

# **FORMATION (en distanciel) :**

## **Utilisation du logiciel PHREEQC : modélisation hydro(géo)chimique et de transport réactif**



### *En résumé*

<b><u>Titre de la formation :</u></b>	Utilisation du logiciel PHREEQC : modélisation hydro(géo)chimique et de transport réactif	
<b><u>Quand :</u></b>	En distanciel ; du lundi 15 au vendredi 19 mars 2021 (5 jours)	
<b><u>Formateurs :</u></b>	- Dr. Nicolas JACQUEMET, chercheur/consultant indépendant en hydrogéochemie - Dr. Laurent CASSAYRE, chercheur en génie des procédés	
<b><u>Tarif :</u></b>	900 € HT par participant	
	<b><u>Information :</u></b> Dr. Nicolas Jacquemet <a href="mailto:nicolas@nicolas-jacquemet.com">nicolas@nicolas-jacquemet.com</a> 06 80 15 10 16	<b><u>Inscription :</u></b> (1) Remplissage du formulaire en ligne : <a href="https://fr.surveymonkey.com/r/NQ3Q8X9">https://fr.surveymonkey.com/r/NQ3Q8X9</a> (2) Envoi de la facture pro forma

**Nombre maximal de participants : 12**

## Objectifs

L'objectif de la formation est d'acquérir les bases dans l'utilisation du logiciel PHREEQC<sup>1</sup> pour simuler des réactions chimiques gaz-eau-solide s'opérant à l'équilibre thermodynamique et/ou contrôlées par des processus cinétiques. La simulation du transport de matière en milieu poreux saturé en eau par advection-dispersion hydrodynamique et par diffusion moléculaire sera aussi abordée, ainsi que les mélanges de solutions aqueuses.

Les participants seront sensibilisés aux problématiques (géo)chimiques des thématiques suivantes : altération chimique (carbonatation) de matériaux cimentaires, stockages géologiques de gaz (CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, ...), eaux souterraines (eaux de formations, entartrage/scaling sulfatique, pollution organique, ...) et hydrométallurgie. Ultérieurement à la formation, les fichiers input utilisés lors des exercices pourront être utilisés comme base par les participants pour simuler leurs propres cas d'études.

Une attestation de présence à la formation sera délivrée à chaque participant.

## Contenu & plan

Le contenu & plan détaillé de la formation est présenté dans le tableau suivant. La première partie (3,5 jours) sera assurée par Nicolas Jacquemet, qui exposera les possibilités qu'offre le logiciel PHREEQC pour simuler des équilibres (thermodynamiques) gaz-eau-solide, des réactions contrôlées cinétiquement et des phénomènes de transport réactif (et des mélanges de solutions aqueuses). La seconde partie de la formation (1,5 jours) sera assurée par Laurent Cassayre, qui détaillera (« Focus ») la simulation des réactions solide-liquide contrôlées cinétiquement et des équilibres eau-solide.

La formation alternera théorie (présentation des lois/concepts physico-chimiques codés dans le logiciel), et pratique, au travers d'exercices de simulations appliqués aux thématiques suivantes : altération chimique (carbonatation) de matériaux cimentaires, stockages géologiques de gaz (CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, ...), eaux souterraines (eaux de formations, entartrage/scaling sulfatique, pollution organique, ...) et hydrométallurgie.

Outre l'écriture des scripts de calcul et l'examen des bases de données, les différentes options/formats de sortie qu'offre PHREEQC seront abordées (fichier texte, feuille Excel ou fenêtre graphique de type « pop-up »).

---

<sup>1</sup> 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>.

Jour #	PROGRAMME	Formateur <sup>s</sup>
1	<p><b><u>Calcul d'équilibres (thermodynamiques) gaz-eau-solide</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Spéciation de solutions aqueuses</li> <li>- Réactions/équilibres acide-base (pH), redox (pe/Eh), et complexation</li> <li>- Indices de saturation de solides/minéraux</li> <li>- Pressions partielles et fugacités de gaz</li> <li>● Réactions/équilibres eau-solide</li> </ul>	NJ
2	<p><b><u>Calcul d'équilibres (thermodynamiques) gaz-eau-solide (suite)</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Réactions/équilibres eau-gaz</li> <li>- Phase gazeuse « exprimée » ou non</li> <li>- Equations d'état du type loi des gaz parfaits ou cubique (Peng-Robinson)</li> <li>● Réactions/équilibres eau-solide-gaz</li> <li>● Addition progressive d'un composé chimique à une solution aqueuse</li> <li>● Construction de diagrammes de spéciation <i>e.g.</i> concentration d'espèces aqueuses versus pH (diagramme de Sillen) ou pe/Eh</li> </ul>	NJ
3	<p><b><u>Etude des bases de données du logiciel</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Organisation, syntaxe et conventions</li> <li>● Données thermochimiques ; ajout d'espèces aqueuses à la base de données</li> <li>● Modèles d'activité pour les espèces aqueuses</li> </ul> <p><b><u>Réactions contrôlées par des lois cinétiques</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Dissolution/précipitation de solides</li> <li>● Réactions bactériennes sans et avec croissance/décroissance de biomasse bactérienne</li> </ul> <p><b><u>Mélange d'eaux</u></b></p>	NJ
4	<p><b><u>Transport réactif en milieu poreux saturé</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Réaction et transport par diffusion moléculaire</li> <li>● Réaction et transport par advection+dispersion hydrodynamique</li> </ul>	NJ
	<p><b><u>Focus « cinétique solide-liquide »</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Prise en compte de différentes classes granulométriques de solides et de modèles de dissolution ; application à l'hydro-métallurgie (étape de lixiviation)</li> </ul>	LC
5	<p><b><u>Focus « description de phases solides »</u></b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Ajout de phases solides dans une base de données (expression des constantes d'équilibre eau-solide à partir de données bibliographiques)</li> <li>● Utilisation de la fonctionnalité « solutions solides » : intérêt, fonctionnement, exemple, ajout de paramètres de mélanges issus de la bibliographie</li> </ul>	LC

<sup>s</sup> : NJ : Nicolas Jacquemet ; LC : Laurent Cassayre

## Instructeurs

### Dr. Nicolas JACQUEMET

Titulaire d'un doctorat en géosciences, N. Jacquemet est chercheur/consultant indépendant. Il utilise la modélisation hydro(géo)chimique et de transport réactif depuis 2006 pour résoudre des problématiques d'interactions fluide-solide appliquées aux stockages géologiques de gaz, contamination d'eaux souterraines, géothermie, métallogénie hydrothermale, hydro-métallurgie et à l'exploration-production pétrolière. Nicolas est intervenu plusieurs fois auprès d'universités pour dispenser des formations à l'utilisation de PHREEQC.

#### Références :

- **Jacquemet N.** et al. (2020) Hydrogen reactivity with a well cement and an aquifer: geochemical thermodynamics PHREEQC calculations. EAGE GET 2020 conference.
- **Jacquemet N.** et al. (2014) In situ identification of the  $S_3^-$  ion in synthetic fluid inclusions. *American Mineralogist* 99 (5-6), 1109-1118.
- **Jacquemet N.** et al. (2012) Armouring of a well cement in  $H_2S-CO_2$  brine induced by calcite coating - experiments and numerical modelling. *Applied geochemistry* 27, 782-795.
- Fabbri A., **Jacquemet N.** et al. (2012) A chemo-poromechanical model of oilwell cement carbonation under  $CO_2$  geological storage conditions. *Cement and concrete research* 42 (1), 8-19.
- **Jacquemet N.** et al. (2010) Intrusion of  $CO_2$  and impurities in a freshwater aquifer – impact evaluation by reactive transport modelling. Proceedings of the GHGT-10 conference, Amsterdam.
- Thiéry D., **Jacquemet N.** et al. (2009) Validation of MARTHE-REACT coupled surface and groundwater reactive transport code for modeling hydro systems. Proceedings of the TOUGH symposium 2009.

### Dr. Laurent CASSAYRE

Titulaire d'un doctorat en génie des procédés, L. Cassayre met en œuvre depuis une vingtaine d'années des outils de simulation thermodynamique dans des domaines d'application tels que les procédés de métallurgie extractive ou de recyclage (pyro et hydrométallurgie) ou le stockage d'énergie. Il s'intéresse notamment à la modélisation thermodynamique et cinétique de procédés impliquant des phases solides.

#### Références :

- Zielinski, M., **Cassayre L.**, Destrac, P., Coppey, N., Garin, G., Biscans, B., 2020. Leaching Mechanisms of Industrial Powders of Spent Nickel Metal Hydride Batteries in a Pilot-Scale Reactor. *ChemSusChem* 13, 616–628.
- Schorne-Pinto, J., Janghorban, A., Lomello-Tafin, M., Pisch, A., Mikaelian, G., Benigni, P., Barnabé, A., **Cassayre, L.**, 2019. Assessment of thermodynamic data for  $CuCrO_2$  delafossite from calorimetric measurements. *Thermochim. Acta* 680, 178345.
- C.-S. Touchard, F. Bourgeois, C. Julcour-Lebigue, **Cassayre L.**, Seeking hydrometallurgical pathways for chalcopyrite leaching: development of a thermodynamic model, 58th Annual Conference of Metallurgists (COM) Hosting Copper 2019, 18-21 août 2019, Vancouver, Canada.
- El Hage, R., Chauvet, F., Biscans, B., **Cassayre L.**, Maurice, L., Tzedakis, T., 2019. Kinetic study of the dissolution of vanadyl sulfate and vanadium pentoxide in sulfuric acid aqueous solution. *Chemical Engineering Science* 199, 123–136.
- Laveissière, M., Cerda, H., Roche, J., **Cassayre L.**, Arurault, L., 2019. In-depth study of the influence of electrolyte composition on coatings prepared by plasma electrolytic oxidation of TA6V alloy. *Surface and Coatings Technology* 361, 50–62.
- **Cassayre L.** et al., Defining the operating conditions of the attrition-leaching process using thermodynamic process modelling, in : Proceedings of the XXVIII International Mineral Processing Congress (IMPC 2016), Québec City, Canada, 11-15 septembre 2016, pp. 196.1-12.