

« PORSAL » MODELE DE PREVISION DE LA LOCALISATION DES SELS ET MINERAUX DANS LES MICRO-SITES DE LA POROSITE

V. VALLES ⁽¹⁾

RESUME

On propose un modèle physico-chimique prévoyant la localisation des sels dans un sol : « PORSAL ». Il prend en compte l'hétérogénéité des vitesses d'écoulement de l'eau dans la porosité et l'interaction chimique eau/sol, ce qui permet de prévoir la localisation des précipitations de minéraux suivant la taille des pores. Sa mise en œuvre sur un sol argileux et salé tunisien nécessite le calage de nombreux paramètres. Cependant, la distinction des différentes vitesses d'écoulement de l'eau dans la porosité permet de s'affranchir dans ce cas du coefficient de dispersion apparent qui peut être remplacé par le coefficient de diffusion moléculaire. Par rapport aux modèles convectif/dispersif habituellement utilisés, le gain de précision sur la localisation des sels est important. Malheureusement, la vérification du modèle n'est que partielle.

La simulation d'une alternance de dessèchement et d'irrigation avec l'eau de l'oued Merdjerdah indique une localisation de gypse dans les gros pores et une précipitation de calcite répartie dans l'ensemble de la porosité. L'étude expérimentale du lessivage du gypse contenu dans le sol argileux confirme les conclusions du modèle.

MOTS CLEFS : Porosité - Précipitation - Calcite - Gypse - Modélisation.

KEY WORDS : Porosity - Precipitation - Calcite - Gypsum - Modelisation.

INTRODUCTION

La nature minéralogique des minéraux précipitant dans un sol salé et l'évolution chimique de la solution du sol due à l'évaporation peuvent être prédites par des modèles géochimiques. Ainsi, la modélisation de l'interaction chimique minéraux/solution proposée par HELGESON (1968, 1970) a été perfectionnée par FRITZ (1975, 1981). Ces derniers modèles, dits « d'association ionique », reconnaissent les paires d'ions ; ils ont été appliqués aux sols salés par DROUBI (1976). Pour l'étude des saumures, les modèles « d'interaction ionique » (PITZER, 1973, 1975, 1979, 1980 ; PITZER et al., 1974 a et b ; GUEDARRI, 1984) sont particulièrement adaptés. Quel que soit leur type, ces modèles ne permettent pas de prévoir la localisation des minéraux et des sels dans le profil. Pour cela, ils doivent être couplés à des modèles de transfert d'eau et de soluté à l'exemple de ceux de DUTT et al. (1972) et PACHEPSKY (1987). La partie hydrodynamique de ces modèles physico-chimiques considère que tous les filets d'eau, s'écoulant à un moment et à une profondeur donnée, possèdent la même vitesse. De manière générale, les résultats des simulations sont acceptables en sol sableux. Par contre, en sol argileux, les prévisions sont assez peu conformes à la réalité pour de nombreuses raisons, et notamment à cause de la forte dispersion de la taille des pores en milieu argileux, ce qui induit une disparité des vitesses d'écoulement de l'eau au sein de la porosité. Cette approche, qui utilise les relations perméabilité/humidité et potentiel matriciel/humidité du sol, offre cependant l'avantage d'intégrer les caractéristiques porales du sol concerné.

(1) ENSAT - 145, avenue de Muret, 31076 Toulouse Cédex.

A l'opposé, l'approche capillariste des transferts d'eau consiste à déterminer les vitesses de l'eau dans les différents pores d'un réseau dont on détermine a priori les caractéristiques géométriques (THIRRIOT, 1981, 1982 a et b). Pour l'instant, ces modèles ne peuvent être appliqués à un cas concret, car ils schématisent trop le système poral des sols.

Un modèle physico-chimique d'un type nouveau, « PORSAL » (VALLES, 1985), est proposé. Il allie la prévision de l'interaction chimique eau/sol à une hydrodynamique qui reconnaît l'hétérogénéité des vitesses de l'eau au sein de la porosité. Il prend en compte la complexité géométrique du système poral du sol étudié, de manière globale, par l'intermédiaire des caractéristiques hydrodynamiques déterminées in situ.

Les buts recherchés sont une prévision acceptable de la localisation des sels dans un sol argileux et une compréhension de certains mécanismes responsables de la distribution des minéraux dans l'espace poral.

Un sol argileux de la basse vallée de l'oued Medjerdah en Tunisie est utilisé pour caler puis mettre en œuvre le modèle.

I - PRESENTATION DU MODELE « PORSAL »

A) Les hypothèses retenues

On considère les transferts d'eau suivant la seule direction verticale dans le sol supposé non gonflant et en conditions isothermes.

La porosité du sol comporte des pores de tailles variables. L'eau occupe les plus petits pores qui lui sont offerts conformément aux différents modèles d'adsorption de vapeur dans un solide poreux (FOSTER, 1932 ; BARRET et al., 1951 ; PIERCE, 1953 ; DELON et DELLYES, 1967). On regroupe les pores de diamètres voisins en classes énergétiques ou fractions de la porosité. Le modèle « PORSAL » est conçu pour prendre en compte deux ou trois classes de pores de diamètres différents. Conformément aux modèles capillaristes et à la loi de Poiseuille, on estime que dans chaque classe de pores le flux d'eau est proportionnel au gradient de potentiel total.

On suppose aussi que l'évapotranspiration est répartie dans la zone d'absorption racinaire et qu'elle décroît linéairement de la surface vers la profondeur. A chaque cote, elle concerne l'eau la moins liée au sol.

Les transferts de solutés sont déterminés dans chaque classe de pores par des phénomènes de convection et de dispersion longitudinale. On montrera ultérieurement que les hypothèses relatives au transfert d'eau imposent la prise en compte d'échange d'eau entre les différentes classes de tailles de pores et donc de mouvement convectif de soluté entre les fractions de la porosité. On suppose, de plus, que l'échange de soluté par diffusion entre les fractions de la porosité est proportionnel à la différence de concentration qui le provoque.

Le profil est divisé en tranches de même épaisseur. Dans chacune d'elles, l'environnement minéralogique de chaque classe de pores est supposé en équilibre chimique avec les solutions qui les remplissent ; on néglige tout aspect cinétique. On envisage la présence éventuelle de calcite, de magnésite, de dolomite, de gypse, de mirabilite et de halite, et l'existence d'échanges de sodium, de calcium et de magnésium entre la solution et le complexe adsorbant. On estime que les constantes d'échange sont indépendantes du potentiel osmotique de la solution et de la garniture cationique, bien que ceci constitue une approximation (LAUDELOUT et al., 1968 ; RIEU, 1978 et 1983) :

$$\frac{X_{Na}^2}{X_{Ca} + X_{Mg}} = \frac{(Na)^2}{(Ca) + (Mg)} \cdot K1$$

$$\frac{X_{Ca}}{X_{Mg}} = \frac{[Ca]}{[Mg]} \cdot K2$$

avec X_M taux de cation M adsorbé sur le complexe et (M) activité chimique du cation M dans la solution.

Les produits de solubilité des minéraux cités figurent dans le tableau I, ainsi que les constantes d'échange cationique déterminées à partir des données de GALLALI (1980) sur les sols de la basse vallée de l'oued Medjerdah et utilisées dans l'exemple d'application du modèle.

Tableau I : Données thermodynamiques utilisées par le modèle « GYPSOL ».
Thermodynamic data of « GYPSOL » model.

Réaction de dissociation		log K 25°C
H ₂ O	=== H ⁺ + OH ⁻	- 14,0
HSO ₄ ⁻	=== H ⁺ + SO ₄ ²⁻	- 1,39
HCO ₃ ⁻	=== H ⁺ + CO ₃ ²⁻	- 10,32
H ₂ CO [*]	=== 2H ⁺ + CO ₃ ²⁻	- 16,70
H ₂ CO ₃ [*]	=== CO ₂ + H ₂ O	+ 1,46
NaCl [*]	=== Na ⁺ + Cl ⁻	+ 0,85
NaOH [*]	=== Na ⁺ + OH ⁻	- 0,719
NaSO ₄ ⁻	=== Na ⁺ + SO ₄ ²⁻	- 1,06
Na ₂ SO ₄ [°]	=== 2Na ⁺ + SO ₄ ²⁻	- 1,512
NaCO ₃ ⁻	=== Na ⁺ + CO ₃ ²⁻	- 1,269
NaCO ₃ [°]	=== 2Na ⁺ + CO ₃ ²⁻	- 0,672
NaHCO ₃ [°]	=== Na ⁺ + HCO ₃ ⁻	+ 0,25
KCl [°]	=== K ⁺ + Cl ⁻	+ 1,585
KS ₄ ⁻	=== K ⁺ + SO ₄ ²⁻	- 0,84
KOH [*]	=== K ⁺ + OH ⁻	- 0,04
MgCO ₃ [°]	=== Mg ²⁺ + CO ₃ ²⁻	- 3,40
MgHCO ₃ ⁺	=== Mg ²⁺ + HCO ₃ ⁻	- 0,90
MgOH ⁺	=== Mg ²⁺ + OH ⁻	- 2,58
MgSO ₄ [°]	=== Mg ²⁺ + SO ₄ ²⁻	- 2,75
CaCO ₃ ⁺	=== Ca ²⁺ + CO ₃ ⁻	- 3,20
CaHCO ₃ ⁺	=== Ca ²⁺ + HCO ₃ ⁻	- 1,26
CaOH ⁺	=== Ca ²⁺ + OH ⁻	- 1,234
CaSO ₄ [°]	=== Ca ²⁺ + SO ₄ ²⁻	- 2,31

minéral	Réaction de dissolution	log K _{ps}
Calcite	CaCO ₃ + 2H ⁺ === Ca ²⁺ + H ₂ O + CO ₂ (g)	+ 9,76
magnésite	MgCO ₃ + 2H ⁺ === Mg ²⁺ + H ₂ O + CO ₂ (g)	+ 9,43
dolomite	CaMg (CO ₃) ₂ + 4H ⁺ === Ca ²⁺ + Mg ²⁺ + 2(H ₂ O) + 2(CO ₂ (g))	+16,38
gypse	CaSO ₄ , 2(H ₂ O) === Ca ²⁺ + SO ₄ ²⁻ + 2(H ₂ O)	- 4,85
mirabilite	Na ₂ SO ₄ , 10(H ₂ O) === 2Na ⁺ + SO ₄ ²⁻ + 10(H ₂ O)	- 1,525
halite	NaCl === Na ⁺ + Cl ⁻	+ 1,58

B) La représentation du modèle

Pour appréhender la signification concrète des hypothèses retenues, on peut considérer le sol à une profondeur donnée. Lorsque l'humidité est égale à une valeur θ_1 , le flux q_1 vérifie la loi de DARCY : $q_1 = K(\theta_1) \cdot \partial H / \partial z$. La vitesse moyenne d'écoulement de l'eau dans la porosité est $U_1 = q_1 / \theta_1$. Avec K conductivité hydraulique, θ humidité, H potentiel total de l'eau, z profondeur, q flux.

Si l'humidité du sol augmente et atteint la valeur θ_2 , la conductivité hydraulique sera plus élevée et, pour un même gradient hydraulique, le flux sera $q_2 = K(\theta_2) \cdot \delta H / \delta z$. La vitesse moyenne d'écoulement de l'eau dans la porosité sera $U_2 = q_2 / \theta_2$.

Les hypothèses retenues par le modèle reviennent à estimer que le flux $\Delta q = q_2 - q_1$ s'écoule au travers de la fraction de porosité qui s'est remplie lors de l'augmentation d'humidité de θ_1 à θ_2 . La vitesse moyenne d'écoulement de l'eau dans cette fraction de la porosité est égale à $(q_2 - q_1) / (\theta_2 - \theta_1)$.

Au sein de la porosité, on peut distinguer plusieurs fractions représentant des tailles de pores différentes et estimer leur conductivité hydraulique intrinsèque à partir de la relation conductivité hydraulique/humidité pour chaque tranche de sol (figure 1). Contrairement à l'approche capillariste, ce modèle intègre les caractéristiques hydriques du sol tout en différenciant les écoulements distincts au sein de la porosité.

D'autre part, comme on considère que l'eau est incompressible, on peut calculer les échanges d'eau et le terme convectif du transfert de soluté entre les fractions de porosité. En effet, si on applique cette hypothèse à la classe des plus petits pores, l'échange d'eau entre cette classe et celle des pores plus gros est égale à la variation de stock d'eau dans cette fraction diminuée de la somme algébrique des flux verticaux la traversant (figure 1). Ce calcul des transferts d'eau entre les différentes parties de porosité ne requiert aucun paramètre d'ajustement.

première fraction de la porosité	+	deuxième fraction de la porosité	-	ensemble de la porosité
pro-flux. potentiel fondeur matriciel				q_{i-1} z_i h_i q_i z_{i+1} h_{i+1}
increment d'espace Δz increment de temps Δt		indice d'espace i indice de temps j		
$q_i^1 = -K \left(\frac{V_1}{V_t} \right) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right)$		$\frac{\Delta q_i^1}{\left[K \left(\frac{V_1+V_2}{V_t} \right) - K \left(\frac{V_1}{V_t} \right) \right] \left[\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right]}$		$q_i = -K \left(\frac{V_e}{V_t} \right) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right)$ flux
$U_1 = q_i^1 \cdot \frac{V_t}{V_1}$		$U_2 = \Delta q_i^1 \cdot \frac{V_t}{V_2}$		$U = q_i \cdot \frac{V_t}{V_e}$ vitesse moyenne
$K \left(\frac{V_1}{V_t} \right)$		$K \left(\frac{V_1+V_2}{V_t} \right) - K \left(\frac{V_1}{V_t} \right)$		$K \left(\frac{V_1+V_2}{V_t} \right)$ conductivité hydraulique
$K \left(\frac{V_1}{V_t} \right) / K \left(\frac{V_1+V_2}{V_t} \right)$		$1 - K \left(\frac{V_1}{V_t} \right) / K \left(\frac{V_1+V_2}{V_t} \right)$		1 fraction du flux total
$T_i \cdot \Delta t = (V_{j+1}^i - V_j^i) + (q_{j+1}^{i-1} - q_j^i) \cdot \Delta t$				
volume : V_s	volume : $V_e = V_1 + V_2$	volume : V_a	volume total $V_t = V_s + V_e + V_a$	

Figure 1: Porosité dans le cas d'un découpage en deux classes de pores.

Hydrodynamic properties of each porosity fraction obtained by dividing the porosity into two pore size classes.

C) Description et fonctionnement du modèle « PORSAL »

Le modèle « PORSAL » utilise les données initiales suivantes :

Données physiques

- Pour chaque profondeur :
 - Relation $h(\theta)$
 - Relation $K(\theta)$
 - Nombre de fractions de la porosité : le modèle est prévu pour prendre en trois fractions, mais il peut être utilisé avec deux seulement si ce nombre s'avère suffisant
 - Importance relative de chaque fraction de la porosité
 - Prélèvement d'eau par les racines des végétaux
 - Profil initial d'humidité ou de tension d'eau
- Flux imposé à la surface (intensité d'irrigation ou évaporation)
- Profondeur du sol supposée uniforme sur le profil
- Incrément d'espace et de temps.

Données chimiques

- Pour chaque profondeur est pour chaque fraction de la porosité :
 - Composition chimique initiale de la solution du sol
 - Composition minéralogique initiale
 - Configuration initiale de la capacité d'échange cationique
 - Coefficient d'échange de chaque élément entre les différentes fractions de la porosité de la même cote
 - Coefficient de dispersion longitudinale pour chaque élément
- Pression partielle de CO₂ régnant dans le sol ; on suppose que cette valeur est constante dans le temps et sur tout le profil
- Constantes thermodynamiques régissant les échanges cationiques entre la solution du sol et le complexe argilo-humique
- Composition chimique de l'eau d'irrigation

Parmi toutes ces données, les seuls paramètres d'ajustement sont :

- le nombre n de fractions et le volume maximal d'eau contenue dans $n-1$ d'entre elles
- le coefficient de dispersion longitudinale
- le coefficient de proportionnalité reliant l'échange de soluté entre deux fractions de la porosité et l'écart de concentration.

La sensibilité du modèle aux différents paramètres sera vue ultérieurement.

Le modèle calcule d'abord les flux d'eau traversant les différentes cotes du sol ; l'équation de transfert : $C(h). \delta h / \delta t = [K(h). (\delta h / \delta z) - 1] - S] / \delta z$

$C(h)d\theta/dh$ capacité capillaire ; S terme puits-source est discrétisée de la manière suivante :

$$C_i^j \frac{h_i^{j+1} - h_i^j}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta z} (K_{i+1/2}^j \frac{h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1}}{\Delta z} - 1) - K_{i-1/2}^j \left(\frac{h_i^{j+1} - h_{i-1}^{j+1}}{\Delta z} \right) - S$$

avec $K_{i \pm 1/2}^j = \sqrt{K_i^j \times K_{i \pm 1}^j}$; i indice de l'espace et j indice du temps

car ce mode de discrétisation s'avère être particulièrement efficace (VAUCLIN et al., 1978, 1979).

GAUDET (1978) permet de calculer les flux totaux traversant chaque tranche de sol, toutes fractions de la porosité confondues. Dans une seconde étape, les flux traversant chaque fraction de porosité sont calculés à partir des flux totaux, confor-

mément à la figure 1, ainsi que les échanges d'eau et de solutés entre les différentes fractions de la porosité d'une même cote. La troisième étape consiste à calculer les termes dispersifs longitudinal et convectif du transfert de soluté dans les différentes parties de la porosité :

— l'équation de dispersion longitudinale appliquée à chaque fraction de la porosité est : $\delta\theta.C/\delta t = \delta[\theta.Da.C/\delta z]\delta z$ avec θ teneur en eau de la fraction k , C concentration en soluté de la fraction k , Da coefficient de dispersion apparent du soluté (LT⁻²) ;

— l'échange de soluté entre deux fractions de la porosité d'un même niveau du sol est supposé proportionnel à la différence de concentration entre ces deux classes à l'instar de DEANS (1963) et GAUDET (1978).

Enfin, le sous-programme « GYPSOL » permet de prévoir l'interaction chimique eau/sol. Ce sous-programme repose sur un modèle d'équilibre du type association ionique. Les espèces reconnues figurent dans le tableau I, ainsi que les constantes de dissociation correspondantes. La concentration des éléments obtenue par le calcul des transferts de soluté permet d'estimer l'activité des ions et de calculer l'indice de saturation $IS = \log Q - \log K$ (Q produit ionique de la solution et K produit de solubilité constante à température et pression données) pour les différents minéraux. Si la solution du sol est sous-saturée ($IS < 0$), le sous-programme « GYPSOL » simule la dissolution d'une quantité de minéral proportionnelle à IS , à condition que le stock de minéral disponible dans le sol le permette. De même, si la solution est sursaturée ($IS > 0$), la quantité de précipité sera proportionnelle à IS . Ainsi, la solution s'approche progressivement de l'équilibre thermodynamique avec les minéraux présents. De même, la recherche de l'équilibre thermodynamique de la solution avec le complexe adsorbant est itérative. Lorsque l'équilibre est atteint, le sous-programme traite les données relatives à la fraction de porosité ou à la cote suivantes.

D) Critique et limites du modèle

Le modèle proposé souffre de nombreuses limites et critiques ; aussi, seules les plus fondamentales et les plus importantes seront soulevées.

a) On note tout d'abord une confusion dans la définition des trajectoires de la porosité. Quand un groupe de pores est associé à une gamme de pF , il s'agit d'une définition énergétique ; lorsque l'on associe une différence de perméabilité à cette fraction de la porosité, on en donne une définition énergétique, on associe implicitement une classe énergétique à un ensemble de sites dans la porosité. Or, si on se réfère aux études de l'adsorption de gaz dans un solide poreux, ceci est faux : lors d'une variation énergétique de la phase adsorbée, la modification du volume adsorbé est due non seulement à la vidange ou à la condensation dans des pores de diamètre donné, mais aussi à la variation de l'épaisseur du film adsorbé dans les pores de diamètre supérieur (PIERCE, 1953 ; DELON et DELYE, 1967). Ainsi, pour l'eau peu mobile, on associe l'eau contenue dans les petits pores à celle qui est adsorbée sur les parois des grands pores ou à celle des pores dépourvus de communication avec le reste de la porosité.

Pour la partie chimique, l'hypothèse de l'équilibre instantané entre la solution, la phase gazeuse et les phases minérales constitue une approximation. En effet, la précipitation de la calcite possède une certaine cinétique à l'échelle de plusieurs heures, comme nous le mettons en évidence sur le sol étudié. L'hypothèse de pression partielle du CO_2 constante et uniforme sur le profil est abusive ; lors des irrigations, cette pression diminue provisoirement à cause de la faible teneur en CO_2 de l'eau d'irrigation. De plus, la pression de CO_2 subit des variations saisonnières (GALLALI, 1980).

b) La conception même du modèle présente de nombreuses insuffisances :

— nombre excessif de paramètres ;

— paramètres difficilement mesurables ; s'il est facile d'estimer la capacité

d'échange pour un volume de sol donné, il est peu aisé de déterminer sa répartition suivant les différentes fractions de la porosité ;

— les paramètres déterminés par calage peuvent être difficilement utilisés en dehors des conditions qui ont présidé au calage ;

— les calculs de la composante convective des transferts, de la composante dispersive et de l'interaction chimique eau/sol se succèdent. La résolution n'est pas simultanée, ce qui biaise légèrement les résultats.

La plupart de ces critiques peuvent d'ailleurs être formulées à l'encontre des différents modèles destinés à prévoir la localisation des sels. La prise en compte de l'hétérogénéité des vitesses des différents filets d'eau au sein de la porosité, par le modèle nouveau « PORSAL », devrait cependant apporter des améliorations importantes par rapport aux modèles existants.

II - CALAGE DU MODELE « PORSAL »

Le modèle sera appliqué aux sols de la basse vallée de l'oued Medjerdah en Tunisie, ce qui implique un calage préalable de « PORSAL ».

Il est difficile de concevoir une expérimentation permettant de caler simultanément l'ensemble des parties du modèle. En effet, l'extraction de la solution du sol à différentes profondeurs, lors d'une irrigation, perturbe les flux hydriques et induit localement des aberrations dans le profil tensiométrique. L'étude simultanée des transferts d'eau devient alors difficile. Aussi les différentes parties du modèle sont calées séparément.

A) Les transferts d'eau

La mise en œuvre de cette partie ne nécessite aucun paramètre de calage. On simule un essai expérimental de trois mois qui a servi à déterminer, avec d'autres essais, les caractéristiques hydrodynamiques d'un sol prélevé sans perturbation sous forme d'une colonne de 155 cm de haut et 50 cm de diamètre (VIELLEFON et al., 1983 ; VALLES et al., 1982 et 1983).

Les conditions expérimentales sont les suivantes :

— profondeur du sol considéré : 150 cm

— état initial du sol : $h(\theta) = -5$ cm à toute profondeur

— conditions aux limites :

• $h(z=150) = -5$ cm

• q_0 flux en surface : $q_0 = 0$ du jour 0 au jour 20 ; $q_0 = -0.0020$ cm/h du jour 20 au jour 30 ; $q_0 = -0.0011$ cm/h du jour 30 au jour 90

— fonction puit/source racinaire : $S(z, t) = 0$; le sol est exempt de toute végétation

— incréments $\Delta t = 1$ heure ; $\Delta z = 2$ cm.

Il s'agit donc du ressuyage sans évaporation d'un sol très humide suivi d'un dessèchement par évaporation d'eau à sa surface.

— Les caractéristiques hydrodynamiques $h(\theta)$, $K(\theta)$ déterminées expérimentalement pour neuf profondeurs sont introduites dans le modèle avec leurs variations spatiales.

La simulation donne de bons résultats aussi bien pour la prédiction du profil tensiométrique (fig. 2) que pour le calcul du volume drainé (fig. 3).

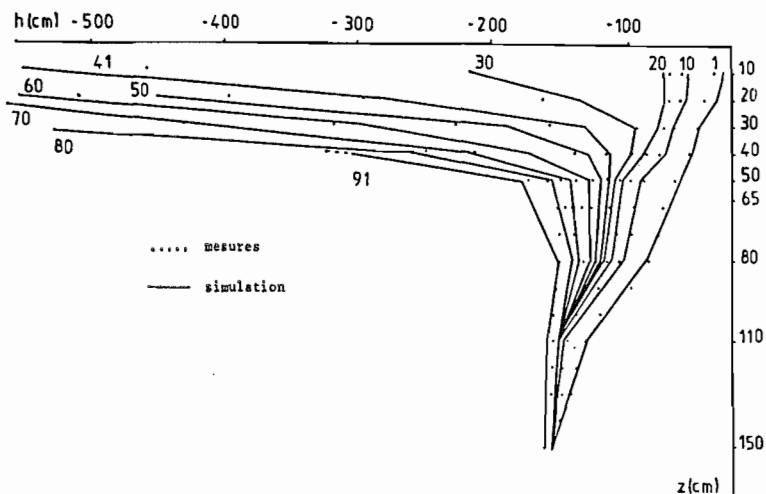


Figure 2 : Evolution du profil tensiométrique. Mesures et simulation.
Evolution of tensiometric profile. Measurement and simulation.

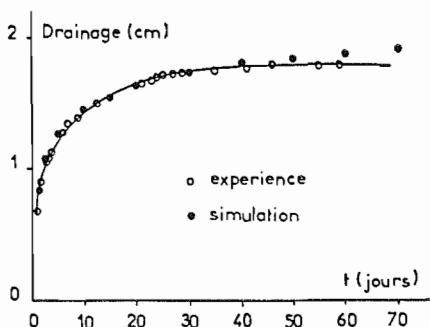


Figure 3 : Evolution des volumes drainés : mesures et simulation.
Evolution of drained volume. Measurement and simulation.

B) Les transferts de solutés

Les paramètres de calage de cette partie du modèle sont : le nombre n de fractions dans la porosité, le volume maximal d'eau contenu dans $n-1$ fractions, le coefficient de dispersion apparent Da du soluté dans chaque fraction de la porosité, et le coefficient α d'échange de soluté entre deux fractions de la porosité de même profondeur.

On simule un essai expérimental mené par VIELLEFON et al. (1983), qui consistait à irriguer la colonne de sol avec un flux constant $q_0 = +2.288$ cm/j pendant plusieurs jours avec de l'eau de l'oued Medjerdah dont la teneur naturelle en tritium est 20 Unités Tritium (U.T.). Après obtention d'un régime hydrique permanent, 1 528 cm d'eau tritiée (83 850 U.T.) sont répandus à la surface du sol. Ceci constitue l'instant de référence t_0 . L'irrigation avec de l'eau non tritiée (20 U.T.) reprend avec un flux de 2.288 cm/jour pendant 90 jours. L'eau de drainage est recueillie quotidiennement à la base de la colonne et sa teneur en tritium est mesurée.

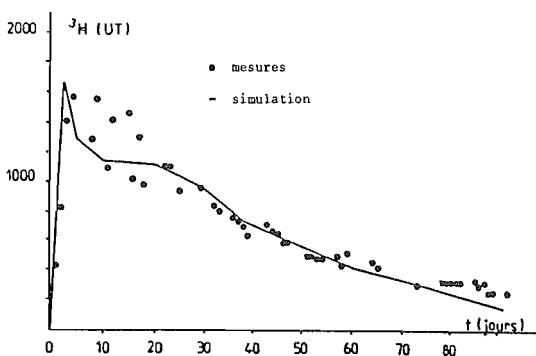


Figure 4 : Teneur en tritium des eaux de drainage : mesures et simulation.
Tritium content of seepage water : measurements and simulation.

Les flux étant constants, on néglige dans ce cas les variations spatiales des caractéristiques hydrodynamiques. L'ajustement présenté sur la figure 4 a été obtenu pour les valeurs suivantes :

- la distinction de deux fractions dans la porosité est suffisante
- Volume de la porosité fine ; 40 % [volume de la porosité grossière occupée par l'eau : 7 % ; humidité 47 %]. Le volume de la porosité fine est voisin de la capacité au champ
- $Da = 2.5 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
- $\alpha = 0.29 \quad h^{-1}$.

On remarque que la simulation est correcte. Le coefficient de dispersion apparent est assimilable à un coefficient de diffusion moléculaire (constante universelle à température donnée) ce qui réduit le nombre de paramètres de calage. En effet, le coefficient de diffusion moléculaire de l'eau tritiée dans l'eau pure est égal à $2,44 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ d'après WANG et al. (1953) et NAKAYAMA et al. (1963). Les phénomènes de dispersion ont été pris en compte directement par la reconnaissance des différentes vitesses d'écoulement de l'eau par le modèle. De plus, hormis le cas de cet essai pour lequel la variation de teneur en soluté est considérable, on pourra négliger l'échange de soluté entre les différentes fractions de la porosité à cause du faible coefficient d'échange. En définitive seul le volume de la porosité fine doit faire l'objet d'un calage, mais peut être estimé indépendamment à partir de la capacité au champ.

Les modèles convectif/dispersif simples prévoient un maximum de la teneur en tritium des eaux de drainage de 28^e jour alors que « PORSAL », en accord avec les mesures expérimentales, prévoit ce maximum pour le 7^e jour. Ces modèles globaux ne distinguant pas l'hétérogénéité des vitesses d'écoulement de l'eau dans la porosité sont inadaptés au cas du sol étudié ; dans les conditions mentionnées précédemment, ils conduisent à une erreur de 300 % sur l'estimation de la position des solutés.

C) Géochimie des solutions

Le sous programme « GYPSOL » a été calé sur deux jeux de données.

Le premier concerne une concentration en laboratoire de l'eau de l'oued Medjerdah. Deux litres d'eau placés dans un récipient ont été concentrés par évaporation. Des prélèvements ont permis de suivre l'évolution de la composition chimique pour différents facteurs de concentration ($FC = \text{Volume initial} / \text{Volume après évaporation}$).

Dans ce cas l'utilisation de « GYPSOL » ne requiert aucun paramètre de calage : les données initiales sont constituées de la composition chimique initiale de l'eau

utilisée. Les résultats de la simulation sont conformes aux données expérimentales, ce qui constitue une validation du sous-programme (fig. 5). Le modèle indique un contrôle de la solution par la précipitation de gypse et de calcite.

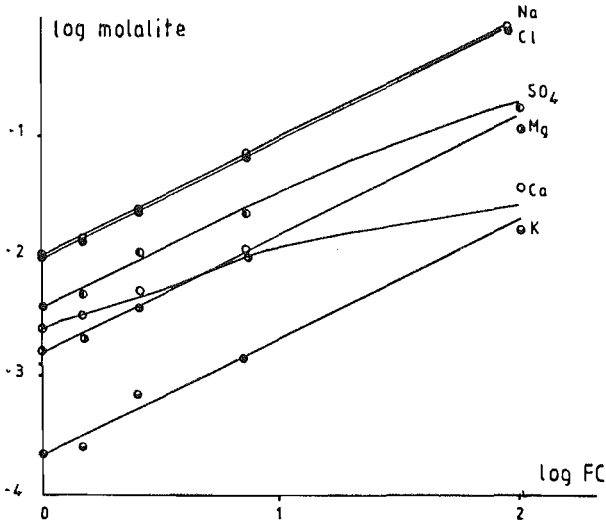


Figure 5 : Evaporation de l'eau de l'oued Medjerdah en absence de sol : évolution des molalités mesurées et simulées.

Concentration by evaporation of Oued Medjerdah water separated from the soil: ionic molality measurements (o) and simulation (—).

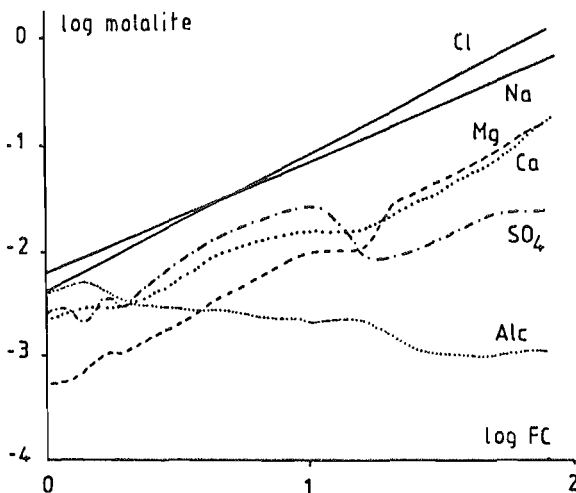


Figure 6 : Evolution de la composition chimiques des extraits de pâte saturée des sols de la basse vallée de l'oued Medjerdah (d'après GALLALI, 1980).

Ionic molality in paste extract of soil of low Medjerdah valley (from GALLALI, 1980).

Le dernier paramètre de calage nécessaire à la mise en œuvre du modèle est l'importance relative du complexe adsorbant dans chaque partie de la porosité. Pour accéder à cette valeur, on utilise un second jeu de données ; des analyses chimiques d'extraits de pâtes saturées ont été effectuées par GALLALI (1980) sur les sols de la toposéquence CHERFECH-UTIQUE située dans la basse vallée de l'oued Medjerdah (fig. 6). L'extraction par dépression inférieure à un bar ne permet d'accéder qu'aux solutions contenues dans la porosité grossière de la pâte. Le facteur de concentration est estimé égal au rapport entre la teneur en chlore de l'extrait et la plus faible teneur observée. Cette dernière correspond à une solution 2,6 fois plus diluée que l'eau de l'oued Medjerdah.

Les résultats de la simulation présentés sur la figure 7 ont été obtenus pour une capacité d'échange cationique de la porosité grossière de 3 meq/100 gr. La capacité d'échange du sol s'élève à 15 meq/100gr.

L'accord entre les données expérimentales et la simulation n'est que qualitatif ; la mauvaise connaissance des solutions diluées, point de départ de la concentration, interdit dans ce cas toute comparaison quantitative.

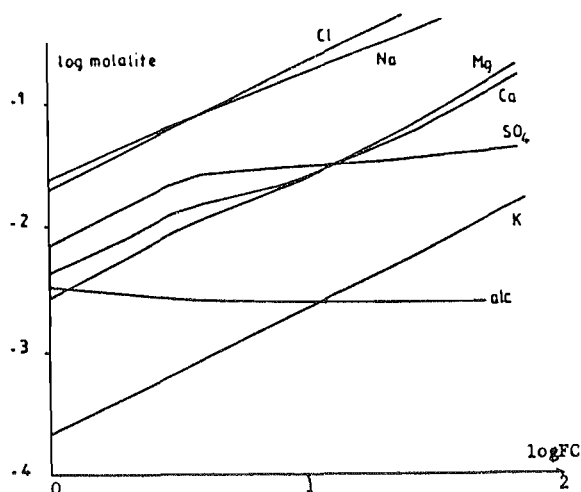


Figure 7 : Simulation de la concentration de l'eau de l'oued Medjerdah en présence d'argile.

Simulation of oued Medjerdah water concentration by evaporation with simultaneous interaction with clay.

III - APPLICATION DU MODELE « PORSAL » A LA PREVISION DE LA LOCALISATION DES MINERAUX DANS LES MICROSITES DE LA POROSITE

A) Description de l'épisode simulé

Bien que fictif, l'épisode simulé correspond à une situation fréquente sous culture. On retient l'exemple de la colonne de sol utilisée pour le calage en prenant en compte l'hétérogénéité verticale de ses caractéristiques hydrodynamiques. Les calculs effectués sur 1,50 m de profondeur par tranches de sol de 5 cm d'épaisseur considèrent

une culture en cours d'implantation ; l'évapotranspiration est égale à 68 mm/mois et la zone d'absorption racinaire est de 40 cm.

Au départ, le sol a été lessivé par une irrigation abondante avec l'eau de l'oued Medjerdah ; la composition chimique de la solution du sol est en tout point égale à celle de l'eau d'irrigation. Le sol possède un stock important de calcite mais pas de gypse ; la garniture cationique est en équilibre avec la solution du sol.

A l'instant t_0 de référence, le pF du sol est nul ($h = -1$ cm) sur tout le profil. On simule le devenir de ce sol sous l'effet de deux épisodes de dessèchement séparés par une irrigation modérée (30 m). L'ensemble de la période simulée correspond à une durée de 15 jours.

B) Résultats de la simulation

Le modèle indique un comportement différent des solutions par rapport aux minéraux suivant que l'on considère la porosité fine ou la porosité grossière. Les solutions contenues dans les petits pores évolue lentement vers un état d'équilibre à long terme. Elles sont peu affectées par les alternances humectation/dessiccation et précipitent continuellement de la calcite mais rarement du gypse. Dans les gros pores, la composition chimique est très variable, les solutions sont plus concentrées que celles des petits pores en phase de dessèchement et le gypse précipite. Lors des irrigations, les solutions sont plus diluées que dans les petits pores et le gypse est dissous. De même, le modèle indique un comportement différent du gypse et de la calcite. A la fin de l'épisode simulé, le gypse se localiserait dans les pores les plus grossiers, à la base de la zone d'absorption racinaire (ig. 8). La calcite précipiterait dans toute la porosité, sur l'ensemble de la zone participant à l'alimentation hydrique de la culture.

Ces résultats sont conformes aux observations des pédologues. En effet, les analyses minéralogiques indiquent la présence de calcite dans toutes les classes granulométriques (GALLALI, 1980) : le gypse précipite en pseudomycélium dans les pores visibles à l'œil ou à la loupe (VIELLEFON, 1985). Bien que cette localisation du gypse soit aussi observée dans des sols languedociens (BOUZIGUES, 1987), une vérification plus rigoureuse est nécessaire.

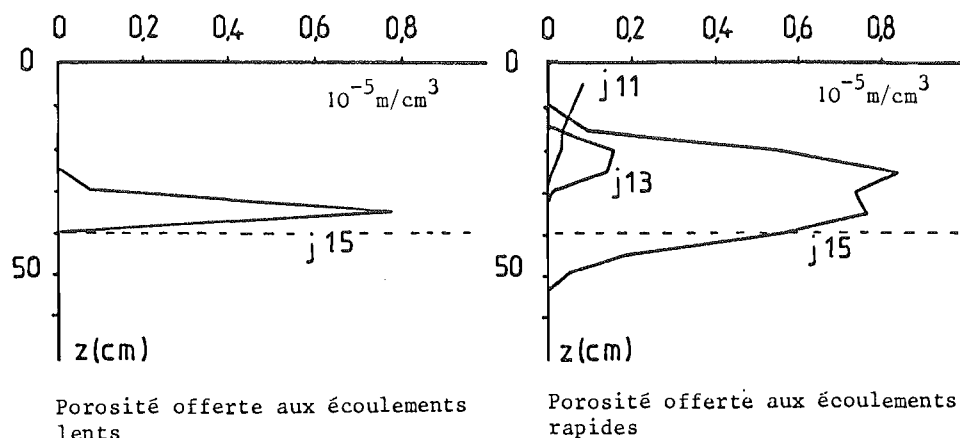


Figure 8 : Simulations de la précipitation de gypse dans les différentes fractions de la porosité (10^{-6} mole cm^3 de sol) : j11 avant irrigation ; j13 après irrigation ; j15 après la seconde phase d'évaporation.

Simulation of gypsum precipitation (10^{-5} mole/ cm^3 of soil) : before irrigation (j11), after irrigation (j13) and after the second evaporation (j15) stage.

C) Vérification expérimentale de la localisation du gypse et de la calcite

La colonne de sol a été irriguée avec l'eau de l'oued Medjerdah. Le flux d'irrigation était de 0.1 cm/h pendant 5 heures puis de 0.2 cm/h pendant 7 heures. Les eaux de drainages recueillies ont été analysées. La mesure du pH a été immédiate. Les 81 échantillons ont été classés par ordre chronologique de F2 à F81. Les 73 premiers correspondent à des humidités et des intensités de drainage importantes. Ces solutions ont circulé au travers d'une porosité grossière qui seule peut présenter une forte conductivité hydraulique. Les dernières solutions ont été obtenues en fin de ressuyage du sol, lorsque l'humidité et les flux sont faibles c'est-à-dire lorsque la porosité grossière ne participe pas aux écoulements.

L'ensemble des solutions présente une légère sur-saturation par rapport à la calcite et s'ordonne en un seul nuage (fig. 9). La sur-saturation croissante lorsque la pression en CO₂ décroît est due à la cinétique de précipitation de la calcite (VALLES, 1985).

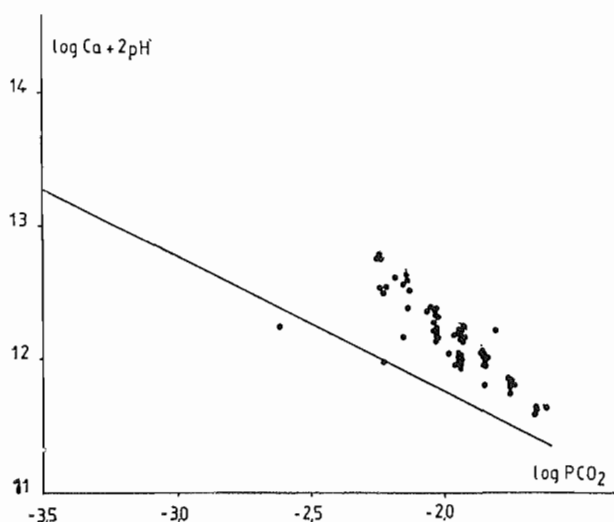


Figure 9 : Etat de saturation des eaux de drainage par rapport à la calcite.
Calcite saturation of seepage water.

L'état de saturation des solutions par rapport au gypse permet de distinguer différentes périodes représentés par quatre ensembles de points (I, II, III, IV) sur la figure 10.

Les premiers échantillons recueillis (F2 à F8, groupe I) sont en équilibre avec le gypse et se caractérisent par une molalité du sulfate supérieure à celle du calcium. Ce sont les solutions les plus concentrées.

Le groupe suivant (F9 à F42, groupe II) est toujours en équilibre avec le gypse mais se situe dans le secteur $S_{O4} < Ca$. Ce sont des eaux moins concentrées que les précédentes, diluées par l'eau d'irrigation et pouvant de ce fait dissoudre du gypse jusqu'à l'arrivée à l'équilibre. Le gypse fait partie de l'environnement minéralogique des écoulements rapides.

Le troisième groupe d'eaux (F43 à F73), groupe III) présente une évolution régulière vers les caractéristiques de l'eau d'irrigation. Les solutions s'éloignent de l'équilibre avec le gypse ce qui montre l'épuisement du stock de ce minéral dans le sol.

Enfin, les solutions circulant lentement (F74 à F82, groupe IV) présentent une stabilité chimique. Elles sont sous-saturées par rapport au gypse ; ce dernier est absent autour des pores offertes aux circulations lentes.

Ces résultats expérimentaux :

- variabilité de l'état de saturation par rapport au gypse des solutions contenues dans les gros pores ;
 - stabilité chimique de la solution de la porosité fine ;
 - comportement identique de l'ensemble des solutions par rapport à la calcite qui est présente dans toute la porosité ;
 - localisation du gypse dans les gros pores et seulement en phase de dessèchement et de début d'irrigation
- confirment les conclusions de la simulation précédente.

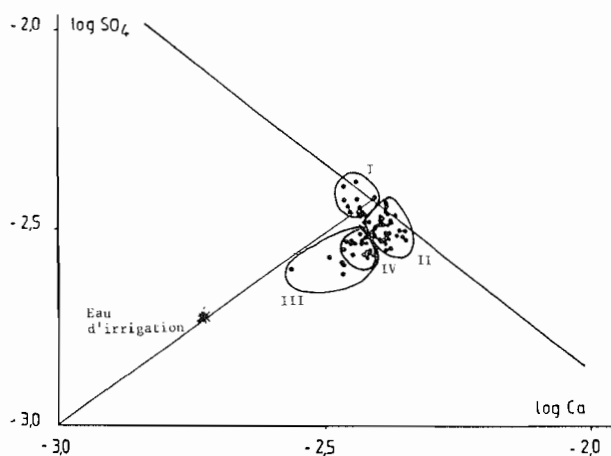


Figure 10 : Evolution chronologique de l'état de saturation des eaux de drainage par rapport au gypse.

Chronological variation of gypsum saturation in seepage water.

CONCLUSION

Le modèle physico-chimique « PORSAL » présenté dans ce travail prend en compte l'hétérogénéité de la vitesse d'écoulement des différents filets d'eau dans la porosité d'un sol ainsi que l'interaction chimique solution/minéraux. Ces deux hypothèses impliquent une différenciation chimique et minéralogique des pores suivant leur taille.

L'application à un sol de la basse vallée de l'oued Medjerdah en Tunisie permet de conclure à la localisation de gypse, minéral soluble, dans les gros pores car ceux-ci sont les plus affectés par l'évaporation. La calcite, moins soluble que le gypse, précipiterait dans l'ensemble de la porosité mais préférentiellement dans la classe de pores contenant le plus d'eau.

La vérification du modèle est difficile, au même titre que son calage. Néanmoins, une expérience de lessivage du gypse dans une colonne de sol remanié a permis de montrer la présence de gypse dans les pores grossiers seulement et un comportement identique des solutions par rapport à la calcite qu'il s'agisse des solutions issues des gros ou des petits pores.

L'utilisation du modèle a mis en évidence la difficulté de déterminer tous les paramètres nécessaires à sa mise en œuvre. En revanche, le gain de précision par rapport aux modèles convectifs-dispersifs simples est considérable pour les sols argileux.

Accepté pour publication : Novembre 1987
Reçu pour publication : Juin 1987

« PORSAL » FORECAST MODEL FOR LOCALIZING
SALT AND MINERAL IN MICROSITES OF POROUS ROCK

The physico chemical model « PORSAL » for the prediction of salt localization in soils takes into account the heterogeneity of flow rates through porosity (fig. 1) as well as the soil-water chemical interactions (Table I) and can thus the prediction of the localization of mineral precipitates depending on pore size. Its use on a salt-affected clayed soil of Tunisia required the fitting of various parameters (fig. 2 to 7). However, the distinction between the various flow rates through the porosity allowed the apparent dispersion coefficient to be replaced with molecular diffusion coefficient. -With respect to the convective-dispersive models commonly used, the increase in accuracy as to salt localization is noteworthy, although the model was only partly checked.

The simulation of a drying wetting cycle when the oued Medjerdah waters are used for irrigation showed a localization of gypsum in big size pores and a precipitation of calcite distributed over the whole porosity (fig. 8). The experimental investigation of gypsum leaching out (fig. 10) corroborated the conclusions reached from the use of the model..

BIBLIOGRAPHIE

- BARRET E.P., JOYNER L.G., HALENDA P.P., 1951. — *The determination of pore volume and area distribution in porous substances. Computation of nitrogen isotherms*, J. Amer. hem. Soc., 73, p. 373-380.
- BOUZIGUES R., 1987. — Communication personnelle.
- DEANS H.A., 1963. — *A mathematical model for dispersion in the direction of flow in porous media*. Trans. A.I.M.E., 228-49.
- DELON J.F., DELLYES R., 1967. — « Calcul du spectre de porosité des minéraux phylliteux ». C.R. Acad. Sci. Paris, 265, p. 1661-1644.
- DROUBI A., 1976. — « Géochimie des sels et des solutions concentrées par évaporation. Modèle thermodynamique de simulation. Application aux sols salés du Tchad ». Sci. Géol., Mém., 46, 177 p.
- DUTT G.R., SHAFFER M.J., MOORE W.J., 1972. — *Computer simulation model of dynamic bio-physicochemical processes in soils*. University of Arizona, Tucson. Tech. Bul., 196 p.
- FOSTER A.G., 1932. — *The sorption of condensable vapours by porous solids*. Faraday Soc., 28, p. 645-657.
- FRITZ B., 1975. — « Etude thermodynamique et simulation des réactions entre minéraux et solutions. Application à la géochimie des altérations et des eaux continentales ». Sci. Géol., Mém., 41, 152 p.
- FRITZ B., 1981. — « Etude thermodynamique et modélisation des réactions hydrothermales et diagénétiques. Sci. Géol., Mém., 65, 197 p.
- GALLALI T., 1980. — « Transferts sels- matière organique en zones arides méditerranéennes. Thèse Doct. Etat, Nancy I, 202 p.
- GAUDET J.L., 1978. — « Transerts d'eau et de soluté dans les sols non saturés. Mesures et simulation ». Thèse Doc. Sci. Phys., Grenoble, 246 p.
- néennes ». Thèse Doct. Etat, Nancy I, 202 p.
- GUEDDARI M., 1984. — « Géochimie et thermodynamique des évaporites continentales. Etude du lac Natron et du chott El Jerid en Tunisie ». Sci. Géol., Mém., 76, 143 p.
- HELGESON H.C., 1968. — *Evaluation of irreversible reactions in geochemical processes involving minerals and aqueous solutions. I. Thermodynamics relations*. Geochim. Cosmochim. Acta, 32, p. 853-877.
- HELGESON H.C., 1970. — *Chemical and thermodynamical model of ore deposition in hydrothermal systems*. In « Fiftieth Anniversary Symposium Volume », Morgan B.A. Ed., Miner. Soc. Amer. Soc. Amer. Spec. Paper n° 3, p. 155-186.
- KOVDA V.A., SZABOLCS I., 1969. — *Modeling of soil salinization and alkalization*. Agro-kemia es talaptan, 28, 208 p.
- LAUDELOUT H., VAN BLADEL R., BOLT G.H. et PAGE A.L., 1968. — *Thermodynamics*

- of heterovalent cation exchange reactions in a montmorillonite clay. *Trans. Faraday Soc.*, 64, p. 1477-1488.
- NAKAYAMA F.S., JACKSON R.D., 1963. — *Diffusion of tritiated water in soils*. *Soil Sci. Soc. Amer. Proc.*, 26, p. 107-111.
- PACHEPSKY Y.A., KUZNETSOV M.S., 1986. — *Short-term and long term models for salinisation control over irrigated territories*. *Trans. 13^e Cong. AISS, Hambourg*, pp. 397-403.
- PIERCE C., 1953. — *Computation of pore sizes from physical adsorption data*. *J. Phys. Chem.*, 77, p. 268-277.
- PITZER K.S., 1973. — *Thermodynamics of Electrolytes. I. Theoretical basis and general equation*. *J. Phys. Chem.*, 77, p. 268-277.
- PITZER K.S., 1975. — *Thermodynamics of Electrolytes. V. Effects of higher order electrostatic term*. *J. Solution Chem.*, 4, p. 249-265.
- PITZER K.S., 1979. — *Theory: ion interaction approach*. In « *Activity coefficients in electrolyte solutions* », 2, Pytkowicz R.M. (Ed.), CRC Press, p. 157-208.
- PITZER K.S., 1980. — *Thermodynamics of aqueous electrolytes at various temperature, pressures and compositions*. *A.C.S. Symp. Ser.*, 133, p. 451-466.
- PITZER K.S. et MAYORGA G., 1974a. — *Thermodynamics of electrolytes. III. Activity and osmotic coefficients for 2-2 electrolytes*. *J. Solution Chem.*, 3, p. 539-546.
- PITZER K.S. et KIM J., 1976b. — *Thermodynamics of Electrolytes. IV. Activity and osmotic coefficients for mixed electrolytes*. *J. Amer. Chem. Soc.*, 96, p. 5701-5707.
- REMSON I., HORNBERGER G.M., MOLZ F.J., 1971. — *Numerical methods in subsurface hydrology*. Ed. John Wiley, New-York.
- RIEU M., 1978. — « *Eléments d'un modèle mathématique de prédiction de la salure dans les sols irrigués. Application aux polders du Tchad* ». Thèse Doct., U.P.S., Toulouse, 2094, 134 p.
- RIEU M., 1983. — « *Simulation numérique des flux hydriques et prédiction de la salinité dans les sols* » Ed. ORSTOM, 161 p.
- THIRRIOT C., 1981. — « *Digression sur les modèles capillaires de l'infiltration de la pluie* ». Rapport C.T. 545 — Institut de mécanique des fluides Toulouse, 23 p.
- THIRRIOT C., 1982a. — « *Des tubes capillaires au trou de ver de terre ou l'utopie du mécanicien des fluides face au réalisme de l'hydrogéologue* ». Rapport C.T. 574 — Institut de mécanique des fluides, Toulouse, 17 p.
- THIRRIOT C., 1982b. — « *L'infiltration dans les sols vue à travers l'image des modèles capillaires* » — *Eau de Québec*, 15-2, p. 124-130.
- VALLES V., 1985. — « *Etude et modélisation des transferts d'eau et de sels dans un sol argileux. Application au calcul des doses d'irrigation* ». Thèse I.N.P., Toulouse, 15, 145 p.
- VALLES V., VALLES A.M., 1982. — « *Etude méthodologique des transferts d'eau et de sels dans un monolithe de sol argileux. 2^e partie : Caractérisation hydrodynamique et modélisation des transferts d'eau* ». Rapport ORSTOM-DRES Tunis, E-S 199, multigraph., 47 p.
- VALLES V., VALLES A.M., VIEILLEFON J., 1983. — « *Etude méthodologique des transferts d'eau et de sels dans un monolithe de sol argileux* ». 3^e partie ; Suivi de la salure par capteurs et caractérisation chimique des solutés. Rapport ORSTOM-DRES, Tunis, E-S 203, multigraph., 70 p.
- VAUCLIN M., HAVERKAMP R., VACHAUD G., 1978. — « *Etude de la résolution numérique de l'équation de l'infiltration d'eau en milieu non saturé* ». Rapport HL-78-1, Grenoble, 159 p.
- VAUCLIN M., HAVERKAMP R., VACHAUD G., 1979. — « *Résolution numérique d'une équation de diffusion non linéaire — Application à l'infiltration de l'eau dans les sols non-saturés* ». Ed. Presses Universitaires de Grenoble, 183 p.
- VIEILLEFON J., 1985. — *Communication personnelle*.
- VIEILLEFON J., OLIVE P., HUBERT P., 1983. — « *Etude méthodologique des transferts d'eau et de sels dans un sol argileux — 1^{re} partie : Essais préliminaires de caractérisation et traçage isotopique* ». Rapport ORSTOM-DRES, Tunis, E-S 198, multigraph., 36 p.
- WANG J.A., ROBINSON C.V., EDELMAN I.S., 1953. — *Self diffusion and structure of liquid water*. *J. Amer. Chem. Soc.*, 75, p. 466-470.