

Formation à l'utilisation du logiciel PHREEQC :

Modélisation hydro(géo)chimique et de transport réactif



En résumé

<u>Titre :</u>	Utilisation du logiciel PHREEQC : modélisation hydro(géo)chimique et de transport réactif
<u>Quand :</u>	Nouvelles dates à venir
<u>Où :</u>	Modalité de dispense (en distanciel ou présentiel) restant à être précisée
<u>Tarif par participant :</u>	Restant à être défini
<u>Information & inscription :</u> Nicolas Jacquemet nicolas@nicolas-jacquemet.com +33 6 80 15 10 16	

Nombre maximal de participants : 12

Nicolas Jacquemet EI

Organisme de formation : enregistré sous le numéro 11756194475. Cet
enregistrement ne vaut pas agrément de l'Etat.

N° SIRET : 799 395 371 00039

N° TVA intra-communautaire : FR29 799 395 371

Objectifs

L'objectif de la formation est d'acquérir les bases dans l'utilisation du logiciel PHREEQC¹ (PH REDox EQUilibrium in C language) pour simuler des équilibres (géo)chimiques gaz-eau-solide et des cinétiques réactionnelles. Les participants seront également formés aux interactions eau-eau au travers de la simulation du mélange de solutions aqueuses, et au transport réactif en milieu poreux (saturé en eau).

Au travers des exemples pratiques de la formation, les participants seront sensibilisés à certains questionnements (géo)chimiques dans les thématiques suivantes : eaux naturelles (notamment de formations), matériaux cimentaires (et leur carbonatation), stockage géologique de CO₂ et d'hydrogène (H₂), entartrage (scaling) sulfatique, et opérations d'hydrométallurgie.

Contenu

La formation est scindée en deux parties (cf. tableau suivant): une première intitulée « PHREEQC basics » ; et une seconde, « PHREEQC advanced ».

La partie « PHREEQC basics », sur 3 jours, concernera le calcul des équilibres thermodynamiques gaz-eau-solide, ainsi que la simulation du mélange de solutions aqueuses. Un module sera également consacré à la présentation des bases de données de PHREEQC (de type Debye-Hückel). Les équilibres en phase aqueuse (spéciation), solide-eau, et gaz-eau seront abordés, avec les notions de solutions et gaz idéaux versus réels.

La partie « PHREEQC advanced », sur 3 jours, reviendra sur des notions plus avancées pour les calculs d'équilibres telles que : (i) la prise en compte de solutions concentrées au travers de l'utilisation des modèles de coefficients d'activité SIT² & Pitzer ; (ii) la prise en compte des solutions solides dans les équilibres eau-solide ; (iii) le redox et l'électrochimie. Un module approfondira également le côté bases de données : l'ajout à celles-ci de phases solides. Les possibilités offertes par PHREEQC pour simuler des cinétiques réactionnelles³ et du transport⁴ réactif en milieu poreux⁵ seront également abordées.

La formation alternera pratique, au travers d'exemples de simulations appliqués à diverses thématiques (cf. tableau suivant), et théorie, au travers de la présentation des lois et concepts physico-chimiques codés dans le logiciel. Les règles d'écriture (syntaxe) des scripts de calcul (« inputs ») ainsi que les différentes options de sortie (« outputs ») qu'offre PHREEQC seront abordées (fichier texte, feuille Excel ou fenêtre graphique de type « pop-up »).

¹ Parkhurst, D.L., and Appelo, C.A.J., 2013. Description of input and examples for PHREEQC version 3—A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations: U.S. Geological Survey Techniques and Methods, book 6, chap. A43, 497 p., available only at <http://pubs.usgs.gov/tm/06/a43>.

² Specific Ion Interaction Theory

³ Incluant des réactions bactériennes

⁴ Advectif-dispersif-diffusif

⁵ Saturé en eau

NOTIONS ET CONCEPTS SCIENTIFIQUES / TECHNIQUES

PHREEQC « basics »	
JOUR 1	<p><u>Calcul d'équilibres thermodynamiques gaz-eau-minéraux</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ● Spéciation d'eaux - Réactions acide-base (pH), redox (pe/Eh) et de complexation - Indices de saturation vis-à-vis de minéraux - Fugacités et pressions partielles de gaz ● Equilibres eau-minéral
JOUR 2	<p><u>Calcul d'équilibres thermodynamiques gaz-eau-solide (suite)</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ● Equilibres eau-gaz - Gaz parfaits versus gaz réels (équation d'état des gaz parfaits ou de Peng-Robinson) - Phase gazeuse « exprimée » ou non ● Equilibres gaz-eau-minéraux ● Addition progressive d'un composé chimique à une solution aqueuse ● Construction d'un diagramme concentration versus pH (diagramme de Sillen (ou Bjerrum))
JOUR 3	<p><u>Base de données</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ● Organisation, syntaxe et conventions ● Données thermochimiques : constantes d'équilibres K et leurs dépendances à la température ● Modèle d'activité en phase aqueuse B-dot ; rappel sur le calcul des coefficients de fugacité ● Ajout d'espèces aqueuses à une base de données « de type B-dot » <p><u>Mélanges d'eaux à l'équilibre thermodynamique</u></p>
PHREEQC « advanced »	
JOUR 4	<p><u>Cinétique de dissolution-précipitation d'un minéral</u></p> <p><u>Cinétique de réaction bactérienne</u></p> <p><u>Transport réactif en milieu poreux saturé</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ● Réaction et transport par diffusion moléculaire ● Réaction et transport par advection+dispersion hydrodynamique
JOUR 5	<p><u>Modèles cinétiques de réactions solide-liquide</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ● Approfondissement des fonctionnalités liées à la cinétique des réactions ● Cas d'étude : dissolution d'une poudre minérale <p><u>Modèles de coefficients d'activité pour les solutions concentrées</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ● Utilisation des modèles SIT et Pitzer ● Structure des bases de données SIT et Pitzer ● Eléments clefs pour la retranscription d'une base de données à partir de données bibliographiques
JOUR 6	<p><u>Description de phases solides</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ● Ajout de phases solides dans une base de données ● Utilisation de la fonctionnalité « solutions solides » <p><u>Réactions redox et électrochimiques</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ● Systèmes à potentiel Eh contrôlé ● Simulation d'une oxydation/réduction électrochimique

EXEMPLES PRATIQUES DE SIMULATIONS

Calculs d'équilibres gaz-eau-minéraux

- Spéciation d'une eau pure à 25°C
- Spéciation d'une eau de Drainage Minier Acide (DMA) ou géothermale à ~20°C
- Spéciation d'une eau de formation à 25°C et à une température différente de 25°C
- Calcul de l'équilibre eau-portlandite (minéral cimentaire)
- Calculs d'équilibres gaz-eau
 - CO₂-eau : avec CO₂=gaz idéal (ou parfait) ou =gaz réel
 - CO₂-eau : relation fugacité-pression (gaz réel)
 - H₂-eau: hydrogénation d'une eau de formation (=ajout d'hydrogène à une eau de formation)
- Calcul d'équilibre gaz-eau-roche : ajout d'hydrogène (H₂) à un ensemble eau+minéraux
- Construction d'un diagramme de Sillen/Bjerrum (Concentration versus pH) pour les carbonates (CO₂, HCO₃⁻ et CO₃²⁻)
- Réactions redox : électro-dissolution d'une électrode de nickel, oxydation de sulfures de métaux en milieu acide

Mélanges d'eaux à l'équilibre thermodynamique

- Mélange d'une eau sulfatée et d'une eau riche en baryum avec précipitation de barytine ("sulfate scaling" en contexte pétrolier)

Base de données et modèles d'activité en solution aqueuse

- Un exemple pour comprendre l'organisation, syntaxe et conventions de la base de données
- Calcul des constantes d'équilibres thermodynamiques (K) avec la température
- Utilisation des modèles d'activité B-dot, SIT et Pitzer et leurs paramètres (systèmes Lanthanides-acide organiques-eau, Cu(II)-H₂SO₄-H₂O)
- Ajout d'espèces aqueuses à des bases de données de type B-dot, SIT et Pitzer
- Ajout de phases solides à une base de données (oxalates de terre rares, MgCO₃, NaF et FeSO₄.xH₂O)

Equilibre solution solide-eau

- Equilibre eau-solution solide (Fe_xMg_{1-x}CO₃); paramètres de mélanges issus de la bibliographie

Cinétique réactionnelle

- Cinétique de dissolution-précipitation de calcite
- Cinétique de réduction biotique (bactéries) des sulfates par une loi de Monod "simple"
- Cinétique de dissolution d'une poudre minérale multiphasée et multidispersée à pH contrôlé

Transport réactif

- Simulation de la progression 1D d'un front de carbonatation au travers d'un ciment (transport par diffusion dans un milieu poreux)
- Percolation 1D d'une eau pure au travers d'une colonne de terre polluée au carbone organique (transport par advection-dispersion dans un milieu poreux)