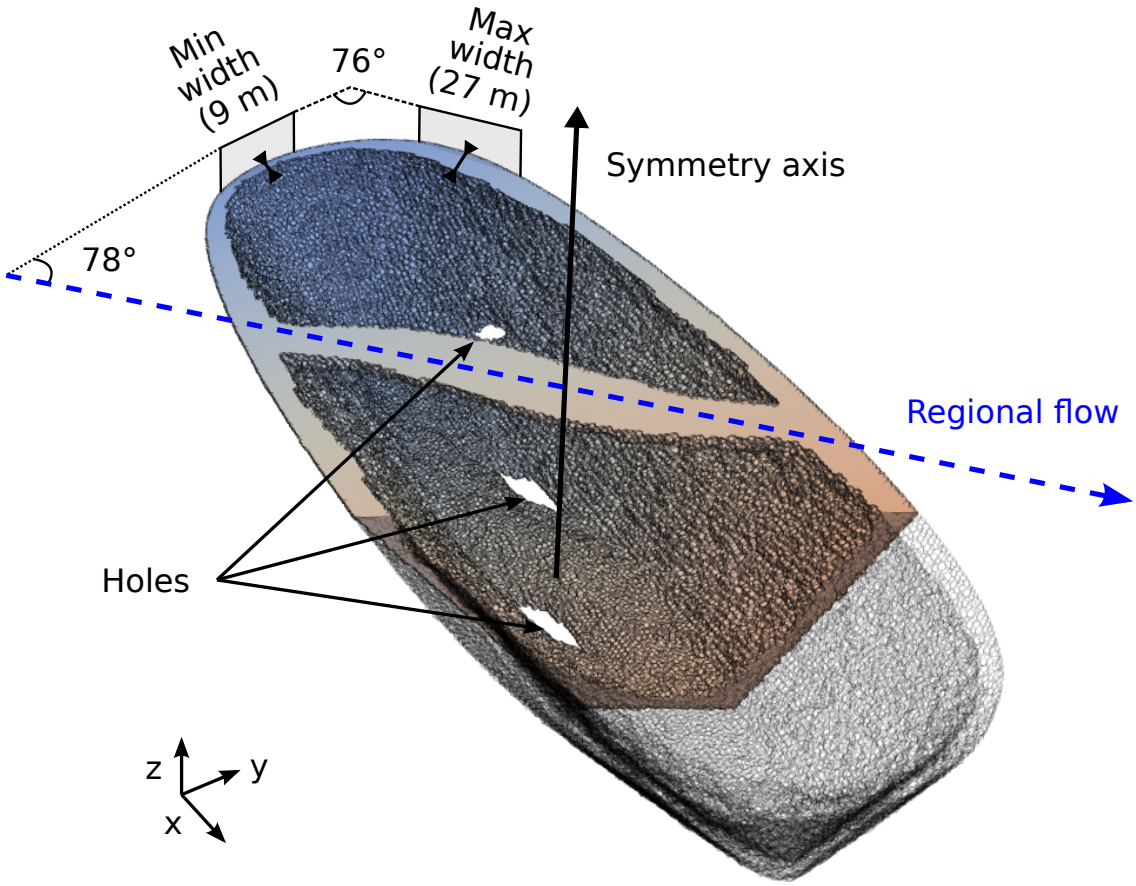


Figure 9.3 Optimal pervious surround for the elliptic pit with a 45° gradient orientation showing minimum and maximum width at non-trivial location, a linear waste rocks inclusion aligned with the regional flow direction and with various holes on pit bottom.

This optimal geometry gave a mean head gradient in the tailings of 4.14×10^{-3}, which corresponded to a decrease of 38% compared to the reference pervious surround case (5.7×10^{-3}), and a decrease by a factor 83 compared to the case with tailings only (Table 9.4). The increased gradient reduction compared to the other elliptic cases considered above (below 5% in general) could be explained by the relatively short flow distance in the pervious surround and by the different flow path taken by the groundwater, which tended to enter the pervious surround and then continue towards the pit bottom. Streamlines in the tailings were mainly rectilinear and aligned with the regional gradient direction, and the simulated flowrate was approximately 5340 (m^3/y), i.e. 38% lower than those in the reference pervious surround case and 100 times lower than the case with tailings only.

The sensitivity analysis conducted for the 90° gradient orientation case showed that all the optimized geometries consisted of a pervious surround, either with a constant or variable

Tableau 9.3 Comparison of mean head gradient in the tailings, groundwater flowrate, dissimilarity P_d (expressed in %) with the optimal pervious surround geometry, and the mean head gradient reduction compared to the case without pervious surround for the 45° gradient orientation elliptic pit. SP : Starting Point.

Simulation	Mean gradient	P_d (%)	Gradient reduction
Tailings only	5.55×10^{-1}		Ref.
Reference pervious surround	9.60×10^{-3} (+4.2%)	15%	58
45° canal	9.74×10^{-3} (+5.7%)	19%	57
Optimal geometry (homogeneous SP)	9.21×10^{-3} (Ref.)	Ref.	60
Pervious surround SP	9.22×10^{-3} (+0.1%)	13%	60
Random Continuous SP (run 1)	9.24×10^{-3} (+0.3%)	15%	60
Random Continuous SP (run 2)	9.27×10^{-3} (+0.6%)	15%	60
Random Continuous SP (run 3)	9.40×10^{-3} (+1.9%)	14%	59
Random Discrete SP (run 1)	9.35×10^{-3} (+1.5%)	19%	59
Random Discrete SP (run 2)	9.38×10^{-3} (+1.8%)	18%	59
Random Discrete SP (run 3)	9.48×10^{-3} (+2.9%)	20%	58

width (larger where the pit wall was parallel to regional flow, thinner elsewhere). Nearly all the optimized geometries (except those starting from the pervious surround) showed waste rock conduits at the surface or through the tailings, and performed better than the reference pervious surround ; Table 9.4). Therefore, these results showed that the width-optimized pervious surround was not the most efficient geometry, even if it contributed to significantly reduce the mean head in the tailings (-17% compared to the reference case) and waste rocks conduits were necessary to increase the efficiency of the pervious surround. In practice, this implied a pervious surround along with multiple linear inclusion of waste rock through or at the surface of the tailings should be considered in elliptic pit when the regional gradient is parallel to the pit minor axis.

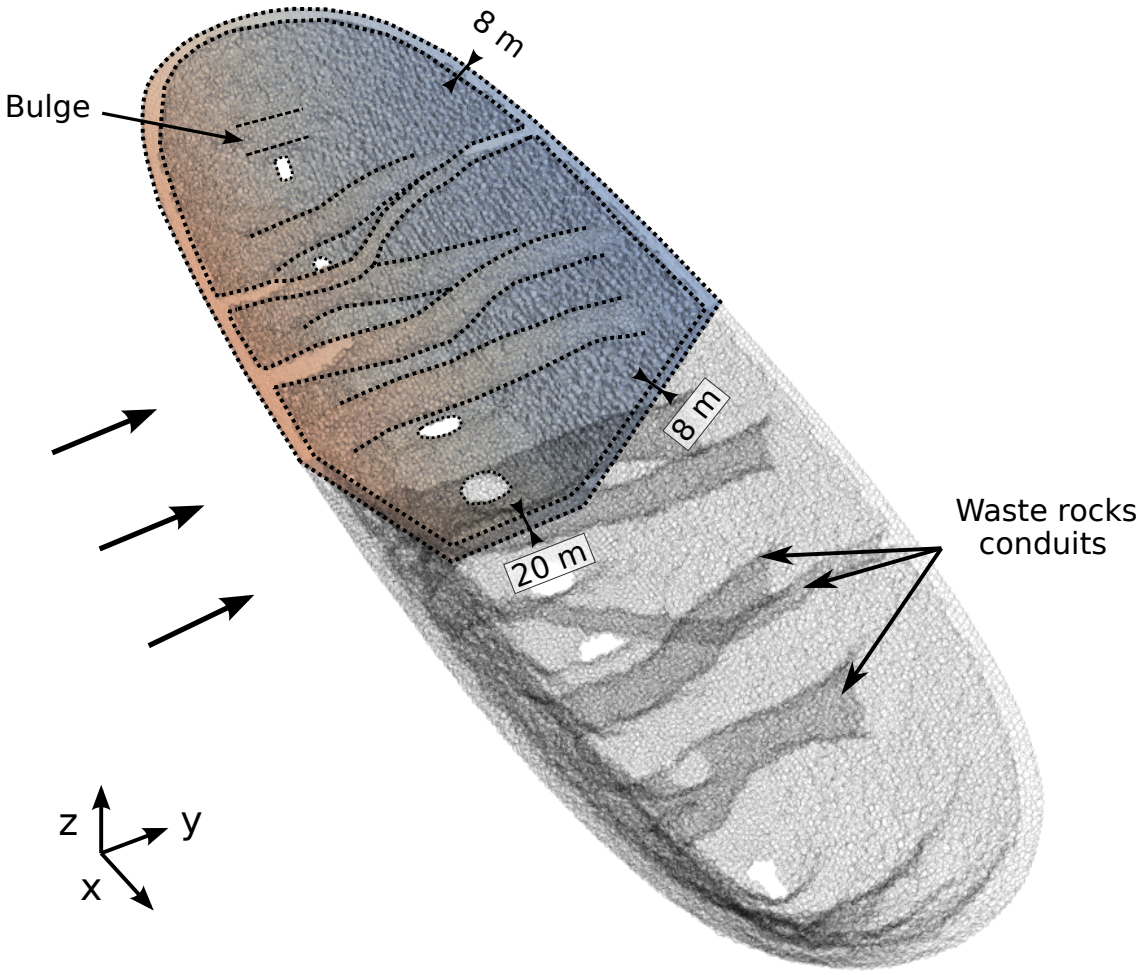


Figure 9.4 Optimal pervious surround for the elliptic pit with a 90° gradient orientation. Black arrows show the gradient orientation (along $\vec{y}$ direction).

9.3.3 Real case geometry

Finally, the topology optimization approach was applied to the pervious surround design in the real pit geometry described above. The optimal geometry was obtained considering the random continuous starting point ($p \in [0, 0.4]$), and consisted of a pervious surround with a variable width (Figure 9.5). Three other starting points (homogeneous, pervious surround and another random continuous) also gave very similar performance (i.e. less than 0.01% difference) and similar optimized geometry (between 7 and 9% dissimilarity ; Table 9.5). The essential feature of these four optimized geometries was the variable width of the pervious surround, which was 8 meters wide alongside the east and west walls of the pit (where the groundwater was entering or leaving the pervious surround), and up to 20 meters wide on the

Tableau 9.4 Comparison of mean head gradient in the tailings, groundwater flowrate, dissimilarity P_d (expressed in %) with the optimal pervious surround geometry, and the mean head gradient reduction compared to the case without pervious surround for the 90° elliptic pit. SP : Starting Point.

Simulation	Mean gradient	P_d (%)	Gradient reduction	Flowrate (m^3/y)
Tailings only	3.44×10^{-1}		Ref.	548000
90° canal	5.05×10^{-3} (+22%)	28%	68	6530 (+22%)
Reference pervious surround	5.70×10^{-3} (+38%)	27%	60	7340 (+38%)
Optimal geometry (Random Discrete SP)	4.14×10^{-3} (Ref.)	Ref.	83	5340 (Ref.)
Homogeneous SP	4.75×10^{-3} (+15%)	27%	72	6070 (+14%)
Pervious surround SP	4.85×10^{-3} (+17%)	25%	71	6170 (+16%)
Canal SP	4.69×10^{-3} (+13%)	28%	73	5920 (+11%)
Random Continuous SP (run 1)	4.55×10^{-3} (+10%)	26%	76	5840 (+9.3%)
Random Continuous SP (run 2)	4.57×10^{-3} (+10%)	28%	75	5880 (+10%)
Random Continuous SP (run 3)	4.50×10^{-3} (+8.8%)	29%	76	5800 (+8.6%)
Random Discrete SP (run 2)	4.28×10^{-3} (+3.6%)	31%	80	5540 (+3.6%)
Random Discrete SP (run 3)	4.22×10^{-3} (+1.9%)	33%	82	5380 (+0.8%)

north and south walls and on the pit floor (where groundwater was flowing mainly tangentially to the pit wall). Pervious surround width was approximately constant and 16 meters thick on pit bottom. Groundwater in the optimal geometry flowed nearly linearly in the tailings, but with an angle of approximately 20° with the regional flow direction, i.e. an angle of -15° with the pit major axis (Figure 9.5). Mean head gradient in the tailings was approximately 9.52×10^{-3} for all the four optimized geometry, which was 64 lower than the case with tailings only, and 5% lower than with a constant width pervious surround (Table 9.5). The very similar mean head gradients considering the four starting point indicated that the optimal geometry found in this study was a robust optimum. This also indicates that the little changes between the different geometry did not impact so much their performance, or, in other words, that construction of the pervious surround would be relatively flexible.

Tableau 9.5 Comparison of mean head gradient in the tailings and of the percentage of dissimilarity P_d considering the different starting points (SP) for the real case pit.

Simulation	Mean gradient	P_d (%)	Gradient reduction
Tailings only	6.07×10^{-3}		Ref.
Reference pervious surround	1.00×10^{-4} (+5.1%)	11%	61
90° canal	1.11×10^{-4} (+16.3%)	17%	55
Optimal geometry (Random Continuous SP)	9.52×10^{-3} (Ref.)	Ref.	64
Pervious surround SP	9.52×10^{-5} (+0.039%)	9.1%	64
Homogeneous SP	9.52×10^{-5} (+0.020%)	7%	64
Random Continuous SP (run 2)	9.53×10^{-5} (+0.095%)	8%	64
Random Discrete SP (run 1)	9.63×10^{-3} (+1.2%)	14%	63
Random Discrete SP (run 2)	9.88×10^{-3} (+3.8%)	17%	61
Random Discrete SP (run 3)	9.77×10^{-5} (+2.7%)	13%	62

9.4 Results analysis

9.4.1 Optimal waste rocks and tailings codiposal geometry

The results of the optimization showed that for all the cases simulated, the optimal geometry for reducing groundwater flow in backfilled tailings consisted of a pervious surround with a variable width, and in few cases with waste rocks conduits through the tailings (i.e. in elliptic pit with gradient along the minor axis). The optimal pervious surround was in general thinner where the groundwater flow entered or exited the pit, and wider where the flow in the pervious surround was tangential to the pit wall. These locations corresponded to the direction perpendicular and parallel to the regional flow direction, respectively, in the cases of conic and elliptic pits when the gradient was aligned with its major or minor axis. However, this was no more the case considering the other gradient orientation for elliptic pits (i.e. the 45° gradient orientation ; Figure 9.3) and for the real case inspired pit, as these locations were no more linked trivially to the pit geometry or to the gradient orientation.

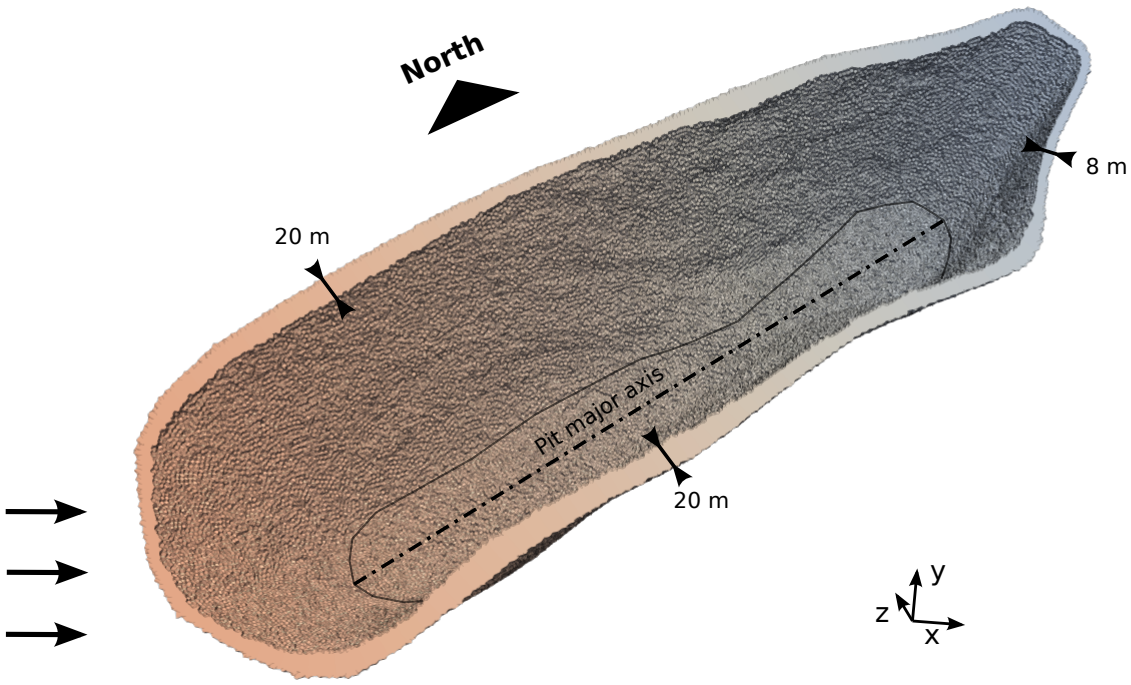


Figure 9.5 Optimal pervious surround geometry for the real case. Black arrows (lower left) shows the regional flow direction.

Gradient reduction using the optimized pervious surround was rather small (between 2 and 5%) compared to the constant width reference case in four of the five cases simulated (i.e. conic, elliptic pit with a gradient orientation of less than 45°, and the real pit). This showed, along with the sensitivity analysis regarding the optimization starting point, that different geometries could perform similarly. In other words, construction rules for building a pervious surround should be relatively flexible in practice, providing the essential feature of the optimal are built (for example as long as the pervious surround is thinner where the flow enters the pit, and wider where the flow is parallel to the pit walls). In these cases, the added value of the topology optimization was to prove that such a pervious surround was actually a robust optimum and which might be close the global optimum of the optimization problem.

Conduits of waste rock running through the tailings were often obtained for several geometries (conic, 45 and 90° elliptic pit and the real case), especially when using random discrete starting points. In most cases, these waste rocks conduits were oriented along the regional flow direction independently of the pit shape, which could give the impression that such design would contribute to reduce the contaminant transport in general. However, such structures contributed to reduce the mean head gradient in the tailings only in the elliptic pit case and

when the regional gradient was orientated along the pit minor axis (90° angle). In this case, gradient reduction was reduced by nearly 17% compared to only a variable width pervious surround, to reach a total reduction compared to the reference case by 38% (Table 9.4). In practice, the use of linear inclusions of waste rock therefore appears useful only when the gradient is oriented with the minor axis, and of negligible significance otherwise (while causing some additional challenges in terms of construction ; also see discussion below).

9.4.2 Test of the optimized geometries with transport simulations

The final purpose of adding a pervious surround structure in the pit was to reduce the solute transport from the backfilled tailings to the environment. In the previous section, optimization was carried out based on the minimization of hydraulic head in the tailings to reduce advective solute transport (see methodology), so optimal geometry was here validated using simplified transport simulations considering advection and dispersion. Transport simulation modeled the dispersion of a non-reactive contaminant contained in the backfilled tailings to the environment. Geochemical reactions such as mineral dissolution or precipitation were neglected. Only the transport results for the optimal pervious surround in the elliptic pit with a gradient oriented along its minor axis (90° case, see above) are presented here, but other cases gave similar trends (results not shown).

To evaluate the performance of the optimized geometry, total contaminants remaining in the pit and contaminant flux exiting the pit were assessed. Transport simulation considering the optimal pervious surround was compared to the case with tailings only, with a constant width pervious surround, and with the optimized width pervious surround (pervious surround starting point). For the purpose of the demonstration, tailings in the pit were considered to initially have an arbitrary contaminant concentration of 1.0 mol/L, while the background concentration in the rest of the domain and in the waste rocks was considered negligible and set to 1.0×10^{-9} mol/L (at time $t = 0$). The diffusion coefficient of the contaminant in the water was 1×10^{-9} m^2/s. Isotropic dispersivity coefficients of 0.5 m in the tailings and the waste rocks, and of 50 m in the surrounding rock were considered. These values were based on the scale of the transport simulation (Schulze-Makuch, 2005), while the choice of an isotropic coefficient was made because use Voronoï cells with PFLOTRAN did not allow for an accurate modeling of anisotropic phenomenon (Rousseau et Pabst, 2021a).

Transport simulations carried out considering the case with tailings only showed half the contaminant initially in the tailings was dispersed in the environment in approximately 500 years, and that all the contaminant was dispersed after 2 000 years. Maximum instantaneous percentage release rate occurred at the start of the transport simulation and was

0.17%/year (dark curve in Figure 9.6a and b). Then, the addition of the pervious surrounds resulted in significant extension of the contaminant retention in the pit and decrease of the solute release rate. Considering the reference (constant width) pervious surround (blue curve in Figure 9.6), it took approximately 21 000 years to disperse half of the contaminant initially in the pit to the environment, i.e. 42 times higher than the case with tailings only. Peak percentage release rate with the reference pervious surround reached 0.0071%/year (25 times less than the case with tailings only) at the start of the simulation, and quickly decreased to less than 0.0025%/year after 4000 years, and then slowly towards less than 0.0001%/year after 80 000 years. Optimization of the width permitted to increase further the retention of half the contaminant by 23% to 26 000 years (red curves in Figure 9.6), but also to decrease the instantaneous percentage release rate by up to 20% between 0 and 38 000 years. After that time, the optimized-width pervious surround released more contaminant, which could be explained because the pit considering the width-optimized contained 35% more contaminants than the constant-width pervious surround at this time (Figure 9.6a). Overall, these results showed the reference and especially the optimized width pervious surround were effective to limit contaminant transport between the pit and the environment.

The optimal pervious surround with conduits did not, however, significantly increase the retention of contaminant in the pit compared to the reference pervious surround (green curve in Figure 9.6a), despite a lower contaminant release rate during 90% of the simulation time (i.e. after 9 000 years Figure 9.6b). This could be explained by the fact that limiting the mean head gradient in tailings might effectively reduce the advective solute transport, but not necessarily the diffusive transport mechanism which can be predominant at early times because of the large concentration gradient at the interface between the tailings and the waste rock (West *et al.*, 2003; Lange et Van Geel, 2011). Actually, waste rocks conduits through the tailings increased the interface area between the waste rocks and the tailings, which allowed more contaminant to migrate from the tailings to the waste rocks and to the environment. This results in a significant increase of the simulated instantaneous solute release rate by up to 35% before 9 000 years compared to the reference case (up to 0.0096 vs. 0.0071%/year ; Figure 9.6b). Consequently, even if the waste rocks conduits contributed to reduce by 40% the mean head gradient in the tailings, it was not effective to limit the overall contaminants transport from the pit to the environment in this case.

9.4.3 Limits of the approach and discussion

Topology optimization results illustrate how different starting points can sometimes result in significantly different optimized geometry. This is caused by the choice of the gradient descent

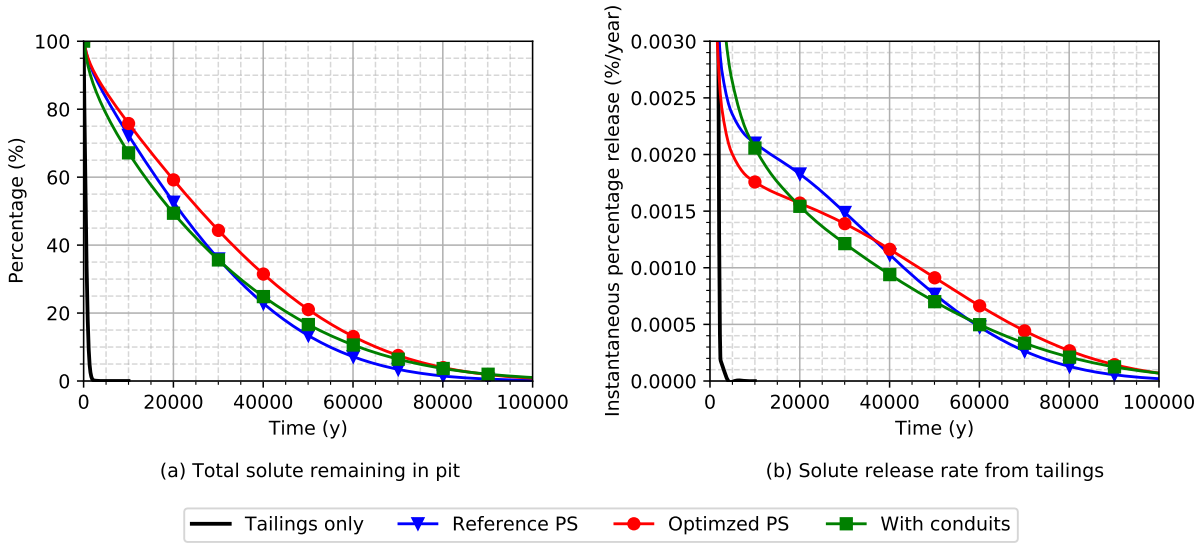


Figure 9.6 (a) Percentage of solute remaining in the pit and (b) solute release rate from the tailings to the environment considering no pervious surround (back curves), the constant width reference pervious surround (blue curves), the optimized width pervious surround (red curve) and the addition of conduits (green curves). PS : Pervious Surround

algorithm to solve the optimization problem which cannot find global, but only local, optima. Starting from a constant-width pervious surround only slightly altered the starting geometry but guarantee to decrease the mean head gradient compared to the reference pervious surround, while starting from a random placement of waste rock and tailings in the pit could create unconventional features such as conduits of waste rocks connecting the two sides of the pit. These conduits, however, often did not contribute to decrease significantly the mean head gradient in the tailings, except for some specific cases such as an elliptic pit with a gradient orientation along the minor axis (Figure 9.4). In practice, these results show that it is necessary to carry more than one optimization and to use various starting points to obtain the most optimal geometries. Such behavior is often encountered when using the topology optimization approach, and other authors also recommend to vary starting points (Haertel *et al.*, 2018) or the material property parameterization technique (Bendsøe et Sigmund, 1999).

However, the waste rocks conduits geometric feature also illustrates the limitations of the topology optimization approach, as no operational constrain was considered until explicitly specified. For example, such conduits could be difficult to construct when the tailings are disposed as a slurry : tailings may not be passable and waste rocks may sink and be mixed with tailings. Constructability and manufacturing limitations are, in fact, a recurring topic in topology optimization, which is typically solved (at least partially) by introducing addi-

tional manufacturability constrains to the optimization (e.g. Harzheim et Graf, 2005, 2006; Vatanabe *et al.*, 2016; Li *et al.*, 2016; Zhou *et al.*, 2016). In the present case, the vertical gradient of the density parameter could be constrained to be only negative, which would result in preventing the apparition of waste rock conduits in the middle of tailings (in other words, waste rocks could appear only above already existing waste rocks). Such constrain was, however, not implemented in the optimization problem. Other operational constrains could also be added to address the long-term performance of the pervious surround by limiting the risk for tailings erosion and migration through the waste rocks and potential clogging of the preferential paths (Kassimov et Obnosov, 2018).

Also, for some of the cases considered in this study (and especially the elliptic pit case with a gradient orientation along the major axis), the relative change of the width near the pit walls was similar to the mean size of the elements used to discretize the pit. This may indicate that the optimization mesh was not refined enough near the pit wall to precisely capture the optimal size of the pervious surround along the walls. The relatively coarse mesh near the pit wall could also introduce numerical errors on the flow and transport simulations carried out in this study. Actually, Salama *et al.* (2002) and Rousseau et Pabst (2018) highlighted the influence of the discretization to accurately simulate flow and transport in backfilled pit, which requires at least 16 elements. In this study, the optimized pervious surround was sometimes represented using only 4 elements, and the solute flux exiting the pit in transport simulation could therefore have been overestimated (Salama *et al.*, 2002). Unfortunately, further refinement in this case was not possible because of computational limitations. Recommendation for future optimization of codisposal in conic or elliptic pits would thus be to increase the mesh density near the pit walls.

Finally, the objective function and constrains used in this study were simplification of the real objective. As discussed above, reducing the mean head gradient in the tailings effectively reduced the advective solute transport from backfilled tailings to the environment, but not necessarily the diffusive transport. Reducing the diffusive mechanisms could be integrated in the optimization process by adding a penalizing term in the objective function to minimize the contact area between the tailings and the waste rocks, for example. A more powerful approach would be to carry the optimization directly on the contaminant release rate from the pit to the environment. This would, however, require to further modify the flow solver to output the transport process model sensitivity, and to adapt the adjoint method to handle coupled processes and time-dependent solution (e.g. Haertel *et al.*, 2018), which was outside the scope of this study. Nevertheless, one of the strenghs of the proposed optimization approach was that it is applicable to any pit shape, hydrogeological setup (heterogeneous surrounding rock

for example), and boundary conditions to consider further the effect of groundwater recharge on the pervious surround effectiveness.

9.5 Conclusion and final remarks

Building a pervious surround with inert waste rocks is an efficient approach to divert water flow around potentially contaminating backfilled tailings and thus reduce contaminant transport. This study proposed a new application of the topology optimization approach to improve the design of the pervious surround for various pit geometries and hydrogeological setups. The optimization approach was applied to two idealistic pit geometries, and a more realistic geometry inspired from a real case.

Results proved that a constant width pervious surround constitutes a nearly optimal geometry for conic and elliptic pits when the gradient formed an angle of maximum 45° with the pit minor axis. A variable width pervious surround (wider when parallel to the flow, thinner when orthogonal to the flow) could contribute to further improve the performance of the technique, but it only resulted in a 5% reduction of the mean head gradient in the tailings. The pervious surround geometry thus appeared to not strongly affect its performance, indicating there would be some flexibility during its conception and construction in practice. In the case the regional flow direction is aligned with the elliptic pit minor axis, the optimized pervious surround could reduce by up to 17% the mean head gradient, and the addition of conduits of waste rocks through the tailings could even increase the performance of the system by 38% compared to the constant width reference case.

Overall, these results showed the good applicability of the topology optimization approach in hydrogeology at the early stage of conception. The optimized geometries and their non-conventional features (and especially waste rocks conduits) were automatically obtained and without previous assumptions on the pit shape, material properties nor hydrogeological conditions in the surrounding rock. However, some of the optimized geometries obtained with this approach could be difficult to construct in practice, as it did not consider constructability constrain (except from those explicitly formulated). In addition, such conduits could increase the diffusive solute transport. However, the topology optimization approach is a powerful tool widely applicable which could easily be improved by integrating more operational constrains and more specific objective functions to address these challenges.

CHAPITRE 10 RÉSULTATS COMPLÉMENTAIRES

10.1 Analyse de l'efficacité de la technique de l'enveloppe perméable

Dans les chapitres précédents, la géométrie de chemins préférentiels placés dans la fosse sous la forme initiale d'une enveloppe perméable a été optimisée. Bien que la technique d'optimisation soit valide pour n'importe quelles propriétés de rejets, de roc ou du matériau de l'enveloppe, ils n'étudient pas l'influence de ces différents paramètres sur son efficacité. Ainsi, la présente section s'intéresse à l'étude de l'efficacité de l'enveloppe perméable et son optimisation au moyen d'une étude paramétrique conduite en deux dimensions avec une géométrie de fosse simplifiée.

10.1.1 Modèle analytique

Le modèle analytique reprend la même géométrie que celle considérée dans le chapitre 6, afin que les solutions analytiques développées dans ce dernier s'appliquent dans cette section. Il se compose d'une fosse circulaire de rayon R_p centré sur l'origine d'un repère cylindrique (r, θ), vu en plan, et dont une enveloppe perméable de largeur e est apposée à la périphérie (Figure 10.1). La fosse est considérée remblayée avec des rejets d'une conductivité K_w et les matériaux de l'enveloppe perméable ont une conductivité K_e. Le roc environnant à l'extérieur de la fosse ($r \geq R_p$) est considéré homogène avec une conductivité hydraulique K_r. L'écoulement de l'eau souterraine est régi par la loi de Darcy, s'effectue en condition saturée et soumis à un gradient hydraulique uniforme à l'infini.

10.1.2 Définition de l'efficacité

L'efficacité de l'enveloppe perméable E_e peut être définie comme pour la ZES (chapitres 7 et 8) par la réduction du flux dans les rejets en présence de l'enveloppe Q_a face au cas sans enveloppe Q_s (voir aussi (Thériault, 2004; Rousseau et Pabst, 2018)) :

$$E_e = 1 - \frac{Q_a}{Q_s} \tag{10.1}$$

Néanmoins, cette définition n'est pas satisfaisante, car ce ratio ne permet pas de rendre compte parfaitement de la diversion des lignes de courant. En effet, une enveloppe perméable de la même conductivité que celle des rejets par exemple n'a pas d'effet sur l'écoulement, mais permet de réduire le flux à travers les rejets parce qu'ils occupent une plus petite section de

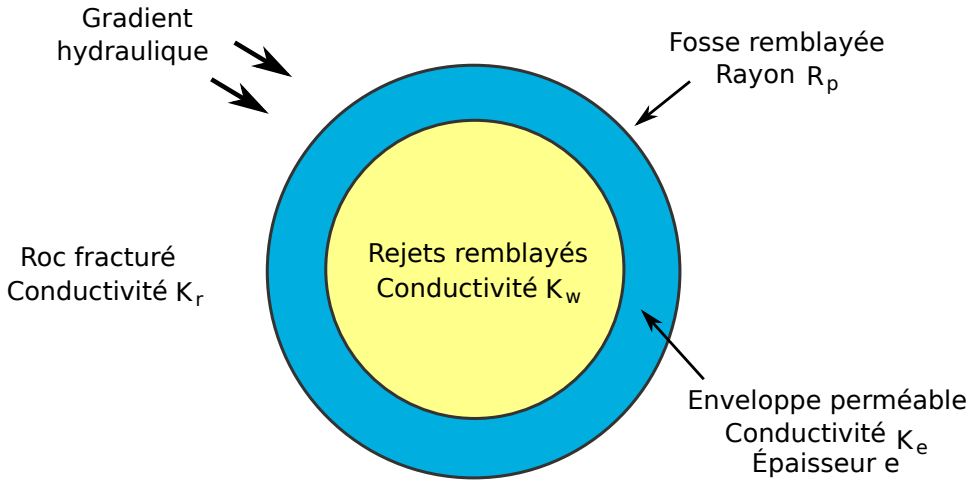


Figure 10.1 Schéma du modèle analytique d'une fosse de rayon R_p remblayée avec des rejets d'une conductivité hydraulique K_w et en présence d'une enveloppe perméable d'épaisseur e et de conductivité K_e, et située dans un roc fracturé homogène et de conductivité K_r

la fosse. Ainsi, l'efficacité de l'enveloppe perméable E_e a alors été définie comme la réduction du flux volumique dans les rejets remblayés (en considérant une épaisseur unitaire au modèle bidimensionnel) :

$$E_e = 1 - \frac{Q_a}{Q_s} \frac{R_p^2}{(R_p - e)^2} \tag{10.2}$$

Le ratio $(R_p - e)/R_p$ est noté x par la suite, avec $x \in [0, 1]$. Cette définition de l'efficacité permet de prendre en considération la variation de volume de rejet entreposé. De cette manière, un petit flux dans un petit volume entreposé et qui aurait tendance à disperser dans l'environnement rapidement les contaminants contenus dans les rejets par exemple, se traduit par un grand flux volumique. D'un autre coté, un grand flux, mais dans un très grand volume de rejet, et dont le temps nécessaire pour disperser l'ensemble des contaminants serait grand, se traduit par un petit flux volumique. Cette définition est donc adaptée pour réduire le transport advectif de contaminants depuis les rejets vers l'environnement et a été adoptée.

10.1.3 Dérivation de l'expression analytique de l'efficacité

Les expressions analytiques du débit à travers les différentes interfaces déterminées dans le chapitre 6 pour des fosses circulaires en deux dimensions permettent de dériver le flux à

travers les rejets remblayés avec Q_a et sans enveloppe perméable Q_s (section 8.6) :

$$Q_a = \frac{4K_rK_wRI}{K_r+K_w}\frac{2x}{1+x^2+(1-x^2)\left[\frac{K_rK_w}{(K_r+K_w)K_e}+\frac{K_e}{K_r+K_w}\right]} \tag{10.3a}$$

$$Q_s = \frac{4K_rK_wRI}{K_r+K_w} \tag{10.3b}$$

L'efficacité E_e s'écrit alors :

$$E_e = 1 - \frac{2}{x+x^3+\frac{(x-x^3)}{K_r+K_w}\left[\frac{K_rK_w}{K_e}+K_e\right]} \tag{10.4}$$

En général, l'expression analytique ci-dessus ne peut pas être factorisée et exprimée uniquement à l'aide de sa transmissivité réduite T_r, définie comme le produit K_ee/R_p. En effet, pour un rayon de fosse R_p constant, différentes valeurs de conductivité hydraulique K_e et d'épaisseur e de l'enveloppe à une même transmissivité réduite donnent des efficacités différentes. Ceci implique, par exemple, qu'une augmentation de la conductivité hydraulique de l'enveloppe d'un facteur deux n'a pas le même effet d'une augmentation de son épaisseur par deux en général. Ces deux paramètres (conductivité hydraulique et épaisseur) de l'enveloppe doivent donc être étudiés séparément.

Dans la suite de cette section, les conditions nécessaires pour garantir une efficacité positive à l'enveloppe perméable sont analysées pour différents cas généraux et pour le cas d'une enveloppe d'une faible épaisseur $x \to 1$, puis l'influence sur l'efficacité de la conductivité de son épaisseur, de sa conductivité, ainsi que celles des rejets et du roc a été étudiée. Une dernière sous-section présente un cas pratique d'utilisation des développements analytiques présentés ci-bas.

10.1.4 Conditions requises pour garantir une enveloppe perméable efficace $E_e \geq 0$

Conditions générales sans hypothèses préalables

L'expression analytique de l'efficacité de l'enveloppe perméable (équation 10.4) permet de dériver l'intervalle de conductivité hydraulique et d'épaisseur pour lesquels l'enveloppe a une efficacité au minimum positive $E_e \geq 0$. Dans ce cas, la conductivité hydraulique minimale que doit avoir l'enveloppe perméable est une solution du polynôme du second degré fonction

de l'épaisseur suivant :

$$\begin{aligned} \frac{K_e^2}{K_r + K_w} + f(x)K_e + \frac{K_r K_w}{K_r + K_w} = 0 \\ f(x) = \frac{x^3 + x - 2}{-x^3 + x} \end{aligned} \tag{10.5}$$

Le discriminant de l'équation 10.5 peut se réduire à :

$$\Delta = \frac{f(x)^2}{(K_r + K_w)^2} \left[K_r^2 + K_w^2 + K_r K_w \left(2 - \frac{4}{f(x)^2} \right) \right] \tag{10.6}$$

La fonction $f(x)$ (equation 10.5) pour $x \in [0, 1]$ est croissante et à valeur strictement négative comprise dans $[-\infty, -2]$, ce qui implique $\Delta > 0$. Les deux racines du polynôme de degré deux (10.5) sont donc :

$$(K_e)_0^{\pm} = \frac{-(K_w + K_r)f(x) \pm \sqrt{(K_r + K_w)^2 f(x)^2 - 4K_r K_w}}{2} \tag{10.7}$$

Ainsi, comme le coefficient du terme quadratique de l'équation 10.5 est positif, les conductivités admissibles sont $K_e \leq (K_e)_0^-$ et $K_e \geq (K_e)_0^+$. La racine $(K_e)_0^-$ donne néanmoins une conductivité hydraulique inférieure à celle des rejets entreposés dans la fosse, alors que, par définition, une enveloppe perméable a une conductivité hydraulique supérieure à celles des rejets ou du roc. La condition sur la conductivité hydraulique de l'enveloppe perméable pour assurer une efficacité positive est donc :

$$E_e \geq 0 \iff K_e \geq (K_e)_0^+ = \frac{-(K_w + K_r)f(x) + \sqrt{(K_r + K_w)^2 f(x)^2 - 4K_r K_w}}{2} \tag{10.8}$$

Cette condition permet de créer, en pratique, un abaque reliant la conductivité et la taille minimale que doit avoir une enveloppe perméable en fonction de la conductivité des rejets dans la fosse (considérée circulaire et vue en plan) et pour une conductivité hydraulique du roc fixe (Figure 10.2).

De manière générale, comme $f(x)$ est une fonction strictement croissante, la conductivité hydraulique minimale requise pour assurer une efficacité positive $E_e \geq 0$ diminue avec le taux de rejets remblayés x, et augmente donc avec la taille de l'enveloppe e (Figure 10.2). En d'autres mots, plus la taille de l'enveloppe perméable est grande, plus sa conductivité doit être grande pour garantir une efficacité positive. Ces observations indiquent que diminuer l'épaisseur d'une enveloppe perméable ayant une faible efficacité (c'est-à-dire positive, mais proche de 0) permet d'augmenter son efficacité, alors qu'augmenter son épaisseur contribuerait, contre-intuitivement, à diminuer son efficacité.

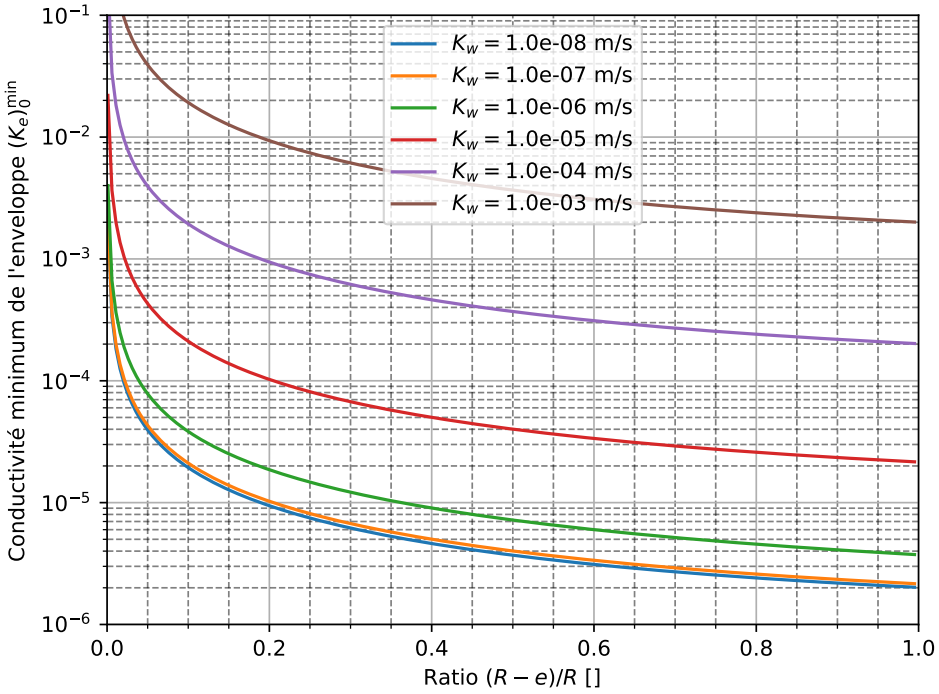


Figure 10.2 Conductivité hydraulique minimum requise pour l'enveloppe perméable pour assurer une efficacité positive $E_e \geq 0$ en fonction de son épaisseur et de la conductivité hydraulique des rejets entreposés. La conductivité du roc est considérée constante $K_r = 1{\times}10^{-6}$ m/s. Une conductivité plus haute que celle requise engendre une efficacité positive.

Cas d'une enveloppe perméable de faible épaisseur $x \to 1$

En pratique, lorsque l'épaisseur de l'enveloppe perméable est faible devant le rayon de la fosse remblayée (par exemple West *et al.*, 2003; Thériault, 2004; Rousseau et Pabst, 2018), le ratio x tend vers 1, et la fonction $f(x = 1)$ tend vers -2. Dans ce cas, la conductivité hydraulique minimale de l'enveloppe perméable permettant d'assurer une efficacité positive peut être simplifiée et s'écrire :

$$(K_e)_0^{\min} = (K_r + K_w) + \sqrt{K_r^2 + K_w^2 + K_r K_w} \tag{10.9}$$

En particulier, pour des rejets beaucoup plus perméables que le roc ($K_w \gg K_r$) ; par exemple des roches stériles déposées dans une formation peu perméable), ou un roc beaucoup plus perméable que les rejets ($K_r \gg K_w$; c'est-à-dire des résidus dans un roc très fracturé), la conductivité hydraulique d'une fine enveloppe perméable doit être au minimum $2K_w$ ou $2K_r$, respectivement (Figure 10.2).

Extension à des cas réels

Il peut être conjecturé que la condition sur la conductivité minimum de l'enveloppe perméable pour assurer une réduction du flux volumique dans les rejets $E_e \geq 0$ s'applique aussi pour le cas des fosses réelles en trois dimensions. Cette conjecture est notamment supportée par la prédiction de la déviation de l'écoulement par la ZES (chapitre 8). En effet, il a été observé dans la section 8.3.5 qu'un indice d'efficacité inférieur à -0.5, qui pour rappel, est fondé sur la solution analytique modifiée d'une enveloppe perméable autour d'une fosse circulaire en deux dimensions, entraînait pour la plupart des cas simulés une augmentation du flux dans les rejets remblayés. Sans la modification apportée, ce seuil passe de -0.5 à 0, ce qui montre que lorsque l'efficacité en deux dimensions est négative, l'efficacité en trois dimensions l'est aussi, ce qui est cohérent avec la conjecture émise. En outre, le critère (10.9) permet de prédire analytiquement le ratio de conductivité hydraulique du massif fracturé sur celui du matériau de l'enveloppe pour lequel l'enveloppe perméable est efficace dans le cas étudié par Thériault (2004) avec une fosse bidimensionnelle. Numériquement, Thériault (2004) avait obtenu un ratio de 60, valeur comparable à la prédiction donnée par le critère (10.9) donnant un ratio de 50. La légère différence peut provenir du fait que Thériault (2004) considérait une définition semblable, mais différente de l'efficacité (réduction du flux non volumique) et une géométrie carrée plutôt que circulaire.

10.1.5 Influence de la conductivité de l'enveloppe

L'influence de la conductivité hydraulique de l'enveloppe a été étudiée avec au moyen du signe de la dérivée de l'efficacité $\partial E/\partial K_e$. Après calcul, il est montré que le signe de la dérivée est donné par la condition suivante :

$$\frac{\partial E}{\partial K_e} \geq 0 \iff K_e \geq \sqrt{K_w K_r} \tag{10.10}$$

En pratique, ceci implique qu'une augmentation de la conductivité de l'enveloppe K_e lorsque $K_e \geq \sqrt{K_w K_r}$ se traduit toujours par une augmentation de l'efficacité et donc une réduction du flux volumique des les rejets, peu importe son épaisseur. Cela implique aussi qu'il existe un minimum d'efficacité atteint lorsque la conductivité de l'enveloppe est égale à la moyenne harmonique de celles des rejets et du roc ($K_e = \sqrt{K_w K_r}$). Ce minimum est par ailleurs négatif (l'enveloppe perméable augmente le flux volumique dans les rejets), car la conductivité hydraulique donnée par l'équation 10.10 ne respecte pas la condition (10.8). En pratique, il faut à tout prix éviter de construire une enveloppe perméable dont la conductivité est égale

à la conductivité donnée par l'équation 10.10, car il s'agit de la conductivité pour laquelle le flux volumique dans les rejets remblayés est maximum.

10.1.6 Influence de l'épaisseur

De manière similaire à l'influence de la conductivité de l'enveloppe précédente, l'influence de l'épaisseur a été étudiée avec le signe de la dérivée de l'efficacité $\partial E/\partial x$. En particulier, l'épaisseur optimale e_{opt} d'une enveloppe perméable avec une conductivité hydraulique constante pour réduire au maximum le flux volumique dans les rejets respecte l'équation suivante :

$$\frac{\partial E_e}{\partial x}(e_{opt}) = 0 \tag{10.11}$$

L'épaisseur optimale e_{opt} s'écrit donc :

$$\begin{aligned} e_{opt} &= R\left(1 - \frac{\sqrt{3}}{3}\sqrt{\frac{A+1}{A-1}}\right) \\ A &= \frac{1}{K_r + K_w}\left(\frac{K_r K_w}{K_e} + K_e\right) \end{aligned} \tag{10.12}$$

Cette épaisseur d'enveloppe perméable minimise le flux volumique dans les rejets, et donc les flux de contaminants sortants par unité de rejets entreposés. Une enveloppe d'une épaisseur plus petite ou plus grande celle donnée par l'équation 10.12 diminue la performance de la technique. En particulier, lorsque l'enveloppe est très perméable par rapport au rejet et au roc environnant (d'un facteur 100 en pratique), la constante A tend vers l'infini et l'épaisseur optimale vaut $e_{opt} = R_p(1 - \sqrt{3})/3$. Dans ce cas, l'enveloppe occupe environ les deux tiers de l'espace disponible dans la fosse. Néanmoins, les variations de l'efficacité sont faibles autour de cet optimum, et une enveloppe de taille (beaucoup) plus petite peut alors être utilisée en pratique, sans pour autant sacrifier ses performances. Par exemple, pour une conductivité du roc de $K_r = 1{\times}10^{\text{-}6}$ m/s, des rejets de $K_r = 5{\times}10^{\text{-}6}$ m/s et de l'enveloppe de $K_r = 5{\times}10^{\text{-}4}$ m/s, l'efficacité maximum est de 94% environ pour une enveloppe occupant 66% de la fosse, mais l'efficacité d'une enveloppe occupant moins de 25% de son espace est de 90% (équation 10.4). En pratique, l'épaisseur optimale est d'intérêt lorsque la conductivité de l'enveloppe est proche la conductivité minimale (équation 10.8) requise pour déterminer l'efficacité maximale.

10.1.7 Influence de la conductivité hydraulique des rejets et du roc

L'influence de la conductivité hydraulique des rejets K_w entreposés dans la fosse sur l'efficacité de l'enveloppe perméable a été étudiée encore une fois en considérant la dérivée analytique de l'efficacité :

$$\frac{dE_e}{dK_w} \geq 0 \tag{10.13}$$

L'équation 10.13 revient à vérifier la condition suivante :

$$K_r \geq K_e \tag{10.14}$$

Où K_r et K_e pour rappel sont les conductivités hydrauliques du roc environnant et de l'enveloppe. L'enveloppe perméable est par définition toujours plus perméable que le roc environnant, et donc, une diminution de la conductivité des rejets engendre toujours une augmentation de l'efficacité de l'enveloppe perméable, quelle que soit son épaisseur e ou la conductivité hydraulique des rejets dans la fosse. Ce résultat est en accord les pratiques actuelles (Misfeldt *et al.*, 1999; Hore et Luppnow, 2015; MEND, 2015), où il est conseillé de réduire la conductivité hydraulique des rejets pour limiter le flux d'eau souterraine en leur sein et augmenter le contraste de perméabilité avec l'enveloppe perméable.

Lorsque les rejets sont beaucoup moins perméables que l'enveloppe ($K_w \ll K_e$; par exemple, une fosse remblayée de résidus avec une enveloppe perméable faite de stérile), l'expression de l'efficacité de l'enveloppe perméable peut être réécrite de la manière suivante :

$$E_e(K_w \ll K_e) \approx 1 - \frac{2}{x + x^3 + (x - x^3)\,\frac{K_e}{K_r}} \tag{10.15}$$

Dans ce cas, l'efficacité atteint un seuil fonction de l'épaisseur de l'enveloppe et du ratio de conductivité entre l'enveloppe et le roc et de son épaisseur. Ce comportement asymptotique valide les résultats d'autres études pour lesquelles une efficacité maximale de la technique de l'enveloppe perméable avait été atteinte (Thériault, 2004; Rousseau et Pabst, 2018).

Le même raisonnement et résultat s'applique aussi pour l'influence de la conductivité hydraulique du roc, car l'expression analytique de l'efficacité E_e (équation 10.4) est symétrique pour la conductivité du roc et des rejets K_r et K_w.

10.1.8 Exemple d'application pour la détermination des propriétés d'une enveloppe perméable

Dans cet exemple, supposons que l'on cherche à remblayer une fosse conique de 146 mètres de diamètre, profonde de 78 mètres et avec des murs inclinés à 45 degrés (pente de 1 :1) avec des résidus miniers caractérisés par une conductivité hydraulique en place K_w de 1×10^{-5} m/s. Les résidus sont supposés contenir un contaminant dans leur eau interstitielle. Supposons aussi qu'une étude d'impact préliminaire a montré que la dispersion de ce contaminant à cause de l'écoulement de l'eau souterraine dans la fosse est susceptible de représenter un risque pour l'environnement, et qu'une diminution du flux volumique d'eau souterraine d'au moins 85% est requise. Une enveloppe perméable composée de stérile miniers inertes, d'une perméabilité comprise entre 1×10^{-5} et 1×10^{-2} m/s est en mesure d'être apposée à la périphérie de la fosse, mais qui, pour différentes raisons opérationnelles, ne doit pas dépasser 20% du volume total de la fosse. Le but est de déterminer les propriétés de l'enveloppe perméable de sorte que le projet de remblayage ne soit plus un risque pour l'environnement.

Dans un premier temps, il est émis l'hypothèse que l'expression analytique de l'efficacité (équation 10.4) déterminée pour une fosse circulaire en deux dimensions est valide pour estimer l'efficacité de la technique de l'enveloppe perméable dans une fosse conique. Ainsi, l'efficacité maximale, estimée au moyen de l'équation (10.4) compte tenu des contraintes, est d'environ 99%, ce qui signifie que le flux volumique dans les rejets peut être réduit d'environ deux ordres de grandeur. Un abaque peut aussi être dérivé à partir de la précédente équation, et relie la conductivité hydraulique de l'enveloppe perméable et sa fraction du volume occupé dans la fosse à la réduction du flux volumique dans les rejets (Figure 10.3). L'abaque ainsi que l'équation (10.9) montrent que la conductivité hydraulique de l'enveloppe doit être d'au moins 2×10^{-5} m/s afin de diminuer le flux volumique, le cas échéant, une augmentation du flux volumique est anticipée. Considérant la réduction visée, une enveloppe occupant environ seulement 1.5% de la fosse pourrait être adaptée (Figure 10.3). Cependant, cela correspondrait à une épaisseur de l'enveloppe de seulement 1 mètre, impossible à mettre en place en pratique. Ajoutant donc une contrainte d'une épaisseur minimale de 5.6 mètres (fraction volumique minimale de 14%), la conductivité de l'enveloppe doit d'être d'environ 1×10^{-3} m/s. Ces différents exemples montrent comment les développements analytiques présentés ici peuvent être utilisés en pratique pour la conception d'une enveloppe perméable.

Le cas d'une fosse conique de 146 mètres de diamètre, avec enveloppe perméable de conductivité hydraulique $K_e = 1 \times 10^{-3}$ m/s et épaisseur $e = 5.6$ mètres, a notamment déjà été simulé numériquement dans la littérature en considérant un roc avec un réseau de fracture orthogonale, mais dont la perméabilité équivalente est approximativement celle considérée

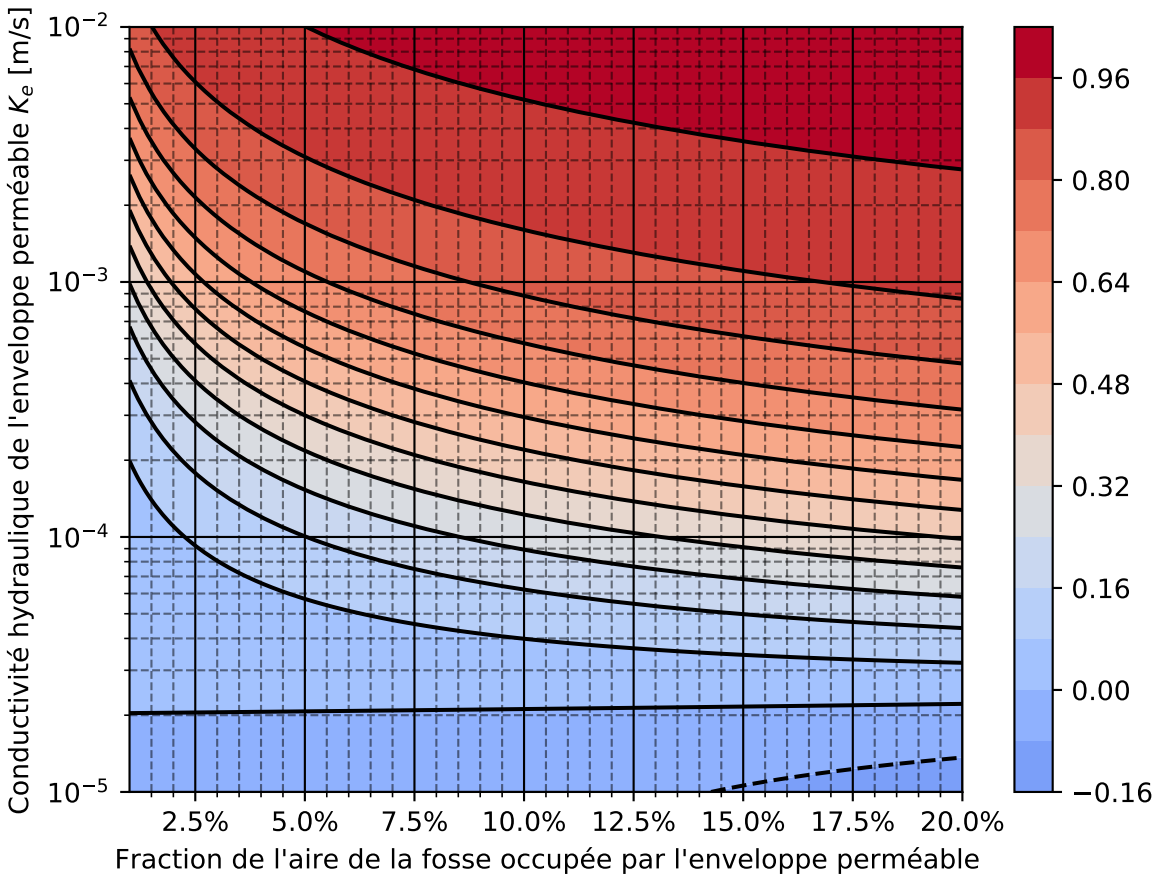


Figure 10.3 Réduction du débit d'eau volumique dans les rejets par l'ajout d'une enveloppe perméable dans une fosse circulaire considérant un roc et des rejets d'une conductivité hydraulique $K_r = 1 \times 10^{-7}$ et $K_w = 5 \times 10^{-6}$ m/s, respectivement. Les lignes pleines et en tiretés représentent les iso contours de l'efficacité (respectivement positive ou négative) avec un incrément de 8%.

ici (Rousseau et Pabst, 2018). Le résultat des simulations donne une réduction du flux (non volumique) de 90%, ce qui correspond, avec la prise en considération de la variation du volume des rejets entreposés, à une réduction volumique de 88%, soit 2% plus grande que celle obtenue ici avec le modèle analytique simplifié en deux dimensions. En règle générale, la comparaison d'autres efficacités simulées numériquement (Rousseau et Pabst, 2018) et calculées analytiquement en utilisant l'équation (10.4) donne des efficacités estimées jusqu'à ±20% différentes. Cette comparaison indique que l'équation analytique permet d'estimer grossièrement l'efficacité d'une enveloppe perméable dans des fosses tridimensionnelles.

10.2 Prédiction du flux d'eau souterraine à travers les fosses remblayées

10.2.1 Contextualisation

L'étude et de la prédiction de l'influence de la ZES sur l'écoulement et la déviation de l'eau souterraine des rejets ont nécessité la conduction d'un important nombre de simulations numériques où les flux sans la ZES étaient aussi calculés (chapitres 7 et 8). Ces flux étaient de plus calculés pour des géométries de fosses diverses (conique, elliptique ou réelle) et des conductivités de rejets remblayés et du roc environnant variées. Ce large jeu de données de flux a été mis à profit afin d'étudier l'influence de la conductivité des rejets, du roc et de la forme de la fosse sur les flux entrants dans les fosses remblayées. La connaissance dans cette thèse du flux sans la considération de la ZES ni d'une enveloppe perméable est importante, car toutes les définitions d'efficacité ou de déviations utilisées dans les chapitres précédents s'exprimaient par rapport à ce flux. Dans le cas des fosses coniques, où beaucoup de modèles et de simulations ont été réalisés, un modèle semi-analytique a été proposé permettant de prédire le flux dans les rejets remblayés avec une précision d'environ 40%.

10.2.2 Correction et normalisation des flux

Comme énoncé plus haut, les simulations réalisées lors de l'étude de l'influence de la ZES considéraient des conductivités hydrauliques variées pour le roc et les rejets. Cela permettait d'étudier l'influence de la conductivité hydraulique et de celle du roc, mais posait à priori un défi, car les flux calculés dépendaient directement des deux variables, rendant chaotique la visualisation du flux en fonction de ces celles-ci. Ainsi, dans un premier temps, il a été nécessaire d'éliminer ou de réduire l'influence des conductivités sur les flux simulés. La solution analytique du flux dans une fosse circulaire déterminée dans le chapitre 6 et appliquée dans la section 10.1 ci-dessus a, ici encore, été utilisée pour déterminer un facteur de correction heuristique avec succès. En effet, il s'avérait que le flux dans les rejets F était toujours proportionnel au ratio $2K_rK_w/(K_r + K_w)$ vu dans les équations 10.3 pour toutes les simulations en trois dimensions. En conséquence, pour éliminer l'influence des conductivités sur les flux dans les fosses, les flux ont été corrigés en les divisant par le précédent ratio.

Ces flux corrigés étaient cependant encore disparates et rendaient difficiles toutes comparaisons entre les différentes formes de fosse. Ainsi, pour permettre cette comparaison, les flux nouvellement corrigés ont aussi été normalisés en les divisant par la valeur du gradient hydraulique I auquel les simulations ont été soumises ainsi que par l'aire projetée de la fosse dans la direction parallèle à l'écoulement A_p. Ainsi, pour chaque valeur de flux F simulée dans les chapitres 7 et 8 sans la ZES, le FCN correspondant a été calculé de la manière

suivante :

$$FCN = \frac{1}{2IA_p}\frac{K_r + K_w}{K_r K_w}F \tag{10.16}$$

Le FCN permet ainsi la comparaison de l'influence des différentes formes de fosse et de la conductivité des rejets et du roc sur le flux dans les fosses remblayées.

10.2.3 Courbe de flux

Le FCN défini précédemment s'avérait être lié de manière unique au ratio de conductivité K_w/K_r pour une géométrie de fosse donnée (Figure 10.4), c'est-à-dire que pour chaque ratio de conductivité correspondait une unique valeur du FCN avec des variations douces et continues à ses environs. En conséquence, le FCN a pu être assimilé à une fonction bijective du ratio de conductivité et qui caractérise l'influence de la forme de la fosse remblayée et des différentes conductivités des matériaux sur l'écoulement et le flux.

De manière générale, le FCN est une fonction croissance du ratio de conductivité K_w/K_r, et possède une courbe caractéristique en S (Figure 10.4). Le FCN est constant pour de grands ou de faibles ratios de conductivité (c'est-à-dire $K_w/K_r \gg 1$ ou $K_w/K_r \ll 1$). Ceci suggère que respectivement, le flux dans les fosses remblayées est uniquement proportionnel à la conductivité du roc environnant (grands ratios de conductivité) ou à celle des rejets (petits ratios). Lorsque les conductivités hydrauliques des rejets et du roc sont similaires, le FCN n'est plus constant et le flux dans les rejets dépend alors de la conductivité des deux matériaux à la fois. Parfois, certaines courbes présentent des variations non monotoniques de FCN en fonction du ratio de conductivité, particulièrement lorsque le ratio de conductivité est proche, mais inférieur à 1, et pour lequel le FCN diminue légèrement. L'analyse de cette diminution montre que la pente des murs influe sur la présence ou non de cette dernière, et aussi à son l'ampleur. Par exemple, les trois fosses coniques et les deux elliptiques ayant les murs les plus pentus présentent cette diminution du FCN, diminution d'autant plus importante que les murs sont pentus (Figure 10.4)

En général, le FCN est compris entre 0.6 et 5 dans toutes les fosses testées, et dépend de la forme de la fosse (conique, elliptique ou autres ; Figure 10.4), de ses caractéristiques géométriques (comme son rayon ou sa profondeur ; Figure 10.4a et b), mais aussi de l'orientation du gradient hydraulique pour les fosses non symétriques (Figure 10.4b et c). Le FCN dans les fosses coniques montre toutefois moins de variabilité, et est compris entre 0.75 et 2.7, avec un écart maximum de 40% entre les différentes fosses coniques. Ce relativement faible écart permet de dériver un modèle heuristique pour approximer le FCN dans les fosses coniques

avec ± 20% d'erreur :

$$(FCN)_{conique} = \begin{cases} 0.92 & \frac{K_w}{K_r} \leq 0.8 \\ 0.76 \log \frac{K_w}{K_r} & 0.8 \leq \frac{K_w}{K_r} \leq 30 \\ 2.12 & 30 \leq \frac{K_w}{K_r} \end{cases} \tag{10.17}$$

Ce modèle est notamment valide pour des fosses coniques avec un rayon à la surface entre 50 et 300 mètres, un ratio de profondeur sur rayon entre 0.3 et 0.8, et une pente moyenne entre 1 :1 et 3 :1. Pour les autres formes de fosses (conique et réelle), trop peu de géométries ont été considérées pour pouvoir proposer un modèle.

10.2.4 Applications

Les courbes de FCN peuvent en pratique être utilisées pour prédire le flux dans les fosses remblayées F en réécrivant l'équation (10.16) :

$$F = 2IA_p \frac{K_r K_w}{K_r + K_w} \cdot FCN\left(\frac{K_w}{K_r}\right) \tag{10.18}$$

En conséquence, la connaissance du gradient hydraulique et de son orientation par rapport à la fosse, des conductivités hydrauliques du roc et des rejets remblayés ainsi que la valeur du FCN est suffisante pour estimer le flux dans les fosses remblayées. Pour des fosses similaires à celles testées, le FCN peut être dérivé à partir des courbes précédentes (Figure 10.4). Pour des fosses coniques, il peut aussi être estimé à partir modèle heuristique (équation 10.17).

Pour illustrer le propos, une fosse conique de 550 mètres de diamètre, 200 mètres de profondeur environ et une inclinaison des murs de 50° (aire projetée A_p d'approximativement 7.6×10^4 m^2), remblayée avec des rejets d'une conductivité de 5×10^{-5} m/s 10 fois plus perméables que le roc environnant et soumise à un gradient hydraulique régional de 0.01 a été considérée. Dans un tel cas, le FCN a été estimé à partir du modèle (10.17) d'où une valeur de 1.8 en a été retirée. Ainsi, le flux estimé d'eau souterraine d'après l'équation (10.18) dans la fosse vaut environ 8.8×10^4 m^3/an.

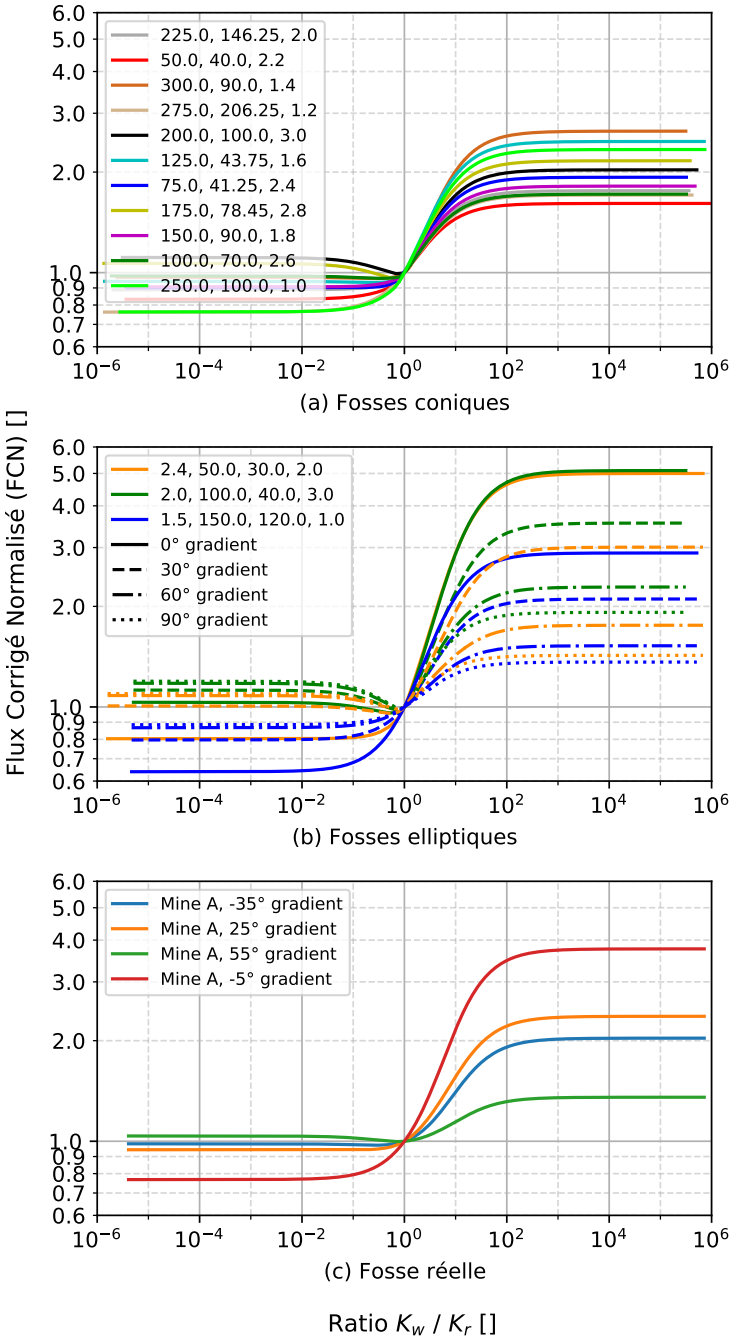


Figure 10.4 Flux Corrigé Normalisé (FCN) dans différentes formes de fosses (a) coniques (légende : rayon au sommet, profondeur, pente des murs), (b) elliptiques (légende : ratio axe majeur sur axe mineur, axe mineur, profondeur, pente des murs) et (c) réelle, et pour différents gradients (angle par rapport à l'axe majeur) simulées dans le chapitre 6. À noter que le flux a été corrigé d'une partie des erreurs des modèles numériques en ramenant le FCN à 1 pour un ratio unitaire.

CHAPITRE 11 SYNTHESE ET DISCUSSION

11.1 Approche numérique

11.1.1 Développement de l'approche numérique

Au cours de ce projet de recherche, de nombreux outils ont été développés afin de supporter la création de modèles numériques, et ainsi créer une approche personnalisée répondant aux objectifs spécifiques du projet. D'une part, une interface entre le logiciel de CAO Salomé et le code de simulation PFLOTRAN a été développée afin de pouvoir utiliser Salomé comme préprocesseur et faciliter la création de modèles numériques sous PFLOTRAN (section 4.1). Une attention particulière a notamment été portée à la prise en main des différents greffons créés, et ce, dans le but de rendre le lien entre Salomé et PFLOTRAN plus transparent et facile à manipuler. Par exemple, l'exportation d'un maillage, ou la création d'un jeu de donnée de face pour calculer les flux de matières les traversant peut se faire très rapidement et permet de produire des fichiers directement importables dans PFLOTRAN.

L'interface entre Salomé et PFLOTRAN a été complétée par l'intégration du mailleur Vorpalite dans Salomé pour la création de Pavage de Voronoï Centré (PVC) en trois dimensions. En effet, Salomé ne possédait à l'origine que des mailleurs tétraédriques, pouvant entraîner de nombreuses erreurs de non-orthogonalité et de biais dans PFLOTRAN. L'utilisation de PVC permet de discrétiser des géométries complexes (comme des fosses par exemple) et d'éviter les erreurs de discrétisation (section 4.2). Ces développements pourraient par ailleurs être utilisés pour d'autres applications, notamment avec les codes TOUGH (Pruess, 2004), PorePy (Keilegavlen *et al.*, 2021) ou DuMux (Koch *et al.*, 2021) dans le domaine de l'hydrogéologie ou de la géothermie, mais aussi plus largement dans le domaine de la mécanique des fluides avec OpenFOAM (`www.openfoam.com`). En outre, la création de PVC au moyen du mailleur Vorpalite avait l'avantage d'être parallélisée, permettant ainsi de tirer parti des nombreux coeurs de calcul des stations de travail modernes. En revanche, le couplage entre les deux logiciels utilisait des entrées-sorties enregistrées dans différents formats, entraînant parfois des temps de conversion et de réimportation du maillage dans Salomé supérieurs au temps nécessaire au calcul du PVC. Un meilleur couplage, par exemple en utilisant un *wrapper* C++/Python permettrait de réduire le coût associé au transfert de donnée entre les deux logiciels. De telles modifications dépassaient cependant les objectifs de cette recherche, mais seraient relativement aisées à implémenter grâce à la flexibilité offerte par l'approche numérique développée dans ce projet.

11.1.2 Application de l'approche numérique aux objectifs du projet

Salomé et les greffons développés ont été utilisés tout au long du projet pour la création des modèles numériques présentés aux chapitres 5 à 9. L'approche était d'ailleurs particulièrement adaptée à la simulation du modèle physique de laboratoire (chapitre 5) et seules quelques heures ont suffi à la création du modèle numérique et son exportation. La création de modèles de fosses, dont les géométries sont plus complexes, demande cependant plus de temps et de connaissances des capacités du module SHAPER. Néanmoins, un tel niveau de détails dans la modélisation des géométries des fosses n'était pas nécessaire dans ce projet, car seules les tendances générales lors de l'étude de l'influence de la Zone Endommagée par Sautage (ZES), et certains exemples d'application lors optimisation des chemins préférentiels étaient étudiés. Le module SMESH pour la manipulation des maillages a aussi rempli les besoins du projet. Il a par exemple permis de générer des couches limites pour les modèles numériques destinés à l'étude de la ZES (chapitre 7 et 8) sans nécessiter d'outils supplémentaires, de créer automatiquement diverses zones dans les maillages à partir des modèles analytiques de Conception Assistée par Ordinateur (CAO) de fosses, ou d'interagir avec les maillages au moyen du langage de programmation Python pour automatiser le traitement et la sortie de données.

Les PVC se sont révélés particulièrement utiles durant le procédé d'optimisation pour des géométries de fosses réelles (voir section 9). Les cellules des PVC, généralement plus compactes que des tétraèdres et pouvant s'apparenter à des sphères (voir Figure 4.7), tendaient à former des géométries optimisées moins anguleuses, plus facilement interprétables, et possédant de meilleures performances optimisées que les maillages tétraédriques. Cela pouvait notamment s'expliquer par le plus grand nombre de voisins pour chaque cellule des PVC (plus d'une dizaine parfois, là où les tétraèdres n'en ont que maximum quatre), réduisant ainsi les erreurs de biais (voir Figure 4.7) et conduisant à une meilleure approximation du gradient (Spiegel *et al.*, 2011; Sosnowski *et al.*, 2018). De manière générale, les simulations sous PFLOTRAN avec des modèles numériques à base de PVC convergeaient aussi plus rapidement (c'est-à-dire, en moins d'itérations) que des maillages tétraédriques de même taille. Ces résultats venaient confirmer certains résultats de la littérature utilisant d'autres solveurs (Sosnowski *et al.*, 2018). En général, l'utilisation du logiciel Salomé couplé avec la librairie Vorpalite pour la génération des modèles numériques et comme préprocesseur du code de simulation PFLOTRAN s'est donc avérée très utile et parfaitement adaptée aux objectifs de l'étude. Ils ont permis à la fois de rendre la création de modèles numériques plus simple, plus intuitive, mais aussi mieux contrôlée, qu'avec les outils intégrés nativement dans PFLOTRAN.

Les modifications apportées au code PFLOTRAN ont aussi été effectuées de manière à faciliter l'entrée des données de simulations numériques, de les résoudre et d'enregistrer les résultats. Ces modifications répondaient aussi à plusieurs objectifs secondaires du projet de recherche, allant de la création des modèles numériques à l'optimisation de la géométrie des chemins préférentiels, en passant par l'utilisation judicieuse des outils informatiques modernes. D'une part, l'entrée de données entre Salomé et PFLTORAN a été facilitée par l'ajout de nouvelles options aux fichiers d'entrées de PFLOTRAN. Ceci avait pour avantage de simplifier l'entrée de données pour l'utilisateur et de réduire la taille du code à développer. Les nouvelles fonctionnalités ajoutées ont permis d'étendre les capacités du code afin de répondre aux objectifs de recherche, par exemple l'intégration des simulations avec un tenseur de conductivité hydraulique anisotrope non diagonal, la sortie de nouvelles variables pour la résolution de systèmes adjoints ou la validation des résultats, et ce, de manière performante au moyen d'une parallélisation via le protocole *Message Passing Interface* (MPI). De plus, avec ces nouveaux ajouts au code, PFLOTRAN devient l'un des premiers logiciels d'écoulement souterrain à proposer la sortie des sensibilités pour la résolution des systèmes adjoints.

11.1.3 Limites de l'approche numérique

L'approche numérique développée dans ce projet de recherche et utilisant les logiciels, codes et librairies Salomé, Vorpalite et PFLOTRAN possédait cependant, malgré les avantages décrits plus haut, quelques inconvénients et limitations identifiés ci-dessous. Le premier concerne la prise en main du logiciel Salomé, qui pourrait limiter l'accessibilité de l'approche numérique développée. En effet, la création de modèles de CAO complexes ainsi que leur discrétisation spatiale pour PFLOTRAN requiert une connaissance avancée des capacités de modélisation de SHAPER et des algorithmes de maillage. De plus, Salomé ne permet que la création de modèles de CAO analytiques avec son module SHAPER. Bien que de tels modèles soient adaptés pour la modélisation d'objets ou de structures avec des géométries bien définies, la modélisation de surfaces naturelles, comme des horizons de couches géologiques ou des topographies, peut être difficile. En effet, l'interpolation d'une surface analytique à partir de points mesurés peut être coûteuse en calcul et en représentation analytique, de sorte que Salomé pourrait ne pas être adapté à la modélisation de modèles géologiques complexes. Pour ces besoins spécifiques, le logiciel GemPy (`www.gempy.org`) qui utilise une paramétrisation implicite des surfaces pourrait être plus adapté.

Aussi, les PVC ne permettent pas de créer des maillages conformes, c'est à dire qui discrétisent aussi la forme des frontières internes des objets maillées, comme l'interface entre le roc et la

fosse. En effet, le mailleur Vorpalite ne considérait pas de frontières internes, ce qui impliquait par exemple que l'interface entre le roc et la fosse était définie comme les faces internes du PVC pour lesquelles le centre des deux cellules les partageants se trouvaient respectivement dans le roc et dans la fosse. L'interface était alors fortement irrégulière, car bien souvent les polyèdres des PVC s'imbriquaient les uns dans les autres. Cette spécificité expliquait entre autres qu'il n'était pas possible de calculer le flux entrant dans les fosses. Pour cette raison, les PVC n'ont pas été utilisés dans les chapitres 7 et 8, où la simulation précise des flux dans les fosses était nécessaire. Une amélioration possible consisterait à ajouter un terme pénalisant la non-conformité lors de la génération des germes du PVC (Merland *et al.*, 2014). Cependant, une implémentation publique de cette méthode n'était pas disponible et nécessitait la révision d'une grande partie du code, ce qui dépassait largement les objectifs de cette thèse.

Enfin, une dernière limitation de l'approche numérique résidait dans l'incapacité de PFLOTRAN à simuler correctement le transport de contaminants avec un tenseur de dispersion anisotropique. En effet, la discrétisation de l'opérateur de diffusion (relatif à la dispersion mécanique) utilisait la méthode *Two Point Flux Approximation* (TPFA), impliquant que le maillage devait être localement parallèle aux directions principales de dispersion (c'est-à-dire, à l'écoulement). Lorsque cette condition n'était pas vérifiée, la dispersion anisotrope pouvait ne pas être adéquatement prise en compte, comme observée lors des simulations de transport dans le chapitre 5. Les seuls types de maillages adaptés étaient donc ceux formés majoritairement par des hexaèdres orientés parallèlement à l'écoulement. De tels maillages pourraient être créés soit à partir des lignes d'écoulement et des iso-valeurs de la charge dans le domaine (Cirpka *et al.*, 1999b), ou à partir d'algorithmes de maillage à dominante hexaédrique et prenant en charge un tenseur d'orientation (Lévy et Liu, 2010). Cependant, ce type de maillage, en plus d'être difficile à générer, nécessite d'être recalculé à chaque pas de temps si l'écoulement est en régime transitoire. Pour ces raisons, les simulations de transport présentées dans la section 9.4.2 ont été réalisées avec un tenseur de dispersion isotrope.

11.2 Optimisation topologique appliquée à l'hydrogéologie

D'après la revue de littérature, les travaux présentés dans cette thèse sont les premiers à appliquer l'approche d'optimisation topologique au domaine de l'hydrogéologie. L'implémentation numérique de l'approche d'optimisation topologique représentait un défi, car ni les travaux de la littérature ni les logiciels ne permettaient ni ne s'intéressaient à l'optimisation topologique appliquée à l'hydrogéologie. L'implémentation numérique du problème d'optimisation a donc été réalisée au moyen d'une multitude de scripts Python indépendants (sous la forme d'une proto librairie). Cette approche modulaire permettait notamment de modifier les

opérations réalisées à chaque étape de l'optimisation (section 4.3). En pratique, cela a permis le développement et le prototypage de nombreuses approches différentes pour l'optimisation de la géométrie des roches stériles dans les fosses remblayées. La fonction objectif utilisée pour ce problème (section 9.2.2) est le résultat de nombreux autres essais préliminaires. La proto librairie développée doit donc être vue comme une plateforme de base personnalisable selon les besoins des utilisateurs et pour de futures optimisations (voir chapitre 12.4).

Les sections 3.4.2 et 4.3 ainsi que le chapitre 9 ont présenté plus en détail le développement de l'approche d'optimisation et décrivent plusieurs exemples d'application. Ces exemples traitaient en particulier de l'optimisation de la géométrie des roches stériles déposées dans les fosses afin de créer des chemins d'écoulements préférentiels et réduire les interactions entre des résidus remblayés et l'eau souterraine. Les résultats de ces exemples d'application illustrent tout le potentiel de l'approche topologique pour l'optimisation de géométrie ainsi que ses nombreux avantages face aux approches paramétriques plus couramment utilisées en hydrogéologie (Kimmel *et al.*, 2003; Courcelles, 2015; Kiecak *et al.*, 2017; Grajales-Mesa *et al.*, 2020; Singh *et al.*, 2020). La principale différence entre les deux approches est que la première permet la création de géométries non conventionnelles et libres de toutes contraintes, donc potentiellement plus performantes, alors que les secondes sont contraintes par une géométrie prédéterminée. Par exemple, la section 9.3.2 a montré comment l'approche d'optimisation topologique permettait l'émergence de caractéristiques géométriques non prédéfinies, comme des canaux de roches stériles au sein des résidus, permettant d'améliorer jusqu'à 17% la performance du système par rapport à une géométrie faite uniquement de roches stériles placées le long des murs de la fosse. En outre, dans les cas où l'approche topologique converge vers des géométries conventionnelles, cela implique qu'il n'existe probablement pas de géométrie plus performance que celle couramment utilisée, et valide donc les pratiques en vigueur. C'est notamment le cas dans ces travaux lorsque l'optimisation de la géométrie des chemins préférentiels dans les fosses coniques donnait justement une enveloppe perméable (section 9.3.1). En ce sens, l'approche d'optimisation topologique pour déterminer la géométrie optimale de chemins d'écoulements préférentiels dans des fosses remblayées s'avère supérieure à l'approche paramétrique.

Cependant, il existe un point particulier sur lequel l'approche paramétrique reste supérieure à l'approche topologique et concerne la faisabilité technique des géométries optimisées. En effet, l'approche topologique n'est pas contrainte par défaut, alors que dans l'approche paramétrique, les formes prédéfinies et les intervalles de variation des paramètres incluent implicitement les contraintes de construction. Par conséquent, les géométries obtenues par l'approche topologique peuvent s'avérer irréalisables ou trop coûteuses à construire en pratique. Certaines contraintes peuvent cependant être ajoutées à l'optimisation sous la forme de

contraintes mathématiques, ou prises en compte implicitement dans la fonction objectif avec un terme de pénalisation pour les géométries non constructibles. Par exemple, dans le cas de la codisposition de roches stériles et de résidus dans les fosses, les roches stériles devraient reposer sur d'autres roches stériles (afin de permettre la circulation des véhicules les transportant). Une tentative a été réalisée en ce sens en contraignant le gradient du paramètre de densité (calculé au moyen du théorème de Green-Gauss) selon la direction verticale à être strictement négatif, afin de favoriser le positionnement de roches stériles sur d'autres roches stériles. Cependant, cette approche s'est avérée infructueuse, car l'utilisation de PVC, même avec de faibles erreurs de biais, pouvait engendrer des gradients faiblement biaisés, entraînant malgré tout l'émergence de roches stériles sur des résidus. L'utilisation d'un maillage cartésien (exempt d'erreurs de biais), le calcul du gradient à l'aide d'autres schémas numériques (comme les moindres carrés) ou l'utilisation des corrections reportées (Jasak, 1996; Moukalled *et al.*, 2016) pourraient permettre d'améliorer la définition de la contrainte, et ainsi permettre de développer des géométries constructibles. En l'état, les géométries obtenues par l'approche topologique doivent être réinterprétées et validées avant de pouvoir être appliquées à grande échelle.

11.3 Réduction du flux d'eau souterraine dans les fosses remblayées

Les précédentes sections revenaient sur les approches numériques développées pour répondre aux objectifs de ce projet. La présente section discute du coeur du projet de recherche, à savoir les performances des chemins d'écoulements préférentiels dans et autour des fosses, formés soit par l'ajout d'un matériau plus perméable que les rejets entreposés et que le roc, soit par l'utilisation de la ZES comme enveloppe perméable.

11.3.1 Utilisation de la ZES

Les présents travaux ont d'abord proposé un modèle conceptuel de la ZES avec une dérivation de sa conductivité hydraulique équivalente. Des paramètres représentatifs ont ensuite été estimés à partir des données disponibles dans la littérature. Le modèle proposé ainsi que les paramètres estimés ont permis de reproduire la taille de la ZES (Morth *et al.*, 1972; MEND, 1995; McCloskey et Bless, 2005; Poulsen *et al.*, 2017) et les augmentations de perméabilité mesurées sur le terrain (McCloskey et Bless, 2005). Les simulations numériques réalisées à partir de ce modèle ont montré que la ZES pouvait influencer significativement l'écoulement autour des rejets remblayés, indiquant ainsi qu'elle pourrait être utilisée comme une enveloppe perméable (chapitre 7). Les critères permettant à la ZES d'agir comme une enveloppe perméable incluent que celle-ci soit fracturée et large, et que la fosse soit remblayée avec des

rejets de faible conductivité hydraulique. De cette manière, l'augmentation de perméabilité dans la ZES est susceptible d'être importante, créant alors les chemins préférentiels d'écoulement désirés. En revanche, si les rejets entreposés ont une conductivité hydraulique élevée, la ZES pourrait contribuer à augmenter le flux d'eau souterraine dans la fosse remblayée. Dans les deux cas, une ZES peu fracturée et/ou fine est susceptible de ne pas avoir d'influence marquée sur l'écoulement (chapitre 7).

Cependant, ces premiers résultats n'étaient que qualitatifs, et ne permettaient donc pas de caractériser totalement l'écoulement dans la ZES comme cela aurait été nécessaire pour des applications pratiques. D'autres approches ont alors été proposées. En particulier, le calcul de l'indice d'efficacité (dérivé des solutions analytiques décrites dans le chapitre 6) et du ratio de l'aire de la ZES et de la fosse projetées dans la direction de l'écoulement (Figure 8.2) permettait de déterminer la déviation minimale et maximale attendue de l'eau souterraine autour des rejets remblayés (chapitre 8) . Ces paramètres ne requéraient que la détermination de la conductivité hydraulique du mur de la fosse et la longueur de la ZES (mesurable avec des essais d'infiltration d'eau sur les murs de fosse, (McCloskey et Bless, 2005)), et dont cette dernière est typiquement comprise entre 6 et 15 mètres (Morth *et al.*, 1972; McCloskey et Bless, 2005; Poulsen *et al.*, 2017). Ces mesures supplémentaires permettaient en outre de dériver des critères plus précis que ceux de la littérature (Misfeldt *et al.*, 1999) pour assurer que la ZES et le roc environnant agissaient bien comme une enveloppe perméable. Par exemple, une ZES avec une perméabilité 5 fois supérieure à celle des rejets contribuerait à garantir une déviation de l'eau souterraine des rejets ; alors qu'un indice d'efficacité supérieur à 0.85 permet d'assurer la déviation d'au moins 90% de l'eau souterraine autour de ces derniers. La réduction désirée, ainsi que le flux d'eau souterraine sans la considération de la ZES autour des fosses peut être estimé grâce à la méta-analyse sur les flux présentée dans la section 10.2. Toutes les prédictions précédentes se sont basées sur une approche stochastique permettant de prendre en considération la grande variabilité des propriétés de la ZES et des fonctions de perméabilité, permettant ainsi une étude de sensibilité plus réaliste que les approches usuelles en environnement minier de type *One Factor A Time* (OFAT) (Czitrom, 1999).

De manière générale, les résultats présentés dans les chapitres 6, 7 et 8 confirment les précédents travaux publiés dans la littérature (Stacey *et al.*, 2003; Villain *et al.*, 2015; Dragila *et al.*, 2015; Foster *et al.*, 2018) quant à la présence d'écoulements préférentiels dans les fractures autour des fosses. La présente étude a ainsi permis de confirmer le rôle de ces chemins d'écoulements préférentiel au moyen d'une approche numérique en trois dimensions (chapitres 7 et 8) et validée par une solution analytique (chapitre 6). Néanmoins, bien que ces travaux aient contribué à confirmer le rôle de la ZES comme enveloppe perméable, ils n'ont pas été

confrontés à des résultats de terrain. Des essais de terrain, comme des essais de traceur dans le mur de fosse pouvant à la fois mettre en évidence la présence de chemins préférentiels continus ainsi que leurs propriétés quant au transport de soluté, sont donc recommandés à l'avenir. De plus, en pratique, l'utilisation de la ZES comme enveloppe perméable nécessite des murs de fosse hautement fracturés sur une grande profondeur, ce qui garantie une grande transmissivité et potentiellement une grande déviation (Figure 8.6). Ce constat est cependant en opposition directe avec les objectifs de stabilité géotechnique des murs de fosses pendant les opérations, où les opérateurs miniers ont tendance à réduire l'énergie des sautages pour conserver les murs intacts. L'atteinte des objectifs géochimiques (minimisation des interactions entre les rejets remblayés en fosses et l'environnement) et géotechnique (stabilité des murs) sont donc en opposition. Ainsi, les considérations de stabilité des murs doivent être prises en compte dans les recommandations sur le développement de la ZES.

11.3.2 Enveloppe perméable

L'efficacité de la technique de l'enveloppe perméable a été étudiée au moyen d'un modèle analytique (section 10.1), puis sa géométrie a été optimisée via l'approche définie dans le chapitre 9 et discutée plus haut. L'efficacité de l'enveloppe perméable a été définie comme la réduction du flux dans les rejets relativement à leur volume, qui permettait de considérer la variation de volume des rejets comparativement aux définitions utilisées dans (Thériault, 2004; Rousseau et Pabst, 2018). L'étude analytique a pu démontrer l'existence d'une conductivité hydraulique et d'une épaisseur remarquables pour l'enveloppe. D'une part, la conductivité remarquable est donnée par l'équation (10.8) et permet d'assurer que l'enveloppe contribue à diminuer le flux dans les rejets. Lorsque l'enveloppe perméable est de faible épaisseur et que les rejets et le roc ont des conductivités très différentes ($K_w \gg K_r$ ou $K_w \ll K_r$), la conductivité hydraulique minimale de l'enveloppe doit être égale à deux fois le maximum entre la conductivité hydraulique du roc et des rejets (c'est-à-dire, $K_e = 2\ \max(K_w, K_r)$). Ces expressions semblent, de plus, applicables à des fosses réelles en trois dimensions comme discuté dans la section 10.1.4. En pratique, cette valeur de conductivité peut être utilisée lors de la conception de l'enveloppe, car elle détermine la conductivité minimale que doit avoir cette dernière pour être efficace (c'est-à-dire pour qu'elle engendre une réduction du flux volumique dans les rejets). D'autre part, l'épaisseur remarquable est donnée par l'équation (10.12), et représente l'épaisseur pour laquelle la réduction du flux volumique par l'enveloppe perméable est maximale (pour une conductivité donnée). Cette valeur peut en pratique être utilisée pour dériver l'efficacité maximale de la technique de l'enveloppe perméable pour un scénario et une conductivité de l'enveloppe donnée.

L'étude analytique a aussi montré qu'une diminution de la conductivité hydraulique des rejets se traduisait toujours par une augmentation de l'efficacité de l'enveloppe. Cet effet se produit jusqu'à un seuil à partir duquel la conductivité des rejets n'a plus d'effet sur l'efficacité de l'enveloppe, laquelle dépend alors uniquement du ratio entre la conductivité du roc et de l'enveloppe. En d'autres termes, il est recommandé de toujours minimiser la conductivité hydraulique des rejets entreposés, par exemple, en favorisant leur consolidation. Ce résultat valide les pratiques déjà en application dans l'industrie (Misfeldt *et al.*, 1999; MEND, 2015).

En pratique, tous les résultats obtenus dans cette étude tendent à indiquer qu'une enveloppe perméable faite de stériles miniers ($K_e \geq 1\times10^{-4}$ m/s ; Aubertin *et al.*, 2002) est une approche performante pour réduire le flux volumique dans des résidus miniers de faible conductivité, et remblayés dans un environnement où le roc est faiblement ou moyennement perméable ($K_r \leq 1\times10^{-5}$ m/s). Néanmoins, la pérennité d'une telle configuration devrait être étudiée. En effet, il possible que les résidus avec une fine granulométrie migrent dans les roches stériles plus grossières et obstruent les chemins d'écoulements préférentiels. Le risque est cependant considéré relativement limité puisque de récentes études dans des configurations similaire ont montrées que la migration des particules fines ne réduisait pas significativement la perméabilité des roches stériles (Essayad *et al.*, 2018). En revanche, la réduction du flux volumique d'eau souterraine s'écoulant dans des stériles miniers remblayés peut être difficile à atteindre, car elle nécessite des matériaux au minimum deux fois plus perméables que les rejets afin de contribuer à dévier l'eau des rejets, et plus encore pour que cette déviation soit véritablement utile. Une attention particulière doit aussi être apportée à l'influence de la ZES lors de l'ajout d'une enveloppe perméable. En effet, l'ajout d'une couche de haute conductivité à proximité de la ZES est susceptible de modifier son impact sur l'écoulement, en engendrant notamment le non-respect de la condition 8.9 qui garantit une déviation de l'écoulement par la ZES (section 8.3.3). Dans tous les cas, il est nécessaire que l'enveloppe perméable soit en mesure de gérer un apport d'eau supplémentaire provenant de la ZES lors de sa conception.

11.3.3 Enveloppe perméable optimisée

Une grande partie du projet de recherche était aussi dédiée à l'optimisation de la géométrie des chemins préférentiels d'écoulement dans les fosses. En effet, les précédentes études s'intéressaient uniquement à des chemins préférentiels sous la forme d'une enveloppe perméable, mais sans qu'aucune preuve n'ait été avancée quant à son optimalité. Les résultats des optimisations réalisées dans le chapitre 9 ont confirmé qu'une enveloppe perméable constituait une caractéristique importante des géométries optimisée, et un optimum robuste, car présente

dans tous les cas simulés. L'optimisation a aussi prouvé qu'une augmentation de l'efficacité de l'enveloppe perméable (et donc une réduction du gradient moyen dans les résidus) était possible en lui conférant une épaisseur variable, en général plus large là où l'eau souterraine dans l'enveloppe s'écoulait parallèlement aux murs de fosse, plus fine lorsque perpendiculairement, et parfois plus épaisse sur le fond. Une telle géométrie optimisée avait pour effet de réduire de 2 à 17% le gradient moyen dans les résidus dépendamment de la géométrie de la fosse et de l'orientation du gradient. Néanmoins, dans quatre cas considérés sur cinq (c'est-à-dire, hormis la fosse elliptique avec un gradient orienté selon son axe mineur), la réduction du gradient moyen n'atteignait qu'entre 2 et 5%. En pratique, cela implique que, d'une part, l'enveloppe perméable constitue une géométrie de chemins préférentiels probablement optimale, et d'autre part, que des variations de l'épaisseur de l'enveloppe n'a que peu d'effet sur sa performance, ajoutant donc de la flexibilité pour sa conception et sa construction. Ce résultat a cependant seulement été obtenu en considérant la conductivité des chemins préférentiels beaucoup plus grande que celle des rejets entreposés, et ces conclusions sont donc susceptibles de changer en considérant d'autres contrastes de perméabilité entre les deux matériaux. Ainsi, une étude de l'influence du ratio de perméabilité devrait être conduite afin de compléter les présentes avancées.

Concernant le dernier cas représentant des fosses elliptiques avec un écoulement régional parallèle à leur axe mineur (section 9.3.2), la performance de l'enveloppe perméable peut encore être améliorée en considérant des inclusions de roches stériles sous la forme de tubes à travers les rejets et parallèles à l'écoulement régional. De cette manière, la réduction du gradient par rapport à une enveloppe perméable de taille constante peut atteindre jusqu'à environ 40%. En pratique, ces résultats montrent que des inclusions linéaires doivent être considérées pour maximiser l'efficacité de chemins préférentiels dans ce type de fosses. Néanmoins, cette géométrie optimisée montre la limite de l'approche d'optimisation topologique utilisée ici, puisqu'elle ne prend pas en compte de contraintes opérationnelles autres que celles explicitement définies. En effet, opérationnellement, les roches stériles doivent être déposées sur d'autres roches stériles afin de permettre, par exemple, la circulation des camions les transportant, ou pour éviter qu'elles ne s'enfoncent et se mélangent avec les résidus déposés hydrauliquement. De nouvelles contraintes devraient donc être ajoutées à l'optimisation afin de se rapprocher de géométries de codisposition de roches et de résidus immédiatement constructibles en pratique.

L'optimisation de la géométrie des chemins préférentiels montre finalement tout son intérêt lorsque des chemins préférentiels doivent être apposés dans des fosses ayant des géométries complexes ne pouvant se rapporter trivialement à un cône ou à une ellipse, ou lorsque des conditions hydrogéologiques complexes sont en places sur le site d'étude (fracture régionale

hautement perméable, multiples couches géologiques de différentes perméabilités ou prise en compte d'une zone de recharge, par exemple). Cette approche d'optimisation permettrait aussi, par exemple, de prendre en considération la ZES pour coupler les effets des deux techniques étudiées ici. Elle constitue globalement un outil puissant à la fois pour l'émission de lignes directrices pour la construction, mais aussi pour la conception et la validation de plan de codisposition.

11.3.4 Comparaison, avantages et inconvénients des différentes approches

Chacune des deux techniques étudiées dans ce projet de recherche (à savoir la ZES et l'enveloppe perméable optimisée) a prouvé qu'elle était capable de dévier une partie importante de l'eau souterraine des rejets entreposés dans les fosses. D'un côté, la ZES a l'avantage de ne pas nécessiter la construction d'une structure à l'intérieur de la fosse, simplifiant grandement les opérations et permettant de se concentrer sur la déposition des rejets dans la fosse. Elle permet alors de maximiser le volume de rejets entreposés, tout en limitant les surcoûts liés à la conception et à la construction d'une structure de confinement. De l'autre, la création d'une enveloppe perméable (possiblement optimisée) a l'avantage de proposer un contrôle de la déviation souhaitée par le choix de son épaisseur ou de la conductivité hydraulique du matériau la composant. Ainsi, la déviation obtenue est sujette à moins d'incertitudes d'une part par l'utilisation de matériau ayant des propriétés facilement caractérisables, et d'autre part grâce à un contrôle accru lors de sa mise en place. La création de chemins préférentiels dans les fosses a aussi déjà été utilisée dans des applications à grande échelle (MEND, 2015; Hore et Luppnow, 2015) où les retours d'expérience démontrent son efficacité, en plus de bénéficier d'une plus vaste littérature sur laquelle sa conception peut s'appuyer en plus des développements présentés dans cette thèse (Misfeldt *et al.*, 1999; Salama *et al.*, 2002; West *et al.*, 2003; Thériault, 2004; Rousseau et Pabst, 2018).

11.4 Retour sur les hypothèses et discussion

Les travaux présentés dans cette thèse ont permis d'obtenir de plus amples connaissances quant à l'utilisation de chemins préférentiels pour réduire les interactions entre les rejets remblayés et l'environnement. Ils sont néanmoins soumis aux hypothèses simplificatrices émises dès le début de la thèse dans la section 3.1 et dont les implications sur les résultats des précédents chapitres sont discutées ici.

Tout d'abord, ces travaux ont pour la plupart été réalisés en considérant un roc autour de la fosse doté de propriétés équivalentes homogènes et isotropes à l'échelle d'étude, et avec une

Tableau 11.1 Avantages et inconvénients comparés de l'utilisation de la ZES comme enveloppe perméable naturelle ou de l'ajout de chemins d'écoulements préférentiels (enveloppe perméable) dans la fosse.

Méthode	Enveloppe perméable par ZES	Enveloppe perméable dans la fosse (optimisée)
Contrôle de la déviation	Aucun (hormis sautages additionnels en amont)	Fort, via les propriétés hydrogéologiques de l'enveloppe et sa géométrie
Incertitude sur la déviation	Forte sans une connaissance détaillée des propriétés du roc	Moyenne, peut être réduite en considérant des facteurs de sécurité
Volume de rejets entreposés	Maximum	Dépend de la taille de l'enveloppe (sauf si faite de rejets)
Mise en place	Facile (pas d'action nécessaire autre que la caractérisation)	Complexe
Surcoût	Faible (seulement caractérisation du roc)	Élevé
Retour d'expérience	Aucun	Quelques applications sur divers site minier [1,2]

[1] (MEND, 2015), [2] (Hore et Luppnow, 2015)

topographie plane. Ces hypothèses ne sont en général pas vérifiées, car la fosse peut intercepter plusieurs formations géologiques avec des conductivités très différentes (par exemple Cahyadi *et al.*, 2017), être située dans une région montagneuse, ou des fractures régionales peuvent influencer l'écoulement et engendrer un écoulement non uniforme, au contraire de ce qui a été supposé ici. De même, il est possible que la conductivité hydraulique du roc diminue avec la profondeur sous l'effet des contraintes (Ranjram *et al.*, 2015). Ainsi, l'environnement hydrogéologique de la fosse est susceptible de biaiser la prédiction de la déviation dans la ZES ou dans une enveloppe perméable, ou de changer les géométries optimisées de codisposition de roches stériles et de résidus dans les fosses déterminées dans les chapitres 8 et 9. Dans les deux cas, un moyen de prendre en compte les incertitudes sur les performances des techniques étudiées pourrait être d'une part l'ajout d'un facteur de sécurité pendant l'étude de la ZES ou la conception d'une enveloppe perméable afin de tenir compte du non-respect de certaines de ces hypothèses. Aussi, des études spécifiques pourraient être entreprises pour s'assurer d'une part de l'influence de la ZES, et, d'autre part, de la position optimale des chemins préférentiels d'écoulement avec l'approche développée pour ces cas particuliers. Dans tous les cas (c'est-à-dire, roc homogène ou non) il est conseillé, lors d'une étude d'impact environnemental,

de plutôt s'attarder sur les flux à long terme sortants des fosses pendant la conception et l'étude des techniques de déviation, car ceux-ci semblent découplés des propriétés du roc. La prédiction des concentrations en aval de la fosse peut en effet être soumise à de larges incertitudes (chapitre 5 ; West *et al.*, 2003; Lange et Van Geel, 2011).

Une autre hypothèse cruciale dans ces travaux a été de considérer que le transport dispersif était négligeable face au transport advectif, ce qui a donc concentré les recherches vers la création de chemins préférentiels visant à dévier l'eau souterraine des rejets. Cette hypothèse pourrait ne pas toujours être vérifiée, notamment lorsque le gradient hydraulique est faible, ou lorsqu'il n'existe pas d'écoulement régional. Ce cas peut par exemple être rencontré pour des fosses situées dans des lacs, comme à la mine Diavik située dans les Territoires du Nord-Ouest (Canada). Ainsi, pour ces cas spécifiques, l'utilisation de chemins d'écoulements préférentiels et l'approche d'optimisation proposée ne sont pas applicables. Aussi, les rejets considérés dans les présents travaux ont été considérés essentiellement non-réactifs, afin de concentrer l'étude sur la dispersion dans l'environnement d'un contaminant initialement contenu dans les rejets. En pratique, les rejets peuvent par exemple être générateurs de Drainage Minier Acide (DMA), et continuer d'interagir avec l'eau souterraine même une fois déposés dans les fosses et en condition saturée (Santofimia *et al.*, 2013; Barfoud *et al.*, 2019). Bien que dans ce cas, les chemins préférentiels d'écoulement restent d'intérêts pour réduire le transport advectif, le transport dispersif devrait aussi être pris en considération et minimisé. En effet, les rejets situés à l'interface avec la ZES ou les chemins préférentiels sont, d'une part, susceptibles de s'oxyder à cause de l'apport de composé oxydant dissous dans l'eau souterraine, et d'autre part, le DMA produit pourrait se retrouver rapidement dans l'environnement par les mêmes chemins préférentiels. Un des moyens de contrôler et de réduire les flux dispersif consisterait à apposer une couche intermédiaire de sable entre les chemins préférentiels et les rejets pour limiter la diffusion (Salama *et al.*, 2002). Une autre approche consisterait à minimiser la surface de l'interface entre les rejets et les chemins préférentiels. Cette dernière solution pourrait notamment être intégrée dans l'approche d'optimisation proposée dans le chapitre 9, soit sous la forme d'une contrainte à respecter, soit la forme d'un terme pénalisant dans la fonction objectif, soit en s'intéressant directement au transport de réactifs entrants ou de contaminants sortants dans l'optimisation.

Finalement, tous les travaux présentés dans cette thèse ont considéré que la fosse était entièrement remblayée, soit un modèle totalement saturé (formation environnante et fosse), et sans recharge. En pratique, ces hypothèses ne sont pas toujours vérifiées, et la performance des chemins d'écoulements préférentiels pour dévier l'eau souterraine des rejets pourrait varier. Par exemple, une fosse partiellement remblayée où les rejets seraient ennoyés sous un lac de fosse pourrait entraîner une modification du régime hydraulique du système, et la fosse pour-

rait agir comme un piège hydraulique (Castendyk et Eary, 2009; McCullough *et al.*, 2013). Dans ce cas, la fosse ne serait pas isolé de la surface, et les des phénomènes de recharges ou d'évaporations devraient être considérés. Le rôle des chemins d'écoulements préférentiels tels qu'étudiés dans ce projet devrait être analysé plus en détail pour ces cas. De même, les travaux présentés ne s'appliquent pas à la zone non saturée, notamment car les conductivités hydrauliques non saturées des matériaux (rejets, chemins préférentiels et ZES) pourraient être significativement différentes de celles considérées ici. En pratique, d'autres techniques de contrôle devraient être mises en place dans la zone non saturée afin de prévenir les interactions entres les rejets et l'environnement, notamment en lien avec l'oxydation de minéraux en présence d'oxygène et d'eau provenant de la surface ou du roc fracturé et menant à la formation de DMA ou de Drainage Neutre Contaminé (DNC) (Villain *et al.*, 2015; Dragila *et al.*, 2015; Bussière et Guittonny, 2020).

CHAPITRE 12 CONCLUSION

12.1 Rappel de la problématique

Ces travaux s'inscrivaient dans un effort de recherche pour proposer une gestion plus avantageuse des rejets miniers. De cette manière, l'acceptabilité sociale des nouveaux projets serait accrue, et l'industrie minière serait en mesure de subvenir aux besoins mondiaux en minerai et en métaux tout en garantissant une empreinte environnementale réduite. La déposition des rejets miniers dans les fosses, bien qu'avantageuse sur de nombreux points, pourrait cependant provoquer des réactions chimiques indésirable ou la dispersion de contaminants dans l'environnement si les interactions entre l'eau souterraine et les rejets ne sont pas correctement prises en considération. La création de chemins d'écoulements préférentiels pour l'eau souterraine afin de dévier celle-ci des rejets problématiques est une méthode de permettant de limiter les contacts entre les rejets et l'environnement. L'objectif du projet de recherche constituait alors d'analyser, d'une part, si de tels chemins d'écoulements préférentiels pouvaient se former dans la Zone Endommagée par Sautage (ZES), qui est une zone de perméabilité augmentée localisée à la périphérie de la fosse et crée par l'excavation de la fosse ; et d'autre part, si il était possible d'augmenter l'efficacité de chemins préférentiels d'écoulements situé dans la fosse par l'optimisation de leur géométrie. Plus en détail, le but était de développer de nouveaux outils afin de quantifier la déviation de l'eau souterraine par la ZES puis d'appliquer une approche d'optimisation topologique pour maximiser la performance de chemins préférentiels en vue réduire le transport advectif de réactifs entrants ou de contaminants sortants des rejets vers l'environnement

12.2 Avancées dans la caractérisation et l'optimisation des chemins préférentiels

Les présents travaux ont permis de mettre en évidence la présence de chemins d'écoulements préférentiels dans la ZES qui puissent être utilisés pour limiter les interaction entre les rejets remblayées dans les fosses et l'environnement. Cette mise en évidence a été supportée par un modèle conceptuel de la ZES construit dans les présents travaux et dont les paramètres ont été estimés au moyen de données disponibles dans la littérature ou mesurées sur le terrain. Ainsi, des déviations importantes pouvant atteindre plus de 90% ont été simulées en considérant des paramètres représentatif de la ZES. En plus de la caractérisation, ces travaux ont permis de contraindre de manière systématique la déviation du flux par la ZES entre un minimum et un maximum à partir de la connaissance de seulement deux propriétés

qui lui sont reliées : son épaisseur et sa perméabilité mesurée au mur de fosse. Ces deux propriétés, entrées dans un modèle semi-analytique et une relation empirique représentant des caractéristiques géométriques de la fosse et la ZES, se sont révélées suffisantes pour estimer la déviation dans un intervalle compris entre plus ou moins 20%, et de manière beaucoup plus précise que dans la littérature. Ces travaux montrent donc que la ZES autour des fosses peut être utilisée comme enveloppe perméable naturelle pour réduire les interactions entre les rejets remblayés et l'environnement, et fournissent des indicateurs fiables pour la prédiction de sa performance.

Ces travaux ont aussi été les premiers à appliquer une approche d'optimisation topologique destinée à des problématiques hydrogéologiques et au domaine de l'environnement minier. Elle a notamment constitué un outil puissant dans la recherche de géométries de chemins préférentiels optimisés pour la réduction des flux d'eau souterraine s'écoulant dans les rejets remblayés. Ce volet de la thèse ayant trait à l'optimisation a tout d'abord prouvé que la technique de l'enveloppe perméable était une géométrie de chemins préférentiels suboptimale dans de nombreux cas, notamment pour des fosses coniques et elliptiques dont le gradient est incliné à maximum 45° avec l'axe majeur. Il a, de plus, permis de montrer que des changements parfois significatifs dans l'épaisseur de l'enveloppe n'avaient que peu d'effet sur ses performances, engendrant alors une certaine flexibilité pour sa conception et sa construction. Cependant, l'approche topologique a aussi montré que pour certaines géométries de fosses, une diminution supplémentaire du flux d'eau souterraine pouvait être obtenue avec des géométries non conventionnelles composées d'une enveloppe perméable et de multiples conduits à travers les rejets, notamment pour des fosses elliptiques dont le gradient régional est orienté selon l'axe mineur ou pour des fosses ayant des géométries complexes.

Toutes les précédentes réponses ont finalement été supportées par l'utilisation d'une approche numérique tridimensionnelle spécialement développée pour les besoins du projet. La totalité des outils utilisés dans ce projet sont rendus disponibles en libre accès et permettront aux opérateurs, experts et chercheurs du domaine à reproduire les résultats ou à les appliquer à leurs problématiques.

12.3 Recommandations

L'utilisation de la ZES comme enveloppe perméable naturelle a été décrite dans ces travaux comme une approche performante et économiquement viable pour dévier l'eau souterraine des rejets. Néanmoins ce comportement n'a été prouvé que numériquement, et n'a pas encore été mis en évidence sur le terrain. Ainsi, une première recommandation serait de conduire des expériences de terrain pour caractériser la présence de chemins préférentiels continus

autour des fosses, puis d'en déduire l'influence sur l'écoulement avec les résultats de la présente recherche. La mise en évidence des chemins préférentiels sur le terrain peut se faire de différentes manières. Une première méthode consisterait à conduire des essais de traceur directement dans le mur de fosse entre un piézomètre d'injection et de récupération pour caractériser l'écoulement et le transport de solutés dans la ZES comme dans Sanford *et al.* (2002). Des essais de transport de chaleur peuvent aussi être employés, ce qui aurait l'avantage de caractériser les flux naturels d'eau souterraine dans des fosses déjà remblayées ainsi que la géométrie des fractures (de La Bernardie *et al.*, 2018; Maldaner *et al.*, 2019). L'utilisation de méthodes géophysiques serait intéressante pour la caractérisation de la porosité, la perméabilité et la position et l'orientation des fractures dans la ZES (Day-Lewis *et al.*, 2017), mais aussi pour le suivi et la reconstruction des chemins d'écoulements préférentiels d'un traceur dans le mur de fosse (Wright et Lane, 1998; Giertzuch *et al.*, 2020).

Opérationnellement, il peut parfois être difficile de garantir que les matériaux de l'enveloppe perméable soient homogènes tout au long de la déposition. La perméabilité des roches stériles peut par exemple variée en fonction des méthodes de déposition ou des séquences de minage (Aubertin *et al.*, 2002). De même, la consolidation des résidus au cours du temps peut influer sur la déviation de l'eau souterraine par des chemins préférentiels (comme montrée dans ces travaux pour la technique de l'enveloppe perméable). Ainsi, il est recommandé de conduire une étude sur la variabilité des géométries optimales en fonction des propriétés des matériaux des chemins préférentiels et des rejets, afin d'assouplir ou d'affermir les contraintes opérationnelles sur le choix des matériaux de l'enveloppe et les propriétés des rejets. De plus, comme discuté tout au long de la thèse, la construction des géométries optimisées des chemins préférentiels peut être difficile, comme le placement de roches stériles sur des résidus. Il est donc tout particulièrement recommandé d'ajouter des contraintes de constructibilité si une approche topologique est utilisée pour l'optimisation des chemins préférentiels dans les fosses. Ces ajouts permettront en outre de supprimer les étapes de réinterprétation des géométries nécessaires avant leur mise en place sur le terrain, et donc de diminuer les délais et les coûts associés à la conception de structure de confinement dans les fosses.

Enfin, comme stipulé dès le début de la thèse, les recherches se sont concentrées sur la réduction des interactions entre les fosses remblayées et l'environnement par la réduction des flux d'eau souterraine entrants dans les rejets et du transport advectif de solutés. Cependant, il a aussi été montré dans cette thèse que les bénéfices obtenus par la réduction du transport advectif pouvaient être annulés par une augmentation du transport dispersif. Pour limiter ces contre-performances, il est donc recommandé de prendre en considération l'augmentation des flux diffusifs directement dans l'optimisation. Cela peut être fait de plusieurs manières, la plus simple étant l'intégration d'une contrainte supplémentaire à l'optimisation représentant

une surface maximum autorisée pour l'interface entre les chemins préférentiels et les rejets réactifs ou contaminés (Fernandes *et al.*, 1999). Cette contrainte peut aussi être ajoutée directement dans la fonction objectif pour que cette dernière puisse considérer à la fois le transport advectif et dispersif, et dont l'importance pourrait préférentiellement être portée sur l'un ou sur l'autre des mécanismes via des constantes de pondération. Une dernière approche, beaucoup plus performante, mais aussi beaucoup plus difficile à mettre en place, serait de prendre en considération directement le transport d'espèces dissoutes en fonction du temps dans l'optimisation. Cette approche aurait l'avantage d'optimiser directement les flux sortants de contaminants de la fosse, et non plus sur des grandeurs reliées aux flux comme précédemment. Elle permettrait de plus d'ouvrir le champ d'application de l'optimisation topologique à un plus grand nombre de problématiques.

12.4 Perspectives

Une des avancées du projet de recherche a été de donner naissance à une adaptation des techniques d'optimisation topologique pour le domaine de l'hydrogéologie et de l'environnement minier. Cette dernière a été implémentée avec l'objectif d'être flexible, en prenant notamment la forme d'une proto-librairie Python. Cette flexibilité permet d'envisager d'autres problèmes d'optimisation qui pourraient être résolus à partir d'un changement de la fonction objectif, de la paramétrisation des propriétés des matériaux ou des contraintes appliquées. Ces changements ne nécessiteraient que la modification respective d'un script à la fois, sans modification supplémentaire à apporter au reste du procédé d'optimisation. Ces modifications permettraient notamment de traiter des problématiques récurrentes en environnement minier tel que celles énoncées ci-dessous.

12.4.1 Roche stérile réactive

L'optimisation de la technique de l'enveloppe perméable présentée dans le chapitre 9 s'est concentrée sur la réduction du flux dans les rejets remblayés en considérant les roches stériles non réactives. De nombreux sites miniers produisent cependant des roches stériles réactives qu'il pourrait être intéressant de déposer également dans les fosses. La considération de roches stériles réactives est susceptible de changer la géométrie des chemins préférentiels optimisés, car le flux d'eau dans les roches stériles devrait alors aussi être réduit afin de limiter la génération de drainage minier. La fonction objectif décrite dans le chapitre 9 (voir équation 9.3) devrait ainsi être modifiée en ajoutant un terme considérant le flux dans les roches stériles

et deux constantes proportionnelles à la réactivité de chaque matériau :

$$c(h,p) = \frac{\sum_i^n V_i \left[(1-\bar{p}_i)R_t + \bar{p}_i R_w\right](\nabla h)_i}{\sum_i^n V_i} \tag{12.1}$$

où R_t et R_w sont les deux constantes reliées à la réactivité des résidus et des roches stériles respectivement.

12.4.2 Restauration des conditions hydrogéologiques avant opération

Un autre problème auquel l'approche d'optimisation permettrait de répondre serait le cas où les opérateurs souhaiteraient restaurer les conditions hydrogéologiques existantes avant le développement du projet minier. Cet objectif pourrait être réalisé en minimisant la différence entre les gradients hydrauliques calculés en chaque point du modèle numérique considérant la fosse avec les rejets remblayés ∇h, et celui visé $(\nabla h)_{obj}$ (par exemple le gradient avant opération) :

$$c(h,p) = \sum_i^n \left((\nabla h)_{obj} - \nabla h\right)^2 \tag{12.2}$$

Cet objectif est semblable à la recherche de l'invisibilité dans le domaine de l'électromagnétisme (Fleury *et al.*, 2015; Jung *et al.*, 2021).

12.4.3 Codisposition de roches stériles dans les parcs à résidus

La codisposition de roches stériles et de résidus dans les parcs à résidus pourrait aussi être optimisée afin de diminuer le temps nécessaire à la dissipation des pressions interstitielles (James *et al.*, 2013). Cette approche peut d'ailleurs être simulée avec PFLOTRAN en modélisant les surpressions interstitielles sous la forme d'un terme source constant et en considérant les roches stériles infiniment perméables. De cette manière, la minimisation de la charge hydraulique moyenne dans tout le domaine en régime permanent donnerait une indication de la performance des inclusions de roches stériles relativement à la dissipation des pressions :

$$c(h,p) = \frac{\sum_i^n h_i V_i}{\sum_i^n V_i} \tag{12.3}$$

12.4.4 Extension à des problèmes transitoires et/ou impliquant du transport réactif

Enfin, l'approche d'optimisation développée dans le cadre de ce projet pourrait être appliquée à des problèmes impliquant des variables évoluant au cours du temps, incluant par exemple

du transport réactif. Ces développements nécessiteraient néanmoins l'implémentation de l'intégration temporelle du problème adjoint (section 3.4.3) pour des problèmes qui dépendent du temps, et aussi la différentiation du solveur PFLOTRAN pour le procédé de transport réactif. Les applications en découlant pourraient être utiles dans de nombreux domaines, par exemple pour inclure la formation de drainage minier directement dans l'optimisation.

RÉFÉRENCES

Abdelaziz, R. et Zambrano-Bigiarini, M. (2014). Particle Swarm Optimization for inverse modeling of solute transport in fractured gneiss aquifer. *Journal of Contaminant Hydrology*, 164:285–298.

Abdelkader, A., Bajaj, C. L., Ebeida, M. S., Mahmoud, A. H., Mitchell, S. A., Owens, J. D. et Rushdi, A. A. (2020). VoroCrust : Voronoi Meshing Without Clipping. *ACM Transactions on Graphics*, 39(3):23 :1–23 :16.

Abelin, H., Birgersson, L., Widén, H., Ågren, T., Moreno, L. et Neretnieks, I. (1994). Channeling experiments in crystalline fractured rocks. *Journal of Contaminant Hydrology*, 15(3):129–158.

Adu-Wusu, C. et Yanful, E. K. (2007). Post-closure investigation of engineered test covers on acid-generating waste rock at Whistle Mine, Ontario. *Canadian Geotechnical Journal*. Publisher : NRC Research Press Ottawa, Canada.

Ali, S. H., Giurco, D., Arndt, N., Nickless, E., Brown, G., Demetriades, A., Durrheim, R., Enriquez, M. A., Kinnaird, J., Littleboy, A., Meinert, L. D., Oberhänsli, R., Salem, J., Schodde, R., Schneider, G., Vidal, O. et Yakovleva, N. (2017). Mineral supply for sustainable development requires resource governance. *Nature*, 543(7645):367–372.

Alkan, H. (2009). Percolation model for dilatancy-induced permeability of the excavation damaged zone in rock salt. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 46(4):716–724.

Allaire, G., Jouve, F. et Toader, A.-M. (2004). Structural optimization using sensitivity analysis and a level-set method. *Journal of Computational Physics*, 194(1):363–393.

Allen, E. (2008). Process water treatment in Canada's oil sands industry : I. Target pollutants and treatment objectives. *Journal of Environmental Engineering and Science*.

Alnæs, M., Blechta, J., Hake, J., Johansson, A., Kehlet, B., Logg, A., Richardson, C., Ring, J., Rognes, M. E. et Wells, G. N. (2015). The FEniCS Project Version 1.5. *Archive of Numerical Software*, 3(100). Number : 100.

Amos, R. T., Blowes, D. W., Bailey, B. L., Sego, D. C., Smith, L. et Ritchie, A. I. M. (2015). Waste-rock hydrogeology and geochemistry. *Applied Geochemistry*, 57:140–156.

Anand, N., Vitale, S., Pini, M. et Colonna, P. (2018). Assessment of ffd and cad-based shape parametrization methods for adjoint-based turbomachinery shape optimization. *In Global Power and Propulsion Forum Montreal 2018*, Montréal, Canada.

Anderson, M. P., Woessner, W. W. et Hunt, R. J. (2015). Chapter 2 - Modeling Purpose and Conceptual Model. *In* Anderson, M. P., Woessner, W. W. et Hunt, R. J., éditeurs : *Applied Groundwater Modeling (Second Edition)*, pages 27–67. Academic Press, San Diego.

Andreassen, E., Clausen, A., Schevenels, M., Lazarov, B. S. et Sigmund, O. (2011). Efficient topology optimization in MATLAB using 88 lines of code. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 43(1):1–16.

Anning, C., Wang, J., Chen, P., Batmunkh, I. et Lyu, X. (2019). Determination and detoxification of cyanide in gold mine tailings : A review. *Waste Management & Research*, 37(11):1117–1126. Publisher : SAGE Publications Ltd STM.

Antonaki, N., Abdoun, T. et Sasanakul, I. (2018). Centrifuge Tests on Comixing of Mine Tailings and Waste Rock. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 144(1):04017099.

Antonio, M., Paulo, L., Guilherme, C. et Luiz, d. S. (2013). Analysis of the non-orthogonality correction of finite volume discretization on unstructured meshes. *In 22nd International Congress of Mechanical Engineering (COBEM 2013)*, Ribeirao Preta, SP, Brazil.

Arsenault, R., Brissette, F. et Martel, J.-L. (2018). The hazards of split-sample validation in hydrological model calibration. *Journal of Hydrology*, 566:346–362.

Aubertin, M. (2013). Waste rock disposal to improve the geotechnical and geochemical stability of piles. *In World Mining Congress*, Montréal, Québec, Canada.

Aubertin, M., Bussière, B. et Bernier, L. (2002). *Environnement et gestion des rejets miniers, manuel sur cédérom*. Polytechnique Montréal, Montréal, Canada, presses internationales polytechnique édition.

Aubertin, M., Bussière, B., Pabst, T., James, M. et Mbonimpa, M. (2016). Review of the Reclamation Techniques for Acid-Generating Mine Wastes upon Closure of Disposal Sites. *In Geo-Chicago 2016*, pages 343–358, Chicago, IL. ISBN : 9780784480137 Publisher : American Society of Civil Engineers.

Aubertin, M., Mbonimpa, M., Bussière, B. et Chapuis, R. P. (2003). A model to predict the water retention curve from basic geotechnical properties. *Canadian Geotechnical Journal*, 40(6):1104–1122.

Aubertin, M., Ricard, J.-F. et Chapuis, R. P. (1998). A predictive model for the water retention curve : application to tailings from hard-rock mines. *Canadian Geotechnical Journal*, 35(1):55–69.

Audet, C. et Hare, W. (2017). *Derivative-Free and Blackbox Optimization*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer International Publishing, Cham.

Auradou, H. (2009). Influence of wall roughness on the geometrical, mechanical and transport properties of single fractures. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 42(21): 214015.

Auradou, H., Drazer, G., Hulin, J. P. et Koplik, J. (2005). Permeability anisotropy induced by the shear displacement of rough fracture walls. *Water Resources Research*, 41(9):W09423.

Awoh, A. S., Mbonimpa, M. et Bussière, B. (2013). Field Study of the Chemical and Physical Stability of Highly Sulphide-Rich Tailings Stored Under a Shallow Water Cover. *Mine Water and the Environment*, 32(1):42–55.

Ayachit, U. (2015). *The ParaView guide : a parallel visualization application ; updated for ParaView version 4.3*. Kitware, Clifton Park, NY. OCLC : 915643233.

Ayres, B. K., Lanteigne, L., O'Kane, M. et Meiers, G. (2012). Whistle Mine Backfilled Pit Dry Cover Case Study – Performance Based on Six Years of Field Monitoring. *In 9th International Conference on Acid Rock Drainage*, page 14, Ottawa, ON, Canada.

Azam, S. et Li, Q. (2010). Tailings dam failures : A review of the last one hundred years. *Geotech. News*, 28.

Azam, S., Wilson, G. W., Herasymuik, G., Nichol, C. et Barbour, L. S. (2007). Hydrogeological behaviour of an unsaturated waste rock pile : a case study at the golden sunlight mine, montana, usa. *Bulletin of Engineering Geology and the Environment*, 66(3): 259–268.

Baghbanan, A. et Jing, L. (2007). Hydraulic properties of fractured rock masses with correlated fracture length and aperture. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 44(5):704–719.

Balay, S., Abhyankar, S., Adams, M.-F., Brown, J., Brune, P., Buschelman, K., Dalcin, L., Dener, A., Eijkhout, V., Gropp, W.-D., Karpeyev, D., Kaushik, D., Knepley, M.-G., May, D.-A., McInnes, L. C., Mills, R. T., Munson, T., Rupp, K., Sanan, P., Smith, B.-F., Zampini, S., Zhang, H. et Zhang, H. (2020). PETSc users manual. Rapport technique ANL-95/11 - Revision 3.14, Argonne National Laboratory.

Bang, S.-H., Jeon, S.-W. et Kwon, S.-K. (2012). Modelling the hydraulic characteristics of a fractured rock mass with correlated fracture length and aperture : applucation in the underground research tunnel at kaeri. *Nuclear Engineering and Technology*, 44(6):639–652.

Barfoud, L., Pabst, T., Zagury, G. J. et Plante, B. (2019). Effect of Dissolved Oxygen on The Oxidation of Saturated Mine Tailings. *In Geo-Environmental Engineering 2019*, page 7, Montréal, Canada.

Batchelor, G. K. (2001). *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press, Cambridge, U.K.

Batool, S., Nisar, M., Frezza, F. et Mangini, F. (2020a). Cloaking Using the Anisotropic Multilayer Sphere. *Photonics*, 7(3):52.

Batool, S., Nisar, M., Mangini, F. et Frezza, F. (2020b). Cloaking using anisotropic multilayer circular cylinder. *AIP Advances*, 10(9):095312.

Beale, G. et Read, J., éditeurs (2014). *Guidelines for Evaluating Water in Pit Slope Stability*. CRC Press, Boca Raton, Florida, 1st edition édition.

Bear, J. (1972). *Dynamics of Fluids In Porous Media*. American Elsevier Publishing Company.

Bear, J. (1993). Modeling Flow and Contaminant Transport in Fractured Rocks. *In Flow and Contaminant Transport in Fractured Rock*, pages 1–37. Elsevier.

Bear, J. et Bachmat, Y. (1990). *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media*. Theory and Applications of Transport in Porous Media. Springer Netherlands.

Begor, K. F., Miller, M. A. et Sutch, R. W. (1989). Creation of an artificially produced fracture zone to prevent contaminated ground-water migration. *Groundwater*, 27(1):57–65.

Ben Abdelghani, F., Aubertin, M., Simon, R. et Therrien, R. (2015). Numerical simulations of water flow and contaminants transport near mining wastes disposed in a fractured rock mass. *International Journal of Mining Science and Technology*, 25(1):37–45.

Ben Belfadhel, M. (2000). Méthodes de gestion et de déclassement des résidus miniers d'uranium au canada. *In Proceedings of the 53th Conference of Canadian Geotechnical Society, GeoMontreal*, pages 675–682, Montréal, Canada.

Bendsøe, M. P. et Kikuchi, N. (1988). Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 71(2):197–224.

Bendsøe, M. P. et Sigmund, O. (1999). Material interpolation schemes in topology optimization. *Archive of Applied Mechanics*, 69(9):635–654.

Bendsøe, M. P. et Sigmund, O. (2004). *Topology optimization : theory, methods, and applications*. Springer, Berlin ; New York.

Berkowitz, B. (2002). Characterizing flow and transport in fractured geological media : A review. *Advances in Water Resources*, 25(8):861–884.

Berre, I., Doster, F. et Keilegavlen, E. (2019). Flow in Fractured Porous Media : A Review of Conceptual Models and Discretization Approaches. *Transport in Porous Media*, 130(1):215–236.

Blackmore, S., Pedretti, D., Mayer, K., Smith, L. et Beckie, R. (2018). Evaluation of single- and dual-porosity models for reproducing the release of external and internal tracers from heterogeneous waste-rock piles. *Journal of Contaminant Hydrology*, 214:65–74.

Blackmore, S., Smith, L., Ulrich Mayer, K. et Beckie, R. D. (2014). Comparison of unsaturated flow and solute transport through waste rock at two experimental scales using temporal moments and numerical modeling. *Journal of Contaminant Hydrology*, 171:49–65.

Blessent, D., Jørgensen, P. R. et Therrien, R. (2014). Comparing Discrete Fracture and Continuum Models to Predict Contaminant Transport in Fractured Porous Media. *Groundwater*, 52(1):84–95.

Blight, G. E. (2010). *Geotechnical engineering for mine waste storage facilities*. CRC Press, Boca Raton.

Blowes, D., Ptacek, C., Jambor, J., Weisener, C., Paktunc, D., Gould, W. et Johnson, D. (2014). The geochemistry of acid mine drainage. *In Treatise on Geochemistry*, pages 131–190. Elsevier.

Bolduc, F. et Aubertin, M. (2014). Numerical investigation of the influence of waste rock inclusions on tailings consolidation. *Canadian Geotechnical Journal*, 51(9):1021–1032.

Booshehrian, A., Wan, R. et Su, G. (2020). Thermal Disturbances in Permafrost Due to Open Pit Mining and Tailings Impoundment. *Minerals*, 10(1):35. Number : 1 Publisher : Multidisciplinary Digital Publishing Institute.

Borghi, A., Renard, P. et Courrioux, G. (2015). Generation of 3D Spatially Variable Anisotropy for Groundwater Flow Simulations. *Groundwater*, 53(6):955–958. _eprint : https ://ngwa.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/gwat.12295.

Bossart, P., Meier, P. M., Moeri, A., Trick, T. et Mayor, J.-C. (2002). Geological and hydraulic characterisation of the excavation disturbed zone in the Opalinus Clay of the Mont Terri Rock Laboratory. *Engineering Geology*, 66(1):19–38.

Bour, O. et Davy, P. (1999). Clustering and size distributions of fault patterns : Theory and measurements. *Geophysical Research Letters*, 26(13):2001–2004.

Bourdin, B. (2001). Filters in topology optimization. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50(9):2143–2158. _eprint : https ://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/nme.116.

Broda, S., Aubertin, M., Blessent, D., Hirthe, E. et Graf, T. (2017). Improving control of contamination from waste rock piles. *Environmental Geotechnics*, 4(4):274–283.

Brooks, R. H. et Corey, A. T. (1964). *Hydraulic Properties of Porous Media*. Colorado State University.

Brown, S., Caprihan, A. et Hardy, R. (1998). Experimental observation of fluid flow channels in a single fracture. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 103(B3):5125–5132.

Burnett, R. D. et Frind, E. O. (1987). Simulation of contaminant transport in three dimensions : 2. Dimensionality effects. *Water Resources Research*, 23(4):695–705.

Bussière, B. (2007). Colloquium 2004 : Hydrogeotechnical properties of hard rock tailings from metal mines and emerging geoenvironmental disposal approaches. *Canadian Geotechnical Journal*, 44(9):1019–1052.

Bussière, B. et Guittonny, M. (2020). *Hard Rock Mine Reclamation : From Prediction to Management of Acid Mine Drainage*. CRC Press, Boca Raton.

Cahyadi, T. A., Widodo, L., Syihab, Z., Notosiswoyo, S. et Widijanto, E. (2017). Hydraulic Conductivity Modeling of Fractured Rock at Grasberg Surface Mine, Papua-Indonesia. *Journal of Engineering and Technological Sciences*, 49(1):37–57.

Calugaru, I. L., Neculita, C. M., Genty, T., Bussière, B. et Potvin, R. (2017). Removal of ni and zn in contaminated neutral drainage by raw and modified wood ash. *Journal of Environmental Science and Health, Part A*, 52(2):117–126.

Carslaw, H. S. et Jaeger, J. C. (1959). *Conduction of heat in solids*. Clarendon Press, Oxford, UK. OCLC : 535528.

Castendyk, D. N. et Eary, L. E. (2009). *Mine Pit Lakes : Characteristics, Predictive Modeling, and Sustainability*. SME.

Chapman, S. W., Parker, B. L., Cherry, J. A., McDonald, S. D., Goldstein, K. J., Frederick, J. J., Germain, D. J. S., Cutt, D. M. et Williams, C. E. (2013). Combined MODFLOW-FRACTRAN Application to Assess Chlorinated Solvent Transport and Remediation in Fractured Sedimentary Rock. *Remediation Journal*, 23(3):7–35.

Chen, S.-H., Feng, X.-M. et Isam, S. (2008). Numerical estimation of REV and permeability tensor for fractured rock masses by composite element method. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 32(12):1459–1477.

Chen, Y., Zhao, J. et Cao, D. (2020). Optimal Design of Presplit Blasting Network of Deep Concave Open-Pit Mine Slope with Heterogeneous Complex Rock Mass. *IOP Conference Series : Earth and Environmental Science*, 555:012072.

Cho, W.-J., Kim, J.-S., Lee, C. et Choi, H.-J. (2013). Gas permeability in the excavation damaged zone at KURT. *Engineering Geology*, 164:222–229.

Cirpka, O. A., Frind, E. O. et Helmig, R. (1999a). Numerical simulation of biodegradation controlled by transverse mixing. *Journal of Contaminant Hydrology*, 40(2):159–182.

Cirpka, O. A., Frind, E. O. et Helmig, R. (1999b). Streamline-oriented grid generation for transport modelling in two-dimensional domains including wells. *Advances in Water Resources*, 22(7):697–710.

Civan, F. (2011). *Porous Media Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, Incorporated, Hoboken, UNITED STATES.

Clifton, A., Barsi, R. et Misfeldt, G. (2002). Decommissioning : A critical component of the design for uranium tailings management facilities. Rapport technique 1011-4289, International Atomic Energy Agency (IAEA). IAEA-CSP–10/P.

Conforti, M., Cornuéjols, G. et Zambelli, G. (2014). *Integer Programming*. Numéro 271 de Graduate Texts in Mathematics. Springer International Publishing : Imprint : Springer, Cham, 1st ed. 2014 édition.

Contreras, C., Yniesta, S. et Aubertin, M. (2020). Seismic and post-seismic stability of tailings impoundments, considering the effect of reinforcement inclusions. *In GeoVirtual, 73rd Canadian Geotechnical Conference*, page 10, Online conference.

Cossey, H. L., Batycky, A. E., Kaminsky, H. et Ulrich, A. C. (2021). Geochemical Stability of Oil Sands Tailings in Mine Closure Landforms. *Minerals*, 11(8):830. Number : 8 Publisher : Multidisciplinary Digital Publishing Institute.

Courcelles, B. (2015). Guidelines for Preliminary Design of Funnel-and-Gate Reactive Barriers. *International Journal of Environmental Pollution and Remediation*.

Craig, J. R. (2015). A general analytical solution for steady flow in heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 51(6):4184–4197. _eprint : https ://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/2014WR016449.

Crivoi, A. et Fan, Z. (2019). A modular sound-attenuating metasurface with subwavelength thickness and hexagonal unit cells. *In 178th Meeting of the Acoustical Society of America*, page 040002, San Diego, California.

Czitrom, V. (1999). One-Factor-at-a-Time versus Designed Experiments. *The American Statistician*, 53(2):126–131. Publisher : [American Statistical Association, Taylor & Francis, Ltd.].

Dagan, G., Fiori, A. et Janković, I. (2003). Flow and transport in highly heterogeneous formations : 1. Conceptual framework and validity of first-order

approximations. *Water Resources Research*, 39(9). _eprint : https ://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1029/2002WR001717.

Darcel, C., Bour, O., Davy, P. et de Dreuzy, J. R. (2003). Connectivity properties of two-dimensional fracture networks with stochastic fractal correlation. *Water Resources Research*, 39(10):1272.

Darcy, H. (1856). *Les fontaines publiques de la ville de Dijon. Exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d'eau ouvrage terminé par un appendice relatif aux fournitures d'eau de plusieurs villes au filtrage des eaux et à la fabrication des tuyaux de fonte, de plomb, de tole*. Dalmont, Paris, France.

Davy, P., Bour, O., De Dreuzy, J.-R. et Darcel, C. (2006). Flow in multiscale fractal fracture networks. *Geological Society, London, Special Publications*, 261(1):31–45.

Davy, P., Le Goc, R. et Darcel, C. (2013). A model of fracture nucleation, growth and arrest, and consequences for fracture density and scaling. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 118(4):1393–1407.

Davy, P., Le Goc, R., Darcel, C., Bour, O., de Dreuzy, J. R. et Munier, R. (2010). A likely universal model of fracture scaling and its consequence for crustal hydromechanics. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 115(B10):B10411.

Day-Lewis, F. D., Slater, L. D., Robinson, J., Johnson, C. D., Terry, N. et Werkema, D. (2017). An overview of geophysical technologies appropriate for characterization and monitoring at fractured-rock sites. *Journal of Environmental Management*, 204:709–720.

de La Bernardie, J., Bour, O., Le Borgne, T., Guihéneuf, N., Chatton, E., Labasque, T., Le Lay, H. et Gerard, M.-F. (2018). Thermal Attenuation and Lag Time in Fractured Rock : Theory and Field Measurements From Joint Heat and Solute Tracer Tests. *Water Resources Research*, 54(12):10,053–10,075. _eprint : https ://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1029/2018WR023199.

de Lima, K. F., Lenzi, A. et Barbieri, R. (2011). The study of reactive silencers by shape and parametric optimization techniques. *Applied Acoustics*, 72(4):142–150.

Deaton, J. D. et Grandhi, R. V. (2014). A survey of structural and multidisciplinary continuum topology optimization : post 2000. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 49(1):1–38.

Deetman, S., Pauliuk, S., van Vuuren, D. P., van der Voet, E. et Tukker, A. (2018). Scenarios for Demand Growth of Metals in Electricity Generation Technologies, Cars, and Electronic Appliances. *Environmental Science & Technology*, 52(8):4950–4959.

Develi, K. et Babadagli, T. (2015). Experimental and visual analysis of single-phase flow through rough fracture replicas. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 73:139–155. WOS :000347033000015.

Diersch, H.-J. G. (2014). *FEFLOW*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.

Diwekar, U. (2008). *Introduction to Applied Optimization*, volume 22 de *Springer Optimization and Its Applications*. Springer US, Boston, MA.

Donato, D., Nichols, O., Possingham, H., Moore, M., Ricci, P. et Noller, B. (2007). A critical review of the effects of gold cyanide-bearing tailings solutions on wildlife. *Environment International*, 33(7).

Dragila, M. I., Nachshon, U. et Weisbrod, N. (2015). Fractures as advective conduits at the earth-atmosphere interface. *In Fluid Dynamics in Complex Fractured-Porous Systems*, pages 159–168. American Geophysical Union (AGU).

Du, Q., Faber, V. et Gunzburger, M. (1999). Centroidal Voronoi Tessellations : Applications and Algorithms. *SIAM Review*, 41(4):637–676.

Ebigbo, A., Lang, P. S., Paluszny, A. et Zimmerman, R. W. (2016). Inclusion-Based Effective Medium Models for the Permeability of a 3D Fractured Rock Mass. *Transport in Porous Media*, 113(1):137–158.

Errico, R. M. (1997). What Is an Adjoint Model ? *Bulletin of the American Meteorological Society*, 78(11):2577–2592. Publisher : American Meteorological Society.

Essayad, K., Pabst, T., Chapuis, R. P. et Aubertin, M. (2018). An experimental study of tailings migration through waste rock inclusions. *In 71st Canadian Geotechnical Conference and the 13th Joint CGS/IAH-CNC Groundwater Conference*, Edmonton, AB, Canada.

Fadeev, A. V. (2013). Solution of a problem of r-linear conjugation for confocal elliptical annulus in the class of piecewise meromorphic functions. *Russian Mathematics*, 57(6):39–52.

Fang, Y., Chen, X., Velez, J. G., Zhang, X., Duan, Z., Hammond, G. E., Goldman, A. E., Garayburu-Caruso, V. A. et Graham, E. B. (2020). A multirate mass transfer model to represent the interaction of multicomponent biogeochemical processes between surface water and hyporheic zones (swat-mrmt-r 1.0). *GEOSCIENTIFIC MODEL DEVELOPMENT*, 13(8):3553–3569.

Ferdosi, B., James, M. et Aubertin, M. (2015). Effect of waste rock inclusions on the seismic stability of an upstream raised tailings impoundment : a numerical investigation. *Canadian Geotechnical Journal*, 52(12):1930–1944.

Fernandes, P., Guedes, J. M. et Rodrigues, H. (1999). Topology optimization of three-dimensional linear elastic structures with a constraint on "perimeter". *Computers & Structures*, 73(6):583–594.

Ferrari, F. et Sigmund, O. (2020). A new generation 99 line Matlab code for compliance topology optimization and its extension to 3D. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 62(4):2211–2228.

Fleury, R., Monticone, F. et Alù, A. (2015). Invisibility and Cloaking : Origins, Present, and Future Perspectives. *Physical Review Applied*, 4(3):037001. Publisher : American Physical Society.

Foster, S., West, L., Bottrell, S. et Hildyard, M. W. (2018). A DFN Approach to Evaluating the Hydrogeological Significance of Lithostatic Unloading in Fractured Strata Around Open-Pit Workings. *In 2nd International Discrete Fracture Network Engineering Conference*, Seattle, WA, USA. American Rock Mechanics Association.

Freeze, A. R. et Cherry, J. A. (1979). *Groundwater*. Pearson, Englewood Cliffs, N.J, $ {nombre}er édition édition.

Furuta, K., Izui, K., Yaji, K., Yamada, T. et Nishiwaki, S. (2017). Level set-based topology optimization for the design of a peltier effect thermoelectric actuator. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 55(5):1671–1683.

Gammons, C. H., Harris, L. N., Castro, J. M., Cott, P. A. et Hanna, B. W. (2009). Creating lakes from open pit mines : Processes and considerations, emphasis on northern environments. Rapport technique, Canadian Technical Report of Fisheries and Aquatic Sciences.

Garzonio, C. A., Piccinini, L. et Gargini, A. (2014). Groundwater Modeling of Fractured Aquifers in Mines : The Case Study of Gavorrano (Tuscany, Italy). *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 47(3):905–921.

Gelhar, L. W. (1997). Perspectives on field-scale application of stochastic subsurface hydrology. *In* Dagan, G. et Neuman, S. P., éditeurs : *Subsurface Flow and Transport : A Stochastic Approach*, International Hydrology Series, pages 157–176. Cambridge University Press, Cambridge.

Gentier, S., Lamontagne, E., Archambault, G. et Riss, J. (1997). Anisotropy of flow in a fracture undergoing shear and its relationship to the direction of shearing and injection pressure. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 34(3):94.e1–94.e12.

Gerke, H. H. (2007). Preferential flow descriptions for structured soils. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science*, 169(3):382–400.

Gerke, H. H. et Genuchten, M. T. v. (1993a). A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media. *Water Resources Research*, 29(2):305–319.

Gerke, H. H. et Genuchten, M. T. v. (1993b). Evaluation of a first-order water transfer term for variably saturated dual-porosity flow models. *Water Resources Research*, 29(4): 1225–1238.

Gersborg-Hansen, A., Bendsøe, M. P. et Sigmund, O. (2006). Topology optimization of heat conduction problems using the finite volume method. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 31(4):251–259.

Gertsch, L.-S. (1995). Three-dimensional fracture network models from laboratory-scale rock samples. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts*, 32(1):85–91.

Geuzaine, C. et Remacle, J.-F. (2009). Gmsh : A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79(11):1309–1331. _eprint : https ://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/nme.2579.

Ghasemizadeh, R., Yu, X., Butscher, C., Hellweger, F., Padilla, I. et Alshawabkeh, A. (2015). Equivalent Porous Media (EPM) Simulation of Groundwater Hydraulics and Contaminant Transport in Karst Aquifers. *PLOS ONE*, 10(9):e0138954.

Gheorghiu, F., Smerekanicz, J. R. et Pedersen, M. C. (2001). Conceptual model discretization, numerical model calibration and field verification for groundwater control using an enhanced bedrock permeability zone. *In 31st International Association of Hydrogeologists Congress*, page 6, Munich, Germany.

Giertzuch, P.-L., Doetsch, J., Jalali, M., Shakas, A., Schmelzbach, C. et Maurer, H. (2020). Time-lapse ground penetrating radar difference reflection imaging of saline tracer flow in fractured rock. *GEOPHYSICS*, 85(3):H25–H37. Publisher : Society of Exploration Geophysicists.

Gorakhki, M. H., Bareither, C. A., Scalia, J. et Jacobs, M. (2019). Hydraulic Conductivity and Soil Water Retention of Waste Rock and Tailings Mixtures. *In GeoCongress 2019*, pages 41–50, Philadelphia, Pennsylvania. Publisher : American Society of Civil Engineers.

Gouvernement du Québec (2020). *Les minéraux critiques et stratégiques : plan québécois pour la valorisation des minéraux critiques et stratégiques 2020-2025*. Bibliothèque et Archives nationales du Québec, Montréal. OCLC : 1256041288.

Gowan, M., Lee, M. et Williams, D. J. (2010). Co-disposal techniques that may mitigate risks associated with storage and management of potentially acid generating wastes. *In First International Seminar on the Reduction of Risk in the Management of Tailings and Mine Waste*, pages 389–404, Perth, Australia. R Jewell & AB Fourie, Australian Centre for Geomechanics.

Grajales-Mesa, S. J., Malina, G., AGH University of Science and Technology, Krakow, Poland, Kret, E., AGH University of Science and Technology, Krakow, Poland, Szklarczyk, T. et AGH University of Science and Technology, Krakow, Poland (2020). Designing a permeable reactive barrier to treat TCE contaminated groundwater : Numerical modelling. *Tecnología y ciencias del agua*, 11(3):78–106.

Grathwohl, P. (1998). *Diffusion in Natural Porous Media : Contaminant Transport, Sorption/Desorption and Dissolution Kinetics*. Topics in Environmental Fluid Mechanics 1. Springer US, 1 édition.

Guest, J. K., Prévost, J. H. et Belytschko, T. (2004). Achieving minimum length scale in topology optimization using nodal design variables and projection functions. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 61(2):238–254.

Guinard, K., Mailhot, A. et Caya, D. (2015). Projected changes in characteristics of precipitation spatial structures over north america. *International Journal of Climatology*, 35(4):596–612.

Gunasekera, D., Cox, J. et Lindsey, P. (1997). The Generation and Application of K-Orthogonal Grid Systems. *In SPE Reservoir Simulation Symposium*, Dallas, TX, United State. Society of Petroleum Engineers.

Gutierrez, J. C., Ochoa, G. V. et Forero, J. D. (2020). Parametric Analysis CFD of the Hydraulic Performance of a Centrifugal Pump with Applications to the Dredging Industry. *Journal of Engineering Science and Technology Review*, 13(3):8–14.

Gärtner, K. et Kamenski, L. (2019). Why Do We Need Voronoi Cells and Delaunay Meshes ? *In* Garanzha, V. A., Kamenski, L. et Si, H., éditeurs : *Numerical Geometry, Grid Generation and Scientific Computing*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, pages 45–60, Cham. Springer International Publishing.

Hadgu, T., Karra, S., Kalinina, E., Makedonska, N., Hyman, J. D., Klise, K., Viswanathan, H. S. et Wang, Y. (2017). A comparative study of discrete fracture network and equivalent continuum models for simulating flow and transport in the far field of a hypothetical nuclear waste repository in crystalline host rock. *Journal of Hydrology*, 553:59–70.

Haertel, J. H. K., Engelbrecht, K., Lazarov, B. S. et Sigmund, O. (2018). Topology optimization of a pseudo 3D thermofluid heat sink model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 121:1073–1088.

Hammond, G. E., Lichtner, P. C., Lu, C. et Mills, R. T. (2012). PFLOTRAN : Reactive Flow & Transport Code for Use on Laptops to Leadership-Class Supercomputers. *In* Zhang, F., Yeh, G.-T. G. et C. Parker, J., éditeurs : *Groundwater Reactive Transport Models*, pages 141–159. Bentham Science Publishers, Sharjah, UAE.

Harris, C. R., Millman, K. J., van der Walt, S. J., Gommers, R., Virtanen, P., Cournapeau, D., Wieser, E., Taylor, J., Berg, S., Smith, N. J., Kern, R., Picus, M., Hoyer, S., van Kerkwijk, M. H., Brett, M., Haldane, A., Del Río, J. F., Wiebe, M., Peterson, P., Gérard-Marchant, P., Sheppard, K., Reddy, T., Weckesser, W., Abbasi, H., Gohlke, C. et Oliphant, T. E. (2020). Array programming with NumPy. *Nature*, 585(7825):357–362.

Harzheim, L. et Graf, G. (2005). A review of optimization of cast parts using topology optimization : (I) Topology optimization without manufacturing constraints. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 30(6):491–497.

Harzheim, L. et Graf, G. (2006). A review of optimization of cast parts using topology optimization : (II) Topology optimization with manufacturing constraints. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 31(5):388–399.

Haverkamp, B., Biurrun, E. et Kucerka, M. (2005). Update of the safety assessment of the Underground Richard Repository, Litomerice, Czech Republic. *In Waste Management 2005 Conference*, Tucson, AZ, USA.

Heinemann, Z. E., Brand, C. W., Munka, M. et Chen, Y. M. (1991). Modeling Reservoir Geometry With Irregular Grids. *SPE Reservoir Engineering*, 6(02):225–232. Publisher : Society of Petroleum Engineers.

Hoek, E. (2012). Blast damage factor D. Technical note for Rocscience, Rocscience.

Hoek, E. et Karzulovic, A. (2000). Rock-Mass Properties for Surface Mines. *In Slope stability in surface mining*. Society for Mining, Metallurgy, and Exploration, Littleton, Colorado.

Hokr, M., Shao, H., Gardner, W. P., Balvín, A., Kunz, H., Wang, Y. et Vencl, M. (2016). Real-case benchmark for flow and tracer transport in the fractured rock. *Environmental Earth Sciences*, 75(18):1273.

Hore, C. et Luppnow, D. (2015). In-pit Tailings Disposal at Langer Heinrich – Tailings Storage Facilities in a Unique Hydrogeological Setting. *In Tailings and Mine Waste Management 2015*, Sydney, Australia.

Hotton, G., Bussière, B., Pabst, T., Bresson, E. et Roy, P. (2020). Influence of climate change on the ability of a cover with capillary barrier effects to control acid generation. *Hydrogeology Journal*, 28(2):763–779.

Hu, L., Wu, H., Zhang, L., Zhang, P. et Wen, Q. (2017). Geotechnical Properties of Mine Tailings. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 29(2):04016220.

Hughes, J. D., Langevin, C. D. et Banta, E. R. (2017). Documentation for the MODFLOW 6 framework. USGS Numbered Series 6-A57, U.S. Geological Survey, Reston, VA.

Hunt, A., Ewing, R. et Ghanbarian, B. (2014). *Percolation Theory for Flow in Porous Media*. Lecture Notes in Physics. Springer International Publishing, 3 édition.

Hunter, J. D. (2007). Matplotlib : A 2D Graphics Environment. *Computing in Science Engineering*, 9(3):90–95.

Ibarra-Gutiérrez, S., Bouchard, J., Laflamme, M. et Fytas, K. (2021). The potential of lithium in Quebec for the electric vehicle market : state of the art, opportunities and challenges. *International Journal of Mining, Reclamation and Environment*, 0(0):1–13.

Ishibashi, T., Watanabe, N., Hirano, N., Okamoto, A. et Tsuchiya, N. (2012). GeoFlow : A novel model simulator for prediction of the 3-D channeling flow in a rock fracture network. *Water Resources Research*, 48(7).

Ishibashi, T., Watanabe, N., Hirano, N., Okamoto, A. et Tsuchiya, N. (2015). Beyond-laboratory-scale prediction for channeling flows through subsurface rock fractures with heterogeneous aperture distributions revealed by laboratory evaluation. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 120(1):2014JB011555.

Jaeger, J. C., Cook, N. G. W. et Zimmerman, R. W. (2007). *Fundamentals of rock mechanics*. Blackwell Pub., Malden, MA. OCLC : 430954955.

Jahanbakhshzadeh, A. et Aubertin, M. (2020). The effect of waste rock inclusions on the slope stability of tailings dikes. *In GeoVirtual, 73rd Canadian Geotechnical Conference*, page 7, Online conference.

James, M., Aubertin, M. et Bussiere, B. (2013). On the use of waste rock inclusions to improve the performance of tailings impoundments. *In 18th International Conference on Soil Mechanics and Geotechnical Engineering*, pages 735–738, Paris, France.

Jang, E., Boog, J., He, W. et Kalbacher, T. (2018). *OpenGeoSys Tutorial*. SpringerBriefs in Earth System Sciences. Springer International Publishing, Cham.

Janković, I. et Barnes, R. (1999). Three-dimensional flow through large numbers of spheroidal inhomogeneities. *Journal of Hydrology*, 226(3):224–233.

Jasak, H. (1996). *Error Analysis and Estimation for Finite Volume Method with Applications to Fluid Flow*. Thèse de doctorat, Imperial College, London.

Jehring, M. M. et Bareither, C. A. (2016). Tailings composition effects on shear strength behavior of co-mixed mine waste rock and tailings. *Acta Geotechnica*, 11(5):1147–1166.

Jiang, J. et Younis, R. M. (2017). An improved projection-based embedded discrete fracture model (pEDFM) for multiphase flow in fractured reservoirs. *Advances in Water Resources*, 109:267–289.

Johnson, S. G. (2020). The NLopt nonlinear-optimization package, version 2.7.0.

Jones, E., Oliphant, E. et Peterson, P. (2001). SciPy : Open Source Scientific Tools for Python.

Jung, M., Heo, N., Park, J. et Yoo, J. (2021). Multi-directional cloaking structure design using topology optimization. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 35(8):1008–1019. Publisher : Taylor and Francis Ltd.

Jung, Y., Pau, G. S. H., Finsterle, S. et Pollyea, R. M. (2017). TOUGH3 : A new efficient version of the TOUGH suite of multiphase flow and transport simulators. *Computers & Geosciences*, 108:2–7.

Jørgensen, P. R., Helstrup, T., Urup, J. et Seifert, D. (2004). Modeling of nonreactive solute transport in fractured clayey till during variable flow rate and time. *Journal of Contaminant Hydrology*, 68(3):193–216.

Jørgensen, P. R., McKay, L. D. et Spliid, N. H. (1998). Evaluation of chloride and pesticide transport in a fractured clayey till using large undisturbed columns and numerical modeling. *Water Resources Research*, 34(4):539–553.

Kambampati, S. et Kim, H. A. (2020). Level set topology optimization of cooling channels using the Darcy flow model. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 61(4):1345–1361.

Kammoun, Z., Fourati, M. et Smaoui, H. (2019). Direct limit analysis based topology optimization of foundations. *Soils and Foundations*, 59(4):1063–1072.

Karra, S., Makedonska, N., Viswanathan, H. S., Painter, S. L. et Hyman, J. D. (2015). Effect of advective flow in fractures and matrix diffusion on natural gas production. *Water Resources Research*, 51(10):8646–8657. _eprint : https ://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/2014WR016829.

Kassimov, A. et Obnosov, Y. (2018). Hydraulically optimal porous liner around a porous lens : Strack's problem revisited. *ISH Journal of Hydraulic Engineering*. Publisher : Taylor and Francis Ltd.

Kaveh, A. et Talatahari, S. (2009). Size optimization of space trusses using Big Bang–Big Crunch algorithm. *Computers & Structures*, 87(17):1129–1140.

Kazarin, A. et Obnosov, Y. (2016). An exact analytical solution of an r-linear conjugation problem for a n-phased concentric circular heterogeneous structure. *Applied Mathematical Modelling*, 40(9):5292–5300.

Keilegavlen, E., Berge, R., Fumagalli, A., Starnoni, M., Stefansson, I., Varela, J. et Berre, I. (2021). PorePy : an open-source software for simulation of multiphysics processes in fractured porous media. *Computational Geosciences*, 25(1):243–265.

Kettunen, H., Wallén, H. et Sihvola, A. (2013). Cloaking and magnifying using radial anisotropy. *Journal of Applied Physics*, 114(4):044110.

Kiecak, A., Malina, G., Kret, E. et Szklarczyk, T. (2017). Applying numerical modeling for designing strategies of effective groundwater remediation. *Environmental Earth Sciences*, 76(6):248.

Kim, K. B. et Han, D. (2017). Exploration of sub-annual calibration schemes of hydrological models. *Hydrology Research*, 48(4):1014–1031.

Kimmel, M., Piel, B., Baroudi, H., Esnault-Filet, A., Laloum, X. et Mazzieri, D. (2003). Hydrogeologic modelling for permeable reactive barriers design. *In International FZK/TNO Conference on Contaminated Soil*, pages 2715–2723, Gand, Belgium.

Klint, K. E. S., Gravesen, P., Rosenbom, A., Laroche, C., Trenty, L., Lethiez, P., Sanchez, F., Molinelli, L. et Tsakiroglou, C. D. (2004). Multi-Scale Characterization of Fractured Rocks Used as a Means for the Realistic Simulation of Pollutant Migration Pathways in Contaminated Sites : A Case Study. *Water, Air and Soil Pollution : Focus*, 4(4):201–214.

Koch, T., Gläser, D., Weishaupt, K., Ackermann, S., Beck, M., Becker, B., Burbulla, S., Class, H., Coltman, E., Emmert, S., Fetzer, T., Grüninger, C., Heck, K., Hommel, J., Kurz, T., Lipp, M., Mohammadi, F., Scherrer, S., Schneider, M., Seitz, G., Stadler, L., Utz, M., Weinhardt, F. et Flemisch, B. (2021). DuMux 3 – an open-source simulator for solving flow and transport problems in porous media with a focus on model coupling. *Computers & Mathematics with Applications*, 81:423–443.

Kollet, S., Sulis, M., Maxwell, R. M., Paniconi, C., Putti, M., Bertoldi, G., Coon, E. T., Cordano, E., Endrizzi, S., Kikinzon, E., Mouche, E., Mügler, C., Park, Y.-J., Refsgaard, J. C., Stisen, S. et Sudicky, E. (2017). The integrated hydrologic model intercomparison project, IH-MIP2 : A second set of benchmark results to diagnose integrated hydrology and feedbacks : INTEGRATED HYDROLOGIC MODEL INTERCOMPARISON, IH-MIP2. *Water Resources Research*, 53(1):867–890.

Kollet, S. J. et Maxwell, R. M. (2006). Integrated surface–groundwater flow modeling : A free-surface overland flow boundary condition in a parallel groundwater flow model. *Advances in Water Resources*, 29(7):945–958.

Kollet, S. J., Maxwell, R. M., Woodward, C. S., Smith, S., Vanderborght, J., Vereecken, H. et Simmer, C. (2010). Proof of concept of regional scale hydrologic simulations at hydrologic resolution utilizing massively parallel computer resources. *Water Resources Research*, 46(4). _eprint : https ://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1029/2009WR008730.

Konikow, L. F. et Bredehoeft, J. D. (1992). Ground-water models cannot be validated. *Advances in Water Resources*, 15(1):75–83.

Krumbein, W. C. et Graybill, F. A. (1965). *An Introduction to Statistical Models in Geology*. McGraw Hill Book Company, first edition édition.

Labonté-Raymond, P.-L., Pabst, T., Bussière, B. et Bresson, E. (2020). Impact of climate change on extreme rainfall events and surface water management at mine waste storage facilities. *Journal of Hydrology*, 590:125383.

Lange, K. (2003). *Physical and numerical modelling of a dual porosity fractured rock surrounding an In-Pit Uranium Tailings Management Facility*. Thèse de doctorat, Carleton University.

Lange, K. et Van Geel, P. J. (2011). Physical and numerical modelling of a dual-porosity fractured rock surrounding an in-pit uranium tailings management facility. *Canadian Geotechnical Journal*, 48(3):365–374.

Lee, S. H., Lee, K.-K. et Yeo, I. W. (2014). Assessment of the validity of Stokes and Reynolds equations for fluid flow through a rough-walled fracture with flow imaging. *Geophysical Research Letters*, 41(13):2014GL060481.

Lee, S. H., Lough, M. F. et Jensen, C. L. (2001). Hierarchical modeling of flow in naturally fractured formations with multiple length scales. *Water Resources Research*, 37(3):443–455. _eprint : https ://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1029/2000WR900340.

Lei, G., Dong, P. C., Mo, S. Y., Yang, S., Wu, Z. S. et Gai, S. H. (2015). Calculation of full permeability tensor for fractured anisotropic media. *Journal of Petroleum Exploration and Production Technology*, 5(2):167–176.

Lemieux, J.-M., Therrien, R. et Kirkwood, D. (2005). Small scale study of groundwater flow in a fractured carbonate-rock aquifer at the St-Eustache quarry, Québec, Canada. *Hydrogeology Journal*, 14(4):603.

Lepillier, B., Bruna, P.-O., Bruhn, D., Bastesen, E., Daniilidis, A., Garcia, O., Torabi, A. et Wheeler, W. (2020). From outcrop scanlines to discrete fracture networks, an integrative workflow. *Journal of Structural Geology*, 133:103992.

Li, N., Zhang, H. et Ouyang, H. (2009). Shape optimization of coronary artery stent based on a parametric model. *Finite Elements in Analysis and Design*, 45(6):468–475.

Li, Q., Chen, W., Liu, S. et Tong, L. (2016). Structural topology optimization considering connectivity constraint. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 54(4):971–984.

Li, W., Dong, Z. et Lei, G. (2017). Integrating Embedded Discrete Fracture and Dual-Porosity, Dual-Permeability Methods to Simulate Fluid Flow in Shale Oil Reservoirs. *Energies*, 10(10):1471. Number : 10 Publisher : Multidisciplinary Digital Publishing Institute.

Lichtner, P. C., Kelkar, S. et Robinson, B. (2002). New form of dispersion tensor for axisymmetric porous media with implementation in particle tracking. *Water Resources Research*, 38(8):21–1–21–16.

Liu, H., Tian, Y., Zong, H., Ma, Q., Wang, M. Y. et Zhang, L. (2019a). Fully parallel level set method for large-scale structural topology optimization. *Computers & Structures*, 221:13–27.

Liu, J. et Ma, Y. (2016). A survey of manufacturing oriented topology optimization methods. *Advances in Engineering Software*, 100:161–175.

Liu, K. et Tovar, A. (2014). An efficient 3D topology optimization code written in Matlab. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 50(6):1175–1196.

Liu, W.-S., Guo, M.-N., Liu, C., Yuan, M., Chen, X.-T., Huot, H., Zhao, C.-M., Tang, Y.-T., Morel, J. L. et Qiu, R.-L. (2019b). Water, sediment and agricultural soil contamination from an ion-adsorption rare earth mining area. *Chemosphere*, 216:75–83.

Lottermoser, B. (2010). *Mine Wastes : Characterization, Treatment and Environmental Impacts*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.

Lupogo, K., Tuckey, Z., Stead, D. et Elmo, D. (2014). Blast Damage in Rock Slopes : Potential Applications of Discrete Fracture Network Engineering. *In 1st International Conference on Discrete Fracture Network Engineering*, Vancouver, Canada.

L'Écuyer, M., Chapuis, R. P. et Aubertin, M. (1993). Field and laboratory investigations of hydraulic conductivity of acid producing mine tailings. *In Proceedings of ASCE-CSCE Conference on Environnemental Engineering*, volume 1, pages 213–220, Montréal, Québec, Canada.

Lévy, B. et Liu, Y. (2010). Lp Centroidal Voronoi Tessellation and its applications. *ACM Transactions on Graphics*, 29(4):119 :1–119 :11.

Maillot, J., Davy, P., Le Goc, R., Darcel, C. et de Dreuzy, J. (2016). Connectivity, permeability, and channeling in randomly distributed and kinematically defined discrete fracture network models. *Water Resources Research*, 52(11):8526–8545.

Makedonska, N., Hyman, J. D., Kwicklis, E. M. et Birdsell, K. (2018). Discrete Fracture Network Modeling and Simulation of Subsurface Transport for the Topopah Spring Aquifer at Pahute Mesa. *In 2nd International Discrete Fracture Network Engineering Conference*, Seattle, Washington, USA. American Rock Mechanics Association.

Maknoon, M. et Aubertin, M. (2021). On the Use of Bench Construction to Improve the Stability of Unsaturated Waste Rock Piles. *Geotechnical and Geological Engineering*, 39(2):1425–1449.

Maksimova, E. A., Cherednichenko, A. V. et Savelyeva, I. Y. (2021). Calculation of the problem of thermoplasticity on the example of a stationary power plant flange using free software Code Aster. *Journal of Physics : Conference Series*, 1902(1):012121. Publisher : IOP Publishing.

Maldaner, C. H., Munn, J. D., Coleman, T. I., Molson, J. W. et Parker, B. L. (2019). Groundwater Flow Quantification in Fractured Rock Boreholes Using Active Distributed Temperature Sensing Under Natural Gradient Conditions. *Water Resources Research*, 55(4): 3285–3306. _eprint : https ://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1029/2018WR024319.

Malinouskaya, I., Thovert, J.-F., Mourzenko, V. V., Adler, P. M., Shekhar, R., Agar, S., Rosero, E. et Tsenn, M. (2014). Fracture analysis in the Amellago outcrop and permeability predictions. *Petroleum Geoscience*, 20(1):93–107.

Manca, A. G. et Pappalardo, C. M. (2020). Topology Optimization Procedure of Aircraft Mechanical Components Based on Computer-Aided Design, Multibody Dynamics, and Finite Element Analysis. *In* Ivanov, V., Pavlenko, I., Liaposhchenko, O., Machado, J. et Edl, M., éditeurs : *Advances in Design, Simulation and Manufacturing III*, Lecture Notes in Mechanical Engineering, pages 159–168, Cham. Springer International Publishing.

Maqsoud, A., Bussière, B., Aubertin, M. et Mbonimpa, M. (2012). Predicting Hysteresis of the Water Retention Curve from Basic Properties of Granular Soils. *Geotechnical and Geological Engineering*, 30(5):1147–1159.

March, R., Doster, F. et Geiger, S. (2018). Assessment of CO2 Storage Potential in Naturally Fractured Reservoirs With Dual-Porosity Models. *Water Resources Research*, 54(3):1650–1668.

Martin, V. (2018). *Evolution of the Hydrogeotechnical Properties of Paste Tailings Deposited on the Surface*. phd, École Polytechnique de Montréal.

Matich, M. A. J. et Tao, W. F. (1986). Pervious surround method of waste disposal.

Maxwell, R. M., Putti, M., Meyerhoff, S., Delfs, J.-O., Ferguson, I. M., Ivanov, V., Kim, J., Kolditz, O., Kollet, S. J., Kumar, M., Lopez, S., Niu, J., Paniconi, C., Park, Y.-J., Phanikumar, M. S., Shen, C., Sudicky, E. A. et Sulis, M. (2014). Surface-subsurface model intercomparison : A first set of benchmark results to diagnose integrated hydrology and feedbacks. *Water Resources Research*, 50(2):1531–1549. _eprint : https ://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/2013WR013725.

Mbonimpa, M., Aubertin, M. et Bussière, B. (2006). Predicting the unsaturated hydraulic conductivity of granular soils from basic geotechnical properties using the modified Kovács (MK) model and statistical models. *Canadian Geotechnical Journal*, 43(8):773–787.

McCloskey, L. et Bless, D. (2005). Prevention of Acid Mine Drainage Generation from Open-pit Highwalls - Final Report Mine Waste Technology Program Activity III, Project 26. Rapport technique EPA/600/R-05/060, U.S. Environmental Protection Agency, Cincinnati (OH), United State.

McCullough, C. D., Marchand, G. et Unseld, J. (2013). Mine Closure of Pit Lakes as Terminal Sinks : Best Available Practice When Options are Limited ? *Mine Water and the Environment*, 32(4):302–313.

McCullough, C. D. et Schultze, M. (2018). Engineered river flow-through to improve mine pit lake and river values. *Science of The Total Environment*, 640-641:217–231.

McDonald, L. et Lane, J. C. (2010). Consolidation of in-pit tailings. Rapport technique, Australian Centre for Geomechanics. Conference Name : First International Seminar on the Reduction of Risk in the Management of Tailings and Mine Waste, 2010 29 September - 1 October, Perth.

Mekki, B. S., Langer, J. et Lynch, S. (2021). Genetic algorithm based topology optimization of heat exchanger fins used in aerospace applications. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 170:121002.

MEND (1995). Minewall 2.0 : Literature review and conceptual models. Rapport technique, MEND, Ottawa.

MEND (2015). In-pit disposal of reactive mine wastes : approaches, update and case study results. Rapport technique, Mine Environment Neutral Drainage, Ottawa.

Merland, R., Caumon, G., Lévy, B. et Collon-Drouaillet, P. (2014). Voronoi grids conforming to 3D structural features. *Computational Geosciences*, 18(3-4):373–383.

Miller, C. B., Parsons, M. B., Jamieson, H. E., Swindles, G. T., Nasser, N. A. et Galloway, J. M. (2019). Lake-specific controls on the long-term stability of mining-related,

legacy arsenic contamination and geochemical baselines in a changing northern environment, Tundra Mine, Northwest Territories, Canada. *Applied Geochemistry*, 109:104403.

Milne Thomson, L.-N. (1962). *Theoretical Hydrodynamics Fourth Edition*. The Macmillan And Company.

Min, K.-B., Jing, L. et Stephansson, O. (2004). Determining the equivalent permeability tensor for fractured rock masses using a stochastic REV approach : Method and application to the field data from Sellafield, UK. *Hydrogeology Journal*, 12(5):497–510.

Misfeldt, G., Loi, J., Herasymuik, G. et Clifton, A. (1999). Comparison of tailings containment strategies for in-pit and above-ground tailings management facilities. *In Proceedings of the 54th Conference of Canadian Geotechnical Society, GeoRegina*, pages 279–286, Regina, Canada.

Moldovan, B. J., Jim Hendry, M. et Harrington, G. A. (2008). The arsenic source term for an in-pit uranium mine tailings facility and its long-term impact on the regional groundwater. *Applied Geochemistry*, 23(6):1437–1450.

Morin, K. A. et Hutt, N. M. (2001). Environmental geochemistry of minesite drainage practical theory and case studies. OCLC : 928795098.

Morth, A. H., Smith, E. E., Shumate, K. S., United States, Environmental Protection Agency et Office of Research and Monitoring (1972). *Pyritic systems : a mathematical model.* Office of Research and Monitoring, U.S. Environmental Protection Agency] for sale by the Supt. of Docs., U.S. Govt. Print. Off., Washington. OCLC : 1012737.

Moukalled, F., Mangani, L. et Darwish, M. (2016). The Discretization Process. *In* Moukalled, F., Mangani, L. et Darwish, M., éditeurs : *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics : An Advanced Introduction with OpenFOAM® and Matlab*, Fluid Mechanics and Its Applications, pages 85–101. Springer International Publishing, Cham, Suisse.

Mourzenko, V. V., Thovert, J.-F. et Adler, P. M. (2005). Percolation and permeability of three dimensional fracture networks with a power law size distribution. *Fractals in Engineering*, pages 81–95. Publisher : Springer, London.

Mourzenko, V. V., Thovert, J.-F. et Adler, P. M. (2011a). Permeability of isotropic and anisotropic fracture networks, from the percolation threshold to very large densities. *Physical Review E*, 84(3):036307.

Mourzenko, V. V., Thovert, J.-F. et Adler, P. M. (2011b). Trace analysis for fracture networks with anisotropic orientations and heterogeneous distributions. *Physical Review E*, 83(3):031104.

Mourzenko, V. V., Thovert, J.-F. et Adler, P. M. (2012). Percolation and permeability of fracture networks in excavated damaged zones. *Physical Review E*, 86(2):026312.

Mualem, Y. (1976). *A Catalogue of the Hydraulic Properties of Unsaturated Soils*. Technion Israel Institute of Technology, Technion Research & Development Foundation, Jerusalem, Israel.

Mukesh, R., Lingadurai, K. et Selvakumar, U. (2012). Application of Nontraditional Optimization Techniques for Airfoil Shape Optimization. *Modelling and Simulation in Engineering*, 2012:e636135. Publisher : Hindawi.

Multiphysics, C. (1998). Introduction to comsol multiphysics®. *COMSOL Multiphysics, Burlington, MA, accessed Feb*, 9:2018.

Mykhaskiv, O., Banović, M., Auriemma, S., Mohanamuraly, P., Walther, A., Legrand, H. et Müller, J.-D. (2018). NURBS-based and parametric-based shape optimization with differentiated CAD kernel. *Computer-Aided Design and Applications*, 15(6):916–926.

Méheust, Y. et Schmittbuhl, J. (2000). Flow enhancement of a rough fracture. *Geophysical Research Letters*, 27(18):2989–2992.

Méheust, Y. et Schmittbuhl, J. (2001). Geometrical heterogeneities and permeability anisotropy of rough fractures. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 106(B2):2089–2102.

Nachshon, U., Weisbrod, N., I., M. et Ganot, Y. (2011). The importance of advective fluxes to gas transport across the earth-atmosphere interface : The role of thermal convection. *In* Carayannis, E., éditeur : *Planet Earth 2011 - Global Warming Challenges and Opportunities for Policy and Practice*. InTech.

Nagare, R. M., Park, Y., Butterfield, T., Belenky, C. et Scyrup, S. (2019). Analytical and Numerical Modeling of Solute Intrusion, Recovery, and Rebound in Fractured Bedrock. *Groundwater*.

Nemec, M. et Aftosmis, M. (2005). Adjoint Algorithm for CAD-Based Shape Optimization Using a Cartesian Method. *In 17th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, Toronto, Ontario, Canada. American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Neuner, M., Smith, L., Blowes, D. W., Sego, D. C., Smith, L. J. D., Fretz, N. et Gupton, M. (2013). The diavik waste rock project : Water flow through mine waste rock in a permafrost terrain. *Applied Geochemistry*, 36:222–233.

Newman, C. P., Poulson, S. R. et McCrea, K. W. (2020). Contaminant generation and transport from mine pit lake to perennial stream system : Multidisciplinary investigations at the Big Ledge Mine, Nevada, USA. *Geochemistry*, 80(4, Supplement):125552.

Nilsson, B., Højberg, A. L., Refsgaard, J. C. et Troldborg, L. (2007). Uncertainty in geological and hydrogeological data. *Hydrology and Earth System Sciences*, 11(5):1551–1561. Publisher : Copernicus GmbH.

Nordstrom, D. K. (2011). Mine waters : Acidic to circmneutral. *Elements*, 7(6):393–398.

Nordstrom, D. K. (2015). Baseline and premining geochemical characterization of mined sites. *Applied Geochemistry*, 57:17–34.

Nordstrom, D. K. et Southam, G. (1997). Geomicrobiology of sulfide mineral oxidation. *Reviews in Mineralogy*, 35:10.

Normani, S. D. et Sykes, J. F. (2018). Embedding Discrete, Irregular Fracture Zone Networks in Three-Dimensional Groundwater Flow Models. *In 2nd International Discrete Fracture Network Engineering Conference*, Seattle, Washington, USA.

Nádudvari, A., Kozielska, B., Abramowicz, A., Fabiańska, M., Ciesielczuk, J., Cabała, J. et Krzykawski, T. (2021). Heavy metal- and organic-matter pollution due to self-heating coal-waste dumps in the Upper Silesian Coal Basin (Poland). *Journal of Hazardous Materials*, 412:125244.

Oda, M. (1985). Permeability tensor for discontinuous rock masses. *Géotechnique*, 35(4): 483–495.

Odling, N. E., Gillespie, P., Bourgine, B., Castaing, C., Chiles, J. P., Christensen, N. P., Fillion, E., Genter, A., Olsen, C., Thrane, L., Trice, R., Aarseth, E., Walsh, J. J. et Watterson, J. (1999). Variations in fracture system geometry and their implications for fluid flow in fractures hydrocarbon reservoirs. *Petroleum Geoscience*, 5(4):373–384.

Ogata, A. et Banks, R. B. (1961). A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. *Professional Paper*. Number : 411-A.

Osher, S. et Sethian, J. A. (1988). Fronts propagating with curvature-dependent speed : Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1):12–49.

Othmani, M. A., Souissi, F., Benzaazoua, M., Bouzahzah, H., Bussiere, B. et Mansouri, A. (2013). The geochemical behaviour of mine tailings from the touiref pb–zn district in tunisia in weathering cells leaching tests. *Mine Water and the Environment*, 32(1):28–41.

Palagi, C. et Aziz, K. (1994). Use of Voronoi Grid in Reservoir Simulation. *SPE Advanced Technology Series*, 2(02):69–77.

Pang, T. Y. et Fard, M. (2020). Reverse Engineering and Topology Optimization for Weight-Reduction of a Bell-Crank. *Applied Sciences*, 10(23):8568. Number : 23 Publisher : Multidisciplinary Digital Publishing Institute.

Parhizkar, M., Therrien, R., Molson, J. W. H., Lemieux, J. M., Fortier, R., Talbot Poulin, M. C., Therrien, P. et Ouellet, M. (2016). Application of a 3D Model to Assess the Thermo-Hydrological Effects of Climate Warming in a Discontinuous Permafrost Zone, Umiujaq, Northern Quebec, Canada. *AGU Fall Meeting Abstracts*, 43.

Pearce, T. D., Ford, J. D., Prno, J., Duerden, F., Pittman, J., Beaumier, M., Berrang-Ford, L. et Smit, B. (2011). Climate change and mining in Canada. *Mitigation and Adaptation Strategies for Global Change*, 16(3):347–368.

Peregoedova, A. (2012). Étude expérimentale des propriétés hydrogéologiques des roches stériles à une échelle intermédiaire de laboratoire. Mémoire de D.E.A., École Polytechnique de Montréal.

Peri, D., Rossetti, M. et Campana, E. F. (2001). Design Optimization of Ship Hulls via CFD Techniques. *Journal of Ship Research*, 45(02):140–149.

Permann, C. J., Gaston, D. R., Andrš, D., Carlsen, R. W., Kong, F., Lindsay, A. D., Miller, J. M., Peterson, J. W., Slaughter, A. E., Stogner, R. H. et Martineau, R. C. (2020). MOOSE : Enabling massively parallel multiphysics simulation. *SoftwareX*, 11:100430.

Plante, B. (2010). *Évaluation des principaux facteurs d'influence sur la prédiction du drainage neutre contaminé*. phd, Université du Québec à en Abitibi-Témiscamingue, Rouyn-Noranda, Québec, Canada.

Plante, B., Benzaazoua, M., Bussière, B., Pepin, G. et Laflamme, D. (2008). Geochemical Behaviour of Nickel Contained in Tio Mine Waste Rocks. *In International Mine Water Association Conference*, pages 317–320, Karlovy Vary, Czech Republic.

Poonoosamy, J., Wanner, C., Alt Epping, P., Águila, J. F., Samper, J., Montenegro, L., Xie, M., Su, D., Mayer, K. U., Mäder, U., Van Loon, L. R. et Kosakowski, G. (2018). Benchmarking of reactive transport codes for 2D simulations with mineral dissolution–precipitation reactions and feedback on transport parameters. *Computational Geosciences*.

Poulsen, B. A., Adhikary, D. P. et Balusu, R. (2017). Assessment of Slope Stability for Deep Pits in Sedimentary Strata. *Geotechnical and Geological Engineering*, 35(2):631–643.

Pruess, K. (2004). The TOUGH Codes–A Family of Simulation Tools for Multiphase Flow and Transport Processes in Permeable Media. *Vadose Zone Journal*, 3(3):738–746.

Pruess, K. et Tsang, Y. W. (1990). On two-phase relative permeability and capillary pressure of rough-walled rock fractures. *Water Resources Research*, 26(9):1915–1926.

Pucker, T. et Grabe, J. (2011). Structural optimization in geotechnical engineering : basics and application. *Acta Geotechnica*, 6(1):41–49.

Puhalovich, A. A. et Coghill, M. (2011). Management of mine wastes using pit void backfilling methods – current issues and approaches. *In* McCullough, C., éditeur : *Mine Pit Lakes : Closure and Management*, page 13. Australian Centre for Geomechanics, Perth, Australia.

Querin, O., Steven, G. et Xie, Y. (1998). Evolutionary structural optimisation (ESO) using a bidirectional algorithm. *Engineering Computations*, 15(8):1031–1048. Publisher : MCB UP Ltd.

Radian (1997). Predicted water quality in the Betze-Screamer pit lake. Rapport technique, Barrick Goldstrike Mines, Elko (NV), United State.

Radzilani, M. (2015). Slope monitoring solution for open pit mines. *EE Publishers*.

Ranjram, M., Gleeson, T. et Luijendijk, E. (2015). Is the permeability of crystalline rock in the shallow crust related to depth, lithology or tectonic setting ? *Geofluids*, 15(1-2):106–119. Publisher : John Wiley & Sons, Ltd.

Rasmuson, A. et Neretnieks, I. (1986). Radionuclide Transport in Fast Channels in Crystalline Rock. *Water Resources Research*, 22(8):1247–1256.

Reiche, T., Noseck, U. et Schäfer, T. (2016). Migration of Contaminants in Fractured-Porous Media in the Presence of Colloids : Effects of Kinetic Interactions. *Transport in Porous Media*, 111(1):143–170.

Ribes, A. et Caremoli, C. (2007). Salome platform component model for numerical simulation. *In 31st Annual International Computer Software and Applications Conference (COMPSAC 2007)*, volume 2, pages 553–564.

Richards, L. A. (1931). Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, 1(5):318–333.

Rico, M., Benito, G., Salgueiro, A. R., Díez-Herrero, A. et Pereira, H. G. (2008). Reported tailings dam failures. a review of the european incidents in the worldwide context. *Journal of Hazardous Materials*, 152(2):846–852.

Rimélé, M., Dimitrakopoulos, R. et Gamache, M. (2018). A stochastic optimization method with in-pit waste and tailings disposal for open pit life-of-mine production planning. *Resources Policy*, 57:112–121.

Roche, C., Thygesen, K. et Baker, E. (2017). Mine Tailings Storage : Safety Is No Accident. Rapport technique, UN Environment, GRID-Arendal.

Romano, V., Bigi, S., Carnevale, F., Hyman, J. D., Karra, S., Valocchi, A. J., Tartarello, M. C. et Battaglia, M. (2020). Hydraulic characterization of a fault zone from fracture distribution. *JOURNAL OF STRUCTURAL GEOLOGY*, 135.

Rotter, B. E., Barry, D. A., Gerhard, J. I. et Small, J. S. (2011). Modeling the effectiveness of U(VI) biomineralization in dual-porosity porous media. *Journal of Hydrology*, 402(1):14–24.

Rousseau, M. et Pabst, T. (2018). 3D numerical assessment of the permeable envelope concept for in-pit disposal of reactive mine wastes. *In GeoEdmonton : 71st Canadian Geotechnical Conference and the 13th Joint CGS/IAH-CNC Groundwater Conference*, Edmonton, AB, Canada.

Rousseau, M. et Pabst, T. (2020). Blast damaged zone influence on water and solute exchange between backfilled open-pit and the environment. *In GeoVirtual, 73rd Canadian Geotechnical Conference*, Online conference.

Rousseau, M. et Pabst, T. (2021a). Analytical solution and numerical simulation of steady flow around a circular heterogeneity with anisotropic and concentrically varying permeability. *Water Resources Research*.

Rousseau, M. et Pabst, T. (2021b). Blast damage zone influence on groundwater fluxes through backfilled open-pits. *Canadian Geotechnical Journal*.

Saad, A., Khan, S. A. et Mahmood, A. (2018). A multi-objective evolutionary artificial bee colony algorithm for optimizing network topology design. *Swarm and Evolutionary Computation*, 38:187–201.

Salama, A., Van Geel, P. J. et Nguyen, T. S. (2003). Potential violation of the REV when modeling the pervious surround concept for the in-pit disposal of Uranium mine tailings in fractured rock systems. *In 56th Canadian Geotechnical and 4rd Joint IAH-CNC and CGS Groundwater Specialty Conferences*, Winnipeg.

Salama, A., Van Geel, P. J., Nguyen, T. S., Ben Belfadhel, M. et Flavelle, P. (2002). Two-dimensional ground flow and solute transport in an in pit tailings management facility : a parametric study. *In 55th Canadian Geotechnical and 3 rd Joint IAH-CNC and CGS Groundwater Specialty Conferences*, pages 1373–1380, Niagara Falls, ON, Canada. D. Stolle, A.R. Piggott and J.J. Crowder.

Saleh Mbemba, F. (2016). *Évaluation du drainage, de la consolidation et de la dessication des résidus miniers fins en présence d'inclusions drainantes*. phd, École Polytechnique de Montréal.

Samardzioska, T. et Popov, V. (2005). Numerical comparison of the equivalent continuum, non-homogeneous and dual porosity models for flow and transport in fractured porous media. *Advances in Water Resources*, 28(3):235–255.

Sanford, W. E., Cook, P. G. et Dighton, J. C. (2002). Analysis of a Vertical Dipole Tracer Test in Highly Fractured Rock. *Groundwater*, 40(5):535–542. _eprint : https ://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/j.1745-6584.2002.tb02538.x.

Santofimia, E., López-Pamo, E. et Montero, E. (2013). Environmental management of Aznalcóllar mine and its influence in the hydrogeochemical of the pit lake. *Water environment research : a research publication of the Water Environment Federation*, 85(8):706.

Scanlon, B. R., Mace, R. E., Barrett, M. E. et Smith, B. (2003). Can we simulate regional groundwater flow in a karst system using equivalent porous media models ? Case study, Barton Springs Edwards aquifer, USA. *Journal of Hydrology*, 276(1):137–158.

Scholes, O. N., Clayton, S. A., Hoadley, A. F. A. et Tiu, C. (2007). Permeability anisotropy due to consolidation of compressible porous media. *Transport in Porous Media*, 68(3):365–387.

Schulze-Makuch, D. (2005). Longitudinal dispersivity data and implications for scaling behavior. *Ground Water*, 43(3):443–456.

Schöberl, J. (1997). NETGEN An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules. *Computing and Visualization in Science*, 1(1):41–52.

Seitz, K.-F. et Grabe, J. (2016). Three-dimensional topology optimization for geotechnical foundations in granular soil. *Computers and Geotechnics*, 80:41–48.

Shabayek, A., Aouada, D., Cherenkova, K. et Gusev, G. (2020). Towards Automatic CAD Modeling from 3D Scan Sketch based Representation :. *In Proceedings of the 15th International Joint Conference on Computer Vision, Imaging and Computer Graphics Theory and Applications*, pages 392–398, Valletta, Malta. SCITEPRESS - Science and Technology Publications.

Siamaki, A., Esmaieli, K. et Mohanty, B. (2018). Effects of Blast Induced Wave Propagation on the Degradation of Jointed Rock Masses. *In 2nd International Discrete Fracture Network Engineering Conference*, Seattle, WA, USA. American Rock Mechanics Association.

Sigmund, O. (2001). A 99 line topology optimization code written in Matlab. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 21(2):120–127.

Sigmund, O. (2011). On the usefulness of non-gradient approaches in topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 43(5):589–596.

Sigmund, O. et Maute, K. (2013). Topology optimization approaches : A comparative review. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 48(6):1031–1055.

Simard, M. (2018). L'industrie minière au Québec : situation, tendances et enjeux. *Études canadiennes / Canadian Studies. Revue interdisciplinaire des études canadiennes en France*, 85:193–217. Number : 85 Publisher : AFEC.

Singh, R., Chakma, S. et Birke, V. (2020). Numerical modelling and performance evaluation of multi-permeable reactive barrier system for aquifer remediation susceptible to chloride contamination. *Groundwater for Sustainable Development*, 10:100317.

Smerekanicz, J. (2004). Blast-Fractured Enhanced Permeability Remediation System at Modern Landfill, York, Pennsylvania : A Five-Year Update. *In U.S. EPA/National Ground Water Association Fractured Rock Conference*, Portland, Maine, US.

Smerekanicz, J. R., Gheorghiu, F., Enachescu, C. et Pedersen, M. C. (2001). Hydrogeologic testing in blast-shattered heterogeneous bedrock. *In 31st International Association of Hydrogeologists Congress*, page 6, Munich, Germany.

Snow, D. T. (1965). *A parallel plate model of fractured permeable media*. Thèse de doctorat, University Microfilms, Ann Arbor, Mich. OCLC : 217258244.

Snow, D. T. (1969). Anisotropie Permeability of Fractured Media. *Water Resources Research*, 5(6):1273–1289.

Sochi, T. (2010). Non-Newtonian flow in porous media. *Polymer*, 51(22):5007–5023.

Soderberg, R. L. et Busch, R. A. (1977). *Design guide for metal and nonmetal tailings disposal*. Washington.

Sokolowski, J. et Zochowski, A. (1999). On the Topological Derivative in Shape Optimization. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 37(4):1251–1272. Publisher : Society for Industrial and Applied Mathematics.

Sonter, L. J., Dade, M. C., Watson, J. E. M. et Valenta, R. K. (2020). Renewable energy production will exacerbate mining threats to biodiversity. *Nature Communications*, 11(1):4174.

Sosnowski, M., Krzywanski, J., Grabowska, K. et Gnatowska, R. (2018). Polyhedral meshing in numerical analysis of conjugate heat transfer. *EPJ Web of Conferences*, 180:02096. Publisher : EDP Sciences.

Soulaine, C. (2012). *Modélisation des écoulements dans les garnissages structurés : de l'échelle du pore à l'échelle de la colonne*. Thèse de doctorat, Toulouse, INPT.

Spiegel, M., Redel, T., Zhang, Y. J., Struffert, T., Hornegger, J., Grossman, R. G., Doerfler, A. et Karmonik, C. (2011). Tetrahedral vs. polyhedral mesh size evaluation on flow velocity and wall shear stress for cerebral hemodynamic simulation. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 14(1):9–22.

Stacey, T. R., Xianbin, Y., Armstrong, R. et Keyter, G. J. (2003). New slope stability considerations for deep open pit mines. *Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy*, 103(6):373–389.

Stauffer, D. et Aharony, A. (1992). *Introduction To Percolation Theory : Second Edition*. Taylor & Francis, London.

Steefel, C. I., Appelo, C. A. J., Arora, B., Jacques, D., Kalbacher, T., Kolditz, O., Lagneau, V., Lichtner, P. C., Mayer, K. U., Meeussen, J. C. L., Molins, S., Moulton, D., Shao, H., Šimůnek, J., Spycher, N., Yabusaki, S. B. et Yeh, G. T. (2015). Reactive transport codes for subsurface environmental simulation. *Computational Geosciences*, 19(3):445–478.

Strack, O. D. L. (2017). *Analytical Groundwater Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge.

Su, D., Ulrich Mayer, K. et MacQuarrie, K. T. B. (2017). Parallelization of MIN3P-THCm : A high performance computational framework for subsurface flow and reactive transport simulation. *Environmental Modelling & Software*, 95:271–289.

Su, X., Booshehrian, A. et Wan, R. (2013). Numerical Simulation of the Issues Related to Uranium Mining and Tailings Management in Continuous Permafrost Zones in Nunavut, Canada. *In American Geophysical Union, Fall Meeting*, volume 2013, pages C41A–0584, San Francisco (CA), United State. Conference Name : AGU Fall Meeting Abstracts.

Sudicky, E. (1990). The Laplace Transform Galerkin technique for efficient time-continuous solution of solute transport in double-porosity media. *Geoderma*, 46(1-3):209–232.

Svanberg, K. (2002). A Class of Globally Convergent Optimization Methods Based on Conservative Convex Separable Approximations. *SIAM Journal on Optimization*, 12(2): 555–573. Publisher : Society for Industrial and Applied Mathematics.

Sykes, J. F., Normani, S. D., Jensen, M. R. et Sudicky, E. A. (2009). Regional-scale groundwater flow in a Canadian Shield setting. *Canadian Geotechnical Journal*, 46(7):813–827.

Tao, Y., Guo, B., Bandilla, K. W. et Celia, M. A. (2019). Vertically integrated dual-continuum models for CO2 injection in fractured geological formations. *Computational Geosciences*, 23(2):273–284.

Tarkian, M., Lunde´n, B. et O¨lvander, J. (2008). Integration of Parametric CAD and Dynamic Models for Industrial Robot Design and Optimization. *In Volume 3 : 28th Computers and Information in Engineering Conference, Parts A and B*, pages 761–769, Brooklyn, New York, USA. ASMEDC.

Teimouri, M. et Asgari, M. (2019). Multi-objective BESO topology optimization for stiffness and frequency of continuum structures. *Structural Engineering and Mechanics*, 72(2):181–190.

Therrien, R. et Sudicky, E. (1996). Three-dimensional analysis of variably-saturated flow and transport in discretely fractured porous media. *Journal of Contaminant Hydrology*, 23:1–44.

Thore, C.-J., Grundström, H. A., Torstenfelt, B. et Klarbring, A. (2019). Penalty regulation of overhang in topology optimization for additive manufacturing. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 60(1):59–67.

Thovert, J. F., Mourzenko, V. V., Adler, P. M., Nussbaum, C. et Pinettes, P. (2011). Faults and fractures in the Gallery 04 of the Mont Terri rock laboratory : Characterization, simulation and application. *Engineering Geology*, 117(1):39–51.

Thériault, V. (2004). *Étude de l'écoulement autour d'un fosse par une approche de fracturation discrète*. Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.

Tomiyama, S., Igarashi, T., Tabelin, C. B., Tangviroon, P. et Ii, H. (2020). Modeling of the groundwater flow system in excavated areas of an abandoned mine. *Journal of Contaminant Hydrology*, 230:103617.

Tomy, R., Benoît, P., Mostafa, B., Isabelle, D. et Isabelle, P. (2020). Geochemical and Mineralogical Study of Lithologies and Tailings From the Whabouchi Lithium Mine Site, Québec, Canada. *In Mine Water Solutions*, page 6, New Zealand.

TOP500 (2021). Performance Development | TOP500.

Trinchero, P., Painter, S., Ebrahimi, H., Koskinen, L., Molinero, J. et Selroos, J.-O. (2016). Modelling radionuclide transport in fractured media with a dynamic update of Kd values. *Computers & Geosciences*, 86:55–63.

Trinchero, P., Puigdomenech, I., Molinero, J., Ebrahimi, H., Gylling, B., Svensson, U., Bosbach, D. et Deissmann, G. (2017). Continuum-based DFN-consistent numerical framework for the simulation of oxygen infiltration into fractured crystalline rocks. *Journal of Contaminant Hydrology*, 200:60–69.

Tsang, C.-F., Bernier, F. et Davies, C. (2005). Geohydromechanical processes in the Excavation Damaged Zone in crystalline rock, rock salt, and indurated and plastic clays—in the context of radioactive waste disposal. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 42(1):109–125.

Tsang, C.-F., Neretnieks, I. et Tsang, Y. (2015). Hydrologic issues associated with nuclear waste repositories. *Water Resources Research*, 51(9):6923–6972.

Tsang, Y. W. (1992). Usage of "Equivalent apertures" for rock fractures as derived from hydraulic and tracer tests. *Water Resources Research*, 28(5):1451–1455. REVUES v. 1-[35]-36 (1965-2000).

Tsiakas, K. T., Trompoukis, X. S., Asouti, V. G. et Giannakoglou, K. C. (2019). Shape Optimization of Wind Turbine Blades Using the Continuous Adjoint Method and Volumetric NURBS on a GPU Cluster. *In* Minisci, E., Vasile, M., Periaux, J., Gauger, N. R., Giannakoglou, K. C. et Quagliarella, D., éditeurs : *Advances in Evolutionary and Deterministic Methods for Design, Optimization and Control in Engineering and Sciences*, volume 48, pages 131–144. Springer International Publishing, Cham. Series Title : Computational Methods in Applied Sciences.

Tso, C.-H. M., Johnson, T. C., Song, X., Chen, X., Kuras, O., Wilkinson, P., Uhlemann, S., Chambers, J. et Binley, A. (2020). Integrated hydrogeophysical modelling and data assimilation for geoelectrical leak detection. *JOURNAL OF CONTAMINANT HYDROLOGY*, 234.

Tuckey, Z., Paul, J. et Price, J. (2016). Discontinuity survey and brittle fracture characterisation in open pit slopes using photogrammetry. Rapport technique, Australian Centre for Geomechanics. Conference Name : First Asia Pacific Slope Stability in Mining Conference, 2016 6–8 September, Brisbane.

Tuckey, Z. et Stead, D. (2016). Improvements to field and remote sensing methods for mapping discontinuity persistence and intact rock bridges in rock slopes. *Engineering Geology*, 208:136–153.

Tuckey, Z. S. (2012). *An Integrated Field Mapping-Numerical Modelling Approach to Characterising Discontinuity Persistence and Intact Rock Bridges in Large Open Pit Slopes*. Thesis, Science : Department of Earth Sciences.

Turcotte, D. L. (1986). Fractals and fragmentation. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 91(B2):1921–1926.

van der Vorst, H. A. (1992). Bi-CGSTAB : A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 13(2):631–644. Publisher : Society for Industrial and Applied Mathematics.

van Genuchten, M. T. (1980). A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils1. *Soil Science Society of America Journal*, 44(5):892.

Vatanabe, S. L., Lippi, T. N., Lima, C. R. d., Paulino, G. H. et Silva, E. C. N. (2016). Topology optimization with manufacturing constraints : A unified projection-based approach. *Advances in Engineering Software*, 100:97–112.

Verma, A. (2000). An introduction to automatic differentiation. *Current Science*, 78(7): 804–807. Publisher : Temporary Publisher.

Vick, S. G. (1990). *Planning, design, and analysis of tailings dams*. BiTech Publishers, Limited, Vancouver, BC, Canada, wiley series in geotechnical engineering édition.

Vidal, O., Rostom, F., François, C. et Giraud, G. (2017). Global Trends in Metal Consumption and Supply : The Raw Material–Energy Nexus. *Elements*, 13(5):319–324.

Villain, L., Sundström, N., Perttu, N., Alakangas, L. et Öhlander, B. (2015). Evaluation of the effectiveness of backfilling and sealing at an open-pit mine using ground penetrating radar and geoelectrical surveys, Kimheden, northern Sweden. *Environmental Earth Sciences*, 73(8):4495–4509.

Vogel, H. J., Weller, U. et Ippisch, O. (2010). Non-equilibrium in soil hydraulic modelling. *Journal of Hydrology*, 393(1):20–28.

Vu, M.-N., Pouya, A. et Seyedi, D. M. (2013). Modelling of steady-state fluid flow in 3D fractured isotropic porous media : application to effective permeability calculation : STEADY-STATE FLUID FLOW IN 3D FRACTURED ISOTROPIC POROUS MEDIA. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 37(14):2257–2277.

Wallace, C. D., Sawyer, A. H., Barnes, R. T., Soltanian, M. R., Gabor, R. S., Wilkins, M. J. et Moore, M. T. (2020). A model analysis of the tidal engine that drives nitrogen cycling in coastal riparian aquifers. *WATER RESOURCES RESEARCH*, 56(4).

Wallin, M., Ristinmaa, M. et Askfelt, H. (2012). Optimal topologies derived from a phase-field method. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 45(2):171–183.

Wang, L., Cardenas, M. B., Slottke, D. T., Ketcham, R. A. et Sharp, J. M. (2015). Modification of the Local Cubic Law of fracture flow for weak inertia, tortuosity, and roughness. *Water Resources Research*, 51(4):2064–2080.

Wang, M. Y., Wang, X. et Guo, D. (2003). A level set method for structural topology optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(1):227–246.

Wang, P., Ren, F., Miao, S., Cai, M. et Yang, T. (2017). Evaluation of the anisotropy and directionality of a jointed rock mass under numerical direct shear tests. *Engineering Geology*, 225(Supplement C):29–41.

Wang, X. et Ghassemi, A. (2011). A three-dimensional stochastic fracture network model for geothermal reservoir stimulation. *In Thirty-Sixth Workshop on Geothermal Reservoir Engineering (in press), Stanford University, Stanford, California.*

Warren, J. et Root, P. (1963). The Behavior of Naturally Fractured Reservoirs. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 3(03):245–255.

Watari, T., Nansai, K. et Nakajima, K. (2020). Review of critical metal dynamics to 2050 for 48 elements. *Resources, Conservation and Recycling*, 155:104669.

Wein, F., Chen, N., Iqbal, N., Stingl, M. et Avila, M. (2019). Topology optimization of unsaturated flows in multi-material porous media : Application to a simple diaper model. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 78:104871.

Weller, H. G., Tabor, G., Jasak, H. et Fureby, C. (1998). A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in Physics*, 12(6):620.

West, A. C., Van Geel, P. J., Raven, K. G., Nguyen, T. S., Ben Belfadhel, M. et Flavelle, P. (2003). Groundwater flow and solute transport in a laboratory-scale analogue of a decommissioned in-pit tailings management facility. *Canadian Geotechnical Journal*, 40(2):326–341.

West, A. C. F. (2001). *Physical and numerical modelling of an in-pit tailings management facility*. M.Eng., Carleton University.

Whitaker, S. (1986). Flow in porous media i : A theoretical derivation of darcy's law. *Transport in Porous Media*, 1(1):3–25.

Whitaker, S. (1999). *The Method of Volume Averaging*. Theory and Applications of Transport in Porous Media. Springer Netherlands.

Wickland, B. E., Wilson, G. W. et Wijewickreme, D. (2010). Hydraulic conductivity and consolidation response of mixtures of mine waste rock and tailings. *Canadian Geotechnical Journal*, 47(4):472–485.

Wickland, B. E., Wilson, G. W., Wijewickreme, D. et Klein, B. (2006). Design and evaluation of mixtures of mine waste rock and tailings. *Canadian Geotechnical Journal*, 43(9):928–945.

Wildenschild, D., Hopmans, J. W. et Simunek, J. (2001). Flow Rate Dependence of Soil Hydraulic Characteristics. *Soil Science Society of America Journal*, 65(1):35–48.

Williams, D. et Currey, N. (2002). Engineering Closure of an Open Pit Gold Operation in a Semi-Arid Climate. *International Journal of Surface Mining, Reclamation and Environment*, 16(4):270–288.

Wilson, G. W., Plewes, H. D., Williams, D. J. et Robertson, J. (2003). Concepts of co-mixing of tailings and waste rock. *In 6th Internatinal Conference on Acid Rock Drainage*, pages 437–443, Cairns, Australia. Publisher : The Australasian Institute of Mining and Metallurgy (AusIMM).

Witherspoon, P. A., Wang, J. S. Y., Iwai, K. et Gale, J. E. (1980). Validity of Cubic Law for fluid flow in a deformable rock fracture. *Water Resources Research*, 16(6):1016–1024.

Worsey, P. (1981). *Geotechnical factors affecting the application of pre-split blasting to rock slopes*. Thèse de doctorat, University of Newcastle upon Tyne.

Wright, D. L. et Lane, J. W. (1998). Mapping Hydraulically Permeable Fractures Using Directional Borehole Radar And Hole-To-Hole Tomography With A Saline Tracer. *In 11th EEGS Symposium on the Application of Geophysics to Engineering and Environmental Problems*, page cp. European Association of Geoscientists & Engineers. ISSN : 2214-4609.

Wu, J., Goto, T.-n. et Koike, K. (2021). Estimating fractured rock effective permeability using discrete fracture networks constrained by electrical resistivity data. *Engineering Geology*, 289:106178.

Wu, J. et Wu, L. (2017). Revised Level Set-Based Method for Topology Optimization and Its Applications in Bridge Construction. *The Open Civil Engineering Journal*, 11(1).

Wu, X. H. et Parashkevov, R. R. (2005). Effect of Grid Deviation on Flow Solutions. *In SPE Reservoir Simulation Symposium*. Society of Petroleum Engineers.

Wu, Y., Cheng, L., Killough, J. E., Huang, S., Fang, S., Jia, P., Cao, R. et Xue, Y. (2019). Integrated Characterization of the Fracture Network in Fractured Shale Gas Reservoirs—Stochastic Fracture Modeling, Simulation and Assisted History Matching. *In SPE Annual Technical Conference and Exhibition*, Calgary, Alberta, Canada. Society of Petroleum Engineers.

Wyllie, D. C., Mah, C. W. et Hoek, E. (2004). *Rock slope engineering : civil and mining*. Spon Press, London ; New York, 4th ed édition. OCLC : ocm52575515.

Xie, Y. M. et Steven, G. P. (1997). *Evolutionary Structural Optimization*. Springer-Verlag, London.

Xu, S., Cai, Y. et Cheng, G. (2010). Volume preserving nonlinear density filter based on heaviside functions. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 41(4):495–505.

Xuan, Y., Xu, X., Gan, Y. et Liu, J. (2019). Complementary elliptical cloak with arbitrary axial ratio. *IEICE Electronics Express*, 16(7):20190069–20190069.

Yamada, T., Izui, K., Nishiwaki, S. et Takezawa, A. (2010). A topology optimization method based on the level set method incorporating a fictitious interface energy. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(45):2876–2891.

Yang, C., Zheng, F., Liu, Y., Zhang, Y.-K., Liu, W., Zhang, Q. et Yang, X. (2019). Modeling hydro-biogeochemical transformation of chromium in hyporheic zone : Effects of spatial and temporal resolutions. *JOURNAL OF HYDROLOGY*, 579.

Yilmaz, E. et Fall, M. (2017). *Paste Tailings Management*. Springer International Publishing.

Yin, T. et Chen (2020). Simulation-based investigation on the accuracy of discrete fracture network (DFN) representation. *Computers and Geotechnics*, 121:103487. Publisher : Elsevier.

Yin, X., Martineau, C., Demers, I., Basiliko, N. et Fenton, N. J. (2021). The potential environmental risks associated with the development of rare earth element production in Canada. *Environmental Reviews*, 29(3):354–377. Publisher : NRC Research Press.

Young, N. L., Reber, J. E. et Simpkins, W. W. (2019). FracKfinder : A MATLAB Toolbox for Computing Three-Dimensional Hydraulic Conductivity Tensors for Fractured Porous Media. *Groundwater*, 57(1):75–80.

Zachara, J. M., Chen, X., Song, X., Shuai, P., Murray, C. et Resch, C. T. (2020). Kilometer-scale hydrologic exchange flows in a gravel bed river corridor and their implications to solute migration. *WATER RESOURCES RESEARCH*, 56(2).

Zafarani, A. R., Yniesta, S. et Aubertin, M. (2020). Effet of height and downstream slope on the seismic behavior of tailings impoundments reinforced with waste rock inclusions. *In GeoVirtual, 73rd Canadian Geotechnical Conference*, page 8, Online conference.

Zhang, C., Wang, X., Jiang, S., Zhou, M., Li, F., Bi, X., Xie, S. et Liu, J. (2021a). Heavy metal pollution caused by cyanide gold leaching : a case study of gold tailings in central China. *Environmental Science and Pollution Research*.

Zhang, K., Muñoz, A. C. et Sanchez-Espinoza, V. H. (2021b). Development and verification of the coupled thermal–hydraulic code – TRACE/SCF based on the ICoCo interface and the SALOME platform. *Annals of Nuclear Energy*, 155:108169.

Zhang, Z., Nemcik, J., Qiao, Q. et Geng, X. (2015). A Model for Water Flow Through Rock Fractures Based on Friction Factor. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 48(2):559–571.

Zhao, X., Zhou, M., Sigmund, O. et Andreasen, C. S. (2018). A "poor man's approach" to topology optimization of cooling channels based on a Darcy flow model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 116:1108–1123.

Zharikov, A. V., Velichkin, V. I., Malkovsky, V. I. et Shmonov, V. M. (2014). Experimental study of crystalline-rock permeability : Implications for underground radioactive waste disposal. *Water Resources*, 41(7):881–895.

Zhou, M., Alexandersen, J., Sigmund, O. et W. Pedersen, C. B. (2016). Industrial application of topology optimization for combined conductive and convective heat transfer problems. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 54(4):1045–1060.

Šimůnek, J., Jarvis, N. J., van Genuchten, M. T. et Gärdenäs, A. (2003). Review and comparison of models for describing non-equilibrium and preferential flow and transport in the vadose zone. *Journal of Hydrology*, 272(1):14–35.

Šimůnek, J., Šejna, M. et van Genuchten, M. T. (2018). New features of version 3 of the HYDRUS (2D/3D) computer software package. *Journal of Hydrology and Hydromechanics*, 66(2):133–142.