

## Calcul des activités ioniques dans une solution aqueuse

### Programme ACTIVE pour IBM-PC et compatibles

J.P. MONTOROI (1), M. RIEU (2)

(1) Pédologue ORSTOM - BP 1386 - Dakar - Sénégal — (2) Pédologue ORSTOM - 70, route d'Aulnay - 93140 Bondy

#### 1. GÉNÉRALITÉS

Le calcul proposé ici a pour objet d'établir simplement, mais avec une bonne précision, l'activité des ions libres dans une solution aqueuse dont la force ionique n'excède pas 0.1. Il est conçu avant tout pour le traitement des données brutes fournies par le laboratoire après dosage des ions majeurs dans les eaux naturelles.

On ne cherche pas à calculer une distribution exhaustive tenant compte de toutes les espèces possibles en solution : on néglige les paires d'ions formées avec OH<sup>-</sup> et l'on admet que pour une force ionique inférieure à 0.1, la totalité de Na, K et Cl sont sous la forme libre Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup> et Cl<sup>-</sup>. On considère que si l'on tient compte des paires d'ions majeures : CaCO<sub>3</sub><sup>°</sup>, MgCO<sub>3</sub><sup>°</sup>, CaHCO<sub>3</sub><sup>+</sup>, MgHCO<sub>3</sub><sup>+</sup>, H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub><sup>°</sup>, CaSO<sub>4</sub><sup>°</sup>, MgSO<sub>4</sub><sup>°</sup>, la correction obtenue sur les concentrations totales de Ca, Mg, SO<sub>4</sub>, HCO<sub>3</sub> et CO<sub>3</sub> est suffisante pour déterminer avec une bonne précision les concentrations des ions libres correspondants. On fait l'approximation que les paires d'ions non chargées ont un coefficient d'activité égal à 1 et que les paires d'ions monovalentes ont un coefficient d'activité sensiblement égal à celui de HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> (HELGESON, 1969).

##### 1.1. Eléments du calcul

— On dispose des concentrations totales (molalités) de :

K<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, Ca<sup>++</sup>, Mg<sup>++</sup>, Cl<sup>-</sup>, SO<sub>4</sub><sup>-</sup> et du pH ou de la pCO<sub>2</sub>.

— On cherche à déterminer la molalité et l'activité des 18 espèces :

CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub><sup>°</sup>, HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>, CO<sub>3</sub><sup>-</sup>, H<sup>+</sup>, OH<sup>-</sup>, K<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, Ca<sup>++</sup>, Mg<sup>++</sup>, Cl<sup>-</sup>, SO<sub>4</sub><sup>-</sup>, CaHCO<sub>3</sub><sup>+</sup>, MgHCO<sub>3</sub><sup>+</sup>, CaCO<sub>3</sub><sup>°</sup>, CaSO<sub>4</sub><sup>°</sup>, MgCO<sub>3</sub><sup>°</sup>, MgSO<sub>4</sub><sup>°</sup>.

— On dispose des 17 équations suivantes :

(les valeurs et références des constantes thermodynamiques proviennent de FRITZ, 1975).

##### EQUILIBRES DE DISSOCIATION

$[H_2CO_3] / pCO_2 = K_0$	$= 10^{-1.46}$	HELGESON (1969)
$[H_3O^+] \cdot [HCO_3^-] / [H_2CO_3] = K_1$	$= 10^{-6.35}$	calculé à partir de HELGESON (1969) et LANGMUIR (1969)
$[H_3O^+] \cdot [CO_3^{2-}] / [HCO_3^-] = K_2$	$= 10^{-10.32}$	LANGMUIR (1969)
$[H_3O^+] \cdot [OH^-] = K_w$	$= 10^{-14}$	LATIMER (1952)
$[Ca^{++}] \cdot [CO_3^{2-}] / [CaCO_3^{\circ}] = K_4$	$= 10^{-3.20}$	HELGESON (1969)
$[Ca^{++}] \cdot [SO_4^{2-}] / [CaSO_4^{\circ}] = K_5$	$= 10^{-2.31}$	HELGESON (1969)
$[Ca^{++}] \cdot [HCO_3^-] / [CaHCO_3^+] = K_8$	$= 10^{-1.27}$	calculé à partir de BERNER (1971) et LANGMUIR (1969)
$[Mg^{++}] \cdot [CO_3^{2-}] / [MgCO_3^{\circ}] = K_6$	$= 10^{-3.40}$	KHARAKA et BARNES (1973)
$[Mg^{++}] \cdot [SO_4^{2-}] / [MgSO_4^{\circ}] = K_7$	$= 10^{-2.25}$	HELGESON (1969)
$[Mg^{++}] \cdot [HCO_3^-] / [MgHCO_3^+] = K_9$	$= 10^{-0.9}$	KHARAKA et BARNES (1973)

## CONSERVATION DE MASSE

$$K_t = K^+$$

$$Na_t = Na^+$$

$$Cl_t = Cl^-$$

$$Ca_t = Ca^{++} + CaCO_3^\circ + CaSO_4^\circ + CaHCO_3^+$$

$$Mg_t = Mg^{++} + MgCO_3^\circ + MgSO_4^\circ + MgHCO_3^+$$

$$SO_{4t} = SO_4^{=} + CaSO_4^\circ + MgSO_4^\circ$$

## ELECTRONEUTRALITÉ

$$2. (Ca^{++} + Mg^{++} - SO_4^{=} - CO_3^{=}) + K^+ + Na^+ + H^+ + CaHCO_3^+ + MgHCO_3^+ - HCO_3^- - OH^- - Cl^- = 0.$$

pCO<sub>2</sub> ou pH étant connu, on a à résoudre un système de 17 équations à 17 inconnues.

## 1.2. Organisation du calcul

L'activité des ions libres est obtenue en multipliant la concentration de ces derniers par leur coefficient d'activité. Le coefficient d'activité est calculé avec l'expression de DEBYE et HÜCKEL. Dans cette expression apparaît la force ionique de la solution étudiée.

La détermination de la force ionique requiert la connaissance préalable des concentrations de toutes les espèces chargées. Or ces concentrations ne peuvent être déterminées qu'à la suite du calcul de la distribution des espèces totales en paires d'ions et ions libres. Mais le calcul de cette distribution suppose connus les coefficients d'activité.

Le calcul est donc apparemment insoluble.

On le résout par approximations successives (ou itérations convergentes) (1) :

## a) FORCE IONIQUE

## Etape 1

On fixe arbitrairement la force ionique  $I = 0$  ; ce qui implique que les coefficients d'activité  $\gamma_i = 1$ .

— on calcule une première distribution,

— on en déduit un premier jeu de concentrations et activités des ions libres,

— on calcule une première force ionique  $I_1$ .

## Etape 2

— on calcule les coefficients d'activité en utilisant  $I_1$ ,

— on calcule une deuxième distribution,

— on en déduit un deuxième jeu de concentrations et activités des ions libres,

— on calcule une deuxième force ionique  $I_2$ .

Les calculs sont répétés jusqu'à ce que la condition de convergence sur la force ionique soit réalisée :

$$\frac{I_1^{1/2} - I_1^{1/2}}{I_1^{1/2}} \leq 0.005$$

Le calcul de distribution proprement dite est donc répété à chaque itération sur la force ionique. Il consiste en deux boucles de calcul imbriquées, l'une destinée à déterminer la pCO<sub>2</sub> ou le pH et les concentrations des espèces carbonatées, l'autre à « ventiler » les concentrations totales de CO<sub>3</sub><sup>=</sup>, HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>, Ca<sup>++</sup>, Mg<sup>++</sup> et SO<sub>4</sub><sup>=</sup> en ions libres et paires d'ions.

b) PCO<sub>2</sub> (OU PH) ET ESPÈCES CARBONATÉES

pH étant connu, le calcul est initialisé avec une pCO<sub>2</sub> arbitraire (10<sup>-3</sup>). Si c'est la pCO<sub>2</sub> qui est donnée initialement, le calcul est initialisé avec un pH arbitraire (6.5).

On en déduit les activités des espèces carbonatées correspondant à la valeur arbitraire de pCO<sub>2</sub> ou pH :

(1) Les algorithmes utilisés dans ce calcul sont une adaptation de ceux que DUFÉY *et al.* (1979) utilisent dans le sous-programme « EQU SOL » du programme « SOPREC » (FORTRAN IV).

$$\begin{aligned}
 [\text{H}_3\text{O}^+] &= 10^{-\text{pH}} \\
 [\text{H}_2\text{CO}_3] &= K_0 \cdot \text{pCO}_2 \\
 [\text{HCO}_3^-] &= K_1 \cdot [\text{H}_2\text{CO}_3] / [\text{H}_3\text{O}^+] \\
 [\text{CO}_3^{2-}] &= K_2 \cdot [\text{HCO}_3^-] / [\text{H}_3\text{O}^+] \\
 [\text{OH}^-] &= K_w / [\text{H}_3\text{O}^+]
 \end{aligned}$$

Les valeurs ainsi calculées ne sont pas réalistes. Elles sont toutefois utilisées dans un premier temps pour le calcul de la distribution des paires d'ions. Toutes les espèces étant ainsi déterminées, on calcule le bilan électrique  $EN_1$ .

On incrémente ensuite pH ou log pCO<sub>2</sub> de + 0.5 et on répète le calcul. On en déduit un bilan électrique  $EN_2$ .

\* Si  $EN_2$  est d'un signe différent de  $EN_1$ , on répète le calcul avec des incréments successifs de - 0.1 jusqu'à un deuxième changement de signe.

\* Si  $EN_2$  est du signe de  $EN_1$ , mais plus petit, on répète le calcul avec des incréments successifs de + 0,5 jusqu'à obtention du changement de signe. On est alors ramené au cas précédent.

\* Si  $EN_2$  est du signe de  $EN_1$ , mais plus grand, on répète le calcul avec des incréments successifs de - 0.5 jusqu'à obtention du changement de signe. On est alors ramené au premier cas.

Un deuxième changement de signe de EN étant obtenu, on répète encore le calcul en divisant l'incrément utilisé par - 5 jusqu'à un 3<sup>e</sup> changement de signe, etc., jusqu'au 5<sup>e</sup> changement de signe. pH ou pCO<sub>2</sub> est déterminé à 0.0008 unités près :

$$\text{pH initial} = 6.5 \text{ ou } \log \text{pCO}_2 = - 3$$

1 <sup>er</sup> incrément	± 0.5	→	1 <sup>er</sup> changement de signe		
2 <sup>e</sup> me	" ± 0.1	→	2 <sup>e</sup> me	" "	" "
3 <sup>e</sup> me	" ± 0.02	→	3 <sup>e</sup> me	" "	" "
4 <sup>e</sup> me	" ± 0.004	→	4 <sup>e</sup> me	" "	" "
5 <sup>e</sup> me	" ± 0,0008	→	5 <sup>e</sup> me	" "	" "

→ STOP

### c) PAIRES D'IONS

Au sein de chaque itération sur pH/pCO<sub>2</sub>, on calcule les concentrations des paires d'ions :

[CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>] et [HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>] ont été déterminés à la suite de l'incrément de pH ou pCO<sub>2</sub>.

On utilise une boucle de calcul convergente :

$$\begin{aligned}
 [\text{CaSO}_4^\circ] &= [\text{Ca}^{\dagger\dagger}] \cdot [\text{SO}_{4j-1}^{--}] / K_5 \\
 [\text{CaCO}_3^\circ] &= [\text{Ca}^{\dagger\dagger}] \cdot [\text{CO}_3^{2-}] / K_4 \\
 [\text{CaHCO}_3^+] &= [\text{Ca}^{\dagger\dagger}] \cdot [\text{HCO}_3^-] / K_8 \\
 \text{Ca}_{\text{pij}} &= [\text{CaSO}_4^\circ] + [\text{CaCO}_3^\circ] + [\text{CaHCO}_3^+] / \gamma\text{HCO}_3^-
 \end{aligned}$$

$$\text{Ca}_j^{++} = \text{Ca}_t / (1 + \frac{\text{Ca}_{\text{pij}}}{\text{Ca}^{\dagger\dagger}}) \text{ et } [\text{Ca}_j^{++}] = \gamma\text{Ca} \cdot \text{Ca}_j^{++}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{MgSO}_4^\circ] &= [\text{Mg}^{\dagger\dagger}] \cdot [\text{SO}_{4j-1}^{--}] / K_7 \\
 [\text{MgCO}_3^\circ] &= [\text{Mg}^{\dagger\dagger}] \cdot [\text{CO}_3^{2-}] / K_6 \\
 [\text{MgHCO}_3^+] &= [\text{Mg}^{\dagger\dagger}] \cdot [\text{HCO}_3^-] / K_9 \\
 \text{Mg}_{\text{pij}} &= [\text{MgSO}_4^\circ] + [\text{MgCO}_3^\circ] + [\text{MgHCO}_3^+] / \gamma\text{HCO}_3^-
 \end{aligned}$$

$$\text{Mg}_j^{++} = \text{Mg}_t / (1 + \frac{\text{Mg}_{\text{pij}}}{\text{Mg}^{\dagger\dagger}}) \text{ et } [\text{Mg}_j^{++}] = \gamma\text{Mg} \cdot \text{Mg}_j^{++}$$

$$\text{SO}_{4ij} = [\text{CaSO}_4^\circ] + [\text{MgSO}_4^\circ]$$

$$\text{SO}_{4j}^{--} = \text{SO}_{4t} / (1 + \frac{\text{SO}_{4\text{pij}}}{\text{SO}_{4j-1}^{--}}) \text{ et } [\text{SO}_{4j}^{--}] = \gamma\text{SO}_4 \cdot \text{SO}_{4j}^{--}$$

Lors du premier passage, on ne dispose pas de valeurs de  $[\text{Ca}^{\dagger\dagger}]$ ,  $[\text{Mg}^{\dagger\dagger}]$  et  $[\text{SO}_{4j-1}^{--}]$ . On utilise les concentrations totales ( $\gamma$  est égal à 1).

De même, le coefficient d'activité de HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> utilisé pour le calcul de l'activité des paires d'ions chargées est égal à 1 lors du premier passage. Par la suite, on a :

$$\begin{aligned}
 \text{CaHCO}_3^+ &= [\text{CaHCO}_3^+] / \gamma\text{HCO}_3^- \\
 \text{et } \text{MgHCO}_3^+ &= [\text{MgHCO}_3^+] / \gamma\text{HCO}_3^-
 \end{aligned}$$

Par contre, le coefficient d'activité des paires d'ions non chargées est toujours égal à l'unité et on a :

$$\text{CaCO}_3^\circ = [\text{CaCO}_3^\circ], \text{ MgCO}_3^\circ = [\text{MgCO}_3^\circ].$$

Au sein d'une même boucle du calcul de pH ou pCO<sub>2</sub>, l'ensemble de calcul des paires d'ions est répété jusqu'à ce que chaque sous-ensemble (Ca, Mg, SO<sub>4</sub>) fournisse deux calculs successifs identiques de Ca<sub>j</sub><sup>++</sup>, Mg<sub>j</sub><sup>++</sup>, et SO<sub>4j</sub><sup>--</sup>.

On dispose alors d'une estimation cohérente (du point de vue de la masse mais pas nécessairement de la charge électrique) de  $\text{HCO}_3^-$ ,  $\text{CO}_3^{--}$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{Ca}^{++}$ ,  $\text{Mg}^{++}$ ,  $\text{CaHCO}_3^+$ ,  $\text{MgHCO}_3^+$ ,  $\text{SO}_4^{--}$ . Par ailleurs,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Na}^+$  et  $\text{K}^+$  sont connus. On peut alors calculer le bilan électrique EN et retourner au début de la boucle de calcul de pH ou  $\text{pCO}_2$  pour une nouvelle incrémentation.

Le pH ou la  $\text{pCO}_2$  ayant été déterminé avec la précision prévue, on a une distribution cohérente du point de vue de la masse et de la charge. Toutefois, les coefficients d'activité utilisés ne sont pas nécessairement exacts tant que la force ionique n'est pas déterminée avec précision. A l'issue de la boucle sur pH ou  $\text{pCO}_2$ , on retourne au début de la boucle force ionique pour une répétition générale des calculs jusqu'à ce que le test de convergence de la force ionique soit positif.

## 2. INSTRUCTIONS D'UTILISATION POUR IBM-PC ET COMPATIBLES

### 2.1. Chargement du programme

Après s'être placé sous système MS-DOS, charger l'utilitaire GWBASIC. Retirer la disquette système et introduire la disquette source dans le lecteur A. Charger en mémoire le programme ACTIVE.

### 2.2. Exécution du programme

#### 2.2.1. INTRODUCTION DES DONNÉES INITIALES

Lancer l'exécution : le message « Donner un nom de référence à la solution aqueuse prélevée (en 20 caractères maximum) » s'affiche à l'écran. Après réponse, succède un second message : « CALCUL A pH OU A  $\text{pCO}_2$  FIXE ? Taper votre option (1 ou 2) ».

Répondre en donnant le numéro de l'option choisie (suivi de [RETURN]), selon que l'on souhaite effectuer le calcul avec un pH donné ou une  $\text{pCO}_2$  donnée (toute autre information entrée provoque la reformulation de la question). La valeur de ce pH ou de cette  $\text{pCO}_2$  est alors demandée à l'écran : l'écrire et frapper [RETURN]. Pour la  $\text{pCO}_2$ , une étape intermédiaire tient compte du fait qu'elle peut être exprimée, soit sous forme décimale, soit sous la forme  $10^{-x}$  : dans le premier cas taper 1 et entrer la valeur numérique, dans le second cas taper 2 et introduire uniquement la valeur de X (réitération de la demande si mauvaise frappe du N° de l'option).

Le message qui apparaît ensuite annonce l'introduction des concentrations totales d'anions et de cations, exprimées soit en moles/l, soit en meq/l, soit en g/l (unités les plus couramment utilisées pour les analyses d'eau). Les messages K t = ?, Na t = ?, Ca t = ?, Mg t = ?, Cl t = ?,  $\text{SO}_4$  t = ?, s'affichent successivement en frappant la touche [RETURN] : à chaque interrogation, entrer la valeur numérique de la concentration correspondante (en conservant toujours la même unité).

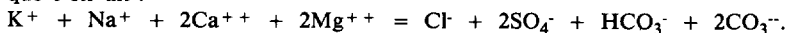
Si les concentrations totales ne sont pas exprimées en moles/l, le programme les convertit ensuite automatiquement. Pour cela, introduire le numéro correspondant à l'unité utilisée lors de l'étape précédente, à savoir 1 pour moles/l, 2 pour meq/l ou 3 pour g/l (1).

Le jeu de données initiales, exprimées en moles/l, s'affiche directement à l'écran. Si l'on désire imprimer ces données, taper la lettre « O » (mettre l'imprimante en position « ON LINE », si ce n'était déjà fait).

#### 2.2.2. DÉROULEMENT DU CALCUL

A chaque commencement d'une boucle générale de calcul (convergence de la force ionique = lignes 1320 à 2530), un symbole « # » s'affiche au-dessous de l'indication « Début d'une itération signalée par le signe # ». Il faut compter 2 à 4 itérations pour le traitement d'une eau naturelle. A l'issue de la dernière boucle, le nombre d'itérations exécutées est affiché. La durée moyenne d'un calcul, sans impressions, est de l'ordre d'une dizaine de secondes sur IBM-PC.

(1) Une des fonctions du programme est de rechercher les molalités de  $\text{HCO}_3^-$  et  $\text{CO}_3^{--}$  en équilibre avec pH et  $\text{pCO}_2$  et telles que l'on ait :



On doit donc introduire des données initiales telles que :

$\text{K}^+ + \text{Na}^+ + 2\text{Ca}^{++} + 2\text{Mg}^{++} \geq \text{Cl}^- + 2\text{SO}_4^-$ . Si tel n'est pas le cas, devant l'impossibilité de calculer  $\text{HCO}_3^- + 2\text{CO}_3^{--} < 0$ , le calcul sera abandonné avec le message d'erreur : PAS DE CONVERGENCE DE L'ÉLECTRONEUTRALITÉ.

### 2.2.3. SORTIE DES RÉSULTATS

Tous les résultats sont stockés automatiquement dans un fichier séquentiel dont le nom est la référence donnée en début d'exécution (attention, seuls les 8 premiers caractères sont pris en compte). Le fichier est créé sur l'unité par défaut (lecteur A ou disque dur s'il existe), soit sur la disquette source si elle est restée dans le lecteur A, soit sur toute autre disquette formatée, placée dans ce lecteur.

Les résultats peuvent être affichés et/ou imprimés selon la réponse aux options proposés à l'écran. Ils sont répartis en deux rubriques principales :

*Distribution des espèces, exprimées en molalités et en activité.*

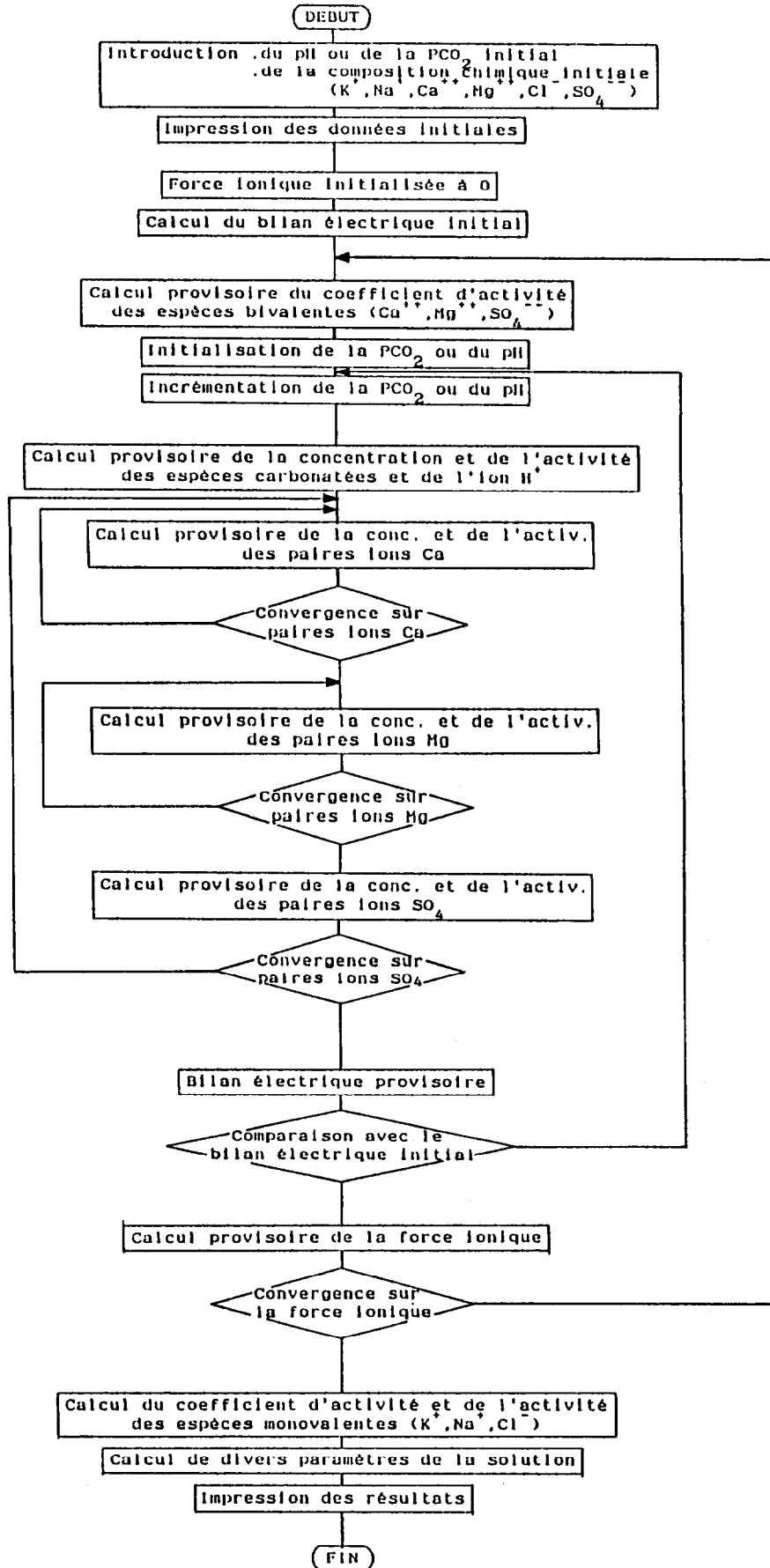
*Caractéristiques de la solution :*

pH, pCO<sub>2</sub>, force ionique, SAR, résidu sec, Kps et produit ionique de la calcite et du gypse, bilan électrique. Le SAR mé/1 est calculé à partir des molalités totales de Na, Ca et Mg par la relation :  $SAR\ mé/1 = 10^{-1.5} \times Na.(Ca + Mg)^{-1/2}$ . Le SAR activités est calculé par une relation identique mais à partir des activités Na, Ca et Mg (RIEU, 1980). La conductivité électrique (EC) est calculée par la relation  $I = 0,0127 EC - 0,003$  (GRIFFIN et JURINAK, 1973), l'activité de l'eau (AW) par  $AW = 1 - 0,0331 \times I$  (valable pour  $0 < I < 1$  ; extrait du diagramme de  $a_w/\nu m$  de ROBINSON et STOCKES, 1959) et la pression osmotique (PO) par  $PO = 1.403.147,5 \times \ln AW$  (valable pour  $T = 25^\circ C$  ; BOURRIE et PEDRO, 1979).

## 3. IDENTIFICATION DES VARIABLES UTILISÉES (92)

D0	Concentration initiale (moles/l)Na t	B7	" Mg <sup>++</sup> (=A7)
D1	" " " K t	J8	Molalité SO <sub>4</sub> <sup>---</sup> (=I8)
D2	" " " Cl t	P0	Molalité/activité H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> <sup>*</sup>
D3	Switch : calcul à pH fixé / PCO <sub>2</sub> fixée	P1	" " CaCO <sub>3</sub> <sup>*</sup>
D4	pH ou PCO <sub>2</sub>	P2	" " CaSO <sub>4</sub> <sup>*</sup>
D6	Concentration initiale (moles/l)Ca t	P3	" " MgCO <sub>3</sub> <sup>*</sup>
D7	" " " Mg t	P4	" " MgSO <sub>4</sub> <sup>*</sup>
D8	" " " SO <sub>4</sub> t	P5	Molalité CaHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>
C(0)	Coefficient activité Na <sup>+</sup>	P6	" MgHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>
C(1)	" " K <sup>+</sup>	P7	Activité CaHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>
C(2)	" " Cl <sup>-</sup>	P8	" MgHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>
C(3)	" " H <sup>+</sup>	E0	Somme des charges positives (données initiales)
C(4)	" " OH <sup>-</sup>	E1	" " " " ( " " " )
C(5)	" " HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	E2	Valeur absolue de E0 x 10 <sup>-4</sup> ou E1 x 10 <sup>-4</sup>
C(6)	" " Ca <sup>++</sup>	F0	Racine carrée force ionique
C(7)	" " Mg <sup>++</sup>	F1	" " " " (=F0)
C(8)	" " SO <sub>4</sub> <sup>---</sup>	X0	Incrément pH ou PCO <sub>2</sub>
C(9)	" " CO <sub>3</sub> <sup>---</sup>	X1	Signe de l'incrément de pH ou PCO <sub>2</sub>
A0	Activité Na <sup>+</sup>	X2	Valeur initiale de pH ou PCO <sub>2</sub>
A1	" K <sup>+</sup>	X3	Nombre divisions/5 de l'incrément pH ou PCO <sub>2</sub>
A2	" Cl <sup>-</sup>	X4	Nombre total incréments pH ou PCO <sub>2</sub>
A3	" H <sup>+</sup>	X5	Switch utilisé dans l'incrément pH/PCO <sub>2</sub>
A4	" OH <sup>-</sup>	X6	Valeur intermédiaire du pH ou PCO <sub>2</sub>
A5	" HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	K	Indice de boucle (calcul coeff.activité)
A6	" Ca <sup>++</sup>	J	Nombre itérations (boucle générale force ionique)
A7	" Mg <sup>++</sup>	R	Numéro choix option
A8	" SO <sub>4</sub> <sup>---</sup>	U, S	" " "
A9	" CO <sub>3</sub> <sup>---</sup>	R\$	Chaîne caractères
I0	Molalité Na <sup>+</sup>	N\$	Chaîne caractères ou nom de fichier
I1	" K <sup>+</sup>	T	Réalisation test convergence force ionique
I2	" Cl <sup>-</sup>	S0	Force ionique
I3	" H <sup>+</sup>	S1	pH
I4	" OH <sup>-</sup>	S2	PCO <sub>2</sub>
I5	" HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	S3	SAR activités solution finale
I6	" Ca <sup>++</sup>	S9	SAR molalités " "
I7	" Mg <sup>++</sup>	S4	Produit activités Ca <sup>++</sup> .CO <sub>3</sub> <sup>---</sup>
I8	" SO <sub>4</sub> <sup>---</sup>	S5	" " Ca <sup>++</sup> .SO <sub>4</sub> <sup>---</sup>
I9	" CO <sub>3</sub> <sup>---</sup>	S6	Somme equiv. cations - somme equiv. anions
N6	Nombre itérations boucle paire d'ions Ca	S7	idem S6
N7	" " " " " Mg	S8	- log (PCO <sub>2</sub> )
N8	" " " " " SO <sub>4</sub>	AW	Activité eau
M6	Ca immobilisé dans paires d'ions Ca	AZ	log AW
M7	Mg " " " " Mg	EC	Conductivité électrique
M8	SO <sub>4</sub> " " " " SO <sub>4</sub>	PF	pF osmotique
B6	Activité Ca <sup>++</sup> (=A6)	PO	Potential osmotique
		RS	Résidu sec

4. ORGANIGRAMME



## 5. PROGRAMME (ÉCRIT EN GWBASIC ; 17,5 KOCTETS)

```

10 '
20 '
30 '      EEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEE
40 '      & PROGRAMME DE CALCUL DES ACTIVITES IONIQUES (ACTIVE) &
50 '      EEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEEE
60 '
70 '
80 '.....
90 '      *** INTRODUCTION DES DONNEES INITIALES ***
100 '.....
110 '
120 '
130 CLEAR:CLS
140 KEY OFF
150 PRINT "+++ INTRODUCTION DES DONNEES INITIALES +++":PRINT:PRINT
160 INPUT "Donner un nom de référence à la solution aqueuse prélevée (en 20 ca
ractères maximum) ";N0
170 IF LEN(N0)>20 THEN 160
180 PRINT:PRINT
190 '
200 '      -----
210 '      * *   pH ou PCO2 initial   * *
220 '      -----
230 INPUT "CALCUL A pH OU PCO2 FIXE ?          Taper votre option (1 ou 2)";D3
240 PRINT
250   IF D3<<1 AND D3><2 THEN 230
260   IF D3=1 THEN 270 ELSE 320
270   CLS:PRINT "pH FIXE"
280   INPUT " Donner la valeur du pH:";D4
290   IF D4<0 XOR D4>14 THEN 280
300   GOTO 470
310 '
320   CLS:PRINT "PCO2 FIXE"
330   PRINT " La PCO2 peut être exprimée .soit par une valeur décima
le (1)                                     (-X)
                                           .soit sous la forme 10
(2)"
340   PRINT
350   INPUT "          Quel est votre cas";R:PRINT
360   IF R><1 AND R><2 THEN 330
370   IF R=1 THEN 380 ELSE 410
380   INPUT "          Donner la valeur de la PCO2:";D4
390   GOTO 470
400 '
410   INPUT "          Donner la valeur de -LOG(PCO2) ou de X:";
X
420   D4=10^(-X)
430 '
440 '      -----
450 '      * *   Concentrations totales initiales   * *
460 '      -----
470 CLS:PRINT "Donner les valeurs des concentrations totales initiales exprimé
es soit en moles/l, soit en meq/l, soit en g/l:"
480 INPUT "          K t= ";D1:INPUT "          Na t= ";D0:INPUT "          Ca t= ";D6
490 INPUT "          Mg t= ";D7:INPUT "          Cl t= ";D2:INPUT "          SO4 t= ";D8
500 PRINT:PRINT
510 '
520 '      -----
530 '      * *   Conversion d'unité:meq/l et g/l en moles/l   * *
540 '      -----
550 INPUT "Quelle est l'unité employée:.moles/l (1)
                                           .meq/l (2)

```



```

                                .g/1      (3)      Taper un chiffre";U
560      IF U=1 THEN 670
570          IF U=2 THEN 620
580              IF U=3 THEN 590 ELSE 550
590                  DO=DO/23:D1=D1/39.1:D2=D2/35.5
600                      D6=D6/40.1:D7=D7/24.3:D8=D8/96
610                          GOTO 670
620                  DO=DO*10^(-3):D1=D1*10^(-3):D2=D2*10^(-3)
630                      D6=(D6/2)*10^(-3):D7=(D7/2)*10^(-3):D8=(D8/2)*10^(-3)
640      '
650      '
660      '.....
670      '          *** IMPRESSION DES DONNEES INITIALES ***
680      '.....
690      '
700      '
710      CLS:PRINT "+++ DONNEES INITIALES +++":PRINT
720          IF D3=1 THEN 730 ELSE 750
730              PRINT "      pH      ";USING"###.###";D4
740                  GOTO 760
750              PRINT "      PCO2     ";USING"##.###****";D4
760                  PRINT
770              PRINT" Molalités (moles/l):"
780                  PRINT "      K t      ";USING"##.###****";D1
790                  PRINT "      Na t     ";USING"##.###****";D0
800                  PRINT "      Ca t     ";USING"##.###****";D6
810                  PRINT "      Mg t     ";USING"##.###****";D7
820                  PRINT "      Cl t     ";USING"##.###****";D2
830                  PRINT "      SO4 t    ";USING"##.###****";D8
840              PRINT:PRINT:PRINT:PRINT:PRINT:PRINT
850
860      INPUT "Voulez-vous l'impression des données initiales (O/N)";R0
870          IF R0="O" XOR R0="o" THEN 880 ELSE 1060
880              PRINT:PRINT:PRINT:PRINT "Mettre l'imprimante en position ON ..."
890                  LPRINT "+++ DONNEES INITIALES +++":LPRINT
900                      IF D3=1 THEN 910 ELSE 930
910                          LPRINT "      pH      ";USING"###.###";D4
920                              GOTO 940
930                          LPRINT "      PCO2     ";USING"##.###****";D4
940                              LPRINT
950                          LPRINT "      Molalités (moles/l):"
960                              LPRINT "      K t      ";USING"##.###****";D1
970                              LPRINT "      Na t     ";USING"##.###****";D0
980                              LPRINT "      Ca t     ";USING"##.###****";D6
990                              LPRINT "      Mg t     ";USING"##.###****";D7
1000                             LPRINT "      Cl t     ";USING"##.###****";D2
1010                             LPRINT "      SO4 t    ";USING"##.###****";D8
1020                             LPRINT:LPRINT:LPRINT:LPRINT:LPRINT:LPRINT
1030      '
1040      '
1050      '.....
1060      '          *** CALCUL PAR ITERATIONS CONVERGENTES ***
1070      '.....
1080      '
1090      '
1100      '
1110      '          -----
1120      '          * *   Bilan électrique initial /Initialisations   * *
1130      '          -----
1130      EO=ABS(2*(D6+D7)+DO+D1)
1140      E1=ABS(2*D8+D2)
1150          IF EO>E1 THEN E2=EO*.0001 ELSE E2=E1*.0001
1160          IF E2<.000001 THEN E2=.000001
1170
1180      IF D3>1 THEN 1190 ELSE 1210
1190          S2=D4:P0=S2*.0338
1200          GOTO 1230

```

```

1210      S1=D4:A3=10^(-S1)
1220      '
1230      F1=FO
1240      IO=D0:I1=D1:I2=D2:I6=D6:I7=D7:I8=D8
1250      A6=D6:A7=D7:A8=D8
1260      '
1270      ' -----
1280      ' * * Calcul provisoire du coefficient d'activité
          ' de H, OH, HCO3, Ca, Mg, SO4, CO3 * *
1290      ' -----
1300      DATA 9,3.5,4.5,6,8,4,4.5
1310      CLS:PRINT "Début d'une itération signalée par le signe £"
1320      J=J+1
1330      PRINT "£"
1340      RESTORE 1300
1350      READ C(3),C(4),C(5),C(6),C(7),C(8),C(9)
1360      FOR K=3 TO 5
1370      C(K)=10^(-.509*FO/(1+(.329*FO*C(K))))
1380      NEXT K
1390      '
1400      FOR K=6 TO 9
1410      C(K)= 10^(-.509*4*FO/(1+(.329*FO*C(K))))
1420      NEXT K
1430      '
1440      ' -----
1450      ' * * Calcul provisoire de la concentration et de l'activité
          ' de H, OH, HCO3, CO3, H2CO3 * *
1460      ' -----
1470      X1=1:X0=.5
1480      IF D3>1 THEN 1490 ELSE 1510
1490      X2=6.5
1500      GOTO 1530
1510      X2=3
1520      '
1530      X3=0:X4=0:X5=0
1540      X6=X2*X0*X1
1550      X4=X4+1
1560      IF X4>625 THEN 2220
1570      IF X6<0 XOR X6>14 THEN 2220
1580      IF D3>1 THEN 1590 ELSE 1610
1590      A3=10^(-X6)
1600      GOTO 1630
1610      S2=10^(-X6)
1620      PO=S2*.03467
1630      '
1640      A5=4.47E-07*PO/A3
1650      A9=4.7863E-11*A5/A3
1660      A4=1E-14/A3
1670      I5=A5/C(5):I9=A9/C(9):I4=A4/C(4):I3=A3/C(3)
1680      '
1690      J8=I8
1700      '
1710      ' -----
1720      ' * * Calcul provisoire de la concentration et de l'activité
          ' de Ca, Mg, SO4, CaHCO3, MgHCO3, CaCO3, CaSO4, MgSO4, MgCO3 * *
1730      ' -----
1740      M8=1
1750      IF D6<=1E-08 THEN 1860
1760      B6=A6:M6=1
1770      P2=A6*A8/.004898
1780      P1=A6*A9/.000631
1785      P5=A6*A5/(.0537*C(5))
1790      M6=P2*P1*P5
1800      I6=D6/(1+M6/I6)
1810      A6=I6*C(6)
1820      IF (1-A6/B6)<=.01 THEN 1860

```

```

1830          B6=A6*N6=N6+1
1840          IF N6>30 THEN 1860 ELSE 1770
1850
1860          IF D7<=1E-08 THEN 1970
1870          B7=A7*N7=1
1880          P4=A7*A8/.00562
1890          P3=A7*A9/.000398
1895          P6=A7*A5/(.1259+C(5))
1900          M7=P4+P3+P6
1910          I7=D7/(1+M7/I7)
1920          A7=I7*C(7)
1930          IF (1-A7/B7)<=.01 THEN 1970
1940          B7=A7*M7=M7+1
1950          IF M7>30 THEN 1970 ELSE 1880
1960
1970          IF D8<=1E-08 THEN 2040
1980          M8=P2+P4
1990          I8=D8/(1+M8/I8)
2000          A8=I8*C(8)
2010          IF (1-I8/J8)<=.01 THEN 2040
2020          J8=I8*N8=N8+1
2030          IF N8>30 THEN 2040 ELSE 1750
2040
2050          -----
2060          * *   Calcul du nouveau bilan électrique
                / Comparaison avec le bilan initial * *
2070          -----
2080          S6=2*(I6+I7-I8-I9)+I0+I1+I3-I2-I4-I5+P5+P6
2090          IF ABS(S6)<E2 THEN 2220
2100          IF X4<=1 THEN 2190
2110          IF S6*S7>=0 THEN 2160
2120          X3=X3+1;X5=1
2130          IF X3>4 THEN 2220
2140          X0=X0/5
2150          GOTO 2180
2160          IF X5=1 THEN 2190
2170          IF ABS(S6)<ABS(S7) THEN 2190
2180          X1=-X1
2190          X2=X6;S7=S6
2200          GOTO 1540
2210
2220          IF X4>625 THEN 2230 ELSE 2250
2230          PRINT "SYSTEME IMPOSSIBLE"
2240          STOP
2250          IF X6<0 XOR X6>14 THEN 2260 ELSE 2280
2260          PRINT "NON CONVERGENCE DE L'ELECTRONEUTRALITE"
2270          END
2280
2290          -----
2300          * *   Calcul du pH, de -LOG(PCO2) et de la force ionique * *
2310          -----
2320          S1=-LOG(A3)/LOG(10)
2330          S8=-LOG(S2)/LOG(10)
2340
2350          S0=2*(I6+I7+I8+I9)+.5*(I0+I1+I2+I3+I4+I5+P5+P6)
2360          FO=S0*.5
2370
2380          -----
2390          * *   Test de convergence sur la force ionique * *
2400          -----
2410          IF (FO+F1)=0 THEN 2490
2420          IF FO-F1=0 THEN 2460
2430          T=ABS(1-F1/FO)-.005
2440          GOTO 2500
2450
2460          T=1

```

```

2470      GOTO 2500
2480
2490      T=0
2500     IF T<=0 THEN 2540
2510     F1=FO
2520     ERASE C
2530     GOTO 1320
2540     PRINT
2550     PRINT "Nombre d'itérations =",J
2560     '
2570     ' -----
2580     ' * * Calcul du coefficient d'activité et de l'activité
                de CaHCO3, MgHCO3, Na, K, Cl * *
2590     ' -----
2600     DATA 4.5,3,3
2610     READ C(0),C(1),C(2)
2620     FOR K=0 TO 2
2630     C(K)=10^(-.509*FO/(1+(.329*FO*C(K))))
2640     NEXT K
2650     '
2660     A0=I0*C(0);A1=I1*C(1);A2=I2*C(2)
2670     P7=P5*C(5);P8=P6*C(5)
2680     ' -----
2690     ' * * Calcul des produits ioniques, de la conductivité
                électrique, du SAR et du résidus sec * *
2700     ' -----
2710     S4=A6*A9
2720     S5=A6*A8
2730     '
2740     EC=78.74*S0+.236
2750     '
2760     S3=(A0/((A6+A7)^.5))*10^1.5
2770     S9=(I0/((I6+I7)^.5))*10^1.5
2780     RS=D0*23+D1*33.1+D2*35.5+D6*40.1+D7*24.3+D8*96+I5*61+P0*62+(I9+P1+P3)*60
2790     '
2800     ' -----
2810     ' * * Calcul de l'activité de l'eau,
                du potentiel et du pF osmotique * *
2820     ' -----
2830     AW=1-.0331*S0
2840     AZ=LOG(AW)/LOG(10)
2850     PO=1403147.5E*LOG(AW)
2860     '
2870     PF=LOG(-PO)/LOG(10)
2880     '
2890     '
2900     ' .....
2910     ' *** IMPRESSION DES RESULTATS ***
2920     ' .....
2930     '
2940     '
2950     KPC=4.266E-09;KPG=.0000141
2960     OPEN "Q",E1,N#
2970     WRITE E1,"K";I1;A1;"pH";S1;"Na";I0;A0;"PCO2";S2;"Ca";I6;A6;"-LOG(PCO2)";S8;"CaHCO3";P5;P7;"FORCE IONIQUE";S0;"Mg";I7;A7;"ACTIVITE EAU";AW;"MgHCO3";P6;P8;"LOG Activité Eau";AZ;"H";I3;A3;"SAR mé/1";S9;"OH";I4;A4;"SAR activités";S3;"Cl";I2;A2
2975     WRITE E1,"Kps Calcite";KPC;"SO4";I8;A8;"Q (Ca).(CO3)";S4;"CO3";I9;A9
2980     WRITE E1,"Kps Gypse";KPG;"HCO3";I5;A5;"Q (Ca).(SO4)";S5;"H2CO3";P0;"BILAN ELECTRIQUE (equiv./l)";S6;"CaCO3";P1;"COND. ELECTRIQUE (mmiemens)";EC;"CaSO4";P2;"RESIDU SEC (g/l)";RS;"MgCO3";P3;"pF. OSMOTIQUE";PF
2990     WRITE E1,"MgSO4";P4;"POTENTIEL OSM. (cm eau)";PO
3000     CLOSE E1
3010     CLS
3020     PRINT "Désirez-vous les résultats . en sortie imprimante (1)
                . en sortie écran (2)"

```

```

. ou les deux en même temps (3)*
3030 PRINT:INPUT "Votre choix ";S
3040 IF S><1 AND S><2 AND S><3 THEN 3020
3050 ON S GOTO 3100,3550,3100
3060 '
3070 ' -----
3080 ' * * Sortie des résultats sur imprimante * *
3090 ' -----
3100 PRINT:PRINT:PRINT:PRINT "Mettre l'imprimante en position ON ..."
3110 E1#=STRING$(80,42):E2#=STRING$(1,42):E3#=STRING$(3,42)
3120 E#=SPACE$(2)
3130 LPRINT E1#
3140 LPRINT E2#;E#;E3#;" DISTRIBUTION DES ESPECES ";E3#;E#;E2#;E#;E3#;" CARACTE
RISTIQUES ";SPC(18);E2#
3150 LPRINT E2#;SPC(36);E2#;SPC(20);" DE LA SOLUTION ";E3#;E#;E2#
3160 LPRINT E2#;SPC(10);" Molarités Activités ";E2#;SPC(41);E2#
3170 LPRINT E1#
3180 OPEN "I",#1,N#
3190 INPUT #1,L#,C,A,M#,E
3200 LPRINT E2#;E#;L#;
3210 LPRINT TAB(12);USING "##.###*****";C;
3220 LPRINT TAB(26);USING "##.###*****";A;
3230 LPRINT E#;E2#;E#;M#;
3240 IF M#="pH" XOR M#="-LOG(PCO2)" THEN 3250 ELSE 3270
3250 LPRINT TAB(68);USING"###.###";E;
3260 GOTO 3280
3270 LPRINT TAB(69);USING"##.###*****";E;
3280 LPRINT TAB(80);E2#
3290 IF L#="HCO3" THEN 3310 ELSE 3190
3300
3310 INPUT #1,L#,A,M#,E
3320 LPRINT E2#;E#;L#;
3330 LPRINT TAB(19);USING "##.###*****";A;
3340 LPRINT TAB(38);E2#;E#;M#;
3350 IF L#="CaCO3" XOR L#="CaSO4" THEN 3400
3360 IF L#="HgCO3" THEN 3420
3370 IF L#="HgSO4" THEN 3440
3380 LPRINT TAB(69);USING"##.###*****";E;
3390 GOTO 3450
3400 LPRINT TAB(68);USING"###.###";E;
3410 GOTO 3450
3420 LPRINT TAB(69);USING"##.##";E;
3430 GOTO 3450
3440 LPRINT TAB(65);USING"#####.##";E;
3450 LPRINT TAB(80);E2#
3460 IF EOF(1) THEN 3470 ELSE 3310
3470 CLOSE #1
3480 LPRINT E1#
3485 LPRINT
3490 LPRINT " Référence : ";N#
3500 IF S=1 THEN END
3510 '
3520 ' -----
3530 ' * * Sortie des résultats à l'écran * *
3540 ' -----
3550 CLS
3560 SCREEN 0
3570 RESTORE 3580
3580 DATA 2,5,23,1,38,80
3590 READ L
3600 FOR I=1 TO 80
3610 LOCATE L,I,0:PRINT "*"
3620 NEXT I
3630 IF L=23 THEN 3640 ELSE 3590
3640 READ L
3650 FOR J=2 TO 23

```

```

3660     LOCATE J,L,0:PRINT "*"
3670     NEXT J
3680     IF L=80 THEN 3690 ELSE 3640
3690     LOCATE 3,4,0:PRINT "DISTRIBUTION * --(Référence :";N$;"]--"
3700     LOCATE 3,60,0:PRINT "*" CARACTERISTIQUES"
3710     LOCATE 4,4,0:PRINT "ESPECES: Molalités     Activités":LOCATE 4,70,0:PRINT"
SOLUTION"
3730     OPEN "I",E1,N$
3740         FOR I=6 TO 17
3750             INPUT E1,L$,C,A,N$,E
3760             LOCATE I,4,0:PRINT L$
3770             LOCATE I,12,0:PRINT USING"EE.EEE^";C
3780             LOCATE I,26,0:PRINT USING"EE.EEE^";A
3790             LOCATE I,41,0:PRINT N$
3800             IF N$="pH" XOR N$="-LOG(PCO2)" THEN 3810 ELSE 3830
3810                 LOCATE I,68,0:PRINT USING"EEE.EEE";E
3820                 GOTO 3840
3830                 LOCATE I,69,0:PRINT USING"EE.EEE^";E
3840             NEXT I
3850
3860         FOR I=18 TO 22
3870             INPUT E1,L$,A,N$,E
3880             LOCATE I,4,0:PRINT L$
3890             LOCATE I,19,0:PRINT USING"EE.EEE^";A
3900             LOCATE I,41,0:PRINT N$
3910             IF L$="CaCO3" XOR L$="CaSO4" THEN 3950
3920             IF L$="MgCO3" THEN 3960
3930             IF L$="MgSO4" THEN 3970
3940                 LOCATE I,69,0:PRINT USING"EE.EEE^";E:GOTO 3980
3950                 LOCATE I,68,0:PRINT USING"EEE.EEE";E:GOTO 3980
3960                 LOCATE I,69,0:PRINT USING"EE.EE";E:GOTO 3980
3970                 LOCATE I,65,0:PRINT USING"EEEEEE.EE";E
3980             NEXT I
3990     IF EOF(1) THEN 4000
4000     CLOSE E1
4020     END

```

6. EXEMPLE DE SORTIE IMPRIMANTE

+++ DONNEES INITIALES +++

pH 7.000  
 Molalités (moles/l):  
 K t 5.000E-04  
 Na t 2.280E-03  
 Ca t 1.450E-03  
 Mg t 6.900E-04  
 Cl t 1.500E-04  
 SO4 t 2.000E-03

***** DISTRIBUTION DES ESPECES *****			***** CARACTERISTIQUES DE LA SOLUTION *****		
	Molalités	Activités			
* K	5.000E-04	4.494E-04	* pH	7.000	*
* Na	2.280E-03	2.059E-03	* PCO2	1.660E-02	*
* Ca	1.214E-03	8.209E-04	* -LOG(PCO2)	1.780	*
* CaHCO3	4.359E-05	3.936E-05	* FORCE IONIQUE	9.988E-03	*
* Mg	5.959E-04	4.113E-04	* ACTIVITE EAU	9.997E-01	*
* MgHCO3	9.310E-06	8.408E-06	* LOG Activité Eau	-1.436E-04	*
* H	1.095E-07	1.000E-07	* SAR me/l	1.695E+00	*
* OH	1.111E-07	1.000E-07	* SAR activités	1.855E+00	*
* Cl	1.500E-04	1.348E-04	* Kps Calcite	4.266E-09	*
* SO4	1.725E-03	1.141E-03	* Q (Ca).(CO3)	1.010E-09	*
* CO3	1.851E-06	1.231E-06	* Kps Gypse	1.410E-05	*
* HCO3	2.848E-03	2.572E-03	* Q (Ca).(SO4)	9.363E-07	*
* H2CO3	5.754E-04		* BILAN ELECTRIQUE (equiv./l)	-7.728E-08	*
* CaCO3	1.603E-06		* COND. ELECTRIQUE (msiemens)	1.022	*
* CaSO4	1.916E-04		* RESIDU SEC (g/l)	0.551	*
* MgCO3	1.273E-06		* pF. OSMOTIQUE	2.67	*
* MgSO4	8.361E-05		* POTENTIEL OSM. (cm eau)	-463.98	*

Référence : BOLI

\*\*\* DONNEES INITIALES \*\*\*

PCO2 1.660E-02

Molalités (moles/l):

K t 5.000E-04

Na t 2.280E-03

Ca t 1.450E-03

Mg t 6.900E-04

Cl t 1.500E-04

SO4 t 2.000E-03

*** DISTRIBUTION DES ESPECES ***		*** CARACTERISTIQUES	
	Molalités	Activités	DE LA SOLUTION ***
K	5.000E-04	4.494E-04	pH 7.011
Na	2.280E-03	2.059E-03	PCO2 1.660E-02
Ca	1.214E-03	8.209E-04	-LOG(PCO2) 1.780
CaHCO3	4.355E-05	3.933E-05	FORCE IONIQUE 9.989E-03
Mg	5.959E-04	4.113E-04	ACTIVITE EAU 9.997E-01
MgHCO3	9.309E-06	8.407E-06	LOG Activité Eau -1.437E-04
H	1.067E-07	9.745E-08	SAR mē/l 1.695E+00
OH	1.140E-07	1.026E-07	SAR activités 1.855E+00
Cl	1.500E-04	1.348E-04	Kps Calcite 4.266E-09
SO4	1.725E-03	1.141E-03	Q (Ca).(CO3) 1.037E-09
CO3	1.900E-06	1.264E-06	Kps Gypse 1.410E-05
HCO3	2.849E-03	2.573E-03	Q (Ca).(SO4) 9.365E-07
H2CO3	5.609E-04		BILAN ELECTRIQUE (equiv./l) -1.534E-06
CaCO3	1.644E-06		COND. ELECTRIQUE (micromhos) 1.023
CaSO4	1.912E-04		RESIDU SEC (g/l) 0.550
MgCO3	1.306E-06		pF. OSMOTIQUE 2.67
MgSO4	8.350E-05		POTENTIEL OSM. (cm eau) -464.15

Référence : BOL



\*\*\* DONNEES INITIALES \*\*\*

pH 7.600  
 Molalités (moles/l):  
 K t 6.800E-05  
 Na t 2.100E-04  
 Ca t 1.700E-04  
 Mg t 1.360E-04  
 Cl t 1.600E-05  
 SO4 t 7.000E-06

*** DISTRIBUTION DES ESPECES ***		*** CARACTERISTIQUES DE LA SOLUTION ***	
	Molalités	Activités	
K	6.800E-05	6.539E-05	pH 7.600
Na	2.100E-04	2.021E-04	PCO2 1.328E-03
Ca	1.672E-04	1.437E-04	-LOG(PCO2) 2.877
CaHCO3	2.278E-06	2.192E-06	FORCE IONIQUE 1.195E-03
Mg	1.346E-04	1.161E-04	ACTIVITE EAU 1.000E+00
MgHCO3	7.850E-07	7.553E-07	LOG Activité Eau -1.718E-05
H	2.606E-08	2.512E-08	SAR me/l 3.822E-01
OH	4.139E-07	3.981E-07	SAR activités 3.965E-01
Cl	1.600E-05	1.539E-05	Kps Calcite 4.266E-09
SO4	6.713E-06	5.749E-06	Q (Ca).(CO3) 2.243E-10
CO3	1.821E-06	1.561E-06	Kps Gypse 1.410E-05
HCO3	8.515E-04	8.193E-04	Q (Ca).(SO4) 8.260E-10
H2CO3	4.604E-05		BILAN ELECTRIQUE (equiv./l) -2.279E-07
CaCO3	3.555E-07		COND. ELECTRIQUE (micromhos) 0.330
CaSO4	1.687E-07		RESIDU SEC (g/l) 0.073
MgCO3	4.553E-07		pF. OSMOTIQUE 1.74
MgSO4	1.187E-07		POTENTIEL OSM. (cm eau) <sup>2</sup> -55.50

Référence : CHARI

## BIBLIOGRAPHIE

- BERNER (R.A.), 1971. — Principles of chemical sedimentology. Mc Graw-Hill. New-York, 240 p.
- BOURRIE (G.) et PEDRO (G.), 1979. — La notion de pF, sa signification physico-chimique et ses implications pédogénétiques — I. Signification physico-chimique. Relation entre le pF et l'activité de l'eau. *Science du Sol*, 4 : 313-322.
- DUFEY (J.E.), PETIT (C.M.), GOBLET (Y.) et LAUDELOUT (H.), 1979. — Modélisation des équilibres physico-chimiques d'échange et de précipitation dans les systèmes sol-eau-électrolyte. *Ann. Agro.*, 30 : 53-62.
- FRITZ (B.), 1975. — Etude thermodynamique et simulation des réactions entre minéraux et solutions. Application à la géochimie des altérations et des eaux continentales. Thèse Univ. Strasbourg 1976 et *Sci. Géol. Bull.*, n° 41.
- GRIFFIN (R.A.) et JURINAK (J.J.), 1973. — Estimation of activity coefficients from the electrical conductivity of natural aquatic systems and soil extracts. *Soil Sci.*, 116, 1 : 26-30.
- HELGESON (H.C.), 1969. — Thermodynamics of hydrothermal systems at elevated temperatures and pressures. *Amer. J. Sci.*, 267 : 724-804.
- KHARAKA (Y.K.) et BARNES (I.), 1973. — SOLMNEQ : Solution-Mineral Equilibrium computations. U.S. Dpt of the Interior, *Geol. Surv. Computer Contribution*, Report n° USGS-WRD-73-002.
- LANGMUIR (D.), 1969. — The Gibbs free energies of substance in the system Fe — O<sub>2</sub> — H<sub>2</sub>O — CO<sub>2</sub> at 25°C. *U.S. Geol. Surv., Prof. paper*, 650-B : 180-183.
- LATIMER (W.M.), 1952. — The oxydation states of the elements and their potentials in aqueous solutions. Prentice Hall Inc. Ed., New-York, 2nd ed., 392 p.
- RIEU M., 1980-1981. — Sodium Adsorption Ratio et estimation du pouvoir alcalinisant des eaux. *Cah. ORSTOM, sér. Pédol.*, vol. XVIII, 2 : 123-128.
- ROBINSON (R.A.) et STOCKES (R.M.), 1959. — Electrolyte solutions. Butterworths. London, 559 p.