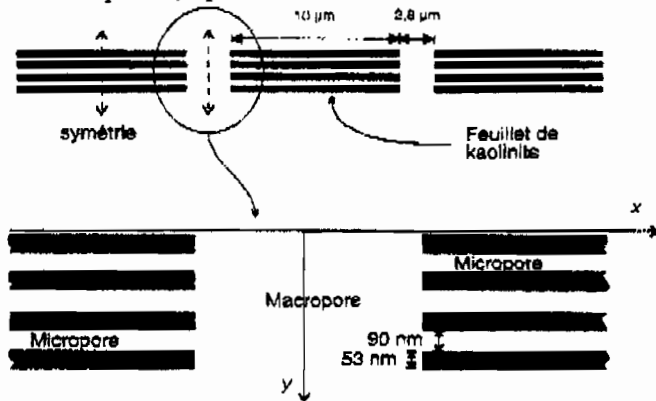


Modélisation des transferts d'ion dans les pores d'un matériau pédologique argileux

Lucas, Y.; Traverse, L.

Le but de l'étude est l'estimation du rôle de la géométrie de l'espace poral sur les échanges d'ions entre les solutions situées dans les macropores, susceptibles de migrer par convection, et les solutions situées dans les micropores, qui sont immobiles. Le modèle est construit à partir des équations de diffusion - convection - adsorption. La connaissance de la structure de l'espace poral permet d'effectuer une modélisation en deux dimensions.



Les courbes de porosité et l'observation au microscope électronique amènent à représenter le milieu de diffusion en deux dimensions de la manière indiquée sur la figure ci-contre.

Les hypothèses initiales sont (1) que le transport des ions par diffusion se fait aussi bien dans les micropores que dans les macropores, et que c'est la diffusion qui régit l'équilibrage entre ces deux régions; (2) que le transport des ions par convection ne se fait que dans les macropores; (3) que l'adsorption est instantanée, et localisée sur les surfaces des macropores aussi bien que des micropores. D'autre part, la capacité d'échange cationique est constante mais différente entre les zones mobiles (macropores) et immobiles (micropores). Enfin, il faut préciser les isothermes d'absorption pour déterminer la relation entre *C* (concentration) et *S* (adsorption).

L'équation générale de diffusion - convection avec adsorption utilisée est de la forme suivante:

$$\varphi \frac{\partial C}{\partial t} + \theta \frac{\partial S}{\partial t} = \theta D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \theta D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - q \frac{\partial C}{\partial y}$$

φ est la masse volumique apparente du solide (rapportée au volume total, en g/cm³)

q est la vitesse apparente de l'eau dans les macropores (en cm/j)

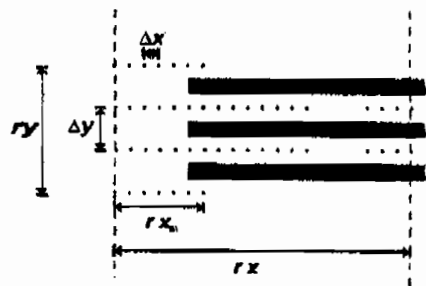
D_x et D_y sont les coefficients de diffusion selon l'horizontale et la verticale (cm²/j)

C est la concentration en solution (en µg/cm³)

S est la concentration adsorbée (en µg/g)

t est le temps (en j)

Pour plus de commodité et pour éviter que les constantes ne dépendent des unités choisies, on est amené à faire des changements de variable. L'isotherme d'adsorption utilisé est un isotherme de type Langmuir, qui semble le plus proche de ce qui est observé dans la pratique. La résolution de l'équation de diffusion est faite par méthode numérique, après définition d'une maille de points représentant le milieu de diffusion. Un exemple simple est donné sur la figure ci-contre. La résolution est faite par la méthode implicite des



directions alternées (Firdaouss et Ta-Dhuoc, 1984), avec un balayage suivant la verticale au premier demi pas de temps, et suivant l'horizontale au second demi pas de temps. Plusieurs type de conditions aux limites à l'entrée et à la sortie du système peuvent être considérées.

Les simulations faites avec le modèle considéré montrent que la géométrie des pores a un effet négligeable sur les vitesses d'équilibrage des concentrations entre zone mobile, dans les macropores, et zone immobile, dans les micropores.

**PROGRAMME ENVIRONNEMENT GEOSPHERE INTERTROPICALE
PEGI**

- EROSION, ALTERATION, PEDOGENESE
- Traceurs Physiques, Chimiques et Biologiques

12 et 13 DECEMBRE 1994
à la Société Géologique de France
77, rue Claude Bernard
75005 PARIS

PROGRAMME :

- . Cosmonucléides et pédogenèse
- . Comportement des isotopes de Sr, U, Th
- . Datation des altérations
- . Cristallochimie de l'altération et de l'érosion
- . Biogéomarqueurs dans les eaux
- . Réactivité et porosité
- . Phytolithes

Organisateurs : Jacques Boulègue, Bruno Hamelin, Yves Lucas

Secrétariat
Renseignements
et Inscriptions

Dr Bernard HIERONYMUS - Mme Geneviève LETEMPLIER
Laboratoire de Géochimie - Casier Postal 124, UPMC
Tél. : 44 27 50 06 Fax : 44 27 51 41