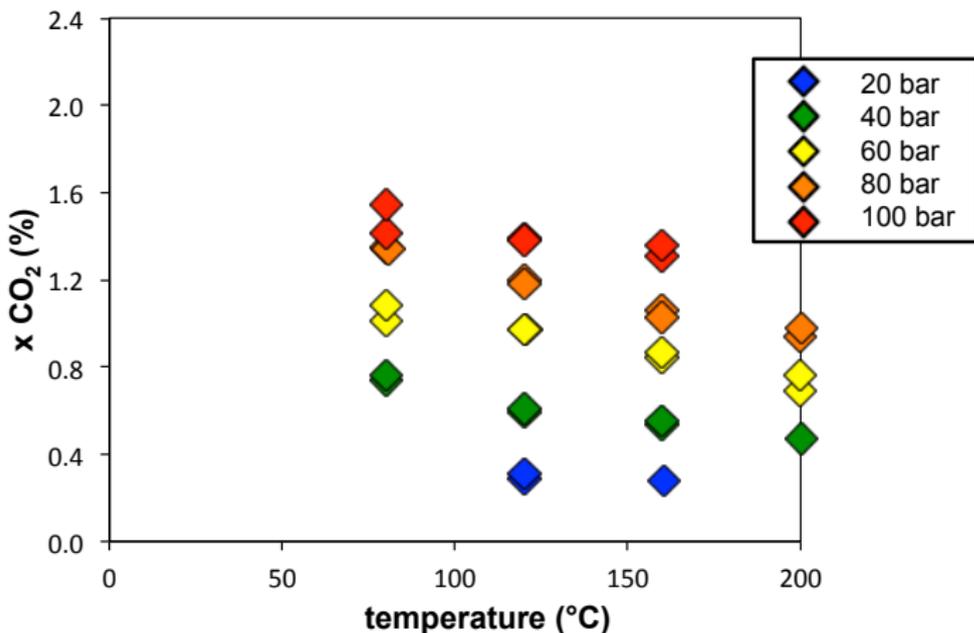


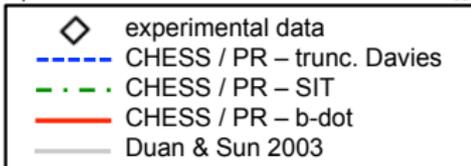
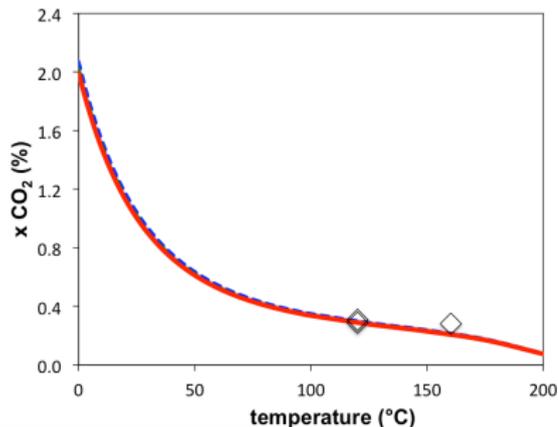
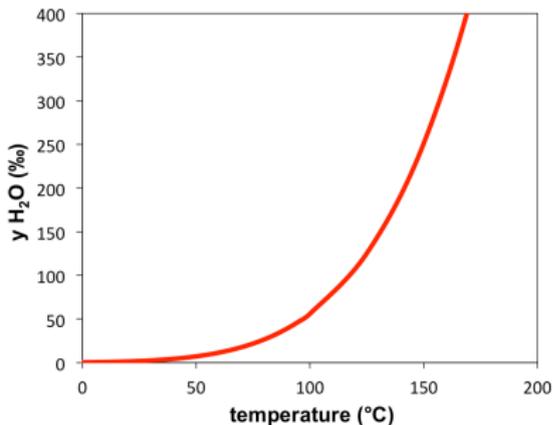
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

Données de Nighswander *et al.* (1989) à $\text{NaCl} = 0.171 \text{ M}$.



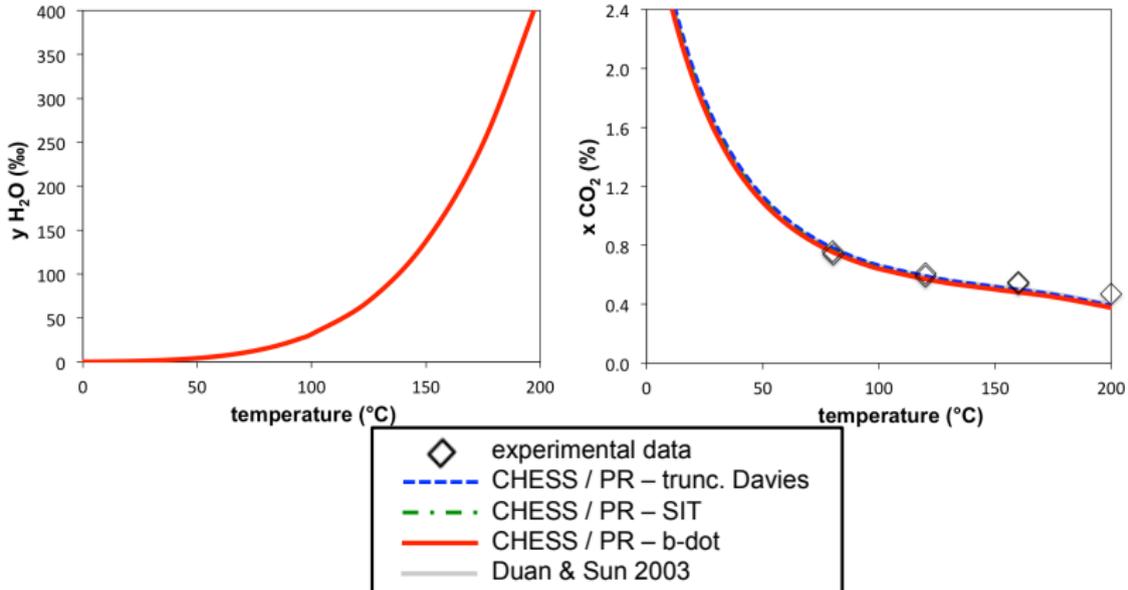
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$P = 20 \text{ bar}$, $\text{NaCl} = 0.171 \text{ M}$



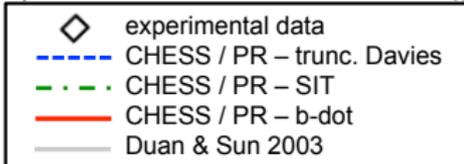
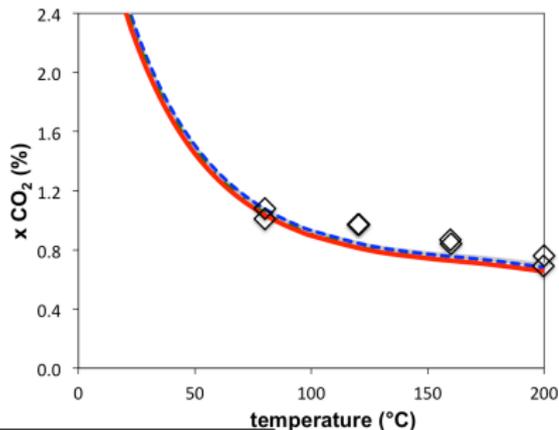
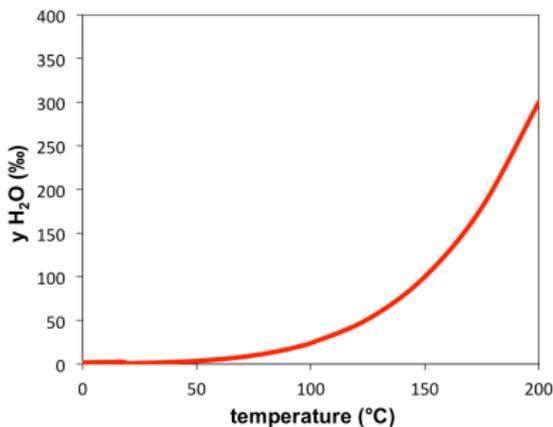
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

P = 40 bar, NaCl = 0.171 M



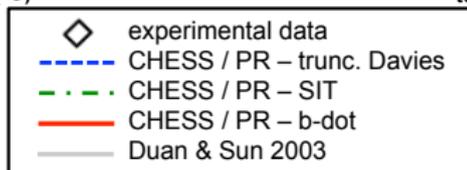
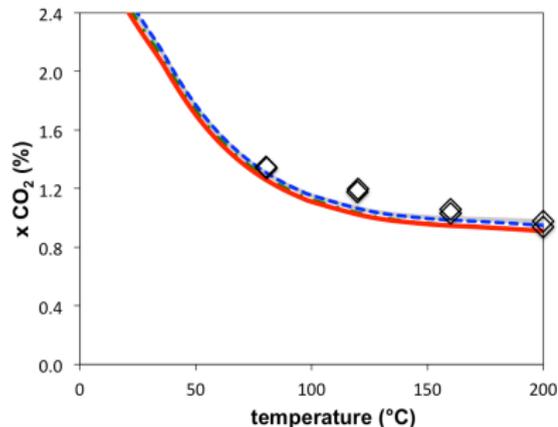
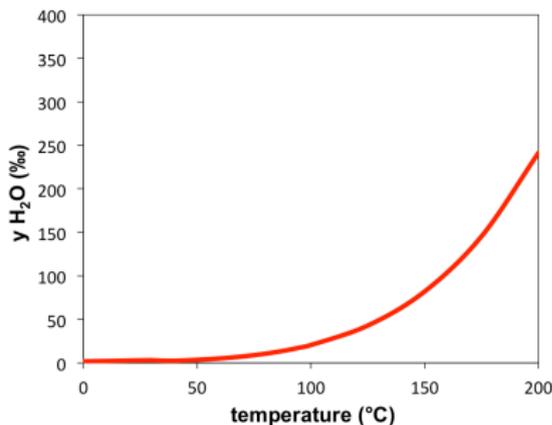
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$P = 60 \text{ bar}$, $\text{NaCl} = 0.171 \text{ M}$



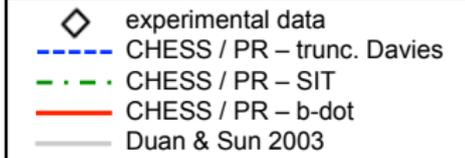
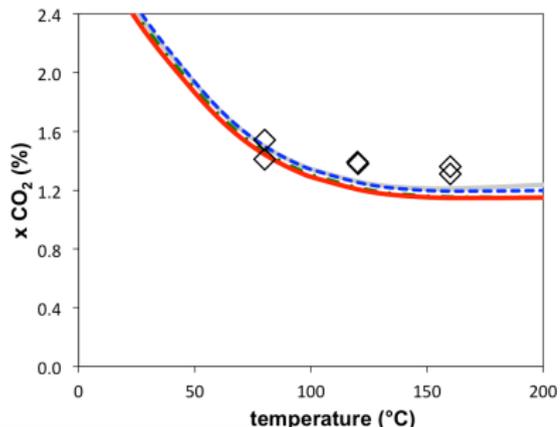
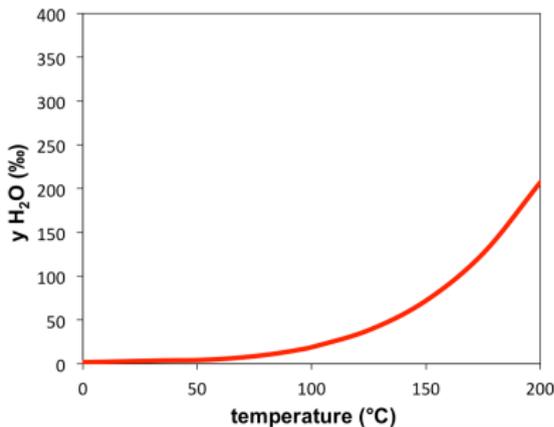
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$P = 80 \text{ bar}$, $\text{NaCl} = 0.171 \text{ M}$



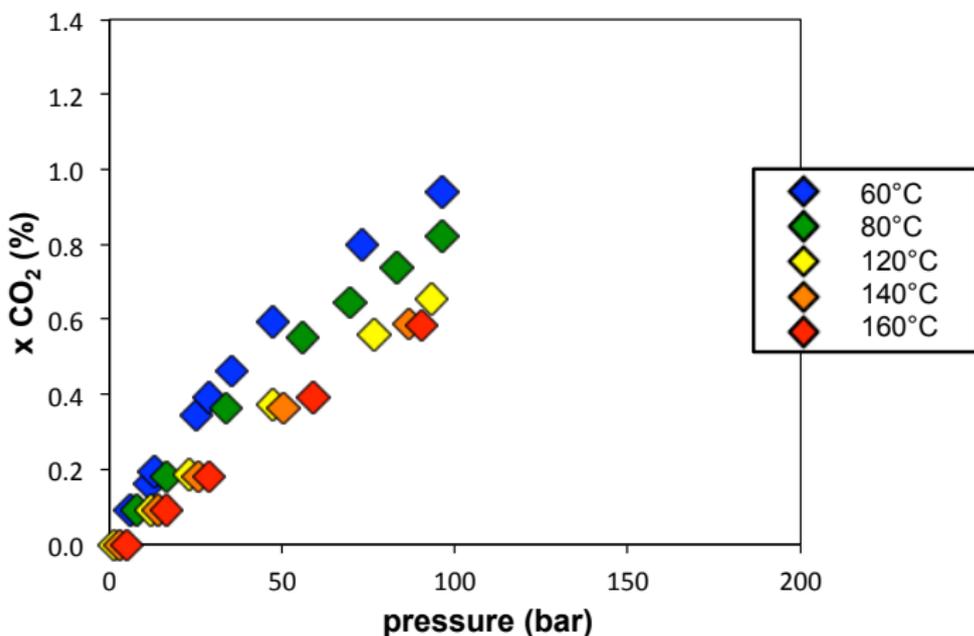
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

P = 100 bar, NaCl = 0.171 M



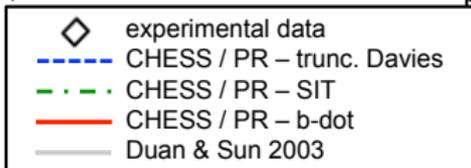
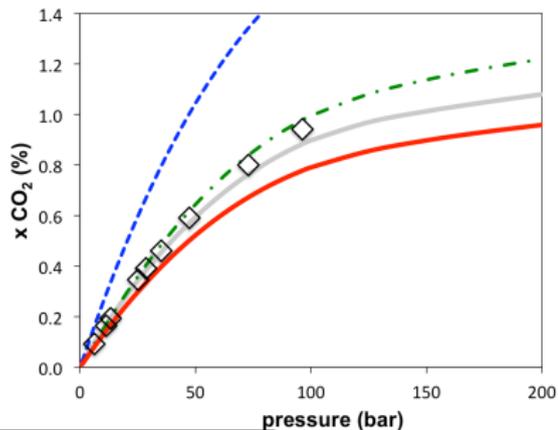
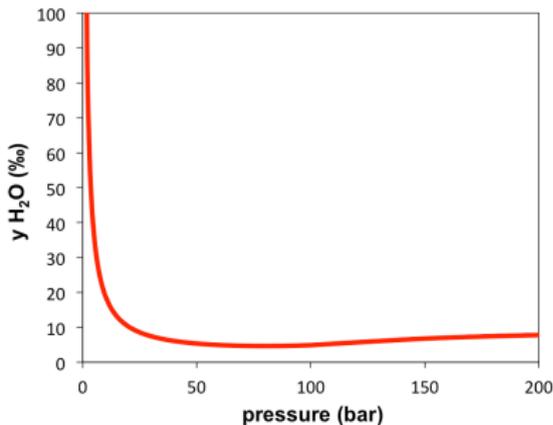
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

Données de Rumpf *et al.* (1994) à $\text{NaCl} = 4.000 \text{ M}$.



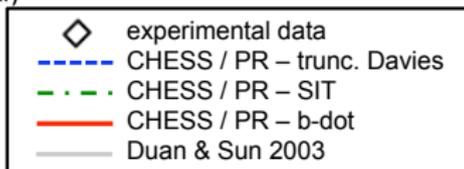
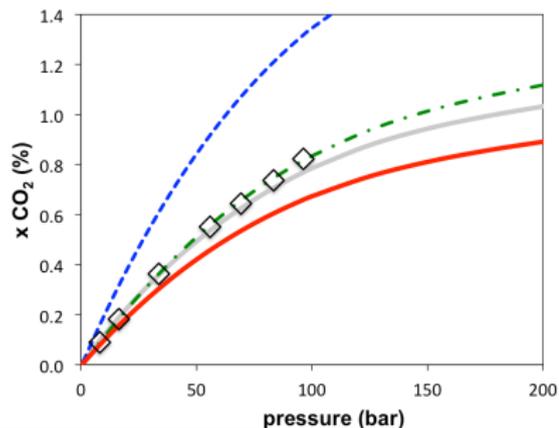
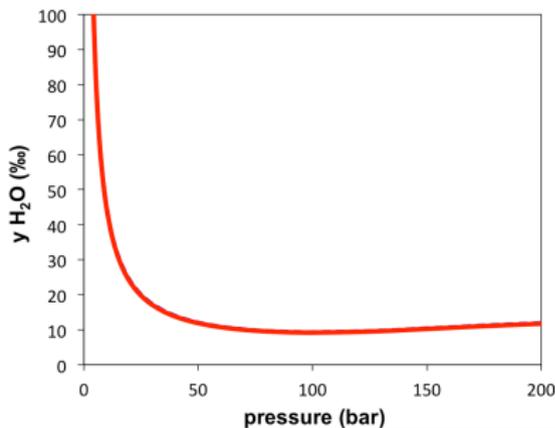
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$T = 60^\circ\text{C}$, $\text{NaCl} = 4.000\text{ M}$



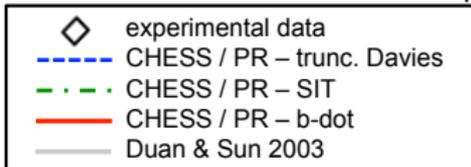
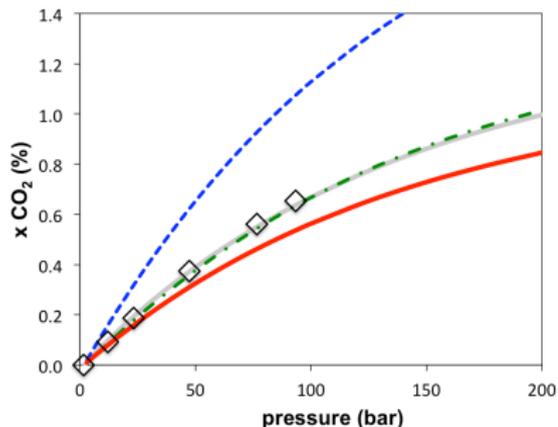
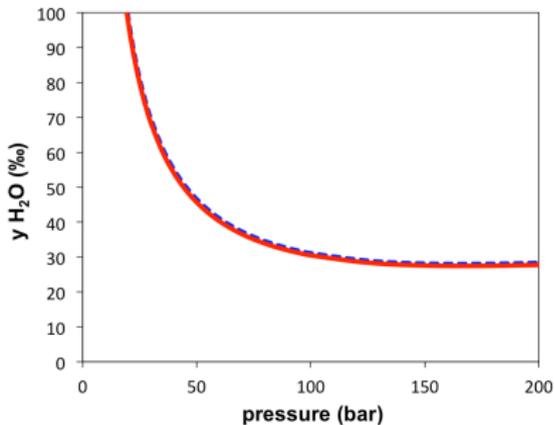
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$T = 80^\circ\text{C}$, $\text{NaCl} = 4.000\text{ M}$



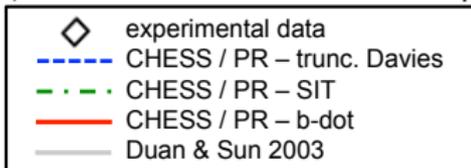
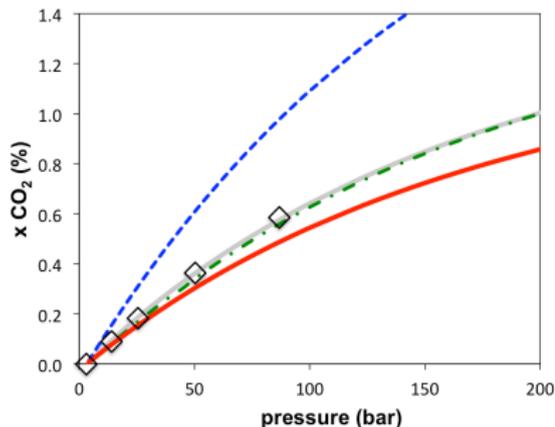
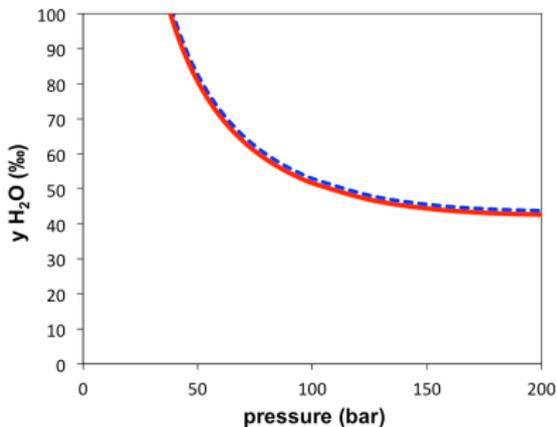
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$T = 120^\circ\text{C}$, $\text{NaCl} = 4.000 \text{ M}$



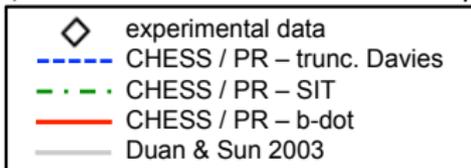
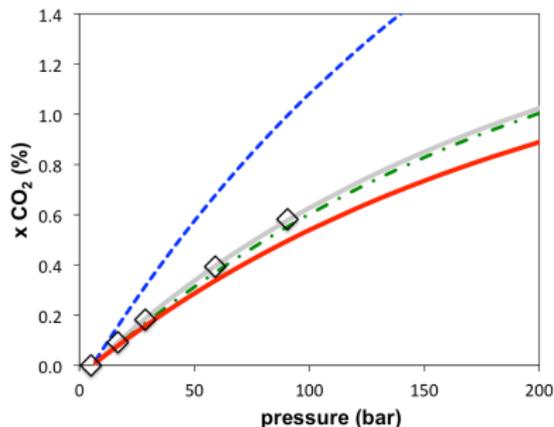
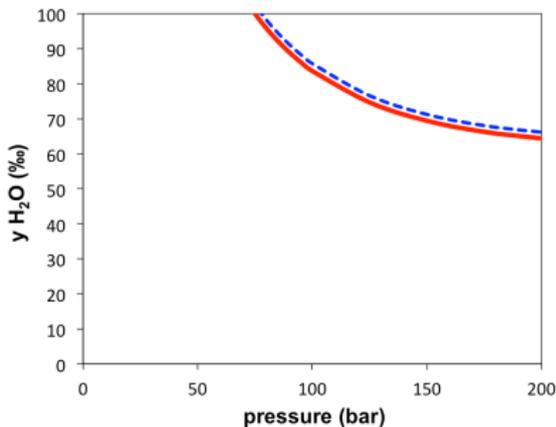
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$T = 140^\circ\text{C}$, $\text{NaCl} = 4.000 \text{ M}$



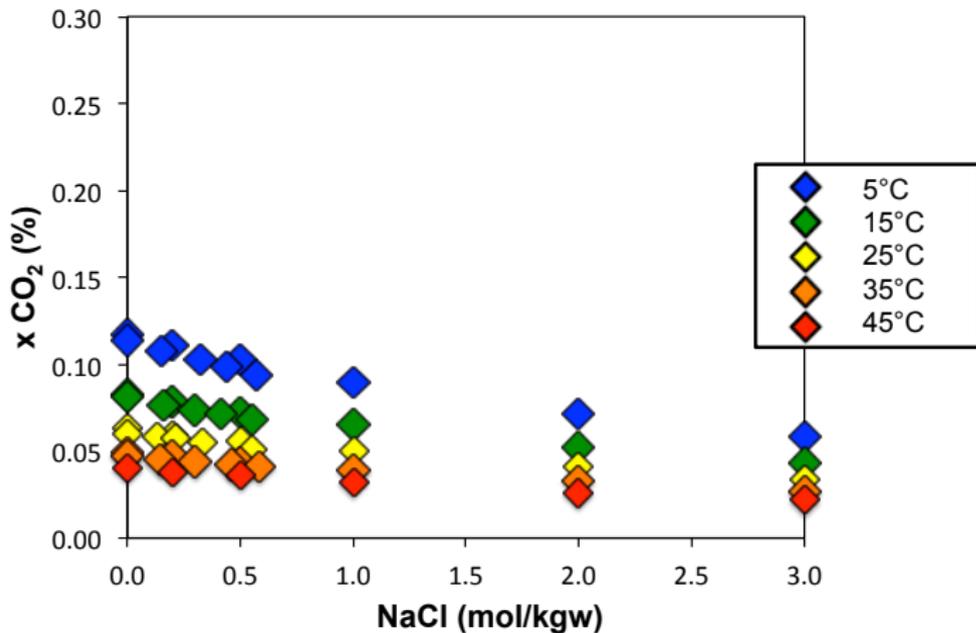
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$T = 160^\circ\text{C}$, $\text{NaCl} = 4.000 \text{ M}$



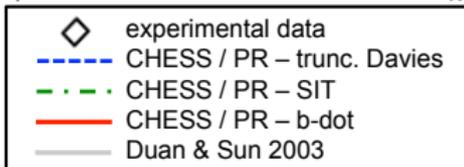
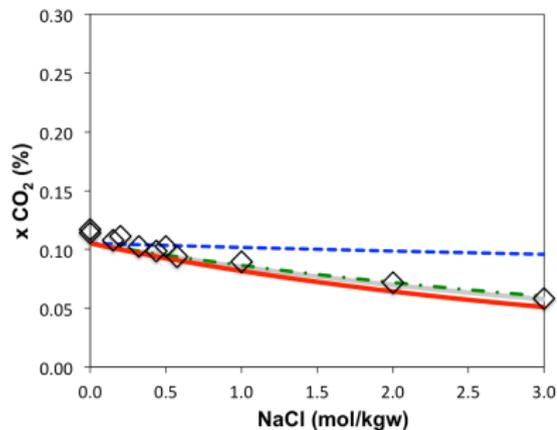
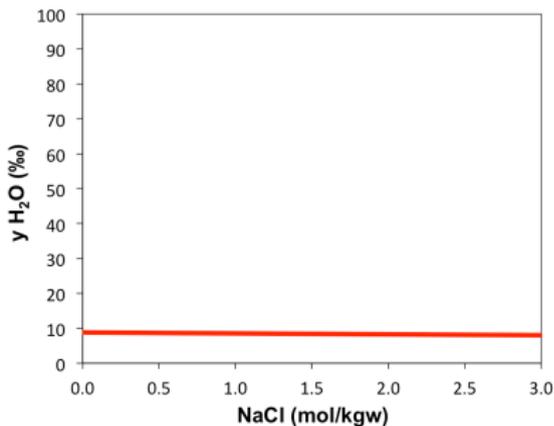
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

Données de Harned & Davis (1943) et Murray & Riley (1971) à $P = 1$ bar.



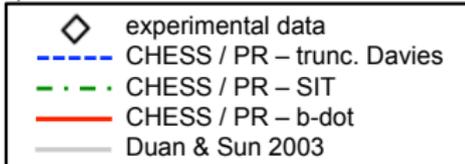
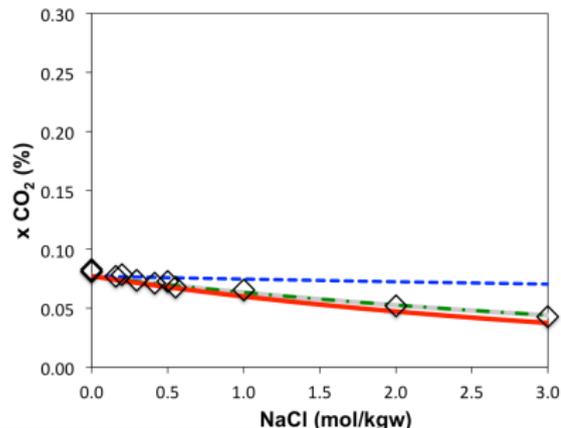
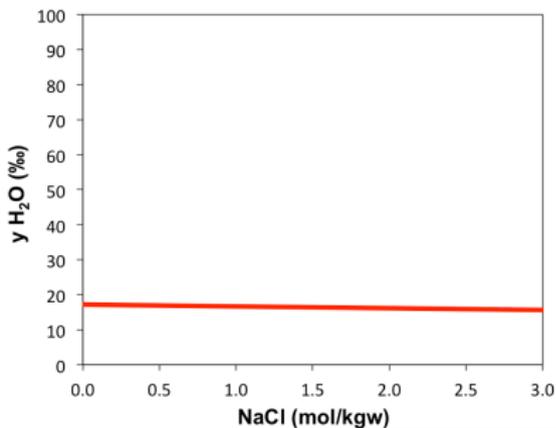
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$P = 1 \text{ bar}, T = 5^\circ\text{C}$



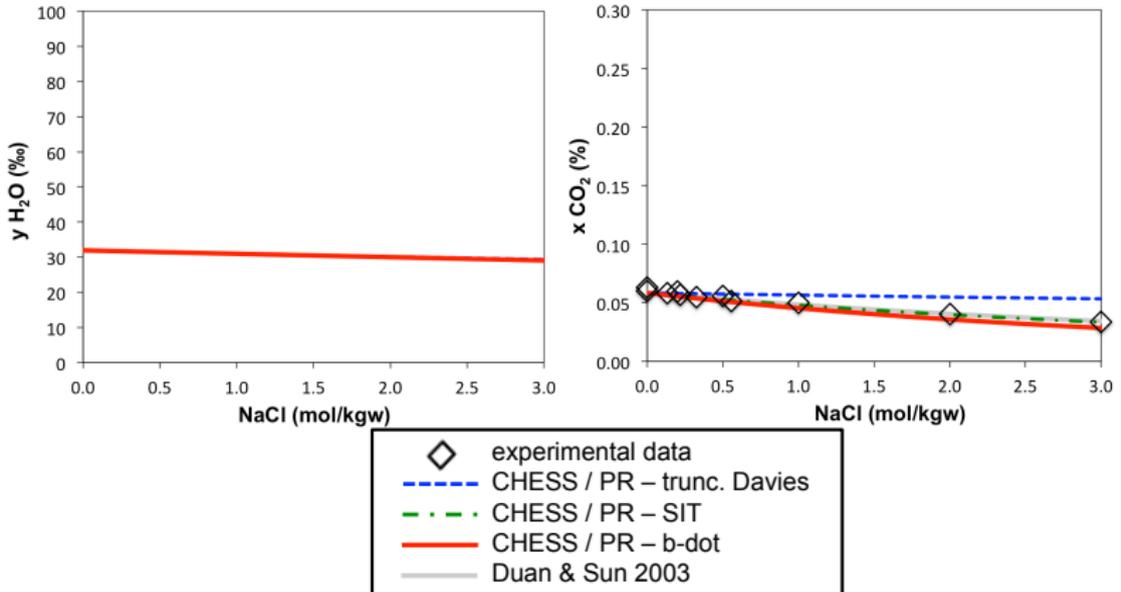
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$P = 1 \text{ bar}, T = 15^\circ\text{C}$



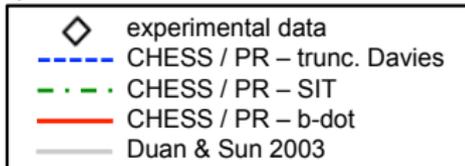
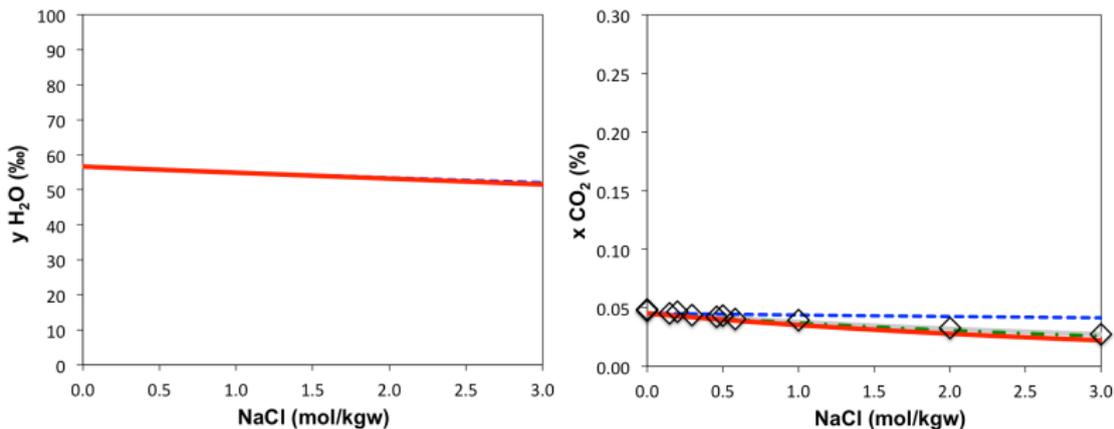
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$P = 1 \text{ bar}, T = 25^\circ\text{C}$



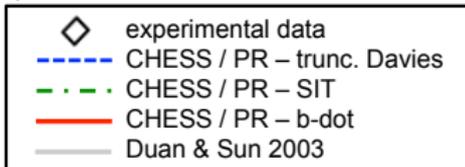
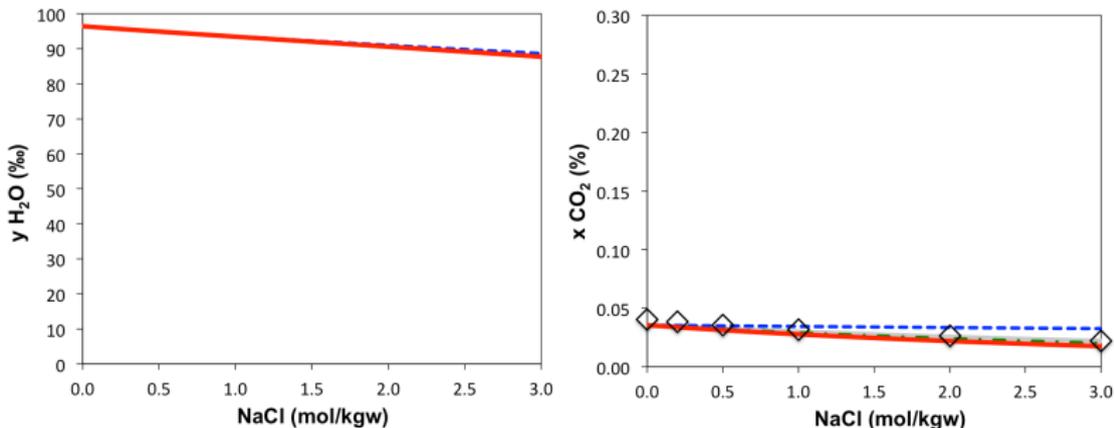
Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$P = 1 \text{ bar}, T = 35^\circ\text{C}$



Interactions Eau-Gaz / solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

$P = 1 \text{ bar}, T = 45^\circ\text{C}$



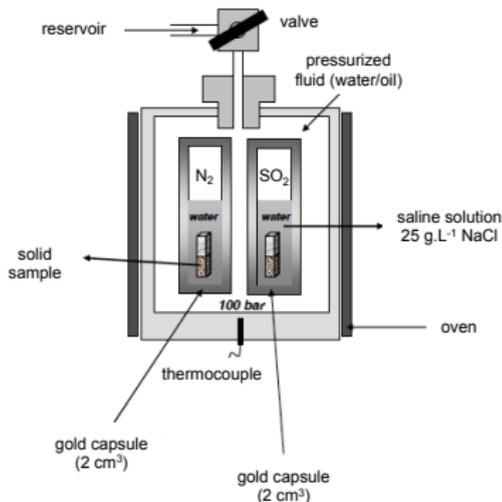
Conclusions sur la modélisation de la solubilité du $\text{CO}_2(\text{g})$ dans une solution chargée en NaCl

- importance d'avoir une représentation précise de la phase aqueuse (*i.e* b-dot et SIT).
- bon accord avec les données jusqu'à une salinité de 4 M (NaCl).
- bon accord avec les autres modèles (ici, Duan & Sun 2003).

Un exemple des Interactions Eau-Gaz-Roche / réactivité du système $\text{SO}_2(\text{g})$ -calcite

Diverses **expériences de réactivité avec différents gaz** ont été réalisées dans le cadre du projet ANR Gaz Annexes et lors de la thèse de Stéphane Renard.

- 150°C , 100 bar de $\text{SO}_2(\text{g})$.
- solution de NaCl à $25 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$.
- eau / calcite = 5 (wt.).
- **2 calcite / $\text{SO}_2(\text{g})$ sont testés : 2.45 et 0.14 (mol.).**

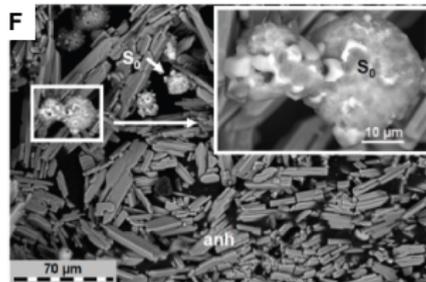
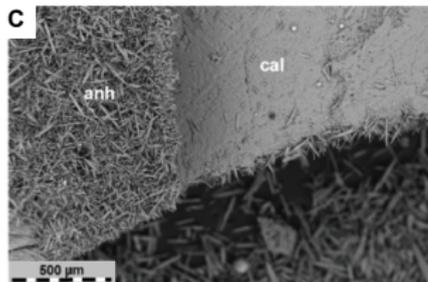
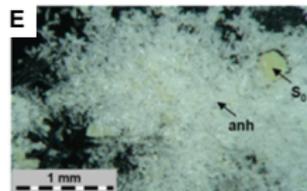
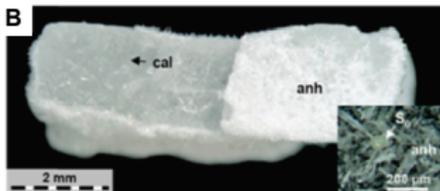


dispositif expérimental utilisé par
Renard 2010

Résultats expérimentaux

$\text{calcite}^0 / \text{SO}_2^0 = 2.45$

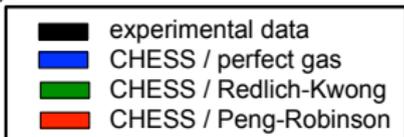
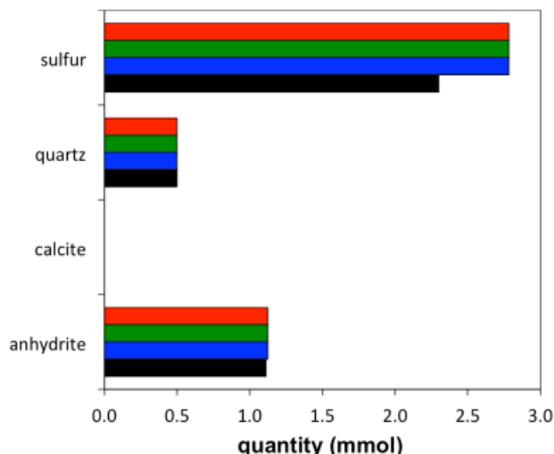
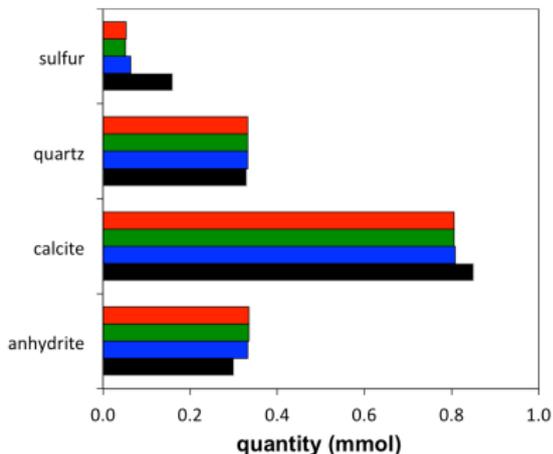
$\text{calcite}^0 / \text{SO}_2^0 = 0.14$



Résultats expérimentaux vs numériques pour les phases minérales

calcite⁰ / $\text{SO}_2^0 = 2.45$

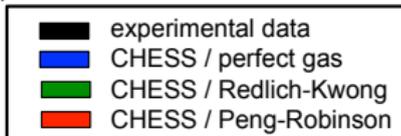
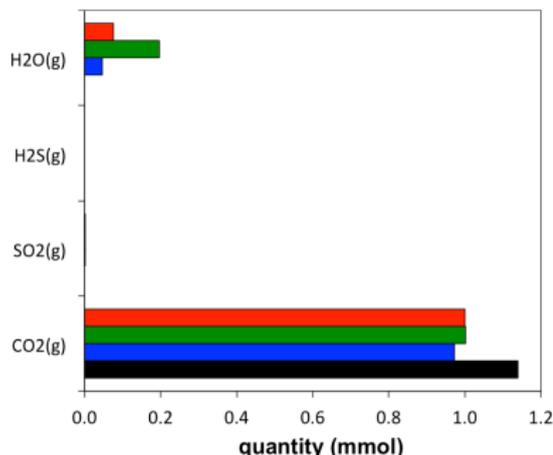
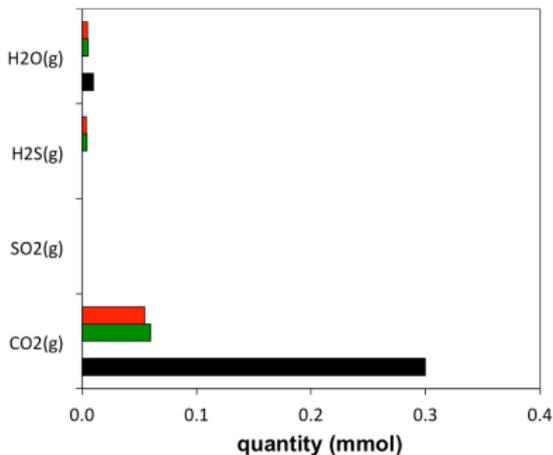
calcite⁰ / $\text{SO}_2^0 = 0.14$



Résultats expérimentaux vs numériques pour les gaz

calcite⁰ / $\text{SO}_2^0 = 2.45$

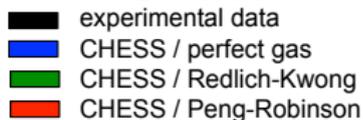
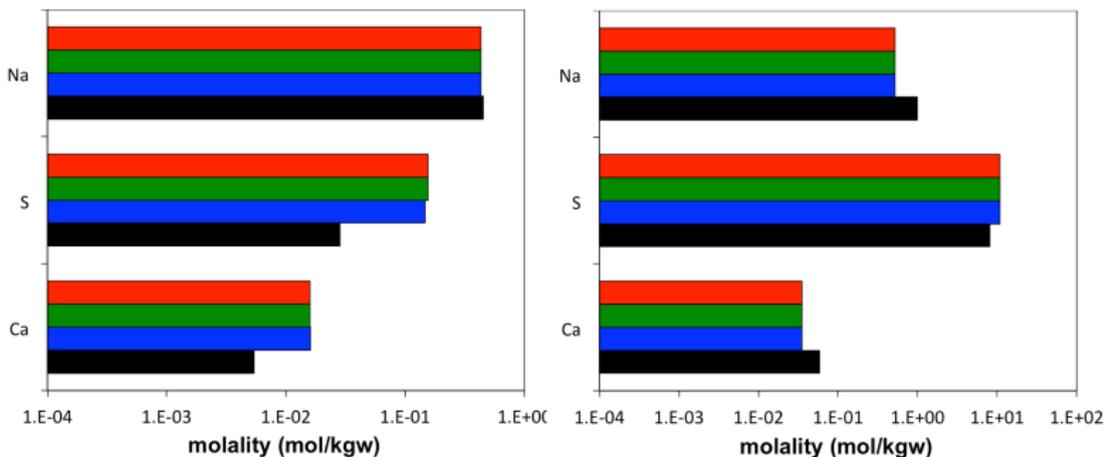
calcite⁰ / $\text{SO}_2^0 = 0.14$



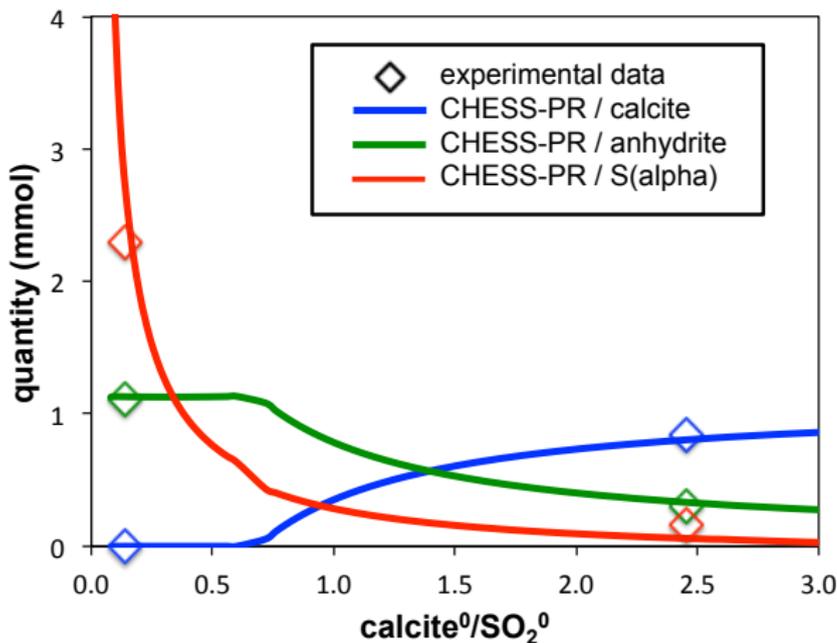
Résultats expérimentaux vs numériques pour la solution aqueuse

calcite⁰ / $\text{SO}_2^0 = 2.45$

calcite⁰ / $\text{SO}_2^0 = 0.14$



Résultats expérimentaux & numériques pour les minéraux vs calcite⁰ / SO_2^0



Conclusions sur la modélisation du système $\text{SO}_2(\text{g})$ - H_2O - NaCl -calcite

- assez bon accord avec les données expérimentales même si le système est complexe.
- la phase gazeuse pourrait être caractérisées plus précisément.
- pas de différence majeure induite par la représentation de la phase gazeuse.
- réactions sont totales.
- le système binaire $\text{SO}_2(\text{g})$ - $\text{CO}_2(\text{g})$ est probablement pas assez contraint dans le modèle.

- les EOS cubiques peuvent facilement être implémentées dans les codes en utilisant la méthode de Cardan.
- le modèle géochimique a été testé à l'échelle du laboratoire sur les mesures de solubilité du système CO₂(g)-H₂O et les expériences de réactivité du système SO₂(g)-H₂O-NaCl-calcite.
- les solubilités d'autres gaz et de mélanges peuvent être simulées numériquement.
- avant le passage à des exemples plus complexes de transport-réactif.