







SWS 95.505

Handleiding TACC90 versie 1.2

Opdrachtgever Opdrachtnummer Auteurs Afdeling : VEWIN : 10014.035 : H. Brink, G.H. Ekkers : Behandeling en Distributie

Onderzoek en Advies Nieuwegein, mei 1995

© 1995 Kiwa N.V.

Niets uit dit drukwerk mag worden verveelvoudigd en/of openbaar gemaakt worden door middel van druk, fotokopie, microfilm of welke andere wijze dan ook, zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van Kiwa N.V., noch mag het zonder dergelijke toestemming worden gebruikt voor enig ander werk dan waarvoor het is vervaardigd.



INHOUDSOPGAVE

1	INLE	DING	3
	1.1	Het computerprogramma TACC90	3
	1.2	De TACC ₉₀ en SI ₉₀ \ldots	3
	1.3	Toepassingsgebied	5
	1.4	Wijzigingen ten opzichte van versie 1.1	5
	1.5	Hoe deze handleiding te gebruiken	6
	1.6	Vragen en problemen	7
2	INST	ALLATIE	9
	2.1	Hardware benodigdheden	9
	2.2	Installatie van het programma	9
3	WER	XEN MET HET PROGRAMMA TACC90 1	1
	3.1	Starten van het programma, de menubalk 1	1
	3.2	Een eerste berekening 1	2
	3.3	Invoer	6
		3.3.1 Invoer via het beeldscherm 1	6
		3.3.2 Invoer inlezen uit een file 1	9
	3.4	Bereken	0
	3.5	Print	1
		3.5.1 Printer	1
		3.5.2 File	2
		3.5.3 Scherm	3
	3.6	Einde 2	4
4	INTE	RPRETATIE VAN DE UITKOMSTEN VAN DE BEREKENINGEN 2	5
5	LITER	ATUUR	7
BIJLA	GE 1		
Achter	gronde	n bij de berekening van de TACC $_{00}$ en SI $_{00}$	
	1.1	Berekening kalk-koolzuur evenwicht bij hogere temperaturen	1
	1.2	Overzicht van vergelijkingen	2
	1.3	Berekeningssystematiek	5
	1.4	Structuur programma TACC90	6
	1.5	Literatuur	7
BIJLA	GE 2		
Tips b	ij vrage	en over het programma TACC90.EXE	
BIJLA	GE 3		
Voorb	eeld-fil	es	
	3.1	De invoerfile	1
	3.2	De uitvoerfile met gegevens over de beginconcentraties	2
	3.3	De uitvoerfile met berekende waarden	3

BIJLAGE 4

Toetsing van het programma TACC90 aan PHREEQE

	I
Iet programma PHREEQE	1
Vergelijking rekenmethodiek PHREEQE met TACC90	4
Aanpassing van PHREEQE voor de toetsing van TACC90	6
Vergelijking resultaten van PHREEQE en TACC90	8
Conclusie	9
De uitdraai van de resultaten van de berekeningen	9
	et programma PHREEQE ergelijking rekenmethodiek PHREEQE met TACC90 anpassing van PHREEQE voor de toetsing van TACC90 ergelijking resultaten van PHREEQE en TACC90 onclusie e uitdraai van de resultaten van de berekeningen

1 INLEIDING

1.1 Het computerprogramma TACC90

Sinds 1989 werkt de Kiwa-Werkgroep Kalkafzetting van de Commissie Conditionering aan de ontwikkeling van nieuwe meetmethoden, waarmee snel en betrouwbaar het kalkafzettend vermogen van drinkwater kan worden bepaald. Het onderzoek is gestart naar aanleiding van problemen met verstopte warmwatertoestellen, die zich voordeden na invoering van conditionering (ontharding, ontzuring).

Uit het onderzoek is gebleken dat 4 meetmethoden nodig zijn om het kalkafzettend vermogen te beschrijven (Van Eekhout e.a., 1992). De berekening van het gehalte 'Theoretisch Afzetbaar CalciumCarbonaat' bij 90°C (TACC₉₀) en van de 'Saturation Index' bij 90°C (SI₉₀) maken hier onderdeel van uit. De TACC₉₀ en SI₉₀ worden berekend uit de samenstelling van het drinkwater. Naast deze twee berekende parameters worden nog twee meetmethoden ontwikkeld, te weten de meting van het 'nucleërend vermogen' en de 'hechtingsmeting'.

Voor de berekening van de $TACC_{90}$ en SI_{90} heeft Kiwa het computerprogramma TACC90 ontwikkeld. Het computerprogramma kan behalve voor de berekening van de $TACC_{90}$ en SI_{90} ook worden gebruikt voor de berekening van:

- de samenstelling (calciumgehalte, waterstofcarbonaatgehalte, de pH, de ionsterkte) van drinkwater bij wijziging van de temperatuur;
- calciumcarbonaat-verzadigingsindices (SI en TACC), bij verschillende temperaturen (bijvoorbeeld de SI bij 10°C, SI₁₀).

1.2 De TACC₉₀ en SI₉₀

De TACC en SI zijn een maat voor de oververzadiging van het water ten opzichte van kalksteen (calciumcarbonaat). Het gehalte Theoretisch Afzetbaar CalciumCarbonaat (TACC) geeft aan hoeveel kalksteen neer moet slaan voor het water in evenwicht is. De Saturation Index (SI) is een maat voor de snelheid waarmee kalksteen zich afzet. De TACC₉₀ en SI₉₀ worden berekend bij 90°C, om aan te sluiten bij temperaturen die voorkomen aan de wand van verwarmingselementen in huishoudelijke warmwatertoestellen.

De TACC₉₀ geeft de maximale hoeveelheid kalksteen die kan ontstaan bij verwarming van het drinkwater tot 90°C, indien de opwarming in een gesloten systeem plaatsvindt en er dus geen ontgassing optreedt. De definitie van de TACC₉₀ luidt:

$$TACC_{90} = [Ca_{totaal}]_{actueel} - [Ca_{totaal}]_{evenwicht}$$

Hierin is

$[Ca_{totaal}]_{actueel}$	het totaal-calciumgehalte bij 90°C, indien geen neerslag
	van calciumcarbonaat optreedt (in mmol/l);
[Ca _{totaal}] _{evenwicht}	het totaal-calciumgehalte bij 90°C, indien calciumcarbo-
	naat is neergeslagen tot evenwicht (in mmol/l);

Hoeveel kalksteen daadwerkelijk afzet in huishoudelijke warmwatertoestellen hangt niet alleen van deze $TACC_{90}$ af, maar ook van de snelheid waarmee de kalkafzetting optreedt. Met name in doorstroom-warmwatertoestellen als gasgeisers wordt het water in een dusdanig korte tijd verwarmd, dat het evenwicht zich niet kan instellen. Juist in deze gevallen zal ook de snelheid waarmee de kalkafzetting optreedt een grote rol spelen. In de literatuur worden voor de kalkafzettingssnelheid verschillende vergelijkingen gegeven, maar deze hebben meestal de volgende vorm:

$$\frac{d(CaCO_3)}{dt} = S k_g F^{ie}(SI)$$

Hierin is

$\frac{d(CaCO_3)}{dt}$	de snelheid waarmee de kalksteen wordt gevormd;
S	het beschikbare kristallisatie-oppervlak
k _g	de reactiesnelheidsconstante. Deze hangt af van de temperatuur:
F ^{ie} (SI)	een functie van de SI. In de literatuur worden hiervoor verschillende functies gegeven.

De SI_{90} geeft de relatieve oververzadiging aan. Het is de verhouding tussen het ionenproduct van calcium en carbonaat en het oplosbaarheidsprodukt:

$$SI_{90} = \log(\frac{\{Ca^{2+}\} \{CO_3^{2-}\}}{K_s})$$

Hierin zijn

$$\{Ca^{2+}\}, \{CO_3^{2-}\}$$

de activiteiten in mol/l, na verwarming van het water tot 90°C de oplosbaarheidsconstante voor calciet bij 90 °C, in mol²/l².

Ks

De berekeningsgrondslagen, gebruikte formules, etc. zijn opgenomen in bijlage 1. Een eerste introductie in berekeningen aan het kalk-koolzuurevenwicht kan worden gevonden in de handboeken van Stumm en Morgan (1982), van Sontheimer e.a. (1980) of in het recent verschenen handboek van Morel en Hering (1993).

1.3 Toepassingsgebied

Het programma TACC90.EXE is ontwikkeld om de calciumcarbonaatverzadigingsindices te berekenen voor drinkwater, zoals dat in Nederland wordt gedistribueerd. Drinkwater in Nederland wordt onder andere gekenmerkt door:

- Ionsterkte kleiner dan 20 mmol/l;
- pH tussen 7 en 9,5.

De calciumcarbonaatverzadigingsindices kunnen worden berekend bij temperaturen tussen 0 en 90°C.

De grenzen voor de watersamenstelling waarbij de calciumcarbonaatverzadigingsindices kunnen worden berekend zijn ruimer genomen, zodat het programma ook kan worden gebruikt om de indices te berekenen van water uit onthardingsinstallaties. In tabel 1 (pagina 17) zijn de grenzen gegeven waaraan de watersamenstelling moet voldoen om een berekening te kunnen uitvoeren.

1.4 Wijzigingen ten opzichte van versie 1.1

Naar aanleiding van opmerkingen van gebruikers zijn een beperkt aantal wijzigingen doorgevoerd in versie 1.2 ten opzichte van versie 1.1. De wijzigingen betreffen met name de gebruikersvriendelijkheid van het programma. De wijzigingen die zijn doorgevoerd betreffen:

- Bij het invoeren van de watersamenstelling worden in versie 1.2 de ionsterkte en geleidbaarheid bij 20°C (EGV₂₀) altijd meteen in elkaar omgerekend, volgens de formule:

Ionsterkte = $0,165 \text{ EGV}_{20}$

Hierin is de ionsterkte uitgedrukt in mmol/l en de EGV₂₀ in mS/m.

In alle gevallen wordt de ionsterkte gebruikt voor de berekeningen. Deze ionsterkte is ook vermeld in de uitvoer-file.

In versie 1.1 werd de ionsterkte uitgerekend uit de EGV, maar niet omgekeerd. Hierdoor was het mogelijk om bij de ionsterkte 0 (nul) in te voeren, terwijl wel een waarde bij de EGV bleef staan. Het programma werd dan afgebroken. Ook in versie 1.1 werden de berekeningen in alle gevallen uitgevoerd met de waarde die bij de ionsterkte stond vermeld.

Bovenstaande formule voor de berekening van de ionsterkte uit de geleidbaarheid wijkt af van de in versie 1.1 gebruikte formule. In versie 1.1 werd de ionsterkte uit de geleidbaarheid berekend door de EGV te delen door 5.45. De nu gebruikte formule is in overeenstemming met de NEN 6535. In bijlage 1 wordt hier nader op in gegaan.

In versie 1.2 kan elk scherm worden verlaten met de **<Esc>**-toets. Eventueel doorgevoerde wijzigingen in het scherm worden teniet gedaan; de oorspronkelijke waarden blijven gehandhaafd. In de meeste gevallen wordt nog wel een bevestiging gevraagd: 'Afbreken (J/N)'. Indien een 'J' wordt ingetoetst wordt het scherm verlaten.

In versie 1.1 reageerde het programma niet op de <Esc>-toets. De vraag 'Abort (Y/N)' verscheen wel op het scherm, maar in alle gevallen werd de berekening toch uitgevoerd met de nieuw ingevoerde gegevens. De oude gegevens waren daarbij verloren.

- De handelingen die moeten worden verricht om files van schijf op te halen en weg te schrijven zijn vereenvoudigd. Zie hiervoor hoofdstuk 3. Aan de lay-out van de invoerfiles is overigens niets gewijzigd; files die zijn aangemaakt met versie 1.1 kunnen zondermeer worden gebruikt met versie 1.2.
- De lay-out van het scherm met de resultaten is vereenvoudigd. In versie 1.1 kwamen vier kolommen op het scherm, in versie 1.2 is dit beperkt tot 2 om verwarring te voorkomen. Bovendien is het aantal parameters dat in het scherm wordt getoond beperkt. In versie 1.2 is een optie opgenomen, waarmee het wel mogelijk om het uitgebreide scherm te tonen. In hoofdstuk 3 wordt nader op het uitvoerscherm ingegaan.
- De waarde van de TACC wordt in versie 1.2 in 2 decimalen gegeven, ten opzichte van 3 decimalen in versie 1.1. De derde decimaal is niet significant.
- De kleur van de keuzebalk is gewijzigd. Bij versie 1.1 kon verwarring optreden doordat het rode keuzeblok minder fel oplichtte dan de grijze achtergrond. Er is nu gekozen voor een groen keuzeblok, tegen een blauwe achtergrond. Misverstanden zijn hierdoor uitgesloten.

Versie 1.2 is in gebruik vanaf september 1994. Van april 1991 tot en met augustus 1994 is gewerkt met versie 1.1.

1.5 Hoe deze handleiding te gebruiken

In deze handleiding is informatie opgenomen over de werking van het computerprogramma 'TACC90'. In hoofdstuk 2 wordt installatie van het programma op een harde schijf beschreven. Hoofdstuk 3 gaat in op het werken met het programma. Hoofdstuk 4 gaat in op de interpretatie van de uitkomsten van de berekende TACC₉₀ en SI₉₀-waarden.

Bijlage 1 geeft de theoretische achtergronden van de berekeningen van de $TACC_{90}$ en SI₉₀. Bijlage 2 geeft oplossingen voor een aantal veel voorkomende vragen. In bijlage 3 zijn een aantal voorbeelden opgenomen van invoer- en uitvoerfiles. Deze informatie kan desgewenst ook worden gebruikt bij controle op de juiste werking van het programma. Om de werking van het programma op voorhand te controleren heeft Kiwa de uitkomsten van berekeningen vergeleken met reeds bestaande programmatuur. In bijlage 4 wordt hier nader op ingegaan.

Indien u nog niet eerder met het programma TACC90 hebt gewerkt raden wij u aan om hoofdstuk 2 ('installatie'), paragraaf 3.1 ('starten van het programma') en paragraaf 3.2 ('een eerste berekening') zorgvuldig door te nemen.

1.6 Vragen en problemen

Bij vragen over of problemen met het programma wordt aangeraden eerst de bijlage 2 met veel voorkomende vragen te bekijken. Mocht dit geen oplossing bieden, dan kan de gebruiker contact opnemen met:

Ir. H. Brink

Kiwa Onderzoek en Advies Sectie Conditionering en Membraantechnologie

Telefoon

03402 - 69675 (doorkiesnummer) 03402 - 69511 (algemeen nummer Kiwa)

Postadres:

Postbus 1072 3430 BB NIEUWEGEIN

2 INSTALLATIE

2.1 Hardware benodigdheden

Het programma TACC90.EXE werkt onder het besturingssysteem MS DOS. Bij voorkeur wordt gebruik gemaakt van een PC/AT 386 of 486, om de berekeningen voldoende snel te laten verlopen. Bij gebruik van een 386 versnelt installatie van een numerieke coprocessor de berekeningen.

Het programma TACC90.EXE is geschikt voor kleur-monitoren, waarbij de grafische kwaliteit niet van belang is (het programma werkt met zowel Hercules, VGA als EGA).

Bij gebruik van monochrome beeldschermen zullen in het algemeen ook geen problemen optreden. Mocht echter het keuzeblok onduidelijk oplichten tegen de achtergrond, dan kunt u contact opnemen met Kiwa (zie hoofdstuk 4). Wij verzorgen dan een aangepaste versie van het programma voor gebruik bij monochrome beeldschermen.

2.2 Installatie van het programma

Het is mogelijk om het programma te gebruiken direct vanaf de geleverde diskette, maar het starten van het programma verloopt sneller indien het programma wordt geïnstalleerd op een harde schijf. Installatie op een harde schijf verloopt als volgt:

- Maak eerst op de harde schijf een directory \TACC90 aan op de volgende manier.

Type achter de DOS-prompt:

cd\

en druk op **<Enter>**; type vervolgens:

md TACC90

en sluit dit af met **<Enter>**; type vervolgens:

cd TACC90

Doe de schijf TACC90 in een passend diskettestation, bijvoorbeeld diskettestation A. Type vervolgens achter de DOS-prompt:

copy a:*.*

en druk op **<Enter>**.

De volgende files worden van de schijf naar de directory TACC90 gekopieerd:

TACC90.EXE TEST.DAT

De file TACC90.EXE bevat het hoofdprogramma. De file TEST.DAT is een voorbeeld-file met invoergegevens.

Indien versie 1.1 van het programma TACC90.EXE al op de schijf was geïnstalleerd, dan wordt deze overschreven bij het kopiëren. De files

TACC90MO.EXE HELPSCH.PIC HOOFD.PCS HOOFD.PFC HOOFD.PFL

dienen van de schijf verwijderd te worden. Het betreft files die in versie 1.2 niet meer worden gebruikt.

3 WERKEN MET HET PROGRAMMA TACC90

3.1 Starten van het programma, de menubalk

Ga eerst naar de directory waarin het programma is weggeschreven, bijvoorbeeld door in te typen:

cd \tacc90

en door op **<Enter>** te drukken.

Het programma TACC90 wordt gestart door achter de DOS-prompt in te typen:

TACC90

en op **<Enter>** te drukken.

Het programma geeft een beginscherm te zien met informatie over het programma (zie figuur 1).



Figuur 1 Het beginscherm

Door de **<Enter>**-toets aan te slaan verschijnt de menu-balk boven in beeld (figuur 2).

Inc	oer Berek	en	Print	Einde
	Invoer mogelijkheid	via File of	Schern, geef	<enter></enter>
Figuur 2	De menuba	lk		

Op de menubalk zijn vier mogelijkheden aangegeven, te weten:

- invoer
- bereken
- print
- einde.

Door middel van de pijltjestoetsen -> en <- kan tussen de keuzemogelijkheden worden gewisseld. Een keuze wordt gemaakt door de **<Enter>**-toets aan te slaan, of door de eerste letter van de keuzemogelijkheid aan te slaan. Op onderste regel van het scherm worden de keuzemogelijkheden kort verduidelijkt.

Meteen na het starten van het programma is vooralsnog alleen de optie invoer mogelijk, aangezien eerst gegevens over de watersamenstelling moeten worden ingevoerd voordat een berekening kan worden uitgevoerd. Nadat er gegevens zijn ingevoerd zijn alle vier de mogelijkheden bereikbaar.

In de volgende paragraaf wordt het werken met het programma toegelicht aan de hand van een eerste berekening. Indien u nog niet eerder met het programma 'TACC90' hebt gewerkt raden wij u aan deze paragraaf zorgvuldig door te nemen. In de paragrafen 3.3 tot en met 3.6 wordt dieper ingegaan op de verschillende mogelijkheden die het programma heeft.

3.2 Een eerste berekening

In deze paragraaf wordt het werken met het programma toegelicht aan de hand van een voorbeeld. Deze paragraaf is met name bedoeld voor gebruikers die nog niet eerder met het programma hebben gewerkt. De $TACC_{90}$ en SI_{90} zullen worden berekend van een water met de volgende watersamenstelling:

- een calciumgehalte van 85 mg/l;
- een waterstofcarbonaatgehalte van 323 mmol/l;
- een pH van 7,52.

Het gemeten Elektrisch Geleidend Vermogen bedraagt 98 mS/m en de temperatuur van het water is 10,4 °C.

Na het starten van het programma (zie paragraaf 3.1) staat het scherm uit figuur 2 voor. Druk nu op de **<Enter>**-toets. Op het scherm komt nu de vraag of u de invoer via het toetsenbord ('Scherm') wilt ingeven, of wilt inlezen van een file:

Invoer	Bereken	Print	Einde	
Schern File				
				p.
Inv	ber gegevens via S	icherm, geef (Ent	er>	

Zet het groene vlakje met behulp van de pijltjestoetsen op 'Scherm' en druk op de **<Enter>**-toets. Het programma vraagt nu of u de gegevens wilt invoeren in de eenheid mg/l of in de eenheid mmol/l.

Zet het groene vlakje met behulp van de pijltjestoetsen op '0-mg/l' en druk op de **<Enter>**-toets. Het lege invoer-scherm is verschenen:

Vul nu de gevraagde watersamenstelling in, op de volgende manier:

- Type Voorbeeld en druk op de **<Enter>**-toets.
- Type **85** en druk op de **<Enter>**-toets.
- Type 323 en druk op de **<Enter>**-toets.
- Type 7.52 en druk op de <Enter>-toets.
- Type 0 en druk op de **<Enter>**-toets.
- Type 98 en druk op de <Enter>-toets.
- Type 10.4 en druk op de **<Enter>**-toets.

Het programma vraagt nu of u de gegevens in een invoer-file wilt bewaren. Zet het groene blokje met de pijltjestoetsen op 'Nee' en druk op de **<Enter>**-toets. Het groene blokje komt weer bij het vakje 'pompstation' te staan. Eventueel kunnen nu nog wijzigingen worden aangebracht in de opgegeven gegevens. Ga daarvoor met de pijltjestoetsen naar het betreffende vakje toe, en vul de juiste waarde in.

Staan alle gegevens goed ingevuld, druk dan op de $\langle F8 \rangle$ -toets. Het programma start met de berekening van de beginconcentraties. Na enige tijd verschijnt het volgende scherm:

TRUCCE	Bereken	Print	Einde
TACC 90 - V Pompstation	ersie 1.2 : V	oorbeeld	Kiwa N.U.
WATERSAMENS	TELLING BIJ	10.4 °C	===========
Ca	(mmo1/1):	2.12	
TAC	(mmo1/1):	5.72	
C02	(mmo1/1):	0.41	
HC03	(anao1/1):	5.30	
C03	(mmo1/1):	0.02	
Ionsterkte	(mmo1/1):	16.17	
pH	(-):	7.52	
SI	(-):	0.22	
TACC	(mmo1/1):	0.16	
=======================================		22222222222222222	
Incore and	elijkheid uja	File of Scherm	meef (Foter)

Zet het groene blokje in de menubalk op de optie **Bereken** en druk op de **<Enter>**-toets. Het programma vraagt nu de temperatuur waarbij de berekening moet worden uitgevoerd. Standaard staat **90** aangegeven. Druk op de **<Enter>**-toets. Het programma start de berekening. Na enige tijd

Druk op de **Enter**>-toets. Het programma start de berekening. Na enige tijd verschijnt het volgende scherm:

TACC 90 - Ve Pompstation	rsie 1.2 : U	oorbeeld	Kiwa N.V.
WATERSAMENST	ELLING BIJ	10.4 °C	90.0 °C
Ca	(mmo1/1):	2.12	2.12
TAC	(mmol/l):	5.72	5.72
C02	(umol/l):	0.41	0.49
HCO3	(amo1/1):	5.30	5.13
C03		0.02	0.09
lonsterkte pH	(1/101/1); (-);	16.17 7.52	15.82 7.33
 SI	 (-);	θ.22	1.80
TACC	(amo1/1):	0.16	0.95

De berekening is afgerond. In de tweede getallen-kolom onderaan staan de SI_{90} (waarde: 1,00) en de TACC₉₀ (waarde 0,95).

Sluit het programma af door met de pijltjestoetsen het groene blokje op de mogelijkheid **Einde** te plaatsen en op de **<Enter>**-toets te drukken. Het programma vraagt nu nog 'Programma verlaten (J/N) ?'. Druk op de **j**-toets. De DOS-prompt verschijnt weer in beeld.

3.3 Invoer

Na de keuze Invoer verschijnt een nieuw keuze menu, met twee opties:

- scherm
- file.

De gegevens van de watersamenstelling kunnen worden ingevoerd via het scherm of worden ingelezen uit een speciale invoerfile. Bij het programma is een voorbeeld van een invoerfile geleverd (TEST.DAT).

U maakt een keuze uit deze twee opties door het groene blokje met behulp van de pijltjestoetsen op de gewenste keuze te plaatsen, gevolgd door het aanslaan van de **<Enter>**-toets. U kunt ook een keuze maken door de eerste letter van de keuze in te toetsen (dus een s voor invoer via het beeldscherm, een **f** voor invoer via een bestaande file).

3.3.1 Invoer via het beeldscherm

De eerste keer dat deze optie wordt gekozen verschijnt een volgend keuzemenu, waarin moet worden aangegeven of de invoer gegeven wordt in de eenheid mg/l of in mmol/l. De keuze wordt weer gemaakt door het groene blokje met de pijltjestoetsen op gewenste optie te plaatsen, gevolgd door het aanslaan van de **<Enter>**-toets. Ook nu kan versneld worden gekozen door het cijfer **0** in te toetsen voor de optie mg/l of het cijfer **1** voor de optie mmol/l.

Indien later een nieuwe watersamenstelling wordt ingevoerd wordt dit keuzemenu overgeslagen, en wordt dezelfde eenheid gebruikt als voorheen.

Vervolgens worden de volgende parameters gevraagd:

- de naam van het pompstation (mag worden overgeslagen);
- het calciumgehalte;
- het waterstofcarbonaatgehalte;
- de **pH** van het water;
- de **ionsterkte** (in mmol/l); het programma berekent uit de ionsterkte meteen het EGV;
- indien de ionsterkte onbekend is kan het Elektrisch Geleidings Vermogen (EGV) worden gegeven (in mS/m); het programma berekent uit de EGV een nieuwe ionsterkte. Het programma rekent verder met de ionsterkte die nu op het scherm staat;
- de temperatuur (in °C) waarbij de pH is gemeten;
- tot slot wordt gevraagd of de gegevens moeten worden opgeslagen in een file. Indien de invoergegevens bewaard dienen te worden moet in het veld achter "Data opslaan", Ja worden ingevoerd door op <Enter> te drukken. Hierna verschijnt de vraag "Filenaam voor opslaan data". Hier kan de gewenste filenaam worden opgegeven. Standaard verlangt het programma filenamen met extensie .dat. Wilt u een overzicht van al bestaande invoer-files, dan dient u alleen <Enter> te geven voordat u

een filenaam hebt ingetypt. U verlaat het overzicht met de **<Esc>**-toets of maak een keuze door met de pijltjestoetsen naar de te kiezen file te gaan en af te sluiten met **<Enter>**.

Indien de opgegeven filenaam al aanwezig is wordt gevraagd of de file wel of niet mag worden overschreven. Indien met **Ja** wordt geantwoord kan met **<Enter>** of **<F8>** worden bevestigd. Indien met **Nee** wordt geantwoord moet een nieuwe filenaam worden opgegeven. Alle concentraties worden opgeslagen in de eenheid mmol/l.

Van elke parameter wordt de invoer afgesloten met **<Enter>**. Indien een onjuiste waarde is ingegeven kan dit worden hersteld door met de pijltjestoetsen op en neer terug te keren naar het betreffende veld, en de juiste waarde in te vullen.

Voor elke parameter zijn een onder- en een bovengrens in het programma opgenomen. Indien wordt geprobeerd een getal in te voeren dat buiten deze grenzen ligt, geeft het programma een foutmelding. De cursor blijft staan op het veld waar het juiste getal moet worden ingevoerd. De grenzen die zijn opgenomen zijn weergegeven in tabel 1.

	Invoer in	n mg/l	Invoer ir	n mmol/l
	Ondergrens	Bovengrens	Ondergrens	Bovengrens
Ca	10	400	0.25	10
HCO3	15	900	0.25	15
pН	6	10	6	10
Ionsterkte	1.83	183	1.83	183
EGV	10	999	10	999
Temperatuur	0	90	0	90

Tabel 1Onder- en bovengrenzen voor de invoer van het programmaTACC90.EXE

Indien u bij nader inzien toch geen nieuwe gegevens had willen invoeren, kunt u het invoerscherm verlaten met de $\langle Esc \rangle$ -toets in plaats van met $\langle F8 \rangle$. Het programma vraagt in dit geval om een bevestiging 'Afbreken (J/N)'. Door **j** in te toetsen verlaat u het invoerscherm; door **n** in te toetsen blijft u in het invoerscherm.

Indien alle waarden juist zijn ingevuld, sluit u de invoer af met de $\langle F8 \rangle$ toets. De beginconcentraties worden berekend, en op het scherm getoond. Figuur 3 geeft een voorbeeld van het scherm met resultaten. De keuze-balk verschijnt weer in beeld.

Invoer	Bereken	Prin	t Einde
TACC 90 - Ve Pompstation	ersie 1.2 : U	oorbeeld	Kiwa N.V.
Watersamens'	TELLING BIJ	19.4 °C	*************
Ca	(mmo1/1):	2.12	
TAC	(mmol/l):	5.72	
C02	(mmo1/1):	0.41	
HCD3	(mmc]/]):	5.30	
CO3	(mmo]/l):	0.82	
Ionsterkte	(mmo1/1):	16.17	
pH 	(-):	7.52	
SI	(-):	0.22	
TACC	(mmol/1):	8.16	

Figuur 3 Voorbeeld van het scherm na berekening van de beginconcentraties.

Toelichting bij het scherm met berekeningsresultaten (figuur 3)

Het scherm bestaat uit één kolom met getallen. Deze kolom geeft de watersamenstelling aan bij de opgegeven temperatuur. Van de watersamenstelling is gegeven:

- het totaal calciumgehalte (Ca) in mmol/l;
- het gehalte aan Totaal Anorganisch Koolstof (TAC), in mmol/l. Het TAC-gehalte is de som van het gehalte koolzuur (CO2), waterstofcarbonaat (HCO3) en carbonaat (CO3);
- het gehalte vrij koolzuur (CO2) in mmol/l;
- het gehalte waterstofcarbonaat (HCO3) in mmol/l;
- het gehalte carbonaat (CO3) in mmol/l;
- de **ionsterkte** in mmol/l;
- de **pH**;
- de **SI** bij de opgegeven temperatuur;
- de **TACC** (in mmol/l) bij de opgegeven temperatuur.

Het programma TACC90 berekent naast de hier gepresenteerde concentraties ook de vorming van de ionparen calciumwaterstofcarbonaat en calciumcarbonaat. Deze zijn niet expliciet in dit overzicht opgenomen, om het scherm overzichtelijk te houden. De waarde voor het totaal calciumgehalte is inclusief de ionparen calciumwaterstofcarbonaat en calciumcarbonaat; de getoonde waarde voor het waterstofcarbonaatgehalte is inclusief het ionpaar calciumwaterstofcarbonaat en de getoonde waarde voor het carbonaatgehalte is inclusief het ionpaar calciumcarbonaat. Een overzicht van de gehaltes waarbij de gehaltes voor de ionparen zijn uitgesplitst, kan worden verkregen door de uitkomsten naar een file te printen (zie paragraaf 3.5). De resultaten worden altijd getoond in de eenheid mmol/l. Deze resultaten kunnen worden omgerekend in de eenheid mg/l door te vermenigvuldigen met de molecuulmassa van het betreffende ion. De TACC kan worden omgerekend in de eenheid mg/l door de waarde in mmol/l te vermenigvuldigen met 100.

3.3.2 Invoer inlezen uit een file

De in een file bewaarde invoergegevens kunnen worden opgeroepen indien wordt gekozen voor de keuze **Invoer**, gevolgd door **File**. Het programma vraagt om een filenaam. De eisen die aan de lay-out van een dergelijke file worden gesteld zijn weergegeven in bijlage 3.

Indien de filenaam onbekend is, kan door middel van **<Enter>** een overzicht van de beschikbare files opgevraagd worden (standaard alle *.dat files). U komt nu in een filekeuzemenu. Uit dit menu kan een file worden geselecteerd door de balk op de gewenste file te zetten. Dit kan gebeuren met behulp van de pijltjestoetsen. De selectie vindt plaats door op **<Enter>** te drukken. Ook kan men alsnog de filenaam intypen. Hierbij verschijnt dan zodra men begint te typen een kadertje bovenin het menu, waaruit met weer kan ontsnappen door **<Esc>** te geven.

Het filekeuzemenu kan op verschillende manieren de files uit de directory weergeven. De volgende toetsen kunnen hierbij worden gebruikt:

<Alt-B> Hiermee wordt een hoger gelegen directory opgeroepen.

<Alt-C> Met deze keuze verschijnt bovenin het filekeuzemenu een balk, waarin een andere directory kan worden ingetypt.

- <Alt-D> Sorteert de files in de door DOS gegeven volgorde. Dit is tevens de standaardinstelling. Van de files worden weergegeven: grootte, datum en tijd van aanmaak en de protectiecode. Voor het wijzigen van de protectiecodes wordt verwezen naar programma's als Norton Utilities of PCtools.
- <Alt-E> Sorteert de files alfabetische op file-extensie.
- <Alt-N> Sorteert de filenamen op alfabetische volgorde.
- <Alt-S> Sorteert de filenamen op grootte.
- <Alt-T> Sorteert de filenamen op datum/tijd van de file.
- <Alt-O> Sorteert de filenamen in op- of aflopende DOS-volgorde.

<Alt-Z> Vergroot de menubox in verticale richting zodat meer files zichtbaar worden. Met de tweede keer <Alt-Z> krijgt de menubox weer het oorspronkelijke formaat.

spatie> Met de spatiebalk kan een bredere menubox worden gepresenteerd, waarin de filenamen zonder verdere informatie naast en onder elkaar worden gepresenteerd. Alle bovengenoemde toetsen kunnen ook in dit venster worden gebruikt. Met nogmaals <spatie> verschijnt het normale scherm weer.

Het filekeuzemenu is voorzien van een help-faciliteit. Deze kan worden opgeroepen door de functietoets $\langle F1 \rangle$ in te drukken. In deze help-faciliteit staan de bovengenoemde mogelijkheden om de files op een andere wijze te

sorteren kort beschreven. Het help-scherm wordt verlaten met de **<Esc>**-toets.

Indien u een overzicht wenst van files met een andere extensie dan *.dat, of indien u een overzicht wenst van files in een andere directory, dan drukt u op **<Alt-C>**. Er verschijnt een window, waarin u de gewenste directory en extensie kunt ingeven. U sluit dit window met **<Enter>**. Standaard worden de files weergegeven alsof <Alt-T> en <Alt-O> zijn ingedrukt.

Na intypen van de filenaam moet de $\langle F8 \rangle$ -toets worden aangeslagen. De beginconcentraties worden berekend, en op het scherm getoond. Figuur 1 (in paragraaf 3.2.1) geeft een voorbeeld van het scherm met resultaten en een toelichting hierbij. De keuze-balk verschijnt weer in beeld.

In bijlage 3 is de lay-out van een invoer-file weergegeven. Dit maakt het mogelijk om desgewenst met andere computerprogrammatuur files aan te maken die kunnen worden ingelezen in het programma TACC90.EXE.

3.4 Bereken

Door op de menubalk de keuze 'Bereken' te kiezen wordt de mogelijkheid geboden om de watersamenstelling (pH, HCO_3^- , ionsterkte, etc.) en de SI en TACC te bereken bij een willekeurige temperatuur tussen 0 en 90°C.

Na de keuze '**Bereken**' vraagt het programma om de temperatuur. Standaard wordt de waarde van 90°C weergegeven, die nodig is voor de berekening van de **TACC**₉₀ en SI₉₀. Indien u de berekeningen bij een andere temperatuur wilt uitvoeren dient u deze waarde in te typen. Er kunnen waarden worden ingegeven tussen 0 en 90°C. De invoer van de temperatuur wordt afgesloten met de **<Enter>**-toets of met de **<F8>**-toets.

De resultaten worden op het scherm getoond. Figuur 4 geeft hiervan een voorbeeld. Intussen is ook de menu-balk weer op het scherm verschenen. Er kunnen meerdere berekeningen worden uitgevoerd met dezelfde invoergegevens.

TACC 90 - U Pompstation	ersie 1.2	borbee ld	Kiwa N.U.
Watersamens	TELLING BIJ	10.4 °C	90.0 °C
Ca	(amo1/1):	2.12	2.12
TAC	(anao1/1):	5.72	5.72
C02	(mmo1/1):	0.41	0.49
HCD3	(mmo1/1):	5.30	5.13
CO3	(mms1/1):	0.02	0.09
lonsterkte	(mmol/l):	16.17	15.82
pH	(-):	7.52	7.33
SI	·	0.22	1.00
TACC	(amo1/1):	0.16	0.95
) I IACC 	(-): (mmol/l):	0.22 0.16	1.00 0.95

Figuur 4 Voorbeeld van het scherm met de resultaten van de berekening van de $TACC_{90}$ en SI_{90} .

Het scherm bestaat uit twee kolommen met getallen. De eerste kolom geeft de watersamenstelling aan bij de temperatuur waarbij de analyses zijn uitgevoerd (zie paragraaf 3.2). De tweede kolom geeft de watersamenstelling bij de temperatuur waarbij de TACC en SI moeten worden berekend (standaard 90°C).

De schermopbouw is verder identiek aan het scherm met de berekeningsresultaten in paragraaf 3.2.1.

De TACC₉₀ en SI₉₀ worden afgelezen onderaan in de tweede getallen kolom.

3.5 Print

De uitkomsten van de berekeningen kunnen worden bewaard door deze weg te schrijven in een zogenaamde ASCII-file, of door de resultaten direct weg te schrijven op een aan de PC gekoppelde printer. Hiervoor moet op de keuze-balk de optie '**Print**' worden gekozen, gevolgd door 'File' of door 'Printer'. Onder de optie 'Print' is het ook mogelijk om op het scherm de uitgebreide schermweergave te laten tonen, door de keuze 'Scherm'.

3.5.1 Printer

Bij de keuze '**Printer**' worden de resultaten direct weggeschreven op een aan de PC gekoppelde printer. De lay-out van de uitvoer is gelijk aan de uitvoer op het beeldscherm. Indien gekozen wordt voor 'File', wordt gevraagd naar een filenaam. Reeds bestaande files kunnen worden opgevraagd door het intypen van een alleen de \langle Enter>-toets of de \langle F8>-toets. Een keuze kan worden gemaakt door met de pijltjestoetsen naar de gewenste file te gaan en door de \langle Enter> aan te slaan.

Standaard worden alle files met extensie *.out weergegeven. Wilt u een andere extensie of directory invoeren, dan dient u <**Alt-C**> in te drukken. U kunt de weergave van de files in het filekeuzemenu wijzigen. In paragraaf 3.2.2 zijn de verschillende mogelijkheden hiervoor aangegeven.

De lay-out van een print-file is weergegeven in figuur 5.

TACC 90 - V	ersie 1.2		K	iwa N.V.	
Pompstation	ı :	Case 1			
		***********		*******	
WATERSAMENS	TELLING BIJ	12.0 °C	90	0.0 °C	
Ca	(mmol/l):	1.83	1	. 83	
TAC	(mmol/1):	4.65	4	.65	
CO2	(mmol/1):	0.25	0	.33	
HCO3	(mmol/l):	4.38	4	. 23	
CO3	(mmol/l):	0.02	0	.09	
Ionsterkte	(mmol/l):	12.40	12	.10	
рН	(-):	7.64	7	. 42	
ST	(-):	0.25	0	. 98	
TACC	(mmol/l):	0.13	õ	.75	
WATERSAMENS	TELLING BIJ	12.	0 °C	90	.0 °C
IONENPAREN	UITGESPLITST	actueel	evenwicht	actueel	evenwicht
Ca totaal	(mmol/l):	1.83	1.70	1.83	1.08
Ca 2+	(mmol/l):	1.77	1.65	1.66	1.03
TAC	(mmol/1):	4.65	4.52	4.65	3.90
CO2	(mmol/l):	0.25	0.37	0.33	0.99
нсоз -	(mmol/l):	4.33	4.09	4.14	2.86
CO3 2-	(mmol/l):	0.01	0.01	0.01	0.00
CaHCO3-ion	(mmol/l):	0.05	0.04	0.09	0.04
CaCO3-ion	(mmol/l):	0.01	0.01	0.08	0.01
Ionsterkte	(mmol/l):	12.40	12.04	12.10	10.18
рн	(-):	7.64	7.44	7.42	6.79
SI	(-):	0.25	0.00	0.98	0.00
TACC	(mmol/1):	0.13	0.00	0.75	0.00

Figuur 5 Een voorbeeld van een print-file

De file bestaat uit twee delen. In het bovenste deel is de lay-out identiek aan het standaard uitvoerscherm (zie paragraaf 3.2.1). Daaronder zijn de resultaten opnieuw weergegeven, maar daarbij zijn expliciet de ionparen calciumwaterstofcarbonaat en calciumcarbonaat uitgesplitst en zijn ook kolommen toegevoegd van de watersamenstelling in evenwicht met calciumcarbonaat. In paragraaf 3.3.3 wordt dit nader toegelicht.

De tekst in de print-file kan worden ingelezen in een tekstverwerker. Op deze wijze kunnen de resultaten eenvoudig worden opgenomen in een rapport. Om een goede lay-out in kolommen te behouden is het hierbij wel van belang dat een 'niet-proportioneel' lettertype wordt gekozen.

3.5.3 Scherm

Door de optie 'Print - Scherm' te kiezen wordt op het scherm de uitgebreide scherm-lay-out getoond (figuur 6).

TACC 90 - Ver Pompstation	rsie 1.2 : Vo	orbeeld			Kiwa N.V.
Watersamenst Ionenenparen	ELLING BIJ UITGESPLITST	10 actueel	.4 °C evenwicht	90 actueel	.0 °C evenwicht
Ca totaal	(mmo]/]):	2.12	1.96	2.12	1.17
Ca 2+	(mmol/l):	2.05	1.90	1.93	1.12
TAC	(mmol/1):	5.72	5.56	5.72	4.76
C02	(mmol/1):	0.41	0.56	0.49	1.36
HCO3 -	(mmol/1):	5.23	4.93	5.01	3.35
CO3 2-	(mmo1/1):	0.01	0.01	0.01	0.00
CaHCO3-ion	(amo1/1):	0.06	0.06	0.12	0.05
CaCO3-ion	(mmol/l):	0.01	0.01	6.68	0.01
Ionsterkte	(mmol/l):	16.17	15.71	15.82	13.34
pH	(-):	7.52	7.35	7.33	6.72
SI	(-):	8.22	-0.09	1.00	9.60
TACC	(mmol/1):	0.16	6.00	0.95	0.00

Figuur 6 Het scherm waarbij de ionparen zijn uitgesplitst en de watersamenstelling ook is gegeven bij evenwicht met calciumcarbonaat.

Toelichting bij het scherm

Op het scherm worden vier kolommen getoond. De eerste kolom geeft de watersamenstelling zoals opgegeven. De tweede kolom geeft de watersamenstelling bij dezelfde temperatuur in evenwicht met calciumcarbonaat. De derde kolom geeft de watersamenstelling na wijziging van de temperatuur. De vierde kolom geeft de watersamenstelling bij deze gewijzigde temperatuur en in evenwicht met calciumcarbonaat.

In iedere kolom staan de volgende gegevens:

- het gehalte totaal calcium (**Ca totaal**). Deze waarde komt overeen met het eerder genoemde Ca. 'Ca totaal' is de som van het gehalte vrij calcium (Ca2+), het ionpaar calciumwaterstofcarbonaat (CaHCO3-ion) en het ionpaar calciumcarbonaat (CaCO3-ion);
- het gehalte vrij calcium (**Ca**²⁺). Dit is dus <u>zonder</u> de ionparen calciumwaterstofcarbonaat en calciumcarbonaat;
- het gehalte aan Totaal Anorganisch Koolstof (TAC), in mmol/l. Het TAC-gehalte is de som van het gehalte koolzuur (CO2), waterstofcarbonaat (HCO3-), carbonaat (CO3 2-), het ionpaar calciumwaterstofcarbonaat (CaHCO3-ion) en het ionpaar calciumcarbonaat (CaCO3-ion);
- het gehalte vrij koolzuur (CO2) in mmol/l;
- het gehalte waterstofcarbonaat (HCO3-) in mmol/l. Dit is zonder het ionpaar calciumwaterstofcarbonaat;

- het gehalte carbonaat (CO3 2-) in mmol/l. Dit is <u>zonder</u> het ionpaar calciumcarbonaat;
- het gehalte ionpaar calciumwaterstofcarbonaat (CaHCO3-ion);
- het gehalte ionpaar calciumcarbonaat (CaCO3-ion);
- de **ionsterkte** in mmol/l;
- de **pH**;
- de SI bij de opgegeven temperatuur;
- de **TACC** (in mmol/l) bij de opgegeven temperatuur.

De parameters TAC, CO2, ionsterkte, pH, SI en TACC zijn identiek aan dezelfde parameters in de standaard scherm-weergave. Het gehalte HCO3 in de standaard scherm weergave is de som van het gehalte HCO3⁻ en het ionpaar calciumwaterstofcarbonaat (CaHCO3-ion) in de uitgebreide weergave. Het gehalte CO3 in de standaard scherm weergave is de som van het gehalte CO3²⁻ en het ionpaar calciumcarbonaat (CaHCO3-ion) in de uitgebreide weergave.

3.6 Einde

Door op de keuze-balk de optie **Einde** aan te slaan wordt het programma gestopt. U kunt het programma ook verlaten door de **<Esc>**-toets aan te slaan. In beide gevallen wordt nog een bevestiging gevraagd of u het programma echt wilt beëindigen.

4 INTERPRETATIE VAN DE UITKOMSTEN VAN DE BEREKENINGEN

De SI en TACC kunnen zowel nul, positief als negatief zijn. Zijn de SI en TACC nul, dan is het water in evenwicht met calciumcarbonaat. Calciumcarbonaat lost niet op en slaat niet neer. Bij een positieve waarde van de SI en TACC is het water kalkafzettend, bij een negatieve waarde van de SI en TACC is het water kalkagressief. Een negatieve TACC komt overeen met wat ook wel genoemd wordt het gehalte 'agressief koolzuur'.

De TACC₉₀ en SI₉₀ zijn voor watertypen in Nederland vrijwel altijd positief. Er zijn nog geen grenswaarden bekend waaraan de TACC₉₀ en SI₉₀ moeten voldoen om problemen met kalkafzetting te voorkomen. Eén van de projecten in het VEWIN-onderzoekprogramma is er op gericht dergelijke grenswaarden te formuleren. Dit onderzoek wordt uitgevoerd onder begeleiding van de Kiwa-Projectbegeleidingsgroep Kalkafzetting.

Een eerste aanzet voor een grenswaarde voor de $TACC_{90}$ is verkregen in een studie die in samenwerking met de Stichting Waterlaboratorium Zuid is uitgevoerd voor de N.V. Waterleiding Maatschappij Limburg. Gebleken is dat in de provincie Limburg in gebieden waar de $TACC_{90}$ lager is dan 0,75 mmol/l minder dan 5% van de aanwezige elektrische boilers wordt ontkalkt.

5 LITERATUUR

EEKEREN, M.W.M. VAN, H. BRINK en TH.J.J. VAN DEN HOVEN: 1991. 'Ontharden van drinkwater: recent onderzoek in Nederland'. De Ingenieur, <u>103</u> nr. 2, pp. 16-19.

EEKHOUT, J.M.J.M. VAN, K.J. HOOGSTEEN, B.J.A.M. HARING en M.W.M. VAN EEKEREN: 1991 . '*Problemen met kalkafzetting*'. H₂O <u>24</u> nr. 12, pp. 310-314.

EEKHOUT, J.M.J.M. VAN, M.W.M. VAN EEKEREN en H. BRINK: 1992. 'Kiwa-workshop: Vóórkomen en voorkómen van kalkafzetting'. H_2O <u>25</u> nr. 25, pp. 697-699.

MOREL, F.M.M. and J.G. HERING: 1993. 'Principles and applications of aquatic chemistry'. Wiley & Sons, London.

NEDERLANDS NORMALISATIE INSTITUUT: 1986. 'NEN 6535 - Water: Berekening of schatting van de ionsterkte'.

NEDERLANDS NORMALISATIE INSTITUUT: 1990. 'Nederlandse Praktijk Richtlijn 6538 - Toelichting bij de bepaling van agressiviteit ten opzichte van calciumcarbonaat en de berekening ten behoeve van de ontzuring volgens NEN 6533 en 6536'.

PLUMMER, L.N. en E. BUSENBERG: 1982. 'The solubilities of calcite, aragonite and vaterite in CO_2 - H_2O solutions between 0 and 90°C'. Geochim. et Cosmochim. Acta <u>46</u>, pp. 1011-1040.

SONTHEIMER, H., P. SPINDLER en U. ROHMAN: 1980. 'Wasserchemie für Ingenieure'. Engler-Bunte-Institut der Universität Karlsruhe. ZfGW-Verlag GmbH, Frankfurt/Main.

STUMM, W. en J.J. MORGAN: 1982. 'Aquatic chemistry'. Wiley & Sons, London.

BLJLAGE 1 Achtergronden bij de berekening van de TACC₉₀ en SI₉₀

1.1 Berekening kalk-koolzuur evenwicht bij hogere temperaturen

Voor berekeningen aan het kalk-koolzuur-evenwicht is in Nederland een standaard beschikbaar, in de vorm van de Nederlandse Praktijk Richtlijn 6538 (1990). Op basis van deze NPR 6538 zijn de berekeningen gegeven in de Nederlandse Norm NEN 6533 voor de 'Bepaling van de agressiviteit ten opzichte van calciumcarbonaat en berekening van de verzadigingsindex'. De NPR 6538 en NEN 6533 zijn echter in toepassingsgebied beperkt tot het temperatuurtraject van 0 tot 30°C. Voor de berekening van de oververzadiging (TACC en SI) bij 90°C zijn deze standaarden dan ook niet zonder meer geschikt.

De NPR 6538 baseert zich op twee artikelen, te weten:

- PLUMMER, L.N. EN E. BUSENBERG: 1982. 'The solubilities of calcite, aragonite and vaterite in CO₂-H₂O solutions between 0 and 90°C'. Geochim. et Cosmochim. Acta <u>46</u>, pp. 1011-1040.
- JACOBSON, R.L. EN D. LANGMUIR: 1974. 'Dissociation constants of calcite and CaHCO₃⁺ from 0 to 50°C'. Geochim. et Cosmochim. Acta 38, pp. 301-318.

Voor berekeningen tot 90°C is het artikel van Jacobson en Langmuir niet geschikt. De berekeningen van de $TACC_{90}$ en SI₉₀ zijn dan ook gebaseerd op het werk van Plummer en Busenberg.

Het artikel van Plummer en Busenberg bevat naast resultaten van eigen metingen, een grootschalig overzicht van literatuur op het gebied van het kalk-koolzuur-evenwicht. Sinds 1982 wordt het werk van Plummer en Busenberg in de literatuur algemeen aangehaald als de huidige stand der wetenschap op het gebied van berekeningen aan het kalk-koolzuur-evenwicht.

In het artikel van Plummer en Busenberg wordt duidelijk gemaakt dat het belangrijk is om de ionparen $CaCO_3^0$ en $CaHCO_3^+$ in de berekeningen mee te nemen. In de NPR 6538 en NEN 6533 is dit vereenvoudigd uitgevoerd, door de berekeningen zonder ionparen uit te voeren en de resultaten met een correctiefactor te corrigeren. Deze benadering is gebaseerd op het werk van Jacobson en Langmuir, en maakt het mogelijk om snel en eenvoudig (zonder computer) berekeningen aan het kalk-koolzuur-evenwicht uit te voeren. Door deze verschillen in berekeningswijze tussen Plummer en Busenberg en de NPR 6538 en NEN 6533 treden verschillen op in de uitkomsten. Deze verschillen liggen in de orde van grootte tot 0,05 pH-eenheid en 0,05 mmol/l TACC, voor temperaturen tot 30°C en bij watersamenstellingen die in Nederland voorkomen als drinkwater.

Metingen aan drinkwater in Nederland hebben laten zien dat de vergelijkingen van Plummer en Busenberg geschikt zijn voor berekening van het kalkkoolzuur-evenwicht in drinkwater bij temperaturen tot 90°C (Van Buchem en Brink, 'De pH bij verhogen van de temperatuur', 1990, Kiwa-SWI 90.132, en Van Bennekom en Brink, 1991, 'Overeenstemming tussen gemeten kalkafzetting bij opwarming van drinkwater en waarden van de TACC₉₀', Kiwa-SWI 91.132). In dit onderzoek is bevestigd dat de uitkomsten van de berekeningen beter overeenstemmen met de gemeten waarden, als de ionparen CaCO₃⁰ en CaHCO₃⁺ worden opgenomen in de berekening.

Voor een heldere introductie in het uitvoeren van berekeningen aan het kalkkoolzuur-evenwicht verwijzen wij naar de handboeken van Stumm en Morgan (1982) en van Sontheimer e.a. (1980).

1.2 Overzicht van vergelijkingen

De volgende componenten zijn opgenomen in de berekening van de TACC₉₀ en SI₉₀: Ca²⁺

Ca²⁺ CO₃²⁻ H₃O⁺ OH⁻

Deze componenten gaan in water reacties aan, waarbij de volgende ionsoorten ontstaan:

 CO_2 HCO₃⁻ H₂O CaCO₃⁰ (ionpaar) CaHCO₃⁺ (ionpaar)

Daarnaast speelt de vorming van het mineraal calciet een rol: $CaCO_{3(s)}$ (neerslag)

Het betreft het kalk-koolzuur-evenwicht, inclusief de ionparen calciumcarbonaat en calciumwaterstofcarbonaat. In de berekeningen zijn verder de temperatuur en de ionsterkte van belang.

De reacties die optreden zijn evenwichtsreacties:

Reactie:

Evenwichtsconstante:

$CO_2 + 2 H_2O$	$-HCO_3^- + H_3O^+$	\mathbf{K}_1
$HCO_3^- + H_2O$	$- CO_3^{2-} + H_3O^+$	K ₂
2 H ₂ O	$- H_3O^+ + OH^-$	K _w
$Ca^{2+} + CO_3^{2-}$	$- CaCO_3^0$	K _{CaCO3}

$$Ca^{2+} + HCO_{3}^{-} \leftarrow CaHCO_{3}^{+} \qquad K_{CaHCO_{3}}$$
$$Ca^{2+} + CO_{3}^{2-} \leftarrow CaCO_{3}_{(s)} \qquad K_{s}$$

De evenwichtsconstanten zijn als volgt gedefinieerd:

$$K_{1} = \frac{\{HCO_{3}^{-}\} \{H_{3}O^{+}\}}{\{CO_{2}\}}$$

$$K_{2} = \frac{\{CO_{3}^{2}\} \{H_{3}O^{+}\}}{\{HCO_{3}^{-}\}}$$

$$K_{w} = \{OH^{-}\} \{H_{3}O^{+}\}$$

$$K_{CaCO3} = \frac{\{CaCO_{3}^{0}\}}{\{Ca^{2+}\} \{CO_{3}^{2-}\}}$$

$$K_{CaHCO3} = \frac{\{CaHCO_{3}^{+}\}}{\{Ca^{2+}\} \{HCO_{3}^{-}\}}$$

$$K_s = \{Ca^{2+}\} \{CO_3^{2-}\}$$

In deze vergelijkingen is {i} de activiteit van ion i. Dit is gedefinieerd als:

 $\{i\}=f_i\ [i]$

Hierin is f_i de activiteits coëfficiënt en [i] de concentratie (in mol/l) voor ion i. De activiteits coëfficiënt en worden berekend uit:

$$\log f_i = \frac{-A z_i^2 \sqrt{I}}{1 + B a_i \sqrt{I}} + b_i I$$

Hierin is I de ionsterkte, A en B zijn parameters die alleen van de temperatuur afhangen, a_i en b_i parameters die alleen van het ionsoort afhangen en z_i de valentie van ionsoort i.

De ionsterkte (in mol/l) wordt berekend met:

$$I = I_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2} \sum_{i=1}^{2} \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \sum_{i=1}^{2} \sum_{i=1}^{2} \sum_{i=1}^{2$$

waarin I_0 de bijdrage aan de ionsterkte is van componenten die niet in het kalk-koolzuur-evenwicht meedoen (zoals Na⁺, Cl⁻, SO₄²⁻, etcetera), z_i de valentie is van het ion i en [i] de concentratie (in mol/l) van het ion i.

De parameters A en B zijn (NPR 6538):

voor temperaturen tot 30°C: A = - 0,275813 + 0,0017439 T + 79,5346/T B = + 0,2829 + 0,0001533 T voor temperaturen vanaf 30 tot en met 90°C: A = + 0,15889 + 0,0011653 T B = + 0,27616 + 0,0001750 T

Hierin is T de temperatuur in Kelvin.

De parameters a_i , b_i en z_i zijn:

Ion	a _i	b _i	Z _i
HCO ₃ -	5,4	0	1
CO ₃ ²⁻	5,0	0	2
H ₃ O ⁻	9,0	0	1
OH-	3,5	0	1
Ca ²⁺	5,0	0,165	2
CaHCO ₃ ⁺	5,4	0	1
CaCO ₃ ⁰	0	0,5	0

De waarden voor de evenwichtsconstanten die worden gebruikt in de berekening zijn afkomstig van Plummer en Busenberg (1982):

$\log K_1 =$	- 356,3094 - 0,06091964 T + 21834,37/T + 126,8339 log(T) - 1684915/T ²
$\log K_2 =$	- 107,8871 - 0,03252849 T + 5151,79/T + 38,92561 log(T) - 563713,9/T ²

$$\begin{split} \log K_{w} &= +22,801 - 0,010365 \cdot T - 4787,3/T - 7,1321 \cdot \log(T) \\ \log K_{CaCO3} &= -1228,732 - 0.299444 \cdot T + 35512,75/T + \\ & 485,818 \cdot \log(T) \end{split} \\ \log K_{CaHCO3} &= +1209,120 + 0,31294 \cdot T - 34765,05/T - 478,782 \cdot \log(T) \\ \log K_{s} &= -171,9065 - 0,077993 \cdot T + 2839,319/T + 71,595 \cdot \log(T) \end{split}$$

In deze vergelijkingen is T de temperatuur in Kelvin.

Bij de berekeningen worden verder nog drie massa-balansen gebruikt, te weten voor het anorganisch koolstofgehalte (TAC), voor de alkaliniteit (het m-getal) en voor het calciumgehalte:

$$TAC = [CO_{2}] + [HCO_{3}] + [CO_{3}] + [CaCO_{3}] + [CaHCO_{3}]$$

m-getal = 2 [CO_{3}] + [HCO_{3}] + [OH] - [H_{3}O^{+}] + 2 [CaCO_{3}] + [CaHCO_{3}]
+ [CaHCO_{3}]
$$Ca_{Total} = [Ca^{2+}] + [CaCO_{3}] + [CaHCO_{3}]$$

1.3 Berekeningssystematiek

Het kalk-koolzuur-evenwicht, zoals beschreven in het vorige hoofdstuk, kent 10 verschillende componenten en ionsoorten. De activiteit van water is in verdunde waterige oplossingen per definitie 1, zodat 9 onbekenden overblijven. Er zijn 6 vergelijkingen (de evenwichtsvergelijkingen), zodat 3 (9-6) componenten of ionsoorten gemeten moeten worden om het systeem te beschrijven. Daarnaast moeten de temperatuur en de ionsterkte gemeten worden.

In het programma 'TACC90' is ervoor gekozen de volgende 3 componenten en ionsoorten te gebruiken als invoergegevens voor de berekeningen:

- het totaal-calciumgehalte;
- het gehalte waterstofcarbonaat;
- de pH.

Deze gegevens worden routinematig en veelvuldig door waterleidingbedrijven gemeten.

Zijn deze gegevens bekend, dan kan elke andere ionsoort/component worden berekend. In de berekeningen staan de massa-balansen centraal. Uit de ingevoerde gegevens wordt daarom eerst het TAC-gehalte en het m-getal berekend. Bij verandering van de temperatuur (bijvoorbeeld verhoging van de temperatuur tot 90°C) veranderen het TAC-gehalte, het m-getal en het totaal-calciumgehalte niet. De samenstelling van het water bij 90°C wordt dan ook berekend uit de volgende gegevens:

- het totaal-calciumgehalte;
- het TAC-gehalte;
- het m-getal;

aangevuld met de temperatuur en ionsterkte.

Uit de samenstelling van het water worden vervolgens de $TACC_{90}$ en SI_{90} berekend.

Indien de ionsterkte onbekend is kan in de plaats hiervan het elektrisch geleidingsvermogen EGV worden opgegeven. De ionsterkte (I) wordt vervolgens geschat, conform NEN 6535:

I = 0,165 EGV

De formule geldt voor Nederlandse drinkwatersoorten. Het geeft een benadering van de ionsterkte. Het verdient aanbeveling om - indien mogelijk - de ionsterkte te berekenen uit een gedetailleerde wateranalyse.

Samenvattend verloopt de berekening als volgt:

- berekening van het TAC-gehalte en van het m-getal (uit [Ca_{totaal}], [HCO₃⁻], pH, temperatuur en ionsterkte);
- berekening van de evenwichtsligging van het kalk-koolzuur-evenwicht bij 90°C (uit [Ca_{totaal}], TAC, m-getal, ionsterkte en temperatuur (=90°C));
- berekening van de $TACC_{90}$ en SI_{90} .

1.4 Structuur programma TACC90

In het programma TACC90 komen verschillende modules voor. Het betreft eenheden voor:

- de invoer van de watersamenstelling (Ca, HCO₃⁻, ionsterkte, pH en temperatuur);
- de berekening van de watersamenstelling bij de opgegeven actuele watertemperatuur. Het betreft met name de berekening van het TACgehalte en van het m-getal;
- het wijzigen van de temperatuur (standaard 90°C);
- de berekening van de watersamenstelling bij 90°C en van de TACC en SI bij 90°C;
- het wegschrijven van de resultaten naar het scherm, printer of file.

In dit hoofdstuk zal nader worden ingegaan op de structuur van de module waarin de TACC en SI worden berekend. De volgende handelingen worden achtereenvolgens uitgevoerd:

- Berekening watersamenstelling zonder neerslag van calciumcarbonaat:
 - . Berekening van de evenwichtsconstanten aan de hand van de temperatuur;
 - . Iteratie van de ionsterkte
 - . Berekening van de activiteitscoëfficiënten
 - . Iteratie ionparen $CaHCO_3^+$ en $CaCO_3^0$
 - Berekenen van de SI₉₀
- Berekenen watersamenstelling met neerslag van calciumcarbonaat:
 - . Berekening van de evenwichtsconstanten bij 90°C;
 - Iteratie van de ionsterkte
 - . Berekening van de activiteitscoëfficiënten
 - . Iteratie ionpaar CaHCO₃⁺
 - . Iteratie van de hoeveelheid neergeslagen calciumcarbonaat
 - Berekenen van de $TACC_{90}$.

Er hoeft bij de berekening van de watersamenstelling met neerslag van calciumcarbonaat geen aparte iteratie uitgevoerd te worden voor het ionpaar $CaCO_3^0$, aangezien er in dit geval geldt dat $K_s = \{Ca^{2+}\}\{CO_3^{2-}\}$, zodat $\{CaCO_3^0\} = K_{CaCO_3} \cdot K_s$.

Elke iteratie bestaat uit de volgende stappen:

- initialiseren door een ondergrens en bovengrens van de te berekenen component te definiëren
- een nieuwe schatting maken (bijvoorbeeld via de halveringsmethode)
- met deze schatting de evenwichtssamenstelling berekenen
- toetsen of de nieuw berekende waarde van de component te hoog of te laag is, en daarmee de ondergrens en bovengrens aanpassen
- stoppen als het verschil tussen onder- en bovengrens kleiner wordt dan de beoogde nauwkeurigheid.

De werking van de routines voor het oplossen van de evenwichtsvergelijkingen in het programma TACC90 is getoetst aan het computerprogramma PHREEQE. PHREEQE is een veel gebruikt programma voor de berekening van complexe chemische evenwichten. In bijlage 4 zijn de resultaten van deze toetsing opgenomen. Gebleken is dat de uitkomsten van de berekening met het programma TACC90 goed overeenkomen met uitkomsten van het programma PHREEQE.

1.5 Literatuur

BUCHEM, H.J VAN en H. BRINK: 1990. 'De pH bij verhogen van de temperatuur', Kiwa-SWI 90.132

BENNEKOM C.A. VAN en H. BRINK: 1991. 'Overeenstemming tussen gemeten kalkafzetting bij opwarming van drinkwater en waarden van de $TACC_{90}$ '. Concept-rapport Kiwa-SWI 91.132

EEKHOUT, J.M.J.M. VAN, K.J. HOOGSTEEN, B.J.A.M. HARING en M.W.M. VAN EEKEREN: 1991 . '*Problemen met kalkafzetting*'. H₂O <u>24</u> nr. 12, pp. 310-314.

EEKHOUT, J.M.J.M. VAN, M.W.M. VAN EEKEREN en H. BRINK: 1992. 'Kiwa-workshop: Vóórkomen en voorkómen van kalkafzetting'. H_2O <u>25</u> nr. 25, pp. 697-699.

JACOBSON, R.L. en D. LANGMUIR: 1974. 'Dissociation constants of calcite and $CaHCO_3^+$ from 0 to 50°C'. Geochim. et Cosmochim. Acta <u>38</u>, pp. 301-318.

NEDERLANDS NORMALISATIE INSTITUUT: 1986. 'NEN 6535 - Water: Berekening of schatting van de ionsterkte'.

NEDERLANDS NORMALISATIE INSTITUUT: 1990. 'Nederlandse Praktijk Richtlijn 6538 - Toelichting bij de bepaling van agressiviteit ten opzichte van calciumcarbonaat en de berekening ten behoeve van de ontzuring volgens NEN 6533 en 6536'.

PLUMMER, L.N. en E. BUSENBERG: 1982. 'The solubilities of calcite, aragonite and vaterite in CO_2 - H_2O solutions between 0 and 90°C'. Geochim. et Cosmochim. Acta <u>46</u>, pp. 1011-1040.

SONTHEIMER, H., P. SPINDLER en U. ROHMAN: 1980. 'Wasserchemie für Ingenieure'. Engler-Bunte-Institut der Universität Karlsruhe. ZfGW-Verlag GmbH, Frankfurt/Main.

STUMM, W. en J.J. MORGAN: 1982. 'Aquatic chemistry'. Wiley & Sons, London.

BLJLAGE 2 Tips bij vragen over het programma TACC90.EXE

- Nadat de watersamenstelling is ingevoerd en het invoer scherm is afgesloten met de toets <F8> stopt het programma na enige tijd met de foutmelding 'Runtime error 207'.

Deze fout kan optreden indien de ingevoerde ionsterkte veel te laag is in vergelijking tot het calcium- en waterstofcarbonaatgehalte. Controleer de watersamenstelling-gegevens en probeer de berekening opnieuw.

- Nadat de watersamenstelling is ingelezen uit een file stopt het programma met de foutmelding 'Runtime error 207'.

Deze fout kan optreden indien de lay-out van de invoer-file niet juist is. Dit kan met name worden veroorzaakt indien de invoerfile niet begint met de naam van het pompstation (eventueel een lege regel) afgesloten met een <Return>.

De juiste lay-out van de invoerfile is afgebeeld in bijlage 3.

Bij het invoeren van de watersamenstelling verspringt de waarde van de EGV of van de ionsterkte

De EGV wordt in versie 1.2 altijd meteen berekend als een ionsterkte wordt ingevoerd en de ionsterkte wordt altijd meteen berekend als een EGV wordt ingevoerd (zie paragraaf 1.4). Door afrondingen kan hierdoor incidenteel de ingegeven ionsterkte of EGV verspringen met 0.01 tot 0.03 eenheid. Een voorbeeld:

- . de ionsterkte was onbekend, hier is dus een 0 ingevoerd. Bij EGV komt nu ook 0 te staan.
- . vervolgens wordt de waarde 103 voor de EGV ingevuld. Het programma berekent meteen de ionsterkte: 16.99
- . vervolgens wordt teruggegaan naar het veld voor de ionsterkte en alleen een <Enter> gegeven
- . het programma berekent nu de EGV, wat in dit geval door afronding resulteert in een waarde van 102.97 in de plaats van de oorspronkelijk opgegeven 103.

De verschillen die hierdoor optreden in ionsterkte / EGV zijn dermate gering dat het geen enkele invloed heeft op de uitkomsten van de berekeningen van de SI en TACC.

Bij gebruik van een monochroom beeldscherm licht het keuzeblokje niet op tegen de achtergrond

Neemt u contact op met Kiwa (zie hoofdstuk 4), en u krijgt een aangepaste versie van het programma voor gebruik bij monochrome beeldschermen.

Het programma geeft tijdens de berekening de foutmelding 'Maximum number of iterations exceeded'

Deze foutmelding kan optreden bij een enkele - extreme - watersamenstelling. De berekening is onderbroken, aangezien te veel iteraties nodig zijn geweest om tot een nauwkeurig antwoord te komen. In het algemeen zal het programma desondanks de juiste uitkomst geven, maar het risico is aanwezig dat niet het geval is. Bij twijfel dient de uitkomst handmatig te worden gecontroleerd.

Het programma geeft tijdens de berekening de foutmelding 'Negatieve TAC in procedure koolzuur Geef <return>'

Deze foutmelding kan evenals de voorgaande optreden bij een enkele extreme - watersamenstelling. De berekening is onderbroken, en voortgezet met een aangepaste beginwaarde voor de iteratie. In het algemeen zal het programma de juiste uitkomst geven, maar het risico is aanwezig dat niet het geval is. Bij twijfel dient de uitkomst handmatig te worden gecontroleerd.

Bij het printen naar de printer geeft het programma de foutmelding 'Printer niet OK!'

Controleer of:

- de printer wel aanstaat;
- . de printer 'on-line' staat;
- . er papier in de printer zit;
- . de kabelverbinding tussen de PC en de printer aangesloten is.

BLJLAGE 3 Voorbeeld-files

3.1 De invoerfile

De invoerfile begint met de naam van het pompstation of watermonster, afgesloten met een <return>. Desgewenst mag de regel leeg blijven; het is echter wel essentieel dat de regel wordt afgesloten met <return>. Vervolgens komen het calciumgehalte, het waterstofcarbonaatgehalte, de pH, de ionsterkte en de temperatuur. Deze getallen worden gescheiden met één of meerdere spaties. Ook deze regel wordt afgesloten met een <return>.

Het calciumgehalte, het waterstofcarbonaatgehalte en de ionsterkte moeten staan vermeld in mmol/l. De temperatuur staat in °C.

Een invoerfile ziet er bijvoorbeeld alsvolgt uit:

Case 1 1.83 4.38 7.64 12.4 12

Deze invoerfile hoort bij een watersamenstelling:

- calciumgehalte 1,83 mmol/l
- waterstofcarbonaatgehalte van 4,38 mmol/l
- een pH van 7,64
- een ionsterkte van 12,4 mmol/l

bij een temperatuur van 12°C.

3.2 De uitvoerfile met gegevens over de beginconcentraties

Nadat de gegevens over de watersamenstelling zijn ingevoerd (zie **invoer**) worden de beginconcentraties uitgerekend. Deze worden op het scherm getoond. Dit scherm kan ook worden geprint naar een file of naar een printer. De file dit wordt geprint ziet er als volgt uit (zelfde voorbeeld als in paragraaf 3.1):

=***		******	**********		
TACC 90 - Ver	sie 1.2		K	iwa N.V.	
Pompstation	:	Case 1			
		******	***********		
WATERSAMENST	ELLING BIJ	12.0 °C	-(0.0 °C	
	(mm=1 (1))	1 03			
	$(\operatorname{mmol}/1)$:	1.65	0	.00	
CO2	(mmol/l):	4.05	0	00	
HC03	(mmo1/1)	4 38	0	00	
CO3	(mmol/1):	0.02	Ō	. 00	
Ionsterkte	(mmol/1):	12.40	Ō.	.00	
рН	(-):	7.64	0	.00	
SI	(-):	0.25	0	.00	
TACC	(mmol/1):	0.13	0	.00	
WATERSAMENSTH	ELLING BIJ	12.	0 °C	-0.	0 °C
IONENPAREN UI	TGESPLITST	actueel	evenwicht	actueel	evenwicht
Ca totaal	(mmol/l):	1.83	1.70	0.00	0.00
Ca 2+	(mmol/l):	1.77	1.65	0.00	0.00
TAC	(mmol/l):	4.65	4.52	0.00	0.00
CO2	(mmo1/1):	0.25	0.37	0.00	0.00
HCO3 -	(mmol/L):	4.33	4.09	0.00	0.00
	(mmol/l):	0.01	0.01	0.00	0.00
Carco3-ion	(mmol/l):	0.05	0.04	0.00	0.00
Tonsterkte	(mmol/l):	12 40	12 04	0.00	0.00
DH	(111101).	7 64	7.44	0.00	0.00
SI	(-):	0.25	0.00	0.00	0.00
TACC	(mmol/1):	0.13	0.00	0.00	0.00

3.3 De uitvoerfile met berekende waarden

Nadat een berekening is uitgevoerd bij een andere temperatuur worden de resultaten op het scherm getoond. Dit scherm kan ook worden geprint naar een file of naar een printer. De file die wordt geprint ziet er als volgt uit (zelfde voorbeeld als in paragraaf 3.1):

TACC 90 - Vers	sie 1.2	0		Kiwa N.V.	
Pompstation	: 	Case I			
WATERSAMENSTE	LLING BIJ	12.0	°C	90.0 °C	
Ca TAC CO2 HCO3 CO3 Ionsterkte pH	<pre>(mmol/l): (mmol/l): (mmol/l): (mmol/l): (mmol/l): (mmol/l): (-):</pre>	1.83 4.65 0.25 4.38 0.02 12.40 7.64		1.83 4.65 0.33 4.23 0.09 12.10 7.42	
SI TACC	(-): (mmol/1):	0.25 0.13		0.98 0.75	
WATERSAMENSTE	LLING BIJ IGESPLITST	actueel	12.0 °C evenwicht	9 actueel	0.0 °C evenwicht
Ca totaal Ca 2+ TAC CO2 HCO3 - CO3 2- CAHCO3-ion CaCO3-ion Ionsterkte pH	<pre>(mmol/1): (mmol/1): (mmol/1): (mmol/1): (mmol/1): (mmol/1): (mmol/1): (mmol/1): (mmol/1): (-):</pre>	1.83 1.77 4.65 0.25 4.33 0.01 0.05 0.01 12.40 7.64	1.70 1.65 4.52 0.37 4.09 0.01 0.04 0.01 12.04 7.44	1.83 1.66 4.65 0.33 4.14 0.01 0.09 0.08 12.10 7.42	1.08 1.03 3.90 0.99 2.86 0.00 0.04 0.01 10.18 6.79
SI TACC	(-): (mmol/l):	0.25 0.13	0.00 0.00	0.98 0.75	0.00 0.00

BLJLAGE 4 Toetsing van het programma TACC90 aan PHREEQE

4.1 Inleiding

Om de iteratie-procedures van het programma TACC90 te controleren is het programma getoetst aan het computerprogramma PHREEQE. PHREEQE is een veel gebruikt programma voor de berekening van complexe chemische evenwichten.

Voor de toetsing wordt het programma PHREEQE gedwongen om dezelfde evenwichtsconstanten en invoergegevens te gebruiken als het programma TACC90. Hiermee wordt bereikt dat uitsluitend de iteratie-procedures in het programma TACC90 worden getoetst.

Het programma PHREEQE wordt toegelicht in paragraaf 4.2. In paragraaf 4.3 wordt de rekenmethodiek van TACC90 vergeleken met de rekenmethodiek van PHREEQE. Welke aanpassingen gemaakt dienen te worden om dezelfde uitgangssituatie voor de berekening te verkrijgen worden beschreven in paragraaf 4.4. In paragraaf 4.5 zijn de uitkomsten weergegeven, die zijn verkregen met PHREEQE en TACC90 na invoer van gelijke invoergegevens. In paragraaf 4.6 volgt de conclusie.

4.2 Het programma PHREEQE

Het programma PHREEQE is in 1980 ontwikkeld door D.L. Parkhurst D.C. Thorstensen en L.N. Plummer van U.S. Geological Survey. Het programma wordt veel gebruikt voor de modellering van aquatische systemen. In dit programma zijn standaard een groot aantal binnen aquatische systemen veel voorkomende chemische evenwichten verwerkt.

Voordat er gerekend kan worden met PHREEQE dienen de pH, temperatuur, redoxpotentiaal en de totaal concentraties van de te onderzoeken elementen ingevoerd te worden. Het programma berekent uit deze waarden in welke concentratie en in welke hoedanigheid (ionen, ionparen of moleculen) de elementen aanwezig zijn in het aquatische systeem.

In deze paragraaf wordt verder in het kort beschreven hoe het programma PHREEQE werkt. Alleen zaken die relevant zijn voor de toetsing van het programma TACC90 zullen toegelicht worden.

Aanpassing van de evenwichtsconstanten aan de temperatuur

Evenwichtsconstanten (K) zijn afhankelijk van de temperatuur. Er zijn verschillende methoden ontwikkeld om de temperatuur afhankelijkheid van evenwichtsconstanten te definiëren. Binnen PHREEQE zijn twee formules te gebruiken, namelijk de van 't Hoff vergelijking en een empirische relatie (de power series). Deze formules beschrijven de temperatuursafhankelijkheid van de evenwichtsconstanten binnen het traject 0 - 30 °C.

De Van 't Hoff vergelijking is als volgt:

$$\ln\left(\frac{\mathbf{K}_2}{\mathbf{K}_1}\right) = \frac{\Delta H^{\circ}}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$$

Hierin zijn:

$K_1 en K_2$	de evenwichtsconstante bij temperatuur 1 en 2
AH	de reaktieenthalpie
R	de gasconstante
Т	de temperatuur

De power series zijn als volgt:

$$Log(K) = A_1 + A_2 T + A_3 T + A_4 T^2 + A_5 T^2$$

Hierin zijn $A_1 \downarrow_m A_5$ constanten.

Om met de Van 't Hoff vergelijking een evenwichtsconstante bij een bepaalde temperatuur (K_2) te kunnen uit rekenen is er een standaard-evenwichtsconstante (K_1) nodig. Deze standaard-constanten gelden bij een temperatuur van 25°C.

Berekening van activiteiten

De componenten, die bij het kalk koolzuurevenwicht betrokken zijn, worden in de evenwichtsvergelijking ingevuld in de vorm van activiteiten. De activiteit wordt met onderstaande formule uitgerekend:

$$\{i\} = f_i * [i]$$

Hierin zijn:

- {i} de activiteit van ion i
- f_i de activiteitscoëfficiënt van ion i
- [i] de concentratie van ion i

Een en ander verloopt overeenkomstig de berekening van activiteiten in het programma TACC90, zoals beschreven in bijlage 1.

De activiteitscoëfficiënt kan met PHREEQE op drie verschillende wijzen worden berekend. Dit kan met behulp van twee vormen van de formule van Debye-Hückel (de zogenaamde extended- en de WATEQ Debye-Hückel) en met de formule van Davies. De extended Debye-Hückel vergelijking is:

$$\log(f_i) = \frac{-A z_i^2 \sqrt{I}}{1 + B a_i^\circ \sqrt{I}}$$

<u>م</u> .

De WATEQ Debye-Hückel vergelijking is:

$$\log(f_i) = \frac{-A z_i^2 \sqrt{I}}{1 + B a_i \sqrt{I}} + b_i I$$

De Davies formule is:

$$\log(f_i) = -A z_i^2 \left(\frac{\sqrt{I}}{1 + \sqrt{I}} - 0.3I \right)$$

In al deze vergelijking zijn:

A en B	temperatuurafhankelijke parameters
$\mathbf{Z}_{\mathbf{i}}$	de valentie van ion i
a_i, a_i° en b_i	ion-afhankelijke constanten
Ι	de ionsterkte

Berekening van de ionsterkte

De ionsterkte wordt berekend met de onderstaande formule:

$$I = \frac{1}{2} \sum [i] z_i^2$$

In deze formule is z_i de valentie en [i] de concentratie van het ion i.

Om de ionsterkte te kunnen bepalen zijn dus alle ionconcentraties in het aquatische systeem vereist. Het betreft niet alleen de concentraties van de ionen uit het kalk-koolzuur-evenwicht maar ook de concentraties van ionen zoals natrium, chloride, nitraat en sulfaat. In PHREEQE is de ionsterkte geen invoer-variabele maar een uitvoer variabele. De ionsterkte wordt iteratief berekend. Eerst wordt een schatting gemaakt van de ionsterkte, op basis van de opgegeven concentraties. Vervolgens wordt de evenwichtsligging berekend. Na de berekening van de evenwichtssituatie zijn alle concentraties van de ionen bekend. Hiermee wordt de ionsterkte opnieuw berekend. Deze nieuwe waarde voor de ionsterkte wordt vergeleken met de oude waarde. Als deze twee waarden niet gelijk zijn, dan wordt een nieuwe berekening uitgevoerd van de evenwichtsligging waarbij deze nieuwe ionsterkte wordt gebruikt. Dit wordt herhaald totdat de nieuwe en de oude ionsterkte gelijk zijn.

Rekenopties

Voordat een berekening wordt uitgevoerd, kan er ook voor gekozen worden om een mineraal neer te laten slaan tot evenwicht. Doet men dit niet dan geeft het programma alleen de mate van oververzadiging weer.

4.3 Vergelijking rekenmethodiek PHREEQE met TACC90

De rekenmethodiek van het programma TACC90 verschilt op de volgende vier punten van de rekenmethodiek van het programma PHREEQE:

- er worden verschillende invoervariabelen gebruikt;
- de definitie van de evenwichtsconstanten verschilt;
- de temperatuurafhankelijkheid van de evenwichtsconstanten is op verschillende wijzen beschreven;
- de definitie van de uitvoervariabelen komt niet in alle gevallen overeen.

In de onderstaande schema's zijn de rekenmethodes van beide programma's weergegeven.





De totaal [Y] en [X] in het schema van de rekenmethodiek van PHREEQE staan voor de totaal concentraties van twee neutrale elementen. Deze doen dus niet met de reacties mee, maar moeten worden ingevoerd om een juiste waarde voor de ionsterkte te verkrijgen.

De vier verschillen in rekenmethodiek worden in deze paragraaf nader toegelicht.

Verschil in invoervariabelen

Binnen PHREEQE wordt gewerkt met totaalconcentraties van elementen (bijvoorbeeld het totaal calciumgehalte en het gehalte Totaal Anorganisch Koolstof). Met behulp van deze concentraties wordt de ionsterkte I berekend. De ionsterkte is dus een parameter die in de uitvoer verschijnt.

Voor het programma TACC90 is de ionsterkte een invoer-variabele. Veelal zijn niet alle afzonderlijke concentraties bekend. Daarom kan in het programma TACC90 een waarde van de ionsterkte worden verkregen uit de waarde van het Elektrisch Geleidings Vermogen.

Verder zijn in het programma TACC90 niet totaalconcentraties maar de concentraties van Ca^{2+} en HCO_3^{-} invoervariabelen.

Verschil in definitie van de evenwichtsconstanten

Een belangrijk verschil tussen PHREEQE en TACC90 is gelegen in de definitie van de evenwichtsconstanten.

Hieronder zijn de definities van de evenwichtsconstanten voor PHREEQE weergegeven. De definities van de evenwichtsconstanten van TACC90 zijn reeds eerder in deze handleiding weergegeven (zie bijlage 1).

Evenwichtsconstanten PHREEQE

$$K_{1} = \frac{\{CO_{2}\}}{\{CO_{3}^{2-}\} \{2H_{3}O^{+}\}} \qquad K_{CaHCO3} = \frac{\{CaHCO_{3}^{+}\}}{\{CO_{3}^{2-}\} \{H_{3}O^{+}\}}$$
$$K_{2} = \frac{\{HCO_{3}^{-}\}}{\{CO_{3}^{2-}\} \{H_{3}O^{+}\}} \qquad K_{s} = \{Ca^{2+}\} \{CO_{3}^{2-}\} \}$$
$$K_{w} = \{OH^{-}\} \{H_{3}O^{+}\} \qquad K_{CaCO3} = \frac{\{CaCO_{3}^{0}\}}{\{Ca^{2+}\} \{CO_{3}^{2-}\}}$$

Van de hierboven weergegeven evenwichtsconstanten zijn de K_s , K_w en de K_{CaCO3} gelijk aan die van TACC90. Hoe de overige evenwichtsconstanten van PHREEQE zich verhouden tot die van TACC90 is weergegeven in paragraaf 4.4 van deze bijlage.

Verschil in temperatuur-afhankelijkheid van de evenwichtsconstanten

PHREEQE en TACC90 hanteren verschillende formules voor de berekening van de temperatuurafhankelijkheid van de evenwichtsconstanten.

PHREEQE berekent de evenwichtsconstante met de Van 't Hoff vergelijking of met de power series (zie paragraaf 4.2 van deze bijlage).

TACC90 berekent de evenwichtsconstanten met behulp van de formule van Plummer en Busenberg (zie bijlage 1).

4.4 Aanpassing van PHREEQE voor de toetsing van TACC90

Om TACC90 op de juiste wijze te kunnen toetsen aan PHREEQE dienen er binnen PHREEQE enige aanpassingen gemaakt te worden. In de voorgaande paragraaf zijn de verschillen tussen de rekenmethodiek van de beide programma's weergegeven. In deze paragraaf zullen de aanpassingen die nodig zijn om deze verschillen op te heffen beschreven worden. Dit zijn

- aanpassing ten behoeve van de ionsterkte;
- aanpassing van de evenwichtsconstanten;
- opheffen van het verschil in temperatuursafhankelijkheid van de evenwichtsconstanten.

Aanpassing ten behoeve van het verschil in invoervariabelen

Wanneer van een bepaalde watersamenstelling de concentraties van de componenten uit het kalk-koolzuurevenwicht, de TACC en de SI door beide programma's berekend dient te worden, geeft dit problemen omdat de ionsterkte en het waterstofcarbonaatgehalte geen invoervariabelen zijn van PHREEQE.

Dit kan eenvoudig worden opgelost door van een watersamenstelling eerst een berekening met PHREEQE uit te voeren, en vervolgens de door PHREE-QE berekende ionsterkte en waterstofcarbonaatgehalte te gebruiken als invoervariabelen voor TACC90.

Aanpassing van de evenwichtsconstanten.

In het onderstaande schema is weergegeven welk verband er bestaat tussen de evenwichtsconstanten in PHREEQE en TACC90. De evenwichtsconstanten in PHREEQE zijn overeenkomstig aangepast. Dit is mogelijk doordat in de invoer-file van PHREEQE waarden voor de evenwichtsconstanten kunnen worden opgegeven. Het programma rekent dan met deze waarden, en niet met de waarden uit de standaard data-base van het programma.

Evenwichtsconstanten TACC90	Evenwichtsconstanten PHREEQE
K ₁	$K_1' = 1 / (K_1 * K_2)$
K ₂	K ₂ '= 1 / K ₂
K _w	$K_w' = K_w$
K _{CaHCO3}	K' _{CaHCO3} = K_{CaHCO3}/K_2
K _s	K _s '= K _s
K _{CaCO3}	K' _{CaCO3} = K _{CaCO3}

Aanpassing voor de temperatuurs-afhankelijkheid van de evenwichtsconstanten

PHREEQE gebruikt standaard-evenwichtsconstanten bij de temperatuur van 25°C. Als er vooraf wordt vermeld dat de temperatuur 25°C is dan wordt er enkel met deze standaard waarden gerekend. Deze standaard waarden voor de evenwichtsconstanten kunnen worden vervangen door de evenwichtsconstanten, die berekend zijn met de formule van Plummer en Busenberg.

Wordt er gerekend bij een andere temperatuur, dan wordt de waarde van de evenwichtsconstante aangepast met de power series of met de Van 't Hoff vergelijking. Dit wijkt af van de benadering van het programma TACC90. De toetsing van het programma TACC90 is dan ook beperkt gebleven tot een temperatuur van 25°C. Aangezien de rekenmethodiek in het programma TACC90 bij 25°C niet afwijkt ten opzichte van andere temperaturen is dit geen probleem. Er kan bij 25°C getoetst worden of de rekenmethodiek juist is.

4.5 Vergelijking resultaten van PHREEQE en TACC90

In paragraaf 4.7 van deze bijlage zijn de resultaten van de berekeningen met PHREEQE en TACC90 weergegeven. De getallen in de uitdraai van PHREEQE, die van belang zijn voor de toetsing van TACC90.exe zijn gemerkt met een *. De waarden zijn door PHREEQE weergegeven in mol/l.

In het onderstaande overzicht zijn de resultaten van PHREEQE en TACC90 weergegeven.

		TACC90	PHREEQE
Ca	<pre>(mmol/l):</pre>	4.00	4.00
TAC	(mmol/l):	7,98	7.98
CO2	(mmol/l):	0.15	0.15
HCO3	(mmol/l):	7.67	7.67
CO3	(mmol/l):	0.16	0.16
Ionsterkte	(mmol/l):	17.30	17.30
pH	(-):	8.00	8.00
CaHCO3-ion	(mmol/l):	0.22	0.22
CaCO3-ion	(mmol/l):	0.11	0.11
SI	(-):	1.32	1.31
TACC	(mmol/l):	1.24	1.24

De resultaten van PHREEQE en TACC90 komen erg goed met elkaar overeen. Alleen de waarden voor de S.I. wijken 0,01 pH-eenheid van elkaar af. Deze geringe afwijking kan zijn veroorzaakt door afrondingen in de

8

invoergegevens voor het programma TACC90 en door afrondingen in de waarden van de evenwichtsconstanten die moeten worden opgegeven in PHREEQE.

4.6 Conclusie

Uit de vergelijking van de uitkomsten van de berekeningen met PHREEQE en TACC90 blijkt dat er geen afwijkingen optreden indien dezelfde evenwichtskonstanten en invoergegevens worden gebruikt. De rekenmethodiek die wordt gehanteerd in het programma TACC90 levert dus uitkomsten die overeenkomen met waarden die worden berekend met het programma PHREEQE. Hieruit blijkt dat de complexe evenwichts-vergelijkingen in het programma TACC90 op een juiste wijze zijn opgelost.

4.7 De uitdraai van de resultaten van de berekeningen

RESULTATEN PHREEQE Date of Simulation Run: 1994/05/31 Time of Simulation Run: 09:14:20 DATA READ FROM DISK ELEMENTS SPECIES LOOK MIN 1Hansjurgen 0050001000 0 0 1.00000 SPECIES -20H+ 300 1.000 .000 .000 . -12.780 14.535 .00000 .00000 .00000 4 1.000 3 1.000 1 -1.000 CaOH+ . 000 . 000 1.000 .00000 .00000 .500 2.000 77 CaHCO3+ 301 1.000 4. 11.443 -.871 1209.1 4 1.000 15 1.000 1 1.000 4.000 .000 5.400 .31294 -34765. .000 1.000 -.13340E-01 .00000 15 CO3-2 .000 .000 .000 .000 .000 .000 .0000 .0000 .0000 .0000 .0000 .0000 .0000 .000 4.500 5.0 2.000 5.000 .000 00000.
 OH 201
 -1.000
 .000
 3.500
 3.500
 13.362
 -283.97
 -.50698E-01
 13323.
 34

 HCO3 201
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 -1.000
 .00000 .000 102.24 1.000 -.11197E+07
 34

 HCC3 201
 -1.000
 4.000
 4.500
 5.400

 10.330
 -3.561
 107.89
 .32528E-01
 -5151.8

 15
 1.000
 1
 1.000
 35
 .000 1.000 .56371E+06 H2CO3 301 .000 4.0 16.683 -5.738 464.20 15 1.000 1 2.000 3 -1.000 H2CO3 4.000 .000 .000 .93448E-01 -26986. .000 .22486E+07 .000 1 H+ 101 1.000 .e 000.e 00 .00000. 00000 .000 9.000 . 000 .000 .00000 .00000 1 1.000 SOLUTION 1 hoppa 4 0 1 8.00 8.00 25.0 1.00 4 4.000D+00 6 6.000D+00 14 6.000D+00 15 8.000D+00 MINERALS CALCITE 2 4.0 -8.5 -2.3 15 1.00 4 1.00 0 .00 .00 .00 ISOLUTION NUMBER 1 0 .000 0 .000 hoppa

TOTAL MOLALITIES OF ELEMENTS

ELEMENT	MOLALITY	LOG MOLALITY
Ca	4.003455D-03	-2.3976
Na	6.005183D-03	-2.2215
C1	6.005183D-03	-2.2215
С	8.006910D-03	-2.0965

----DESCRIPTION OF SOLUTION----

PH		8.0000
PE	~	8.0000
ACTIVITY H2O	*	.9996
IONIC STRENGTH	=	.0173
TEMPERATURE	-	25.0000
ELECTRICAL BALANCE	-	-2.1661D-05
THOR	-	3.2028D-02
TOTAL ALKALINITY	-	8.0286D-03
ITERATIONS	-	16

DISTRIBUTION OF SPECIES

I	SPECIES	z	MOLALITY	LOG MOLAL	ACTIVITY	LOG ACT	GAMMA	LOG GAM
			1 1100 00	7 050	1 0007 00		0.0467.01	040
1	H+	1.0	1.1198-08	-/.952	T.000E-08	-8.000	8.940E-01	048
2	E-	-1.0	1.000E-08	-8.000	1.000E-08	-8.000	1.000E+00	.000
3	H2O	.0	9.996E-01	.000	9.996E-01	.000	1.000E+00	.000
4	Ca+2	2.0	3.675E-03	-2.435	2.224E-03	-2.653	6.052E-01	218
6	Na+	1.0	5.982E-03	-2.223	5.259E-03	-2.279	8.791E-01	056
14	C1-	-1.0	6.005E-03	-2.221	5.253E-03	-2.280	8.748E-01	058
15	CO3-2	-2.0	5.117E-05	-4.291	3.077E-05	-4.512	6.013E-01	221
31	OH-	-1.0	1.143E-06	-5.942	9.996E-07	-6.000	8.743E-01	058
32	02 AQ	.0	8.278E-23	-22.082	8.311E-23	-22.080	1.004E+00	.002
34	HCO3 -	-1.0	7.456E-03	-2.127	6.578E-03	-2.182	8.822E-01	054
35	H2CO3	.0	1.477E-04	-3.830	1.483E-04	-3.829	1.004E+00	.002
76	CaCO3	. 0	1.136E-04	-3.945	1.141E-04	-3.943	1.004E+00	.002
77	CaHCO3+	1.0	2.151E-04	-3.667	1.898E-04	-3.722	8.822E-01	~.054

---- LOOK MIN IAP ----

	PHASE	LOG IAP	LOG KT	LOG IAP/KT
1STEP NUMBER	Calcite 1	-7.1648	-8.4790	1.3142

TOTAL MOLALITIES OF ELEMENTS

ELEMENT	MOLALITY	LOG MOLALITY
Ca	4.003455D-03	-2.3976
Na	6.005183D-03	-2.2215
C1	6.005183D-03	-2.2215
с	8.006910D-03	-2.0965

----PHASE BOUNDARIES----

PHASE	DELTA PHASE*	LOG IAP	LOG KT	LOG IAP/KT
CALCITE	-1.237404D-03	-8.4790	-8.4790	.0000

* NEGATIVE DELTA PHASE INDICATES PRECIPITATION AND POSITIVE DELTA PHASE INDICATES DISSOLUTION.

---- LOOK MIN IAP ----

PHASE	LOG IAP	LOG KT	LOG IAP/KT
Calcite	-8.4790	-8.4790	.0000

TOTAL MOLALITIES OF ELEMENTS

ELEMENT	MOLALITY	LOG MOLALITY
Ca	2.766051D-03	-2.5581
Na	6.005183D-03	-2.2215
Cl	6.005183D-03	-2.2215
C	6.769506D-03	-2.1694

----DESCRIPTION OF SOLUTION----

.9465
.0000
.9996
.0141
.0000
.1661D-05
.7078D-02
.5539D-03

DISTRIBUTION OF SPECIES

I SPECIES Z MOLALITY LOG MOLAL ACTIVITY LOG ACT GAMMA LOG GAM 1 H+ 1.0 1.254E-07 -6.902 1.131E-07 -6.946 9.019E-01 -.045

2	E-	-1.0	1.000E-08	-8.000	1.000E-08	-8.000	1.000E+00	.000
3	H2O	.0	9.996E-01	.000	9.996E-01	.000	1.000E+00	.000
4	Ca+2	2.0	2.644E-03	-2.578	1.666E-03	-2.778	6.303E-01	200
6	Na+	1.0	5.991E-03	-2.223	5.323E-03	-2.274	8.885E-01	051
14	C1-	-1.0	6.005E-03	-2.221	5.314E-03	-2.275	8.849E-01	053
15	CO3 - 2	-2.0	3.177E-06	-5.498	1.992E-06	-5.701	6.270E-01	203
31	OH-	-1.0	9.991E-08	-7.000	8.838E-08	-7.054	8.845E-01	053
32	02 AQ	.0	5.061E-27	-26.296	5.077E-27	-26.294	1.003E+00	.001
34	нсоз -	-1.0	5.405E-03	-2.267	4.817E-03	-2.317	8.912E-01	050
35	H2CO3	. 0	1.225E-03	-2.912	1.229E-03	-2.911	1.003E+00	.001
77	CaHCO3+	1.0	1.168E-04	-3.932	1.041E-04	-3.982	8.912E-01	050

RESULTATEN TACC90

TACC 90 - Ve	rsie 1.2	Ioets aan PHRE	Kiwa N.V.
Pompstation	: '		EQE
WATERSAMENST	ELLING BIJ	25.0 °C	25.0 °C
Ca	<pre>(mmol/l):</pre>	4.00	4.00
TAC	(mmol/l):	7.98	7.98
CO2	(mmol/l):	0.15	0.15
HCO3	(mmol/l):	7.67	7.67
CO3	(mmol/l):	0.16	0.16
Ionsterkte	(mmol/l):	17.30	17.30
pH	(-):	8.00	8.00
SI	(~):	1.32	1.32
TACC	(mmol/l):	1.24	1.24

WATERSAMENSTELLING - IONPAREN UITGESPLITST

Ca totaal	(mmol/l):	4.00	4.00
Ca 2+	(mmol/1):	3.67	3.67
TAC	(mmol/l):	7.98	7.98
CO2	(mmol/l):	0.15	0.15
нсоз -	(mmol/l):	7.45	7.45
CO3 2-	(mmo1/1):	0.05	0.05
CaHCO3-ion	(mmol/l):	0.22	0.22
CaCO3-ion	(mmo1/1):	0.11	0.11
Ionsterkte	(mmol/l):	17.30	17.30
рН	(-):	8.00	8.00
SI	(-):	1.32	1.32
TACC	(mmol/1):	1.24	1.24
	. <i></i> 		