

REPUBLIQUE TUNISIENNE

MINISTÈRE DE L'AGRICULTURE

DIRECTION DES SOLS

**PROGRAMMES DE CALCUL POUR MICRO-ORDINATEURS DE POCHE
"SHARP" A L'USAGE DU LABORATOIRE DES SOLS ET EAUX**

Par : Michel RIEU, Pédologue à l'O.R.S.T.O.M. - Tunis

E-S 242

PROGRAMMES DE CALCUL POUR MICRO-ORDINATEURS DE POCHE "SHARP"

A L'USAGE DU LABORATOIRE DES SOLS ET EAUX

par Michel RIEU pédologue à l'ORSTOM - TUNIS

ACTIVE	PC 1251
REGRES	PC 1211
POLYGR	PC 1211
CORDEC / CORLOG	PC 1211
TRADAT	PC 1211

ACTIVE

(Cf. Programme "EQU SOL" de DUFEY J.E., PETIT C.M., GOBLET Y. et LAUDELOUT H. (1979), Modélisation des équilibres physico-chimiques d'échange et de précipitation dans les systèmes sol-eau-électrolyte. *Ann. Agro.*, 30, p. 53-62.)

1. Généralités

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

On ne cherche pas à calculer une distribution exhaustive tenant compte de toutes les espèces possibles en solution : on néglige les paires d'ions formées avec les ions monovalents dont la tendance à s'apparier est faible et l'on admet que pour une force ionique inférieure à 0.1, la totalité de Na et Cl sont sous la forme libre Na^+ et Cl^- . On considère que si l'on tient compte des paires d'ions majeures : CaCO_3 , MgCO_3 , H_2CO_3 , CaSO_4 , MgSO_4 , la correction obtenue sur les concentrations totales de Ca, Mg, SO_4 , et CO_3 est suffisante pour déterminer avec une bonne précision les concentrations des ions libres correspondants. On fait l'approximation que les paires d'ions non chargées ont un coefficient d'activité égal à 1. Le potassium, peu abondant en général, n'est pas pris en considération.

1.1. Eléments du calcul

- On dispose des concentrations totales (molalités) de : Na^+ , Ca^{++} , Mg^{++} , Cl^- , SO_4^{--} et du pH ou de la PCO_2 .
- On cherche à déterminer la molalité et l'activité des 15 espèces : CO_2 , $\text{H}_2\text{CO}_3^\circ$, HCO_3^- , CO_3^{--} , H^+ , OH^- , Na^+ , Ca^{++} , Mg^{++} , Cl^- , SO_4^{--} , CaCO_3° , CaSO_4° , MgCO_3° , MgSO_4° .
- On dispose des 14 équations suivantes :

*Equilibres de dissociation

$$|\text{H}_2\text{CO}_3^\circ| / \text{PCO}_2 = K_0 = 10^{-1,46} \quad (1)$$

$$|\text{H}_3\text{O}^+| \cdot |\text{HCO}_3^-| / |\text{H}_2\text{CO}_3| = 10^{-6,35} = K_1 \quad (2)$$

$$|\text{H}_3\text{O}^+| \cdot |\text{CO}_3^{--}| / |\text{HCO}_3^-| = 10^{-10,32} = K_2 \quad (3)$$

$$|H_3O^+| \cdot |OH^-| = K_w = 10^{-14} \quad (4)$$

$$|Ca^{++}| \cdot |CO_3^{=}| / |CaCO_3^o| = 10^{-3,20} = K_4 \quad (5)$$

$$|Ca^{++}| \cdot |SO_4^{=}| / |CaSO_4^o| = 10^{-2,31} = K_5 \quad (6)$$

$$|Mg^{++}| \cdot |CO_3^{=}| / |MgCO_3^o| = 10^{-3,40} = K_6 \quad (7)$$

$$|Mg^{++}| \cdot |SO_4^{=}| / |MgSO_4^o| = 10^{-2,25} = K_7 \quad (8)$$

*Conservation de masse

$$Na_t = Na^+ \quad (9)$$

$$Cl_t = Cl^- \quad (10)$$

$$Ca_t = Ca^{++} + CaCO_3^o + CaSO_4^o \quad (11)$$

$$Mg_t = Mg^{++} + MgCO_3^o + MgSO_4^o \quad (12)$$

$$SO_{4t} = SO_4^{=} + CaSO_4^o + MgSO_4^o \quad (13)$$

*Electroneutralité

$$2.(Ca^{++} + Mg^{++} - SO_4^{=} - CO_3^{=}) + Na^+ + H^+ - HCO_3^- - OH^- - Cl^- = 0 \quad (14)$$

pCO_2 ou pH étant connu, on a à résoudre un système de 14 équations à 14 inconnues.

1.2. Organisation du calcul

L'activité des ions libres est obtenue en multipliant la concentration de ces derniers par leur coefficient d'activité.

Le coefficient d'activité est calculé avec l'expression de DEBYE ET HUECKEL. Dans cette expression apparaît la force ionique de la solution étudiée.

La détermination de la force ionique requiert la connaissance préalable des concentrations de toutes les espèces chargées ; les paires d'ions envisagées dans ce travail étant neutres, les espèces chargées correspondent aux ions libres en solution.

Or pour calculer les concentrations des ions libres, il faut connaître la distribution des espèces totales en paires d'ions et ions libres : le calcul de cette distribution suppose connues les activités des ions libres.

Le calcul est donc apparemment insoluble.

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

a) Force ionique

Etape 1
.....

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

- on calcule une première distribution,
- on en déduit un premier jeu de concentrations et activités des ions libres,
- on calcule une première force ionique I_1 .

Etape 2
.....

- on calcule les coefficients d'activité en utilisant I_1 ,
- on calcule une deuxième distribution,
- on en déduit un deuxième jeu de concentrations et activités des ions libres,
- on calcule une deuxième force ionique I_2 .

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

$$\frac{I_j^{1/2} - I_{j+1}^{1/2}}{I_j^{1/2}} \text{ inférieur ou égal à } 0,005$$

Le calcul de distribution proprement dite est donc répété à chaque itération sur la force ionique. Il consiste en deux boucles de calcul imbriquées, l'une destinée à déterminer la PCO_2 ou le pH et les concentrations des espèces carbonatées, l'autre à "ventiler" les concentrations totales de CO_3^{--} , Ca^{++} , Mg^{++} et SO_4^{--} en ions libres et paires d'ions.

b) PCO_2 (ou pH) et espèces carbonatées

pH étant connu, le calcul est initialisé avec une PCO_2 arbitraire (10^{-3}). Si c'est la PCO_2 qui est donnée initialement, le calcul est initialisé avec un pH arbitraire (6,5).

On en déduit en activités des espèces carbonatées correspondant à la valeur arbitraire de PCO_2 ou pH :

$$|H_3O^+| = 10^{-pH}$$

$$|H_2CO_3| = K_0 \cdot PCO_2$$

$$|HCO_3^-| = K_1 \cdot |H_2CO_3| / |H_3O^+|$$

$$|CO_3^{--}| = K_2 \cdot |HCO_3^-| / |H_3O^+|$$

$$|OH^-| = K_w / |H_3O^+|$$

Les valeurs ainsi calculées ne sont pas réalistes. Elles sont toutefois utilisées dans un premier temps pour le calcul de la distribution des paires d'ions. Toutes les espèces étant ainsi déterminées, on calcule le bilan électrique EN_1 (éq. 14).

On incrémente ensuite pH ou $\log PCO_2$ de + 0,5 et on répète le calcul. On en déduit un bilan électrique EN_2 .

*Si EN_2 est d'un signe différent de EN_1 , on répète le calcul avec des incréments successifs de - 0,1. jusqu'à un deuxième changement de signe.

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

*Si EN_2 est du signe de EN_1 , mais plus grand, on répète le calcul avec des incréments successifs de - 0,5 jusqu'à obtention du changement de signe. On est ramené au premier cas.

Un deuxième changement de signe de EN étant obtenu, on répète encore le calcul en divisant l'incrément utilisé par - 5 jusqu'à un 3ème changement de signe, etc. jusqu'au 5ème changement de signe. pH ou pCO_2 est déterminé à 0,0008 unités près :

$$pH \text{ initial} = 6,5 \text{ ou } \log PCO_2 = - 3$$

1er incrément $\pm 0,5$	\rightarrow	1er changement de signe	
2ème incrément $\pm 0,1$	\rightarrow	2ème " " "	
3ème incrément $\pm 0,02$	\rightarrow	3ème " " "	
4ème incrément $\pm 0,004$	\rightarrow	4ème " " "	
5ème incrément $\pm 0,0008$	\rightarrow	5ème " " "	\rightarrow STOP.

c) Paires d'ions

Au sein de chaque itération sur pH / PCO₂, on calcule les concentrations des paires d'ions :

|CO₃⁻⁻| a été déterminé à la suite de l'incrémentation de pH ou PCO₂.

On utilise une boucle de calcul convergente :

$$|\text{CaSO}_4^{\circ}| = |\text{Ca}_{j-1}^{++}| \cdot |\text{SO}_{4j-1}^{--}| / K_5$$

$$|\text{CaCO}_3^{\circ}| = |\text{Ca}_{j-1}^{++}| \cdot |\text{CO}_3^{--}| / K_4$$

$$\text{Ca}_{\text{pij}} = |\text{CaSO}_4^{\circ}| + |\text{CaCO}_3^{\circ}|$$

$$\text{Ca}_j^{++} = \text{Ca}_t / \left(1 + \frac{\text{Ca}_{\text{pij}}}{\text{Ca}_{j-1}^{++}}\right) \quad \text{et} \quad |\text{Ca}_j^{++}| = \gamma_{\text{Ca}} \cdot \text{Ca}_j^{++}$$

$$|\text{MgSO}_4^{\circ}| = |\text{Mg}_{j-1}^{++}| \cdot |\text{SO}_{4j-1}^{--}| / K_7$$

$$|\text{MgCO}_3^{\circ}| = |\text{Mg}_{j-1}^{++}| \cdot |\text{CO}_3^{--}| / K_6$$

$$\text{Mg}_{\text{pij}} = |\text{MgSO}_4^{\circ}| + |\text{MgCO}_3^{\circ}|$$

$$\text{Mg}_j^{++} = \text{Mg}_t / \left(1 + \frac{\text{Mg}_{\text{pij}}}{\text{Mg}_{j-1}^{++}}\right) \quad \text{et} \quad |\text{Mg}_j^{++}| = \gamma_{\text{Mg}} \cdot \text{Mg}_j^{++}$$

$$\text{SO}_{4\text{pij}} = |\text{CaSO}_4^{\circ}| + |\text{MgSO}_4^{\circ}|$$

$$\text{SO}_{4j}^{--} = \text{SO}_{4t} / \left(1 + \frac{\text{SO}_{4\text{pij}}}{\text{SO}_{4j-1}^{--}}\right) \quad \text{et} \quad |\text{SO}_{4j}^{--}| = \gamma_{\text{SO}_4} \cdot \text{SO}_{4j}^{--}$$

Lors du premier passage, on ne dispose pas de valeurs de |Ca_{j-1}⁺⁺|, |Mg_{j-1}⁺⁺| et |SO_{4j-1}⁻⁻|. On utilise les concentrations totales (γ est égal à 1).

Au sein d'une même boucle du calcul de pH ou PCO₂, l'ensemble de calcul des paires d'ions est répété jusqu'à ce que chaque sous-ensemble (Ca, Mg, SO₄) fournisse deux calculs successifs identiques de Ca_j⁺⁺, Mg_j⁺⁺, et SO_{4j}⁻⁻.

On dispose alors d'une estimation cohérente (du point de vue de la masse mais pas nécessairement de la charge électrique) de HCO₃⁻, CO₃⁻⁻, OH⁻, H₃O⁺, Ca⁺⁺, Mg⁺⁺, SO₄⁻⁻. Par ailleurs Cl_t⁻ et Na_t⁻ sont connus. On peut alors calculer le bilan électrique EN et retourner au début de la boucle du calcul de pH ou PCO₂ pour une nouvelle incrémentation.

Le pH ou la pCO_2 ayant été déterminé avec la précision prévue, on a une distribution cohérente du point de vue de la masse et de la charge. Toutefois les coefficients d'activité utilisés ne sont pas nécessairement exacts tant que la force ionique n'est pas déterminée avec précision. A l'issue de la boucle sur pH et PCO_2 on retourne au début de la boucle force ionique pour une répétition générale des calculs jusqu'à ce que le test de convergence de la force ionique soit positif.

2. Instructions d'utilisation (SHARP PC 1251)

2.1. Chargement du programme

Interrupteur REMOTE en position OFF
 Interrupteur PRINT en position ON
 Sélecteur de MODE en position PRU

Introduire la cassette, face A et enroulement à droite, dans le lecteur. Si nécessaire, rebobiner.

Enfoncer la touche PLAY: la cassette commence à se dérouler. Dès qu'on entend un son aigu et continu, mettre l'interrupteur REMOTE en position ON. La cassette s'arrête.

Ecrire le message CLOAD"ACTIVE" et enfoncer la touche "ENTER": La cassette recommence à tourner et on entend de nouveau le son aigu puis un grésillement. La cassette s'arrête automatiquement lorsque le programme est chargé. Mettre l'interrupteur REMOTE sur OFF, arrêter le lecteur et retirer la cassette.

2.2. Lancement de l'exécution et introduction des données initiales.

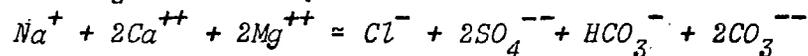
Sélecteur de MODE en position RUN

Ecrire le message RUN et enfoncer la touche "ENTER":
 Le message JHC= apparaît sur l'écran.

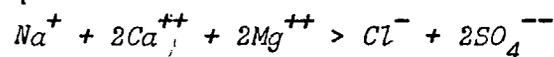
Introduire la valeur 1 ou 2 (suivi de "ENTER") selon que l'on veut effectuer le calcul à pH fixé ou PCO₂ fixée.

Apparaissent ensuite les messages successifs: NAT=, CAT=, MGT=, CLT=, S04T=. Après chaque message, introduire les concentrations correspondantes (en moles/litre) en enfonçant la touche "ENTER" après avoir écrit chaque valeur numérique.

N.B. Une des activités du programme est de rechercher les molalités de HCO₃⁻ et CO₃⁻⁻ en équilibre avec pH et PCO₂ et telles que l'on ait:



On doit donc introduire des données initiales telles que:



Si tel n'est pas le cas, devant l'impossibilité de calculer HCO₃⁻ + 2CO₃⁻⁻ ≤ 0, le calcul sera abandonné avec le message d'erreur: PAS DE CONVERGENCE DE L'ELECTRONEUTRALITE.

2.3. Déroulement du calcul

Le message ITERATION est imprimé chaque fois qu'une boucle générale de calculs (convergence Force Ionique: 28-510) est entreprise. Il faut compter de 2 à 4 itérations pour le traitement d'une eau naturelle. A l'issue de la dernière boucle, les données initiales et les résultats du traitement sont imprimés.

2.4. Relancement

Il suffit de réécrire le message RUN pour relancer les calculs en vue du traitement des analyses d'une autre eau.

3. Identification des variables utilisées

ACTIVE (BASIC)		EQU SOL (FORTRAN IV)
A	Switch:calcul pH fixé/PCO ₂ fixée	JHC
B	pH ou PCO ₂	PHCO2
C	Ca _t (moles/l)	CAT
D	Mg _t "	MGT
E	Na _t "	NAT
F	Cl _t "	CLT
G	H ₂ CO ₃ ^o (molarité/activité)	H2CO3
H	H ⁺ (activité)	H
I	Na ⁺ "	ANA
J	Nombre itérations boucle paires d'ions Mg	ITMG
K	Cl ⁻ (activité)	ACL
L	Racine carrée force ionique	SM
M	HCO ₃ ⁻ (activité)	HC03
N	CO ₃ ⁻⁻ "	C03
O	OH ⁻ "	OH
P	CaSO ₄ ^o (molarité/activité)	CAS04
Q	CaCO ₃ " "	CAC03
R	Ca ⁺⁺ (activité)	CA
S	SO ₄ _t (moles/l)	S04T
T	MgSO ₄ ^o (molarité/activité)	MGS04
U	MgCO ₃ " "	MGC03
V	Mg ⁺⁺ (activité)	MG
W	SO ₄ ⁻⁻ "	S04
X	Nombre itérations boucle paires d'ions SO ₄	IT3
Y	" " " " " Ca	ITCA
Z	Incrément pH ou PCO ₂	Z
A(27)	Somme des charges positives (données init.)	SOMC
A(28)	Somme des charges négatives "	SOMA
A(29)	Valeur absolue de .0001.A(27) ou .0001.A(28)	ELN

A(30)	pH	PH
A(31)	PCO ₂	PCO2
A(32)	Ca ⁺⁺ (activité) (=R)	CAP
A(33)	Racine carrée force ionique (=L)	PSM
A(34)	Mg ⁺⁺ (activité) (=V)	MGP
A(35)	Coefficient activité HCO ₃ ⁻	GHC03
A(36)	" " CO ₃ ⁻⁻	GC03
A(37)	" " Ca ⁺⁺	GCA
A(38)	" " Mg ⁺⁺	GMG
A(39)	" " SO ₄ ⁻⁻	GS04
A(40)	" " H ⁺	GH
A(41)	" " OH ⁻	GOH
A(42)	Signe de l'incrément de pH ou PCO ₂	SIGN
A(43)	Valeur initiale de pH ou PCO ₂	OVAR
A(44)	Nb. divisions /5 de l'incrément pH ou PCO ₂	IT
A(45)	Nb. total incréments pH ou PCO ₂	IVAR
A(46)	Switch utilisé dans l'incrément pH/PCO ₂	IS
A(47)	Valeur intermédiaire du pH ou PCO ₂	VAR
A(48)	HCO ₃ ⁻ (concentration)	CHC03
A(49)	CO ₃ ⁻⁻ "	CC03
A(50)	OH ⁻ "	COH
A(51)	H ⁺ "	CH
A(52)	SO ₄ ⁻⁻ "	PS
A(53)	Cl ⁻ "	CL
A(54)	Ca ⁺⁺ "	CCA
A(55)	Mg ⁺⁺ "	CMG
A(56)	Na ⁺ "	NA
A(57)	SO ₄ ⁻⁻ " (A(52))	CS04
A(58)	Ca immobilisé dans paires d'ions Ca	CAIP
A(60)	Mg " " " Mg	MGIP
A(61)	SO ₄ " " " SO ₄	SO4IP
A(62)	Somme équiv. cations - somme équiv. anions	EN
A(64)	Idem A(62)	OEN
A(66)	Force ionique	M
A(67)	Produit activités Ca ⁺⁺ .CO ₃ ⁻⁻	KSCACO
A(68)	Produit activités Ca ⁺⁺ .SO ₄ ⁻⁻	KSCASO
A(69)	SAR activités solution finale	SAR
A(70)	Coefficient activité Na ⁺	GNA
A(71)	" " Cl ⁻	GCL

4. Texte du programme ACTIVE (BASIC SHARP)

active 10

(Traduction et adaptation pour SHARP PC 1251 du programme EQU SOL (FORTRAN IV) de J.E. DUFEY et al., 1979)

```

1: CLEAR : INPUT "JHC="
  :A, "PHCO2=";B, "CAT="
  :C, "MGT=";D, "NAT=";E
  , "CLT=";F, "SO4T=";S
2: PRINT = LPRINT
3: A(27)= ABS (2*(C+D)+
  E):A(28)= ABS (2*S+F
  ): IF A(27)>A(28)
  LET A(29)=A(27):
  GOTO 7
6: A(29)=A(28)
7: A(29)=A(29)/10000:
  IF A(29)<1E-06 LET A
  (29)=1E-06
8: IF A>1 GOTO 12
10: A(30)=R:H="10^(-A(30)
  )": GOTO 14
12: A(31)=R:G=A(31)*3.38
  E-2
14: A(33)=L:A(53)=F:A(54
  )=O:A(55)=D:A(56)=E:
  A(57)=S:R=C:V=D:w=S
28: PRINT "ITERATION"
30: A(35)=4.5:A(36)=4.5:
  A(37)=6:A(38)=8:A(39
  )=4:A(40)=9:A(41)=3.
  5
32: FOR X=35 TO 41:A(X)=
  10^(-.509*4*L/(1+(.3
  29*L*A(X)))): NEXT X
34: A(35)=A(35)^.25:A(40
  )=A(40)^.25:A(41)=A(
  41)^.25
40: A(42)=1:Z=.5: IF A>1
  GOTO 46
45: A(43)=3: GOTO 47
46: A(43)=6.5
47: A(44)=0:A(45)=0:A(46
  )=0
50: A(47)=A(43)+Z*A(42):
  A(45)=A(45)+1: IF A(
  45)>625 GOTO 370
52: IF A(47)<0 GOTO 370
54: IF A(47)>14 GOTO 370
56: IF A>1 GOTO 60
58: A(31)=10^(-A(47)):G=
  A(31)*3.38E-2: GOTO
  70
60: H=10^(-A(47))
70: M=4.467E-7*G/H:N=4.6
  77E-11*M/H:O=1E-14/H
80: A(48)=M/A(35):A(49)=
  N/A(36):A(50)=O/A(41
  ):A(51)=H/A(40):A(52
  )=A(57)

```

*introduction données initiales**bilan électrique initial**calcul à pH fixé**calcul à PCO₂ fixée**initialisation concentrations
et activités espèces libres
non carbonatées
DEBUT BOUCLE FORCE IONIQUE**calcul coefficients d'activité**initialisation incrément pH, PCO₂**initialisation PCO₂
initialisation pH**DEBUT BOUCLE pH, PCO₂
incrémentation pH, PCO₂**calcul PCO₂
calcul H₂CO₃**calcul H₃O⁺
calcul concentrations
et activités espèces
carbonatées:
HCO₃⁻, CO₃²⁻, H₃O⁺, OH⁻*

```

90: X=1
100: IF C<=.00001 GOTO 16
      0
110: A(32)=R
120: Y=1
130: P=R*W/4.9E-3: Q=R*N/3
      .29E-5: A(58)=P+Q: A(5
      4)=Q/(1+(A(58)/A(54)
      )): R=A(54)*A(37)
140: IF ((A(32)-R)/A(32))
      <=.01 GOTO 160
145: A(32)=R
150: Y=Y+1: IF Y>30 GOTO
      160
155: GOTO 130
160: IF D<=.00001 GOTO 22
      0
170: A(34)=V
180: J=1
190: T=V*W/5.88E-3: U=V*N/
      4.0E-4: A(60)=T+U: A(5
      5)=U/(1+(A(60)/A(55)
      )): V=A(55)*A(38)
200: IF ((A(34)-V)/A(34))
      <=.01 GOTO 220
205: A(34)=V
210: J=J+1: IF J>30 GOTO
      220
215: GOTO 190
220: IF S<=.00001 GOTO 27
      0
230: A(61)=P+T: A(57)=S/(1
      +(A(61)/A(57))): W=A(
      57)*A(39)
240: IF ((A(52)-A(57))/A(
      52))<=.01 GOTO 270
250: A(52)=A(57)
260: X=X+1: IF X>30 GOTO
      270
265: GOTO 100
270: A(62)=2*(A(54)+A(55)
      -A(57)-A(49))+A(56)+
      A(51)-A(53)-A(48)-A(
      50)
280: IF ABS A(62)<A(29)
      GOTO 370
290: IF A(45)<=1 GOTO 360
300: IF A(62)*A(64)>=0
      GOTO 330
310: A(44)=A(44)+1: A(46)=
      1: IF A(44)>4 GOTO 3
      70
320: Z=Z/5: GOTO 350
330: IF A(46)=1 GOTO 360
340: IF ABS A(62)< ABS A(
      64) GOTO 360
350: A(42)=-A(42)
360: A(43)=A(47): A(64)=A(
      62): GOTO 50

```

Début boucle Paires d'ions
début boucle Ca^{2+}

calcul de CaCO_3° , CaSO_4°
et des concentration et
activité de Ca^{2+}

fin boucle Ca^{2+}

début boucle Mg^{2+}

calcul de MgCO_3° , MgSO_4°
et des concentration et
activité de Mg^{2+}

fin boucle Mg^{2+}

début boucle SO_4^{2-}

calcul des concentration
et activité de SO_4^{2-}

fin boucle SO_4^{2-}

Fin boucle Paires d'ions
calcul bilan électrique

options de sortie de la boucle
 pH , PCO_2
décisions d'incrémentations de
 pH ou PCO_2

FIN BOUCLE pH , PCO_2

```

370:IF A(45)>625 PRINT *
      SYSTEME IMPOSSIBLE*:
      STOP
380:IF A(47)>14 PRINT *P
      AS DE CONVERGENCE DE
      L ELECTRONEUTRALITE
      *: STOP
390:IF A(47)<0 PRINT *PA
      S DE CONVERGENCE DE
      L ELECTRONEUTRALITE*
      : STOP
400:A(30)=- LOG H
410:A(66)=2*(A(54)+A(55)
      +A(49)+A(57))+.5*(A(
      56)+A(53)+A(51)+A(50)
      )+A(48))
420:L=F(A(66))
430:IF (L+A(33))=0 GOTO
      470
440:IF (L*A(33))=0 GOTO
      460
450:A(59)= ABS (1-A(33)/
      L)-.005: GOTO 480
460:A(59)=1: GOTO 480
470:A(59)=0
480:IF A(59)<=0 GOTO 520
490:A(33)=L
510:GOTO 28
520:A(70)=10^(-.509*L/(1
      +(.329*4.5*)))
530:A(71)=10^(-.509*L/(1
      +(.329*3*L)))
540:I=A(56)*A(70):K=A(53
      )*A(71):A(67)=P*N:A(
      68)=R*W
580:A(69)=J(R+V):A(69)=I
      /A(69):A(69)=A(69)*1
      0^1.5
620:PRINT * *
630:PRINT *DONNEES INIT
      IALES*
640:PRINT *JHC= *A
650:PRINT *PHCO2 *B
660:PRINT *NAT *I: USING
      *II,IIII*F: *MOLES/L
      *
670:PRINT *CAT *C: *MOLE
      S/L*
680:PRINT *MGT *D: *MOLE
      S/L*
690:PRINT *CLT *F: *MOLE
      S/L*
700:PRINT *SO4T *S: *MOLE
      S/L*
710:PRINT * *

```

impression messages d'erreur

*calcul pH
calcul force ionique*

*test de convergence de
la force ionique*

SORTIE DES BOUCLES FORCE IONIQUE

RETOUR DEBUT BOUCLE FORCE IONIQUE

calcul SAR

*fin des calculs
DEBUT IMPRESSION SORTIES*

données initiales

```

720:PRINT '*DISTRIBUTION
      ESPECES*'
730:PRINT '      MOLALITE
      S ACTIVITES*'
740:PRINT 'NA  *%A(56):I
750:PRINT 'CA  *%A(54):R
760:PRINT 'MG  *%A(55):V
770:PRINT 'H   *%A(51):H
780:PRINT 'OH  *%A(50):O
790:PRINT 'CL  *%A(53):K
800:PRINT 'SO4 *%A(57):W
810:PRINT 'CO3 *%A(49):N
820:PRINT 'HCO3*%A(48):M
830:PRINT 'H2CO3  *%G
840:PRINT 'CACO3  *%Q
850:PRINT 'CASO4  *%P
860:PRINT 'MGC03  *%U
870:PRINT 'MGS04  *%T
875:PRINT ' '
880:PRINT '*SOLUTION*'
890:PRINT 'PH
      : USING 'III.III'%A(
      30)
900:PRINT 'FORCE IONIQUE
      %: USING 'II.III'%A
      (66)
910:PRINT 'PCO2
      *%A(31)
930:PRINT 'SAR
      *%A(69)
940:PRINT 'KSP CALCITE
      0.4E-08*
950:PRINT '%O (CA)(CO3)
      %: USING 'II.III'%A
      (67)
960:PRINT 'KSP GYPSE
      0.2E-04*
970:PRINT '%O (CA)(SO4)
      *%A(68)
975:PRINT 'ELECTRONEUTRA
      LITE RESID.EQUIV./LI
      TRE *%A(62)
980:PRINT ' '
990:PRINT '      AU PLAIS
      IR... '
999:END

```

*concentrations et activités
des espèces dans la solution
d'équilibre*

pH

force ionique

PCO₂

SAR

produit activités Ca⁺⁺. CO₃⁻⁻

produit activités Ca⁺⁺. SO₄⁻⁻

bilan électrique

FIN DES CALCULS

5. Exemple d'exécution

ITERATION
 ITERATION
 ITERATION

*DONNEES INITIALES

JAC= 2.
 PCO2 0.011
 NAT 8.450E-03MOLES/L
 CAT 3.550E-03MOLES/L
 MGT 1.910E-03MOLES/L
 CLT 1.420E-02MOLES/L
 SO4T 7.300E-04MOLES/L

*DISTRIBUTION ESPECES

	MOLALITES	ACTIVITES
NA	8.450E-03	7.281E-03
CA	3.294E-03	1.881E-03
MG	1.846E-03	1.098E-03
H	6.402E-08	5.649E-08
OH	2.067E-07	1.770E-07
CL	1.420E-02	1.211E-02
SO4	5.568E-04	3.032E-04
CO3	4.412E-06	2.433E-06
HCO3	3.411E-03	2.939E-03
H2CO3	3.718E-04	
CACO3	1.392E-04	
CASO4	1.164E-04	
MGCO3	6.666E-06	
MGSO4	5.667E-05	

*SOLUTION

PH 7.248
 FORCE IONIQUE 2.443E-02
 PCO2 1.100E-02
 SAR 4.217E 00
 KSP CALCITE 0.4E-08
 Q (CA)(CO3) 4.580E-09
 KSP GYPSE 0.2E-04
 Q (CA)(SO4) 5.707E-07
 ELECTRONEUTRALITE RESID.
 EQUIV./LITRE -2.047E-06

AU PLAISIR...

R E G R E S

1. Généralités

Le programme REGRES permet de calculer et d'optimiser des corrélations linéaires:

$$1 \quad Y = A X + B$$

$$2 \quad Y = A \log X + B$$

$$3 \quad \log Y = A X + B$$

$$4 \quad \log Y = A \log X + B \quad \text{soit } Y = C X^A \quad (\text{avec } C = 10^B)$$

La capacité est limitée à 36 couples X, Y. Ces derniers sont introduits de façon à constituer un fichier de base, imprimé par l'ordinateur, chaque couple étant affecté d'un numéro d'ordre. Une première régression est alors calculée.

Par la suite, il est possible de tenter d'améliorer les résultats en éliminant progressivement les couples de valeurs les moins satisfaisants (1). On peut recalculer une corrélation autant de fois qu'il est nécessaire après suppression de un ou plusieurs couples de valeurs. Les numéros d'ordre des couples éliminés et le nombre de couples utilisés pour chaque calcul sont imprimés par l'ordinateur.

2. Eléments du calcul

Pour une série de couples de valeurs x_i, y_i on calcule les coefficients de la droite de régression. (Le même calcul peut être effectué avec les $\log x_i$ et $\log y_i$)

$$\text{pente: } A = \frac{\sum x_i \cdot y_i - n \cdot \bar{x} \cdot \bar{y}}{\sum x_i^2 - n \cdot \bar{x}^2}$$

n = nombre de couples

$$\bar{x} = \frac{\sum x_i}{n}$$

$$\bar{y} = \frac{\sum y_i}{n}$$

$$y (x=0): B = \bar{y} - A \cdot \bar{x}$$

$$\text{coef. corrél.: } R = \frac{\sum x_i^2 - n \cdot \bar{x}^2}{\sqrt{(\sum x_i^2 - n \cdot \bar{x}^2)(\sum y_i^2 - n \cdot \bar{y}^2)}}$$

(1) Il n'est pas possible de modifier ou rajouter des couples X, Y en cours d'exécution. Si le cas se présentait, il faudrait réintroduire toutes les données.

3. Instructions d'utilisation du programme (sur SHARP PC 1211)

3.1. Chargement du programme

Interface CE 122: Power, Print et Remote sur "ON"

Lecteur de cassettes: Touche PLAY enfoncée et cassette rebobinée

Ordinateur: mode "DEF"

Ecrire le message: CLOAD"REGRES"

Enfoncer la touche "ENTER"

Lorsque le lecteur de cassettes s'arrete, enfoncer la touche "STOP"

3.2. Exécution

a) Lancement

Enfoncer la touche jaune "SHFT" puis la touche "A". Lorsque le message "OPTION CHOISIE?" apparait sur l'écran, introduire le chiffre correspondant à la formule sélectionnée, selon les indications du "MENU" imprimé par l'ordinateur.

b) Introduction des données

Lorsque le message "X,Y" apparait sur l'écran, introduire la donnée X (valeur, ENTER) et après apparition du "?" la donnée Y. Introduire ainsi tous les couples X, Y. Après introduction du dernier couple, enfoncer les touches "SHFT" et "B" sans porter attention au message "X,Y" figurant sur l'écran. Ce message disparaît.

c) Correction du fichier

L'ordinateur émet alors un triple signal sonore en meme temps qu'apparait sur l'écran le message: "POINT A ELIMINER ?". Si l'on désire écarter un ou plusieurs couples X, Y, répondre: "OUI" ENTER.

Apparait alors le message: "NO DU POINT A ELIMINER ?". Introduire alors le n° de fichier du premier couple à éliminer. Ce numéro est imprimé par l'ordinateur tandis que la question "POINT A ELIMINER ?" est répétée. On peut alors éliminer un autre couple etc.

Les corrections terminées, ou si aucune correction n'est souhaitée, répondre "NON" ENTER à la question "POINT A ELIMINER ?".

d) Résultats

A la suite de la réponse "NON", l'ordinateur imprime la valeur des coefficients de la régression et du coefficient de corrélation ainsi que le nombre de couples utilisés pour le calcul.

e) Retour au fichier pour corrections complémentaires

Si le résultat n'est pas satisfaisant et que l'on désire accéder au fichier pour de nouvelles corrections, enfoncer les touches: "SHFT" puis "B".

NOTA BENE

Les calculs pouvant faire intervenir la fonction $\log X$, il n'est pas possible d'introduire des données X ou Y nulles. Si le cas se présentait introduire 10^{-6} au lieu de 0.

4. Texte du programme

```

2:"A"PRINT "MA
X.: 36 POINT
S POUR 0 INT
R.1E-6FIN DA
TA ET COR-RE
CTION FICHIE
R:SHFT B"
5:PRINT "-----"
:PRINT "MENU
:":PRINT "1
Y=AX+B":
PRINT "2 Y=
A.LOGX+B":
PRINT "3 LO
GY=AX+E"
6:PRINT "4 Y=
B(**A)":
PRINT "-----"
8:CLEAR :INPUT
"OPTION CHOI
SIE? ":Z
10:PAUSE "DONNE
ES"
15:G=27:H=G+1:U
=1
16:INPUT "X,Y",
A(G),A(H)
17:PRINT USING
"####";U;" X
=";USING "##
##.###";A(G)
;" Y=";
A(H)
18:G=H+1:H=G+1:
U=U+1:GOTO 1
6
20:"B"BEEP 3:
INPUT "POINT
A ELIMINER?
":T#
21:IF T#="NON"
GOTO 26
22:INPUT "NO DU
PT.A ELIMIN
ER? ":S
23:A(25+(2*S))=
0
24:PRINT "PT. E
LIMINE:";
USING "###";
S:GOTO 20

```

Impression message d'instructions d'utilisation

Impression Menu

Introduction de l'indicateur du type de variable à utiliser (cf. lignes 35-50)

*Initialisation indicateurs de mémoires utilisées pour le fichier des données
Introduction des données; constitution fichier*

Impression des couples de valeurs X, Y avec leur numéro d'ordre

Incrémentation des indicateurs des mémoires et retour à l'introduction des données

Adresse à la fin de l'introduction des données ou de retour au fichier; signal sonore et décision de correction du fichier. Réponse OUI/NON

*Si réponse NON: calculs de corrélation
Si réponse OUI: correction
Introduction du n° du couple de valeurs à éliminer*

Mise à 0 du X du couple à éliminer

Impression du n° du couple éliminé

Retour en début de correction fichier

```

26:FOR A=9TO 14
27:A(A)=0
28:NEXT A
29:PRINT "----"
30:V=U-1:G=27:H
   =G+1
33:X=A(G):Y=A(H
   ):IF X=0GOTO
   120
35:IF Z=1GOTO 6
   0
36:IF Z=3GOTO 5
   0
40:X=LOG X:IF Z
   =2GOTO 60
50:Y=LOG Y
60:I=I+X:J=J+Y:
   K=K+X*X:L=L+
   X*Y:M=M+Y*Y:
   N=N+1
120:G=H+1:H=G+1:
   IF G<=(26+(2
   *V))GOTO 33
130:I=I/N:J=J/N
140:K=K-N*I:L=L-
   N*I:J=J-N*
   I:M=M-N*I
160:A=L/K:B=J-A*
   I:IF Z=4LET
   B=10^B
170:PRINT "A=";
   USING ".####
   ^";A:PRINT "
   B=";B
175:R=L/√(K*M)
180:PRINT "COEF.
   CORREL.: R
   =";R
185:PRINT " PTS.
   REELEMENT
   UTILISES: ";
   USING "####"
   ;N;" ----"
330:END

```

Mise à 0 des mémoires utilisées par les calculs de corrélation

Réactualisation des indicateurs des mémoires fichier pour lecture du 1^o couple X, Y
Lecture du fichier

Si X=0 le couple n'est pas utilisé

Transformation des données X, Y selon la valeur de l'indicateur du type de variable à utiliser (cf. lignes 5-8):

1→ X et Y; 2→ logX et Y; 3→ X et logY;
4→ logX et log Y et dans ce cas B → 10^B

Début des calculs de corrélation

Calcul des coefficients A et B
Si option 4: B → 10^B

Impression des sorties: A, B

Calcul coefficient de corrélation R
Impression R

Impression du nombre de couples utilisés dans le calcul

Fin des calculs

(Si nécessaire, retour direct au fichier pour corrections complémentaires avec SHFT B)

5. Exemple d'exécution

```

MAX.: 36 POINTS
POUR 0 INTR.1E-6
FIN DATA ET COR-
RECTION FICHER:
SHFT B

```

```

-----
MENU:

```

```

1 Y=AX+B
2 Y=A.LOGX+B
3 LOGY=AX+B
4 Y=B(X**A)

```

```

-----
1 X= 1.000
  Y= 2.000
2 X= 2.000
  Y= 4.000
3 X= 3.000
  Y= 6.000
4 X= 4.000
  Y= 8.000
5 X= 5.000
  Y= 9.000

```

```

-----
A= 1.8000E 00
B= 4.0000E-01
COEF. CORREL.:
R= 9.9388E-01
PTS. REELEMNT
UTILISES: 5

```

```

-----
PT. ELIMINE: 5

```

```

-----
A= 2.0000E 00
B= 0.0000E 00
COEF. CORREL.:
R= 1.0000E 00
PTS. REELEMNT
UTILISES: 4

```

P O L Y G R

1. Généralités

Le programme POLYGR permet d'ajuster une équation polynomiale du 3^e degré, de la forme $A_0 + A_1.X + A_2.X^2 + A_3.X^3 = Y$, à un graphe expérimental dans le cas où ce dernier est trop incurvé pour être assimilé à un ou plusieurs segments de droite.

Les données nécessaires au calcul sont les coordonnées X_0, Y_0 et X_1, Y_1 de deux points (suffisamment éloignés) du graphe ainsi que la valeur des tangentes dY_0/dX_0 et dY_1/dX_1 en ces points. La valeur de ces tangentes doit être mesurée avec le plus de précision possible sur le graphe expérimental: c'est elle qui commande la courbure du graphe de l'équation polynomiale.

Le programme offre à l'utilisateur la possibilité de vérifier la qualité de l'ajustement analytique en calculant l'ordonnée Y_i de tout point d'abscisse X_i et, le cas échéant, de répéter le calcul d'ajustement après modification de la valeur d'une ou des deux tangentes, jusqu'à obtention d'un résultat satisfaisant.

2. Eléments du calcul

Les coordonnées X_0, Y_0 et X_1, Y_1 et les tangentes dY_0/dX_0 et dY_1/dX_1 étant déterminées, un point quelconque du graphe, de coordonnées X, Y vérifie l'équation suivante:

$$Y = Y_0 + (dY_0/dX_0)(X-X_0) + \frac{\frac{Y_1 - Y_0}{X_1 - X_0} - dY_0/dX_0}{X_1 - X_0} \cdot (X-X_0)^2 + \frac{(dY_1/dX_1 + dY_0/dX_0) - 2 \cdot \frac{Y_1 - Y_0}{X_1 - X_0}}{(X_1 - X_0)^2} \cdot (X-X_0)^2 \cdot (X-X_1)$$

(Vérification: pour $X=X_1$, on a $Y=Y_1$)

En développant et en ordonnant, on obtient:

$$Y = B.X^3 + (A - 2B.X_0 - B.X_1)X^2 + (dY_0/dX_0 - 2A.X_0 + 2B.X_0.X_1 + B.X_0^2)X - Y_0 - (dY_0/dX_0).X_0 + A.X_0 - B.X_1.X_0^2$$

avec:

$$A = \frac{(Y_1 - Y_0) - (dY_0/dX_0)(X_1 - X_0)}{(X_1 - X_0)^2}$$

$$B = \frac{(dY_1/dX_1 + dY_0/dX_0)(X_1 - X_0) - 2.(Y_1 - Y_0)}{(X_1 - X_0)^3}$$

soit finalement:

$$Y = P_3.X^3 + P_2.X^2 + P_1.X + P_0$$

les polynômes P₀, P₁, P₂ et P₃ ne contenant que des termes connus..

3. Instructions d'utilisation du programme (sur SHARP PC 1211)

3.1. Chargement du programme

Interface CE 122: Power, Print et Remote sur "ON"

Lecteur de cassettes: Touche PLAY enfoncée et cassette rebovinée

Ordinateur: mode "DEF"

Ecrire le message CLOAD"POLYGR"

Enfoncer la touche ENTER

Après arrêt du lecteur de cassettes, enfoncer la touche "STOP".

3.2. Lancement et introduction des données

Enfoncer la touche jaune "SHFT" puis la touche "A". Lorsque le message "X0" apparait sur l'écran, inscrire la valeur correspondante puis enfoncer la touche ENTER. Procéder de même pour les données suivantes après apparition des messages successifs sur l'écran: Y₀, dY₀/dX₀, X₁, Y₁ et dY₁/dX₁.

3.3. Vérification

A la suite de l'équation polynomiale calculée, l'ordinateur imprime le message: VERIFICATION (SI VERIFICATION TERMINEE INTRODUIRE X=0) tandis que le message "X=" apparait sur l'écran. Après introduction de la valeur désirée, l'ordinateur imprime les valeurs de X et de Y calculé d'après l'équation et le message "X=" apparait de nouveau sur l'écran. Si l'on désire mettre un terme à la vérification, introduire la valeur 0. Apparait alors sur l'écran le message: SATISFAIT ? tandis qu'est émis un signal sonore. Si tel est le cas, répondre OUI. L'exécution est alors arrêtée.

3.4. Correction de la valeur des tangentes

Si la vérification a fait apparaître un ajustement inadéquat, il est possible de l'améliorer en corrigeant la valeur des tangentes dy_0/dx_0 et dy_1/dx_1 . Dans ce cas, à la question SATISFAIT ? répondre NON. Un double signal sonore est alors émis par l'ordinateur tandis que le message $DY_0/DX_0=$ apparaît sur l'écran. Introduire alors une nouvelle valeur le cas échéant ou répéter la valeur précédemment introduite. Procéder de même pour DY_1/DX_1 dès que le message correspondant apparaît sur l'écran.

L'ordinateur imprime ensuite le n° de l'essai d'ajustement puis les nouvelles valeurs des tangentes et la nouvelle équation polynomiale. Enfin le message VERIFICATION est imprimé et "X=" apparaît sur l'écran. Procéder alors comme indiqué au § 3.3. Si une nouvelle correction s'avère nécessaire, répondre NON à la question SATISFAIT ? etc.

2: "A" CLEAR	<i>Remise à 0 des mémoires</i>
5: PRINT "***** *****"	<i>Impression de commentaires introductifs</i>
10: PRINT "AJUST EMENT ANALY TIQUE -- GRAP HE QUELCONQU E"	
15: PRINT "----- -----"	
16: PRINT " D ATA: * COORDONNEES ET TANGENTE POUR 2 POINT S EXP."	
17: PRINT "----- -----"	
20: J=1: PRINT " ESSAI 1"	<i>Initialisation du compteur d'essais Impression du n° du premier essai</i>
35: PRINT " "	
40: INPUT "X0="; A, "Y0="; B	<i>Introduction de X0 et Y0</i>
50: PRINT "X0= " ; USING "###" #.###"; A; PRINT "Y0= " ; B	<i>Impression X0 et Y0</i>
80: INPUT "DY0/D X0="; C; PRINT "DY0/D X0="; C	<i>Introduction de dy0/dx0 Impression dy0/dx0</i>
100: PRINT " "	
110: INPUT "X1="; D, "Y1="; E	<i>Introduction de X1 et Y1</i>
120: PRINT "X1= " ; D; PRINT "Y1 = "; E	<i>Impression X1 et Y1</i>
150: INPUT "DY1/D X1="; F; PRINT "DY1/D X1="; F	<i>Introduction de dy1/dx1 Impression dy1/dx1</i>
170: PRINT ". "	
180: "B" IF J=1 GOTO 190	<i>Si 2° essai ou plus: corrections tangentes Si 1° essai: calcul de l'équation</i>
181: BEEP 2: INPUT "DY0/DX0="; C ; INPUT "DY1/ DX1="; F	<i>Signal sonore; introduction dy0/dx0 Introduction dy1/dx1</i>
182: PRINT USING "###"; J ESSAI"; J	<i>Impression du n° de l'essai (>1) et des nouvelles tangentes</i>
183: PRINT ". "	
185: PRINT "DY0/D X0="; USING " ###.###"; C	
186: PRINT "DY1/D X1="; F	
187: PRINT ". "	
190: G=D-A; H=E-B; I=F+C	<i>Calcul des coefficients de l'équation polynomiale</i>
200: S=((H-(C*G)) /(G*G))	
210: T=((I*G)-(2* H))/(G*G*G)	
220: U=S-(2*T*A)- (T*D)	
230: V=C-(2*S*A)+ (2*T*A*D)+(T *A*A)	
240: W=E-(C*A)+(S *A*A)-(T*D*A *A)	
245: J=J+1	<i>Incrémentation du compteur d'essais</i>

```

250:PRINT "EQUAT
      ION POLYNOMI
      ALE:"
260:PRINT "Y= ";
      USING "##.##
      #^";T;" X3"
265:K$="+":IF UK
      OLET K$="-"
267:L=ABS U
270:PRINT " ";K
      $;L;" X2"
275:K$="+":IF VK
      OLET K$="-"
277:L=ABS V
280:PRINT " ";K
      $;L;" X"
285:K$="+":IF WK
      OLET K$="-"
287:L=ABS W
290:PRINT " ";K
      $;L
300:PRINT "-----"
      "
310:PRINT "VERIF
      ICATION"
315:IF J>2GOTO 3
      25
320:PRINT "(SI V
      ERIFICATION
      TERMINEE INT
      RO- DUIRE X=
      0)"
325:PRINT " "
330:INPUT "X=";X
      :IF X=0GOTO
      375
340:Y=(T*X*X*X)+
      (U*X*X)+(V*X
      )+W
350:PRINT "X = "
      ;USING "####
      .###";X
360:PRINT " Y =
      ";Y
370:GOTO 330
375:PRINT "+++++
      ++++++"
380:BEEP 5:INPUT
      "SATISFAIT ?
      ";M$
390:IF M$="NON"
      GOTO 181
395:PRINT " A LA
      PROCHAINE"
400:PRINT "+++++
      ++++++"
420:END

```

Impression de l'équation polynomiale:

coefficient de X^3

*sélection du signe à imprimer devant
le coefficient de X^2*

*coefficient de X^2
sélection du signe à imprimer devant
le coefficient de X*

coefficient de X

*sélection du signe à imprimer devant
le terme constant*

terme constant

*Impression du message indiquant le début de
la vérification point par point
Si le n° de l'essai est >1 ne pas imprimer
l'instruction de fin de vérification
Impression de l'instruction de la manoeuvre
à effectuer pour arrêter la vérification
(exécutée seulement au 1° essai)*

*Introduction de X_i
Vérification arrêtée si $X_i=0$*

Calcul de Y_i

Impression de X_i et Y_i

*Retour en début de vérification
Sortie de la vérification*

*Message sonore; message à l'écran avec demande
de réponse OUI/NON
Si réponse NON: retour à la correction des tan-
gentes pour un nouvel essai
Si réponse OUI: fin du calcul et impression
message .*

5. Exemple d'exécution

```
*****
AJUSTEMENT ANALY
TIQUE -- GRAPHE
QUELCONQUE
-----
```

```
DATA:
*COORDONNEES ET
TANGENTE POUR 2
POINTS EXP.
-----
```

```
ESSAI 1
```

```
X0= 0.220
Y0= 20.000
DY0/DX0= 75.00
0
```

```
X1= 2.850
Y1= 90.000
DY1/DX1= 2.85
7
```

```
ÉQUATION POLYNOM
IALE:
```

```
Y= 3.560E 00 X3
- 3.010E 01 X2
+ 8.773E 01 X
+ 2.118E 00
```

```
-----
VERIFICATION
(SI VERIFICATION
TERMINEE INTRO-
DUIRE X=0)
```

```
X = 0.500
Y = 38.901
X = 1.000
Y = 63.300
X = 1.500
Y = 77.983
X = 2.500
Y = 88.887
X = 2.850
Y = 89.999
```

```
+++++++
ESSAI 2
```

```
DY0/DX0= 75.000
DY1/DX1= 3.030
```

```
ÉQUATION POLYNOM
IALE:
```

```
Y= 3.585E 00 X3
- 3.019E 01 X2
+ 8.776E 01 X
+ 2.115E 00
```

```
-----
VERIFICATION
```

```
X = 0.500
Y = 38.897
X = 1.000
Y = 63.272
X = 1.500
Y = 77.928
X = 2.500
Y = 88.842
X = 2.850
Y = 90.000
```

```
+++++++
A LA PROCHAINE
+++++++
```

C O R D E C

C O R L O G

1. Généralités

Il s'agit de programmes simples pour le calcul de régressions linéaires. Pour les deux programmes, le nombre de couples de valeurs X,Y que l'on peut traiter est illimité.

CORDEC calcule les coefficients de $Y = A X + B$

CORLOG calcule les coefficients de $\log Y = A \log X + b$

soit: $Y = B X^A$ (avec $b = \log B$)

Les éléments du calcul sont identiques à ceux du programme REGRES (§2).

Les programmes CORDEC et CORLOG permettent en outre de vérifier la précision de la régression en calculant la valeur de Y pour toute valeur de X.

2. Instructions d'utilisation (SHARP PC 1211)

2.1. Chargement

Lecteur de cassettes: PLAY, cassette en début du programme voulu

Interface CE 122: Power, print et remote sur "ON"

Ordinateur: mode "DEF"

Ecrire le message: CLOAD"CORDEC" (ou "CORLOG")

Enfoncer la touche "ENTER"

Après arrêt du lecteur de cassette, enfoncer la touche "STOP"

2.2. Exécution

Enfoncer successivement la touche jaune "SHFT" puis "A"

Lorsque le message "X,Y" apparait sur l'écran, introduire la donnée X (valeur, ENTER) et après apparition du "?" la donnée Y. Introduire ainsi tous les couples X, Y. Après introduction du dernier Y, enfoncer les touches "SHFT" puis "C" sans porter attention au message X,Y figurant sur l'écran. Ce message disparaît.

A la suite des résultats est imprimé le message "ESTIMATION" et le message "X=" apparait sur l'écran. Introduire la valeur désirée. Cette valeur et la valeur calculée de Y sont alors imprimées. Une nouvelle valeur de X est alors demandée. Pour arrêter la vérification, enfoncer la touche "ON/BREAK".

3. Texte du programme CORDEC et exemple d'exécution (BASIC SHARP)

```

5:"A":PRINT "F
  IN DATA: SHF
  T C-----"
12:FOR A=9TO 14
15:A(A)=0
17:NEXT A
20:INPUT "X,Y",
  X,Y
30:PRINT "X= ";
  USING "####
  ###.####"X;
  "Y= ";Y
60:I=I+X
70:J=J+Y
80:K=K+X*X
90:L=L+X*Y
100:M=M+Y*Y
110:N=N+1
120:GOTO 20
130:"C":PRINT "-
  ----":I=I/N:
  J=J/N
140:K=K-N*I*I:L=
  L-N*I*J
150:M=M-N*J*J
160:A=L/K:B=J-A*
  I
170:PRINT " A=";
  A:PRINT " B=
  ";B
175:R=L/4(K*M)
180:PRINT " R=";
  R
190:PRINT "-----
  "
210:PRINT "ESTIM
  ATION"
220:INPUT "X=";X
225:PRINT "X= ";
  X
230:Y=A*X+B
260:PRINT "Y= ";
  Y
270:GOTO 220
280:END

```

FIN DATA: SHFT C

```

-----
X=      1.0000
Y=      5.0000
X=     10.0000
Y=     50.0000
X=     20.0000
Y=    100.0000
-----
A=      4.9999
B=      0.0000
R=      0.9999

```

ESTIMATION

```

X=      4.0000
Y=     20.0000
X=      8.0000
Y=     40.0000

```

4. Texte du programme CORLOG et exemple d'exécution (BASIC SHARP)

```

10: "A": PRINT "F
      IN DATA: SHF
      T C-----"
12: FOR A=9 TO 14
15: A(A)=0
17: NEXT A
20: INPUT "X,Y",
      X,Y
30: PRINT "X= ";
      USING ".####
      #^";X;" Y= "
      ;Y
40: W=LOG X
50: Z=LOG Y
60: I=I+W
70: J=J+Z
80: K=K+W*N
90: L=L+W*Z
100: M=M+Z*Z
110: N=N+1
120: GOTO 20
130: "C": PRINT "-
      ----": I=I/N:
      J=J/N
140: K=K-N*I*I:L=
      L-N*I*J
150: M=M-N*J*J
160: A=L/K:B=J-A*
      I:B=10^B
170: PRINT " Y=";
      B:"* X**"
      ;USING "####
      .####";A
180: R=L/J(K*M)
190: PRINT " R=";
      USING "##.##
      ##";R
200: PRINT "-----
      "
210: PRINT "ESTIM
      ATION"
220: INPUT "X=";X
225: PRINT "X= ";
      USING "###.#
      #####";X
230: Y=X^A
240: Y=B*Y
260: PRINT "Y= ";
      Y
270: GOTO 220
280: END

```

FIN DATA: SHFT C

```

-----
X= 1.00000E 00
Y= 4.00000E 00
X= 5.00000E 00
Y= 2.00000E 01
X= 8.00000E 00
Y= 4.00000E 01

```

```

-----
Y= 3.90648E 00*
X** 1.0797
R= 0.9967
-----

```

```

ESTIMATION
X= 6.00000E 00
Y= 2.70382E 01
X= 1.20000E 01
Y= 5.71491E 01

```

T R A D A T

1. Généralités

Le programme TRADAT est destiné à préparer automatiquement le fichier de données initiales du programme SIMUL (Rieu, 1983). Il peut aussi être utilisé pour harmoniser les données courantes fournies par le laboratoire d'analyse pour un profil de sol de 180 cm maximum.

<u>Données labo.</u>	<u>Sorties TRADAT</u>
Densité apparente: da (g/cm ³) de 10 en 10 cm ou de 15 en 15 cm	da (g/cm ³) de 5 en 5 cm da moyen par strates de 15 cm
Teneur en eau: H (g/100g) ou θ (cm ³ /100cm ³) de 10 en 10 cm	H (g/100g) et θ (cm ³ /cm ³) de 5 en 5 cm Hauteur d'eau par strate de 15 cm
Solution du sol: Ca ⁺⁺ , Mg ⁺⁺ , Na ⁺ , HCO ₃ ⁻ , Cl ⁻ , SO ₄ ⁻⁻ en mé/100g ou mé/l dans extraits 1/2, 1/5 ou 1/10 données par strates de 15 cm	Ca ⁺⁺ , Mg ⁺⁺ , Na ⁺ , HCO ₃ ⁻ , Cl ⁻ , SO ₄ ⁻⁻ en moles/litre de solution du sol (pour la teneur en eau correspondant au profil hydrique) par strates de 15 cm
Calcaire calcaire total (g/100g) par strates de 15 cm	CaCO ₃ en moles/litre de solution du sol et par strates de 15 cm

2. Eléments du calcul

2.1. Normalisation de la profondeur du profil (sous-programme DAP)

En raison de la distribution en strates de 15 cm, la profondeur du profil réel est ramenée ou étendue à un multiple de 15 cm. On a la profondeur

$$Z = 15 \cdot \text{partie entière de } (\text{Prof. réelle} + 7)/15$$

Ainsi, une profondeur comprise entre 165 et 172 cm sera ramenée à 165 cm; une profondeur supérieure à 172 cm sera étendue à 180 cm.

2.2 Ventilation de la densité apparente (sous-programme DAP)

a) Données de 10 en 10

Les valeurs de d_a de 5 en 5 cm sont alternativement la donnée de laboratoire ou la moyenne arithmétique de deux données successives.

Ainsi, la valeur de $d_a(10-20)$ est attribuée à la cote 15 cm et la moyenne entre $d_a(0-10)$ et $d_a(10-20)$ à la cote 10 cm. On attribue à la base du profil la valeur de d_a 5 cm au-dessus et à la surface celle de d_a à la cote

b) Données de 15 en 15

La valeur de d_a à une profondeur égale à un multiple de 15 cm est la moyenne de deux données successives; les deux autres valeurs intermédiaires sont égales à la donnée du laboratoire.

Ainsi, la valeur de $d_a(15-30)$ est attribuée aux cotes 20 cm et 25 cm et la moyenne des valeurs de $d_a(0-15)$ et $d_a(15-30)$ à la cote 15 cm. On attribue à la base du profil la valeur de d_a 5 cm au-dessus et à la surface celle de d_a à la cote 5 cm.

c) Densité apparente moyenne par strate de 15 cm

On calcule une moyenne de 4 valeurs successives de d_a de 5 en 5 cm:

On a par exemple: $d_a(0-15) = (2.5d_{a0} + 5d_{a5} + 5d_{a10} + 2.5d_{a15})/15$

2.3. Ventilation de la teneur en eau (sous-programmes THETA ou THETA1)

a) Etablissement du profil hydrique de 5 en 5 cm

Les données sont distribuées de la même façon que pour la densité apparente (données de 10 en 10). On calcule ensuite suivant le type de donnée:

$$\theta = H \cdot d_a/100 \quad \text{ou} \quad H = \theta/d_a$$

b) Hauteur d'eau par strate de 15 cm

On calcule le stock dans chaque strate à partir de 4 valeurs successives de θ de 5 en 5 cm:

On a par exemple: $stock(15-30) = 2.5\theta_{15} + 5\theta_{20} + 5\theta_{25} + 2.5\theta_{30}$

2.4. Ventilation des compositions chimiques (sous-programmes COMPO, SITION, CHIM)

Les données de laboratoire sont multipliées par le coefficient:

$$\frac{15 \cdot d_a}{200 \cdot Stock \cdot z}$$

avec $z = 1$ pour les $\text{mé}/100\text{g}$ ou $\text{mé}/\text{l}$ dans extrait 1/10

$z = 2$ pour les $\text{mé}/\text{l}$ dans extrait 1/5

$z = 5$ pour les $\text{mé}/\text{l}$ dans extrait 1/2

2.5. Ventilation de la teneur en calcaire (sous-programme BECAL)

Si on prend un poids moléculaire de la calcite de 100g, les données du laboratoire doivent être multipliées par le coefficient:

$$\frac{15 \text{ . da . } 20}{200 \text{ . stock}}$$

3. Instructions d'utilisation du programme (sur SHARP PC 1211)

3.1. Chargement du programme

Interface CE 122: Power, Print et Remote sur "ON"

Lecteur de cassettes: Touche PLAY enfoncée, cassette rebobinée

Ordinateur: mode "RUN"

Ecrire le message: CLOAD"TRADAT"

Enfoncer la touche "ENTER"

La lecture et le chargement du premier sous-programme sont alors exécutés.

3.2. Lancement du calcul et exécution

Interface, lecteur de cassettes et ordinateur: inchangés

Ecrire le message "RUN"

Enfoncer la touche "ENTER"

Lire attentivement les instructions apparaissant à l'imprimante et introduire les données demandées sur l'écran lorsque le point d'interrogation apparait. Enfoncer la touche "ENTER" après chaque donnée.

N O T A B E N E

Le début du chargement en mémoire d'un programme enregistré sur cassette est facilement identifiable par le son particulier (semblable au signal morse ".-") émis par l'ordinateur. Si ce message n'est pas émis très clairement, le programme n'a pas été correctement identifié et n'est pas chargé.

Dans ce cas, sans rien toucher à l'ordinateur, arrêter la lecture de la cassette (STOP), rebobiner quelques tours (REW) et recommencer la lecture (PLAY).

Si le message "5....." apparaît sur l'écran et la cassette s'arrête, une erreur de chargement s'est produite.

Enfoncer la touche "ON/BREAK de l'ordinateur pour effacer le message de l'écran.

Interface CE 122: touche "Remote" sur "OFF"

Lecteur de cassettes: rebobiner jusqu'au début approximatif du programme à charger.

Interface CE 122: touche "Remote" sur "ON"

Lecteur de cassettes:"PLAY"

Ordinateur: Ecrire le message de chargement: "LOAD"nom du programme" et enfoncer la touche "ENTER".

4. Texte du programme (BASIC SHARP)

4.1. Sous-programme TRADAT

```

5:PRINT "+++++
+++++"
10:PRINT "PROGR
AMME TRADAT"
15:PRINT "
-----"
20:PRINT "TRAIT
EMENT DON- N
EES EXPERIME
N- TALES SOL
:"
30:PRINT "*PROF
ILS DENSITEA
PPARENTE ET
TE-NEUR EN E
AU DE 5EN 5
CM"
35:PRINT "*STOC
K D EAU ET D
A PAR STRATE
S DE 15 CM"
37:PRINT "*MOLA
RITES DANS L
A SOLUTION D
U SOL A LA
TENEUR EN EA
U THETA"
38:PRINT "PAR S
TRATES DE 1
5 CM"
39:PRINT " "
40:PRINT "A PAR
TIR DE :
-DA DE 10 EN
10 OU 15 E
N 15 ET THE
TA PONDERAL"
50:PRINT " OU
VOLUMIQUE
DE 10 EN 10
"
70:PRINT " -ANA
LYSES D EX-
TRAITS 1/2
1/5 OU 1/10
"
80:PRINT "+++++
+++++"
85:PRINT " "
87:PRINT " EX
ECUTION"
88:PRINT " "
90:CLEAR
100:CHAIN "DAP"

```

*Impression de commentaires
et instructions préliminaires*

```

5:PRINT "-----
":INPUT "PRO
FIL (CM)";X:
PRINT "PROFI
L ";USING "#
###";X;"CM"
7:X=15*INT ((X
+7)/15):
PRINT "PROF.
NORM.";X;"CM
"
10:PRINT " 1.
DENSITE AP-P
ARENTE"
20:PRINT "INPUT
S DA:";PRINT
"DE 10 EN 10
: Z=1";PRINT
"DE 15 EN 15
: Z=0"
25:PRINT " A P
ARTIR DE LAS
URFACE."
30:PRINT " SI
DONNEE MAN-Q
UANTE REDOUB
LERLA PRECED
ENTE."
40:PRINT "SORTI
ES: DA DE 5E
N 5"
60:PRINT "-----
"
80:INPUT "Z=";Z
85:Y=(X/5)+27
90:IF Z=1GOTO 2
26
92:U=X/15
100:PRINT "DA DE
15 EN 15: "
:USING "###"
;U;" DONNEES
-----"
110:FOR W=1TO U
120:PAUSE "DA-";
W:INPUT A(W)
130:NEXT W
150:V=27;W=1
160:A(V)=A(W)
170:V=V+1
180:A(V)=A(W)
190:A(V+1)=A(W)
195:IF A(W+1)=0
LET A(W+1)=A
(W)
200:A(V+2)=(A(W)
+A(W+1))/2
210:V=V+3;W=W+1
220:IF V<=YGOTO
180
225:GOTO 370
226:U=INT ((X+5)
/10)
230:PRINT "DA DE
10 EN 10: "
:USING "###"
;U;" DONNEES
-----"
250:FOR W=1TO U
260:PAUSE "DA-";
W:INPUT A(W)
270:NEXT W

```

```

280:V=27;W=1
290:A(V)=A(W)
300:V=V+1
310:A(V)=A(W)
315:IF A(W+1)=0
LET A(W+1)=A
(W)
320:A(V+1)=(A(W)
+A(W+1))/2
330:V=V+2;W=W+1
340:IF V<=YGOTO
310
370:PRINT "DENSI
TES APPARENT
ES (G/CM3)"
390:W=27;Z=0
395:IF W>63GOTO
420
400:PRINT USING
"####";Z;
USING "####"
##.###";A(W)
405:Z=5*(W-26);W
=W+1:IF W<=Y
GOTO 395
470:CHAIN "THETA
"

```

4.2. Sous-programme DAP

5-7 Normalisation profondeur profil

80 Sélection des données dA de 10 en 10
ou de 15 en 15

100-225 Ventilation de dA; données de 1 en 1

230-340 Ventilation de dA; données de 10 en 10

400-405 Impression dA de 5 en 5

```

1:PRINT "-----
"
2:PRINT "SI DO
NNEES THETA
OLUMIQUES IN
TRODUIRE Z=0
SINON Z=1"
3:PRINT "-----
"
4:INPUT "Z=";Z
:IF Z=0GOTO
190
5:X=15*INT ((X
+7)/15)
9:PRINT "INPUT
S: H POND.%(
DE 10 EN 10)
"
10:U=INT ((X+5)
/10);V=1;W=6
4:Q=27:P=3*(
X/15)+1
20:PRINT USING
"###";U;" D
ONNEES":
PRINT "-----
"
30:PRINT "SORTI
ES":PRINT "
TENEURS EN E
AU DE 5
EN 5":PRINT
"PROF H %
THETA"
40:PAUSE "H%";V
:INPUT R
45:Q=-5
50:Q=Q+5:A(W)=.
01*A(Q)*R:
PRINT USING
"####";Q;
USING "###.#
";R;USING "#
#.###";A(W)
:W=W+1:Q=Q+1
60:IF W=65GOTO
50
70:IF W=(63+P)
GOTO 50
80:IF W>(63+P)
GOTO 112
90:V=V+1:PAUSE
"H%";USING "
###";V:INPUT
S
95:Q=Q+5
100:T=(R+S)/2:A(
W)=.01*A(Q)*
T:PRINT
USING "####"
;Q;USING "##
#. #";T;USING
"###.###";A(
W)
110:R=S:W=W+1:Q=
Q+1:GOTO 50
112:W=27:N=X/15:
FOR V=27TO (
26+N)

```

```

130:A(V)=((2.5*(
A(W)+A(W+3))
)+(5*(A(W+1)
+A(W+2))))/1
5
140:W=W+3:NEXT V
150:W=64:FOR V=(
27+N)TO (26+
(2*N))
160:A(V)=(2.5*(A
(W)+A(W+3))
+(5*(A(W+1)+
A(W+2))))
170:W=W+3:NEXT V
180:CHAIN "COMPO
"
190:CHAIN "THETA
1"

```

4.3. Sous-programme THETA

4 Sélection des données pondérales ou volumiques

40-100 Ventilation H%, calcul θ et sorties de 5 en 5

110-140 Calcul de dA moyen par strate de 15 cm

150-170 Calcul du stock par strate de 15 cm

```

5: X=15*INT ((X
+7)/15)
9: PRINT "INPUT
S: THETA %
DE 10 EN 10)
"
10: U=INT ((X+5)
/10): V=1: W=6
4: Q=27: P=3*(
X/15)+1
20: PRINT USING
"###"; U; " D
ONNEES":
PRINT "-----
"
30: PRINT "SORTI
ES": PRINT "
TENEURS EN E
AU DE 5
EN 5": PRINT
"PROF. H. %
THETA"
40: PAUSE "THETA
"; V: INPUT R
45: Q=-5
50: Q=Q+5: A(W)=.
01*R: T=R/A(Q
): PRINT
USING "####"
; Q; USING "##
#. #"; T; USING
"###.###"; A(
W): W=W+1: Q=Q
+1
60: IF W=65 GOTO
50
70: IF W<(63+P)
GOTO 50
80: IF W>(63+P)
GOTO 112
90: V=V+1: PAUSE
"THETA";
USING "###";
V: INPUT S
95: Q=Q+5
100: T=(R+S)/2: A(
W)=.01*T: T=T
/A(Q): PRINT
USING "####"
; Q; USING "##
#. #"; T; USING
"###.###"; A(
W)
110: R=S: W=W+1: Q=
Q+1: GOTO 50
112: W=27: N=X/15:
FOR V=27 TO (
26+N)
130: A(V)=((2.5*(
A(W)+A(W+3))
)+(5*(A(W+1)
+A(W+2))))/1
5
140: W=W+3: NEXT V
150: W=64: FOR V=(
27+N) TO (26+
(2*N))
160: A(V)=(2.5*(A
(W)+A(W+3))
+(5*(A(W+1)+
A(W+2))))
170: W=W+3: NEXT V
180: CHAIN "COMPO
"

```

4.4. Sous-programme THETA1

*Ventilation 0%, calcul H% et sorties
de 5 en 5*

Calcul de dA moyen par strate de 15 cm

Calcul du stock par strate de 15 cm

4.5. Sous-programme COMPU

```

15:N=X/15
20:W=27:V=W+N:
  PRINT "-----
  "
30:PRINT "SORTI
ES: DA ET S
TOCK PAR STR
ATEDE 15. CM"
:PRINT " G/
CM3 CM3"
40:PRINT USING
"###.###";A(
W);USING "##
###.###";A(V
)
45:A(W)=15*A(W)
/(200*A(V))
50:W=W+1:V=V+1:
IF W<=(26+N)
GOTO 40
55:PRINT "*****
*****"
60:PRINT "VENTI
LATION COM-P
OSITIONS CHI
MI-QUES"
65:PRINT "-----
"
70:PRINT " INP
UTS: M
E/100G SOL:
Z=1ME/L EXTR
AIT : 1/10
: Z=1"
80:PRINT "1/5
: Z=21
/2 :
Z=5"
90:INPUT "Z=";Z
100:PRINT "ECH.
DE 15 EN 15"
110:PRINT USING
"####";N;" D
ONNEES PARES
PECE. DANS
L ORDRE: CA,
MG,NA,HCO3,C
L,SO4"
130:PRINT " SI
DONNEE MAN-Q
UANTE, REPET
ER LA PRECED
ENTE"
140:PRINT "-----
"
200:CHAIN "SITIO
N"

```

*Sorties de moyen et stock par strate de
15 cm*

*Calcul des coefficients de transformation
en moles/litre*

Sélection du type d'extrait

4.6. Sous-programme SITIUN

```

40: T=X/15: V=1: S
    $="CA": X=39
50: Y=1: W=27
70: PAUSE S#: "-"
    ; USING "###"
    ; Y
80: INPUT A(Y)
120: A(X)=A(Y)*A(
    W)/Z
125: X=X+1: Y=Y+1:
    W=W+1
140: IF W<=(26+T)
    GOTO 70
150: V=V+1
170: IF V=2 LET S#
    ="NG": GOTO 5
    0
180: IF V=3 LET S#
    ="NA": GOTO 5
    0
190: IF V=4 LET S#
    ="HCO3": GOTO
    50
200: IF V=5 LET S#
    ="CL": GOTO 5
    0
210: IF V=6 LET S#
    ="SO4": GOTO
    50
220: FOR X=(39+2*
    T) TO (38+5*T
    )
230: A(X)=2*A(X)
240: NEXT X
250: CHAIN "CHIMI
    C"

```

Introduction données espèces en solution

Calcul des molarités

4.7. Sous-programme CHIMIC

*Sorties : Molarité espèces dissoutes
par strate de 15 cm*

```

20:PRINT "MOLAR
      ITES DANS L
      A SOLUTION D
      U SOL PAR S
      TRATES DE
      15 CM."
30:FOR X=39TO (
      38+6*T)
40:IF X=39PRINT
      "CA
      -----"
50:IF X=(39+T)
      PRINT "MG
      -----"
60:IF X=(39+2*T)
      PRINT "NA
      -----"
      "
70:IF X=(39+3*T)
      PRINT "HCO3
      -----"
      "
80:IF X=(39+4*T)
      PRINT "CL
      -----"
      "
90:IF X=(39+5*T)
      PRINT "SO4
      -----"
      "
100:PRINT USING
      ".#####^";A(
      X)
110:NEXT X
120:PRINT "*****
      *****"
130:PRINT "VENTI
      LATION CAL-C
      ITE"
140:PRINT "-----
      ":PRINT " I
      NPUTS:"
150:PRINT "CALCA
      IRE TOTAL E
      N %"
160:PRINT USING
      "#####";T;"
      DONNEES PA
      R ESPECE":
      PRINT "-----
      "
170:CHAIN "BECAL
      "

```

4.8. Sous-programme BECAL

```

10: S$="CACO3":X
   =39:W=27
20: FOR Y=1 TO T
30: PAUSE S$: "-"
   ; USING "###"
   ; Y
40: INPUT A(Y)
50: A(X)=A(Y)*20
   *A(W)
60: W=W+1: X=X+1
70: NEXT Y
220: PRINT "  SORTIES:"
230: PRINT "CALCITE (MOLES/LS
   OLUTION DU SOL) PAR STRATE
   DE 15CM."
280: FOR X=39 TO 38+T
290: PRINT USING ".###^"; A(X)
300: NEXT X
310: PRINT "*****
   *****"
320: PRINT "*  BEST REGARDS *"
330: PRINT "*****
   *****"
340: END

```

Introduction données calcaire total %

Calcul molarités CaCO₃

Sorties: Molarités CaCO₃ par strate de 15 cm

Fin des calculs

5. Exemple d'exécution

PROGRAMME TRADAT

TRAITEMENT DON-
NEES EXPERIMEN-
TALES SOL :
*PROFILS DENSITE
APPARENTE ET TE-
NEUR EN EAU DE 5
EN 5 CM
*STOCK D EAU ET
DA PAR STRATES
DE 15 CM
*MOLARITES DANS
LA SOLUTION DU
SOL A LA TENEUR
EN EAU THETA
PAR STRATES DE
15 CM

A PARTIR DE :
-DA DE 10 EN 10
OU 15 EN 15 ET
THETA PONDERAL
OU VOLUMIQUE
DE 10 EN 10
-ANALYSES D EX-
TRAITS 1/2 1/5
OU 1/10

EXECUTION

PROFIL 42CM
PROF.NORM. 45CM
1. DENSITE AP-
PARENTE

INPUTS DA:
DE 10 EN 10: Z=1
DE 15 EN 15: Z=0
A PARTIR DE LA
SURFACE.

SI DONNEE MAN-
QUANTE REDOUBLER
LA PRECEDENTE.
SORTIES: DA DE 5
EN 5

DA DE 15 EN 15:
3 DONNEES.

DENSITES APPAREN-
TES (G/CM3)

0	1.500
5	1.500
10	1.500
15	1.500
20	1.500
25	1.500
30	1.500
35	1.500
40	1.500
45	1.500

SI DONNEES THETA
VOLUMIQUES INTRO-
DUIRE Z=0 SINON
Z=1

INPUTS: H POND.%
(DE 10 EN 10)
5 DONNEES

SORTIES
TENEURS EN EAU
DE 5 EN 5

PROF	H %	THETA
0	40.0	0.600
5	40.0	0.600
10	40.0	0.600
15	40.0	0.600
20	40.5	0.607
25	41.0	0.615
30	41.5	0.622
35	42.0	0.630
40	42.5	0.637
45	43.0	0.645

SORTIES: DA ET
STOCK PAR STRATE
DE 15 CM

G/CM3	CM3
1.500	9.000
1.500	9.168
1.500	9.506

VENTILATION COM-
POSITIONS CHIMI-
QUES

INPUTS:

ME/100G SOL: Z=1
ME/L EXTRAIT :
1/10 : Z=1
1/5 : Z=2
1/2 : Z=5

ECH. DE 15 EN 15
3 DONNEES PAR
ESPECE. DANS L
ORDRE: CA, MG, NA,
HCO3, CL, SO4

SI DONNEE MAN-
QUANTE, REPETER
LA PRECEDENTE

MOLARITES DANS
LA SOLUTION DU
SOL PAR STRATES
DE 15 CM.

CA
6.25000E-03
6.13496E-03
5.91715E-03

MG
6.25000E-03
6.13496E-03
5.91715E-03

NA
1.25000E-02
1.22699E-02
1.18343E-02

HCO3
1.25000E-02
1.22699E-02
1.18343E-02

CL
1.25000E-02
1.22699E-02
1.18343E-02

SO4
6.25000E-03
6.13496E-03
5.91715E-03

VENTILATION CAL-
CITE

INPUTS:

CALCAIRE TOTAL
EN %

3 DONNEES
PAR ESPECE

SORTIES:
CALCITE (MOLES/L
SOLUTION DU SOL)
PAR STRATE DE 15
CM,

2.5000E-01
2.4539E-01
2.3668E-01

* BEST REGARDS *
