

CALCUL DES ACTIVITES DES IONS:
ESTIMATION DE LA CONDUCTIVITE ELECTRIQUE DES SOLUTIONS
PAR LA METHODE DES POLYNOMES ET CELLE DES ACTIVITES

JOB J.O., COCHONNEAU G., CHEVALIER Nathalie.

1ères Journées informatiques sur la valorisation
des données physico-chimiques,
20-26 Octobre 1987, Centre ORSTOM de BONDY.

CALCUL DES ACTIVITES DES IONS:
ESTIMATION DE LA CONDUCTIVITE ELECTRIQUE
PAR LA METHODE DES POLYNOMES ET CELLE DES ACTIVITES

JOB J.O., COCHONNEAU G., CHEVALIER Nathalie.

Bondy le 26/10/87

INTRODUCTION

Bilion est un logiciel qui permet de vérifier le bilan ionique d'analyse d'eaux ou d'extraits de sols. Il s'applique aux eaux contenant les ions les plus courants dans les zones arides, Ca, Mg, Na, K, Cl, SO₄, HCO₃, NO₃. Il fonctionne sur Micro-ordinateur compatible IBM-PC avec lecteur de disquettes de 360 Ko. Le programme prend 190 Ko, le stockage des résultats de 50 échantillons 150 Ko supplémentaires.

UTILISATION PRATIQUE

L'utilisateur rentre les données soit à partir du clavier, soit à partir d'un fichier ASCII. Les résultats apparaissent à l'écran sous la forme présentée fig.1.

Echantillon N° 1	Force ionique : I[N-1] = 0.662 I[N] = 0.669									
Conc init : (me/l)	Ca	Mg	Na	K	Cl	SO4	HCO3	CO3	NO3	pH
	20.80	108.00	475.00	10.00	554.00	56.80	2.38	0.54	0.00	7.0
Ions lib. :	19.20	100.78	464.28	9.87	553.84	28.29	1.80	0.20	0.00	
Sels simp. (corrigés) :	NaCl	CaSO4	MgSO4	Na2SO4	CaCL2	MgCL2	Ca(HCO3)2			
	472.67	9.02	46.85	0.00	11.67	60.62	0.08			
	Mg(HCO3)2	NaHCO3	MgCO3	KCl	K2SO4	CaCO3	Na2CO3			
	0.43	1.87	0.10	9.07	0.93	0.02	0.42			
Activités (nbre) :	ACA	AMG	ANA	AK	ACL	ASO4	AHCO3	ACO3		
	1.48	7.75	348.26	7.37	412.66	2.51	0.29	0.02		
Paires :	CaCO3	CaSO4	CaHCO3	MgHCO3	MgSO4	Na(CO3)	NaSO4	NaHCO3	KSO4	
	0.04	0.76	0.01	0.02	3.38	0.10	9.99	0.55	0.13	
EC (ds/cm) :	ECmin= 50.89	ECexp= 55.00	ECmax= 58.01	ECpol= 58.55	EClim= 62.97					
	Σ+=613.60	CO=813.78	Σ--=813.72	SO=584.15	S°= 4.93					

fig.1: -Présentation des résultats à l'écran.

Les résultats peuvent être stockés dans un fichier de sauvegarde et édités à l'imprimante, un par un ou en bloc. Les tests sur les formules empiriques donnant la concentration globale (me/l) en fonction de la conductivité peuvent être détaillés (fig.2):

4 formules d'estimation de CO à partir de EC ont été testées.
0 ont donné des estimations significatives.

CAMPBELL	=	28.60%
JOB	=	21.10%
LE BRUSQ-LOYER	=	17.30%
BOUTEYRE	=	25.80%

Moyenne des estimations : 23.20%

fig.2:-Détail des estimations de la conductivité .

PRINCIPE DES CALCULS

Deux options sont possibles:

1-:La première teste les concentrations analytiques à partir de la mesure de la conductivité, supposée exacte. On calcule les activités des espèces dissoutes à partir des données analytiques. Puis à partir de ces activités, les valeurs les plus probables de EC ainsi que l'intervalle de confiance. Les valeurs théoriques ainsi calculées ne sont égales aux valeurs expérimentales que si les concentrations analytiques sont justes (à la précision requise près).

2-:La deuxième teste la conductivité à partir des concentrations analytiques. Les calculs sont les mêmes que précédemment.

Dans les deux cas, les calculs annexes suivant sont effectués.

- Activités des paires d'ions principales.
- Composition saline de départ.
- Force ionique et comparaison du rapport Co/EC avec les formules empiriques les plus couramment utilisées.

DESCRIPTION DU PROGRAMME

Le programme est écrit en Turbo-Pascal, version 3.0. Il comprend 1700 instructions réparties en procédures dont quatre sont des procédures externes. Un programme séparé (INIT.COM) permet de remettre à zéro le fichier de stockage des résultats. Les procédures s'articulent comme indiqué page suivante.

- ° signifie une ouverture ou une écriture dans un fichier.
- ° indique une procédure externe.
- * indique une procédure overlay.

****articulation des procédures****

CADRE
TRAITEMENT fichier RESULT.D
ENT-DONNEES
ENT-CLAVIER* option : LECT-FICHER
INIT* TRANSFO1° fichier NOM1 (ASCII)
CONCERSION* TRANS-Nb
SAUVEGARDE* TEST-FICHER
CHOIX-EDIT
NAT-DONNEES
CALC-SELS
CALC-ACTIV options : CORREC et AJUST-PAIR
CALC-EC options : TRAIT-1 à TRAIT-9
TABLEAU
PRESENT* option : INFOSUP*
TEST-SORTIE* fichier RESULT.D
TRANSFO2 fichier RESULT.A
EDITION options : EDIT1 ou EDIT2

***** détail des procédures *****
(ordre alphabetique)

AJUST-PAIR - ajustement des concentrations des paires d'ions
CADRE - présentation du programme
CALC-ACTIV - calcul des activités et des ions libres en solution.
CALC-EC - calcul des conductivités à partir des activités.
CALC-SELS - composition de sels solides correspondant à la solution.
CHOIX-EDIT - choix d'édition (écran ou imprimante)
CONVERSION* - conversion des données initiales en me/l et en mm/l .
CORREC - correction pour concentrations négatives.
EDITION - édition du fichier de sortie (écran ou imprimante).
EDIT1 - édition à l'écran de tout ou partie du fichier RESULT.D
EDIT2 - édition à l'imprimante .
ENT-CLAVIER* - saisie au clavier.
ENT-DONNEES - choix de saisie des données (clavier ou fichier)
INFOSUP* - estimation de Co à partir de Ec (procédure optionnelle).
INIT* - initialisation des tableaux Co,Sc,Sa(me/l).
LECT-FICHER - saisie des données à partir du fichier NOM1.OPT
NAT-DONNEES - choix de l'unité d'entrée des données (me/l ou mm/l)
PRESENT* - présentation et édition des résultats.
SAUVEGARDE* - écriture données initiales dans NOM3.OPT
TABLEAU - tableau des coefficients du polynôme pour calcul de Ec
TEST-FICHER - choix des enregistrements et positionnement du pointeur.
TEST-SORTIE* - sauvegarde des résultats dans le fichier RESULT.D
TRAIT-1 à . - comparaison de Co calculé par les formules
TRAIT-9 empiriques et de Co donné par l'analyse.
TRAITEMENT - lecture de RESULT.D ;Test de capacité (500 échantillons).
TRANSFO1° - transformation de NOM1.ASC en fichier NAME.OPT
TRANSFO2 - écriture des résultats en ASCII dans RESULT.A .
TRANS-Nb -transformation chaine de caractères en nombres réels.

CALCULS

Le programme utilise 93 variables numériques, déclarées en réels et 29 tableaux. Pour l'explication sommaire des calculs nous emploierons les notations suivantes:

c_i	= concentrations analytiques de l'ion i .
c_{in}	= concentrations de i après n itérations.
z_i	= valence de l'ion i .
$[Ca]$	= concentration de l'ion Caetc
$[Ca(n)]$	= concentration de Ca calculé après n itérations.
(Ca)	= activité de l'ion Ca .
I	= force ionique (mm/l).
f_i	= coefficient d'activité de l'ion i en solution.
$Co = \frac{1}{2} \sum C_i$	= concentration globale en me/l.
Sa, Sc	= somme des anions, des cations.
E_{ce}	= conductivité expérimentale.
a	= 1.5115 à 25°C coefficient de Debye-Hückel.
b	= 0.329
a_i	= rayon ionique de l'ion i .
l_{ic}	= conductivité équivalente d'un sel à la concentration C_i .

CALCUL DES ACTIVITES

Le calcul des activités est fait de manière classique par itération:

1-: force ionique: $I(0) = 0.5 * \sum z_i^2 \cdot c_{i0}$

$$0 = \sum z_i \cdot c_{i0}$$

2-: coefficients f_i :

$$\log f_i = -az^2(I)^{1/2} / (1 + ba_i \sqrt{I}) \quad E_c \leq 2 \text{ mS/cm}$$

$$\log f_i = -az^2(I)^{1/2} / [\sqrt{I} / (1 + \sqrt{I})] - 0.3 * I \quad E_c > 2 \text{ mS/cm}$$

3-: activités :

$$(Ca(1)) = f_{Ca} [Ca(0)] \quad \dots \quad (Mg(1)) = f_{Mg} [Mg(0)]$$

$$CaSO_4^0 = k_1 (Ca(1)) * (SO_4(1))$$

$$CaHCO_3 = k_2 (Ca(1)) * (HCO_3(1))$$

4-: concentrations:

$$[Ca(1)] = [Ca(0)] - CaSO_4^0 - CaHCO_3 \quad \dots \text{etc}$$

on revient en 1) avec le calcul de la nouvelle force ionique:

$$I(1) = 0.5 * \sum z_i^2 * C(1)_i$$

Vingt itérations sont prévues, bien que généralement une dizaine soit suffisante pour arriver à convergence produisant deux valeurs $I(n+1)$ et $I(n)$ ne différent pas plus de un millième. A l'étape 4, si $[Ca(1)] < 0$ on prend $Ca(1) = 0.5 * (Ca(1) + Ca(2))$..etc

Les constantes de dissociations extraites du programme sont :

```

CA[N] := CA[1]-ACA[N]*(AC03[N]*1.59 + AS04[N]*0.204 + AHCO3[N]*0.0182);
MG[N] := MG[1]-AMG[N]*(AC03[N]*1.67 + AS04[N]*0.174 + AHCO3[N]*0.0094);
NA[N] := NA[1]-ANA[N]*(AC03[N]*0.0182 + AS04[N]*0.0115 + AHCO3[N]*0.00562);
K[N] := K[1]-AK[N]*AS04[N]*(6.9E-3);
SO4[N] := SO4[1]-AS04[N]*(ACA[N]*0.204+AMG[N]*0.174+ANA[N]*0.0115+AK[N]*6.9
CO3[N] := CO3[1]-ACO3[N]*(ACA[N]*1.59 + AMG[N]*1.67 + ANA[N]*0.0182);
HCO3[N] := HCO3[1]-AHC03[N]*(ACA[N]*0.0182 + AMG[N]*0.0094 + ANA[N]*0.00562

FCACO3:=ACA[N]*ACO3[N]*1.59;
FCASO4:=ACA[N]*ASO4[N]*0.204;
FCAHCO3:=ACA[N]*AHC03[N]*0.0182;
FMGCO3:=AMG[N]*ACO3[N]*1.67;
FMGSO4:=AMG[N]*ASO4[N]*0.174;
FMGHCO3:=AMG[N]*AHC03[N]*0.0094;
FNACO3:=ANA[N]*ACO3[N]*0.0182;
FNASO4:=ANA[N]*ASO4[N]*0.0115;
FNAHCO3:=ANA[N]*AHC03[N]*0.00562;
PKSO4:=AK[N]*ASO4[N]*6.9E-3;

```

CALCUL DES CONDUCTIVITES

1-:approximation par les polynômes de Mc Neal: La conductivité est calculée par une formule de la forme :

$$E_{pol} = E_c(Ca) + E_c(Mg) + E_c(Na) + E_c(K) + E_c(Cl) + E_c(SO_4) + \dots$$

où:

$$E_c(Ca) = [Ca]/Co + k_2.[Ca]^2 + k_3.[Ca]^4 + k_4.[Ca]^7$$

$$E_c(Mg) = [Mg]/Co + k_2*[Mg]^2 + k_3.[Mg]^4 + k_4.[Mg]^7$$

.....etc

Un calcul préalable permet d'estimer une concentration globale des paires d'ions $CaSO_4$ et $MgSO_4$. Leur conductivité est celle qu'auraient $MgSO_4$ à une concentration égale à la somme des ions appariés $CaSO_4^0 + MgSO_4^0$.

E_{pol} est corrigée pour les valeurs comprises entre 3 et 25 nS/cm:

$$E_{pol} = 1.133 + 0.5633 * E_{pol} + 0.03003 * E_{pol}^2 - 0.007079 * E_{pol}^3$$

Ion	$k_1 \cdot 10^2$	$k_2 \cdot 10^2$	$k_3 \cdot 10^4$	$k_4 \cdot 10^7$
Ca	1.608	4.834	-1.323	3.762
Mg	-1.208	5.065	-2.749	9.106
Na	1.155	4.718	-0.448	0.383
K	0.825	6.973	-0.722	1.664
SO4	3.090	5.984	-1.716	3.408
CO3	5.281	5.268	-1.202	2.026
HCO3	1.071	3.755	-0.192	-3.401
Cl	1.919	6.760	-0.357	0.353
NO3	0.193	6.617	-1.211	2.510

table 1:-Coefficients du polynôme de Mc Neal.

2-:approximation par courbe exponentielle.

La conductivité équivalente de chaque ion peut se mettre sous la forme:

$$Ec(Ca) = a \cdot [Ca]^b$$

on a:

$$Elim = Ec(Ca) + Ec(Mg) + Ec(Na) + Ec(K) + \dots \quad \text{pour } EC \geq 4 \text{ mS/cm}$$

$$\text{et: } Elim = 59 \cdot [Ca] + 53 \cdot [Mg] + 50 \cdot [Na] + \dots + 0.67 \cdot (CaHCO_3) + \dots \quad \text{pour } EC < 4 \text{ mS/cm}$$

les équations utilisées sont les suivantes:

$$\begin{aligned} Ec(Ca) &= 0.05393 \cdot [Ca]^{0.9442} & Ec(Mg) &= 0.04731 \cdot [Mg]^{0.9397} \\ Ec(Na) &= 0.04828 \cdot [Na]^{0.9799} & Ec(K) &= 0.07120 \cdot [K]^{0.9831} \\ Ec(Mg) &= 0.04731 \cdot [Mg]^{0.9397} & Ec(Cl) &= 0.07400 \cdot [Cl]^{0.9838} \\ Ec(SO_4) &= 0.06256 \cdot [Mg]^{0.8771} & Ec(HCO_3) &= 0.0434 \cdot [HCO_3]^{0.9737} \\ & & Ec(CO_3) &= 0.05897 \cdot [CO_3]^{0.9578} \end{aligned}$$

3-:calcul de la fourchette des conductivités.

On décompose la solution en sels simples (procédure CALC-SELS). Soient C_i les concentrations individuelles trouvées.

$$\text{on a: } \sum_{i=1}^n C_i \cdot Co < Ece < \sum_{i=1}^n C_i$$

Cette inéquation permet de déterminer le sens des erreurs sur Ece si on considère que l'analyse est juste par ailleurs.

Les valeurs des conductivités équivalentes sont stockées dans un tableau à deux dimensions qui est initialisé dans la procédure externe TABLEAU .(table 2).

SELS	Concentrations en me/l									
	0.1	1.0	2.5	10	20	50	100	200	500	1000
NaCl	8.1	8.2	8.3	8.5	8.7	9.0	9.4	9.7	10.4	11.6
CaSO4	8.2	8.9	10	11.1	12.6	13.8	13.8	13.8	13.8	13.8
MgSO4	8.1	9.0	10	11.0	12.5	15.6	16.6	20.0	24.4	29.8
Na2SO4	8.1	8.2	8.7	9.1	9.3	10.0	11.8	12.5	14.4	16.9
CaCl2	7.7	7.8	8.8	8.3	8.5	8.9	9.7	10.0	11.1	12.7
MgCl2	8.1	8.2	8.4	8.8	9.0	9.7	10.3	10.7	12.4	14.0
Ca(HCO3)2	10.1	10.3	10.7	11.1	11.8	12.7	13.9	13.9	13.9	13.9
Mg(HCO3)2	10.4	10.5	10.7	10.8	11.1	11.5	12.0	12.7	12.7	12.7
NaHCO3	11.0	11.1	11.2	11.3	11.8	12.5	13.5	13.5	13.5	13.5
MgCO3	7.7	7.9	8.4	9.3	9.7	11.0	13.3	13.3	13.3	13.3
KCL	6.8	6.9	7.0	7.1	7.2	7.4	7.7	7.9	8.2	8.8
K2SO4	7.2	7.5	8.1	8.7	9.3	9.6	9.6	9.6	9.6	9.6
CaCO3	7.3	7.5	8.0	8.8	8.8	8.8	8.8	8.8	8.8	8.8
Na2CO3	7.7	7.8	8.1	8.5	8.8	9.9	11.8	12.6	14.9	18.9

table 2:- Rapports Co/Ec pour quelques sels (me/mS par litre)

4-:calcul du fit avec les formules experimentales.

On verifie que la solution donnée verifie un certain nombre de relations empirique du type $C_n = a * E_c^b$ qui ont été établies pour des eaux naturelles et des solution de sol, soit:

$C_n = 10.37 * E_c^{1.065}$	pour $E_c < 70$ mS/cm	(Campbell , 1948)
$C_n = 10.1 * E_c$	$E_c < 4$	(Richards , 1954)
$C_n = 9.924 * E_c^{1.091}$	$4 < E_c < 70$	(" " " ")
$C_n = 12.88 * E_c - 3.61$	$E_c < 10$	(McNeal , 1970)
$C_n = 9.76 * E_c^{1.055}$	$E_c < 4$	(Marion-Babcock , 1975)
$C_n = 7.17 * E_c^{1.15}$	$E_c < 100$	(Bouteyre , 1981)
$C_n = 8.9 * E_c^{1.075}$	$E_c < 60$	(Le Brusq-Loyer , 1982)
$C_n = 10.88 * E_c^{1.049}$	$E_c < 16$	(Job-Mouheich , 1983)
$C_n = \exp(2.326 + 0.011f) * E_c^{1.033}$	$E_c < 100$	(Job , 1985)
$f = ([Ca] + 2 * [Mg] + [SO_4]) / ([Na] + [Cl])$		

Lorsque les conditions d'application d'une formule sont satisfaites, on calcule:

$$D_n = 200 * (C_n - C_o) / (C_n - C_o)$$

Si D_n est inférieur à l'intervalle de confiance déterminé pour chaque formule, on admet que C_n est correctement calculé et on incrémente une valeur notée "fit" de 1. On teste entre deux et cinq formules suivant les cas.

CALCUL DES SELS SIMPLES

Il s'agit de savoir de quelle composition de sels de départ peut parvenir la solution dont on connaît les analyses. L'algorithme choisi est basé sur les hypothèses de travail suivantes:

-les carbonates et bicarbonates proviennent du calcium, puis du magnésium, puis du sodium.

-les sulfates proviennent d'abord du gypse, puis du sulfate de magnésium, puis seulement du sulfate de sodium.

-la concentration de chlorure de sodium sera égale à la plus petite des concentrations de chlore ou de sodium.

-le potassium provient de chlorure et de sulfate proportionnellement à leur concentrations.

Cet algorithme permet de donner une composition de départ qui n'a pas de sens au point de vue thermodynamique, mais qui renseigne sur la provenance possible de la solution, en fonction de la solubilité croissante des sels d'origine.

Bibliographie

- ADAMS F., 1971-Ionic Concentrations and Activities in Soil Solutions. Soil Sci., Soc., Amer., Proc. vol.35, p:420-425.
- CRUZ J.L., 1977-Revue bibliographique des représentations analytiques des coefficients d'activité ioniques moyens dans les solutions binaires électrolytiques. Rev., Inst., Fr., Petr., vol.XXXVIII, n°3, p:393-412.
- DROUBI A., 1976-Geochemie des sels et des solutions concentrées par évaporation. Modèle thermodynamique de simulation. Application aux sols salés du Lac Tchad. Thèse Dr., Ing., n°46 Univ., L., Pasteur Strasbourg.
- JOB J.O., 1985-Essais de corrélation entre la conductivité électrique et la composition ionique des solutions du sol. DEA agronomie-pédologie, ENSAM-USTL Montpellier 86 p.
- Le BRUSQ J.Y., LOYER J.Y., 1982- Relations entre les mesures de conductivité sur des extraits de sols de rapports sol/solution variables dans la vallée du fleuve Sénégal. Cah., ORSTOM ser., Pédol., Vol.XIX, n°3, p :293-301.
- Le BRUSQ J.Y., 1982-Le concept d'activité ionique en solution aqueuse et ses applications à l'étude des sols salés .I: Calcul et mesure des coefficients d'activité. ORSTOM, Dakar, 38 pp., multigr.

McNEAL B.L., OSTER J.D., HATCHER J.T., 1970—Calculation of electrical conductivity from solution composition data as an aid to in situ estimation of soil salinity. Soil Science vol. 110 n°6, p:405-414.

NOTICE D'UTILISATION DE BILION

Bilion est un programme d'étude des bilans ioniques des solutions du sol, des extraits et des eaux naturelles. Il permet d'interpréter les analyses chimiques des éléments majeurs en donnant les concentrations des ions libres et leurs activités, les concentrations des ions appariés, la force ionique de la solution et une composition saline de départ. Il permet en outre de vérifier ces bilans ioniques à l'aide d'un test qui recalcule les conductivités électriques à partir des compositions données par l'analyse.

I. CHARGEMENT DU PROGRAMME

Charger la disquette contenant les dix-neuf fichiers:

BILION.COM	BILION2.001 à BILION2.010
INIT.COM	ARMAIN.TXT
RESULT.A	RESULT.D
EDITION.BAK	TABLEAU.PAS
TRANSFO1.BAK	TRANSFO2.PAS

sur un répertoire du disque dur si possible.

II. LANCEMENT DU PROGRAMME

- Tapez BILION

- Pour sélectionner une option du menu, se déplacer grâce aux flèches (à partir du clavier numérique), valider par RETURN.

Le menu comporte les options suivantes:

II.1) Saisie au clavier

On rentrera dans l'ordre les concentrations des solutions du sol ou des eaux naturelles : Ca, Mg, Na, K, Cl, SO₄, HCO₃, CO₃, NO₃, EC, pH, en me/l ou en mm/l.

II.2) Saisie à partir d'un fichier

Le fichier doit être en format ASCII ou PASCAL et contenir la structure de champ Ca, Mg,

Dans les deux cas, le nombre d'échantillons à traiter doit être spécifié.

Le calcul des compositions ne commencera que lorsque toutes les données seront entrées.

II.3) Edition des résultats sur écran/sur imprimante

Les calculs et l'édition se font échantillon par échantillon.
Les calculs édités sont:

- force ionique In-1 et In après n itérations (en mm/l).
- les concentrations initiales (en me/l quelle que soit l'unité de départ).
- les concentrations en ions libres (en me/l).
- les concentrations des sels de départ (en me/l) (calculées à partir des solubilités croissantes des sels).
- les activités des ions principaux.
- les concentrations des ions appariés (me/l).

Dans les dernières lignes, un test sur les valeurs de conductivité donne les éléments suivants:

- ECexp: valeurs des conductivité électrique expérimentales.
- ECmin et ECmax: valeurs minimum et maximum que peut prendre la conductivité électrique si les résultats analytiques sont corrects
- ECapp: valeur la plus plausible de la conductivité électrique à partir des compositions ioniques (on suppose que les données analytiques sont justes). Les valeurs de conductivité sont en ms/cm.
- $\Sigma+$, $\Sigma-$ et Co: la somme des cations, des anions et la concentration ionique globale en me/l.
- dans une fenêtre apparait un message d'évaluation.

Dans la version primitive, deux messages seulement apparaissent (analyse correcte à 3 près et analyse non correcte à 3 près). Dans les versions définitives, les tests seront plus complets.

On calcule les approximations de Co à partir de EC avec trois à cinq formules empiriques.

II.4) Sauvegarde des données initiales

Ce sont les valeurs Ca, Mg, ...pH, qui sont saisies au clavier. Il est nécessaire de donner un nom au fichier dans lequel elles seront sauvegardées.

II.5) Sauvegarde des résultats

C'est la sauvegarde des valeurs calculées, I, ions libres, paires, activités etc... en plus des analyses de départ, Ca, Mg,pH. Ce fichier existe au départ (RESULT.D) et ne peut contenir que 500 résultats.

II.6) Edition du fichier de sortie sur écran/imprimante

C'est l'édition des résultats contenus dans RESULT.D. On peut demander un affichage à l'écran ou sur imprimante à partir d'un numéro d'échantillon et pour un nombre d'échantillons quelconque.

II.7) Fin d'exécution

Fin de l'exécution du programme BILION et retour au DOS.

NOTES: on peut sortir à tout moment d'un sous menu par ESC

et redefinir l'option en cours.

III. INTERPRETATION DES RESULTATS

L'interprétation des données se fait à partir des valeurs:

ECmin
ECmax
et ECapp

On suppose au départ que la valeur de EC est juste.

Si $EC_{min} < EC_{app} < EC_{max}$, l'analyse est correcte on examine:

$\Sigma+$ et $\Sigma-$

Si $EC_{exp} < EC_{app}$, $\Sigma+$ ou/et $\Sigma-$ est trop fort, donc:

si $\Sigma+ > \Sigma-$ alors $\Sigma+$ est trop fort.

si $\Sigma+ < \Sigma-$ alors $\Sigma-$ est trop fort.

de même si $EC_{exp} > EC_{app}$, cela veut dire que $\Sigma+$ et/ou $\Sigma-$ est trop faible, donc:

si $\Sigma+ > \Sigma-$ alors $\Sigma-$ est trop faible.

si $\Sigma+ < \Sigma-$ alors $\Sigma+$ est trop faible.

On confirme ces hypothèses en regardant les valeurs du complément de conductivité. Le complément est calculé à partir des valeurs:

$$C_n = a E_c^b$$

On calcule $D_n = 2*(C_n - C_o)/(C_n + C_o)$

si EC est correcte alors:

- si $D_n < -5$, cela veut dire que:

C_o est trop fort (donc soit $\Sigma+$, soit $\Sigma-$ ou les deux sont trop fort).

- si $-5 < D_n < +5$ l'analyse est correcte.

- si $D_n > 5$ alors C_o est trop faible.

Une fois l'interprétation des données faite, on rentre au clavier les données corrigées par l'analyse et on révérifie les tests.
