

## ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

file= a7\_naclgyps\_pitz2.inn

appel à un modèle de Pitzer == inclusion de la base ad hoc:

```
INCLUDE dtb\pitz_hmw_jm.dtb
```

(logK des espèces + paramètres du modèle + bloc SOLVENT )

EX:

système=

1kg d'eau "pure"

```
SYSTEM
```

```
NA INERT NA+
```

```
CL INERT CL-
```

```
CA INERT CA+2
```

```
S INERT SO4-2
```

```
ENDSYSTEM
```

et 1 mole de gypse (stœchiométrique)

```
SYSTEM.ROCK
```

```
GYP SUM 1.00
```

```
ENDSYSTEM.ROCK
```

## ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

évolution de la solubilité du gypse en fonction de la salinité du milieu:

```
PATH CHANGE
```

```
NA 1E-9 10.0 1.1
```

```
CL 1E-9 10.0 1.1
```

```
ENDPATH
```

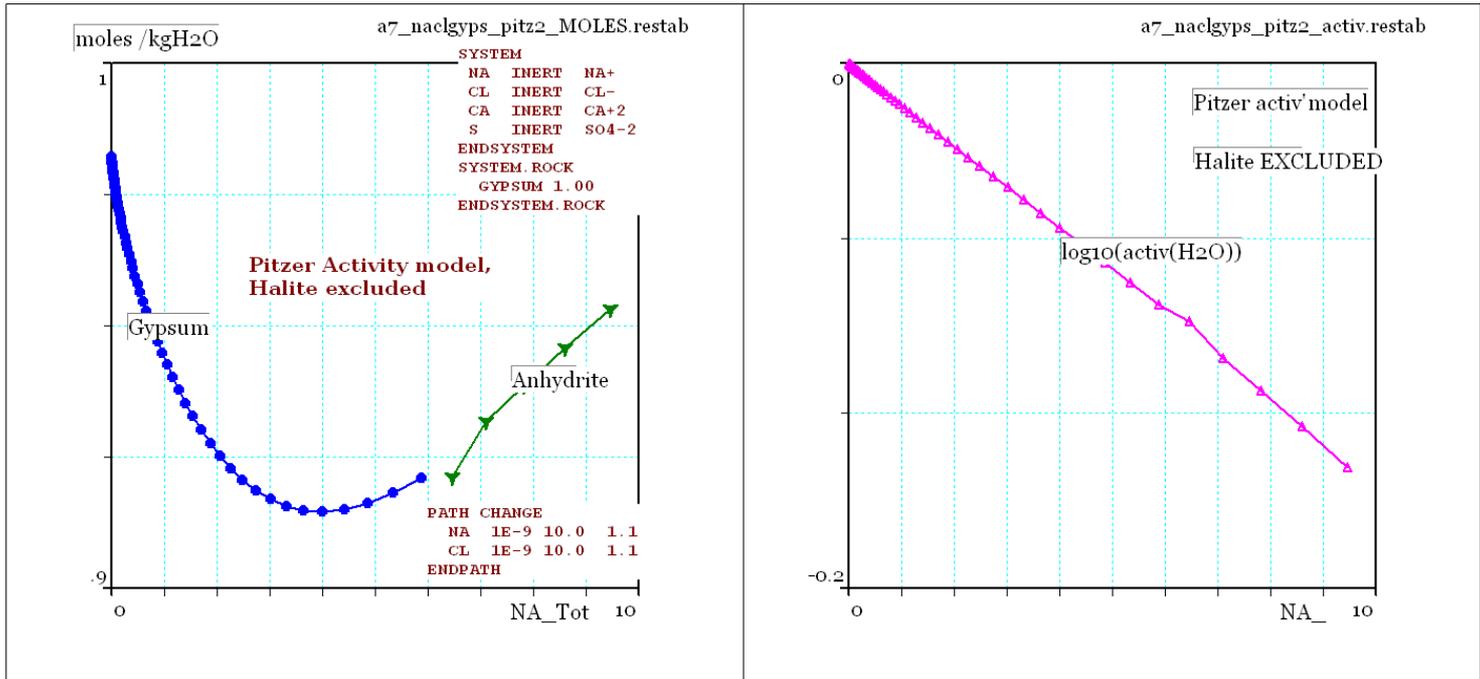
tester d'abord en considérant uniquement gypse et anhydrite:

```
EQUIL.EXCLUDE
```

```
HALITE
```

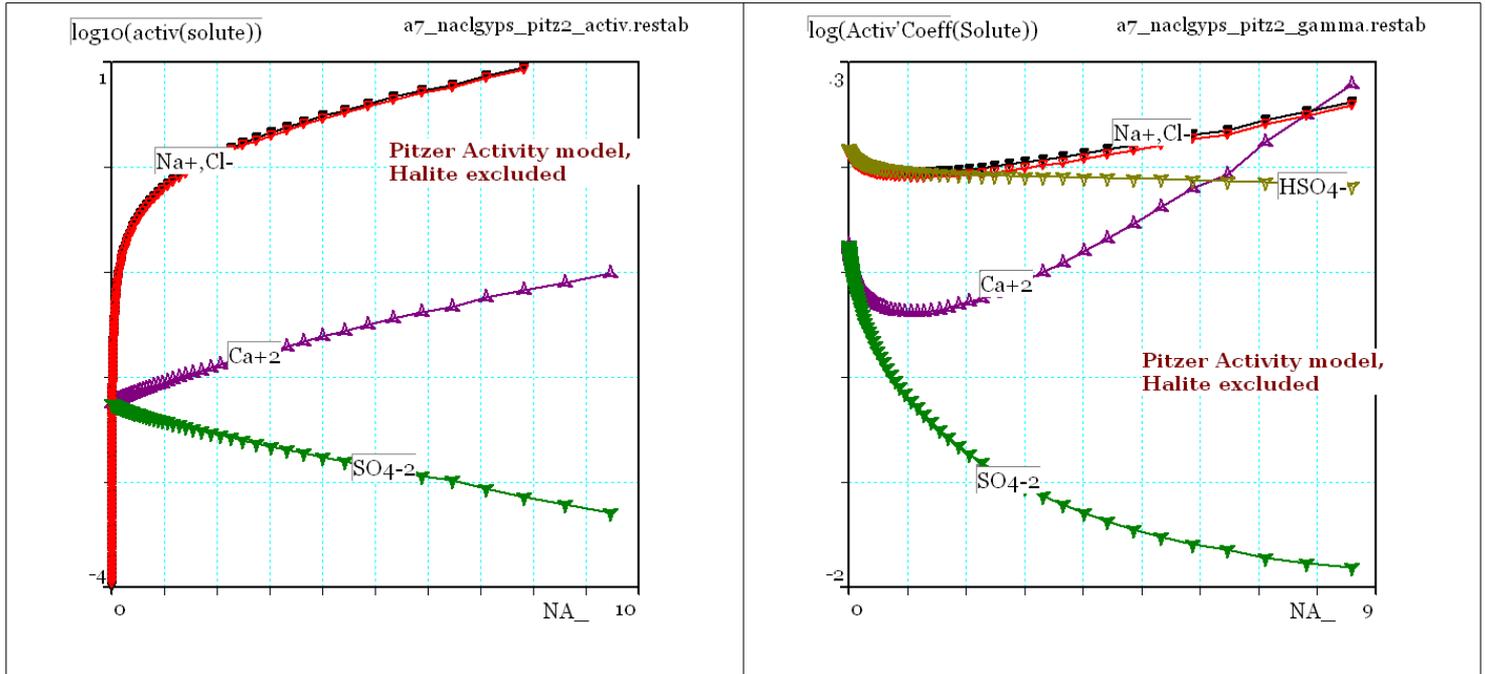
```
END
```

# ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer



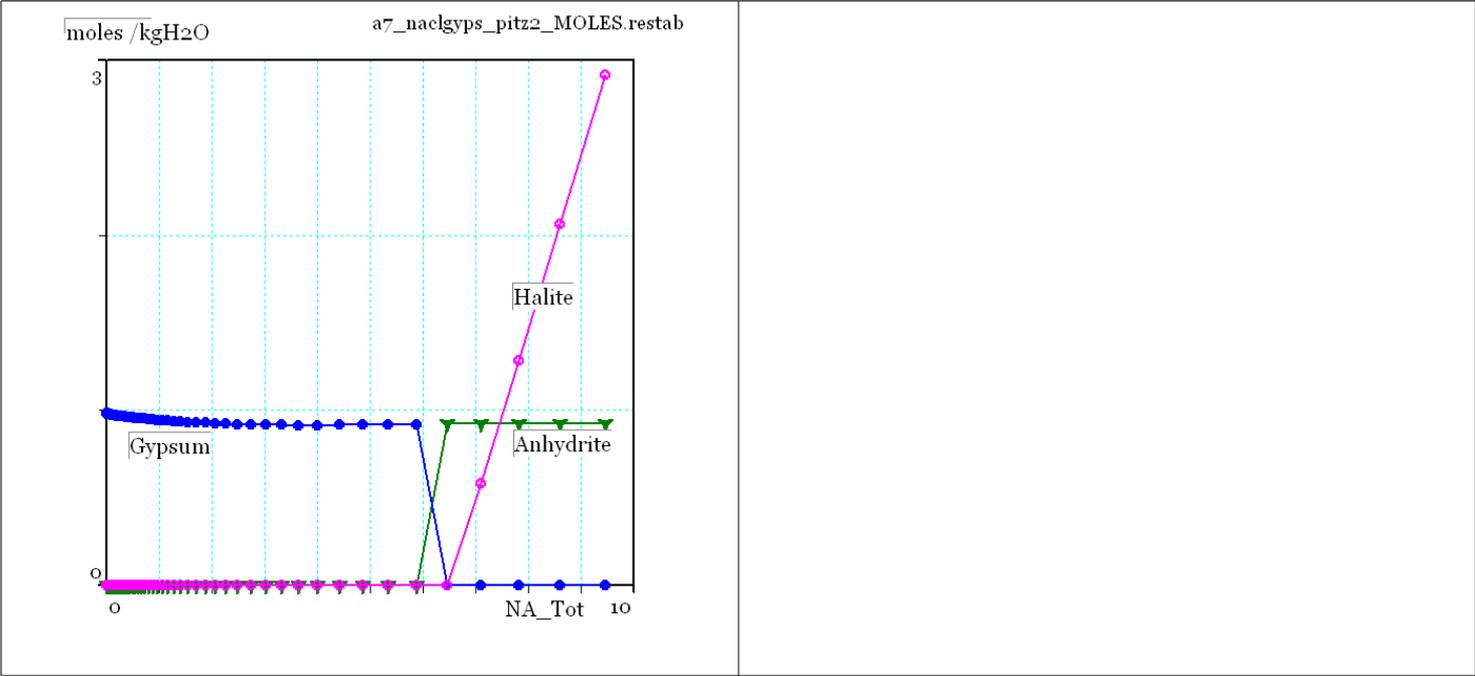
# ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

## évolutions des activités et coeff'activité



# ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

halite non exclue:



# ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

## *Comparaison avec un modèle de Davies*

■ fichier d'entrée: a7\_naclgyps\_pitzless

base de données en logK (eq36\_hkf, dérivée de slop98)

+base logK pour gypse (absent de slop98)

```
INCLUDE dtb\elements.dtb  
INCLUDE dtb\eq36_hkf.dtb  
INCLUDE dtb\eq36_hkf_custom.dtb
```

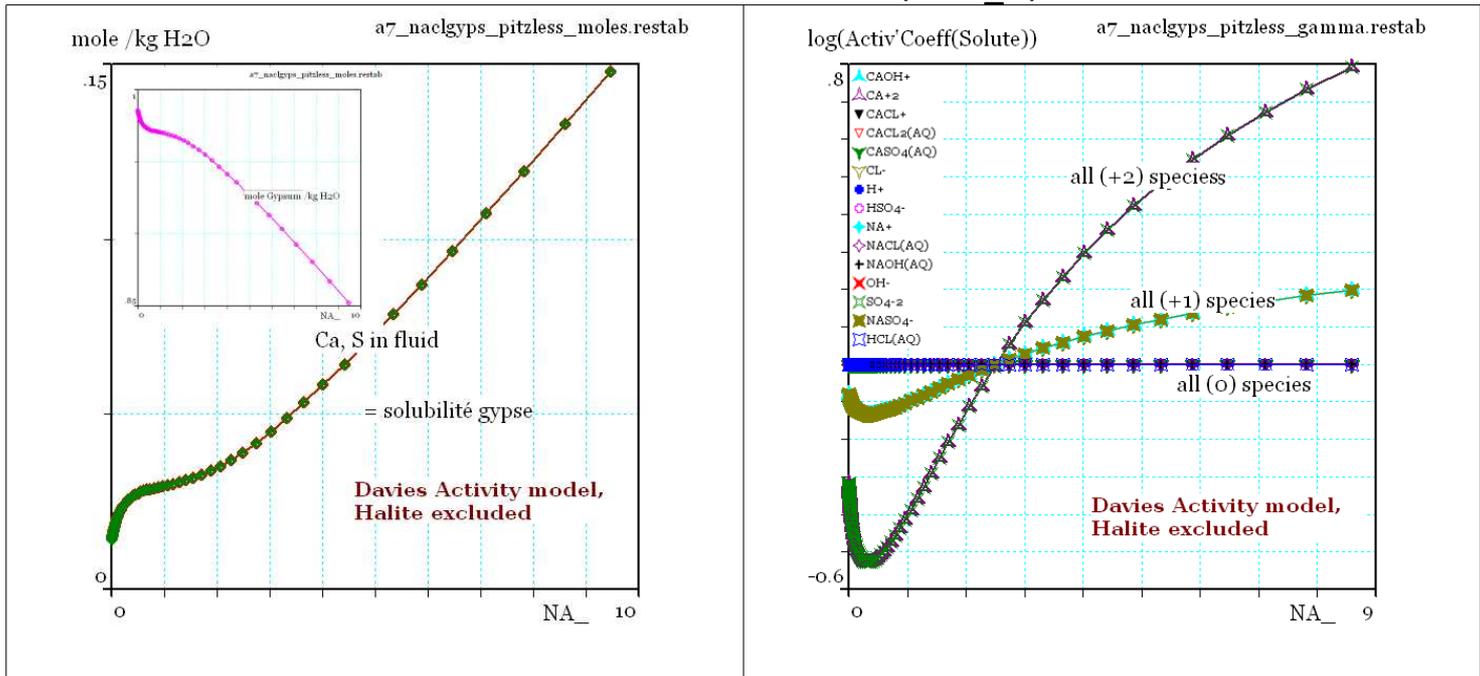
modèle d'activité choisi:

```
SOLVENT  
  MODEL DAV_1  
ENDSOLVENT
```

= Davies standard, connu par ARXIM sous le mot-clé DAV\_1

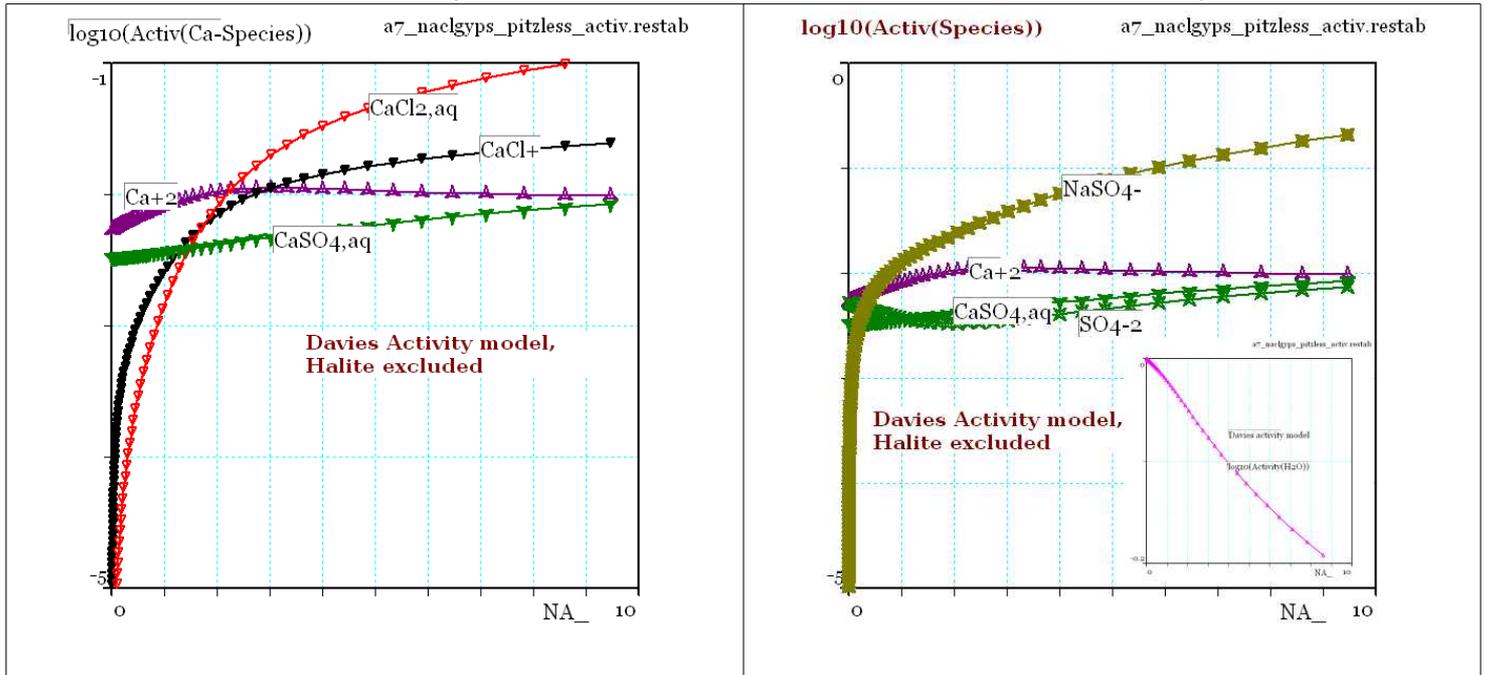
# ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

## solubilité calculée avec le modèle de Davies (Dav\_1)



# ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

activités des solutés (Pitzer=Interaction, Davies=Association)



## ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

### *un autre modèle d'activité à la Davies*

appel à un autre modèle d'activité, référencé DAV\_2

```
SOLVENT
```

```
MODEL DAV_2
```

```
ENDSOLVENT
```

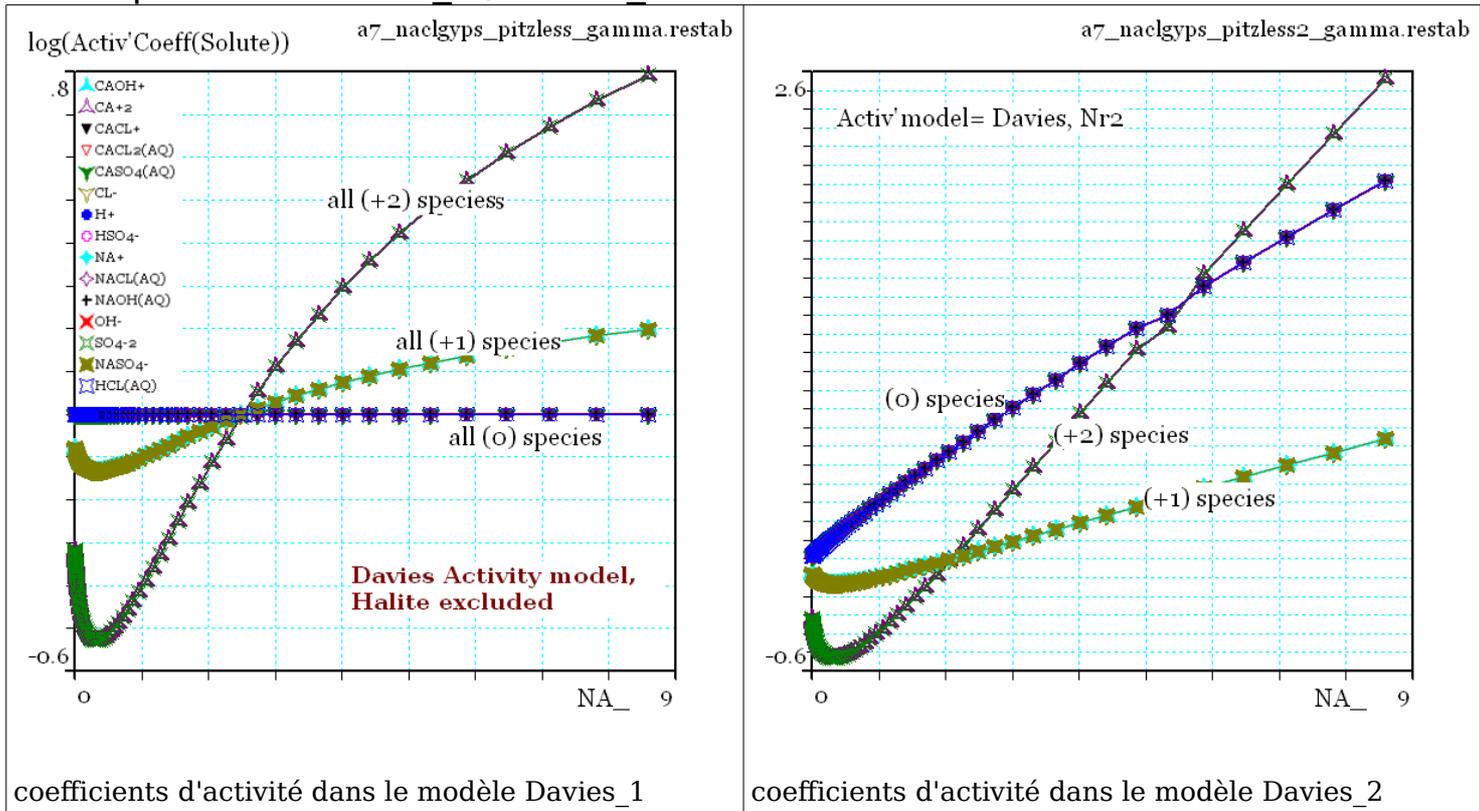
pour une espèce neutre,

dans Davies "standard"  $\log(\gamma) = 0$

dans Davies Nr2,  $\log(\gamma) = 0,3 I$

# ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

## comparaison Davies\_1 /Davies\_2





## ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

comparaison Davies\_1 /Davies\_2

coefficient(espèce neutre) >1 dans Davies\_2

▷ association de Na + Cl en NaCl plus faible dans Dav\_2 /Dav\_1

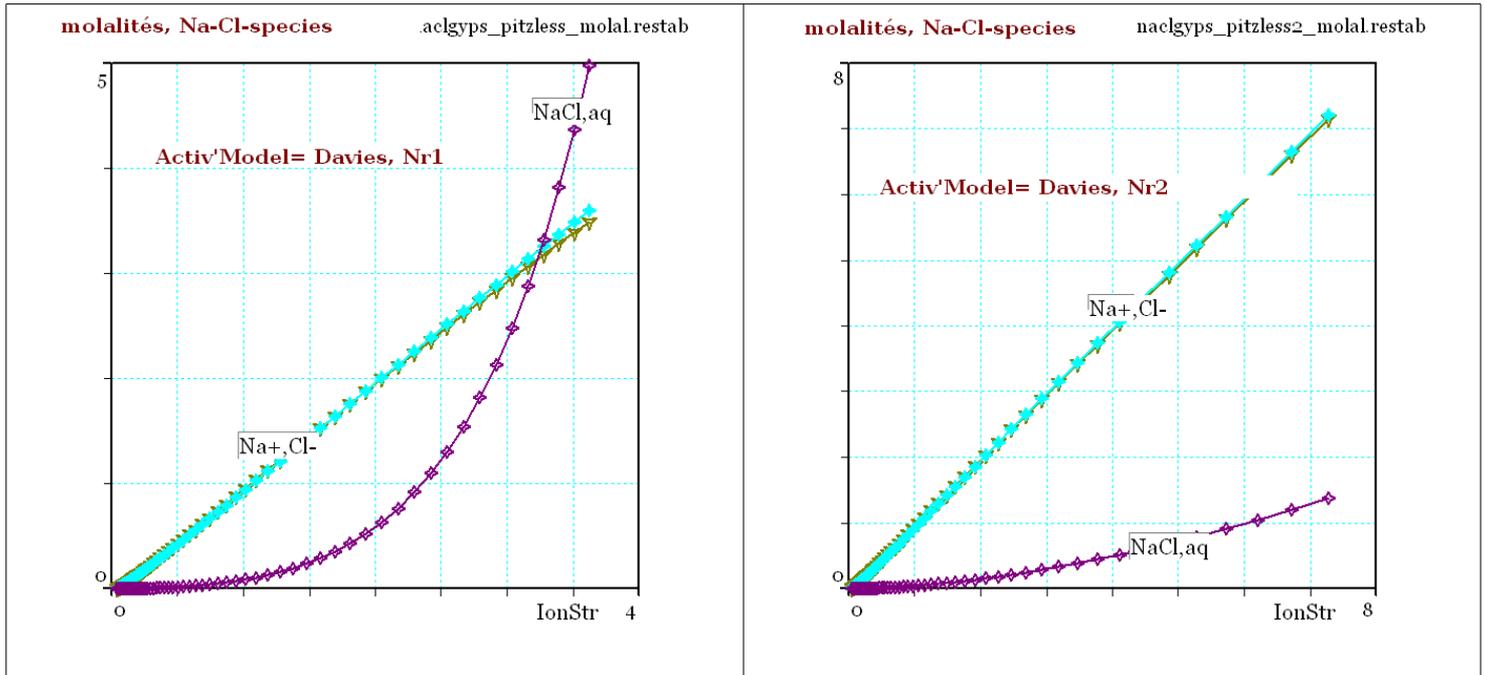
▷ molalités plus élevées (à NaCl\_tot donné) en ions libres Na<sup>+</sup> et Cl<sup>-</sup>

▷ force ionique Dav\_2 >> Dav\_1

▷ augmentation importante des coefficients de toutes les espèces

# ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

comparaison Davies\_1 /Davies\_2



## ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

### *solubilité du gypse vs NaCl, Davies\_2*

résultat avec Dav\_2 comparable à celui obtenu avec Dav\_1

différence: transition gypse - anhydrite

dissociation plus élevée, à salinité donnée

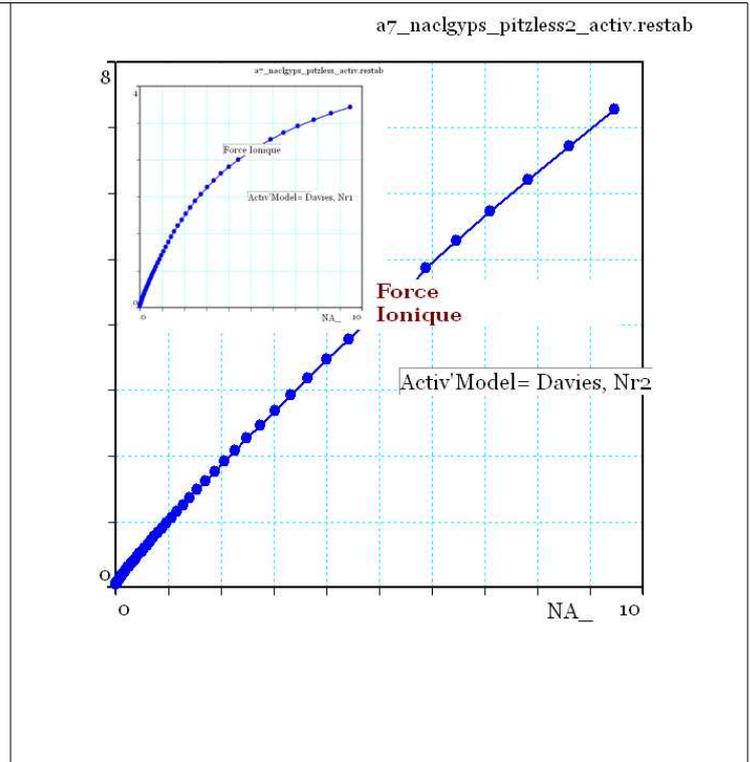
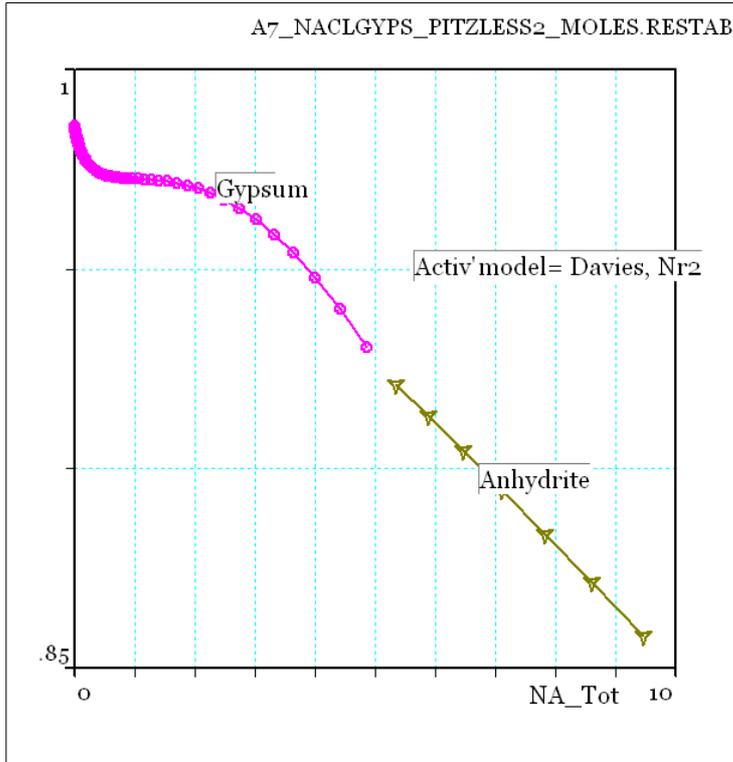
→ augmentation de  $\Sigma(\text{molalités}(\text{soluté}))$

(Na<sup>+</sup>, Cl<sup>-</sup>, etc. plus abondants)

→ diminution importante de l'activité de l'eau

# ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer

## *solubilité du gypse vs NaCl, Davies\_2*



# sommaire

- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....1
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....2
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....3
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....4
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....5
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....6
  - Comparaison avec un modèle de Davies.....6
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....7
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....8
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....9
  - un autre modèle d'activité à la Davies.....9
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....10
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....12
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....13
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....14
  - solubilité du gypse vs NaCl, Davies\_2.....14
- ARXIM, tests de l'implémentation d'un modèle de Pitzer.....15
  - solubilité du gypse vs NaCl, Davies\_2.....15

sommaire.....16