

FORMATION CHESS – MODELISATION EN GEOCHIMIE DES EAUX

Centre de Géosciences – MINES Paris
locaux de Fontainebleau (77)

Mardi 02 décembre (9h30 – 18h)

- Introduction à la modélisation : concepts physico-chimiques (processus thermodynamiques et cinétiques), principaux algorithmes et bases de données.
- Logiciel CHESS : familiarisation avec l'interface et ses modes de fonctionnement, les fichiers en ligne de commande et son glossaire des mots-clefs, la lecture et la représentation graphique des résultats.
- Exercices 1 et 2, réactions chimiques : conventions d'écriture d'une base de données thermodynamiques, diagrammes activité/activité et de Pourbaix (Eh/pH), spéciation et loi d'action de masse ; saturation et sous-saturation des phases minérales.
- Exercice 3, processus réactionnels et pouvoirs tampons acido/basique et d'oxydo-réduction, Exemple et comportement d'une solution tampon exercé par un gaz, un soluté, un minéral.

Mercredi 03 décembre (9h – 18h)

- Exercice 4, impact d'une décharge de produits industriels fluorés : solubilité et comportement géochimique du fluor, impact des lixiviats sur les eaux superficielles et souterraines.
- Exercice 5a, solutions de forces ioniques élevées : modèles de correction d'activité des solutés et de l'eau, application aux solutions d'acide nitrique très concentrées.
- Exercice 5b, équilibre eau-gaz : solubilité et réactivité des gaz en fonction de la température et de la pression, équations d'état et carbonatation des bétons par le CO₂ atmosphérique.
- Exercice 6, expérience batch de sorption du cadmium par l'hydroxyde ferrique et le quartz : mécanismes de la complexation de surface et calage de constante, effets de compétition entre complexation par ligands, précipitation et sorption multi-sites.

Réunion amicale autour d'un verre (17h – 18h)

Jeudi 04 décembre (9h – 15h30)

- Exercice 7, production de matière en suspension : précipitation cinétique de calcite dans des effluents d'industrie chimique, cinétique généralisée et calage de constantes, hydrochimie des effluents et simulation de mélange de fluides.
- Exercice 8, échanges ioniques : formalismes de Gaines-Thomas et Vanselow, capacité d'échange cationique, salinisation des aquifères, diagrammes de Piper et types d'eaux naturelles.
- Eléments d'application et discussion ouverte avec les participants sur l'application de CHESS à leurs propres thématiques de recherche, par ex. cinétiques, gaz, matériaux cimentaires....
- Transférabilité de CHESS au logiciel de transport réactif HYTEC (illustration par colonnes échangeuses, durabilité des bétons, exploitations minières, etc.).

N.B. : Ce programme est indicatif et pourra être révisé au gré des circonstances.