

**SIMULATION NUMÉRIQUE
DES FLUX HYDRIQUES ET PRÉDICTION
DE LA SALINITÉ DANS LES SOLS**

M. RIEU

ISBN 2-7099-0684-8

Copyright ORSTOM 1983

SOMMAIRE

Structure du modèle et méthodes

Simulation de la dynamique de l'eau dans le sol

Simulation des transferts de solutés et de l'équilibre

Détermination des caractéristiques hydrodynamiques

Programme SIMUL

Généralités

Introduction des données initiales

Dispositions particulières

Exemples de simulation

Validations

Simulation standard

Bibliographie

Texte du programme "SIMUL"

INTRODUCTION

L'apologie de la méthode de simulation par modèles numériques, moyen par excellence d'analyse et de prévision n'est plus à faire. Ses applications en pédologie sont nombreuses, que ce soit dans l'investigation des mécanismes de la pédogenèse ou dans l'estimation préalable de l'effet sur les sols des travaux d'aménagements et même des façons culturales.

Le travail présenté ici a été entrepris dans le but de déterminer l'évolution probable de la salinité d'un sol au cas où il serait irrigué avec une eau de qualité donnée. Pour cela, on a cherché à reproduire par le calcul, en fonction d'une échelle de temps simulé, les processus majeurs, observés sur le terrain, selon lesquels les sels apparaissent ou disparaissent dans le sol. L'environnement du sol a été défini par des facteurs externes d'ordre atmosphérique : précipitations et évaporation ; agronomiques : irrigations, consommation en eau par la végétation ; ou souterrains : fluctuation du niveau de la nappe phréatique et de sa salinité. L'ensemble de ces données étant connu, le sol caractérisé et le modèle "calé" par la simulation d'épisodes précis et mesurés sur le terrain, il devient possible, grâce à la rapidité de calcul des ordinateurs, d'anticiper sur l'avenir. Les calculs se déroulent en deux étapes :

Il faut d'abord évaluer les quantités d'éléments solubles transférés d'un élément de sol à un autre pendant un espace de temps donné. Les phénomènes de diffusion moléculaire pouvant être le plus souvent négligés, on admet que ces transferts se produisent par convection grâce aux flux hydriques dont le sol est le siège. Dans cette perspective, le sol apparaît comme un substrat poreux dont les caractéristiques hydrodynamiques règlent le mouvement des flux.

Mais le sol est aussi un milieu réactif, constitué par l'assemblage d'éléments minéraux et organiques solubles dans l'eau à des degrés divers et dont le complexe adsorbant peut échanger des ions avec la solution à son contact. A tout instant et en tout point, il doit y avoir équilibre, du point de vue thermodynamique, entre les quatre

phases : gazeuse (atmosphère du sol), liquide (solution du sol), solide (silicates et sels cristallisés) et échangeuse d'ions (capacité d'échange du sol).

Mécaniste dans sa conception, le modèle a été voulu pragmatique dans son développement. Il repose en effet sur l'extension à un système naturel, essentiellement anisotrope, de lois établies pour des systèmes idéaux : faute de pouvoir rendre compte de l'infinité d'états d'équilibre qui se succèdent ou coexistent dans le sol au gré des flux qui le parcourent, on en est réduit à préciser, à des intervalles de temps plus ou moins rapprochés, l'équilibre moyen de strates de sol de composition et mode d'assemblage approximativement uniformes, dont la superposition constitue le profil simulé.

Du point de vue spatial, le modèle, limité à la dimension verticale n'est applicable qu'à des zones où les transferts latéraux sont négligeables ; limité à une surface de base élémentaire, il ne peut exprimer que l'évolution d'un profil unique, très exactement déterminé. Il ne nous a pas paru opportun de chercher à exprimer, à l'aide d'un modèle unique, l'évolution globale d'un ensemble de sols, même très voisins. Les traitements statistiques, assez lourds, auxquels il faudrait alors recourir tendraient à estomper des variations qui sont d'abord le reflet d'une dépendance génétique ; les possibilités de généralisation ainsi offertes resteraient limitées sinon contestables. Il nous a semblé préférable d'envisager la simulation d'une série de comportements spécifiques entre lesquels des liens organiques puissent être mis en évidence.

Dans les pages qui suivent, l'accent a été mis sur la modélisation des transferts de l'eau et des solutés tandis que celle de la mise à l'équilibre est à peine ébauchée. Cet aspect du modèle est en effet dû à J.E. DUFÉY et al. (1979), et est exposé en détail dans les publications de ces auteurs. Leur programme SOPREC a été raccordé au programme TRASOL (M. RIEU et al., 1980) afin de constituer le programme général SIMUL.

STRUCTURE DU MODELE ET METHODES

SIMULATION DE LA DYNAMIQUE DE L'EAU DANS LE SOL

RAPPELS THEORIQUES

En tout point du sol, l'eau est affectée d'un potentiel total H , ou charge hydraulique, dont les composants essentiels sont le potentiel gravitaire Z et le potentiel de succion h (h a la dimension d'une longueur, soit d'une pression exprimée en hauteur d'eau par rapport à la pression atmosphérique). Les gradients de potentiel total sont à l'origine des mouvements de masses d'eau dans le sol ou flux hydriques. Selon la loi de DARCY, le flux hydrique, ou hauteur d'eau traversant, pendant l'unité de temps, une surface unitaire perpendiculaire à l'axe de propagation, est proportionnel au gradient du potentiel total selon la direction de circulation.

Les terres irrigables dont on cherche à prévoir le devenir sont en général planes et l'on peut considérer que l'essentiel des mouvements de l'eau se produit selon un axe vertical. Soit \vec{Oz} cet axe, orienté vers le bas. Dans ce cas le flux hydrique s'écrit :

$$q = - K(\theta) \cdot (\partial H / \partial z) \quad (1)$$

où $K(\theta)$ est la conductivité hydraulique. $K(\theta)$ et q ont la dimension d'une vitesse. Dans le domaine non saturé, $K(\theta)$ varie en fonction de la teneur en eau θ du sol. (θ est la teneur en eau exprimée sous forme volumique : si w est la teneur en eau pondérale exprimée en g d'eau par g de sol et dA la densité apparente, on a : $\theta = w \cdot dA$). En milieu saturé, la succion étant nulle, H se réduit au potentiel gravitaire. L'axe \vec{Oz} étant orienté vers le bas, on a $\partial Z / \partial z = -1$ et $q = K$. En milieu non saturé, les flux hydriques produisent une variation de teneur en eau qui est explicitée par l'équation de continuité :

$$\partial \theta / \partial t = - \partial q / \partial z \quad (2)$$

En remplaçant q par sa valeur et tenant compte de l'orientation de l'axe \vec{Oz} , on peut écrire :

$$\partial \theta / \partial t = - \frac{\partial}{\partial z} \left\{ - K(\theta) \cdot \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right\} \quad (3)$$

ou encore :

$$\partial \theta / \partial t = - \frac{\partial}{\partial z} \left\{ - K(\theta) \cdot \frac{\partial h}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z} + K(\theta) \right\}$$

En introduisant la diffusivité $D(\theta) = K(\theta) \cdot \frac{\partial h}{\partial \theta}$ (CHILDERS et COLLIS GEORGE, 1950), l'équation (3) peut s'écrire :

$$\partial \theta / \partial t = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} - K(\theta) \right\} \quad (4)$$

où t est exprimé en jours, z en cm, θ en cm^3/cm^3 , h en cm d'eau, $K(\theta)$ en cm/j et $D(\theta)$ en cm^2/j .

ELABORATION D'UN MODELE HYDRODYNAMIQUE

L'équation différentielle (4) décrit la variation instantanée de la teneur en eau dans un volume élémentaire de sol traversé par des flux hydriques selon un axe \vec{Oz} . Elle traduit la conservation de la masse d'eau dans ce volume. Son utilisation pratique requiert la détermination de relations fonctionnelles exprimant la variation de la conductivité hydraulique et de la diffusivité en fonction de la teneur en eau. En raison de la non linéarité de ces relations, il n'existe pas, dans le cas général, de solution analytique pour une telle équation. Il est possible cependant de rechercher une solution numérique en substituant des opérateurs discrets aux opérateurs différentiels. La méthode de discrétisation adoptée dans ce travail est fondée sur les différences finies, selon un schéma implicite du type CRANK - NICHOLSON (1956).

DISCRETISATION DE L'EQUATION DE CONTINUITE

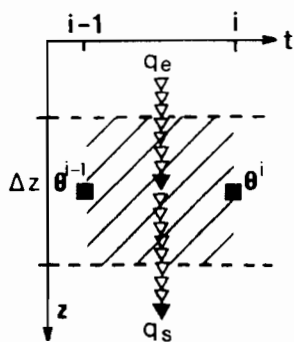


Fig. 1 - Discrétisation de l'équation de continuité. Cas d'un volume élémentaire.

Pour un volume élémentaire de sol, de surface de base unitaire et d'épaisseur Δz (Fig. 1), on peut écrire que, pendant un espace de temps $t^i - t^{i-1}$, la variation de teneur en eau dans ce volume est égale au gradient selon \vec{Oz} du flux moyen pendant cette période (éq. 2) :

$$\frac{\theta^i - \theta^{i-1}}{t^i - t^{i-1}} = - \frac{1}{\Delta z} \left[\frac{1}{2}(q_e^{i-1} + q_e^i) - \frac{1}{2}(q_s^{i-1} + q_s^i) \right]$$

=

$$- \frac{1}{\Delta z} \left[\frac{1}{2}(q_e - q_s)^{i-1} + \frac{1}{2}(q_e - q_s)^i \right] \quad (5)$$

q_e et q_s étant les flux entrant et sortant.

L'équation (5) peut être utilisée pour décrire l'évolution de la teneur en eau dans un profil de sol complet (Fig. 2). Considérant une série de surfaces imaginaires que l'on appellera "surfaces de transit", situées à des profondeurs $n.\Delta z$, ($n \in [0, Q]$), on peut étudier la variation de la teneur en eau au niveau de chaque surface de transit j , en fonction des flux hydriques en direction ou provenance des surfaces adjacentes. Cette teneur en eau est étendue au volume élémentaire situé entre les cotes $j.\Delta z - \Delta z/2$ et $j.\Delta z + \Delta z/2$. A la limite supérieure du sol, on considère un demi-volume élémentaire situé au-dessous de la surface 1 et, à la limite inférieure, un demi-volume situé au-dessus de la surface Q .

En écrivant pour chaque volume élémentaire une équation du type (5), on constitue un système de Q équations de la forme :

$$\frac{\Delta \theta_j^i}{\Delta t} = -\frac{1}{\Delta z} \left[\frac{1}{2}(q^{i-1} + q^i)_{j-1} - \frac{1}{2}(q^{i-1} + q^i)_j \right]$$

soit

$$\frac{\Delta \theta_j^i}{\Delta t} = -\frac{1}{\Delta z} (q_{j-1}^{i-1/2} - q_j^{i-1/2}) \quad (6)$$

L'axe \vec{Oz} étant orienté vers le bas, les flux descendants sont positifs et les flux ascendants négatifs.

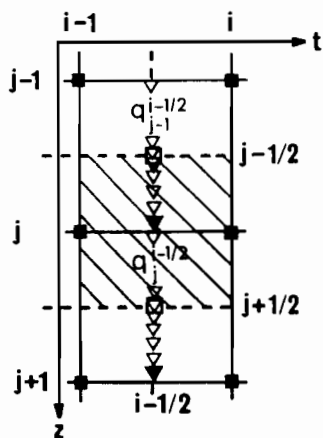


Fig. 2 - Discrétisation de l'équation de continuité. Cas général.

Le flux moyen échangé entre les surfaces j et $j+1$ s'écrit :

$$q_j^{i-1/2} = K_{j+1/2}^{i-1/2} - D_{j+1/2}^{i-1/2} \cdot \frac{\Delta \theta_{j+1/2}^{i-1/2}}{\Delta z}$$

expression dans laquelle $K_{j+1/2}^{i-1/2}$ et $D_{j+1/2}^{i-1/2}$ représentent la valeur de la conductivité et de la diffusivité moyennes pendant l'intervalle de temps $t^i - t^{i-1}$ et pour une teneur en eau moyenne entre θ_j et θ_{j+1} .

On a :

$$\frac{\Delta \theta_{j+\frac{1}{2}}^{i-\frac{1}{2}}}{\Delta z} = \frac{\frac{1}{2}(\theta^{i-1} + \theta^i)_{j+1} - \frac{1}{2}(\theta^{i-1} + \theta^i)_j}{\Delta z}$$

En appliquant les conventions d'écriture précédentes, le développement de l'équation (6) est de la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\theta_j^i - \theta_j^{i-1}}{\Delta z} &= \frac{D_{j-\frac{1}{2}}^{i-\frac{1}{2}} (\theta_j^{i-1} + \theta_j^i - \theta_{j-1}^{i-1} - \theta_{j-1}^i) - 2.G.K_{j-\frac{1}{2}}^{i-\frac{1}{2}}}{2\Delta z^2} \\ &\quad - \frac{D_{j+\frac{1}{2}}^{i-\frac{1}{2}} (\theta_{j+1}^{i-1} - \theta_{j+1}^i - \theta_j^{i-1} - \theta_j^i) - 2.G.K_{j+\frac{1}{2}}^{i-\frac{1}{2}}}{2\Delta z^2} \end{aligned} \quad (7)$$

où $G = \Delta z$

CHOIX DES VALEURS DE Δz ET Δt

La surface de base utilisée est la surface unitaire : 1 cm². Pour que l'équation (7) soit applicable aux extrémités d'une section de sol, l'ensemble de celle-ci doit posséder les mêmes caractéristiques hydrodynamiques. La valeur de Δz est donc imposée par la morphologie du profil. Pour la simplicité des calculs, il est avantageux que toutes les sections aient la même épaisseur. Enfin, plus la valeur de Δz est faible plus le profil hydrique calculé est précis. La valeur de $\Delta z = 5$ cm adoptée dans ce travail représente un compromis entre le degré de différenciation des profils, la précision des profils hydriques mesurés sur le terrain et le souci de ne pas alourdir les calculs de simulation. Les teneurs en eau calculées tous les 5 cm sont étendues aux 2,5 cm situés de part et d'autre de chaque surface de transit, de manière à constituer un profil hydrique continu. La teneur en eau aux limites du sol est étendue aux 2,5 cm au-dessous de la surface 1 et au-dessus de la dernière.

La durée de l'intervalle de temps doit permettre de "suivre" l'infiltration d'une pluie ou d'une irrigation ainsi que les flux ascendants induits par l'assèchement du sol. Pour la simulation de ces derniers flux, en général lents, un Δt de l'ordre de la journée serait suffisant. Par contre, lorsqu'il y a une charge d'eau à la surface du sol la conductivité hydraulique peut être élevée dans les premières sections du sol et les flux rapides. Il résulte de la conception du modèle que ces flux ne pourront être pris en compte dans les calculs que si pendant Δt ils n'ont pas parcouru une distance supérieure à Δz : plus les flux sont rapides plus l'intervalle de temps doit être faible. On a opté dans ce travail pour une valeur maximum de $\Delta t = 0,1$ jour qui permet de tenir compte de flux allant jusqu'à 50 cm/jour ; le cas échéant, Δt peut être réduit de sorte que l'on ait toujours :

$$q_{\text{maximum}}^{i-1} \cdot \Delta t^i \leq .035 \cdot \Delta z$$

Du point de vue strictement numérique, les incréments d'espace et de temps doivent être déterminés avec prudence afin d'éviter le plus possible les phénomènes de divergence. On se référera à ce propos aux travaux de HAVERKAMP et al. (1977), VAUCLIN, HAVERKAMP et VACHAUD (1978) et HAVERKAMP et VAUCLIN (1981) : si l'on opère pour z et t les transformations affines :

$$z^* = \frac{z}{L} \quad \text{et} \quad t^* = \frac{t}{T}$$

avec

$$L = h_0 - h_n \quad \text{et} \quad T = \frac{(h_0 - h_n) (\theta_0 - \theta_n)}{K_{\text{sat.}}}$$

h_0 et h_n étant deux valeurs particulières de la succion et θ_0 et θ_n les teneurs en eau correspondantes ; K_{sat} la conductivité hydraulique à la saturation, ces auteurs indiquent que si la condition :

$$0.5 \leq \frac{\Delta t}{\Delta z^2} \leq 50$$

est respectée, le schéma de CRANK-NICHOLSON est stable.

ESTIMATION DE $K_{j+\frac{1}{2}}^{i-\frac{1}{2}}$ ET $D_{j+\frac{1}{2}}^{i-\frac{1}{2}}$

Le flux moyen pendant l'intervalle de temps $t^i - t^{i-1}$ doit être calculé en fonction de la teneur en eau moyenne pendant cette période. Comme on ne connaît pas θ au temps t^i , on a recours à l'un ou l'autre procédé d'extrapolation linéaire. Le plus couramment employé est celui de HANKS et BOWERS (1962) par lequel on calcule une valeur anticipée de θ^i :

$$\theta_{\text{ant}} = \theta^{i-1} + \alpha \cdot (\theta^{i-1} - \theta^{i-2})$$

$$\text{avec : } \alpha = 0.7 \cdot \frac{t^i - t^{i-1}}{t^{i-1} - t^{i-2}}$$

Après avoir constaté de fortes incohérences dans le calcul anticipé de θ^i , il a semblé préférable de faire l'approximation que K et D ne varient pas pendant un intervalle de temps et sont égaux à leur valeur au début de cet intervalle de temps. Cette approximation n'introduit pas une grande erreur : pendant une phase de redistribution les teneurs en eau varient lentement ; pendant une infiltration, la teneur en eau peut varier rapidement, mais alors les flux sont intenses et les intervalles de temps réduits en conséquence.

On calcule donc :

$$K_{j+\frac{1}{2}}^{i-1} = K(\bar{\theta}^{i-1}) \quad \text{et} \quad D_{j+\frac{1}{2}}^{i-1} = K_{j+\frac{1}{2}}^{i-1} \cdot \frac{dh}{d\bar{\theta}^{i-1}}$$

$$\text{avec } \bar{\theta}^{i-1} = \frac{1}{2}(\theta_j^{i-1} + \theta_{j+1}^{i-1})$$

Enfin, si plusieurs zones hydrodynamiques sont à prendre en considération pour un même profil, on calcule une conductivité hydraulique moyenne à la limite des zones adjacentes. Ainsi pour les zones 1 et 2 on a :

$$K_{1,2} = \sqrt{K_1 \cdot K_2}$$

Etant donné la grande dispersion des données expérimentales sur la relation $h - \theta$, on peut en général se limiter à une expression unique pour $h(\theta)$ et, partant, $dh/d\theta$. On a alors :

$$D_{1,2} = K_{1,2} \cdot dh/d\theta$$

EVAPORATION ET CONSOMMATION EN EAU

L'eau qui, remontant par les capillaires, atteint la surface du sol nu est vaporisée. La surface de transit 1 est donc traversée par un flux ascendant. Toutefois, ce flux ne peut exister que tant que la teneur en eau au-dessous de la surface 1 est suffisante pour que la conductivité hydraulique ne soit pas négligeable (rupture des capillaires). En réalité, la surface du sol n'est jamais parfaitement continue et même si il n'y a plus de flux à la surface "sensu stricto", il s'en produit encore à l'intérieur des fissures et au sein des irrégularités proches de la surface. Les phénomènes évaporatoires affectent alors une couche superficielle d'épaisseur variable selon la structure du sol. Lorsque le sol est partiellement couvert par la végétation (parcelles cultivées), l'évaporation directe continue à exister, combinée à la consommation par la végétation. Lorsque le tapis végétal est continu, on peut admettre que la surface du sol n'évapore plus directement.

Dans ces conditions, plutôt que de combiner une consommation racinaire avec un flux évaporatoire variable (toujours délicat à déterminer), il a paru plus simple de traiter dans tous les cas les pertes d'eau dans la partie supérieure du sol comme un appauvrissement global des couches superficielles. Cette ponction est exercée par le système racinaire d'une végétation réelle ou fictive.

Numériquement, l'appauvrissement est obtenu en affectant les θ_j d'un terme correctif ou fonction puits et aucun flux ascendant traversant la surface 1 n'est introduit comme donnée initiale ou calculé.

La consommation en eau journalière est évaluée en faisant le produit de l'E.T.P. du jour par le "crop factor" du stade végétatif de la culture en cours. Si le sol n'est que partiellement couvert par la

végétation ou même nu on utilise un crop-factor fictif que l'on détermine en pratiquant des essais de simulation calés sur l'évolution de profils hydriques observés sur le terrain. La consommation est distribuée à l'intérieur du profil au prorata de la densité du système racinaire et est calculée à chaque intervalle de temps. Etant donné le caractère grossier de ce modèle évaporatoire, il a paru suffisant de déterminer la proportion de racines par strates de 15 cm d'épaisseur. L'eau consommée au sein de chaque strate et par jour est alors :

$$S = ETP \cdot CF \cdot KP$$

où ETP = ETP du jour (cm d'eau)

CF = Crop factor

KP = Proportion de racines contenues dans la strate
(en fractions d'unité)

La valeur de S est alors transformée en une donnée volumique par intervalle de temps et est retranchée à la variation de la teneur en eau, pendant cet intervalle de temps, de part et d'autre des surfaces de transit contenues dans chaque strate. La valeur "corrigée" de chaque θ_j ainsi obtenue étant étendue aux 2,5 cm situés de part et d'autre de chaque surface de transit, la totalité de la consommation en eau est prise en compte. La surface de base étant la surface unitaire, on a le terme correctif :

$$S_j^i = \frac{ETP \cdot CF \cdot KP \cdot \Delta t^i}{15}$$

S_j^i étant exprimé en cm^3 d'eau par cm^3 de sol pour un intervalle de temps.

Pour un volume élémentaire j affecté par une consommation en eau, le bilan local devient (cf. équ. 6) :

$$\theta_j^i = \left[\theta_j^{i-1} - S_j^i - \frac{1}{\Delta z} (q_{j-1}^{i-\frac{1}{2}} - q_j^{i-\frac{1}{2}}) \right] \cdot \Delta t^i$$

La consommation en eau ou l'évaporation directe sont donc évaluées sur une base de temps journalière et ramenées pour les besoins du

calcul à leur valeur pour un intervalle de temps. Dans les régions où l'on peut envisager l'application du modèle de simulation, les données sur l'E.T.P. sont des moyennes mensuelles, bi-hebdomadaires dans les meilleurs des cas. Quant aux valeurs des "crop-factors," elles sont généralement extrapolées à partir de mesures effectuées dans des stations agronomiques souvent fort éloignées. La disproportion est grande entre la précision des calculs effectués sur une base de temps de 0,1 jour et la mauvaise qualité des données agro-climatiques établies sur une base de temps supérieure à 15 jours. Si le modèle présenté dans ce travail prend effectivement en compte une consommation globale journalière, il ne peut être utilisé pour la simulation précise des processus évaporatoires. En tout état de cause, il est indispensable de pratiquer des essais de simulation calés sur des exemples réels afin d'ajuster les valeurs des crop-factors et éventuellement corriger celles de E.T.P.

CONDITIONS AUX LIMITES

Le système de Q équations du type (7) comporte $Q+2$ inconnues : en effet les termes θ_0 et θ_{Q+1} apparaissent dans la première et la dernière équation où sont calculés θ_1 et θ_Q respectivement. Des conditions aux limites simples permettent de définir ces deux teneurs en eau sans avoir à utiliser les équations correspondantes :

- A la base du sol, on peut considérer que le régime est permanent au-dessous de la surface $Q-1$ et que θ_Q est constant. Cela revient à identifier le flux échangé entre la surface Q et le sous-sol avec celui qui a circulé entre les surfaces $Q-1$ et Q . C'est ce dernier qui est calculé afin d'évaluer les échanges avec le sous-sol ou la nappe phréatique. On attribue à θ_Q la valeur moyenne mesurée dans le sous-sol ou la valeur maximum si il y a une nappe.

On a ainsi à la base du sol :

$$\theta_Q = \text{Constante } (\theta_{\text{sous-sol}} \text{ ou } \theta_{\text{max}})$$

$$q_Q = q_{Q-1}$$

- En surface, deux situations sont possibles :

- Dans le cas d'un apport d'eau, pluie ou irrigation, le modèle prend en compte une hauteur d'eau égale à la totalité de l'eau d'apport, présente en surface du sol dès le début de l'infiltration. Cette hauteur d'eau est ensuite progressivement réduite, au prorata de la hauteur infiltrée. Cette schématisation, assez proche de la réalité d'une irrigation par submersion ou d'une forte pluie, est peu adaptée à la simulation d'une pluie de faible intensité. On notera toutefois que le fait de considérer une hauteur d'eau à infiltrer en surface du sol ne correspond pas à la prise en compte d'une charge d'eau. (*) En effet, l'équation (7), exprimée en fonction de θ , ne décrit pas le champ des pressions.

Numériquement, l'amorçage de l'infiltration est obtenu grâce à deux approximations. La première consiste à attribuer à θ_1 la valeur maximum dès le début de l'infiltration et tant qu'il reste de l'eau à infiltrer. Il en résulte une augmentation instantanée et arbitraire du stock d'eau dans le sol, les 2,5 premiers cm passant à la teneur en eau à la saturation. La hauteur d'eau correspondante doit donc être déduite de la hauteur initiale d'eau à infiltrer. Attribuer à θ_1 la valeur maximum revient à prendre en compte subitement un flux d'infiltration maximum qui pénètre jusqu'à 2,5 cm de profondeur. De manière à assurer à ce flux une propagation correcte à l'intérieur du sol on a recours à une deuxième approximation qui consiste à admettre qu'il est maximum au moins jusqu'à la deuxième surface de transit, tant qu'il y a de l'eau à infiltrer. Cet artifice crée arbitrairement des conditions optimales de pénétration de l'eau entre les surfaces 1 et 2 mais a l'inconvénient de rendre possible une sursaturation en eau au niveau de la surface 2. Toutefois un excès d'eau à ce niveau est calculé et redistribué vers la profondeur ; ce qui est impossible au niveau de la surface 1 où la teneur en eau est nécessairement constante.

(*) Sous sa forme actuelle, le modèle suppose une infiltrabilité maximum en surface du sol. Dans le cas d'un apport d'eau brutal et excessif, aucun ruissellement n'est pris en considération : toute l'eau est infiltrée.

Enfin, de nombreux essais de calcul ont permis de vérifier qu'une situation de sursaturation, lorsqu'elle se produisait, était toujours de courte durée, inférieure à 0.1 jour. En résumé, les deux conditions adoptées en surface du sol dans le cas de l'infiltration sont :

$$\theta_1 = \theta_{\max}$$

$$q_1 = q_{\max}$$

• En l'absence d'eau à infiltrer, le seul processus actif en surface du sol est l'évaporation-consommation. Ce dernier est simulé par une fonction puits, sans qu'il soit nécessaire de calculer un flux évaporatoire q_0 . Mais, il est nécessaire d'évaluer θ_1 et le flux q_1 qui assure la redistribution de l'eau dans les premiers cm du sol. On considère que les 2.5 premiers cm de sol, à la teneur en eau θ_1 , ont un comportement solidaire des 5 cm suivants, mais avec des ressources en eau inférieures, puisque le volume est deux fois plus faible, et avec un retard d'un intervalle de temps. Ces options sont approximativement traduites par l'expression du flux q_1 (cf. p. 14 et 15) :

$$q_1^{i-\frac{1}{2}} = K_{1+\frac{1}{2}}^{i-1} - D_{1+\frac{1}{2}}^{i-1} \left(\frac{\theta_2^i - \theta_1^{i-1}}{1.5 \Delta z} \right)$$

expression dans laquelle le dénominateur $2 \Delta z$ a été remplacé par $1.5 \Delta z$ puisque le domaine étudié est de 7.5 cm au lieu de 10 cm et où le terme θ_1^i , qui n'est pas encore déterminé, est anticipé par la valeur de θ_2^{i-1} , ce qui traduit la tendance de θ_1 à suivre l'évolution de θ_2 avec un décalage dans le temps.

θ_1^i est ensuite calculé en faisant le bilan local entre 0 et 2,5 cm :

$$0.5 \cdot \Delta z (\theta_1^i - \theta_1^{i-1}) = - q_1^{i-\frac{1}{2}} \cdot \Delta t$$

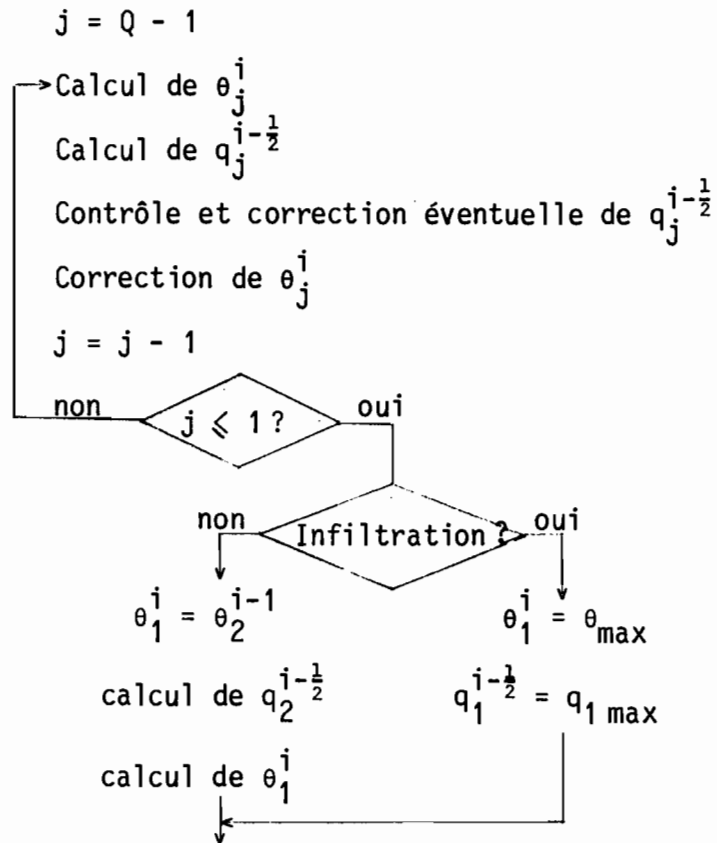
et c'est cette dernière valeur qui est retenue à la place de la première valeur anticipée. Numériquement on obtient ainsi une convergence progressive entre θ_1 et θ_2 vers une valeur commune décroissante en fonction de la consommation.

RESOLUTION DU SYSTEME D'EQUATIONS

θ_Q^i étant connu et constant, il est possible, à partir d'un premier ensemble de valeurs θ_j^{i-1} de résoudre le système d'équations à l'aide de l'ordinateur (*). On calcule ainsi de proche en proche θ_{Q-1}^i et $q_{Q-1}^{i-\frac{1}{2}}$ puis θ_{Q-2}^i et $q_{Q-2}^{i-\frac{1}{2}}$ et ainsi de suite jusqu'à θ_1^i et $q_1^{i-\frac{1}{2}}$ qui sont fixés par les conditions en surface ou doivent être calculés, selon le cas. Un contrôle doit être exercé sur la valeur des flux, tout flux supérieur à la perméabilité maximum du milieu n'ayant aucun sens physique.

On a constaté toutefois que cette organisation des calculs ne permettait pas de respecter le principe du bilan local avec toute la rigueur désirée. Ceci est dû au fait que les flux calculés sont des flux moyens ; en outre ils sont calculés à partir de valeurs de θ obtenues grâce à la discrétisation de l'équation (7). Les interpolations et approximations qui interviennent dans ces calculs sont à l'origine d'erreurs très faibles mais qui se cumulent et dont l'influence ne peut être négligée dans le cas d'une simulation d'une longue période. Dans ces conditions, il a paru convenable d'homogénéiser les résultats en corrigeant les valeurs de θ_j^i en fonction de celles de $q_j^{i-\frac{1}{2}}$ à chaque itération. Cette correction minime s'est avérée efficace. On parvient ainsi à l'organisation suivante :

(*) Algorithme de la matrice tridiagonale de THOMAS (RICHTMYER, 1957)



La série de valeurs θ_j^i constitue les données initiales θ_j^{i-1} pour la simulation de l'intervalle de temps suivant.

SIMULATION DES TRANSFERTS DE SOLUTÉS ET DE L'ÉQUILIBRE

PRINCIPE DU CALCUL ET SEGMENTATION DU PROFIL

La simulation du transfert des espèces solubles repose sur le postulat que tout soluté migre librement par convection dans le sol, au gré des flux hydriques pendant un intervalle de temps et que les mélanges entre solutions de provenance différente ne s'effectuent qu'à la fin de l'intervalle de temps. Cette approximation est d'autant moins grossière que l'intervalle de temps est bref.

La méthode utilisée consiste à effectuer à la fin de chaque intervalle de temps un bilan des masses de soluté contenues dans un élément de sol donné dont l'état initial est connu. Ce dernier est défini par le volume d'eau que contient l'élément de sol et les molalités des espèces solubles : K^+ , Na^+ , Ca^{++} , Mg^{++} , Cl^- , $SO_4^{=}$, $(HCO_3^- + 2 CO_3^{=})$ et H_4SiO_4 . On admet, à ce stade des calculs, que le pouvoir tampon du sol est suffisant pour neutraliser les variations de pH dues aux flux d'ions H^+ en solution.

Après avoir calculé la masse de chaque espèce soluble que contient l'élément de sol, on évalue, en fonction du volume d'eau ayant flué vers les éléments adjacents, les masses de soluté perdues. Les masses de soluté gagnées aux dépens des éléments de sol voisins sont évaluées de manière identique, en fonction de l'état initial de ces derniers et des volumes d'eau ayant pénétré dans l'élément de sol étudié. Le bilan de masse est alors établi pour chaque espèce en fonction des masses conservées, gagnées ou perdues par l'élément de sol considéré. Enfin, le nouveau contenu en eau de ce dernier ayant été calculé, les molalités de la nouvelle solution du sol sont déterminées. Il s'agit de valeurs globales qui peuvent exprimer des sursaturations éventuelles.

Ces molalités constituent les données initiales pour les programmes de calcul de l'équilibre thermodynamique. Afin de pouvoir préciser le pH exact de la solution du sol il est nécessaire d'adjoindre à ces données la valeur de fugacité du CO_2 dans le sol étudié.

Il s'agit donc d'opérations simples mais longues qu'il a paru inadéquat de répéter pour chaque section de sol de 5 cm d'épaisseur. Les horizons pédologiques, que l'on considère ici homogènes du point de vue de leur composition chimique, sont en général plus épais et les calculs de simulation auraient été inutilement chargés. Le profil du sol a été découpé en "segments de sol" de 15 cm d'épaisseur, c'est-à-dire 3.Δz, cette dimension ayant paru plus proche de la réalité physique. Ce choix implique que l'on ne peut simuler la salinisation que d'horizons dont l'épaisseur est approximativement un multiple de 15 cm. En particulier, la simulation de la formation d'une croûte saline de quelques millimètres d'épaisseur au voisinage de la surface n'entre pas dans les performances du modèle, qui ne pourra exprimer qu'une accumulation saline diffuse dans les premiers 15 cm du profil. Aux segments correspondant au sol proprement dit, il convient d'ajouter un segment au-dessus de la surface et un autre au-dessous de la limite inférieure. Le segment superficiel contient l'eau d'apport, pluie ou irrigation, ou est vide ; les molalités correspondantes sont soit constantes soit nulles. Le segment inférieur correspond soit au sous-sol, soit à la nappe phréatique qui est envisagée comme la solution du sol d'un segment saturé en eau. Il en résulte que toute variation du niveau de la nappe ne pourra être prise en compte dans la simulation que lorsqu'elle aura atteint l'épaisseur d'un segment. On a admis avec CHEVERRY (1972) que la composition chimique de la nappe pouvait être assimilée à celle de la solution du segment de sol immédiatement à son contact. En pratique, cela revient à attribuer à la nappe la composition du segment qu'elle vient d'envoyer dans le cas d'une hausse de niveau et, dans le cas d'une baisse, de conserver inchangée la composition antérieure.

CALCUL DU TRANSFERT DES SOLUTES

Les segments sont indicés JJ (JJ = 1, ..., QQ + 1). A la fin de chaque Δt et à partir des résultats du modèle hydrodynamique, on effectue les calculs suivants :

- Un segment de sol incluant 4 surfaces de transit, sa teneur en eau s'obtient en faisant une moyenne pondérée des teneurs en eau au voisinage de ces 4 surfaces :

$$\theta_{JJ} = \frac{2,5 \theta_j + 5 \theta_{j+1} + 5 \theta_{j+2} + 2,5 \theta_{j+3}}{15}$$

et son contenu en eau est égal à $\theta_{JJ} \cdot 15 \text{ cm}^3$, la surface de base étant 1 cm^2 . On détermine ainsi le contenu en eau au début d'un intervalle de temps, ORMOIS (JJ), et à la fin, SEGVOL (JJ), du segment JJ.

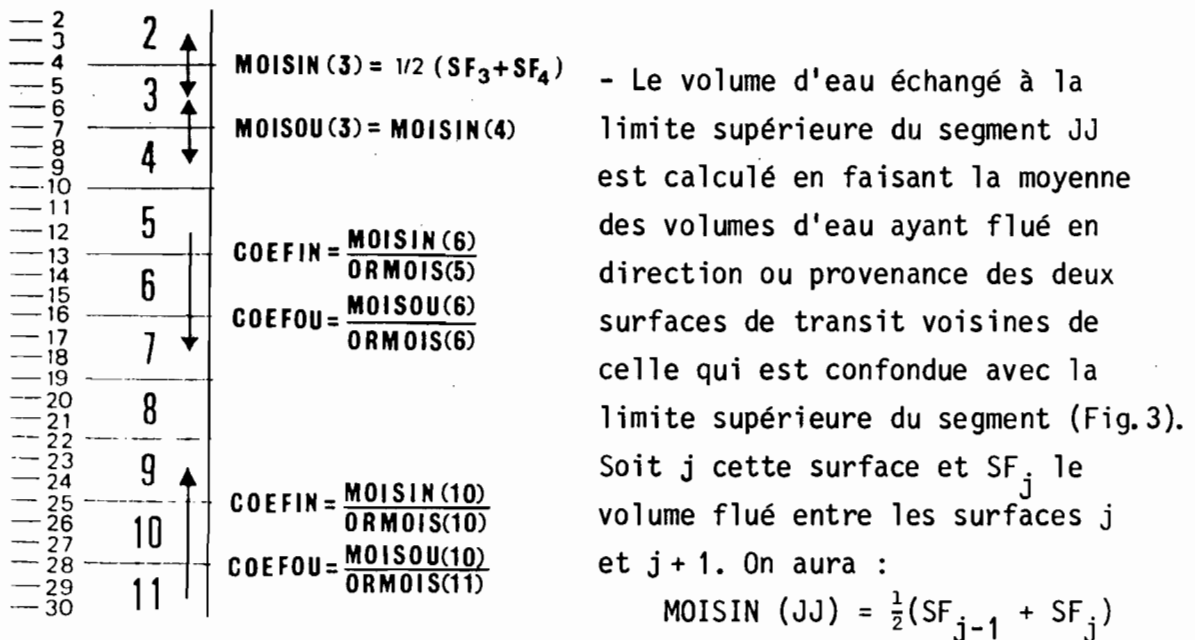


Fig.3-Coefficients de transfert.

Le volume échangé à la limite inférieure du segment JJ est défini par :

$$\text{MOISOU (JJ)} = \text{MOISIN (JJ+1)}$$

MOISIN (1) est toujours nul et MOISOU (1) = SF_1 , positif ou nul (Fig. 3).

- Pour chaque segment JJ on calcule les coefficients COEFIN et COEFOU, nombres affectés d'un signe, qui expriment le rapport des volumes d'eau ayant flué d'un segment à l'autre et le sens des flux. Le calcul de COEFIN et COEFOU met en jeu, selon le sens des flux, deux des trois segments adjacents JJ - 1, JJ et JJ+1 (Fig. 3).

Si les flux sont ascendants (MOISIN et MOISOU négatifs) on a :

$$\text{COEFIN} = \text{MOISIN (JJ)} / \text{ORMOIS (JJ)}$$

COEFIN et COEFOU négatifs

$$\text{COEFOU} = \text{MOISOU (JJ)} / \text{ORMOIS (JJ+1)}$$

Si les flux sont descendants (MOISIN et MOISOU positifs) on a :

$$\text{COEFIN} = \text{MOISIN (JJ)} / \text{ORMOIS (JJ-1)}$$

COEFIN et COEFOU positifs

$$\text{COEFOU} = \text{MOISOU (JJ)} / \text{ORMOIS (JJ)}$$

- Le nombre de moles des différentes espèces en solution dans chaque segment de sol au début de l'intervalle de temps est obtenu en multipliant chaque molarité par le contenu en eau initial du segment, exprimé en litres : $\text{ORMOIS (JJ)} \cdot 10^{-3}$. L'ensemble des valeurs ainsi calculées est réuni dans la matrice CONC1 (JJ, J) , J correspondant à chaque espèce.

- On appelle NK et LK les deux segments de sol (dont l'un est nécessairement JJ) entre lesquels un flux a été échangé. Si ce flux était ascendant on a $\text{NK} = \text{JJ}$ et $\text{LK} = \text{JJ} + 1$ et dans le cas contraire, $\text{NK} = \text{JJ} - 1$ et $\text{LK} = \text{JJ}$. On appelle D1(J) et D2(J) les nombres de moles de chaque espèce soluble J ayant traversé les limites supérieure et inférieure du segment JJ. On a : $\text{D1(J)} = \text{COEFIN} \cdot \text{CONC1 (NK, J)}$.

$$\text{D2(J)} = \text{COEFOU} \cdot \text{CONC1 (LK, J)}$$

D1(J) et D2(J) , ayant le signe de COEFIN ou COEFOU, peuvent être négatifs. Le nombre de moles perdues ou acquises par le segment JJ est alors : $\text{FL(J)} = \text{D1(J)} - \text{D2(J)}$, FL(J) pouvant être négatif ou même nul. Le nouveau contenu en solutés du segment JJ est égal à la somme algébrique des valeurs : $\text{CONC1(JJ, J)} + \text{FL(J)}$. Les nouvelles molarités de la solution du segment JJ sont obtenues en rapportant ce contenu en solutés au nouveau contenu en eau SEGVOL(JJ) .

Ces calculs sont effectués à la fin de chaque intervalle de temps pour tous les segments successivement.

MODELE DE MISE A L'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE

Les concentrations globales calculées pour chaque segment de sol expriment les quantités d'eau pure et des différentes espèces solubles présentes dans le segment à la fin de l'intervalle de temps, mais ne traduisent en rien l'équilibre du système complexe constitué par ce milieu. L'on peut y distinguer quatre phases : une phase gazeuse correspondant à l'atmosphère qui occupe une partie de la porosité ; une phase liquide constituée par l'eau qui remplit le restant de la porosité et par les espèces qu'elle contient en solution ; une phase solide fortement réactive formée par des sels précipités ; la matrice composée de silicates et de matière organique, peu réactive du point de vue de la solubilité, mais que l'on peut considérer comme une phase échangeuse d'ions.

A l'équilibre, la distribution des éléments actifs du système doit être telle que toutes les lois propres à chaque phase soient simultanément vérifiées. Il doit donc y avoir compatibilité entre les concentrations des ions libres et complexes en solution, les masses de précipités, la fugacité du CO_2 et les proportions des cations adsorbés ; les lois de conservation de masse et de neutralité électrique doivent être vérifiées.

Le modèle de calcul permettant de simuler l'équilibre thermodynamique à partir d'un jeu de concentrations initiales est dû à J.E. DUFÉY et al. et a fait l'objet de publications de la part de ces auteurs (DUFÉY J.E. et al., 1979 ; LAUDELOUT R., DUFÉY J.E. et SHETA T.H., 1979). On rappellera ici les aspects essentiels de la méthode de calcul utilisée dans ce modèle.

L'équilibre général du système est conçu comme le résultat de la convergence de trois équilibres partiels entre deux phases :

- Solution d'électrolytes et phase gazeuse,
- Solution d'électrolytes et masse de sels précipités,
- Solution d'électrolytes et complexe d'échange.

MISE A L'EQUILIBRE D'UNE SOLUTION D'ELECTROLYTES EN CONTACT AVEC
UNE PHASE GAZEUSE

Il s'agit de redistribuer des quantités fixes de solutés de sorte que les équilibres de dissociation des espèces complexes soient respectés. La phase gazeuse intervient par la fugacité du CO_2 qu'elle contient celle-ci réglant les équilibres des espèces carbonatées.

Les espèces solubles prises en compte sont au nombre de 15 : pCO_2 , CO_3^- , HCO_3^- , $\text{H}_2\text{CO}_3^\circ$, H^+ , OH^- , Na^+ , Cl^- , SO_4^- , Mg^{++} , MgSO_4° , MgCO_3° , Ca^{++} , CaSO_4° , CaCO_3° . Leur activité est calculée selon la théorie de DEBYE-HÜCKEL étendue (DROUBI et al., 1976). L'activité des espèces non chargées est assimilée à leur molalité. L'activité de l'eau est estimée égale à 1.

Le calcul de distribution s'appuie sur 8 constantes thermodynamiques de dissociation, 5 équations de conservation de masse et une équation d'électroneutralité, soit 14 équations. Le système ne peut être résolu que si l'une des espèces est fixée. Le calcul comporte deux possibilités : soit H^+ , soit pCO_2 constant. Dans la plupart des cas, bien que le pH du sol soit assez bien tamponné, la teneur en CO_2 de l'atmosphère du sol peut être considérée comme encore plus stable.

Les données du calcul sont alors pCO_2 et les concentrations totales :

$$\text{pCO}_2 = \text{constante}$$

$$\text{Na}_t = \text{Na}^+ \quad (8)$$

$$\text{Cl}_t = \text{Cl}^- \quad (9)$$

$$\text{Ca}_t = \text{Ca}^{++} + \text{CaSO}_4^\circ + \text{CaCO}_3^\circ \quad (10)$$

$$\text{Mg}_t = \text{Mg}^{++} + \text{MgSO}_4^\circ + \text{MgCO}_3^\circ \quad (11)$$

$$\text{SO}_{4t} = \text{SO}_4^- + \text{CaSO}_4^\circ + \text{MgSO}_4^\circ \quad (12)$$

Les concentrations étant exprimées en moles/litres et l'indice t indiquant les concentrations totales.

On a en outre l'équation d'électroneutralité :

$$2(\text{Ca}^{++} + \text{Mg}^{++} - \text{CO}_3^- - \text{SO}_4^-) + \text{Na}^+ + \text{H}^+ - \text{Cl}^- - \text{HCO}_3^- - \text{OH}^- = 0 \quad (13)$$

et les équilibres de dissociation :



où les () indiquent les activités. Les valeurs des constantes thermodynamiques de dissociation peuvent être trouvées dans la littérature, par exemple dans DROUBI, FRITZ et TARDY (1976).

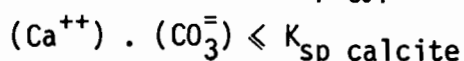
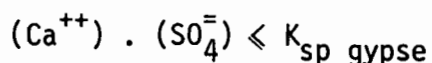
Les équations (14) à (21) permettent de calculer les concentrations des espèces chargées. Ecrites en termes d'activité, elles font intervenir les coefficients individuels d'activité qui sont établis en fonction de la force ionique de la solution ; mais la force ionique est elle-même fonction des concentrations des espèces chargées. Le système ne peut être résolu que par approximations successives librement convergentes.

Aucune donnée initiale sur l'alcalinité n'étant introduite et le pH n'étant pas déterminé, les équilibres carbonatés (éq. 14 à 16) ne peuvent être résolus. La méthode utilisée dans ce travail consiste à répéter le calcul de distribution pour des valeurs arbitraires successives du pH en déterminant à chaque fois la charge électrique résiduelle (éq. 13). Lorsque cette dernière devient inférieure à une valeur

déterminée (par ex. 10^{-5} équiv./litre), le calcul est interrompu.

*MISE A L'EQUILIBRE D'UNE SOLUTION D'ELECTROLYTES EN CONTACT AVEC
UNE MASSE D'EVAPORITES*

Sous sa forme actuelle, le modèle simule l'équilibre avec le gypse et la calcite seulement. Le calcul de distribution précédent a permis de déterminer les molalités et activités de Ca^{++} , Mg^{++} , SO_4^- , CO_3^- , CaSO_4^0 , MgSO_4^0 et CaCO_3^0 . Ces valeurs doivent être ajustées de sorte que l'on ait :



Cette correction implique la précipitation ou dissolution (dans la mesure du stock disponible) de quantités de gypse ou de calcite qui doivent être déterminées afin de réactualiser le stock dans le segment de sol.

Les calculs d'équilibration sont d'abord effectués pour le gypse puis pour la calcite. En effet, le gypse étant beaucoup plus soluble que la calcite (4 ordres de grandeur), la correction à effectuer peut être importante, tandis que la mise à l'équilibre avec la calcite implique rarement une révision des résultats obtenus pour le gypse. De la même manière, si le traitement du cas du gypse conduit à réévaluer MgSO_4^0 , la variation de MgCO_3^0 due à l'équilibration avec la calcite s'avère négligeable dans la plupart des cas.

Le calcul (*), fondé sur la comparaison entre les situations avant et après équilibration, consiste à déterminer les concentrations et activités à l'équilibre et le nombre de moles par litre, dissoutes ou précipitées. On fait l'approximation que les coefficients individuels d'activité ne sont pas sensiblement différents pour l'une et l'autre situation.

(*) DUFÉY J.E., Communication personnelle.

CAS DU GYPSE

avant équilibration

après équilibration

$$\text{Ca}^{++} \cdot \text{SO}_4^- = K'_s = K_s / \gamma_{\text{Ca}} \cdot \gamma_{\text{SO}_4} \quad (22)$$

$$\text{Ca}_e^{++} \cdot \text{SO}_{4e}^- = K'_{sp} = K_{sp} / \gamma_{\text{Ca}} \cdot \gamma_{\text{SO}_4} \quad (23)$$

$$\frac{\text{Ca}^{++} \cdot \text{SO}_4^-}{\text{CaSO}_4^\circ} = K'_5 = \frac{\text{Ca}_e^{++} \cdot \text{SO}_{4e}^-}{\text{CaSO}_{4e}^\circ} = \frac{K'_{sp}}{\text{CaSO}_{4e}^\circ} \quad (24)$$

$$\frac{\text{Ca}^{++} \cdot \text{CO}_3^-}{\text{CaCO}_3^\circ} = K'_4 = \frac{\text{Ca}_e^{++} \cdot \text{CO}_{3e}^-}{\text{CaCO}_{3e}^\circ} \quad (25)$$

$$\frac{\text{Mg}^{++} \cdot \text{SO}_4^-}{\text{MgSO}_4^\circ} = K'_7 = \frac{\text{Mg}^{++} \cdot \text{SO}_{4e}^-}{\text{MgSO}_{4e}^\circ} \quad (26)$$

$$\text{SO}_4^- + \text{MgSO}_4^\circ + \text{CaSO}_4^\circ = \text{SO}_{4t}^- = \text{SO}_{4e}^- + \text{MgSO}_{4e}^\circ + \text{CaSO}_{4e}^\circ + q \quad (27)$$

$$\text{Ca}^{++} + \text{CaSO}_4^\circ + \text{CaCO}_3^\circ = \text{Ca}_t^{++} = \text{Ca}_e^{++} + \text{CaSO}_{4e}^\circ + \text{CaCO}_{3e}^\circ + q \quad (28)$$

où K_s : Produit ionique (activités) K_{sp} : Produit de solubilité (activités) γ : Coefficient d'activité t : Molalités totales e : Molalités d'équilibreOn pose $\text{Ca}_e^{++} = x \cdot \text{Ca}^{++}$ et $\text{SO}_{4e}^- = y \cdot \text{SO}_4^-$ On vérifie que $y = \frac{1}{x} \cdot \frac{K_{sp}}{K_s}$ (eq. 22,23)

$$\text{CaSO}_{4e}^\circ = K'_{sp} / K'_5 = K_{sp} / K_5 \quad (\text{eq. 22, 23, 24})$$

$$\text{CaCO}_{3e}^\circ = x \cdot \text{CaCO}_3^\circ \quad (\text{eq. 25})$$

$$\text{MgSO}_{4e}^\circ = y \cdot \text{MgSO}_4^\circ \quad (\text{eq. 26})$$

$$q = (\text{Ca}^{++} + \text{CaCO}_3^{\circ}) \cdot (1 - x) + \text{CaSO}_4^{\circ} - K_{sp}/K_5 \quad (29)$$

$$(\text{Ca}^{++} + \text{CaCO}_3^{\circ}) \cdot x^2 + (\text{SO}_4^{\ominus} + \text{MgSO}_4^{\circ} - \text{Ca}^{++} - \text{CaCO}_3^{\circ}) \cdot x - (\text{SO}_4^{\ominus} + \text{MgSO}_4^{\circ}) \cdot \frac{K_{sp}}{K_5} = 0 \quad (30)$$

qui permettent le calcul de x puis de q . Si q est > 0 , on a précipitation et si q est < 0 , on a dissolution.

CAS DE LA CALCITE

avant équilibration

après équilibration

$$\text{Ca}^{++} \cdot \text{CO}_3^{\ominus} = K'_s = K_s / \gamma_{\text{Ca}} \cdot \gamma_{\text{CO}_3} \quad (31) \quad \text{Ca}^{++} \cdot \text{CO}_{3e}^{\ominus} = K'_{sp} = K_{sp} / \gamma_{\text{Ca}} \cdot \gamma_{\text{CO}_3} \quad (32)$$

$$\frac{\text{H}^+ \cdot \text{CO}_3^{\ominus}}{\text{HCO}_3^-} = K'_2 = \frac{\text{H}^+ \cdot \text{CO}_{3e}^{\ominus}}{\text{HCO}_{3e}^-} \quad (33)$$

$$\frac{\text{Ca}^{++} \cdot \text{CO}_3^{\ominus}}{\text{CaCO}_3^{\circ}} = K'_4 = \frac{\text{Ca}_e^{++} \cdot \text{CO}_{3e}^{\ominus}}{\text{CaCO}_{3e}^{\circ}} = \frac{K'_{sp}}{\text{CaCO}_{3e}^{\circ}} \quad (34)$$

$$\frac{\text{Ca}^{++} \cdot \text{SO}_4^{\ominus}}{\text{CaSO}_4^{\circ}} = K'_5 = \frac{\text{Ca}_e^{++} \cdot \text{SO}_{4e}^{\ominus}}{\text{CaSO}_{4e}^{\circ}} \quad (35)$$

$$\text{Ca}^{++} + \text{CaSO}_4^{\circ} + \text{CaCO}_3^{\circ} = \text{Ca}_t = \text{Ca}_e^{++} + \text{CaSO}_{4e}^{\circ} + \text{CaCO}_{3e}^{\circ} + q \quad (36)$$

$$2 \text{Ca}^{++} - 2 \text{CO}_3^{\ominus} - \text{HCO}_3^- = 2\text{Ca}_e^{++} - 2 \text{CO}_{3e}^{\ominus} - \text{HCO}_{3e}^- \quad (37)$$

L'équation (37) est fondée sur l'approximation que la fraction de CO_3^{\ominus} appariée à Mg^{++} ne varie pas sensiblement. Une méthode analogue à celle utilisée pour le gypse conduit aux équations :

$$q = (\text{Ca}^{++} + \text{CaSO}_4^{\circ}) \cdot (1 - x) + \text{CaCO}_3^{\circ} - K_{sp}/K_4 \quad (38)$$

$$2 \text{Ca}^{++} \cdot x^2 + (2 \text{CO}_3^{\bar{}} + \text{HCO}_3^{\bar{}} - 2 \text{Ca}^{++}) \cdot x - (2 \text{CO}_3^{\bar{}} + \text{HCO}_3^{\bar{}}) \cdot K_{sp}/K_s = 0 \quad (39)$$

qui permettent de déterminer le nombre de moles/l de calcite à dissoudre ($q < 0$) ou à précipiter ($q > 0$).

Dans l'un et l'autre cas, une série d'ajustements successifs et convergents est nécessaire pour atteindre l'état d'équilibre. En effet, toute modification des molalités des espèces impliquées dans l'équilibre avec un sel se traduit par un déséquilibre dans la distribution initiale qui doit être recalculée. Il en résulte une valeur nouvelle pour le produit ionique qui doit alors être comparé au produit de solubilité du sel considéré.

La valeur de q est soumise à deux conditions qui la bornent :

Si q est < 0 , sa valeur absolue ne peut être supérieure au nombre de moles cristallisées disponibles.

Si q est > 0 , le nombre de moles précipitées ne peut être supérieur à SO_{4t} dans le cas du gypse ou $(\text{CO}_3^{\bar{}} + \text{HCO}_3^{\bar{}})_t$ dans le cas de la calcite et enfin à Ca_t pour le gypse et la calcite.

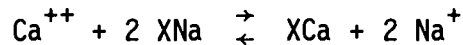
Les valeurs des produits de solubilité peuvent être trouvés dans la littérature spécialisée (DUFÉY J.E. et al., 1979 proposent :

$$\log K_{sp} \text{ calcite} = -8.25 \pm 0.17$$

$$\log K_{sp} \text{ gypse} = -4.85 \pm 0.03)$$

MISE A L'EQUILIBRE D'UNE SOLUTION D'ELECTROLYTES EN CONTACT AVEC UN COMPLEXE ECHANGEUR D'IONS

Les réactions d'échange sont considérées comme réversibles bien que, dans les milieux naturels complexes, cette réversibilité ne soit pas vérifiée (LAUDELOUT, 1970). L'équilibre d'échange $\text{Na}^+ - \text{Ca}^{++}$ peut s'écrire :



où XNa et XCa représentent les quantités d'échangeur, correspondant à 2 équivalents de capacité d'échange, occupées par Na et Ca respectivement.

La constante thermodynamique de l'équilibre d'échange est telle que :

$$K_{\text{Na}}^{\text{Ca}} = \frac{N_{\text{Ca}} \cdot \bar{\gamma}_{\text{Ca}} \cdot (\text{Na}^+)^2}{N_{\text{Na}}^2 \cdot \bar{\gamma}_{\text{Na}}^2 \cdot (\text{Ca}^{++})}$$

soit

$$K_{\text{Na}}^{\text{Ca}} = K_{\text{Na}}^{\text{Ca}} \cdot \bar{\gamma}_{\text{Ca}} / \bar{\gamma}_{\text{Na}}^2$$

où

- N_{Na} et N_{Ca} sont les fractions ioniques équivalentes de Na^+ et Ca^{++} adsorbées. CEC étant la capacité d'échange (éq/g), on a $N_{\text{Na}} = \text{Na}^+ / \text{CEC}$ et $N_{\text{Ca}} = \text{Ca}^{++} / \text{CEC}$ (Na^+ et Ca^{++} en éq/g)
- $\bar{\gamma}_{\text{Na}}$ et $\bar{\gamma}_{\text{Ca}}$ sont les coefficients d'activité de Na^+ et Ca^{++} adsorbés
- (Na^+) et (Ca^{++}) sont les activités de Na^+ et Ca^{++} en solution (moles/l)

et où $K_{\text{Na}}^{\text{Ca}}$ est le coefficient de sélectivité de l'échange Na - Ca, défini par :

$$K_{\text{Na}}^{\text{Ca}} = \frac{N_{\text{Ca}}}{N_{\text{Na}}^2} \frac{(\text{Na}^+)^2}{(\text{Ca}^{++})}$$

(LAUDELOUT, 1965 ; LAUDELOUT et al., 1979 ; RIEU et CHEVERRY, 1976)

Le modèle de calcul proposé par DUFÉY et al. est limité aux échanges de Ca^{++} , Mg^{++} et Na^+ , le potassium étant considéré peu mobile. La mise à l'équilibre est réalisée en deux étapes.

Dans un premier temps, les cations divalents sont considérés de façon globale et on traite l'échange $\text{Na}^+ - \text{D}^{++}$ (avec $\text{D}^{++} = 2(\text{Ca}^{++} + \text{Mg}^{++})$, D en éq/l et Ca^{++} et Mg^{++} en moles/l), (DUFÉY et al., 1979).

On définit :

Capacité d'échange du complexe adsorbant
entièrement saturé par Ca^{++} , Mg^{++} et Na^+ : CEC (en éq./g)

Fraction ionique équivalente de divalents
adsorbés : Y_0 (avant équilibration) ; Y_e (après équilibration)

Normalité totale de la solution
d'électrolytes ($2.(\text{Ca}^{++} + \text{Mg}^{++}) + \text{Na}^+$) : C_0 (en éq./l)

Fraction ionique équivalente de divalents
en solution (D^{++}/C_0) : X_0 (avant équilibration) ;
 X_e (après équilibration)

Relation sol/eau : W (en g/l)

Si l'échange se fait de façon stoechiométrique, toute variation Z de la fraction ionique équivalente de divalents adsorbés met en jeu une quantité d d'équivalents/l de divalents telle que

$$Z = d / W \cdot \text{CEC}$$

et la fraction ionique équivalente de divalents en solution varie d'une quantité :

$$d / C_0 = Z \cdot W \cdot \text{CEC} / C_0$$

Quant au coefficient de sélectivité de l'échange, il peut s'écrire :

$$K_{\text{Na}}^{\text{D}} = \frac{Y}{(1-Y)^2} \cdot \frac{\text{Na}^{+2} \cdot \gamma_{\text{Na}}^2 / C_0^2}{\text{D}^{++} \cdot \gamma_{\text{D}} / 2 \cdot C_0^2}$$

soit

$$K_{Na}^D = 2 \cdot C_o \cdot \frac{Y}{(1-Y)^2} \cdot \frac{(1-X)^2}{X} \cdot \frac{\gamma_{Na}^2}{\gamma_D}$$

La recherche de l'équilibre consiste à déterminer la quantité Z telle que :

$$Y_e = Y_o + Z \quad \text{ou bien} \quad X_e = X_o + Z \cdot W \cdot CEC / C_o$$

on a alors :

$$K_{Na}^D = 2 \cdot C_o \cdot \frac{Y_e}{(1-Y_e)^2} \cdot \frac{(1-X_e)^2}{X_e} \cdot \frac{\gamma_{Na}^2}{\gamma_D} \quad (41)$$

La valeur du coefficient de sélectivité est une donnée expérimentale qui peut être différente d'un sol à l'autre (GAST, 1972), et qui varie en fonction de la composition de la phase adsorbée (LAUDELOUT et al., 1979 ; GALLEZ, STITOU et DUFEY, 1981). DUFEY (1979) propose pour ce coefficient la relation fonctionnelle :

$$K_{Na}^D = a_0 + a_1 Y_e + a_2 Y_e^2 + a_3 Y_e^3 \quad (42)$$

où a_0 , a_1 , a_2 et a_3 sont des constantes expérimentales.

La méthode d'équilibration consiste à incrémenter arbitrairement Y_e et X_e de sorte que le calcul du coefficient de sélectivité par les équations (41) et (42) donne des résultats suffisamment voisins. Pour assurer et accélérer la convergence, on revient d'un pas en arrière et on diminue la valeur de l'incrément Z quand le point d'équilibre est dépassé.

Dans un deuxième temps, il faut rechercher l'équilibre pour l'échange entre les divalents $Ca^{++} - Mg^{++}$. Le plus souvent, on peut attribuer un rôle équivalent aux deux cations et se contenter d'assurer une distribution sur le complexe qui soit à l'image des proportions de ces cations dans la solution. Si tel n'était pas le cas, DUFEY propose la procédure suivante (*) :

(*) J.E. DUFEY, communication personnelle.

On définit :

CEC, Co, W comme précédemment

Fraction ionique équivalente de divalents adsorbés : Y

Fraction ionique de divalents en solution : X

Moles de Ca^{++} adsorbé par gramme de sol : $\overline{\text{Ca}}^{++}$

Molalité de Ca^{++} en solution : Ca^{++}

Ca^{++} total (adsorbé et en solution) : QCa (en moles/l)

Moles de Mg^{++} adsorbé par gramme de sol : $\overline{\text{Mg}}^{++}$

Molalité de Mg^{++} en solution : Mg^{++}

Mg^{++} total (adsorbé et en solution) : QMg (en moles/l)

Le coefficient de sélectivité de l'échange peut s'écrire :

$$K_{\text{Ca}}^{\text{Mg}} = \frac{\frac{2 \overline{\text{Mg}}^{++}}{2 \overline{\text{Ca}}^{++} + 2 \overline{\text{Mg}}^{++}} \cdot \text{Ca}^{++} \cdot \gamma_{\text{Ca}}}{\frac{2 \overline{\text{Ca}}^{++}}{2 \overline{\text{Ca}}^{++} + 2 \overline{\text{Mg}}^{++}} \cdot \text{Mg}^{++} \cdot \gamma_{\text{Mg}}}$$

et si $\gamma_{\text{Ca}} \cong \gamma_{\text{Mg}}$, on a :

$$K_{\text{Ca}}^{\text{Mg}} = \frac{\overline{\text{Mg}}^{++}}{\overline{\text{Ca}}^{++}} \cdot \frac{\text{Ca}^{++}}{\text{Mg}^{++}} \quad (43)$$

(On vérifie bien que pour $K_{\text{Ca}}^{\text{Mg}} = 1$, c'est-à-dire pour une même sélectivité de l'adsorbant pour l'un ou l'autre cation, on a :

$$\overline{\text{Mg}}^{++} / \overline{\text{Ca}}^{++} = \text{Mg}^{++} / \text{Ca}^{++})$$

On a encore :

$$Q_{\text{Ca}} = W \cdot \overline{\text{Ca}}^{++} + \text{Ca}^{++}$$

$$Q_{\text{Mg}} = W \cdot \overline{\text{Mg}}^{++} + \text{Mg}^{++}$$

$$\text{Ca}^{++} + \text{Mg}^{++} = \text{Co} \cdot X / 2 = s$$

$$\overline{\text{Ca}}^{++} + \overline{\text{Mg}}^{++} = \text{CEC} \cdot Y / 2 = v$$

$$K_{\text{Ca}}^{\text{Mg}} \cdot \overline{\text{Ca}}^{++} \cdot \text{Mg}^{++} = \overline{\text{Mg}}^{++} \cdot \text{Ca}^{++}$$

soit

$$K_{\text{Ca}}^{\text{Mg}} \cdot \overline{\text{Ca}}^{++} \cdot (s - \text{Ca}^{++}) = (v - \overline{\text{Ca}}^{++}) \cdot \text{Ca}^{++}$$

$$K_{Ca}^{Mg} \cdot \overline{Ca^{++}} \cdot s - K_{Ca}^{Mg} \cdot Ca^{++} \cdot (Q_{Ca} - W \cdot Ca^{++}) = v \cdot (Q_{Ca} - W \cdot \overline{Ca^{++}}) - \overline{Ca^{++}} \cdot (Q_{Ca} - W \cdot \overline{Ca^{++}})$$

d'où l'équation :

$$a \cdot \overline{Ca^{++}}^2 + b \cdot \overline{Ca^{++}} + c = 0$$

avec

$$a = K_{Ca}^{Mg} \cdot W - W$$

$$b = K_{Ca}^{Mg} \cdot s - K_{Ca}^{Mg} \cdot Q_{Ca} + v \cdot W + Q_{Ca}$$

$$c = -v \cdot Q_{Ca}$$

COHERENCE DE L'EQUILIBRE GENERAL

L'opération d'équilibration avec le complexe d'échange introduisant des modifications dans la distribution initiale, le calcul de cette dernière ainsi que la mise à l'équilibre avec la masse de sels précipités doit être repris.

La cohérence entre les différents aspects de l'équilibre est obtenue par itérations librement convergentes des trois sous-systèmes jusqu'à ce que l'écart entre deux calculs successifs de Ca^{++} , Mg^{++} et Na^+ soit inférieur à une valeur minimale déterminée.

A l'issue du calcul de mise à l'équilibre, les molalités totales des ions Na^+ , Ca^{++} , Mg^{++} , Cl^- , $SO_4^{=}$ et H^+ constituent les données initiales pour la simulation du transfert des solutés au cours de l'intervalle de temps suivant.

DÉTERMINATION DES CARACTÉRISTIQUES HYDRODYNAMIQUES

REMARQUES PRELIMINAIRES

La mise en oeuvre du modèle hydrodynamique n'est possible que si l'on dispose d'expressions mathématiques de $K(\theta)$ et $D(\theta)$, au moins pour des teneurs en eau allant de la saturation au point de flétrissement en-deçà duquel on peut admettre qu'il n'y a plus de circulation d'eau sous forme liquide.

La diffusivité est égale au produit de la conductivité hydraulique par la pente de la courbe représentant la variation de la succion en fonction de la teneur en eau. La caractérisation hydrodynamique d'un élément de sol se ramène donc à la détermination des deux relations fonctionnelles $K = f(\theta)$ et $h = f(\theta)$.

Il est rare qu'un sol soit suffisamment homogène pour être caractérisé par une relation $K(\theta)$ unique quelle que soit la profondeur. Une étude de la morphologie du profil, une analyse de la texture et de la porosité permettent d'identifier des strates de texture et mode d'assemblage grossièrement homogènes où l'on puisse attendre un même comportement hydrodynamique. La conductivité hydraulique de chacun de ces niveaux doit être déterminée expérimentalement.

Il n'en va pas de même pour la relation $h = f(\theta)$. Bien que les mesures permettent d'identifier des comportements dissemblables selon les niveaux, l'hystérésis qui caractérise la relation $h - \theta$ entraîne une telle dispersion des valeurs mesurées que l'individualité des différents comportements en est masquée et la détermination d'une relation univoque le plus souvent impossible : l'incertitude sur h pour une même valeur de θ peut atteindre un ordre de grandeur (VACHAUD, 1982). En fait, ce n'est pas la relation $h = f(\theta)$ mais sa dérivée qui intervient dans le calcul de $D(\theta)$; la pente de la courbe $h(\theta)$ est toujours très prononcée (de 10^1 à 10^6) et les écarts expérimentaux y ont une incidence relativement moins forte dans la majeure partie du domaine non saturé. Par contre l'incertitude est très élevée au voisinage de la saturation. La variation de $dh/d\theta$ est en quelque sorte un indicateur de la propension de l'espace poral à admettre ou restituer

de l'eau. Dans la zone non saturée où les quantités d'eau mises en jeu dans de tels processus sont peu abondantes, on peut observer que les comportements de niveaux morphologiquement différents restent assez proches. Mais, à proximité de la saturation, le déclenchement de la vidange ou la complète expulsion du gaz ont lieu à des teneurs en eau différentes et surtout selon des dynamiques très variables suivant le type de porosité et son histoire hydraulique récente (VACHAUD et THONY, 1971). Il devient alors très délicat d'assigner tel comportement à tel niveau du sol et, lorsque'elle peut être tentée, cette opération est d'une complexité peu compatible avec la schématisation propre à un modèle global comme celui présenté dans ce travail.

Dans ces conditions, on aura plutôt intérêt à rechercher une relation unique, grossièrement moyenne pour l'ensemble du profil. Il en résulte une erreur importante sur les valeurs de la diffusivité, surtout pour les teneurs en eau proches de la saturation. L'incidence de cette erreur reste toutefois peu élevée dans les calculs des flux : dans l'équation (7), $D(\theta)$ n'apparaît que dans son produit par une différence de teneurs en eau, dont la valeur numérique dépasse rarement 0.01. Ceci est particulièrement vrai au voisinage de la saturation : $K(\theta)$ est alors élevé et les flux intenses ; l'incrément de temps est alors fortement réduit et les variations de teneur en eau durant un intervalle de temps sont très faibles.

MESURES DANS LE SOL SATURÉ

Dans le sol saturé d'eau, le potentiel de succion est nul et la circulation de l'eau n'est fonction que du potentiel gravitaire. La mesure de la conductivité hydraulique revient alors à une détermination habituelle de la perméabilité.

La conductivité hydraulique du niveau de surface saturé peut être mesurée sur le terrain avec un dispositif classique d'infiltrométrie. Un perméamètre de laboratoire, par sa simplicité d'emploi

et la possibilité de mesures en série qu'il offre, s'avère utile. Il convient toutefois d'effectuer la mesure sur échantillons non perturbés, initialement saturés en eau.

Si l'on maintient en surface de l'échantillon d'épaisseur L et de surface de base S une hauteur d'eau constante ℓ , le volume flué en fonction du temps à la base de l'échantillon est défini par la loi de DARCY :

$$q = -K_{\text{sat}} \cdot \frac{dH}{dz}$$

soit

$$\frac{1}{S} \cdot \frac{dV}{dt} = -K_{\text{sat}} \cdot \frac{H_{z=L} - H_{z=0}}{L}$$

l'axe Oz étant orienté vers le bas et où : dV/dt est la pente du graphe représentant le volume flué en fonction du temps

$H_{z=0}$ est la charge hydraulique au sommet de l'échantillon ; $H_{z=0} = L + \ell$

$H_{z=L}$ est la charge hydraulique à la base de l'échantillon ; $H_{z=L} = 0$

$$\text{On a : } K_{\text{sat}} = \frac{dV}{dt} \cdot \frac{1}{S} \cdot \frac{L}{L + \ell}$$

La hauteur d'eau appliquée est en général de l'ordre du cm et est maintenue constante par un dispositif de siphon. L'on peut aussi apporter en surface de l'échantillon une lame d'eau plus épaisse que l'on laisse diminuer sans rétablir le niveau initial. La charge hydraulique est alors fonction du temps t . On a à un instant t donné :

$$\frac{1}{S} \cdot \frac{dV}{dt} = -K_{\text{sat}} \cdot \frac{H(t)_{z=L} - H(t)_{z=0}}{L}$$

avec : $H(t)_{z=0} = L + \ell(t)$ et $H(t)_{z=L} = 0$

et $dV = -S \cdot d\ell_t = -S \cdot dH_t$

d'où l'équation : $K_{\text{sat}} \cdot dt = -L \cdot \frac{dH}{H}$

que l'on peut intégrer entre deux instants t_0 et t_1 :

$$K_{\text{sat}} \cdot \int_{t_0}^{t_1} dt = -L \cdot \int_{t_0}^{t_1} \frac{dH}{H}$$

soit

$$K_{\text{sat}} = -\frac{L}{t_1 - t_0} \cdot \ln \frac{H_1}{H_0}$$

ou

$$K_{\text{sat}} = -\frac{L}{t_1 - t_0} \cdot 2,303 \cdot \log H_1/H_0$$

MESURES DANS LE SOL NON SATURE

MESURE SUR LE TERRAIN

La mesure de la conductivité hydraulique est effectuée étudiant l'écoulement vertical de l'eau à travers une épaisseur de sol z_0, z_1 ne comportant ni source ni puits. C'est l'essai classique de "Drainage Interne" (HILLEL et al., 1972).

Si on applique l'équation (7) au domaine considéré, on a à un instant t donné :

$$\int_{z_0}^{z_1} \frac{d\theta(z,t)}{dt} \cdot dz = - \int_{z_0}^{z_1} \frac{dq(z,t)}{dz} \cdot dz \quad (44)$$

Cela revient à écrire le bilan local pour : le domaine z_0, z_1 : la variation du stock d'eau instantané dans l'élément de sol de surface de base unitaire et de hauteur $z_1 - z_0$ est égale à la différence des flux aux limites du domaine considéré :

$$\frac{dS(t)}{dt}_{z_0, z_1} = - \{q(t)_{z_1} - q(t)_{z_0}\} \quad (45)$$

Si le sol est recouvert d'un film imperméable, de façon à éviter l'évaporation en surface, on a la condition :

$$z_0 = 0 \text{ et } q(t)_{z_0}$$

on a alors :

$$\frac{dS(t)_{z_0, z_1}}{dt} = - q(t)_{z_1}$$

$$\frac{dS(t)_{z_0, z_1}}{dt} = K(\theta)_{z_1} \cdot \left(\frac{dh(t)}{dz} - 1 \right) \Big|_{z_1}$$

La valeur de $K(\theta)$ à la cote z_1 pour la valeur de θ à l'instant t est donnée par l'expression :

$$K(\theta)_{z_1} = \frac{dS(t)_{z_0, z_1}}{dt} \cdot \frac{1}{\left(\frac{dh(t)}{dz} - 1 \right) \Big|_{z_1}} \quad (46)$$

Si le flux d'évaporation n'est pas nul, on a l'expression :

$$K(\theta)_{z_1} = \frac{dS(t)_{z_0, z_1}}{dt} - q(t)_{z_0} \cdot \frac{1}{\left(\frac{dh(t)}{dz} - 1 \right) \Big|_{z_1}} \quad (47)$$

Le dispositif expérimental et la méthode de calcul permettant de déterminer le membre de droite des équations (46) et (47) ont été exposés par VACHAUD et al. (1978, 1981). On rappellera le principe :

Après un apport d'eau, on suit la redistribution de l'eau dans le sol en établissant des profils hydriques et de succion à différents instants t .

Si le sol a été couvert, on utilise l'équation (46):

- la pente des graphes $h(z, t)$ donne la valeur instantanée

$$\frac{dh(t)}{dz} \Big|_{z_1}$$

- la valeur du stock instantané $S(t)_{z_0, z_1}$ à différents instants est déterminée par intégration des profils hydriques $\theta(z, t)$ entre z_0 et z_1 (méthode des rectangles ou de Simpson). On cherche ensuite une loi de variation de S en fonction du temps. En général, une bonne corrélation est obtenue avec une loi logarithmique du type :

$$\begin{aligned} \text{ou } S(t) &= a_0 \ln t + b_0 & \text{et } dS(t)_{z_0, z_1}/dt &= a_0/t \\ S(t) &= A t^B & \text{et } dS(t)_{z_0, z_1}/dt &= AB t^{B-1} \end{aligned}$$

Si le sol n'a pas été couvert, il faut tenir compte d'un flux évaporatoire $q(t)_{z_0}$, $z_0 = 0$, (l'axe \vec{Oz} étant orienté vers le bas, on a $q(t) < 0$) et on utilise l'équation (47). A une cote z_x du sol, les flux inversent leur direction. On définit un plan de flux nul au niveau de cette cote que l'on détermine graphiquement sur les profils de succion z_x est tel que l'on ait :

$$\begin{aligned} \text{ou } \frac{dh(z, t)}{dz} \Big|_{z_x} &= + 1 \\ \frac{dH(z, t)}{dz} \Big|_{z_x} &= 0 \quad (\text{ROYER et VACHAUD, 1974}) \end{aligned}$$

- le niveau du plan de flux nul varie avec le temps. On peut toutefois considérer que d'un instant à l'autre, il reste à une cote moyenne entre ses cotes réelles à l'un et l'autre instant. On peut évaluer sur les profils hydriques établis à ces instants la variation du stock au-dessus du plan de flux nul. Elle correspond à la lame d'eau évaporée pendant cette durée. En répétant l'opération de profil hydrique en profil hydrique, on peut déterminer l'évolution de la hauteur d'eau évaporée en fonction du temps. La pente du graphe représentant cette évolution donne la valeur du flux d'évaporation à tout instant t : $q(t)_{z_0}$

MESURE AU LABORATOIRE

Les équations (44) à (46) peuvent être utilisées pour décrire le ressuyage d'un petit monolithe de sol non perturbé, initialement saturé en eau puis recouvert en surface (flux nul pour $z = 0$). Soient L sa hauteur, s sa surface de base, V son volume, dA sa densité apparente et P son poids.

La variation du stock d'eau instantané $S(t)$ peut être déterminée par pesées successives. On a :

$$P(t) = V \cdot dA + s \cdot \int_{z=0}^{z=L} \theta(z,t) dz$$

$$\frac{dP(t)}{dt} = s \cdot \int_{z=0}^{z=L} \frac{d\theta(z,t)}{dt} dz \quad (48)$$

Le membre de droite de l'équation (48) représente la variation du stock d'eau instantané dans le monolithe. Pour une surface unitaire, on a :

$$\frac{dS(t)_{0,L}}{dt} = \frac{1}{s} \cdot \frac{dP(t)}{dt}$$

Si le monolithe est de taille réduite (100 à 150 cm³), on peut admettre qu'il présente une certaine homogénéité du point de vue de ses propriétés hydrodynamiques. Dans ce cas on peut faire l'approximation que, durant le processus de drainage, la teneur en eau et la succion instantanée ont une valeur unique dans l'ensemble de l'échantillon, sauf au voisinage immédiat de la base (GARDNER, 1962 ; BLACK et al., 1969 ; DAVIDSON et al., 1969 ; LIBARDI et al., 1980). On a alors :

$$dh/dz = 0 \quad \text{et} \quad d\theta/dz = 0; \quad z \in (0, L-\epsilon)$$

L'équation (46) devient :

$$K(\theta)_{z=L-\epsilon} = - \frac{dS(t)_{0,L-\epsilon}}{dt}$$

En raison de l'hypothèse sur l'homogénéité du monolithe, la conductivité hydraulique en tout point de ce dernier est approchée par l'expression :

$$K(\theta) = - dS(t)/dt$$

$$K(\theta) = - \frac{1}{s} \cdot \frac{dP(t)}{dt} \quad (49)$$

θ étant considéré indépendant de la cote z , on a :

$$P(t) = V \cdot dA + V \cdot \theta(t)$$

la densité de l'eau étant considérée égale à 1.

$$\text{Et } \frac{dP(t)}{dt} = V \cdot \frac{d\theta(t)}{dt} \quad (\text{cf. éq. 48})$$

en reportant dans l'équation (49), on obtient l'expression :

$$K(\theta) = - L \cdot \frac{d\theta(t)}{dt} \quad (50)$$

Les expressions (49) ou (50) définissent la conductivité hydraulique moyenne au sein du monolithe pour sa teneur en eau globale θ à l'instant t .

Si l'approximation de GARDNER ne peut être admise, on peut mesurer la succion au voisinage du sommet et de la base du monolithe et estimer une valeur approchée de dh/dz instantané entre les cotes z_1 et z_0 des points de mesure de la succion. On a :

$$\frac{dh_{z_1, z_0}}{dz} \approx \frac{h_{z_1} - h_{z_0}}{z_1 - z_0}$$

On a alors :

$$K(\theta) = L \cdot \frac{d\theta(t)}{dt} \cdot \frac{1}{\left(\frac{z_1 - z_0}{z_1 - z_0}\right) - 1}$$

expression qui définit $K(\theta)$ dans la zone médiane du monolithe pour sa teneur en eau globale θ à l'instant t .

Un dispositif expérimental rustique, mais ne nécessitant aucun matériel particulier, consiste à effectuer les mesures sur un

échantillon non remanié prélevé avec une méthode similaire à celle du cylindre. On utilise à cet effet un tronçon de tube plastique dans lequel 4 ouvertures diamétralement opposées deux à deux ont été ménagées à faible distance du sommet et de la base. On fabrique 4 petits tensiomètres que l'on introduit dans ces ouvertures (Fig. 4). Chaque paire de tensiomètres correspondant à un même niveau est relié à un même tube à mercure au moyen de tubulures plastique souples et les circuits tensiométriques sont remplis d'eau dégazée.

On procède à la mesure de la conductivité hydraulique du sol saturé, par une méthode classique (percolation). Le cylindre est ensuite hermétiquement fermé à son sommet.

L'ensemble constitué par le tube, les tensiomètres et l'échantillon est suspendu au fléau d'une balance de précision, tandis que le faisceau de tubulures est relié au bâti supportant les tubes à mercure par une amarre extensible afin de ne pas introduire d'erreur dans les pesées. Un récipient rempli de terre tamisée à 2 mm, de même origine que l'échantillon étudié est disposé au-dessous du cylindre de sorte que la base de l'échantillon soit en contact étroit avec la terre fine lorsque le fléau de la balance est en position basse, mais qu'il soit complètement libre lorsque le fléau est remonté en position de pesée (Fig. 4). La terre fine non en contact avec l'échantillon est couverte afin d'éviter les pertes par évaporation.

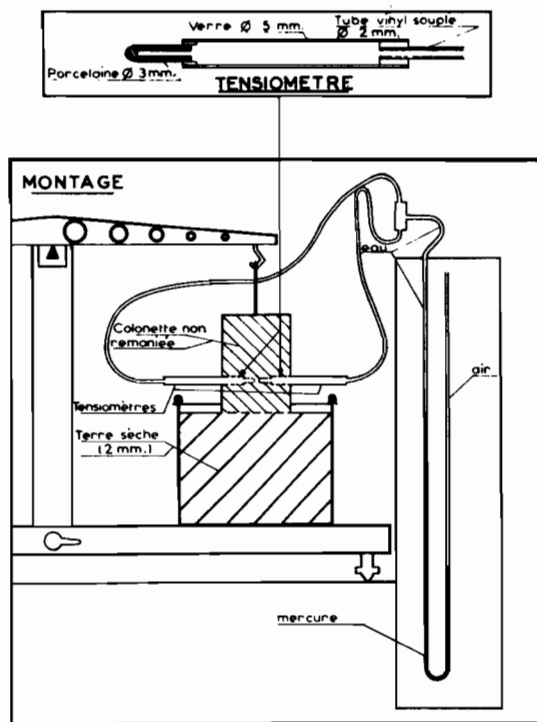


Fig. 4 - Dispositif expérimental pour la détermination des caractéristiques hydrodynamiques d'un monolithe de petite taille.

L'échantillon, saturé d'eau, est mis en contact avec la terre fine, elle-même sèche ou légèrement humide, de façon à assurer le ressuyage du monolithe. A des instants d'abord rapprochés puis de plus en plus espacés, on mesure simultanément la succion dans le monolithe et le poids de l'ensemble échantillon cylindre tensiomètres. Le montage en parallèle des tensiomètres permet de ne pas interrompre l'expérimentation si un tensiomètre vient à se désamorcer (il est alors isolé du circuit et remis en état). L'expérimentation est arrêtée lorsque le poids ne varie plus de façon mesurable. Le monolithe est alors retiré du dispositif pour être séché à l'étuve afin de déterminer son poids sec. On pèse enfin le tube et les tensiomètres. On en déduit la teneur en eau finale et la densité apparente qui permettent de recalculer les teneurs en eau volumiques correspondant aux pesées antérieures. On dispose ainsi de couples de valeur $\theta(t) - h(t)$ pour des instants t successifs.

On peut vérifier que $dh(z,t)/dz \approx 0$ (Fig.5) et que la variation en fonction du temps du poids du monolithe ainsi que celle de sa teneur en eau θ sont bien décrites par des lois de type logarithmique. On recherche pour cela une corrélation entre $\log P$ ou $\log \theta$ et $\log t$. On a :

$$\theta(t) = At^B$$

$$\frac{d\theta(t)}{dt} = AB t^{B-1} = AB \cdot \left(\frac{1}{A}\right)^{\frac{B-1}{B}} \cdot \theta^{\frac{B-1}{B}}$$

et, en utilisant l'équation (50) :

$$K(\theta) = -L \cdot AB \cdot \left(\frac{1}{A}\right)^{\frac{B-1}{B}} \cdot \theta^{\frac{B-1}{B}}$$

(FEODOROFF et GALULA, 1973 ; OGATA et RICHARDS, 1957).

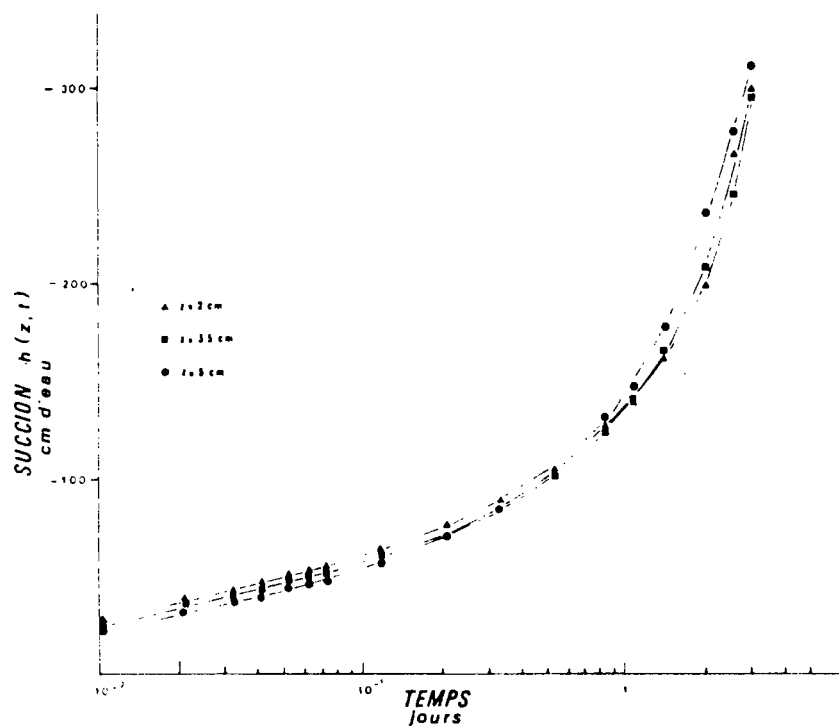


Fig. 5 - Evolution de la succion en fonction du temps durant le drainage d'un monolithe de 6 cm d'épaisseur, à 2 cm, 3,5 cm et 5 cm du sommet.

On notera que chaque pesée du monolithe exige que celui-ci soit séparé de la terre fine, ce qui implique une rupture momentanée de la circulation capillaire. Afin de limiter l'effet de cet artéfact, il est nécessaire de procéder très rapidement, ce qui demande une certaine habileté de la part de l'opérateur.

Si la petite taille des monolithes rend possible l'approximation de GARDNER et permet d'atteindre une bonne précision sur la mesure de $\theta(t)$ et $h(t)$, les déterminations de $K(\theta)$ obtenues ont un caractère ponctuel très marqué. Plusieurs répétitions sont donc nécessaires pour caractériser un niveau. Toutefois, la mise en oeuvre de l'expérimentation étant relativement simple, des mesures en série sont aisément réalisables.

COHERENCE DES MESURES EN MILIEU SATURE OU NON

Quelle que soit la méthode expérimentale employée, il convient de vérifier que les relations fonctionnelles obtenues permettent de calculer une conductivité hydraulique ayant un sens physique. En particulier, $K(\theta)$ doit être pratiquement nul (10^{-4} à 10^{-5} cm/j) pour θ correspondant au point de flétrissement et surtout, on doit calculer une valeur très proche de K_{sat} pour $\theta = \theta_{sat}$. La conductivité hydraulique du sol saturé borne la variation de $K(\theta)$ pour les fortes teneurs en eau. On peut effectuer la transformation suivante :

La relation fonctionnelle générale étant :

$$K(\theta) = \alpha \cdot \theta^\beta$$

on a : $K_{sat} = \alpha \cdot \theta_{sat}^\beta$

et : $K(\theta) = K_{sat} \cdot (\theta / \theta_{sat})^\beta$

ou bien, si on a utilisé l'expression :

$$K(\theta) = \alpha \cdot e^{\beta \cdot \theta}$$

on aura $K(\theta) = K_{sat} \cdot e^{\beta \cdot (\theta - \theta_{sat})}$

RELATION $h - \theta$ ET DIFFUSIVITE

Les dispositifs tensiométriques utilisés pour la mesure des suctions fournissent des valeurs $h(z,t)$ que l'on peut reporter sur un graphique $\log h(z,t)$, $\log \theta(z,t)$: on obtient en général un nuage de points très dispersés. On peut cependant définir une loi moyenne logarithmique de la forme : $h = v.\theta^\lambda$. On constate que l'on améliore le coefficient de la corrélation $\log h - \log \theta$ si l'on écarte un certain nombre de points correspondant à θ voisin de θ_{sat} et h faible. On détermine ainsi un seuil h_x, θ_x , tel que pour $\theta < \theta_x$ et $h > h_x$, la variation de la succion en fonction de la teneur en eau soit décrite par une loi de type exponentiel (Fig.6).

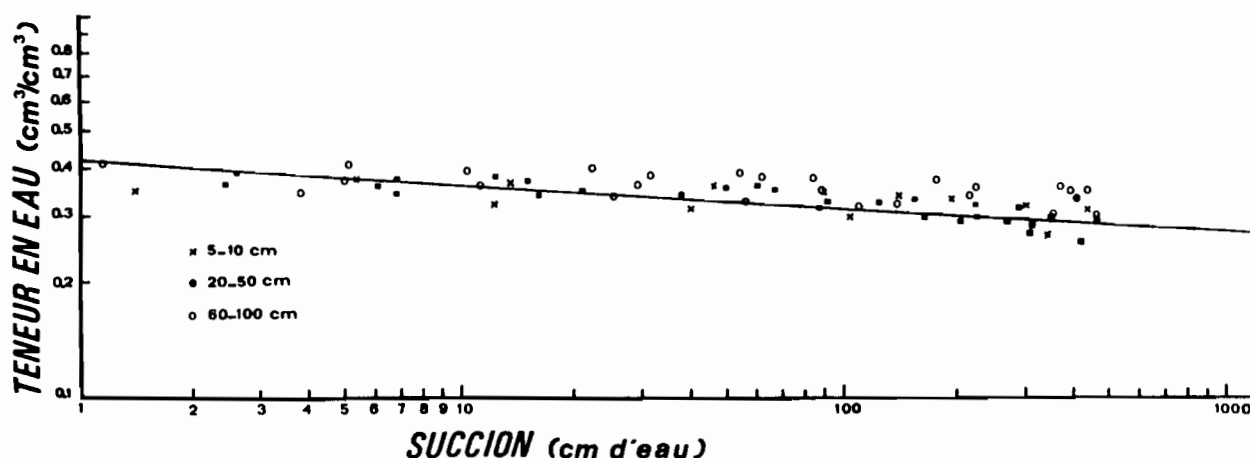


Fig.6 - Dispersion des valeurs $h - \theta$ et recherche d'une loi moyenne : $h = -1,0592 (\theta / 0,42)^{-15,854}$
 $\theta_x = 0,42$; $h_x = -1,06$. Sol limoneux argileux (ARANT).

Pour $\theta > \theta_x$, les valeurs de h sont en général très faibles (10 à 20 cm d'eau) et la dispersion des valeurs expérimentales est telle qu'il est le plus souvent impossible de définir une loi de variation (*). Une interprétation de ce comportement particulier de h au voisinage de la saturation pourrait être que seuls quelques gros pores restent encore incomplètement remplis d'eau ; mais leur diamètre est suffisamment grand pour que l'effet de la tension superficielle soit négligeable. La succion est alors pratiquement nulle et sa variation échappe à la mesure lorsque les gros pores finissent de se remplir ou se vident partiellement. θ_x correspondrait alors à la teneur en eau limite en deçà de laquelle les phénomènes de succion dans les capillaires ne sont plus négligeables ("Air entry value", BROOKS et COREY, 1964 ; BRESLER et al., 1978 ; AHUJA et al., 1980). On a donc :

$$h = h_x \left(\frac{\theta}{\theta_x} \right)^\lambda$$

λ étant négatif, lorsque θ varie de θ_x à θ_{sat} , h devient inférieur à h_x sans toutefois devenir nul pour $\theta = \theta_{sat}$. L'erreur introduite reste négligeable. On a alors :

$$\frac{dh}{d\theta} = \frac{h_x \cdot \lambda}{\theta_x} \cdot \left(\frac{\theta}{\theta_x} \right)^{\lambda-1}$$

et $D(\theta) = K(\theta) \cdot \frac{dh}{d\theta}$

(*) - AHUJA et al., (1980) proposent une relation linéaire entre θ et h pour $\theta_x \leq \theta \leq \theta_{sat}$; pour le domaine $\theta < \theta_x$, ces auteurs, ainsi que BROOKS et COREY (1964), BRESLER et al. (1978) et VAUCLIN et VACHAUD (1981) proposent des relations faisant intervenir des constantes de calage ou des teneurs en eau caractéristiques du milieu. Etant donné le caractère très moyen et général de la relation recherchée dans ce travail, on s'est limité à une formulation plus sommaire.

CONDUCTIVITE HYDRAULIQUE DU SOL ALCALINISE

Lorsque le taux de sodium échangeable est élevé, de fortes quantités d'eau sont adsorbées entre les feuillets argileux et provoquent la dislocation des tectoïdes. Il en résulte une dispersion de l'argile, le colmatage des pores et une baisse rapide de la conductivité hydraulique. Ce processus est surtout net dans les horizons superficiels du sol lors d'un apport d'eau. On a montré (SHAINBERG et CAISERMAN, 1971) que la décroissance de la conductivité hydraulique du sol saturé en eau en fonction du taux de sodium échangeable est de type exponentiel. Si l'on appelle P_{Na} un paramètre caractérisant le taux de sodium, la variation de la conductivité hydraulique du sol saturé, K_{sat} , est assez bien décrite par une relation de la forme :

$$K_{sat} = \zeta \cdot P_{Na}^{\xi}$$

(RIEII, 1978. Fig. 7)

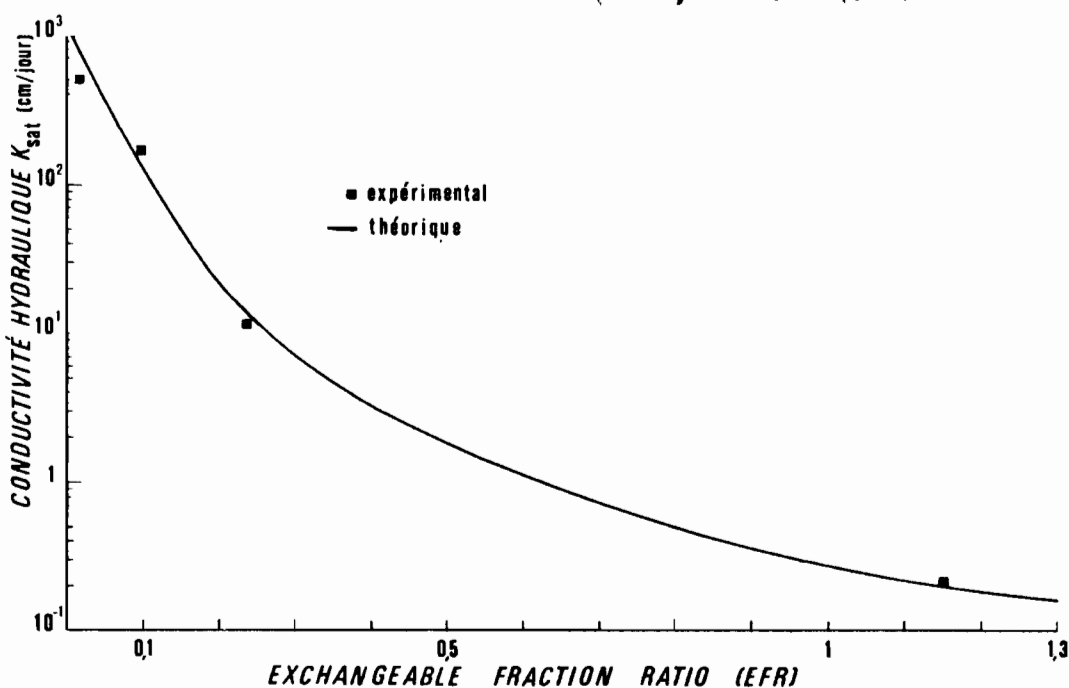


Fig.7 - Effet de la teneur en sodium échangeable sur la conductivité hydraulique du sol saturé en eau : $K_{sat} = .295 (EFR)^{-2.66}$. Niveau de surface d'un sol argileux et organique (MATAFO).

En raison de son analogie formelle avec le S.A.P. (Sodium Adsorption Ratio = $(Na^+) \cdot (Ca^{++} + Mg^{++})^{-\frac{1}{2}}$, les () indiquant l'activité des ions libres en solution, exprimée en millimoles/litre), il est commode d'utiliser le E.F.R. (Exchangeable Fraction Ratio = $(Na/CEC) \cdot (Na/CEC) \cdot (1-Na/CEC)^{-\frac{1}{2}}$, CEC signifiant capacité d'échange, Na et CEC en mé/100g) pour caractériser le taux de sodium échangeable du sol.

Après avoir mesuré la conductivité hydraulique d'échantillons saturés en eau et de EFR croissant, on calcule la corrélation entre $\log K_{sat}$ et $\log EFR$, d'où l'on tire l'expression:

$$K_{sat} = \zeta \cdot EFR^{\xi}$$

Des mesures, encore partielles, de la conductivité hydraulique en milieu non saturé et pour différentes valeurs de EFR, permettent de constater une certaine constante dans le mode de réduction de la conductivité hydraulique, quels que soient EFR et θ (RIEU, 1978) (Fig.8). Dans ces conditions on a étendu au domaine non saturé la loi de modulation de $K(\theta)$ en fonction de EFR en introduisant dans l'expression générale de la conductivité hydraulique la valeur de K_{sat} en fonction de EFR :

$$K(\theta) = \zeta \cdot EFR^{\xi} \cdot \left(\frac{\theta}{\theta_{sat}} \right)^{\beta}$$

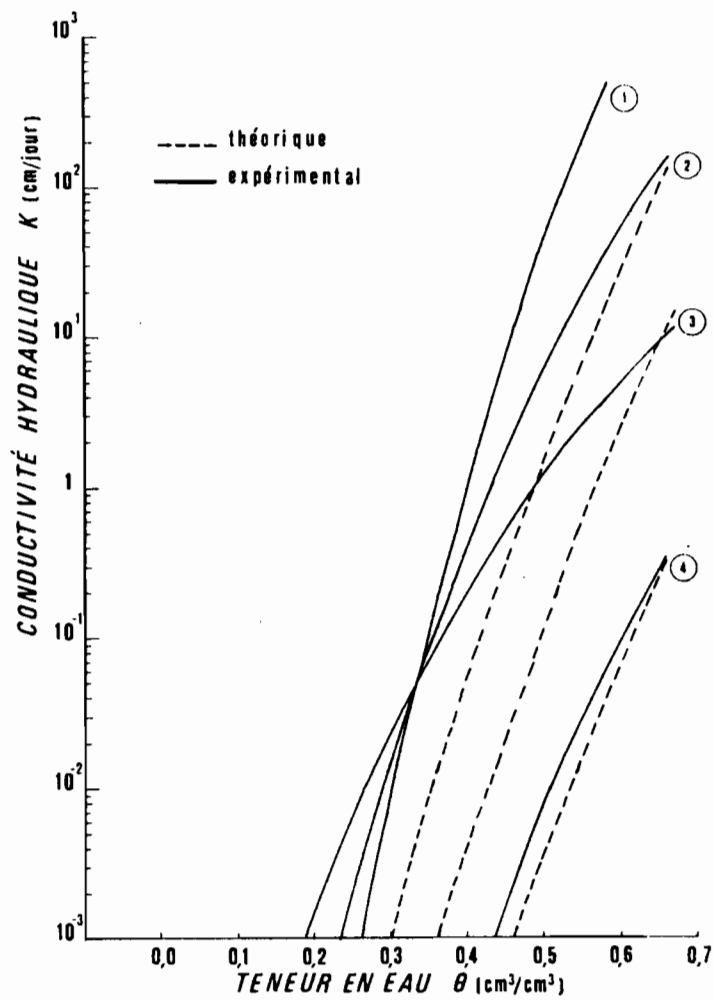


Fig. 8 - Effet de la teneur en sodium échangeable sur la conductivité hydraulique. Niveau de surface d'un sol argileux et organique (MATAFO).

- 1 : EFR = 0,022
- 2 : EFR = 0,101
- 3 : EFR = 0,240
- 4 : EFR = 1,149

PROGRAMME "SIMUL"

GENERALITES

SIMUL a été élaboré à partir du programme TRASOL (RIEU M. et al. 1980), version remanée du MOISTURE FLOW PROGRAM de DUTT G.R. et al. (1972), et du programme SOPREC de DUFEY J. et al. (1979). Il est constitué d'un programme principal (SIMUL MAIN), de 8 sous-programmes (SOLUTE, CODI, VEGT, THE, VENTIL, GYPAL, EQU SOL, ECHANG) et de 4 fonctions. (JOUR, ECH, G, EQE). L'ensemble représente 1463 lignes.

Les unités employées sont les unités métriques C.G.S. La mesure du temps est le jour ou ses fractions décimales et les concentrations sont exprimées en moles/litre et méq/100 g. Tous les calculs sont menés pour une surface de base de 1 cm² et peuvent être reconduits pendant 365 jours simulés consécutifs.

DONNEES INITIALES

La simulation tient compte des apports d'eau en surface du sol (pluies ou irrigations) et en profondeur (remontées capillaires à partir d'une nappe phréatique de niveau variable). Les processus d'évaporation sont pris en compte, qu'il s'agisse de l'évaporation directe du sol nu ou de la consommation en eau d'un couvert végétal. Dans ce cas, trois cultures successives peuvent être considérées, avec la possibilité de faire intervenir une période de friche entre chacune d'entre elles.

Les calculs de simulation sont développés à partir d'un sol moyen initial défini par :

- son profil hydrique,
- sa teneur en eau à la saturation et au point de flétrissement,
- sa conductivité hydraulique et la relation liant la teneur en eau volumique à la succion,
- la pression partielle de CO₂,
- les concentrations dans la solution qui l'imprègne,
- les stocks de Calcite et de Gypse cristallisés,
- la distribution des cations dans les sites d'échange.

Les paramètres utilisés dans les calculs sont d'ordre :

- agro-climatique : pluie et irrigations, E.T.P., dates des semis, densité d'enracinement, durée et crop-factor des trois stades végétatifs principaux (germination, croissance, maturation) de chaque culture considérée,
- chimique : concentrations dans la nappe et l'eau d'irrigation (valeurs moyennes pour une année),
- physico-chimique : teneur en sodium échangeable pour laquelle la perméabilité du sol commence à s'altérer,
- thermodynamique: constantes de dissociation des ions complexes, produits de solubilité de la Calcite et du Gypse, coefficients de sélectivité des réactions d'échange sodium-calcium et calcium-magnésium.

ORGANISATION DES CALCULS

Au début de chaque jour simulé, MAIN appelle THE pour la détermination de la date calendaire correspondante, puis VEGT pour l'évaluation des consommations d'eau dans le sol ; CØNT est ensuite appelé pour le calcul de la conductivité hydraulique et de la diffusivité. Enfin MAIN transfère à SØLUTE l'ensemble des résultats déjà acquis et les données initiales. SØLUTE analyse les flux hydriques dans le sol et calcule les nouveaux contenus en eau et les nouvelles concentrations. Selon l'intensité des flux hydriques, l'ensemble CØNT-SØLUTE est appelé à plusieurs reprises avant que la journée simulée soit achevée (Boucle interne, $t < 1.0$ jour). Les sorties journalières concernant l'hydrodynamique sont alors imprimées.

Sur option DD = 1, MAIN transmet l'ensemble de ces résultats à VENTIL qui organise les calculs de l'équilibre thermodynamique, pour chaque strate successivement. VENTIL appelle d'abord FØISØL qui calcule les concentrations d'équilibre dans une solution d'électrolytes en contact avec une phase gazeuse. Les valeurs des concentrations sont passées à GYPCAL dont le rôle est d'assurer les équilibres de solubilité du Gypse et de la Calcite. A cet effet, GYPCAL simule les réactions de solubilisation et/ou précipitation impliquées par les valeurs des

produits ioniques correspondants et réactualise les stocks de calcite et de gypse cristallisés. Ces calculs entraînent une modification des concentrations des espèces en solution : leurs valeurs sont retournées à EQUØL pour un nouveau calcul d'équilibre avec la phase gazeuse. Le va - et-vient entre GYPCAL et EQUØL se répète jusqu'à cohérence entre les résultats fournis par les deux sous-programmes.

Les données de cet équilibre partiel sont alors transmises à ECHANG pour la simulation des échanges de cations entre la phase surface et la phase liquide. La distribution des cations dans les sites d'échange est ainsi réactualisée, mais les concentrations des espèces en solution sont modifiées. Leurs valeurs sont donc retransmises à EQUØL, puis GYPCAL pour un nouveau calcul d'équilibre. EQUØL appelle ainsi successivement les deux sous-programmes GYPCAL et ECHANG jusqu'à ce que les valeurs calculées des concentrations des espèces en solution, les quantités de gypse et de calcite cristallisés et des proportions de cations adsorbés soient compatibles entre elles. VENTIL transmet alors les résultats finaux à MAIN qui les imprime et relance les calculs pour la journée simulée suivante.

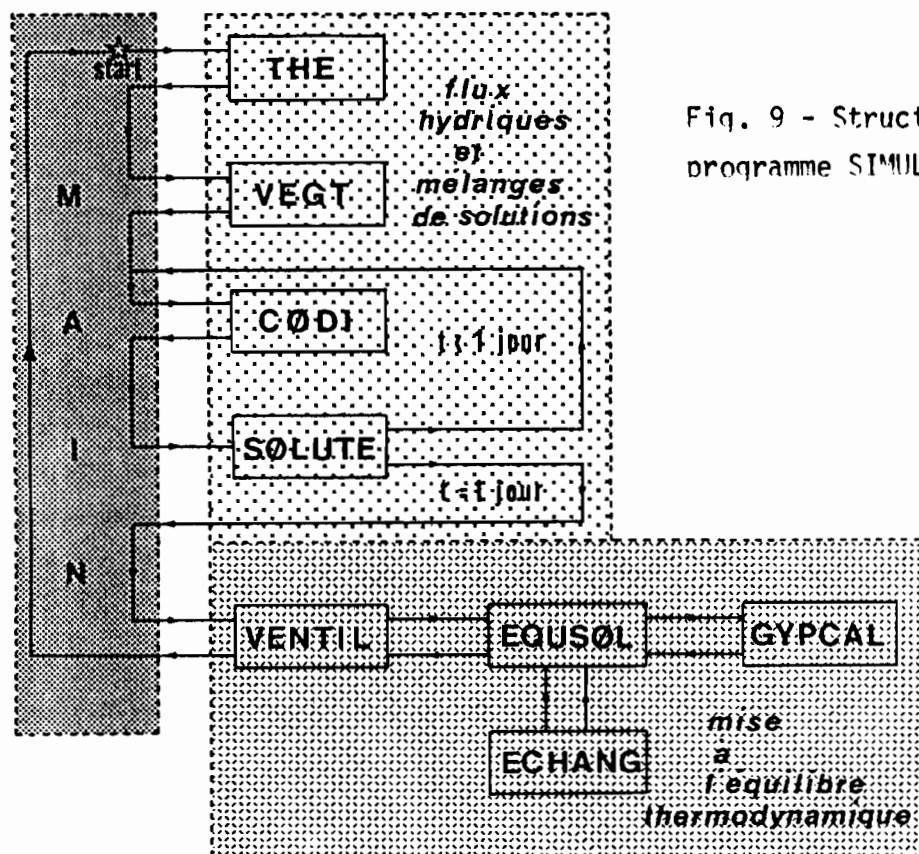


Fig. 9 - Structure du programme SIMUL.

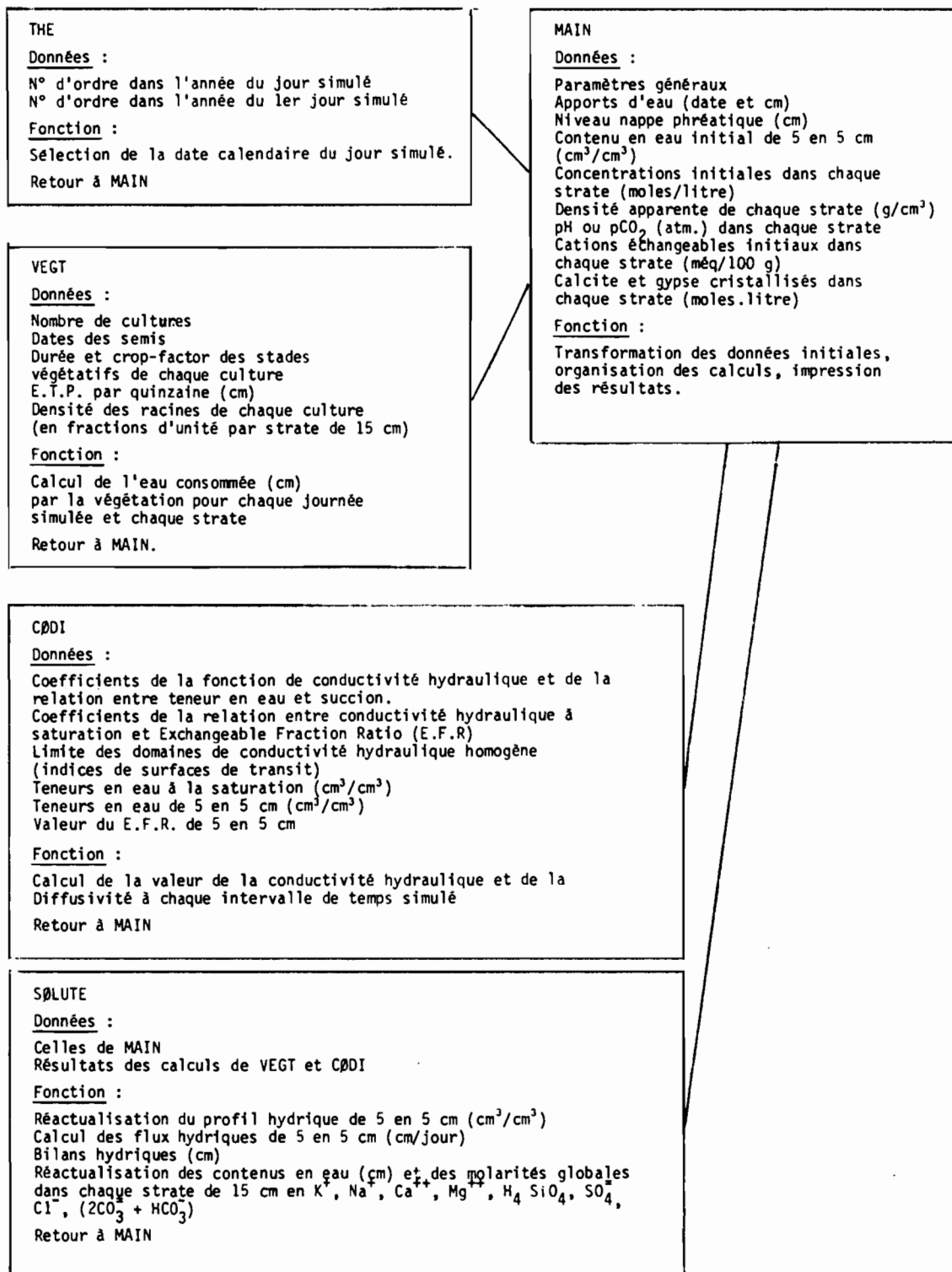


Fig. 10 - Organigramme général de l'ensemble des programmes "Flux hydriques et mélanges de solutions".

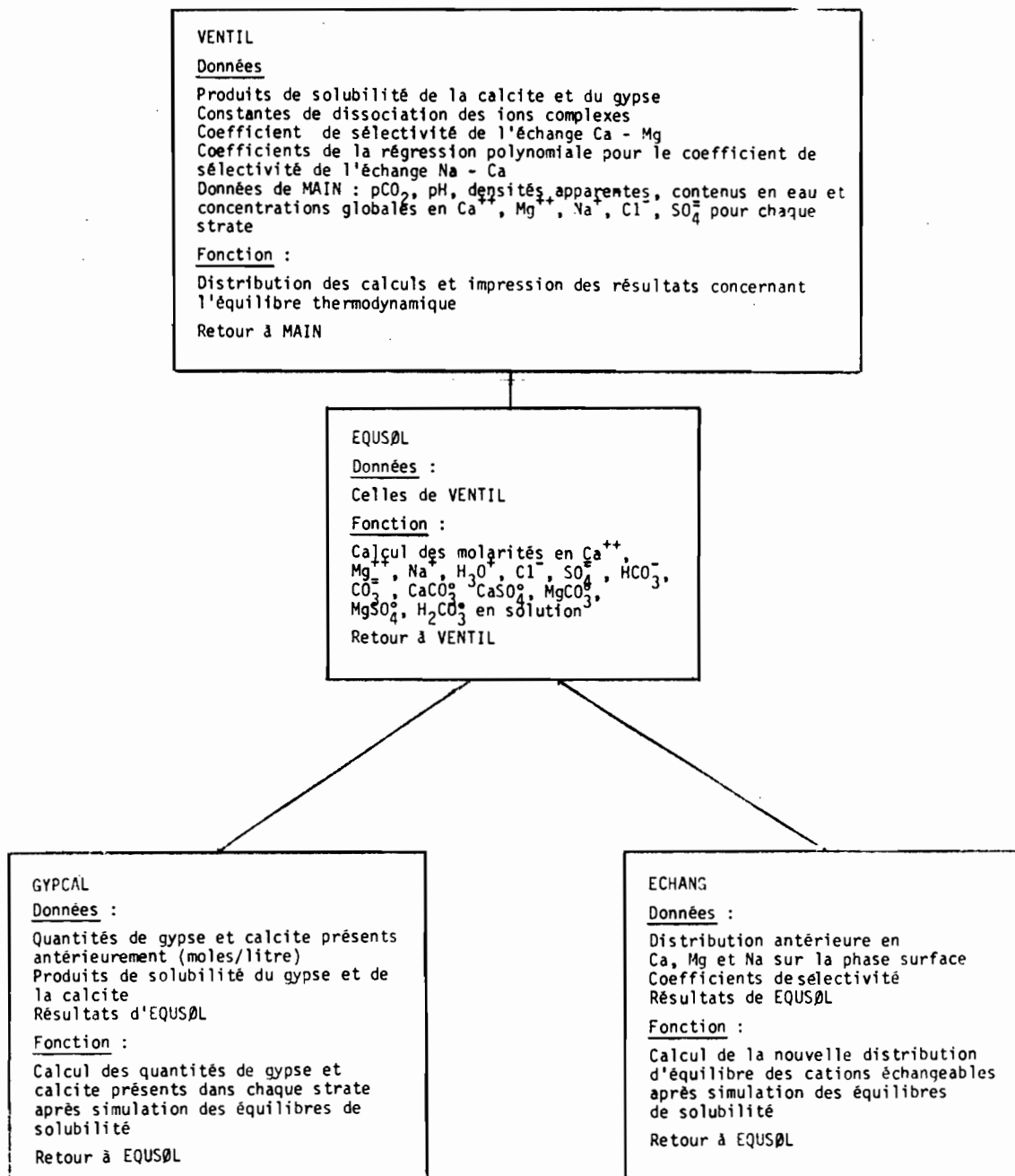


Fig. 11 - Organigramme général de l'ensemble des programmes "Mise à l'équilibre thermodynamique".

SORTIES

Selon la préoccupation de l'utilisateur, deux types de résultats peuvent être imprimés.

- S'il s'agit d'une simulation étalée sur une période longue, dans le but de prévoir le devenir d'un sol irrigué, on peut se limiter à l'impression des teneurs en eau et des concentrations d'équilibre à la fin de chaque journée simulée. Ces impressions sont exécutées automatiquement. Elles sont accompagnées de quelques informations générales concernant le bilan hydrique du sol, imprimées au début de chaque journée simulée.
- Si l'on désire étudier en détail un processus particulier de la dynamique de l'eau dans le profil, il est possible d'avoir accès à des informations détaillées qui peuvent être imprimées à une fréquence de temps simulé très élevée. Ces impressions sont optionnelles et sont obtenues grâce à un jeu de switches.

L'ensemble des informations disponibles sur les flux hydriques et les mélanges de solutions et leur mode d'accès sont présentés sur le tableau I:

TABLEAU - I - RESULTATS SUR LES FLUX HYDRIQUES ET LES MELANGES DE SOLUTIONS

Information	Variable	Type d'accès
N° d'ordre de la journée simulée (depuis le début de la simulation)	II	1,2,4
Profondeur du sol (cm)	HØRIZØ	1
Nombre de surfaces de transit	Q	1
Nombre de strates de sol	QQ	1
Eau d'apport en surface (cm) (au début de chaque journée simulée)	HED	1
Eau d'apport restant à infiltrer (cm) (en cours de journée simulée)	HED	4
Date calendaire de la journée simulée	IDTE, MØI	2
Nombre d'itérations effectuées depuis le début de la journée simulée et durée simulée correspondante (jour)	IT	2,4
	XT	2,4
Infiltration cumulée en surface (cm) (depuis le début de la simulation)	CI	2,4
Drainage cumulé à la base du sol (cm) (depuis le début de la simulation)	LC	2,4
Eau remontée depuis la nappe (cm) cumulée (depuis le début de la simulation)	ETS	2,4

TABLEAU - I - (suite)

Information	Variable	Type accès
Eau consommée cumulée (cm) (depuis le début de la simulation)	ET	2
Déficit hydrique (1) cumulé (cm) (depuis le début de la simulation)	DEF	2
Bilan de l'eau gagnée ou perdue par le sol (cm) (cumulatif depuis le début de la simulation)	CHECK	2
Différence de stock d'eau dans le sol (cm) (par rapport au stock en début de simulation)	DIF	2
Teneur en eau au niveau de chaque surface de transit (cm ³ /cm ³)	TN	2,4
Eau fluée à travers chaque surface de transit (cumulée depuis l'impression précédente ; cm positifs : flux descendant cm négatifs : flux ascendant)	FNT	4
Bilan gains-pertes d'eau dans le profil (cm) cumulé depuis l'impression précédente.	DBIL	4
Variation du stock d'eau dans le profil (cm) cumulée depuis l'impression précédente.	DSTOK	4
Durée simulée par la dernière itération exécutée (jour)	DELTA	4
Contenu en eau de chaque strate de sol (cm)	CØNT	5
Molarités dans chaque strate de sol K ⁺ , Na ⁺ , Ca ⁺⁺ , Mg ⁺⁺ , H ₄ SiO ₄ , Cl ⁻ , SO ₄ ⁼ 2(CO ₃ ⁼ + HCO ₃ ⁻), H ⁺	CØNC	5
Molarités dans l'eau d'apport (s'il y a lieu)	CØNC 1	3

- 1 : Impression systématique en début de journée simulée.
 2 : Impression systématique en fin de journée simulée.
 3 : Impression en début de journée simulée sur option DD = 1
 4 : Impression à la fin de chaque intervalle de temps simulé
 (sur option BB = 1) ou à la fin de chaque 0,1 jour simulé
 (sur option EE = 1).
 5 : Impression en fin de journée simulée sur option DD = 1.

(1) - Le déficit hydrique (DEF ou ZT) exprime la hauteur d'eau qui aurait dû être consommée sans avoir pu l'être, le point de flétrissement ayant été atteint. Bien que calculée, cette hauteur d'eau n'est pas prise en compte dans les bilans hydriques. Par contre la teneur en eau peut être réduite jusqu'à la valeur limite de 0,05 cm³/cm³ (dessèchement du sol).

A la suite de ce premier groupe de résultats sont imprimés systématiquement à la fin de chaque journée simulée ceux concernant l'équilibre thermodynamique :

- D'abord les données utilisées pour le calcul :
 - . concentrations globales des solutés et des précipités en fin de journée, (moles/l).
 - . Cations échangeables en début de journée (méq/100 g),
 - . Rapport sol/solution en fin de journée (g/litre),
 - . Coefficients de l'expression du coefficient de sélectivité de l'échange Ca - Na en fonction de la teneur en Ca échangeable,
 - . Coefficient de sélectivité de l'échange Ca - Mg,
 - . Produits de solubilité de la Calcite et de Gypse.
- Ensuite les résultats traduisant l'équilibre.
 - . Molarité et activité des espèces en solution :
 - $\text{CO}_3^{=}$, HCO_3^- , H_2CO_3^0 , H^+ , OH^- , Na^+ , Cl^- , $\text{SO}_4^{=}$, Mg^{++} ,
 - MgSO_4^0 , MgCO_3^0 , Ca^{++} , CaSO_4^0 , CaCO_3^0 ,
 - . Molarités des espèces cristallisées : CaCO_{3c} , $(\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O})_c$,
 - . Cations échangeables adsorbés : Ca, Mg, Na (méq/100 g),
 - . Taux de Na échangeables (Na/T),
 - . Exchangeable Fraction Ratio $((\text{Na}/\text{CEC}) \cdot (1 - \text{Na}/\text{CEC})^{-1/2})$,
 - . pH, pCO_2 , Force ionique de la solution du sol,
 - . Charge électrique résiduelle (équival/litre),
 - . SAR de la solution du sol,
 - . Produits ioniques $\text{Ca}^{++} \cdot \text{CO}_3^{=}$ et $\text{Ca}^{++} \cdot \text{SO}_4^{=}$ dans la solution du sol,
 - . Compteurs d'itérations permettant d'analyser la manière dont se sont déroulés les calculs de l'équilibre.

INTRODUCTION DES DONNÉES INITIALES

Le programme SIMUL a été dimensionné de manière telle qu'il puisse être appliqué à des types de sols différents et dans des situations agro-climatiques diverses. Les données initiales correspondantes doivent être introduites selon les normes précisées à la suite.

GROUPE 1 - PARAMETRES GENERAUX

2 cartes - Format 501 et 502

Il s'agit d'instructions concernant des options d'impressions, la durée de la simulation, la dimension du sol, quelques teneurs en eau particulières, les apports d'eau et variations du niveau de la nappe.

- La valeur des switches AA, BB, DD et EE commande les options d'impression :

- . Si AA = 1, les données initiales sont imprimées sous une forme directement intelligible au début de la simulation. (non impression : AA \neq 1). AA : I2 ; col. 1-2.
- . Si BB = 1, les résultats concernant les mouvements d'eau dans le sol sont imprimés à chaque intervalle de temps simulé. (non impression : BB \neq 1). BB : I2 ; col. 3-4.
- . Si DD = 1, les concentrations dans l'eau d'apport sont imprimées le cas échéant et les concentrations globales dans chaque strate de sol sont imprimées à la fin de chaque jour simulé et l'équilibre thermodynamique est calculé (non impression et pas de calcul d'équilibre : DD \neq 1). DD : I2 ; col. 7-8.
- . Si EE = 1, les résultats concernant les mouvements d'eau dans le sol sont imprimés chaque 0,1 jour simulé (non impression : EE \neq 1). EE : I2 ; col. 9-10.

- La durée de la simulation est définie par les valeurs de LL et MM. LL est le numéro d'ordre dans l'année du premier jour simulé.

- . On a $1 < LL < 365$. MM correspondant au dernier jour simulé est défini par : $LL < MM < LL + 364$. LL : I4 ; col. 16-19.
MM : I4 ; col. 20-23.

- . La variable YEAR permet de faire imprimer l'année de la période simulée. Cette donnée est purement informative et peut être modifiée "ad libitum". YEAR : I5 ; Col. 11-15.
- . Le nombre minimum d'intervalles de temps nécessaires à la simulation des mouvements d'eau pendant une journée est introduit par M. On a fixé une fois pour toutes $M = 10$. M : I3 ; col. 24-26.

- L'épaisseur du sol doit toujours être un multiple de 15cm, épaisseur standard des strates de sol. Sa valeur est introduite par la variable HØRIZØ (cm). Le nombre de surfaces de transit est introduit par Q. On a $Q = 1 + (HØRIZØ/5)$. Le dimensionnement du programme prévoit que $Q \leq 60$. La distance entre deux surfaces de transit est introduite par DELX (cm). On a fixé une fois pour toutes : DELX = 5.
HØRIZØ : I3 ; col. 34-36. DELX : I3 ; col. 37-39. Q : I3 ; col. 40-42.

Il est possible de distinguer dans le sol trois zones de comportement hydrodynamique spécifique. A chacune de ces zones correspondant une valeur propre de la teneur en eau à la saturation : TM pour la partie supérieure, TITI pour la partie médiane et TS pour la partie inférieure. Une seule valeur de la teneur en eau correspondant à l'"air entry value" est introduite pour l'ensemble du profil par TATA. Enfin la teneur en eau au point de flétrissement est introduite par TD et l'humidité résiduelle du sol sec par SM. On a dans l'ordre et sur la carte 1 : TS, TM, TD, SM : Format 4F5.2 ; col. 51-70. Sur la carte 2 : TATA, TITI : Format 2F5.2 ; col. 1-10.

- Les calculs de simulation peuvent commencer avec deux types de distributions initiale de teneur en eau : soit un profil hydrique réel introduit par Q valeurs de TØ (cf. Groupe 6), soit un profil hydrique standard avec un contenu en eau uniforme à l'intérieur du profil et des valeurs particulières aux limites. La teneur en eau uniforme peut être l'une des valeurs TM, TS, TITI, TATA, TD ou SM. C'est la valeur SM qui est imposée dans le texte actuel du programme mais une instruction différente peut être introduite. Les teneurs en eau aux limites peuvent être TM, TS ou une teneur quelconque selon la valeur des switches TBC et BBC. Pour la surface du sol, si TBC = 1.0 la teneur en eau est TM ; si TBC = 2.0 la teneur en eau est TØ (1). A la base du sol, si BBC = 1.0

la teneur en eau est $T\emptyset(Q)$; si $BBC = 2.0$, la teneur en eau est TS .
 BBC : F4.1 ; col. 43-46. TBC : F4.1 ; col.47-50. $T\emptyset(1)$ et $T\emptyset(Q)$ sont
introduits comme première et dernière donnée du groupe 6. Le choix
entre l'une ou l'autre distribution initiale de teneur en eau est
opéré par la valeur du switch CC .

. Si $CC = 1$, les valeurs utilisées sont les $T\emptyset$ introduits dans le
6ème groupe de données initiales. Si $CC \neq 1$, c'est le profil hydrique
standard qui est retenu et les teneurs en eau aux limites sont fixées
par les valeurs de BBC et TBC . CC : I2 ; col. 5-6.

- Le nombre de jours d'apport d'eau durant l'année agro-
climatique (ou la période simulée) est introduit par $APPS$ ($APPS < 60$).
 $APPS$: I3 ; col. 27-29.

- Le nombre de jours où un changement de niveau de la nappe
phréatique est à prendre en considération est introduit par $FLUC$
($FLUC \leq 20$). $FLUC$: I3 ; col 30-32.

GROUPE 2 - APPORTS D'EAU

APPS Cartes. Format 503.

Il s'agit de la liste des jours de l'année agro-climatique
où a lieu une pluie ou une irrigation. Seul un apport d'eau par jour
peut être pris en considération. Leur nombre total, $APPS$, ne peut
être supérieur à 60 pour une année. Lorsque la simulation est limitée
à une période réduite, il suffit d'indiquer les jours d'apport d'eau
correspondants à la période simulée (Au moins 1 qui peut être éventuel-
lement de 0,0 cm).

A chaque jour d'apport d'eau correspond une carte sur laquel-
le figurent le jour du mois ($DATE$), le mois ($MOIS$), la hauteur d'eau
en cm (AMT) et le type d'apport ($GENRE = 1$ pour la pluie et 2 pour
l'irrigation).

$GENRE$: I1 ; col. 3. $DATE$: I2 ; col. 21-22.

$MOIS$: I2 ; col. 24-25. AMT : F10.2 ; col. 26-35.

GRUPE 3 - NIVEAU DE LA NAPPE PHREATIQUE

FLUC cartes. Format 504.

Il résulte de la division du sol en segments de 15 cm que seules des variations de niveau de 15 cm ou d'un multiple de 15 cm peuvent être prises en compte. Les jours où la variation de niveau de la nappe atteint ces valeurs sont considérés comme "jours de variation de niveau". Le nombre total de ces jours, FLUC, ne peut être supérieur à 20 pour une année. A chaque jour correspond une carte sur laquelle figurent le jour du mois (DIA), le mois (MES) et le niveau de la nappe en cm (NIVØ).

DIA : I2 : col. 21-22. MES : I2 : col. 24-25. NIVØ : I3 : col.33-35.

GRUPE 4 - COMPOSITIONS CHIMIQUES INITIALES

2(1 + (Q-1)/3) cartes. Format 511.

Les concentrations en K^+ , Na^+ , Ca^{++} , Mg^{++} , H_4SiO_4 , SO_4 , Cl^- , $(HCO_3^- + 2 CO_3^{=})$, H^+ de l'eau d'irrigation (moyenne annuelle) et de la solution du sol dans chaque strate de 15 cm sont introduites. Les valeurs sont exprimées en moles/litre et figurent dans l'ordre indiqué précédemment sur deux cartes, avec les 5 premières données sur la première carte et les 4 suivantes sur la deuxième. Le premier ensemble de deux cartes correspond à l'eau d'irrigation et les suivants aux strates de sol, depuis la surface jusqu'à la nappe (ou la base du sol). Le format et le même pour chaque donnée : 5E12.5 pour la première carte et 4E12.5 pour la deuxième.

Nota : Les analyses d'extraits de sol sont le plus souvent fournies par les laboratoires en méq/100 g. Ces données doivent être transformées pour être exprimées en moles/litre de solution du sol dans l'état d'humidité initial. On rappelle que la surface de base du sol simulé est de 1 cm². Chaque strate a donc un volume de 15 cm³ et un poids de 15. dAg (dA étant la densité apparente). Son contenu en eau s'obtient facilement à partir du profil hydrique initial : A chaque strate (J) correspondent quatre données de teneur en eau de 5 en 5 cm : θ_j , θ_{j+1} , θ_{j+2} , et θ_{j+3} . Le contenu en eau de la strate (J) exprimé en cm³ est :

$$CØNT (J) = 2,5\theta_j + 5\theta_{j+1} + 5\theta_{j+2} + 2,5\theta_{j+3}$$

- . Si A est la concentration d'un ion monovalent exprimée en méq/100g, la molarité correspondante dans la strate (J) est $\frac{A \cdot 15 \cdot dA}{100 \cdot \text{CONT}(J)}$ moles/litre ; dans le cas d'un ion bivalent B, on aurait $\frac{B \cdot 15 \cdot dA}{200 \cdot \text{CONT}(J)}$ moles/litre.

GRUPE 5 - DONNEES COMPLEMENTAIRES PROFIL

1 + (Q-1)/3 cartes. Format 505

Dans le groupe 5 sont introduites les valeurs de la densité apparente dA (g/cm³), pression partielle de CO₂ (atm.) Na⁺, Ca⁺⁺, Mg⁺⁺ échangeables (méq/100g), CaCO₃ et (CaSO₄ · 2H₂O)_C en moles/litre de solution du sol, pour chaque strate. Dans la pratique, pour des raisons de simplicité des instructions de lecture, une première carte de données est lue pour l'eau d'irrigation, puis les cartes correspondant aux strates de sol, depuis le sommet jusqu'à la base. Le groupe 5 comporte donc, comme le groupe 4, autant d'ensembles de données qu'il existe de strates de sol, plus un. Chaque ensemble figure sur une carte dans l'ordre indiqué précédemment. Le format est le même pour chaque donnée : 7E10.3 : col. 1-70.

Les données portées sur la première carte sont toutes nulles. Pour les cartes suivantes, les données sont celle mesurées pour chaque strate de 15 cm du sol initial.

Nota : En général, les données relatives au contenu du sol en calcaire et gypse sont fournies par les laboratoires d'analyse en pourcentages pondéraux. Les transformations à effectuer sont les suivantes :

- . Si l'on adopte 100g pour poids moléculaire de la calcite, N% de calcite devient :

$$\frac{1}{100} \cdot \frac{N}{100} \cdot 15 \cdot dA \cdot \frac{1000}{\text{CONT}(J)} \text{ moles/litre de solution de la}$$

strate (J); et pour un poids moléculaire du gypse de 132 g on a :

$$\frac{1}{132} \cdot \frac{N}{100} \cdot 15 \cdot dA \cdot \frac{1000}{\text{CONT}(J)} \text{ moles/litre de solution de la}$$

strate (J).

GRUPE 6 - PROFIL HYDRIQUE REEL INITIAL

Q Cartes. Format 503.

On introduit ici Q valeurs de teneurs en eau volumiques correspondant au profil hydrique du sol initial de 5 en 5 cm. A chaque valeur T_0 correspond une carte. T_0 : F6.4 ; col. 54-59.

GROUPES 7-8-9-10 - CULTURES ET CONSOMMATION D'EAU

Dans sa présentation courante, le programme est dimensionné pour la prise en compte de deux cultures et une période de friche. (Les modifications à apporter dans le cas de trois cultures sont indiquées plus loin) Deux combinaisons sont possibles : friche - culture 1 - culture 2 - friche, ou bien friche - culture 1 - friche - culture 2 - friche.

Pour chaque culture, on considère trois stades végétatifs auxquels correspondent trois facteurs de consommation propres à la région (crop-factor). On définit aussi un crop-factor pour le sol en friche (couverture naturelle peu dense ou sol nu).

L'épaisseur maximum de sol exploité par les racines est limitée à 180 cm. La distribution des racines de chaque culture est introduite sous la forme de proportions de l'ensemble du système racinaire, contenues dans les strates successives de 15 cm. En tout état de cause il ne peut y avoir de racines à une profondeur supérieure à l'épaisseur du sol simulé et les proportions de racines introduites pour ces niveaux doivent être nulles. On définit aussi une distribution de racines fictives destinée à la simulation de l'évaporation par le sol en friche.

- Dans le groupe 7 (1 carte, Format 509), sont introduits successivement : Nombre de cultures, NSEMI : I1 ; col. 2 ; les crop-factor correspondant aux trois stades végétatifs successifs et la friche, CF(1), CF(2), CF(3), CF(4) : 4F5.2 ; col. 4-23 ; la durée, en nombre de jours, des trois stades végétatifs de la première culture : T(1,1), T(2,1), T(3,1) et de la friche consécutive T(4,1) (T(4,1) peut être nul) et le cas échéant, les mêmes données pour la deuxième culture : T(1,2), T(2,2), T(3,2) T(4,2). On introduit : T(1,1), T(2,1), T(3,1), T(4,1) : 4I3 ; col. 29-40. T(1,2), T(2,2), T(3,2), T(4,2) : 4I3 ; col. 49-60.

- Dans le groupe 8 (1 carte, Format 510), apparaissent les dates des semis des cultures considérées. Les dates sont introduites par le numéro d'ordre du jour dans l'année calendaire. On notera que si l'on ajoute au numéro d'ordre d'un semis le nombre de jours de la culture correspondante et de la friche consécutive, on doit obtenir exactement le numéro d'ordre du semis de la culture suivante.

. Si le total obtenu est supérieur à 365, on lui retranche 365 et on doit obtenir le numéro d'ordre du semis antérieur. Dans la présentation normale du programme on a deux dates de semis : ID(1), ID(2). ID(1) : I3 ; col. 18-20. ID(2) : I3 ; col.28-30.

- Dans le groupe 9 (NSEMI + 1 carte, Format 508), sont introduites les fractions de système racinaire par strate de 15 cm correspondant à chaque culture et à la friche. L'enracinement maximum étant de 180 cm, il s'agit de groupes de 12 valeurs (fractions décimales d'unité) dont certaines peuvent être nulles. On introduit dans l'ordre :

KP(1, i) i = 1,12 Format 12F6.3 ; col. 1-72.

KP(2, i) i = 1,12 Format 12F6.3 ; col. 1-72.

KPF(i) i = 1,12 Format 12F6.3 ; col. 1-72.

- Dans le groupe 10 (2 cartes, Format 507) sont introduites les valeurs de l'E.T.P. par quinzaine (en cm d'eau). Il s'agit de 24 valeurs introduites dans l'ordre chronologique : 1-15 janvier, etc...

On a U(N), N = 1,12 sur la première carte et U(N), N = 13-24 sur la deuxième carte. Le format est le même pour les deux cartes : 12F6.3 ; col. 1-72.

GROUPE 11 - CONDUCTIVITE HYDRAULIQUE ET DIFFUSIVITE

3 Cartes. Format 502.

La valeur de ces deux fonctions est calculée à chaque intervalle de temps simulé au niveau de chaque surface de transit (j) selon les expressions suivantes :

CONDUCTIVITE HYDRAULIQUE

$$\text{Sol normal : } K(J) = K_{\text{sat}} \cdot (TK(J)/T_{\text{max}})^B$$

$$\text{Sol alcalinisé : } K(J) = (ANA.EFR(J)^{RNA}) \cdot (TK(J)/T_{\text{max}})^B$$

$$\text{où, } TK(J) = (\theta_j + \theta_{j+1})/2$$

$$K_{\text{sat}} = A \cdot T_{\text{max}}^B$$

T_{max} : teneur en eau à la saturation

θ_j : teneur en eau au niveau de la surface (j)

EFR(J) : Exchangeable Fraction Ratio au niveau de la surface (j)

A, B, ANA, BNA : constantes expérimentales.

DIFFUSIVITE

$$D(J) = K(J) \cdot \text{DPSI}(J)$$

où DPSI(J) est la valeur de la pente de la courbe représentant la succion h (cm H₂O) en fonction de la teneur en eau au point TK(J).

$$\text{On a : } h_j = C_0 \cdot \left(\frac{TK(j)}{TATA}\right)^{P_0}$$

$$\text{et : } \text{DPSI} = \frac{dh}{d\theta} = C_1 \cdot \left(\frac{TK}{TATA}\right)^{P_1}$$

Pour $TK \ll TATA$.

Cette relation est le plus souvent étendue au domaine $TATA \leq TK \leq T_{\text{max}}$ pour lequel on ne dispose pas de relation particulière. Si toutefois on a pu définir une relation linéaire entre θ et h pour ce domaine, on a :

$$h = C_0 \cdot TK + P_0$$

$$\text{soit : } h = C'_0 \cdot \left(\frac{TK}{TATA}\right) + P_0$$

$$\text{et : } \text{DPSI} = \frac{dh}{d\theta} = \frac{C'_0}{TATA} = C_2$$

On utilise une expression unique de DPSI, de la forme :

$$\text{DPSI} = CD \cdot \left(\frac{TK}{TATA}\right)^{PD}$$

où $CD = C_1$ et $PD = P_1$ pour $TK \leq TATA$;

Si on dispose d'une 2^o relation pour le domaine $TK \geq TATA$, on a :

$$CD = C_2 \text{ et } PD = P_2 = 0$$

sinon on conserve les mêmes valeurs C_1 et P_1 .

Il est en général possible de se limiter à une seule relation entre succion et teneur en eau pour tout le profil. Par contre, la conductivité hydraulique, beaucoup plus dépendante des variations de structure, peut prendre des expressions différentes dans le même profil.

On a ménagé la possibilité de distinguer dans le profil simulé trois zones de conductivité hydraulique différente. L'épaisseur de chaque zone doit être un multiple de 5 cm et est précisée par la valeur de l'indice de la surface de transit située à la base : JCHK1 pour la zone supérieure et JCHK2 pour la zone médiane. Chaque zone est ainsi caractérisée par :

	T_{\max}	A	B	K_{sat}	J
zone 1	TM	A(1)	B(1)	KSATD	JCHK1
zone 2	TITI	A(2)	B(2)	KSATD1	JCHK2
zone 3	TS	A(3)	B(3)	KSATD2	Q

Pour le sol alcalinisé, on utilise un seul jeu de constantes ANA, BNA ainsi qu'une seule valeur de teneur en eau à la saturation TSS. Par contre B(1), B(2) et B(3) sont utilisés selon le niveau où se manifeste l'alcalinisation.

TM, TITI, TS, TATA ont déjà été introduits dans le Groupe 1. Les autres données sont introduites dans le Groupe 11 :

Carte 1 : A(1), A(2), A(3), B(1), B(2), B(3). Format 6E12.5 ; col.1-72.

Carte 2 : C(1), C(2), P(1), P(2). Format 4E12.5 ; col. 1-48.

JCHK1, JCHK2. Format 2I5 ; col. 49-58.

Carte 3 : TSS, ANA, BNA. Format 3E12.5 ; col. 1-36.

Quand le sol simulé a une conductivité hydraulique uniforme, on introduit des valeurs nulles pour A(2), A(3), B(2), B(3) et on attribue à JCHK1 et JCHK2 une valeur supérieure à $Q + 1$. Enfin on donne à TITI la valeur de TS. Si seulement deux zones de conductivité hydraulique différente doivent être simulées, on introduit des valeurs nulles pour A(3) et B(3), on attribue à JCHK2 une valeur supérieure à $Q + 1$ et à TITI la même valeur que TS.

DISPOSITIONS PARTICULIÈRES

Une légère modification du texte du programme permet la simulation de situations particulières : trois cultures dans l'année; plus de 60 jours d'apport d'eau ; plus de 20 jours de variation du niveau de la nappe ; équilibre thermodynamique calculé à pH constant et $p\text{CO}_2$ variable ou avec d'autres valeurs des constantes thermodynamiques que celles proposées ; absence de nappe phréatique.

SIMULATION DE TROIS CULTURES DANS L'ANNEE

TEXTE DU SOUS-PROGRAMME VEGT

Au lieu de l'instruction : IF(JO.GE.DEB(4,2)GØTØ 240 (ligne 66), on introduit le paragraphe suivant :

```
IF(JO.GE.DEB(4,2).AND.JO.LT.DEB(1,3))GØTØ 160
IF(JO.GE.DEB(1,3).AND.JO.LT.DEB(2,3))GØTØ 300
IF(JO.GE.DEB(2,3).AND.JO.LT.DEB(3,3))GØTØ 320
IF(JO.GE.DEB(3,3).AND.JO.LT.DEB(4,3))GØTØ 340
IF(JO.GE.DEB(4,3)GØTØ 240.
```

Juste avant l'instruction : 240 DØ 250 Z = 1, KJK (ligne 88), on insère le paragraphe suivant :

```
300 DØ 310 Z = 1, KJK
310 CØNS (Z) = ETR (JO)×CF(1)×KP(3,Z)
      GØ TØ 260
320 DØ 330 Z = 1, KJK
330 CØNS (Z) = ETR (JO)×CF(2)×KP(3,Z)
      GØ TØ 260
340 DØ 350 Z = 1, KJK
350 CØNS (Z) = ETR (JO)×CF(3)×KP(3,Z)
      GØ TØ 260
```

Enfin les formats de lecture doivent être modifiés : après l'instruction 507 FØRMAT (12F6.3/12F6.3) (ligne 106), on introduit les formats corrigés :

```
508 FØRMAT (12F6.3/12F6.3/12F6.3/12F6.3)
509 FØRMAT (1X, I1, 1X, 4F5.2, 5X, 4I3, 8X, 4I3, 8X, 4I3)
510 FØRMAT (17X, I3, 7X, I3, 7X, I3)
```

DONNEES INITIALES (GROUPES - 7-8-9)

Dans le groupe 7, NSEMI (Col.2) prend la valeur 3 et on ajoute la durée des stades végétatifs de la 3ème culture : T(1,3), T(2,3), T(3,3), T(4,3) : Format 4I3 ; col. 69.80.
où T(4,3) peut être nul.

Dans le groupe 8, on introduit la date du 3ème semis ID(3) : Format I3 ; col.38-40.

Dans le groupe 9, on introduit la distribution racinaire de la 3ème culture. Il s'agit d'une carte supplémentaire portant douze valeurs de KP (3,i) (i=1,12) (Format 12F6.3 ; col. 1-72) insérée entre les données de KP(2,i) et KPF(i).

AUGMENTATION DU NOMBRE DE JOURS D'APPORT D'EAU OU DE MOUVEMENT DE NIVEAU DE LA NAPPE

Il suffit, au début du programme MAIN de redimensionner les variables DATE, MØIS, AMT et GENRE à la valeur nécessaire. GENRE est aussi à redimensionner au début du sous-programme SØLITE. DIA, MES et NIVØ doivent être redimensionnées au début de MAIN.

MODIFICATION DES CONDITIONS DE L'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE

La sélection de l'une ou l'autre voie de calcul de l'équilibre thermodynamique se réalise par la valeur de la variable JHC : Si JHC = 1, le calcul se fait à pH constant et si JHC = 2 il se fait à pCO₂ constante. Le programme, sous sa présentation générale, prévoit un calcul à pCO₂ constante. Si on désire une simulation à pH constant, il suffit de modifier la valeur de JHC dans le sous-programme VENTIL (ligne 60). Dans le même sous-programme, on peut attribuer une valeur différente de celles choisies aux constantes thermodynamiques suivantes :

K0 = 3,38 10 ⁻²	(équilibre CO ₂ - H ₂ O)	(ligne 52)
K1 = 4,467 10 ⁻⁷	(- H ₂ CO ₃ ^o - H ₂ O)	(- 53)
K2 = 4,677 10 ⁻¹¹	(- HCO ₃ ⁻ - H ₂ O)	(- 54)
KCASØ = 4,90 10 ⁻³	(dissociation CaSO ₄ ^o)	(- 55)
KCASØ = 3,29 10 ⁻⁵	(- CaCO ₃ ^o)	(- 56)
KMGSØ = 5,88 10 ⁻³	(- MgSO ₄ ^o)	(- 57)
KMGCØ = 4,0 10 ⁻⁴	(- MgCO ₃ ^o)	(- 58)

KSPCAL = 0,4 10 ⁻⁸	(Produit solubilité calcite)	(ligne 61)
KSPGYG = 0,2 10 ⁻⁴	(- - gypse)	(- 62)
KCAMG = 1,0	(coef.sélectivité échange Ca ⁺⁺ -Mg ⁺⁺)	(- 63
A0 = 5,0	(coefficients de la regression)
A1 = 4,0	polynomiale dans l'expression	} (ligne 64 à 67)
A2 = 0,0	du coef.de sélectivité de l'échange	
A3 = 0,0	Na ⁺ - Ca ⁺⁺)	{

ALCALINISATION DU SOL

La simulation de l'alcalinisation du sol n'est abordée que par son aspect physique : perte de conductivité hydraulique liée à la dispersion des particules d'argile. La teneur en Na⁺ échangeable pour laquelle ce phénomène commence à se produire est à mesurer pour tout sol simulé. Elle correspond à une valeur du paramètre EFR qui est égal à $(Na / CEC) \cdot (1 - Na / CEC)^{-\frac{1}{2}}$. Cette valeur particulière de EFR est utilisée dans le sous-programme CØDI pour la sélection de l'expression de K(J) pour le sol alcalinisé. Elle apparait dans la ligne 44 :

```
80 IF(EFR (J).GE ..1) GØ TØ 90
```

La valeur 0,1 de EFR figurant dans cette instruction peut éventuellement être changée selon les mesures effectuées sur le sol que l'on désire simuler.

ABSENCE DE NAPPE PHREATIQUE

Dans le cas où la nappe phréatique n'existe pas ou bien si elle est trop profonde pour avoir une influence sur la dynamique de l'eau dans le sol, on considère que le sol est au contact d'un sous-sol semi fini de teneur en eau constante. La teneur en eau à la base du sol est considérée constante et égale à celle du sous-sol. On notera que cette teneur en eau doit être choisie suffisamment élevée pour que les flux traversant la surface de transit (Q-1) puissent évacuer tout excédent d'eau éventuel à la base du profil. Sa valeur est introduite par TØ(Q) dans le groupe 6. Pour qu'elle soit prise en compte il faut avoir : BBC = 1.

Le groupe 3 (Fluctuations du niveau de la nappe) est lu de toutes façons. On doit donc introduire dans ce groupe une donnée. On aura alors FLUC = 1 et le groupe 3 comportera une seule carte avec une date quelconque et une profondeur NIVØ égale à la profondeur du sol HØRIZØ.

EXEMPLES DE SIMULATION

VALIDATIONS

Le modèle de simulation numérique présenté dans les pages précédentes met en jeu des processus de nature très différente et utilise un nombre important de paramètres et constantes expérimentales. La simulation complète d'une évolution mesurée sur le terrain ne peut difficilement être considérée comme un test de validation fiable : on ne saurait faire la part des écarts dus aux calculs proprement dits et celle des erreurs expérimentales ou analytiques. Il a paru plus significatif de procéder à des essais partiels et circonscrits : simulation du comportement hydrodynamique du sol pour un épisode court mais identifié avec précision, simulation de l'équilibre d'un système connu dans le détail.

MISE A L'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE

Les capacités du modèle de calcul de l'équilibre ont été vérifiées de façon originale par ses auteurs : le test consiste à analyser au laboratoire différentes pâtes de sol afin de déterminer les concentrations totales de Na^+ , Ca^{++} , Mg^{++} , Cl^- et $\text{SO}_4^{=}$ ainsi que les quantités de chaque espèce sous forme dissoute ou adsorbée. On introduit ensuite comme données initiales du modèle les concentrations totales mesurées mais avec une ventilation sciemment erronée entre les phases liquide et surface. Le modèle d'équilibration permet de retrouver de façon satisfaisante la distribution réelle des cations entre la solution et le complexe adsorbant (DUFFY et al. 1979 ; LAUDELOUT et al. 1980).

SIMULATION DES TRANSFERTS D'EAU

Un épisode d'irrigation-redistribution observé au laboratoire sur un monolithe de 160 cm de haut et 50 cm de diamètre a été simulé par le modèle hydrodynamique.

Il s'agit d'un sol peu évolué, développé dans des alluvions argileuses. Il est représentatif des sols de la basse vallée de la Medjerda où il a été prélevé (VALLES V. et VALLES A.M. 1982, VIEILLEFON J. OLIVE P. et HURERT P. 1982).

L'apport d'eau de 13,41 mm a été effectué en 3 jours (19-21/10/81) à la surface du monolithe partiellement desséché. Dès la fin de l'irrigation, la surface a été recouverte afin d'éviter l'évaporation.

La simulation concerne les 3 jours d'apport d'eau et les 5 premiers jours de la redistribution.

Afin de la mener à bien, il a été nécessaire de "normaliser" le profil du monolithe selon les caractéristiques du modèle de calcul utilisé. On a utilisé à cet effet les nombreuses données expérimentales réunies par les auteurs précédemment cités.

Les données initiales de la simulation sont :

- les caractéristiques hydrodynamiques du monolithe (relation $h - \theta$, conductivité hydraulique et teneur en eau à la saturation),
- le profil hydrique initial,
- la hauteur d'eau apportée.

DONNEES EXPERIMENTALES

Profils hydriques

La teneur en eau dans le monolithe a été mesurée 2 fois par jour avec des humidimètres neutroniques. Sur le tableau II sont reportés les profils hydriques en fin de journée les 2ème et 3ème jours d'apport d'eau ainsi que les 1er, 2ème et 5ème jours de la redistribution. Les teneurs en eau, exprimées en cm^3 d'eau par cm^3 de sol, concernent des tranches de sol successives de 10cm d'épaisseur, entre 0 et 150 cm.

TABLEAU II - MONOLITHE. PROFILS HYDRIQUES EXPERIMENTAUX ET APPORTS D'EAU (cm^3/cm^3)

Prof. (cm)	19/2 initial	20/2	21/2	22/2	23/2	26/2
5	.26	.401	.403	.397	.393	.392
15	.355	.428	.433	.431	.426	.423
25	.392	.418	.426	.429	.426	.420
35	.398	.421	.421	.420	.421	.4145
45	.376	.394	.397	.395	.3965	.386
55	.368	.380	.3805	.382	.3835	.375
65	.368	.389	.388	.385	.386	.376
75	.395	.410	.413	.410	.408	.401
85	.397	.411	.410	.408	.410	.399
95	.385	.406	.406	.397	.395	.386
105	.407	.423	.419	.415	.414	.405
115	.438	.454	.454	.445	.4475	.4365
125	.461	.472	.473	.468	.466	.465
135	.465	.483	.477	.475	.478	.469
145	.448	.455	.458	.4565	.454	.453
apports d'eau cumulés (cm)	7.18	9.68	13.41	13.41	13.41	13.41

Caractéristiques hydrodynamiques

relation $h - \theta$

une relation unique, de la forme

$$h = a \cdot (\theta/\theta_x)^b$$

où θ_x est la teneur en eau au dessous de laquelle la porosité n'est plus saturée d'eau ("air entry value"), a été définie à partir des données expérimentales concernant les niveaux : 10 cm, 50 cm, 65 cm et 80 cm. Pour une valeur de $\theta_x = .44$, la valeur des coefficients a et b est :

$$a = 8.5624 \text{ et } b = -13.347$$

on en tire l'expression :

$$dh/d\theta = 259.73 (\theta/.44)^{-14.347}$$

conductivité hydraulique et θ_{sat}

3 zones hydrodynamiques différentes au maximum peuvent être prises en compte par le modèle. Il a donc été nécessaire de préciser les limites de ces zones et de leur attribuer une conductivité hydraulique. A cet effet, on a considéré les valeurs de la densité apparente et de θ_{sat} d'une part et l'ensemble des mesures de la conductivité hydraulique d'autre part. Les 3 expressions retenues ont été déterminées graphiquement et après des calculs d'essais qui ont permis de tester la valeur des coefficients sélectionnés.

$$\begin{aligned} \text{zone 1 : } \theta_{sat} &= .44 \\ (0-40) \quad K &= .23785 \cdot 10^{31} \theta^{82.589} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{zone 2 : } \theta_{sat} &= .41 \\ (40-120) \quad K &= .87554 \cdot 10^{24} \theta^{59.148} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{zone 3 : } \theta_{sat} &= .47 \\ (120-150) \quad K &= .11150 \cdot 10^{34} \theta^{98.971} \end{aligned}$$

En l'absence d'une nappe phréatique, la mise en oeuvre du modèle exige la définition d'une teneur en eau constante à la base du profil. On a conservé la teneur initiale : $.45 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$ qui varie peu pendant l'épisode (Tab. II).

RESULTATS ET DISCUSSIONS

Les résultats de la simulation sont présentés sur les figures 13 à 19. Ils concernent la situation du monolithe en fin de journée du 2ème au 5ème jour et le 8ème jour de l'épisode.

On notera que le profil hydrique simulé du 21/2 (fin de l'apport d'eau) présente un excédent par rapport à la mesure. Par la suite, les profils simulés deviennent très proches des profils mesurés. En particulier, le "ventre" médian est correctement rendu.

En ce qui concerne le comportement hydrodynamique du monolithe, la hauteur d'eau apportée et le stock initial étant identiques dans l'expérimentation et la simulation, la comparaison des stocks et du drainage permet d'apprécier la fidélité de la simulation.

On notera que le drainage mesuré n'est pas en accord avec la variation des stocks mesurés. (Ce point sera abordé plus loin); en conséquence c'est à un drainage effectif, déduit des stocks mesurés, que l'on compare le drainage simulé (Tableau III).

On constate sur la Fig. 13 que, dès la fin du 2ème jour, la hauteur d'eau de drainage simulé est légèrement moins élevée que le drainage calculé à partir des stocks mesurés (2.35% du stock mesuré au 20/2). Les comportements sont cependant très semblables et on note la fin du ressuyage du monolithe à la fin du 3ème jour (21/2) alors que cet état n'est obtenu par la simulation que 24 heures plus tard. La hauteur d'eau de drainage simulée est alors légèrement excédentaire (0.75% du stock mesuré au 22/2). Durant toute la période écoulée, l'intensité du drainage est constante et égale à la valeur maximum, voisine de 4 cm/j. (3.93 cm/j dans la simulation). Par la suite, le comportement simulé converge avec les observations; la différence relative sur le stock d'eau devient inférieure à 1%, l'intensité du drainage devient très faible (0.3 cm/j) et décroît progressivement.

L'état de dessèchement du monolithe en début d'expérimentation rend possible l'existence de fentes de retrait. Dans ces conditions les premiers cm. d'eau d'apport ont pu rejoindre très rapidement la base

TABLEAU III - MONOLITHE. ELEMENTS DU BILAN HYDRIQUE

(cm d'eau, cumulés depuis le début de l'épisode)

	Initial	19/2	20/2	21/2	22/2	23/2	24/2	25/2	26/2
Infiltration		7.18	9.68	13.41	13.41	13.41	13.41	13.41	13.41
Stock mesuré	59.13		63.510	63.585	63.135	63.745			62.010
Variation stock			+4.380	+4.455	+4.705	+3.915			
Drainage mesuré			2.595	6.535	7.095	7.180			7.335
Drainage calculé			5.300	8.955	9.405	9.495			10.530
Drainage simulé			3.861	7.492	9.927	10.377	10.675	10.872	11.021
Stock simulé	59.18		64.999	65.98	62.660	62.213	61.915	61.718	61.569
Stock sim.-Stock mes. Stock mes.			2.35%	2.38%	0.75%	1.32%			0.71%

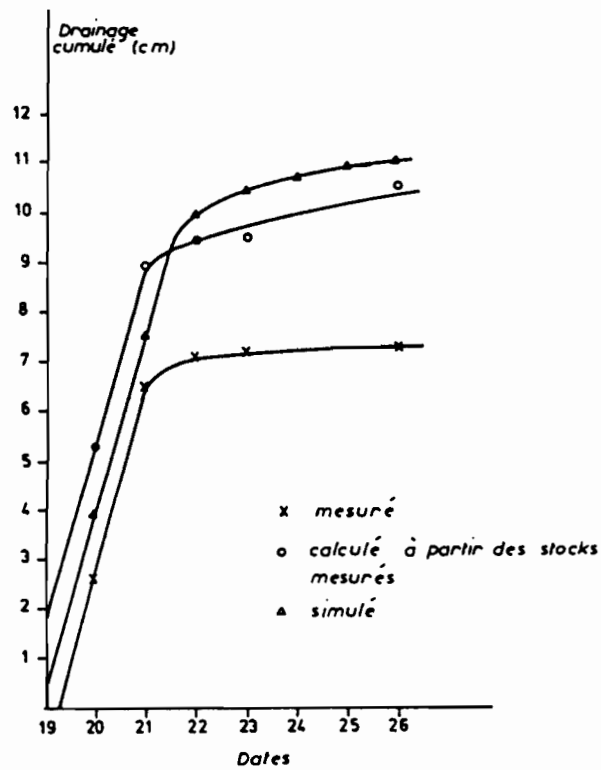


Fig. 13-Monolithe. Evolution du drainage pendant l'infiltration et la redistribution consécutive.

du monolithe sans en modifier notablement le stock d'eau.

Ce fait semble confirmé par les mesures effectuées le 20/2 : étant donné la hauteur d'eau apportée et la variation du stock, le drainage mesuré montre un déficit de près de 2.5 cm et cet écart par défaut se maintient les jours suivants. Il est probable que les premiers 2.5 cm d'eau d'apport ont rapidement traversé le monolithe et réhumecté le lit de graviers disposé à sa base, échappant ainsi à la mesure. La simulation prenant en compte l'intégralité de l'eau d'apport calcule un stock excédentaire qui n'est résorbé que lorsque le drainage du monolithe est complet. Cet état est atteint lorsque les 2.5 cm en excédent ont flué à la base du monolithe avec une intensité de flux de 4 cm/j, soit une quinzaine d'heures plus tard que dans la réalité.

La simulation du comportement hydrodynamique d'un sol à profil complexe paraît donc satisfaisante :

- . les calculs sont conservatifs pour la masse d'eau (bilan gains/pertes = 2.389 cm et variation stock = 2.390 cm au bout de 8 jours).

- . l'écart relatif entre l'eau stockée dans le profil réel et le profil simulé ne dépasse pas 2.5 % et est inférieur à 1% au bout de 8 jours.

- . l'allure des profils hydriques est correctement simulée.

- Toutefois, du fait même de la schématisation que suppose le modèle, il n'est pas possible de simuler correctement un accident tel qu'un ruissellement intensif le long de fentes de retrait. Il en résulte une erreur dans les premiers moments de l'infiltration.

```

*****
EVOLUTION DE LA SALINITE
*
* DU SOL
* (PROGRAMME SIMUL)
*
*****

ANNEE SIMULEE      1981      *
PREMIER JOUR       50        *
DERNIER JOUR       57        *
INTERVALLE MAXI   0.110JR   *

PROFONDEUR DU SOL INITIAL      150CM.
DISTANCE ENTRE DEUX SURFACES   5CM.
EPAISSEUR DES SEGMENTS DE SOL  15CM.
NOMBRE DE ZONES HYDRAULIQUES   3

ZONE 1
PROFONDEUR      D = 40CM
TENEUR EN EAU MAXI  0.44CM3/CM3
COEFF. CONDUCTIVITE  A = 0.23785E 31      B = 0.82537E 02

ZONE 2
PROFONDEUR      D = 120CM
TENEUR EN EAU MAXI  0.41CM3/CM3
COEFF. CONDUCTIVITE  A = 0.87554E 24      B = 0.59143E 02

ZONE 3
PROFONDEUR      D = 150CM
TENEUR EN EAU MAXI  0.47CM3/CM3
COEFF. CONDUCTIVITE  A = 0.11150E 34      B = 0.93971E 02

COEFF. MPSI      C1 = 0.25973E 03      P1 = 0.14347E 02
                  C2 = 0.25973E 03      P2 = 0.14347E 02
TENEUR EN EAU CHANGEMENT COEFF.  0.44CM3/CM3

APPORTS D EAU.

NUMERO DU JOUR      1      DATE  19. 2      QUANTITE D EAU  7.18CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR      2      DATE  20. 2      QUANTITE D EAU  2.50CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR      3      DATE  21. 2      QUANTITE D EAU  3.73CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR      9      DATE  27. 2      QUANTITE D EAU  0.74CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR     10      DATE  28. 2      QUANTITE D EAU  0.17CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR     11      DATE   1. 3      QUANTITE D EAU  0.50CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR     12      DATE   2. 3      QUANTITE D EAU  1.38CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR     15      DATE   5. 3      QUANTITE D EAU  0.48CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR     17      DATE   7. 3      QUANTITE D EAU  0.26CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR     19      DATE   9. 3      QUANTITE D EAU  0.46CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR     21      DATE  11. 3      QUANTITE D EAU  0.30CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR     23      DATE  13. 3      QUANTITE D EAU  0.69CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR     25      DATE  16. 3      QUANTITE D EAU  0.48CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR     29      DATE  19. 3      QUANTITE D EAU  0.62CM.      SOURCE  1
NUMERO DU JOUR     37      DATE  27. 3      QUANTITE D EAU  0.51CM.      SOURCE  1

```

Fig. 14 - Simulation Monolithe. Extrait de l'impression en clair des données initiales.

JOUR SIMULE NUMERO 2
 EAU INFILTRE 2.44CM
 PROFONDEUR DU SOL 150CM (31SURFACES, 11SEGMENTS)

SIMULATION DU 20 2 (JOUR SIMULE NUMERO 2)

DUREE SIMULEE 1.000 JOUR
 NOMBRE ITERATIONSEFFECTUEES 42

EAU INFILTREE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	9.693CM
EAU DRAINEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	3.851CM
EAU REMONTEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. CM
EAU CONSOMMEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. CM
DEFICIT HYDRIQUE CUMULE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. CM
BILAN GAINS/PERTES DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	5.842CM
VARIATION DE STOCK DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	5.823CM

PROFIL HYDRIQUE

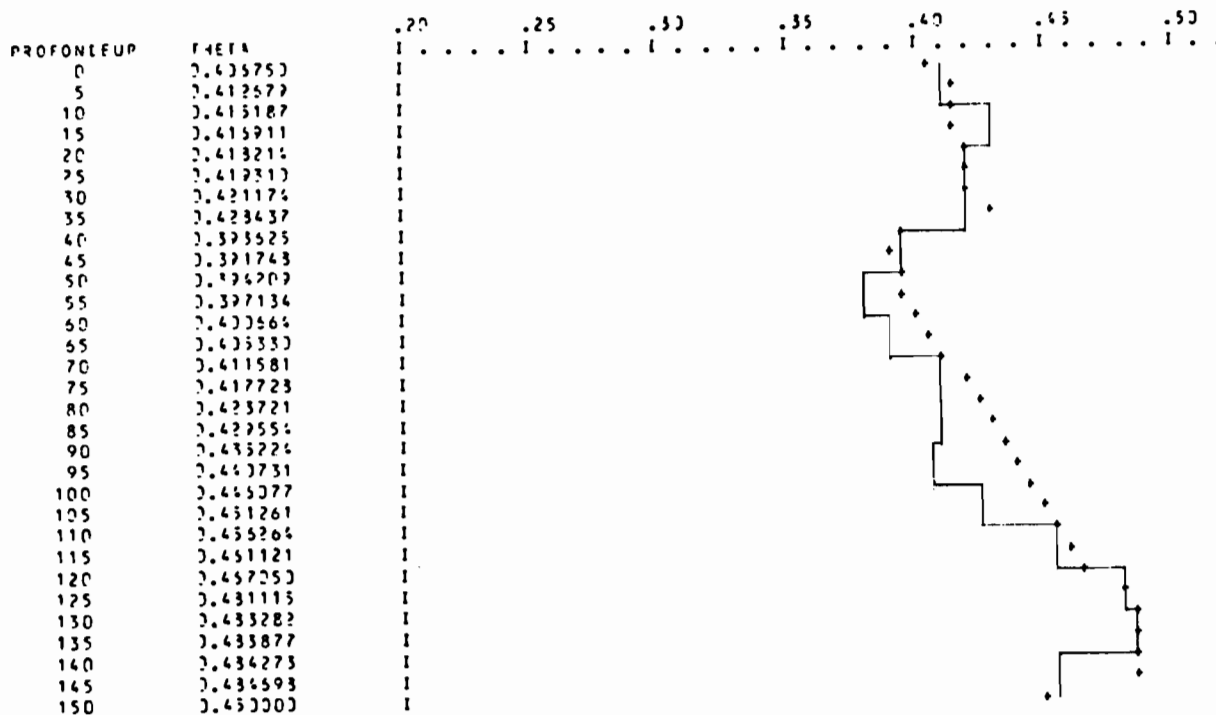


Fig. 15 - Simulation Monolithe. Etat hydrique au 20/02.
 (— : mesuré; +++ : simulé)

JOUR SIMULE NUMERO 3
 EAU A INFILTRER 3.65CM
 PROFONDEUR DU SOL 150CM (31SURFACES, 11SEGMENTS)

.....
 SIMULATION DU 21 ? (JOUR SIMULE NUMERO) 3)

DUREE SIMULEE 1.000 JOUR
 NOMBRE ITERATIONSEFFECTUEES 47

EAU INFILTREE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	13.410CM
EAU DRAINEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	7.492CM
EAU REMONTEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. C4
EAU CONSOMMEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. C4
DEFICIT HYDRIQUE CUMULE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. C4
BILAN GAINS/PERTES DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	5.915CM
VARIATION DE STOCK DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	5.912CM

PROFIL HYDRIQUE

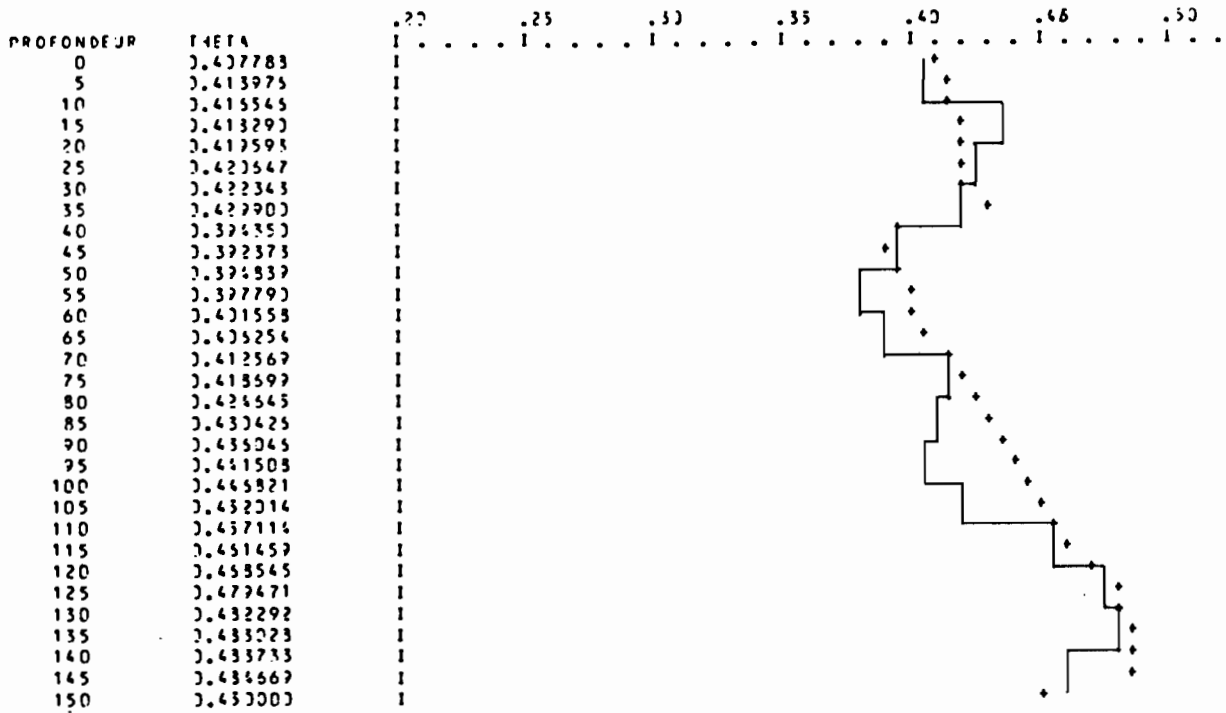


Fig. 16 - Simulation Monolithe. Etat hydrique au 21/02.

JOUR SIMULE NUMERO 4
 EAU A INFILTRER 0. CM
 PROFONDEUR DU SOL 150CM (315URFACES, 11SEGMENTS)

SIMULATION DU 22 2 (JOUR SIMULE NUMERO 6)

DUREE SIMULEE 1.000 JOUR
 NOMBRE ITERATIONSEFFECTUEES 30

EAU INFILTREE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 13.410CM
 EAU DRAINEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 9.927CM
 EAU REMONTEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 0. CM
 EAU CONSOMMEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 0. CM
 DEFICIT HYDRIQUE CUMULE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 0. CM

BILAN GAINS/PERTES DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 3.483CM
 VARIATION DE STOCK DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 3.483CM

PROFIL HYDRIQUE

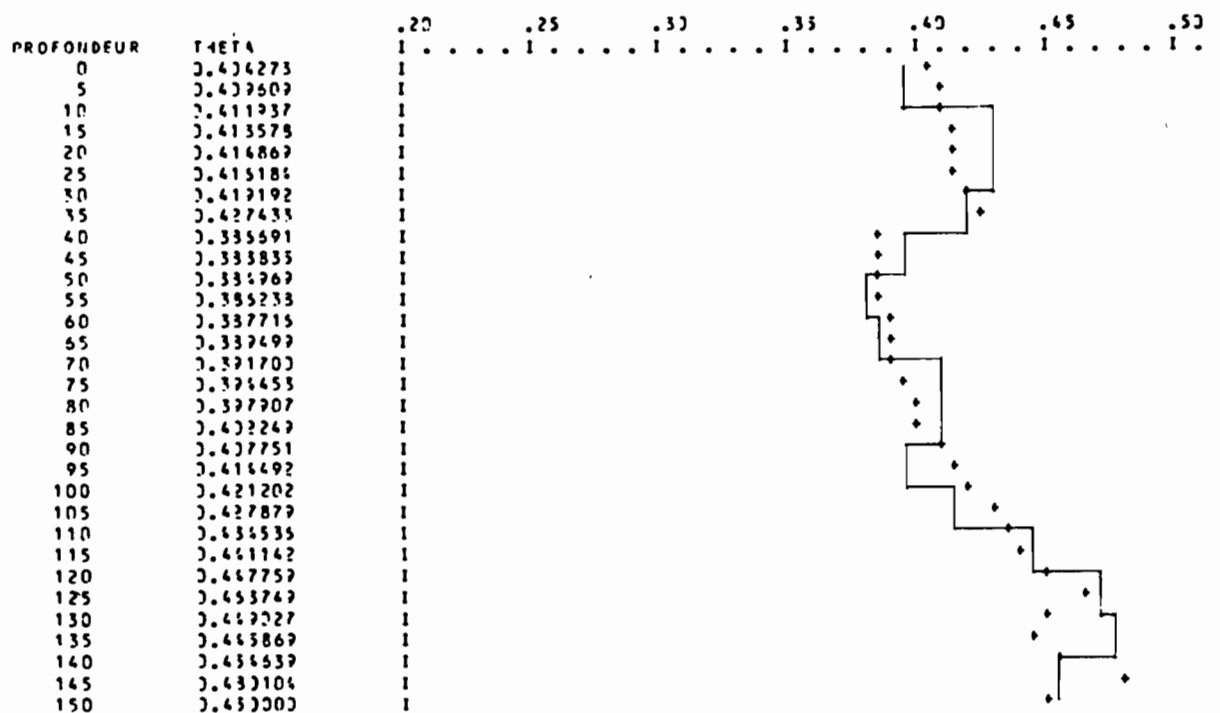


Fig. 17 - Simulation Monolithe. Etat hydrique au 22/02.

JOUR SIMULE NUMERO 5
 EAU A INFILTRER D. CM
 PROFONDEUR DJ SOL 150CM (31SURFACES, 11SEGMENTS)

.....

SIMULATION DJ 23 2 (JOUR SIMULE NUMERO 5)

DUREE SIMULEE 1.000 JOUR
 NOMBRE ITERATIONSEFFECTUEES 30

EAU INFILTREE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	13.410CM
EAU DRAINEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	10.377CM
EAU REMONTEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. CM
EAU CONSOMMEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. CM
DEFICIT HYDRIQUE CUMULE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. CM
BILAN GAINS/PERTES DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	3.033CM
VARIATION DE STOCK DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	3.033CM

PROFIL HYDRIQUE

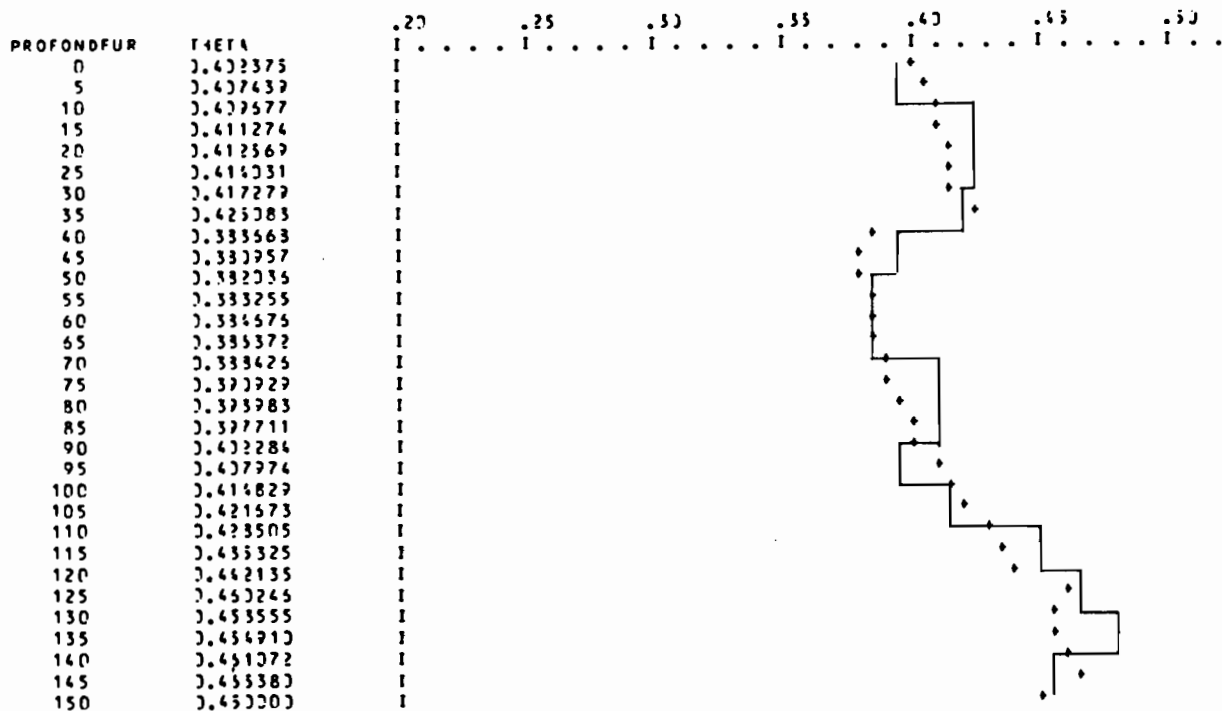


Fig. 18 - Simulation Monolithe. Etat hydrique au 23/02.

JOUR SIMULE NUMERO 8
 EAU A INFILTRER 0. CM
 PROFONDEUR DU SOL 150CM (315SURFACES, 115E54ENTS)

SIMULATION DU 25 2 (JOUR SIMULE NUMERO 3)

DUREE SIMULEE 1.000 JOUR
 NOMBRE ITERATIONSEFFECTUEES 30

EAU INFILTREE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 13.41304
 EAU DRAINEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 11.02104
 EAU RENDEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 0. CM
 EAU CONSOMMEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 0. CM
 DEFICIT HYDRIQUE CUMULE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 0. CM
 BILAN GAINS/PERTES DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 2.39204
 VARIATION DE STOCK DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION 2.39204

PROFIL HYDRIQUE

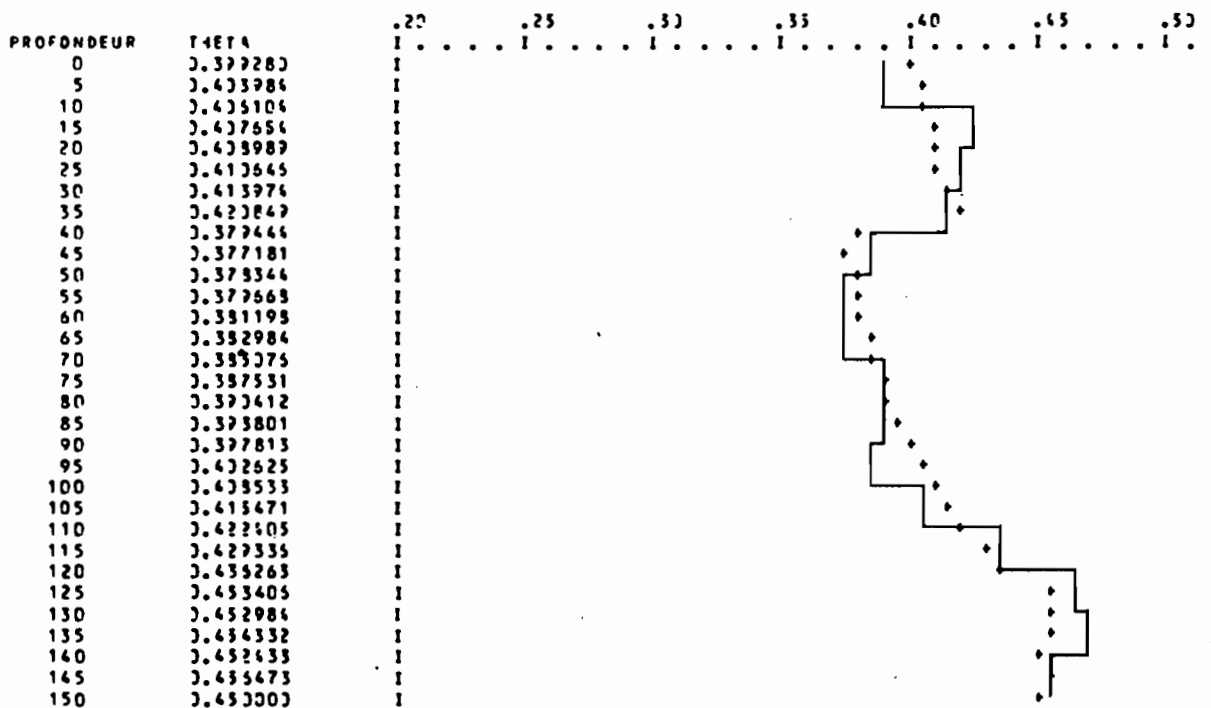


Fig. 19 - Simulation Monolithe. Etat hydrique au 26/02.

SIMULATION STANDARD

Le modèle de simulation a été utilisé pour étudier l'effet d'eaux d'irrigation de qualités différentes sur le sol d'une parcelle irriguée à ARANI (Bolivie). Il s'agit d'un sol peu évolué, hydromorphe et faiblement carbonaté (Aquic Ustifluent), développé dans les alluvions de la bordure est de la plaine de PINATA, à 2800 m d'altitude. De texture limoneuse (L = 45%, S = 30%, AR = 25%), ce sol est peu structuré et peu perméable sauf dans l'horizon Ap. Il est utilisé pour la production de maïs et de pommes de terre.

On présente ici la simulation d'une irrigation de 30 mm, mesurée sur le terrain du 1/10 au 4/10 1981 alors que le sol était cultivé en pommes de terre. Cette opération a été effectuée afin de caler le modèle préalablement à une simulation de longue durée.

DONNEES EXPERIMENTALES

Le prélèvement d'échantillons en vue de la détermination de la teneur en eau (mesure pondérale), de la densité apparente ou de la composition chimique de la solution du sol (extraits 1/5) a été réalisé avec une tarière.

On a établi les profils hydriques avant l'irrigation et 24, 48 et 72 heures après (Tableau IV).

La conductivité hydraulique et la relation $h - \theta$ ont été mesurées sur de petits monolithes non remaniés selon la méthode exposée antérieurement. Au vu des résultats expérimentaux et compte tenu des caractéristiques physiques du profil (texture, structure, densité apparente), le profil a été décomposé en trois zones hydrodynamiques (Tableau V).

Les concentrations totales dans la solution du sol, les bases échangeables et la calcaire total ont été déterminés sur les prélèvements initial et de 72 h. après l'apport d'eau. L'eau d'irrigation provenant d'un puits proche a été analysée (Tableau VI).

TABLEAU IV - ARANI. PROFILS HYDRIQUES EXPERIMENTAUX
(cm^3/cm^3)

Prof. (cm)	1/10 initial	2/10	3/10	4/10	d^A (g/cm^3)
5	.161	.328	.304	.288	1.460
15	.192	.287	.320	.235	1.506
25	.239	.214	.214	.191	1.552
35	.239	.225	.233	.209	1.536
45	.260	.247	.255	.247	1.541
55	.286	.281	.257	.278	1.547
65	.288	.299	.286	.282	1.533
75	.278	.275	.279	.275	1.637
85	.292	.276	.280	.291	1.641
95	.333	.332	.328	.332	1.728
105	.333	.328	.332	.333	1.728

TABLEAU V - ARANI. CARACTERISTIQUES HYDRODYNAMIQUES
(θ : cm^3/cm^3 ; K: cm/j ; h: cm)

Zone	0 - 10	10 - 65	65 - 105
θ_{max}	.40	.42	.41
K_{sat}	12.13	4.20	1.62
$K(\theta)$	$5.615 \cdot 10^7 \theta^{16.75}$	$8.523 \cdot 10^8 \theta^{22.05}$	$5.40 \cdot 10^{12} \theta^{32.34}$
$h(\theta)$	$-1.0592 \cdot (\theta/.42)^{-15.854}$		
$dh/d\theta$	$39.3810 \cdot (\theta/.42)^{-16.854}$		

TABLEAU VI - ARANI. COMPOSITIONS CHIMIQUES, CATIONS ECHANGEABLES
ET CALCAIRE TOTAL
(moles/litre de solution du sol et mē/100g)

Strate(cm)	0 - 15	15 - 30	30 - 45	45 - 60
Solubles 01/10/81				
Na ⁺	1.2048 10 ⁻²	1.7556 10 ⁻²	1.6738 10 ⁻²	1.0442 10 ⁻²
Ca ⁺⁺	2.1515 10 ⁻²	1.7212 10 ⁻²	1.0144 10 ⁻²	6.9310 10 ⁻³
Mg ⁺⁺	1.4343 10 ⁻²	3.6061 10 ⁻³	7.6084 10 ⁻³	4.6207 10 ⁻³
Cl ⁻	2.3380 10 ⁻²	8.3756 10 ⁻³	1.1159 10 ⁻²	7.9476 10 ⁻³
SO ₄ ⁼	1.0757 10 ⁻³	5.1637 10 ⁻⁴	3.5506 10 ⁻⁴	4.2048 10 ⁻³
Echangeables 01/10/81				
Na ⁺	.31	.46	.48	.50
Ca ⁺⁺	4.40	4.00	6.30	4.725
Mg ⁺⁺	2.02	2.95	11.04	9.37
Calcaire total (moles/litre) 01/10/81	9.3923 10 ⁻¹	1.0111	2.2951	1.5677
Eau d'irrigation (pH = 6.79; EC = .451 mmhos/cm)				
Na ⁺	1.8 10 ⁻³			
Ca ⁺⁺	8.0 10 ⁻⁴			
Mg ⁺⁺	5.8 10 ⁻⁴			
Cl ⁻	7.5 10 ⁻⁴			
SO ₄ ⁼	2.0 10 ⁻⁴			
Solubles 04/10/81				
Na ⁺	6.3307 10 ⁻³	1.8991 10 ⁻²	2.6461 10 ⁻²	2.8616 10 ⁻²
Ca ⁺⁺	1.3000 10 ⁻²	1.6292 10 ⁻²	1.5993 10 ⁻²	1.0821 10 ⁻²
Mg ⁺⁺	9.6091 10 ⁻³	1.1637 10 ⁻²	8.7234 10 ⁻³	7.2141 10 ⁻³
Cl ⁻	5.8785 10 ⁻³	8.0684 10 ⁻³	1.0002 10 ⁻²	1.8275 10 ⁻²
SO ₄ ⁼	8.1395 10 ⁻⁴	1.4274 10 ⁻³	2.5879 10 ⁻³	2.7173 10 ⁻³
Echangeables 04/10/81				
Na ⁺	.34	.36	.28	.45
Ca ⁺⁺	4.30	3.963	4.963	6.00
Mg ⁺⁺	2.22	1.88	6.28	7.88
Calcaire total 04/10/81	6.6111 10 ⁻¹	1.4967	4.2279	1.7027

RESULTATS ET DISCUSSIONS

Les résultats de la simulation sont présentés sur le tableau VII et les figures 20 à 28.

Les profils hydriques simulés sont voisins des profils mesurés (Fig.24 à 26), bien que quelques écarts importants ($>0.01 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$) apparaissent. La simulation de l'évolution du stock d'eau reproduit assez bien l'évolution réelle (Fig.20), l'écart entre les valeurs simulées et mesurées restant inférieur à 2.8%. Le modèle est conservatif pour l'eau, aucun écart n'étant calculé entre la variation du stock et le bilan gains/pertes (Tableau VII).

Deux aspects de l'équilibre thermodynamique, la distribution des cations échangeables et le stock de calcite 72 h. après l'irrigation sont présentés sur les figures 21 et 22. Dans les deux cas, on note une correspondance approximative entre les valeurs simulées et les résultats expérimentaux, avec quelques écarts importants : jusqu'à 5 méq/100g de Mg^{++} échangeable (78% de la valeur mesurée) et 2 moles/l de CaCO_3 (45% de la valeur mesurée).

La simulation indique une substitution du Na^+ échangeable par Mg^{++} et Ca^{++} ainsi qu'une légère sursaturation par rapport à la calcite dont le stock augmente légèrement (Fig.27 et 28). Ces résultats indiquent que le sol est en cours d'enrichissement en calcaire.

L'électroneutralité est respectée par les calculs d'équilibration, la charge résiduelle restant au voisinage de 10^{-5} équivalent/litre.

Ainsi qu'on l'a signalé à propos de la validation du modèle, il est délicat d'interpréter les écarts entre les résultats de la simulation et les mesures expérimentales : les prélèvements d'échantillons à la tarière ne sont guère précis et leur caractère ponctuel est très marqué ; les analyses de laboratoire comportent leur propre marge d'erreur. Enfin lorsque l'on compare deux états, chacun faisant appel à un prélèvement et une analyse, le cumul des erreurs peut conduire à des écarts importants. Le modèle ayant été testé par ailleurs, les contrôles intrinsèques attestant de la bonne exécution des calculs, il est naturel de rechercher d'abord la source des écarts dans les procédures expérimentales et analytiques. Il reste que si les données

initiales comportaient quelque erreur, celle-ci a été reconduite par les calculs de simulation.

La simulation de l'épisode du 1/10 au 4/10 a demandé un temps de calcul de 16 secondes C.P.U. sur ordinateur DPS8 de CIT HONEYWELL-BULL.

TABLEAU VII - ARANI. EVOLUTION DU STOCK D'EAU
(cm d'eau, cumulés depuis le 1/10).

	1/10 initial	2/10	3/10	4/10
Stock mesuré	27.330	29.298	29.145	27.932
Stock simulé	27.330	29.743	29.156	28.570
$\frac{\text{Stock sim.} - \text{Stock mes.}}{\text{Stock mes.}}$	-	1.52%	0.03%	2.28%
Bilan gains pertes		+2.413	+1.827	+1.240
Variation stock		+2.413	+1.827	+1.240

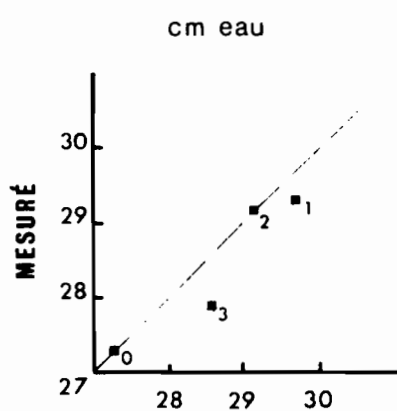


Fig. 20

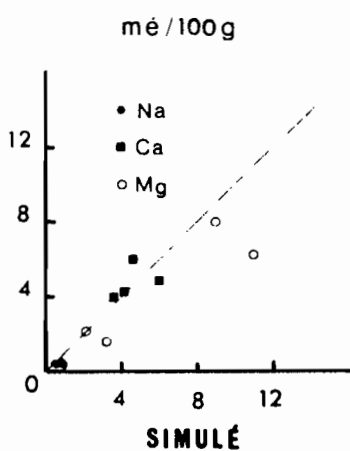


Fig. 21

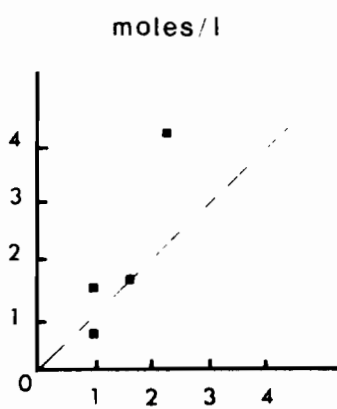


Fig. 22

Sol d'Arani. Irrigation de 30 mm. Comparaison entre les valeurs calculées et expérimentales du stock d'eau (Fig. 20), de la distribution des cations échangeables (Fig. 21) et du stock de calcite cristallisée (Fig. 22).

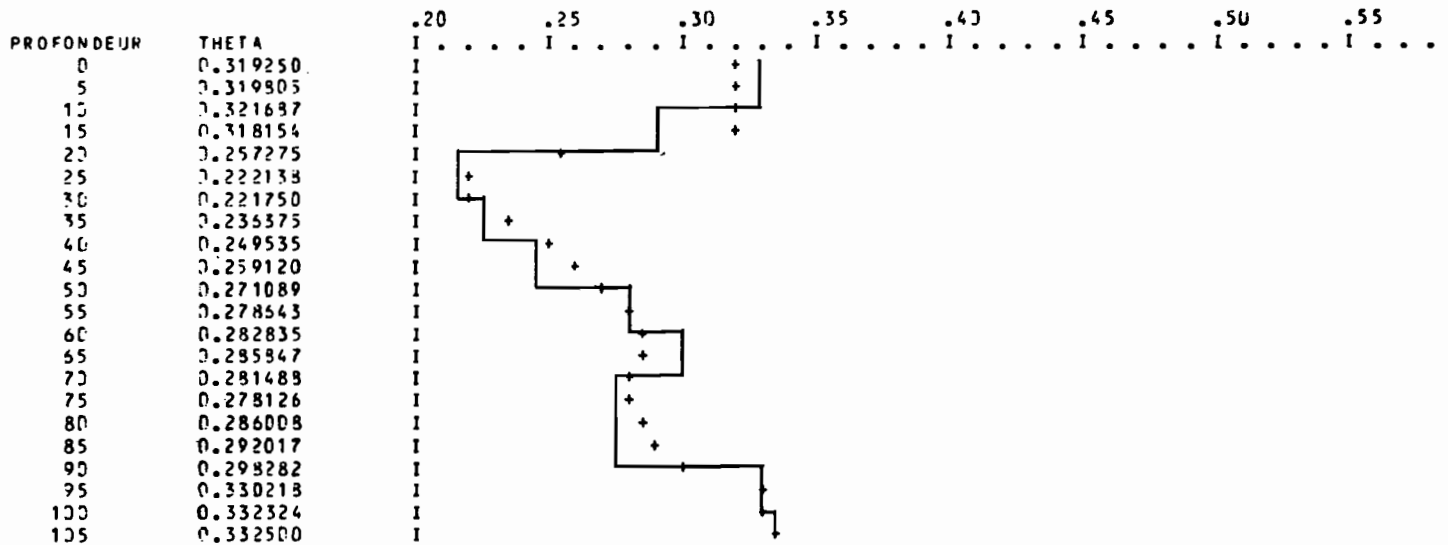
1	2	1	1	2	1981	275	277	10	59	1	105	5	22	1.	1.	.41	.40	.14	.05
	.42		.42																
1						01	01				.29								
1						02	01				.50								
1						03	01				.43								
1						04	01			1.43									
1						05	01				.45								
1						06	01				.43								
1						10	01				.50								
1						12	01				.25								
1						13	01				.52								
1						14	01				.59								
1						15	01				.34								
1						20	01				.23								
1						21	01				.61								
1						26	01			1.51									
1						28	01			1.67									
1						29	01				.73								
1						01	02				.51								
1						05	02				.32								
1						06	02				.49								
1						07	02				.22								
1						09	02				.85								
1						10	02				.51								
1						11	02				.15								
1						12	02			1.01									
1						16	02				.23								
1						18	02				.30								
1						20	02			1.20									
1						21	02				.75								
1						22	02				.74								
1						23	02				.17								
1						25	02				.50								
1						01	03			1.33									
1						05	03				.43								
1						07	03				.25								
1						09	03				.45								
1						11	03				.80								
1						13	03				.59								
1						16	03				.43								
1						19	03				.62								
1						27	03				.51								
2						16	09			10.00									
2						02	10			3.00									
2						14	10			10.00									
2						28	10			10.00									
2						11	11			10.00									
2						25	11			10.73									
1						02	12			.25									
1						06	12			.25									
2						09	12			10.53									
1						10	12			.55									
1						12	12			.23									
1						13	12			.34									
1						15	12			.94									
1						21	12			.43									
2						23	12			10.59									
1						24	12			.57									
1						25	12			.91									

Fig. 23 - Simulation ARANI. Données initiales.

1		28 12		.65									
1		31 12		.67									
		01 01		105									
+0.00000E+00	+0.18000E-02	+0.30000E-03	+0.53000E-03	+0.00000E+00									
+0.20000E-03	+0.75000E-03	+0.33775E-02	+0.15210E-06										
+0.00000E+00	+0.12048E-01	+0.21515E-01	+0.14343E-01	+0.00000E+00									
+0.10757E-02	+0.23380E-01	+0.27529E-01	+0.77620E-08										
+0.00000E+00	+0.17556E-01	+0.17212E-01	+0.35051E-02	+0.00000E+00									
+0.51670E-03	+0.83766E-02	+0.23163E-01	+0.39310E-08										
+0.00000E+00	+0.16733E-01	+0.10144E-01	+0.75034E-02	+0.00000E+00									
+0.35506E-03	+0.11159E-01	+0.20674E-01	+0.31620E-03										
+0.00000E+00	+0.10442E-01	+0.69510E-02	+0.45207E-02	+0.00000E+00									
+0.42048E-02	+0.79476E-02	+0.33394E-02	+0.33110E-08										
+0.00000E+00	+0.11211E-01	+0.28028E-01	+0.11912E-01	+0.00000E+00									
+0.70071E-02	+0.84085E-02	+0.22746E-01	+0.35430E-08										
+0.00000E+00	+0.11211E-01	+0.28028E-01	+0.11912E-01	+0.00000E+00									
+0.70071E-02	+0.84085E-02	+0.22746E-01	+0.35430E-08										
+0.00000E+00	+0.11211E-01	+0.28028E-01	+0.11912E-01	+0.00000E+00									
+0.70071E-02	+0.84085E-02	+0.22746E-01	+0.35430E-08										
+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00
+0.147E+01	+0.110E-01	+0.310E+00	+0.440E+01	+0.202E+01	+0.939E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00
+0.154E+01	+0.537E-02	+0.460E+00	+0.400E+01	+0.295E+01	+0.101E+01	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00
+0.154E+01	+0.343E-02	+0.480E+00	+0.630E+01	+0.110E+02	+0.230E+01	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00
+0.155E+01	+0.148E-02	+0.600E+00	+0.473E+01	+0.937E+01	+0.157E+01	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00
+0.163E+01	+0.414E-02	+0.370E+00	+0.425E+01	+0.375E+01	+0.722E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00
+0.165E+01	+0.414E-02	+0.380E+00	+0.335E+01	+0.327E+01	+0.686E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00
+0.172E+01	+0.414E-02	+0.300E+00	+0.435E+01	+0.347E+01	+0.550E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00	+0.000E+00
					.1614								
					.1614								
					.1736								
					.1917								
					.2131								
					.2337								
					.2300								
					.2302								
					.2502								
					.2603								
					.2777								
					.2800								
					.2800								
					.2800								
					.2800								
					.2700								
					.2600								
					.2900								
					.2900								
					.3305								
					.3305								
					.3305								
1	.66	1.30	1.13	.60		50	51	312	43				
				213									
.230	.500	.170	.100	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
.800	.200	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000	.000
.337	.311	.331	.286	.297	.319	.342	.341	.297	.271	.255	.259	.259	.259
.295	.319	.357	.373	.381	.327	.450	.455	.449	.453	.395	.361	.361	.361
+0.56150E+08	+0.85230E+09	+0.54000E+13	+0.15750E+02	+0.22050E+02	+0.32340E+02								
+0.39981E+02	+0.39981E+02	-0.16354E+02	-0.15854E+02			3	14						
+0.47000E+00	+0.30093E+01	-0.42550E+00											

Fig. 23 - (suite)

PROFIL HYDRIQUE



CONTENUS EN EAU ET CONCENTRATIONS TOTALES (MOLES/LITRE)

PROF.	EAU	←	NA+	CA++	MG++	H4SI04	S04--	CL-	ALC	H+
0- 15 CM.	4.8010 CM3 O.		0.76507E-02	0.12592E-01	0.84148E-02	0.	0.70043E-03	0.13630E-01	0.17155E-01	0.77620E-08
15- 30 CM.	3.7468 CM3 O.		0.17170E-01	0.17777E-01	0.92831E-02	0.	0.59093E-03	0.10047E-01	0.28432E-01	0.39810E-08
30- 45 CM.	3.6317 CM3 O.		0.17291E-01	0.10485E-01	0.78590E-02	0.	0.40070E-03	0.11536E-01	0.21319E-01	0.31620E-08
45- 60 CM.	4.1035 CM3 O.		0.10610E-01	0.70939E-02	0.47123E-02	0.	0.42785E-02	0.80749E-02	0.85079E-02	0.33110E-08
60- 75 CM.	4.2391 CM3 O.		0.11237E-01	0.28092E-01	0.11939E-01	0.	0.70232E-02	0.34278E-02	0.22798E-01	0.35480E-08
75- 90 CM.	4.3311 CM3 O.		0.11211E-01	0.28028E-01	0.11912E-01	0.	0.70071E-02	0.84085E-02	0.22746E-01	0.35480E-08
90-105 CM.	4.8897 CM3 O.		0.11211E-01	0.28028E-01	0.11912E-01	0.	0.70071E-02	0.84085E-02	0.22746E-01	0.35480E-08
105-120 CM.	4.9875 CM3 O.		0.11211E-01	0.28028E-01	0.11912E-01	0.	0.70071E-02	0.84085E-02	0.22746E-01	0.35480E-08

JOUR SIMULE NUMERO 2
EAU A INFILTRER 0. CM
PROFONDEUR DU SOL 105CM (22SURFACES, 9SEGMENTS)

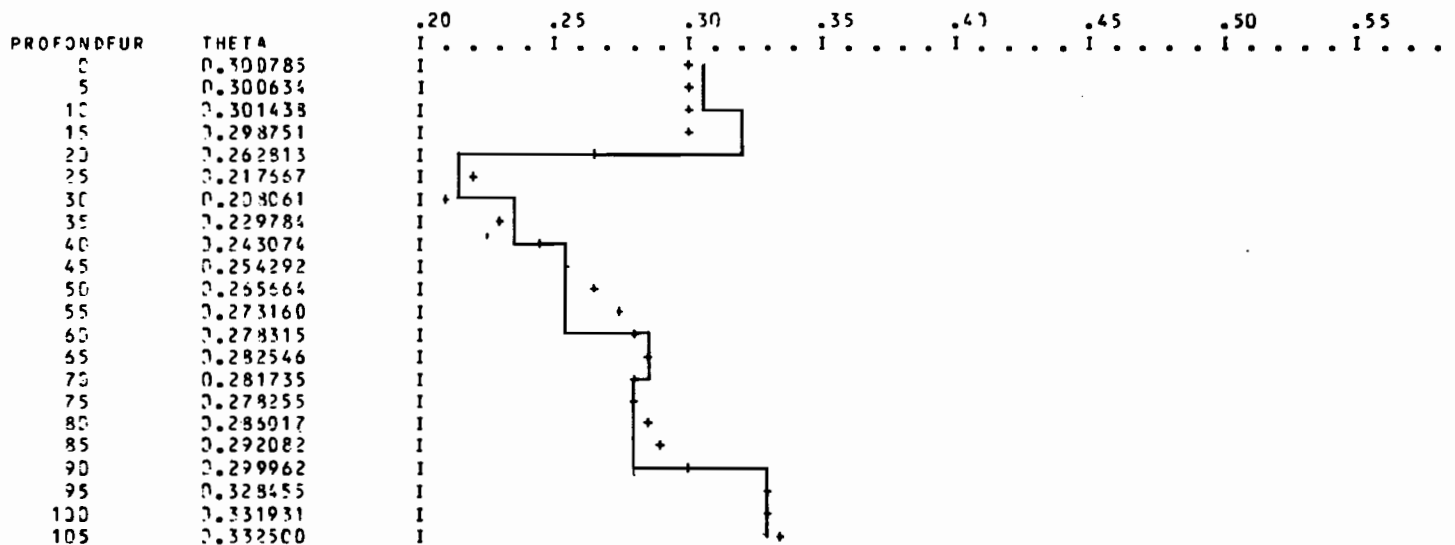
SIMULATION DU 3 10 (JOUR SIMULE NUMERO 2)

DUREE SIMULEE 1.000 JOUR
NOMBRE ITERATIONS EFFECTUEES 20

EAU INFILTREE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	3.000CM
EAU DRAINEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0.003CM
EAU REMONTEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. CM
EAU CONSOMMEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	1.170CM
DEFICIT HYDRIQUE CUMULE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. CM
BILAN GAINS/PERTES DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	1.827CM
VARIATION DE STOCK DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	1.827CM

Fig. 25 - Simulation ARANI. Etat hydrique au 3/10

PROFIL HYDRIQUE



CONTENUS EN EAU ET CONCENTRATIONS TOTALES (MOLES/LITRE)

PROF.	EAU	Ca ⁺⁺	NA ⁺	CA ⁺⁺	MG ⁺⁺	H4SI04	SO4 ⁻	CL ⁻	ALC	H ⁺
0-15 CM.	4.5092 CM3 O.	0.83412E-02	0.34561E-02	0.18597E-02	0.	0.71456E-03	0.13905E-01	0.36390E-02	0.58291E-07	
15-30 CM.	3.6694 CM3 O.	0.10758E-01	0.16033E-02	0.12577E-02	0.	0.63902E-03	0.10961E-01	0.42509E-02	0.27340E-07	
30-45 CM.	3.5202 CM3 O.	0.66856E-02	0.16955E-02	0.29312E-02	0.	0.44812E-03	0.11939E-01	0.31066E-02	0.22121E-07	
45-60 CM.	4.0256 CM3 O.	0.79107E-02	0.19535E-02	0.36238E-02	0.	0.43591E-03	0.32069E-02	0.21405E-02	0.14508E-07	
60-75 CM.	4.2128 CM3 O.	0.95208E-02	0.39563E-02	0.33257E-02	0.	0.70396E-03	0.34473E-02	0.25584E-02	0.32749E-07	
75-90 CM.	4.3360 CM3 O.	0.10256E-01	0.37884E-02	0.35922E-02	0.	0.70071E-03	0.34085E-02	0.26047E-02	0.31974E-07	
90-105 CM.	4.8331 CM3 O.	0.86832E-02	0.42582E-02	0.33204E-02	0.	0.70071E-03	0.34085E-02	0.24378E-02	0.34356E-07	
105-120 CM.	4.9375 CM3 O.	0.86932E-02	0.42682E-02	0.33204E-02	0.	0.70071E-03	0.34085E-02	0.24378E-02	0.34356E-07	

Fig. 25 - (suite)

JOUR SIMULE NUMERO 3

EAU A INFILTRER 0. CM
PROFONDEUR DU SOL 105CM (22SURFACES, 8SEGMENTS)

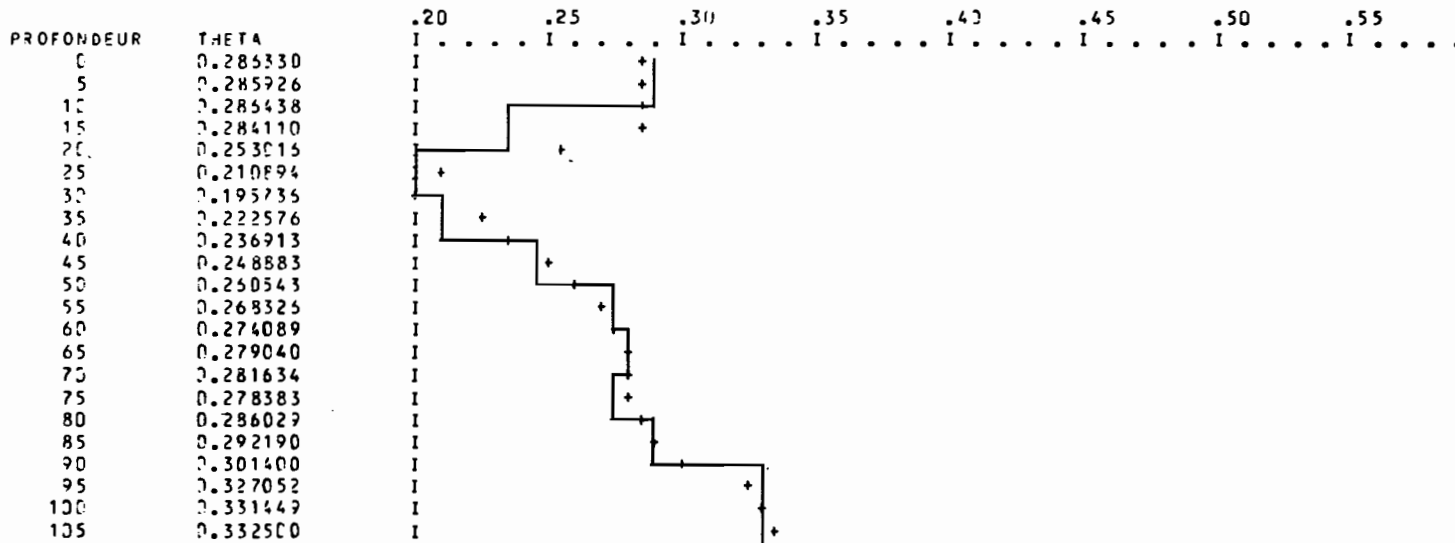
.....
SIMULATION DU 4 10 (JOUR SIMULE NUMERO 3)

DUREE SIMULEE 1.000 JOUR
NOMBRE ITERATIONS EFFECTUEES 20

EAU INFILTREE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	3.000CM
EAU DRAINEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	7.005CM
EAU REMONTEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. CM
EAU CONSOMMEE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	1.755CM
DEFICIT HYDRIQUE CUMULE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	0. CM
BILAN GAINS/PERTES DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	1.240CM
VARIATION DE STOCK DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION	1.240CM

Fig. 26 - Simulation ARANI. Etat hydrique au 4/10

PROFIL HYDRIQUE



CONTENUS EN FAU ET CONCENTRATIONS TOTALES (MOLES/LITRE)

PROF.	EAU	Ca++	NA+	CA++	MG++	H4SI04	SO4--	CL-	ALC	H+
0-15 CM.	4.2879 CM3 D.	0.84526E-02	0.35533E-02	0.19101E-02	0.	0.72987E-03	0.14203E-01	0.37170E-02	0.57332E-07	
15-30 CM.	3.5192 CM3 D.	0.11305E-01	0.17041E-02	0.13633E-02	0.	0.68958E-03	0.11888E-01	0.41729E-02	0.28158E-07	
30-45 CM.	3.4090 CM3 D.	0.67135E-02	0.17649E-02	0.30653E-02	0.	0.49683E-03	0.12370E-01	0.30101E-02	0.22909E-07	
45-60 CM.	3.9519 CM3 D.	0.79528E-02	0.20074E-02	0.37153E-02	0.	0.44435E-02	0.83433E-02	0.21779E-02	0.14348E-07	
60-75 CM.	4.1846 CM3 D.	0.95429E-02	0.39689E-02	0.38312E-02	0.	0.70559E-02	0.84069E-02	0.25646E-02	0.32699E-07	
75-90 CM.	4.3406 CM3 D.	0.10265E-01	0.37923E-02	0.35391E-02	0.	0.70070E-02	0.84085E-02	0.26049E-02	0.31974E-07	
90-105 CM.	4.8773 CM3 D.	0.86832E-02	0.42710E-02	0.33178E-02	0.	0.70070E-02	0.84085E-02	0.24381E-02	0.34356E-07	
105-120 CM.	4.9375 CM3 D.	0.86832E-02	0.42710E-02	0.33178E-02	0.	0.70070E-02	0.84085E-02	0.24381E-02	0.34356E-07	

Fig. 26 - (suite)

STRATE 0- 15CM

PC02 FIXEE A 0.110E-01 ATM

		MEQ/100G	MOLE/L
SOLUBLES	CA	0.138E-00	0.355E-02
	MG	0.743E-01	0.191E-02
	NA	0.154E-00	0.845E-02
	CL	0.275E-00	0.142E-01
	SO4	0.284E-01	0.730E-03
PRECIPITES	CALCITE	0.371E-02	0.955E-00
	GYPSE	0.	0.
ECHANGEABLES	CA	0.412E-01	
	MG	0.231E-01	
	NA	0.300E-00	

RAPPORT SOL/SOLUTION 5142.35 G/L
COEFF.PEG.POLYN. KC SUR Y 0.500E-01
0.400E-01 Y
0. Y**2
0. Y**3

KCAMG 1.000

KSP.CALCITE 0.400E-08
KSP.GYPSE 0.200E-04

ESPECE	MOLARITE	ACTIVITE	ESPECE	MOLARITE	ACTIVITE
CO3	0.393E-05	0.217E-05	MG	0.182E-02	0.109E-02
HCO3	0.322E-02	0.278E-02	MSO40	0.564E-04	
H2CO3	0.372E-03		MSO30	0.591E-05	
H	0.678E-07	0.598E-07	CA	0.326E-02	0.196E-02
OH	0.195E-06	0.147E-06	CASO4	0.116E-03	
NA	0.338E-02	0.723E-02	CACO3	0.123E-03	
CL	0.142E-01	0.121E-01	GYPSE	0.	
SO4	0.558E-03	0.305E-03	CALCITE	0.955E-00	

ECHANGEABLES(MEQ/100G) CA 0.412E-01
MG 0.230E-01
NA 0.301E-00
NA/T 0.4475E-01

EXCHANGEABLE FRACTION RATIO 0.4580E-01

PC02 0.110E-01 PH 7.223 FORCE IONIQUE 0.242E-01
ELECTRONEUTRALITE -0.235E-05 EQUIV/LITRE SAR 0.421E-01
KS(CACO3) 0.400E-08 KS(CASO4) 0.568E-05

IT1 1 IT3 1 ITCA 1 ITMG 1 ITCO3 15
ITSOPR 1 ITPPR 2

STRATE 15- 30CM

PC02 FIXEE A 0.587E-02 ATM

		MEQ/100G	MOLE/L
SOLUBLES	CA	0.519E-01	0.170E-02
	MG	0.415E-01	0.136E-02
	NA	0.172E-00	0.113E-01
	CL	0.181E-00	0.119E-01
	SO4	0.213E-01	0.690E-03
PRECIPITES	CALCITE	0.315E-02	0.104E-01
	GYPSE	0.	0.
ECHANGEABLES	CA	0.352E-01	
	MG	0.321E-01	
	NA	0.577E-00	

RAPPORT SOL/SOLUTION 6554.05 G/L
COEFF.PEG.POLYN. KC SUR Y 0.500E-01
0.400E-01 Y
0. Y**2
0. Y**3

KCAMG 1.000

KSP.CALCITE 0.400E-08
KSP.GYPSE 0.200E-04

ESPECE	MOLARITE	ACTIVITE	ESPECE	MOLARITE	ACTIVITE
CO3	0.851E-05	0.493E-05	MG	0.130E-02	0.805E-03
HCO3	0.350E-02	0.306E-02	MSO40	0.459E-04	
H2CO3	0.198E-03		MSO30	0.922E-05	
H	0.326E-07	0.290E-07	CA	0.146E-02	0.865E-03
OH	0.397E-06	0.345E-06	CASO4	0.592E-04	
NA	0.111E-01	0.965E-02	CACO3	0.130E-03	
CL	0.119E-01	0.103E-01	GYPSE	0.	
SO4	0.585E-03	0.335E-03	CALCITE	0.104E-01	

ECHANGEABLES(MEQ/100G) CA 0.361E-01
MG 0.321E-01
NA 0.580E-00
NA/T 0.783E-01

EXCHANGEABLE FRACTION RATIO 0.8154E-01

PC02 0.587E-02 PH 7.538 FORCE IONIQUE 0.199E-01
ELECTRONEUTRALITE -0.402E-05 EQUIV/LITRE SAR 0.746E-01
KS(CACO3) 0.427E-08 KS(CASO4) 0.290E-04

IT1 1 IT3 1 ITCA 1 ITMG 1 ITCO3 13
ITSOPR 1 ITPPR 2

Fig. 27 - Simulation ARANI. Situation du 4/10 : Equilibre thermodynamique dans les strates 0-15 et 15-30 cm.

STRATE 30- 45CM

PCO2 FIXEE A 0.343E-02 ATM

		MEQ/100G	MOLE/L
SOLUBLES	CA	0.521E-01	0.175E-02
	MG	0.225E-01	0.307E-02
	NA	0.291E-01	0.571E-02
	CL	0.183E 00	0.124E-01
	SO4	0.147E-01	0.497E-03
PRECIPITES	CALCITE	0.585E 02	0.232E 01
	GYPSE	0.	0.
ECHANGEABLES	CA	0.597E 01	
	MG	0.112E 02	
	NA	0.554E 00	

RAPPORT SOL/SOLUTION 6775.19 G/L

COEFF.REG.POLYN. KC SUR Y 0.500E 01
0.400E 01 Y
0. Y**2
0. Y**3

KCAMG 1.000

KSP.CALCITE 0.400E-08

KSP.GYPSE 0.200E-04

ESPECE	MOLARITE	ACTIVITE	ESPECE	MOLARITE	ACTIVITE
CO3	0.756E-05	0.440E-05	MG	0.297E-02	0.182E-02
HCO3	0.254E-02	0.221E-02	MGSO4	0.581E-04	
H2CO3	0.116E-03		MGC03	0.200E-04	
H	0.264E-07	0.235E-07	CA	0.159E-02	0.937E-03
OH	0.492E-06	0.426E-06	CASO4	0.420E-04	
NA	0.659E-02	0.574E-02	CAC03	0.125E-03	
CL	0.124E-01	0.107E-01	GYPSE	0.	
SO4	0.387E-03	0.220E-03	CALCITE	0.232E 01	

ECHANGEABLES (MEQ/100G) CA 0.5955E 01
MG 0.1115E 02
NA 0.6550E 00
NA/T 0.3690E-01

EXCHANGEABLE FRACTION RATIO 0.3750E-01

PCO2 0.343E-02 PH 7.630 FORCE IONIQUE 0.206E-01
ELECTRONEUTRALITE 0.138E-05 EQJIV/LITRE SAR 0.345E 01
KS(CAC03) 0.412E-08 KS(CASO4) 0.206E-05

IT1 1 IT3 1 ITCA 1 ITMG 1 ITC03 14

ITSOPR 1 ITERPR 2

STRATE 45- 60CM

PCO2 FIXEE A 0.148E-02 ATM

		MEQ/100G	MOLE/L
SOLUBLES	CA	0.592E-01	0.201E-02
	MG	0.126E 00	0.372E-02
	NA	0.135E 00	0.796E-02
	CL	0.142E 00	0.534E-02
	SO4	0.151E 00	0.444E-02
PRECIPITES	CALCITE	0.536E 02	0.158E 01
	GYPSE	0.	0.
ECHANGEABLES	CA	0.454E 01	
	MG	0.241E 01	
	NA	0.551E 00	

RAPPORT SOL/SOLUTION 5983.43 G/L

COEFF.REG.POLYN. KC SUR Y 0.500E 01
0.400E 01 Y
0. Y**2
0. Y**3

KCAMG 1.000

KSP.CALCITE 0.400E-08

KSP.GYPSE 0.200E-04

ESPECE	MOLARITE	ACTIVITE	ESPECE	MOLARITE	ACTIVITE
CO3	0.959E-05	0.470E-05	MG	0.310E-02	0.184E-02
HCO3	0.174E-02	0.150E-02	MSSO4	0.593E-03	
H2CO3	0.500E-04		MGC03	0.216E-04	
H	0.169E-07	0.149E-07	CA	0.153E-02	0.864E-03
OH	0.785E-06	0.671E-06	CASO4	0.335E-03	
NA	0.738E-02	0.677E-02	CAC03	0.123E-03	
CL	0.934E-02	0.710E-02	GYPSE	0.	
SO4	0.352E-02	0.190E-02	CALCITE	0.158E 01	

ECHANGEABLES (MEQ/100G) CA 0.4638E 01
MG 0.9409E 01
NA 0.6529E 00
NA/T 0.4442E-01

EXCHANGEABLE FRACTION RATIO 0.4544E-01

PCO2 0.148E-02 PH 7.825 FORCE IONIQUE 0.253E-01
ELECTRONEUTRALITE -0.117E-05 EQJIV/LITRE SAR 0.412E 01
KS(CAC03) 0.406E-08 KS(CASO4) 0.154E-05

IT1 1 IT3 1 ITCA 1 ITMG 1 ITC03 14

ITSOPR 1 ITERPR 2

Fig. 28 - Simulation ARANI. Situation du 4/10 : Equilibre thermodynamique dans les strates 30-45 et 45-60 cm.

CONCLUSION

La segmentation du profil et la discrétisation de l'équation de continuité permettent de modéliser les transferts d'eau et de soluté à travers le sol. Dans le modèle présenté dans ce travail, ces opérations comportent quelques options et approximations particulières :

- Le profil est décomposé en strates de 5 cm d'épaisseur où la teneur en eau est considérée uniforme.
- Les flux sont calculés entre les plans médians de 2 strates adjacentes.
- Le pas de temps est modulable en fonction de l'intensité des flux.
- A chaque intervalle de temps, la conductivité hydraulique et la diffusivité sont calculées pour la valeur moyenne au début de l'intervalle de temps, des teneurs en eau de 2 strates adjacentes.
- La teneur en eau est supposée invariable à la base du sol.
- A la limite supérieure du sol, l'intégralité de l'eau d'apport est infiltrée, aucun flux d'évaporation n'est calculé, l'appauvrissement en eau par évaporation/consommation étant simulé par une fonction puits.

L'application des lois générales de la thermodynamique permet de calculer l'équilibre au sein de strates de 15 cm d'épaisseur. Cet équilibre est réactualisé toutes les 24 heures simulées.

La mise en oeuvre du modèle de calcul demande quelques précautions : il est très sensible à la valeur de la conductivité hydraulique qui est le pivot, pour ainsi dire, de tous les calculs. La détermination de cette caractéristique doit être très précise, ce qui n'est pas toujours aisé avec les méthodes actuelles de mesure. La méthode de laboratoire proposée dans ce travail n'échappe pas à cet écueil, bien que sa facilité d'emploi permette de réaliser rapidement de nombreuses répétitions. La décomposition du profil en zones hydrodynamiques approximativement homogènes repose sur une appréciation subjective de la morphologie de ce dernier : Une certaine expérience pédologique est nécessaire.

Dans la mesure où les calculs de mise à l'équilibre sont exécutés à $p\text{CO}_2$ constante, cette donnée doit être mesurée. Il en va de même pour les coefficients de sélectivité des échanges cationiques.

Il reste que le modèle "SIMUL" permet des simulations dont la précision est en rapport avec la qualité des données expérimentales couramment disponibles. Le calage, par simulation d'un événement particulier mesuré par ailleurs, ayant été réalisé, il est possible d'envisager la prévision :

- Comportement du sol vis à vis de l'eau et évolution des réserves utilisables, si l'on se limite au seul modèle hydrodynamique ;
- Devenir salin d'un sol irrigué, évolution d'une croûte calcaire ou gypseuse etc...si l'on utilise les modèles hydrodynamique et thermodynamique couplés.

D'autres aspects de l'évolution des sols peuvent être simulés en utilisant la structure de base actuelle sur laquelle peuvent être greffées d'autres sous-routines : équilibre avec d'autres évaporites telles que le trona ou la thénardite, état d'oxydo-réduction du sol et solubilisation du fer.

BIBLIOGRAPHIE

- AHUJA L.R., GREEN R.E., CHONG S.-K. et NIELSEN D.R. (1980) - A simplified functions approach for determining soil hydraulic conductivities and water characteristic in situ. *Water Resou. Res.*, 16, 5, p.947-953.
- BLACK T.A., GARDNER W.R. et THURTELL G.W. (1969) - The prediction of evaporation, drainage and soil water storage for a bare soil. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 33, p.655-660.
- BRESLER E., RUSSO D. et MILLER R.D. (1978) - Rapid estimate of unsaturated hydraulic conductivity function. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 42, p. 170-172.
- BROOKS R.H. et COREY A.T. (1964) - Hydraulic properties of porous media. Colorado State Univ. Fort Collins, *Hydrol. Pap.* 8, p. 1 - 15.
- CHEVERRY Cl. (1972) - Exemple d'application des travaux de l'"US. Salinity Laboratory" 1963-1968 sur l'alcalinisation des sols soumis à l'action d'eaux bicarbonatées. *Cah. ORSTOM, Sér. Pédol.*, X, p. 193-203.
- CHILDS E.C. and COLLIS-GEORGE N. (1950) - The permeability of porous materials. *London, Proc. Roy. Soc. A.*, 201, p. 392-405
- CRANK J. (1956) - Mathematics of diffusion. *Oxford University Press.* London.
- DAVIDSON J.M., STONE L.R., NIELSEN D.R. et LARUE M.E. (1969) - Field measurement and use of soil-water properties. *Water Resou. Res.*, 5, 6, p. 1312-1321.
- DROUBI A. , FRITZ B. et TARDY Y. (1976) - Equilibres entre minéraux et solutions. Programmes de calcul appliqués à la prédiction de la salure des sols et des doses optimales d'irrigation. *Cah. ORSTOM, sér. Pédol.*, XIV, p. 13-38
- DUFFEY 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, p. 53-62.

- DUTT G.R., SHAFFER M.J. and MOORE W.J. (1972) - Computer simulation model of dynamic bio-physicochemical processes in soils. University of Arizona, Tucson. *Tech. Bul.*, 196.
- FEODOROFF A. et GALULA E. (1973) - Conductivité hydraulique d'un sol non saturé. *Science du Sol*, 3, p. 163-175.
- GALLEZ A., STITOU M. et DUFEY J.E. (1981) - Dessalage et désodification d'un sol marocain irrigué. *Agronomie*, 1, 4, p. 265-272.
- GARDNER W.R. (1962) - Note on the separation and solution of diffusion type equations. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 26, p. 404.
- GAST R.G. (1972) - Alkali metal cation exchange on Chambers Montmorillonite. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 36, 1, p. 14-19.
- HANKS R.J. et BOWERS S.A. (1962) - Numerical solution of the moisture flow equation for infiltration into layered soils. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 26, p. 530-534.
- HAVERKAMP R., VAUCLIN M., TOUMA J., WIERENGA P.J. et VACHAUD G. (1977)- A comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 41, p.285-294.
- HAVERKAMP R. et VAUCLIN M. (1981) - A comparison study of three forms of the Richard equation used for predicting one dimensional infiltration in unsaturated soil. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 45, p. 13-20.
- HILLEL D. KRENTOS V.D. et STILIANOU Y. (1972) - Procédure and test of an internal drainage method for measuring soil hydraulic conductivity in situ. *Soil Sci.*, 114, p. 395-400.
- LAUDELOUT H. et THOMAS H.C. (1965) - The effect of water activity on ion exchange selectivity. *J. Phys. Chem.*, 69, p. 339-340
- LAUDELOUT H. (1970) - Cation exchange in soils. In "Sorption and Transport Processes in Soils.", *S.C.J. Monogr.*, 37, p.33-39.

- LAUDELOUT H., DUFFEY J.E. et SHETA T.H. (1979) - Ionic equilibria in semi-arid soils. *14th Coll. of the Int. Potash Inst. on Soils in mediterranean type climates and their yield potential*. Sevilla, Spain. Preprints p. 99-114.
- LIBARDI P.L., REICHARDT K., NIELSEN D.R. et BIGGAR J.W. (1980) - Simple-field methods for estimating soil hydraulic conductivity. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44, p. 3-7.
- OGATA and RICHARDS L.A. (1957) - Water content changes following irrigation of bare-field soil that is protected from irrigation. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 21, p. 355-356
- RICHTMYER R.D. (1957) - Difference methods for initial value problems. *New York, Inter-Science Publ.*
- RIEU M. et CHEVERRY Cl. (1976) - Mise au point bibliographique sur quelques recherches récentes en matière de sols salés. *Cah. ORSTOM, sér. Pédol.*, XIV, p. 39-61.
- RIEU M. (1978) - Eléments d'un modèle mathématique de prédiction de la salure dans les sols irrigués. Application aux polders du Tchad. *Thèse Doct. Spéc.*, Toulouse, 134 p.
- RIEU M., VALDES M. et RICO R. (1980) - Prevision de la salinizacion de los suelos de regadio. Univ. Mayor San Simon, Cochabamba Bolivia, Biling., Fr./Esp., Multigr., 207 p.
- ROYER J.M. et VACHAUD G. (1974) - Détermination directe de l'évaporation et de l'infiltration par mesure des teneurs en eau et des succions. *Hydrological Sci. Bul.*, 19, p. 319-336.
- SHAINBERG I. and CAISERMAN A. (1971) - Studies on Na/Ca montmorillonite systems. II . The hydraulic conductivity. *Soil Sci.*, 111, p. 273-281.
- VACHAUD G. and TONY J.L. (1971) - Hysteresis during infiltration and redistribution in a soil column at different initial waters contents. *Water Resou. Res.*, 7, p. 111-127.

- VACHAUD G., DANCETTE C., SONKO M. et THONY J.L. (1978) - Méthode de caractérisation hydrodynamique in-situ d'un sol non saturé. Application à deux types de sols du Sénégal en vue de la détermination des termes du bilan hydrique. *Ann. Agron.*, 29, p. 1-36.
- VACHAUD G., VAUCLIN M. et COLOMBANI J. (1981) - Bilan hydrique dans le Sud Tunisien. I : Caractérisation expérimentale des transferts dans la zone non saturée. *Jour. of Hydrol.*, 49, p.31-52.
- VACHAUD G. (1982) - Soil physics research and water management. In *Trans. of the 12th Int. Congr. of Soil Sci.*, New Delhi, India, 5, p. 32-58.
- VALLES V. et VALLES A.M. (1982) - Etude méthodologique des transferts d'eau et des sels dans un monolithe de sol argileux. II : Caractérisation hydrodynamique et modélisation des transferts d'eau. *Rapport D.R.E.S. - ORSTOM, ES 199*, Tunis, Multigr. 47 p.
- VAUCLIN M., HAVERKAMP R. et VACHAUD G. (1978) - Etude de la résolution numérique de l'équation de l'infiltration de l'eau en milieu non saturé. Univ. Sci. et Med. Grenoble, Inst. Mécan., *Rapport HL - 78 - 1*, Multigr., 159 p.
- VAUCLIN M., HAVERKAMP R. et VACHAUD G. (1979) - Résolution numérique d'une équation de diffusion non linéaire : application à l'infiltration de l'eau dans les sols non saturés. *Presses Univ. Grenoble*, Fr., 180 p.
- VAUCLIN M. et VACHAUD G. (1981) - Bilan hydrique dans le Sud Tunisie II : Modélisation numérique et prévision des transferts hydriques en sol stratifié. *Jour. of Hydrol.*, 49, p. 53-73.
- VIEILLEFON J. OLIVE P. et HUBERT P. (1982) - Etude méthodologique des transferts d'eau et de sels dans un monolithe de sol argileux. I : Essais préliminaires de caractérisation et traçage isotopique. *Rapport D.R.E.S. - ORSTOM, ES 198*, Tunis, Multigr., 36 p.

ANNEXE
TEXTE DU PROGRAMME "SIMUL"


```

1      C      *
2      C      * - SIMULATION *
3      C      *   DE L'EVOLUTION DE LA SALINITE *
4      C      *     DU SOL *
5      C      *   (PROGRAMME SIMJL) *
6      C      *   (MR DRSTON 14.02.33) *
7      C      *
8      DIMENSION A(3),ANT(60),ANT(50),B(3),C(2),CF(4),CONC(20,9)
9      DIMENSION CONSO(50),CONT(20),D(50),IES(20),MOIS(60),NIVO(365)
10     DIMENSION NPE(20),P(2),SF(60),TH(60),TN(50),TO(50),U(24)
11     DIMENSION DRMOIS(20),SEGVOL(20),ETR(365),ST(50),ZT(60),FNT(50)
12     DIMENSION THERM(13,7),EFR(50),LIGNE(50,30)
13     INTEGER AA,APPS,BASE,BB,CC,DATE(50),DAY,DD,DELX,DIA(20),EE
14     INTEGER FLJC,S,GENRE(50),HORIZO,PIED,PL,QQ,RETOUR,START,T(4,2)
15     INTEGER TAP,TME(50),YEAR,DEJ(4,2)
16     REAL IR,K(50),KP(2,12),KPF(12),KSAT0,KSAT01,LC,KSAT02
17     LEC=JS
18     IMP=J
19     READ(LEC,501)AA,BB,CC,DD,EE,YEAR,LL,11,1,APPS,FLJC,HORIZO,DELX,
20     133C,T3C,TS,T4,TD,SM
21     READ(LEC,502)TATA,TITI
22     READ(LEC,503)(GENRE(L),DATE(L),MOIS(L),ANT(L),L=1,APPS)
23     READ(LEC,504)(DIA(PL),IES(PL),NIVO(PL),PL=1,FLJC)
24     JKJ=1+(2-1)/3
25     READ(LEC,505)((CONC(I,J),J=1,9),I=1,JKJ)
26     READ(LEC,505)((THERM(I,J),J=1,7),I=1,JKJ)
27     READ(LEC,505)(TO(J),J=1,4)
28     C      *
29     * * * NUMEROTATION DES JOURS D APPORT D EAU
30     START=LL-1
31     DO 1 L=1,APPS
32     1 TME(L)=JOUR(DATE(L),START,MOIS(L))
33     DO 7 L=1,APPS
34     IF (L.NE.1) GO TO 25
35     25 MET = TME(L)
36     ME = L
37     GO TO 7
38     26 IF(TIE(L).GT.MET) GO TO 25
39     7 CONTINUE
40     L = LE + 1
41     C      *
42     * * * NUMEROTATION DES JOURS DE FLUCTUATION DE VAPPE
43     DO 2PL=1,FLJC
44     2 NPE(PL)=JOUR(DIA(PL),START,MES(PL))
45     DO 3PL=1,FLJC
46     IF(PL.NE.1) GOTO 5
47     3 IOTA=NPE(PL)
48     IOT=PL
49     GOTO 5
50     5 IF (IPE(PL).GT.IOTA) GOTO 3
51     5 CONTINUE
52     NIVO(LL)=NIVO(IOT)
53     HORIZO=NIVO(LL)
54     Q=(HORIZO/DELX)+1
55     PL = IOT + 1
56     QQ=(HORIZO/(3+DELX))+1
57     BASE=Q
58     PIED=QQ

```

```

57 C      *** INITIALISATIONS
58      MJ=0
59      X=.0000001
60      DO 13 J=1,60
61      EFR(J)=0.05
62      SF(J)=0.0
63      FVT(J)=0.0
64      ST(J)=0.0
65      13 ZT(J)=0.0
66      HED=0.0
67      LC=0.0
68      CHECK=0.0
69      ETS=0.0
70      ET=0.0
71      CI=0.0
72      DIF=0.0
73      DEF=0.0
74      CONST=0.0
75      CONSTI=0.0
76      KI=Q-1
77      IR=1000.
78      DELT=.035*DELX/IR
79      KSATD=0.
80      KSATD1=0.
81      KSATD2=0.
82      DSTOK=0.
83      DEBIL=0.
84 C      *** TEVEURS EN EAU AUX LIMITES
85      IF(BBC.EQ.1.)BBC=TO(Q)
86      IF(BBC.EQ.2.)BBC=TS
87      IF(TBC.EQ.1.)TBC=TM
88      IF(TBC.EQ.2.)TBC=TO(1)
89      IF(CC.EQ.1) GO TO 10
90      TO(1)=TBC
91      TO(Q) = BBC
92 C      *** INTERIEUR DU PROFIL TEVEUR EN EAU UNIFORME ET ARBITRAIRE
93      DOB J=2,KI
94      8 TO(J)=SM
95 C      *** INTERIEUR DU PROFIL TEVEUR EN EAU REELLE
96      10 DO 11 J=1,KI
97      11 ANT(J)=(TO(J)+TO(J+1))/2.
98      ANT(Q)=BBC
99      DO 12 J=1,Q
100     TH(J)=TO(J)
101     12 CONST=CONST+TO(J)
102     CONST=CONST*.5*(TO(1)+TO(Q))
103 C      *** BOUCLE JOURNALIERE
104     MM=MM*START
105     II=1
106     1000 CONTINUE
107     XT=.0000001
108     IT=0
109     NWAT=0
110     CALL THE(IDTE,II,MOI,START)
111 C      *** INITIALISATION DE HED ET HORIZO AU DEBUT DE CHAQUE JOUR
112     14 IF(II.NE.TME(L))GO TO 15

```

```

113     IF (HED .GT. 0.) HED=HED+AMT(L)
114     IF (HED .LE. 0.) HED=AMT(L) * ((TM-TO(1)) + DELX/2.)
115     CI=CI+((TM-TO(1)) * DELX/2.)
116     IL=L
117     L=L+1
118     15 IF (II .NE. NPE(PL)) GO TO 20
119     HORIZO=NIVO(PL)
120     P_=PL+1
121     Q=(HORIZO/DELX)+1
122     QQ=(HORIZO/(3*DELX))+1
123     C   * TENEUR EN EAU AU DEBUT DE CHAQUE JOJR
124     IF (II .EQ. 1) GO TO 17
125     DO 16 J=1, BASE
126     16 TO(J) = TN(J)
127     17 TO(Q)=B3C
128     IF (Q .EQ. BASE) GO TO 27
129     IF (Q .T. BASE) GO TO 27
130     DO 18 J=BASE, KI
131     18 TO(J)=B3C
132     GO TO 27
133     20 IF (II .EQ. 1) GO TO 27
134     DO 21 J=1, Q
135     21 TO(J)=TN(J)
136     27 CALL VEGT(CF, CONSO, DEB, DELX, ETR, IDEB, II, KP, KPF, NSEMI, 2, START, T, L)
137     GO TO 23
138     C   * BOJCLE INTERNE
139     10) DO 22 J=1, Q
140     22 TO(J)=TN(J)
141     23 IT=IT+1
142     CALL CODI(A, ANA, ANT, B, BNA, C, D, HFD, IT, K, KSATD, KSATD1, P, Q,
143     1KSATD2, TATA, TD, TITI, TM, TO, TS, TSS, II, EFR, JCHK1, JCHK2)
144     IF (II .EQ. 1 .AND. IT .EQ. 1) GO TO 175
145     24 IF (IT .NE. 1) GO TO 31
146     WRITE(IMP, 605) II, HED, HORIZO, Q, QQ
147     31 CALL SOLUTE(ANT, B3C, CONC, CONSO, CONT, CI, D, DELX, EE, ET, ETS, GENRE,
148     1HED, IT, II, IR, K, KSATD, KSATD1, IL, LC, M, PIED, 2, QQ, RETOUR, SM, KSATD2,
149     2TO, TM, TN, TO, TS, XT, ORMOIS, SEGVOL, NWAT, DELT, DD, FNT, ST, ZT, DEF, B3,
150     3JCHK1, JCHK2, LIGNE, DSTOK, DEBIL)
151     GO TO (95, 100), RETOUR
152     C   * BI-AN HYDRIQUE
153     95 CONST1=J.D
154     DO 217 J=1, 2
155     217 CONST1=CONST1+TN(J)
156     CONST1=CONST1*0.5*(TN(1)+TN(Q))
157     DIF=(CONST1-CONST)*DELX
158     CHECK=CI-ETS-ET-LC
159     C   * STOCKAGES
160     BASE=2
161     PIED=2Q
162     C   * IMPRESSION DES SORTIES JOURNALIERES
163     WRITE(IMP, 600)
164     WRITE(IMP, 601) IDTE, MOI, II
165     WRITE(IMP, 602) XT, IT, CI, LC, ETS, ET, DEF, CHECK, DIF
166     WRITE(IMP, 607)
167     WRITE(IMP, 619)
168     WRITE(IMP, 615)

```

```

169      DO 230 J=1,3
170      JPROF=5*(J-1)
171      230 WRITE(IMP,620) JPROF,TV(J),(LIGNE(J,KAK),KAK=1,80)
172      225 IF(DD.NE.1)GO TO 999
173      WRITE(IMP,604)
174      DO 225 I3=1,32
175      IM5=(I3-1)*15
176      IM6=I3-15
177      I4=I3+1
178      225 WRITE(IMP,605)IM5,IM6,CONT(I4),(CONC(I4,J),J=1,9)
179      CALL VENTIL(THERM,CONT,COVC,QR,EFR)
180      999 II=II+1
181      IF(II.LE.MM)GOTO 1000
182      STOP
183      C      IMPRESSION SUR OPTION AA=1 DES CONSTANTES,PARAMETRES ET
184      C      CONDITIONS INITIALES
185      175 IF(AA.NE.1)GO TO 24
186      MJ=MJ+MM+START
187      WRITE(IMP,500)
188      JZONE=3
189      IF(JC+K2.GE.9)JZONE=2
190      IF(JC+K1.GE.9)JZONE=1
191      WRITE(IMP,551)YEAR,HORIZO,LL,MU,JZONE
192      JZ01=5*(JCHK1-1)
193      JZ02=5*(JCH(2)-1)
194      WRITE(IMP,555)JZ01,TM,A(1),B(1)
195      IF(JZONE=2)182,180,181
196      180 WRITE(IMP,552)JZ01,JZ02,TITI,A(2),B(2)
197      GO TO 182
198      181 WRITE(IMP,552)JZ01,JZ02,TITI,A(2),B(2)
199      WRITE(IMP,553)JZ02,HORIZO,TS,A(3),B(3)
200      182 WRITE(IMP,550)C(1),P(1),C(2),P(2),TATA
201      WRITE(IMP,580)
202      WRITE(IMP,556)(TME(LW),DATE(LW),MOIS(LW),AMT(LW),GENRE(LW),LW=1,
203      1APPS)
204      WRITE(IMP,571)
205      WRITE(IMP,557)(NPE(IPL),DIA(IPL),MES(IPL),NIVO(IPL),IPL=1,FLUC)
206      WRITE(IMP,590)
207      WRITE(IMP,603)(TH(J),J=1,Q)
208      IDEB=IDEB+1
209      WRITE(IMP,558)NSEMI,IDEB
210      IDEB=IDEB-1
211      DO 175 IA=1,24
212      175 WRITE(IMP,559)IA,U(IA)
213      IF(NSEMI=2) 177,183,186
214      177 WRITE(IMP,576)
215      DO 178 IA=1,12
216      IMI=(IA-1)*15
217      IMA=IA-15
218      178 WRITE(IMP,572)IMI,IMA,((KP(I,J),I=1,NSEMI),J=IA,IA),KPF(IA)
219      WRITE(IMP,573)
220      DO 179 J=1,4
221      179 WRITE(IMP,574)J,(T(J,I),I=1,NSEMI),CF(J)
222      GO TO 188
223      183 WRITE(IMP,560)
224      DO 184 IA=1,12

```



```

225     IMI=(IA-1)*15
226     IMA=IA*15
227 184 WRITE(IMP,561)IMI,IMA,((KP(I,J),I=1,NSEMI),J=IA,IA),<PF(IA)
228     WRITE(IMP,562)
229     DO 185 J=1,4
230 185 WRITE(IMP,563)J,(T(J,I),I=1,NSEMI),CF(J)
231     GO TO 188
232 186 WRITE(IMP,569)
233     DO 187 IA=1,12
234     IMI=(IA-1)*15
235     IMA=IA*15
236 187 WRITE(IMP,567)IMI,IMA,((KP(I,J),I=1,NSEMI),J=IA,IA),<PF(IA)
237     WRITE(IMP,570)
238     DO 190 J=1,4
239 190 WRITE(IMP,563) J,(T(J,I),I=1,NSEMI),CF(J)
240 188 WRITE(IMP,564)
241     WRITE(IMP,565)(CONC(I,J),J=1,9)
242     DO 189 IA=1,20
243     IMI=(IA-1)*15
244     IMA=IA*15
245     IB=IA+1
246 189 WRITE(IMP,566)IMI,IMA,(CONC(IB,J),J=1,9)
247     GO TO 24
248 C     ***** FORMATS DE LECTURE
249 501 FORMAT(5I2,15,2I4,3I3,1X,3I3,2F4.1,4F5.2)
250 502 FORMAT(2F5.2)
251 503 FORMAT(2X,I1,17X,I2,1X,I2,F10.2)
252 504 FORMAT(20X,I2,1X,I2,7X,I3)
253 505 FORMAT(7E10.3)
254 506 FORMAT(53X,F5.4)
255 511 FORMAT(5E12.5/4E12.5)
256 C     ***** FORMATS D IMPRESSION
257 500 FORMAT(1H1,49X,26(' ')/50X,' EVOLUTION DE LA SALINITE'/'/50X,'
258     1     DU SOL'/'/50X,' (PROGRAMME SIMUL)'/'/50X,26('
259     2) //)
260 551 FORMAT(1H0/10X,' ANNEE SIMULEE'/' ,14,14X,' ' ,12X,' PROFONDEUR DJ'
261     1' SOL INITIAL'/' ,13,' CM'/'/10X,' PREMIER JOUR'/' ,14,14X,' ' ,
262     22X,' DISTANCE ENTRE DEJX SURFACES'/' 5CM'/'/10X,' DERNIER JOUR'
263     3' ,13,14X,' ' ,12X,' EPAISSEUR DES SEGMENTS DE SOL'/' 15CM'/'/10X,' INT
264     4,' ERVALLE MAXI 0,1JOUR' ,12X,' ' ,12X,' NOMBRE DE ZONES HYDRAULIQUES
265     5,' ' ,13)
266 C 554 FORMAT(1H0/10X,' PARAMETRES HYDRAULIQUES' /)
267 555 FORMAT(/10X,' ZONE 1'/'/12X,' PROFONDEUR'/' 0 - ' ,13,' CM'/'/12X,' TENEUR
268     1EN EAU MAXI'/' ,F5.2,' CM3/CM3'/'/12X,' COEF. CONDUCTIVITE'/' A =' ,E12.
269     2,'/10X,' B =' ,E12.5/)
270 552 FORMAT(/10X,' ZONE 2'/'/12X,' PROFONDEUR'/' ,13,' ' : ' ,13,' CM'/'/12X,' TEN
271     1UR EN EAU MAXI'/' ,F5.2,' CM3/CM3'/'/12X,' COEF. CONDUCTIVITE'/' A =' ,E
272     22.5,'/10X,' B =' ,E12.5/)
273 553 FORMAT(/10X,' ZONE 3'/'/12X,' PROFONDEUR'/' ,13,' ' ; ' ,13,' CM'/'/12X,' TEN
274     1UR EN EAU MAXI'/' ,F5.2,' CM3/CM3'/'/12X,' COEF. CONDUCTIVITE'/' A =' ,E
275     22.5,'/10X,' B =' ,E12.5/)
276 550 FORMAT(/10X,' COEF. DPSI'/' C1 =' ,E12.5,9X,' P1 =' ,E12.5/32
277     1,' C2 =' ,E12.5,9X,' P2 =' ,E12.5/12X,' TENEUR EN EAU CHANGEMENT COEF.
278     2' ,F5.2,' CM3/CM3' //)
279 580 FORMAT(1H0,9X,14HAPPORTS D EAU, //)
280 556 FORMAT(10X,' NUMERO DU JOUR'/' ,13,

```

```

281      1'      DATE      ',12,','',12,','          HAUTEUR D EAJ      ',F5.2,
282      2'CM.          SOURCE      ',I1/)
283      571 FORMAT(1HD,9X,334VARIATIONS DU NIVEAU DE LA NAPPE,/)
284      557 FORMAT(1DX,'NUMERO DU JOUR      ',I3,
285      1'      DATE      ',12,','',12,','          NIVEAU      '
286      2,I3,' CM.'/)
287      59) FORMAT(1HD/9X,82HTENEJRS EN EAU INITIALES A CHAQUE SURFACE DE TRA
288      1SIT UTILISEE SI L'OPTION CC = 1. //)
289      558 FORMAT(1HD//1DX,24HPARAMETRES AGRONOMIQUES,//1DX,'NOMBRE DE CULTU
290      1,'RES      ',I5//1DX,'NUMERO DU JOUR DU PREMIER SEMIS      ',I5/
291      2//1DX,'EVAPO-TRANSPIRATION POTENTIELLE      '/)
292      559 FORMAT(13X,9HQUINZAINES,I4,5H      ',F6.3,7H CM./J./)
293      55) FORMAT(1HD,1DX,'DISTRIBUTION DES RACINES      CULTURE1  CULTURE2 '
294      1' FRICHE'/)
295      551 FORMAT(13X,6HSTRATE,I4,1H',I3,4H CM.,4X,3F10.4/)
296      552 FORMAT(1HD/1DX,'STADES VEGETATIFS      CULTURE1  CULTURE2 '
297      1' CROP FACTOR'/)
298      553 FORMAT(30X,I1,3X,2(5X,I5),8X,F5.2)
299      554 FORMAT(1HD/1DX,'COMPOSITIONS CHIMIQUES (MOLES/LITRE)'//31X,'K+
300      1      VA+      CA++      MG++      H4SIO4      SO4--
301      2L:      A_C      H+')
302      555 FORMAT(4X,'EAU D IRRIGATION      ',9E12.5)
303      555 FORMAT(4X,'STRATE',I3,1H',I3,7H CM.,9E12.5)
304      557 FORMAT(13X,'STRATE',I4,','',I3,'CM.',4F10.4/)
305      558 FORMAT(30X,I1,3X,3(5X,I5),4X,F5.2)
306      559 FORMAT(1DX,'DISTRIBUTION DES RACINES      CULTURE1  CULTURE2  CUL
307      1URE3  FRICHE'/)
308      57) FORMAT(1HD/1DX,'STADES VEGETATIFS      CULTURE1  CULTURE2
309      1ULTURE3  CROP FACTOR'/)
310      572 FORMAT(13X,'STRATE',I4,','',I3,' CM.',4X,2F10.4)
311      573 FORMAT(1HD/1DX,'STADES VEGETATIFS      CULTURE1  CROP FAC',
312      1'TOR'/)
313      574 FORMAT(30X,I1,8X,I5,8X,F5.2)
314      575 FORMAT(30X,I1,3X,3(5X,I5),8X,F5.2)
315      575 FORMAT(1HD,1DX,'DISTRIBUTION DES RACINES      CULTURE1  FRICHE'/)
316      6) FORMAT(1HD,1DX,11D(''))
317      6) FORMAT(1HD/2DX,'SIMULATION DU',2I3,' (JOJR SIMULE NUMERO',I4,')'
318      6) FORMAT(1HD,19X,'DUREE SIMULEE',F3.3,' JOJR'/2DX,'NOMBRE ITERATION
319      1 EFFECTUEES',I5//2DX,'EAU INFILTREE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMU',
320      2' _ATION',14X,F10.3,'CM'/2DX,'EAU DRAINEE DEPUIS LE DEBUT DE LA',
321      3' SIMULATION',15X,F10.3,'CM'/2DX,'EAU REMONTEE DEPUIS LE DEBUT',
322      4' DE _A SIMULATION',15X,F10.3,'CM'/2DX,'EAU CONSOMMEE DEPUIS LE',
323      5' DEBUT DE LA SIMULATION',14X,F10.3,'CM'/2DX,'DEFICIT HYDRIQUE',
324      6' CUMULE DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION',4X,F10.3,'CM'//2DX,
325      7'BILAN GAINS/PERTES DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULATION',9X,F10.3,
326      8'CM',/2DX,'VARIATION DE STOCK DEPUIS LE DEBUT DE LA SIMULA',
327      9'TION',9X,F10.3,'CM')
328      6)3 FORMAT(1DX,1)F12.6/1DX,1)F12.6/1DX,1)F12.6/1DX,1)F12.6)
329      6)4 FORMAT(1HD/1DX,'CONTENUS EN EAU ET CONCENTRATIONS TOTALES (MOLES/L
330      1ITRE)'//3X,'PROF.      EAU      K+      NA+      CA
331      2+      MG++      H4SIO4      SO4--      CL-      ALC
332      3      H+')
333      6)5 FORMAT(1X,I3,1H',I3,4H CM.,F8.4,4H CM,9E12.5)
334      6)6 FORMAT(1HD,2DX,'JOUR SIMULE NUMERO',I4,//2DX,'EAU A INFILTRE'
335      1,F5.2,'CM'/2DX,'PROFONDEUR DU SOL',I5,'CM      ('I3,'SURFACES',I3,
336      2'SEGMENTS ')

```

```
337 607 FORMAT(1H1,9X,'PROFIL HYDRIQUE'//)
338 615 FORMAT(10X,'PROFONDEUR',4X,'THETA',11X,8('I . . . .'))
339 619 FORMAT(1HD/4)X, '.20',7X, '.25',7X, '.30',7X, '.35',7X, '.40',
340 17X, '.45',7X, '.50',7X, '.55')
341 620 FORMAT(13X,I3,4X,F12.6,8X,80A1)
342 . END
```

```

1      C
2      C
3      C
4      C
5      C
6      C
7      SUBROUTINE SOLUTE(ANT,BBC,CONC,CONSO,CONT,CI,D,DELX,EE,ET,ETS,
8      1GENRE,HED,IT,II,IR,K,KSATD,KSATD1,IL,LC,M,PIED,Q,QQ,RETOUR,SM,
9      2KSATD2,TD,TM,TN,TO,TS,X,XT,ORMOIS,SEGVOL,NWAT,DELT,DD,FNT,ST,
10     3ZT,DEF,BB,JCHK1,JCHK2,LIGNE,DSTOK,DEBIL)
11     DIMENSION ANT(50),CONC(20,9),CONSO(60),CONT(20),D(60),E(50)
12     DIMENSION F(50),FN(50),ORMOIS(20),S(50),SEGVOL(20),SF(60)
13     DIMENSION STCONC(1,9),TAN(60),TN(60),TO(60),Z(60),CONC1(20,9)
14     DIMENSION ST(50),FNT(50),ZT(60)
15     DIMENSION D1(9),D2(9),FL(9),LIGNE(60,80)
16     INTEGER DELX,EE,G,GENRE(50),PIED,Q,QQ,RETOUR,START,DD,BB
17     REAL IR,K(60),KSATD,KSATD1,LC,MOISIN(20),MOISOU(20),KSATD2
18     DATA IBLA,IBAR,IPLUS/1H,1HI,1H+/
19     LEC=08
20     IMP=6
21     C *** INITIALISATIONS
22     DELTO=DELT
23     DELT=) )
24     DELTM = 1./M
25     DELT = DELT+DELTM
26     G = DELX
27     AJ=0.)
28     BJ=0.)
29     CJ=0.)
30     W=0.)
31     STOK1=0.)
32     STOK2=0.)
33     FINF=) )
34     FATM=) )
35     DO 7 J=1,60
36     E(J)=) )
37     F(J)=) )
38     FN(J)=) )
39     SF(J)=) )
40     7 Z(J)=) )
41     DO 8 J=1,9
42     D1(J)=) )
43     D2(J)=) )
44     8 FL(J)=0.)
45     DO 9 J=1,9
46     DO 9 (AK=1,8)
47     9 LIGNE(J,KAK)=IBLA
48     C *** CALCUL DE L'INTERVALLE DE TEMPS
49     IF (X.GE.0.1) X=.0000001
50     DELT=AMIN1(DELX*0.035/IR,DELTM)
51     IF (HED.GT.0.) AND (KSATD*DELT.GT.HED) DELT=HED/KSATD
52     IF (X+DELT.LE.0.1) GO TO 25
53     DELT=.1*X+.0000002
54     25 IF (DELT.LT.0.000035*DELX) DELT=0.000035*DELX
55     IR=0.) ) ) ) ) )
56     Y=).7)*DELT/DELTO

```

```

57      C      *** CONDITIONS A LA SURFACE DU SOL
58      APT=4ED
59      IF(HEJ.GT.DJ) GO TO 24
60      E(1)=J.O
61      F(1)=T0(2)
62      GO TO 27
63      24 E(1)=J.O
64      F(1)=TM
65      T0(1)=TM
66      27 KI=Q-1
67      DO 33 J=2,KI
68      C      *** CALCUL DE LA FONCTION PUIITS
69      S(J)=CONSO(J)*(DELX/DELX)
70      C      *** CALCUL DES FONCTIONS INTERMEDIAIRES
71      AJ=(DELX*D(J))/(2.*DELX+2)
72      CJ=(DELX*D(J-1))/(2.*DELX+2)
73      BJ=1.+AU+CU
74      W=AU*T0(J+1)+(1.+AJ+CJ)*T0(J)+CU*T0(J-1)+(K(J-1)-K(J))*2.*G
75      DELX/(2.*DELX+2)
76      C      *** EXTRACTION DE LA FONCTION PUIITS ET DEFICIT HYDRIQUE Z
77      IF(T0(J)*S(J).GT.SM)GO TO 29
78      S(J)=T0(J)*SM
79      IF(S(J).LT.J.O) S(J)=J.O
80      W=W*S(J)
81      Z(J)=Z(J)+(CONSO(J)*DELX/S(J)*DELX)
82      DEF=DEF+Z(J)
83      ZT(J)=ZT(J)+Z(J)
84      GO TO 30
85      29 W=W*S(J)
86      30 ET=ET+S(J)*DELX
87      ST(J)=ST(J)+(S(J)*DELX)
88      FATM=FATM+(S(J)*DELX)
89      C      *** CALCUL DES FONCTIONS E ET F
90      E(J)=AU/(BU*CU*E(J-1))
91      F(J)=(W+CU*F(J-1))/(BJ*CU*E(J-1))
92      33 CONTINUE
93      C      *** CALCUL DE LA TENEUR EN EAU AU NIVEAU DE CHAQUE
94      C      SURFACE DE TRANSIT EN PARTANT DE LA BASE DU PROFIL
95      34 J=Q
96      TN(Q)=B3C
97      J=Q-1
98      35 TN(J)=E(J)*TN(J+1)+F(J)
99      IF(TN(J).LE.SM) TN(J)=SM
100     C      *** CALCUL DES FLUX CORRESPONDANTS
101     FN(J)=(K(J)*(D(J)*(TN(J+1)+T0(J+1)-TN(J)-T0(J))/(2.*DELX))*DEL
102     FVN=ABS(FN(J))
103     SENS=FN(J)/FVN
104     IF(J.GE.JCH?) GO TO 41
105     IF(J.GE.JCH1) GO TO 42
106     IF(J.GE.1) GO TO 43
107     41 IF(FVN.GE.KSATD2*DELX) FN(J)=SENS*KSATD2*DELX
108     GO TO 39
109     42 IF(FVN.GE.KSATD1*DELX) FN(J)=SENS*KSATD1*DELX
110     GO TO 39
111     43 IF(FVN.GE.KSATD*DELX) FN(J)=SENS*KSATD*DELX
112     C      *** CAS DE LA SURFACE DU SOL

```

```

113     IF(J.GT.1) GO TO 39
114     IF(HE.GT.0.1) GO TO 38
115     FN(1)=(K(1)-(D(1)*(TN(2)-TO(1))/(1.5*DELX)))*DELX
116     TN(1)=TO(1)-FN(1)/(0.5*DELX)
117     GO TO 39
118 38   TN(1)=TM
119     FN(1)=KSATD*DELX
120     FINF=FINF+FN(1)
121     CI=CI+FN(1)
122     HED=HED-FN(1)
123     IF(HE.LE.0.000001) HED=0.0
124 C   ; STOCKAGES
125 39   FR=FN(J)/DELX
126     FR=ABS(FR)
127     IR=AMAX1(IR,FR)
128     SF(J)=SF(J)+FN(J)
129     FNT(J)=FNT(J)+FN(J)
130     J=J-1
131     IF(J.GT.0) GO TO 35
132 C   ; TEVEJRS EV EAU CORRIGES D'APRES LES FLUX
133     DO 40 J=2,KI
134 40   TN(J)=TO(J)-S(J)+(FN(J-1)-FN(J))/DELX
135 C   ; STOCKAGES ET CALCUL DU BILAN
136     FN(Q)=FN(KI)
137     FNT(Q)=FNT(Q)+FN(KI)
138     IF(FN(KI).LE.0.0) GO TO 35
139     LC=LC+FN(KI)
140     GO TO 37
141 35   ETS=ETS+FN(KI)
142 C   ; ACTUALISATION DU BILAN HYDRIQUE ET DU STOCK
143 37   DO 45 J=1,Q
144     STOK1=STOK1+TO(J)
145 45   STOK2=STOK2+TN(J)
146     STOK1=STOK1-0.5*(TO(1)+TO(Q))
147     STOK2=STOK2-0.5*(TN(1)+TN(Q))
148     DSTOK=DSTOK+((STOK2-STOK1)*DELX)
149     DBIL=DBIL+FINF-FN(Q)-FATM
150 C   ; CONSTRUCTION DU PROFIL HYDRIQUE
151     KTK=8)
152     DO 51 J=1,Q
153     KTN=INT(TN(J)/400)
154     IF(KTN.GE.239) GO TO 59
155     IF(KTN.LE.KTK) GO TO 58
156     KCO=KTK+2)
157 52   IF(KTN.LE.KCO) GO TO 54
158     KCO=KCO+2)
159     GO TO 52
160 54   KCO=KCO-2)
161 55   IF(KTN.LE.(KCO+2)) GO TO 57
162     KCO=KCO+2)
163     GO TO 56
164 57   KTN=(KCO+2)/2
165     GO TO 6)
166 58   KTN=KTK/2
167     GO TO 6)
168 59   KTN=1)

```

```

169      5) KAK=INT(KTN*39)
170      LIGNE(J,KAK)=IBAR
171      51 LIGNE(J,KAK)=IPLUS
172      C      !!! CONTENU EN EAU ET FLUX PAR SEGMENTS DE SOL
173      7) JJ=1
174      SEGVOL(JJ)=HED
175      MOISIN(JJ)=0.0
176      KK=Q-3
177      DO 71 M=1, KK, 3
178      JJ=JJ+1
179      71 SEGVOL(JJ)=2.5*TN(M)+5.0*TN(M+1)+5.0*TN(M+2)+2.5*TN(M+3)
180      JJ=2
181      DO 72 M=4, KK, 3
182      JJ=JJ+1
183      72 MOISIN(JJ)=(SF(M)+SF(M-1))/2
184      MOISIN(2)=SF(1)
185      KKI=Q+1
186      MOISIN(KKI)=SF(Q-1)
187      DO 73 JJ=2, KKI
188      73 MOISOJ(JJ-1)=MOISIN(JJ)
189      C      !!! CONTENU EN EAU INITIAL ET CONCENTRATIONS INITIALES PAR SEGMENT
190      75 DO 76 J=1, 9
191      75 STCONC(1,J)=CONC(1,J)
192      JJ=1
193      IF(APRT.GT.0.0)GO TO 77
194      ORMOIS(JJ)=0.0
195      GO TO 82
196      77 ORMOIS(JJ)=HED+MOISIN(2)
197      IF(GENRE(IL).NE.1)GO TO 79
198      DO 78 J=1, 8
199      78 CONC(1,J)=0.0
200      CONC(1,9)=0.31253*10.0*(+5)
201      GO TO 81
202      79 DO 80 J=1, 9
203      80 CONC(1,J)=STCONC(1,J)
204      81 IF (DD.NE.1) GO TO 82
205      IF(NWAT.NE.0) GO TO 82
206      WRITE(IMP,607)(CONC(1,J),J=1,9)
207      NWAT=VWAT+1
208      82 CONTINUE
209      IF(IT.NE.1)GO TO 88
210      IF(II.EQ.1)GO TO 90
211      IF(QQ.EQ.PIED)GO TO 88
212      IF(QQ.GT.PIED)GO TO 85
213      C      !!! PREMIER IT D UN JOUR QUELCONQUE AVEC HAUSSE DE LA NAPPE
214      DO 83 JJ=2, QQ
215      83 ORMOIS(JJ)=CONT(JJ)
216      DO 84 J=1, 9
217      CONC(KKI,J)=CONC(PIED,J)
218      84 CONTINUE
219      GO TO 92
220      C      !!! PREMIER IT D UN JOUR QUELCONQUE AVEC BAISSSE DE LA NAPPE
221      85 DO 86 JJ=2, PIED
222      85 ORMOIS(JJ)=CONT(JJ)
223      ORMOIS(QQ)=15*B3C
224      DO 87 J=1, 9

```

```

225      CONC(QQ,J)=CONC(PIED,J)
226      B7 CONC(KKI,J)=CONC(QQ,J)
227      GO TO 92
228 C      ***** PREMIER IT D UN JOUR QUELCONQUE SANS MOUVEMENT DE NAPPE OU IT
229 C      1 QUELCONQUE
230      B8 DO 89 JJ=2,QQ
231      B9 ORMOIS(JJ)=CONC(JJ)
232      GO TO 92
233 C      ***** PREMIER IT DU PREMIER JOUR
234      90 JJ=1
235      DO 91 M=1,3,3
236      JJ=JJ+1
237      91 ORMOIS(JJ)=2.5*TO(M)+5.0*TO(M+1)+5.0*TO(M+2)+2.5*TO(M+3)
238      DO 94 J=1,9
239      94 CONC(KKI,J)=CONC(QQ,J)
240      92 CONTINUE
241      ORMOIS(KKI)=15*ABC
242      DO 93 JJ=1,KKI
243      DO 93 J=1,8
244      CONC1(JJ,J)=1.0
245      CONC1(JJ,J)=CONC1(JJ,J)+(CONC(JJ,J)+ORMOIS(JJ)+10.)*(.3)
246      93 CONTINUE
247 C      ***** COEFFICIENTS DE TRANSFERT
248      JJ=2
249      200 IF(MOISIN(JJ).LT.0.0)GO TO 202
250      IF(ORMOIS(JJ-1).GT.0.0)GO TO 201
251      COEFIN=0.0
252      GO TO 203
253      201 COEFIN=MOISIN(JJ)/ORMOIS(JJ-1)
254      GO TO 204
255      202 COEFIN=MOISIN(JJ)/ORMOIS(JJ)
256      203 CONTINUE
257      204 IF(MOISOU(JJ).LT.0.0)GO TO 205
258      COEFOJ=MOISOU(JJ)/ORMOIS(JJ)
259      GO TO 206
260      205 COEFOJ=MOISOU(JJ)/ORMOIS(JJ+1)
261      206 IF(COEFIN.LT.0.0)GO TO 207
262      NK=JJ-1
263      GO TO 208
264      207 NK=JJ
265      208 IF(COEFOU.LT.0.0)GO TO 209
266      LK=JJ
267      GO TO 210
268      209 LK=JJ+1
269      210 CONTINUE
270      IF(ABS(COEFIN).GT.1.0)COEFIN=ABS(COEFIN)/COEFIN
271      IF(ABS(COEFOU).GT.1.0)COEFOU=ABS(COEFOU)/COEFOU
272 C      ***** MOLES FLUEES AUX LIMITES DE CHAQUE SEGMENT ET MOLA_LITES
273      DO 211 J=1,8
274      D1(J)=CONC1(NK,J)*COEFIN
275      D2(J)=CONC1(LK,J)*COEFOU
276      F_(J)=D1(J)-D2(J)
277      CONC(JJ,J)=0.0
278      CONC(JJ,J)=CONC(JJ,J)+((CONC1(JJ,J)+FL(J))/(SEGVOL(JJ)+10.)*(.3))
279      IF(CONC(JJ,J).LT.0.0)CONC(JJ,J)=0.0
280      211 CONTINUE

```



```

281      JJ=JJ+1
282      IF(JJ.LE.QQ)GO TO 200
283  213 CONTINUE
284      CONT(KKI)=ORMOIS(KKI)
285      DO 213 JJ=1,20
286  218 CONT(JJ)=SE3VOL(JJ)
287      IF(CONT(1).GT.0.0) GO TO 220
288      DO 219 J=1,9
289  219 CONC(1,J)=0.0
290      GO TO 222
291  220 DO 221 J=1,8
292      CONC(1,J)=0.0
293  221 CONC(1,J)=CONC(1,J)+(CONC(1,J)/(ORMOIS(1)-10.)*(-3))
294  222 DO 223 J=1,9
295      CONC(KKI,J)=0.0
296  223 CONC(KKI,J)=CONC(KKI,J)+CONC(QQ,J)
297  C      IMPRESSION TRANSFERTS D EAU TOUS LES 0.1 JOURS OU TOUS LES IT
298      RETOUR=0
299      IF(BB.EQ.1) GO TO 214
300      X=X+DELT
301      IF(X.LT.0.1) GO TO 225
302      XT=XT+X
303      IF(EE.NE.1)GO TO 224
304      GO TO 215
305  214 X=X+DELT
306      XT=XT+DELT
307  215 WRITE(IMP,610)
308      WRITE(IMP,608)
309      WRITE(IMP,609)II,IT,XT,DELT,CI,LC,HED,ETS
310      WRITE(IMP,619)
311      WRITE(IMP,615)
312      DO 230 J=1,0
313  230 WRITE(IMP,617)J,TN(J),FNT(J),(LIGNE(J,KAK),KAK=1,80)
314      WRITE(IMP,618)DSTOK,DEBIL
315  224 DO 216 J=1,60
316      FNT(J)=0.0
317      ST(J)=0.0
318  215 ZT(J)=0.0
319      DSTOK=0.0
320      DEBIL=0.0
321      IF(XT.LT.1.0) GO TO 225
322      RETOJR=RETOJR+1
323      GO TO 226
324  225 RETOUR=RETOUR+2
325  225 RETURN
326  603 FORMAT(10X,10F12.6/10X,10F12.6/10X,10F12.6/10X,10F12.5)
327  607 FORMAT(1H0/11X,118HEA J D APPORT.      K+      NA+      CA+
328      1      MG++      H4SI04      S04+      CL+      ALC
329      2      H+/12X,12H(MOLARITES) ,9E12.5)
330  608 FORMAT(1H0/30X,72HII      IT      XT(JOURS)      DELT(JOURS)      CI(CM)
331      1(CM)      HED(CM)      ETS(CM))
332  609 FORMAT(28X,14,I5,F10.4,F12.4,5X,3F9.4,F10.4)
333  610 FORMAT(1H1,14X,116(1H))
334  615 FORMAT(3X,'SJRFACE',3X,'THETA',7X,'FLJX',11X,8('I : : : : '))
335  619 FORMAT(1H0/40X,'.20',7X,
336      1'.25',7X,'.30',7X,'.35',7X,'.40',7X,'.45',7X,'.50',7X,'.55')

```

```
337      617 FORMAT(5X,I2,2F12.6,8X,8D41)
338      618 FORMAT(1H0/3X,' VARIATION STOCK  ',F12.6,6X,
339      1'BILAN E/S ',F12.6)
340      END
```

```

1      C
2      C
3      C
4      C
5      C
6      C
7      SUBROUTINE CODI(A,ANA,ANT,3,BNA,C,D,HED,IT,K,KSATD,KSATD1,P,Q,
8      1KSATD2,TATA,TD,TITI,TM,TO,TS,TSS,II,EFR,JCHK1,JCHK2)
9      DIMENSION A(3),ANT(50),B(3),C(2),D(60),P(2),TK(60),TO(60)
10     DIMENSION EFR(60)
11     INTEGER Q
12     REAL K(60),KSATD,KSATD1,KSATD2
13     C    CALCUL DE K ET D POUR CHAQUE SURFACE DE TRANSIT
14     LEC=08
15     IF(II.NE.1) GO TO 4
16     IF(IT.NE.1) GO TO 4
17     READ(LEC,502)(A(L),L=1,3),(B(L),L=1,3),C(1),C(2),P(1),P(2),
18     1JCHK1,JCHK2,TSS,ANA,BNA
19     KSATD=KSATD+(A(1)*TM)*B(1))
20     KSATD1=KSATD1+(A(2)*TITI)*B(2))
21     KSATD2=KSATD2+(A(3)*TS)*B(3))
22     4 DO 5 J=1,Q
23     5 TK(J)=0.0
24     KI=0.1
25     DO 10 J=1,KI
26     1) TK(J)=(TO(J)+TO(J+1))/2.
27     TK(Q)=TO(Q)
28     J=1
29     IF(HED.GT.0.) TK(J)=TM
30     2) IF(J.EQ.JCHK1) GOTO 7)
31     3) IF(J.EQ.JCHK2) GOTO 5)
32     AX=KSATD2
33     4) BX=B(3)
34     TSAT=TS
35     GO TO 8)
36     5) BX=B(2)
37     TSAT=TITI
38     6) AX=KSATD1
39     GO TO 8)
40     7) AX=KSATD
41     BX=B(1)
42     TSAT=TM
43     8) IF(TK(J).GT.TSAT) TK(J)=TSAT
44     IF(EFR(J).GE.1) GO TO 9)
45     K(J)=AX*((TK(J)/TSAT)**BX)
46     GO TO 10)
47     9) K(J)=(ANA*(EFR(J)*BNA))*((TK(J)/TSS)**BX)
48     10) IF(J.EQ.JCHK1.OR.J.EQ.JCHK2) K(J)=SQRT(K(J)*K(J-1))
49     IF(TK(J).GT.TATA) GO TO 11)
50     CD=C(1)
51     PD=P(1)
52     GO TO 12)
53     11) CD=C(2)
54     PD=P(2)
55     12) DPSI=CD*((TK(J)/TATA)**PD)
56     D(J)=K(J)*DPSI

```

```
57      J=J+1
58      IF(J.E.Q) GO TO 20
59      5)2 FORMAT(6E12.5/4E12.5,2I5/3E12.5)
60      17) RETURN
61      END
```

SUBROUTINE 3
CALCUL DE L'EAU CONSOMMEE

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56

C
C
C
C

```

SUBROUTINE VEGT(CF,CONS,DEB,DELX,ETR,IDEB,II,KP,KPF,NSEMI,Q,
1  ISTART,T,U)
2  DIMENSION CF(4),CONS(12),CONSO(60),ETP(365),ETR(365),ID(3)
3  DIMENSION U(24)
4  INTEGER DEB(4,2),DEBI,DELX,PROF,Q,START,T(4,2),VJ,VJ0,V1,Z
5  REAL KP(2,12),KPF(12)
6  KJK=(2**1)/3
7  LEC=JB
8  IF(II.NE.1) GO TO 95
9  READ(LEC,509) NSEMI,(CF(I),I=1,4),((T(I,J),I=1,4),J=1,NSEMI)
10 READ(LEC,510) (ID(I),I=1,NSEMI)
11 READ(LEC,508) ((KP(I,Z),Z=1,12),I=1,NSEMI),(KPF(Z),Z=1,12)
12 READ(LEC,507) (U(N),N=1,24)
13 N=1
14 I1=1
15 1) I2=I1+14
16 IF(I1.EQ.16.OR.I1.EQ.75.OR.I1.EQ.136.OR.I1.EQ.197.OR.I1.EQ.228.OR
17 I1.EQ.289.OR.I1.EQ.350) I2=I1+15
18 IF(I1.EQ.32.OR.I1.EQ.46) I2=I1+13
19 DO 2) I=I1,I2
20 2) ETP(I)=U(N)
21 N=N+1
22 I1=I2+1
23 IF(N=25) GO TO 30,30
24 3) I=1
25 LX=1
26 VJ0=1
27 VJ=1
28 V1=2
29 DEBI=J
30 DEB(1,I)=I
31 4) DEB(V1,V0)=DEB(VJ0,V0)+T(I,LX)
32 5) I=I+1
33 VJ0=VJ
34 IF(VJ0.EQ.4) GO TO 70
35 V1=V1+1
36 6) IF(I.EQ.4) GO TO 40
37 I=I-4
38 LX=LX+1
39 GO TO 40
40 7) DEBI=DEBI+DEB(V1,V0)
41 V1=1
42 VJ=VJ+1
43 IF(VJ.GT.NSEMI) GO TO 80
44 DEB(V1,V0)=DEBI+T(I,LX)
45 DEBI=J
46 GO TO 50
47 8) DO 9) I=1,365
48 ISTART=I+ID(1)
49 IF(ISTART.GT.365) ISTART=ISTART-365
50 9) ETR(I)=ETP(ISTART)
51 IDEB=ID(1)+1

```

```

57      95 JJ=II+START-IDEB
58      IF(JD.LE.0)JD=JD+355
59      IF(JD.GE.DEB(1,1).AND.JD.LT.DEB(2,1)) GO TO 100
60      IF(JD.GE.DEB(2,1).AND.JD.LT.DEB(3,1)) GO TO 120
61      IF(JD.GE.DEB(3,1).AND.JD.LT.DEB(4,1)) GO TO 140
62      IF(JD.GE.DEB(4,1).AND.JD.LT.DEB(1,2)) GO TO 160
63      IF(JD.GE.DEB(1,2).AND.JD.LT.DEB(2,2)) GO TO 180
64      IF(JD.GE.DEB(2,2).AND.JD.LT.DEB(3,2)) GO TO 200
65      IF(JD.GE.DEB(3,2).AND.JD.LT.DEB(4,2)) GO TO 220
66      IF(JD.GE.DEB(4,2)) GO TO 240
67      100 DO 110 Z=1,KJK
68      110 CONS(Z)=ETR(JD)*CF(1)*KP(1,Z)
69      GO TO 260
70      120 DO 130 Z=1,KJK
71      130 CONS(Z)=ETR(JD)*CF(2)*KP(1,Z)
72      GO TO 260
73      140 DO 150 Z=1,KJK
74      150 CONS(Z)=ETR(JD)*CF(3)*KP(1,Z)
75      GO TO 260
76      160 DO 170 Z=1,KJK
77      170 CONS(Z)=ETR(JD)*CF(4)*KPF(Z)
78      GO TO 260
79      180 DO 190 Z=1,KJK
80      190 CONS(Z)=ETR(JD)*CF(1)*KP(2,Z)
81      GO TO 260
82      200 DO 210 Z=1,KJK
83      210 CONS(Z)=ETR(JD)*CF(2)*KP(2,Z)
84      GO TO 260
85      220 DO 230 Z=1,KJK
86      230 CONS(Z)=ETR(JD)*CF(3)*KP(2,Z)
87      GO TO 260
88      240 DO 250 Z=1,KJK
89      250 CONS(Z)=ETR(JD)*CF(4)*KPF(Z)
90      250 DO 270 J=1,3
91      PROF=DELX*(J-1)
92      IF(PROF.LE.15)CONSO(J)=CONS(1)/3
93      IF(PROF.GT.15.AND.PROF.LE.30)CONSO(J)=CONS(2)/3
94      IF(PROF.GT.30.AND.PROF.LE.45)CONSO(J)=CONS(3)/3
95      IF(PROF.GT.45.AND.PROF.LE.60)CONSO(J)=CONS(4)/3
96      IF(PROF.GT.60.AND.PROF.LE.75)CONSO(J)=CONS(5)/3
97      IF(PROF.GT.75.AND.PROF.LE.90)CONSO(J)=CONS(6)/3
98      IF(PROF.GT.90.AND.PROF.LE.105)CONSO(J)=CONS(7)/3
99      IF(PROF.GT.105.AND.PROF.LE.120)CONSO(J)=CONS(8)/3
100     IF(PROF.GT.120.AND.PROF.LE.135)CONSO(J)=CONS(9)/3
101     IF(PROF.GT.135.AND.PROF.LE.150)CONSO(J)=CONS(10)/3
102     IF(PROF.GT.150.AND.PROF.LE.165)CONSO(J)=CONS(11)/3
103     IF(PROF.GT.165.AND.PROF.LE.180)CONSO(J)=CONS(12)/3
104     IF(PROF.GT.180)CONSO(J)=0.0
105     270 CONTINUE
106     507 FORMAT(12F6.3/12F6.3)
107     508 FORMAT(12F6.3/12F6.3)
108     509 FORMAT(1X,I1,1X,4F5.2,5X,4I3)
109     510 FORMAT(17X,I3)
110     RETURN
111     END

```

```

1      C
2      C
3      C
4      C
5      C
6      SUBROUTINE THE(IDTE,II,MOI,START)
7      INTEGER START
8      M=II+START
9      IF(M.GE.1.AND.M.LE.31)GO TO 1
10     IF(M.GT.31.AND.M.LE.59)GO TO 2
11     IF(M.GT.59.AND.M.LE.90)GO TO 3
12     IF(M.GT.90.AND.M.LE.120)GO TO 4
13     IF(M.GT.120.AND.M.LE.151)GO TO 5
14     IF(M.GT.151.AND.M.LE.181)GO TO 6
15     IF(M.GT.181.AND.M.LE.212)GO TO 7
16     IF(M.GT.212.AND.M.LE.243)GO TO 8
17     IF(M.GT.243.AND.M.LE.273)GO TO 9
18     IF(M.GT.273.AND.M.LE.304)GO TO 10
19     IF(M.GT.304.AND.M.LE.334)GO TO 11
20     IF(M.GT.334.AND.M.LE.365)GO TO 12
21     1  IDTE=M
22         MOI=1
23         RETURN
24     2  IDTE=M-31
25         MOI=2
26         RETURN
27     3  IDTE=M-59
28         MOI=3
29         RETURN
30     4  IDTE=M-90
31         MOI=4
32         RETURN
33     5  IDTE=M-120
34         MOI=5
35         RETURN
36     6  IDTE=M-151
37         MOI=6
38         RETURN
39     7  IDTE=M-181
40         MOI=7
41         RETURN
42     8  IDTE=M-212
43         MOI=8
44         RETURN
45     9  IDTE=M-243
46         MOI=9
47         RETURN
48     10 IDTE=M-273
49         MOI=10
50         RETURN
51     11 IDTE=M-304
52         MOI=11
53         RETURN
54     12 IDTE=M-334
55         MOI=12
56         RETURN
57     END

```

```
          SUBROUTINE S
          NUMEROTATION D'UN JOJR
          REPERE PAR SA DATE
```

```
1      C
2      C
3      C
4      C
5      C
6      FJUNCTION JOUR (K,L,M)
7      GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12),M
8          1  JOUR=< L
9             GOTO13
10         2  JOUR=< L+31
11            GOTO13
12         3  JOUR=< L+59
13            GOTO13
14         4  JOUR=< L+90
15            GOTO13
16         5  JOUR=< L+120
17            GOTO13
18         6  JOUR=< L+151
19            GOTO13
20         7  JOUR=< L+181
21            GOTO13
22         8  JOUR=< L+212
23            GOTO13
24         9  JOUR=< L+243
25            GOTO13
26        10  JOUR=< L+273
27            GOTO13
28        11  JOUR=< L+304
29            GOTO13
30        12  JOUR=< L+334
31        13  IF(JOJR.LE.0) JOJR=JOJR+365
32            RETURN
33            END
```


SUBROUTINE 6
VENTILATION CALCULS EQUILIBRE

```

1   C
2   C
3   C
4   C
5   SUBROUTINE VENTIL(THERM,CONT,CONC,QQ,EFR)
6   REAL MGT,NAT,NA,MG,MGC03,MGS04,MY,KSCACO,KSCASO,KSPCAL,KSPGYP,
7     1 <J,K1,K2,KCASO,KCACO,KMGSO,KMGCO,KW
8     2 ,MGSOL,NASOL,MGAD,NAAD,KCAMG
9     COMMON/ETI1/SMY
10    1 /ETI2/FIP,AJ,A1,A2,A3
11    2 /ETI3/CCA,CMG,NA
12    3 /ETI4/CAAD,MGAD,NAAD,BT,KCAMG
13    4 /ETI5/KSPCAL,KSPGYP,CAC03P,CAS04P
14    5 /ETI6/MY,PHCO2,CAT,MGT,S04T,NAT,CLT,CSO4,CL,CASO4,CAC03,MGS04,
15    6 MGC03,CCO3,CHCO3,H2CO3,CH,COH,CA,MG,S04,ACNA,ACL,CO3,HCO3,H,OH,
16    7 PH,PCO2,GCA,GS04,GC03,KSCACO,KSCASO,KJ,K1,K2,KCASO,KCACO,KMGSO,
17    8 <MGC0,KW,JHC,ISTOP,IT1,IT3,ITCA,ITMG,ITC03,ITSOPR
18    DIMENSION THERM(13,7),CONT(20),CONC(20,9),EFR(60)
19    INTEGER IQ
20    C
21    103 FORMAT('1'///3X,51(' ')//3X,'STRATE',I4,' ',I3,'CM'/)
22    101 FORMAT(3X,61(' ')//3X,'PH FIXE A ',F6.3)
23    102 FORMAT(3X,61(' ')//3X,'PCO2 FIXEE A ',E10.3,' ATM')
24    105 FORMAT(' CO3',E14.3,E11.3,' * MG',E15.3,E11.3/
25    1 ' HCO3',E13.3,E11.3,' * MGS04D',E11.3/
26    2 ' H2CO3',E12.3,13X,' MGC03D',E11.3/
27    3 ' CA',E16.3,E11.3,' CA',E15.3,E11.3/
28    4 ' OH',E15.3,E11.3,' CASO4D',E11.3/
29    5 ' NA',E15.3,E11.3,' CAC03D',E11.3/
30    6 ' CL',E15.3,E11.3,' GYPSE',E12.3/
31    7 ' S04',E14.3,E11.3,' CALCITE',E10.3/3X,10(' '))
32    108 FORMAT(' PCO2',E12.3,' PH',F7.3,' FORCE IONIQUE',
33    1 E11.3/' ELECTRONEUTRALITE',E12.3,' EQUIV/LITRE SAR',E11.3/
34    2 ' <S(CACO3)',E11.3,' <S(CASO4)',E11.3/3X,10(' '))
35    109 FORMAT(' IT1',I3,' IT3',I3,' ITCA',I3,' ITMG',
36    1 I3,' ITC03',I3/' ITSOPR',I3,' ITERPR',I3/3X,61(' ')/)
37    104 FORMAT(3X,61(' ')/26X,'MEQ/100G',5X,'MOLE/L'//3X,'SOLJBLES',6X,
38    1 'CA',3X,2E12.3/17X,'MG',3X,2E12.3/17X,'NA',3X,2E12.3/17X,'CL',3X
39    2 2E12.3/17X,'S04',2X,2E12.3/3X,'PRECIPITES CALCITE',F10.3,
40    3 E12.3/17X,'GYPSE',2E12.3/3X,'ECHANGEABLES CA',E15.3/17X,'MG',
41    4 E15.3/17X,'NA',E15.3/3X,10(' ')/' RAPPORT SOL/SOLUTION',F10.2,
42    5 ' G',/' COEFF.REG.POLYN. KC SUR Y',E12.3/30X,E10.3,' Y',/30X,
43    6 E10.3,' Y',/30X,E10.3,' Y',/30X/' KCAMG',F7.3/' KSP.CALCITE',
44    7 E12.3/' KSP.GYPSE',E12.3/3X,61(' ')/' ESPECE MOLARITE AC
45    BIVITE ESPECE MOLARITE ACTIVITE'/)
46    107 FORMAT(' ECHANGEABLES(MEQ/100G) CA',E11.4/27X,'MG',E11.4/
47    1 27X,'NA',E11.4/25X,'NA/T',E11.4/3X,
48    2'EXCHANGEABLE FRACTION RATIO',E11.4/3X,10(' '))
49    110 FORMAT(///10X,'FIN DES CALCULS POUR LA JOURNEE SIMULEE'///)
50    111 FORMAT(///' SYSTEME IMPOSSIBLE'/)
51    C
52    KJ=3.38E-02
53    K1=4.467E-07
54    K2=4.577E-11
55    KCASO=4.90E-03
56    KCACO=3.29E-05

```

```

57      KMGSD=5.88E-03
58      KMGCO=4.00E-04
59      KA=1.00E-14
60      JHC=2
61      KSPCAL=0.4E-08
62      KSPGY=0.2E-04
63      KCAMG=1.0
64      AJ=5.0
65      A1=4.0
66      A2=0.0
67      A3=0.0
68      CCCCCC
69      DO 1000 JJ=2,20
70      IM1=(JJ-2)*15
71      IM2=(JJ-1)*15
72      NAT=CONC(JJ,2)
73      CAT=CONC(JJ,3)
74      MGT=CONC(JJ,4)
75      SO4T=CONC(JJ,6)
76      CLT=CONC(JJ,7)
77      DA=THERM(JJ,1)
78      PHCO2=THERM(JJ,2)
79      NAAD=THERM(JJ,3)
80      CAAD=THERM(JJ,4)
81      MGAD=THERM(JJ,5)
82      CACO3P=THERM(JJ,6)
83      CASO4P=THERM(JJ,7)
84      BT=DA*15.0/(CONC(JJ)*10.0**(-3))
85      NASOL=NAT*100000./BT
86      CASOL=CAT*200000./BT
87      MGSOL=MGT*200000./BT
88      SO4SOL=SO4T*200000./BT
89      CLSOL=CLT*100000./BT
90      CALCIT=CACO3P*200000./BT
91      GYPSE=CASO4P*200000./BT
92      WRITE(6,103)IM1,IM2
93      IF(JHC.EQ.1) 99,601,602
94      601 WRITE(6,101)PHCO2
95      GO TO 603
96      602 WRITE(6,102)PHCO2
97      603 WRITE(6,104)CASOL,CAT,MGSOL,MGT,NASOL,NAT,CLSOL,CLT,SO4SOL,SO4T,
98      1 CALCIT,CACO3P,GYPSE,CASO4P,CAAD,MGAD,NAAD,BT,AJ,A1,A2,A3,KCAMG,
99      2 KSPCAL,KSPGY
100     CCCCCC
101     CL=CLT
102     CCA=CAT
103     CMG=MGT
104     NA=NAT
105     CSO4=SO4T
106     CA=CAT
107     MG=MGT
108     SO4=SO4T
109     MGC03=0.
110     MGS04=0.
111     CACO3=0.
112     CASO4=0.

```

```

113          SMY=0
114          C F F F F F
115          DO 1 ITERPR=1,50
116          CALL GYPCAL
117          IF(ISTOP.EQ.1) GOTO 99
118          OCA=CCA
119          OMG=CMG
120          OVA=NA
121          FIP=2*(CCO3+CSO4)+0.5*(CHCO3+CL+COH+CH)
122          IF((NAAD+CAA)+MGAD) 99,98,550
123          65) CALL ECHANG
124          IF(EQE(OVA,NA,0.01)) 652,652,2
125          652 IF(EQE(OCA,CCA,0.01)) 653,653,2
126          653 IF(EQE(OMG,CMG,0.01)) 98,98,2
127          2 CAT=CCA+CACO3+CASO4
128          MGT=CMG+MGCO3+MGSO4
129          NAT=NA
130          1 CONTINUE
131          98 ELECT=2*(CCA+CMG+CSO4+CCO3)+NA+CH+CL+COH+CHCO3
132          SODADS=(10*(1.5)*ACNA+((CA+MG)*(0.5)))
133          RELSOD=NAAD/(NAAD+CAAD+MGAD)
134          SODEX=RELSOD*((1-RELSOD)*(0.5))
135          WRITE(6,106)CCO3,CO3,CMG,MG,CHCO3,HCO3,MGSO4,H2CO3,MGCO3,CH,H,
136          1 CCA,CA,COH,OH,CASO4,VA,ACNA,CACO3,CL,ACL,CASO4P,CSO4,SO4,CACO3
137          WRITE(6,107)CAAD,MGAD,NAAD,RELSOD,SODEX
138          WRITE(6,108)PCO2,PH,MY,ELECT,SODADS,KSCACO,KSCASO
139          WRITE(6,109)IT1,IT3,ITCA,ITMG,ITCO3,ITSOPR,ITERPR
140          THERM(JJ,3)=VAAD
141          THERM(JJ,4)=CAAD
142          THERM(JJ,5)=MGAD
143          THERM(JJ,6)=CACO3P
144          THERM(JJ,7)=CASO4P
145          CONC(JJ,2)=VA
146          CONC(JJ,3)=CCA+CASO4+CACO3
147          CONC(JJ,4)=CMG+MGSO4+MGCO3
148          CONC(JJ,6)=CSO4+MGSO4+CASO4
149          CONC(JJ,7)=CL
150          CONC(JJ,8)=CONC(JJ,1)+CONC(JJ,2)-CONC(JJ,7)-2*(CONC(JJ,6)
151          1*CONC(JJ,3)+CONC(JJ,4))
152          CONC(JJ,9)=10*(1-PH)
153          I1=(3*JJ)-5
154          I2=I1+3
155          DO 3 J=I1,I2
156          EFR(J)=SODEX
157          3 CONTINUE
158          GO TO 1000
159          99 WRITE(6,111)
160          10) CONTINUE
161          999 WRITE(6,110)
162          RETURN
163          END

```

SUBROUTINE 7
ECHANGE IONIQUE CA-MG-NA

```

1      C
2      C
3      C
4      C
5      SUBROUTINE ECHANG
6      REAL NA,MGA),NAAD,KCAMG
7      COMMON /ETI2/FIP,A0,A1,A2,A3
8      2 /ETI3/CCA,CMG,NA
9      3 /ETI4/CAAD,MGAD,NAAD,BT,KCAMG
10     CEC=(CAAD+MGA)+NAAD)/100000.
11     C)=2*(CCA+CMG)+NA
12     R=BT*CEC/CO
13     Y=(CAAD+MGAD)/(CAAD+MGAD+NAAD)
14     X=2*(CCA+CMG)/CO
15     IF((NA.EQ.0).AND.(NAAD.EQ.0))GO TO 350
16     IF((CCA.NE.0).OR.(CAAD.NE.0))GO TO 351
17     IF((CMG.NE.0).OR.(MGAD.NE.0))GO TO 351
18     RETURN
19 351 Z=0.01
20     NARR=)
21     FIF=).00001
22     IF(Y.E.0)Y=FIF
23     IF(Y.GE.1)Y=1-FIF
24     IF(X.LE.0)X=FIF
25     IF(X.GE.1)X=1-FIF
26     FD=ECH(Y,X,C)
27     IF(FD)72,77,71
28 72 SIG=-1.
29     GO TO 73
30 71 SIG=+1.
31 73 Y=Y+SIG*Z
32     X=X+R*SIG*Z
33     IF((Y.GE.1).OR.(X.GE.1))GO TO 75
34     IF((Y.LE.0).OR.(X.LE.0))GO TO 75
35     F=ECH(Y,X,C)
36     IF(F.FD)75,77,73
37 75 Y=Y-SIG*Z
38     X=X+R*SIG*Z
39     NARR=NARR+1
40     IF(NARR.2)76,76,77
41 76 Z=Z/1)
42     GO TO 73
43 77 NAAD=(1-Y)*CEC/100000.
44     NA=(1-X)*CO
45     IF((CCA.LE.0).AND.(CAAD.LE.0))GO TO 52
46     IF((CMG.LE.0).AND.(MGAD.LE.0))GO TO 53
47     GO TO 80
48 350 IF((CCA.EQ.0).AND.(CAAD.EQ.0))GO TO 81
49     IF((CMG.EQ.0).AND.(MGAD.EQ.0))GO TO 81
50 80 S=CO*X/2.
51     V=CEC*Y/2.
52     TCA=CAAD*BT/200000.+CCA
53     TMS=MGAD*BT/200000.+CMG
54     A=KCAMG*BT*BT
55     B=KCAMG*(S-TCA)+V*BT+TCA
56     C=-V*TCA

```

```

57      IF(A)82,83,82
58      83 ADCA=C/B
59      GO TO 84
60      82 ADCA=(B+SQRT(B*B-4*A*C))/(2*A)
61      84 ADMG=V*ADCA
62      CCA=TCA*ADCA*BT
63      CMG=TMG-ADMG*BT
64      GO TO 50
65      52 ADMG=CEC*Y/2.
66      CMG=CJ*X/2.
67      ADCA=J.
68      CCA=J.
69      GO TO 50
70      53 ADCA=CEC*Y/2.
71      CCA=CJ*X/2.
72      ADMG=J.
73      CMG=J.
74      50 CAAD=ADCA*200000.
75      MSAD=ADMG*200000.
76      81 RETURN
77      . END

```

```

1      C
2      C
3      C
4      SUBROUTINE 8
5      FUNCTION ECH(Y,X,C0)
6      COMMON/ETI2/FIP,A0,A1,A2,A3
7      FI=(X+1)*C0/2+FIP
8      RFI=SQRT(FI)
9      GAMMA=EXP(2.341*(RFI/(1+RFI)-0.2*FI))
10     SOM=A0+A1*Y+A2*Y**2+A3*Y**3
11     SKC=2*C0*Y*(1-X)**2*GAMMA/((1-Y)+2*X)
12     ECH=SOM-SKC
13     RETURN
14     END

```

SUBROUTINE 9
EQUILIBRES DE SOLUBILISATION
ET DE PRECIPITATION

```

1      C
2      C
3      C
4      C
5      C
6      SUBROUTINE GYPCAL
7      REAL MGT,NAT,NA,MG,MGC03,MGS04,MY,KSCACO,KSCASO,KSPCAL,KSPGYP,
8      1 KJ,K1,K2,KCASO,KCACO,KMGSO,KMGCO,KW
9      COMMON/ETI1/SMY
10     2 /ETI3/CCA,CMG,NA
11     4 /ETI5/KSPCAL,KSPGYP,CAC03P,CAS04P
12     5 /ETI6/MY,PHCO2,CAT,MGT,S04T,NAT,CLT,CS04,CL,CAS04,CAC03,MGS04,
13     5 MGC03,CC03,CHCO3,H2CO3,CH,COH,CA,MG,S04,ACNA,ACL,CO3,HCO3,H,OH
14     7 PH,PCO2,GCA,GS04,GC03,KSEACO,KSCASO,KD,K1,K2,KCASO,KCACO,KMGSO
15     8 KMGCO,KW,JHC,ISTOP,IT1,IT3,ITCA,ITMG,ITCO3,ITSOPR
16     C I I I I I
17     ISTOP=0
18     PKSPCA=(KSPCAL)
19     ITSOPR=0
20     AJXEN=CLT+2*S04T+2*CAT+2*MGT-NAT
21     IF(AJXEN.LE.0)GOTO 55
22     AJXEN=AJXEN/2.0
23     IF(AJXEN.GT.CAC03P)AJXEN=CAC03P
24     CAT=CAT+AJXEN
25     CAC03P=CAC03P-AJXEN
26     55) CALL EQU SOL
27     IF(ISTOP.EQ.1)GOTO 99
28     IF(KSCACO)995,725,726
29     725 OPCACO=(KSCACO)
30     OCACOP=CAC03P
31     C I I I I I
32     725 DO 11 ITSOPR=1,50
33     IF(EQ2(KSCASO,KSPGYP),1)701,701,702
34     702 IF(KSCASO,KSPGYP)703,704,704
35     703 IF(CAS04P)701,701,704
36     704 IF(KSCASO)995,705,706
37     705 IF(CAS04P)701,701,707
38     707 Q=SQR(KSPGYP/(GCA*GS04))
39     GOTO 708
40     706 A=CCA+CAC03
41     B=CS04+MGS04-A
42     C=(CS04+MGS04)*KSPGYP/KSCASO
43     X=(3+SQR(B*B-4*A*C))/(2*A)
44     Q=A*(1-X)+CAS04*KSPGYP/KCASO
45     IF(Q)708,708,709
46     709 AJX=AMIN1(S04T,CAT)
47     IF(Q.GT.AUX)Q=AUX*0.99
48     GOTO 710
49     708 IF(ABS(Q).GT.CAS04P)Q=CAS04P
50     710 CAS04P=CAS04P+Q
51     CAT=CAT-Q
52     S04T=S04T-Q
53     CCA=CAT
54     CS04=S04T
55     GOTO 711
56     C I I I I I

```

```

57      701 J JL=0
58      IF(EQE(KSCACO,KSPCAL,J,1))98,98,712
59      712 IF(KSCACO=KSPCAL)713,714,714
60      713 IF(CAC03P)98,98,714
61      714 IF(KSCACO)995,715,716
62      715 J JL=1
63      IF(CAC03P)98,98,717
64      717 Q=SQRT(KSPCAL/(GCA*GC03))
65      GO TO 718
66      715 A=2*CCA
67      B=2*CC03+CHC03*A
68      C=(2*CC03+CHC03)*KSPCAL/KSCACO
69      X=(B+SQRT(B*B-4*A*C))/(2*A)
70      Q=(1-X)*(CCA+CAS04)+CAC03*KSPCAL/KCAC0
71      IF(Q)718,718,719
72      719 IF(Q.GT.CAT)Q=CAT*.99
73      IF(Q.GT.(CHC03+C03))Q=CHC03+C03
74      GO TO 720
75      718 IF(ABS(Q).GT.CAC03P)Q=-CAC03P
76      720 CAC03P=CAC03P+Q
77      CAT=CAT*Q
78      CCA=CAT
79      IF(JU.EQ.1)GOTO 711
80      CALL EQJSOL
81      IF(ISTOP.EQ.1)GOTO 99
82      IF(KSCACO)995,715,721
83      721 PCACO=(KSCACO)
84      IF((P<SPCA*OPCACO)/(PCACO*PKSPCA))722,722,723
85      722 OPCACO=PCACO
86      OCACOP=CAC03P
87      GOTO 11
88      723 Y2=CAC03P
89      CAC03P=OCACOP+(PKSPCA*OPCACO)-(Y2-OCACOP)/(PCACO-OPCACO)
90      CAT=CAT+Y2*CAC03P
91      CCA=CAT
92      711 CALL EQJSOL
93      IF(ISTOP.EQ.1)GOTO 99
94      IF(KSCACO)995,715,724
95      724 OPCACO=KSCACO
96      OCACOP=CAC03P
97      11 CONTINUE
98      98 E_LCT=2*(CCA+CMG*CS04-CC03)+NA*CL+CH*COH*CHC03
99      99 RETURN
100     995 WRITE(6,108)
101     108 FORMAT('/', ' SYSTEME IMPOSSIBLE '/')
102     999 RETURN
103     END

```

SUBROUTINE T0
EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE
DES ESPECES EN SOLUTION

```

1      C
2      C
3      C
4      C
5      C
6      SUBROUTINE EQUUSOL
7      REAL MGT,NAT,NA,MG,MGP,MGIP,MGC03,MGS04,MY,KSCACO,KSCASO,
8      1  KJ,K1,K2,KW,KCACO,KCASO,KMGCO,KMGSO,KPR,K2PR,KWPR
9      COMMON/ETI1/SMY
10     2  /ETI3/CCA,CMG,NA
11     5  /ETI5/MY,PHCO2,CAT,MGT,S04T,NAT,CLT,CS04,CL,CAS04,CAC03,MGS04,
12     6  MGC03,CC03,CHC03,H2C03,CH,COH,CA,MG,S04,ACVA,ACL,C03,HC03,H,OH
13     7  PH,PC02,GCA,GS04,GC03,KSCACO,KSCASO,KJ,K1,K2,KCASO,KCACO,KMGSO
14     8  KMGC0,KW,JHC,ISTOP,IT1,IT3,ITCA,ITMG,ITC03,ITSOPR
15     C
16     SOMC=2*(CAT+MGT)+NAT
17     SOMA=2*S04T+CLT
18     ELV=AMAX1(SOMC,SOMA)/10000.
19     IF(ELV.LT.1E-06) ELV=1E-06
20     IF(JHC.EQ.1)601,601,602
21 601  PH=PHCO2
22     H=10.13*(-PH)
23     GOTO 503
24 602  PC02=PHCO2
25     H2C03=PC02*KJ
26     C
27 603  PSM=SMY
28     DJ 130 IT1=1,30
29     GHCO3=G(1.,4.5)
30     GC03=G(2.,4.5)
31     GCA=G(2.,6.)
32     GMG=G(2.,8.)
33     GS04=G(2.,4.)
34     GH=G(1.,9.)
35     GOH=G(1.,3.5)
36     SIGN=1.
37     Z=0.5
38     IF(JHC.EQ.1)604,604,605
39 604  OVAR=3.
40     GOTO 506
41 605  OVAR=5.5
42 606  IT=0
43     IVAR=0
44     IS=0
45 607  VAR=OVAR+Z*SIGN
46     IVAR=IVAR+1
47     IF(IVAR.GT.625)GOTO 997
48     IF((VAR.LT.0).OR.(VAR.GT.14))GOTO 998
49     IF(JHC.EQ.1)608,608,609
50 608  PC02=10.13*(-VAR)
51     H2C03=PC02*KJ
52     GOTO 510
53 609  H=10.13*(-VAR)
54 610  HC03=<1. H2C03/H
55     C03=K2*HC03/H
56     OH=KW/H

```



```

113      621 OVAR=VAR
114      OEN=EV
115      GOTO 507
116      622 P4=-A*OG10(H)
117      MY=(CCA+CMG+CCO3+CSO4)*2.+C.5*(NA+CL+CH+COH+CHCO3)
118      SMY=SQRT(MY)
119      IF(EQE(SMY,PSM,0.005))523,523,522
120      522 PSM=SMY
121      132 CONTINUE
122      C*****
123      523 ACNA=VA*G(1.,4.,5)
124      ACL=C*G(1.,3.)
125      KSCACO=CA*CO3
126      KSCASO=CA*SO4
127      ITCO3=IVAR
128      C*****
129      RETURN
130      998 WRITE(6,190)
131      190 FORMAT(//' SYSTEME IMPOSSIBLE'//)
132      GOTO 996
133      997 WRITE(6,191)
134      191 FORMAT(//' PAS DE CONVERGENCE DE L'ELECTRONEUTRALITE'//)
135      995 ISTOP=1
136      RETURN
137      END

```

```

1      C
2      C
3      C
4      C
5      C
6      C
7      C
8      C
9      C
10     C
11     C

```

SUBROUTINE 11
COEFFICIENTS D'ACTIVITE
SELON DEBYE-HUCKEL

```

FJUNCTION G(Z,A)
COMMON/ET11/SMY
G=.509*Z*Z*SMY/(1.+(.329*A*SMY))
G=EXP(-2.30258513)
RETURN
END

```

```
1      C
2      C
3      C
4      C
5      FJUNCTION EQE(A,B,C)
6      IF((A.EQ.0).AND.(B.EQ.0))GOTO 5
7      IF((A.EQ.0).OR.(B.EQ.0))GOTO 6
8      IF(A/B)5,6,7
9      EQE=ABS(1.-B/A)-C
10     RETURN
11     5 EQE=1.
12     RETURN
13     5 EQE=0.
14     RETURN
15     . END
```


INTRODUCTION	5
STRUCTURE DU MODELE ET METHODES	9
Simulation de la dynamique de l'eau dans le sol	11
Rappels théoriques	11
Elaboration d'un modèle hydrodynamique	13
<i>Discrétisation de l'équation de continuité</i>	13
<i>Choix des valeurs de Δz et Δt</i>	15
<i>Estimation de $K_{j+1/2}^{i-1/2}$ et $D_{j+1/2}^{i-1/2}$</i>	17
<i>Evaporation et consommation en eau</i>	18
<i>Conditions aux limites</i>	20
<i>Résolution du système d'équations</i>	23
Simulation des transferts de solutés et de l'équilibre	25
Principe du calcul et segmentation du profil	25
Calcul du transfert des solutés	26
Modèle de mise à l'équilibre thermodynamique	29
<i>Mise à l'équilibre d'une solution d'électrolytes</i> <i>en contact avec une phase gazeuse</i>	30
<i>Mise à l'équilibre d'une solution d'électrolytes</i> <i>en contact avec une masse d'évaporites</i>	32
<i>Mise à l'équilibre d'une solution d'électrolytes</i> <i>en contact avec un complexe échangeur d'ions</i>	36
<i>Cohérence de l'équilibre général</i>	40
Détermination des caractéristiques hydrodynamiques	41
Remarques préliminaires	41
Mesures dans le sol saturé	42
Mesures dans le sol non saturé	44
<i>Mesures sur le terrain</i>	44
<i>Mesure au laboratoire</i>	47
<i>Cohérence des mesures en milieu saturé ou non</i>	52
<i>Relation $h - \theta$ et diffusivité</i>	53
<i>Conductivité hydraulique du sol alcalinisé</i>	55

PROGRAMME SIMUL	59
Généralités	61
Données initiales	61
Organisation des calculs	62
Sorties	66
Introduction des données initiales	69
Groupe 1-Paramètres généraux	69
Groupe 2-Apports d'eau	72
Groupe 3-Niveau de la nappe phréatique	73
Groupe 4-Compositions chimiques initiales	73
Groupe 5-Données complémentaires profil	74
Groupe 6-Profil hydrique réel initial	75
Groupes 7-8-9-10-Cultures et consommation en eau	75
Groupe 11-Conductivité hydraulique et diffusivité	76
<i>Conductivité hydraulique</i>	76
<i>Diffusivité</i>	77
Dispositions particulières	79
Simulation de trois cultures dans l'année	79
<i>Texte du sous-programme VEGT</i>	79
<i>Données initiales (Groupes 7-8-9)</i>	80
Augmentation du nombre de jours d'apport d'eau ou de mouvement du niveau de la nappe	80
Modification des conditions de l'équilibre thermodynamique ...	80
Alcalinisation du sol	81
Absence de nappe phréatique	81
EXEMPLES DE SIMULATION	83
Validations	85
Mise à l'équilibre thermodynamique	85
Simulation des transferts d'eau	86
<i>Données expérimentales</i>	87
<i>Résultats et discussion</i>	89

Simulation standard.....	98
Données expérimentales.....	98
Résultats et discussion.....	101
CONCLUSION.....	113
BIBLIOGRAPHIE.....	117
ANNEXE. TEXTE DU PROGRAMME "SIMUL".....	123