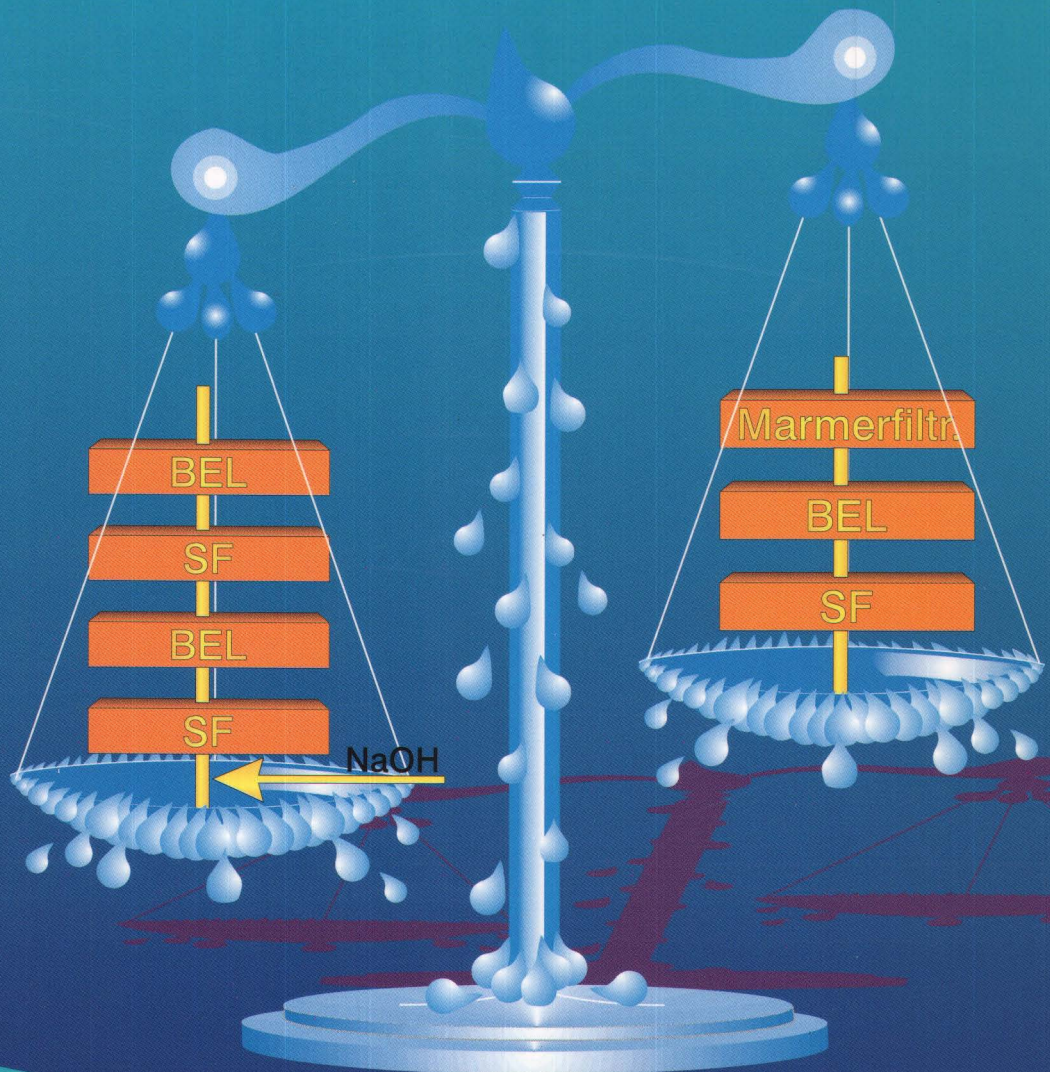


AQUACALC versie 2.0

Handleiding

VERENIGING VAN EXPLOITANTEN VAN WATERLEIDINGBEDRIJVEN IN NEDERLAND

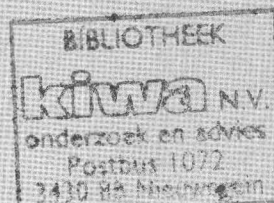
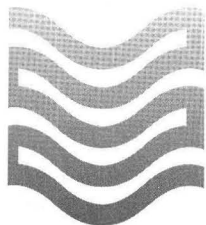


kiwa

AQUACALC versie 2.0

Handleiding

VEWIN



OPDRACHTGEVER

VEWIN

OPDRACHTNUMMER

111009.272

AUTEURS

G.J.P.M. Eggen, H. Brink en M.M. Nederlof

AFDELING

Behandeling en Distributie

Nieuwegein, november 1997

kiwa

Onderzoek en Advies

Roosdorpseweg 7
Postbus 1072
4300 BB Nieuwegein
telefoon (030) 60 69 511
telefax (030) 60 61 165

© 1997 Kiwa N.V.

Niets uit dit drukwerk mag worden veelevoudigd 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.

97.510

INHOUDSOPGAVE

1	INLEIDING	2
1.1	Het computerprogramma AQUACALC	2
1.2	Vragen en problemen	2
2	INSTALLATIE, STARTEN EN BEDIENING	3
2.1	Hardware-benodigdheden en besturingssysteem	3
2.2	Installatie van AQUACALC	3
2.3	Starten van het programma	3
2.4	Bediening van het programma	4
3	WERKEN MET AQUACALC: DE MENU-OPTIES	8
3.1	Bestand	8
3.2	Invoer	10
3.3	Bereken	11
3.4	Uitvoer	15
3.5	Opties	17
3.6	Informatie	19
3.7	Help	19
3.8	Einde	19
4	VOORBEELDEN	20
4.1	Voorbeeld 1 : Deelstroom ontharding	20
4.2	Voorbeeld 2 : Zuurdosering, beluchting en loogdosering	25
4.3	Voorbeeld 3 : Marmerfiltratie	28
	LITERATUUR	30
	BIJLAGE 1	
	De menustructuur van AQUACALC	
	BIJLAGE 2	
	Bestandsformaten	
	BIJLAGE 3	
	Foutmeldingen van het Kiwa-computerprogramma AQUACALC	
	3.1 Input/Output foutmeldingen	1
	3.2 Invoer restricties	4
	3.3 Chemische restricties	5
	BIJLAGE 4	
	Theoretische achtergronden	
	4.1 Inleiding	1
	4.2 Het kalk-koolzuurevenwicht	1
	4.3 Berekeningssystematiek	3

1 INLEIDING

1.1 Het computerprogramma AQUACALC

AQUACALC is een computerprogramma voor het uitvoeren van berekeningen aan het kalk-koolzuur-evenwicht van water. Het kan gebruikt worden voor het berekenen van de watersamenstelling na ontharding, loogdosering, zuurdosering, beluchting, marmerfiltratie en/of menging. Het programma is door Kiwa ontwikkeld in het kader van het gezamenlijke onderzoekprogramma van de waterleidingbedrijven.

Versie 2.0 van het programma AQUACALC is met de grootste zorgvuldigheid samengesteld, waarbij gebruik is gemaakt van ervaringen van testers binnen Kiwa met een eerste versie van het programma. De berekeningen van het programma zijn getoetst aan de hand van PHREEQE. PHREEQE is een veel gebruikt programma voor de berekening van complexe chemische evenwichten. Een uitgebreide validatie door toetsing aan praktijkgegevens heeft echter nog niet plaatsgevonden.

Het programma is geschikt voor het uitvoeren van berekeningen aan watertypen, die in de praktijk bij waterleidingbedrijven in Nederland voorkomen.

Deze handleiding is een gebruikershandleiding. Dat wil zeggen dat nieuwe gebruikers het programma met deze handleiding stap voor stap kunnen doornemen. Hierbij worden de verschillende mogelijkheden van het programma toegelicht. Ervaren gebruikers kunnen de handleiding gebruiken als naslagwerk en voor uitleg van de betekenis van foutmeldingen, als deze onverhoopt bij het werken met het programma gegenereerd worden. Theoretische achtergronden bij het programma zijn in bijlage 4 opgenomen.

1.2 Vragen en problemen

Bij vragen over of problemen met het programma wordt geadviseerd eerst bijlage 3 te raadplegen. In deze bijlage zijn de mogelijke foutmeldingen van het programma opgenomen. Mocht dit geen oplossing bieden kan contact opgenomen worden met:

Kiwa Onderzoek en Advies
Sectie Membraantechnologie en Ander Water

Contactpersoon : Dr. ir. M.M. Nederlof
Telefoon: (030) 60 69 565
Telefax: (030) 60 61 165

Postbus 1072
3430 BB NIEUWEGEIN

2 INSTALLATIE, STARTEN EN BEDIENING

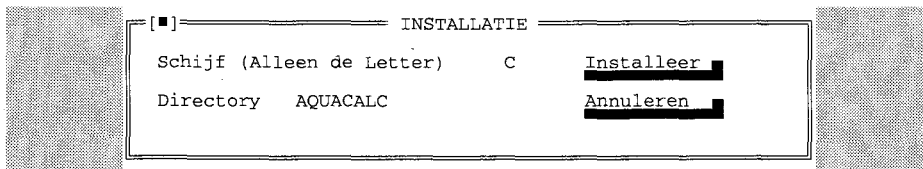
2.1 Hardware-benodigdheden en besturingssysteem

Het programma werkt op elke computer met een 80286 processor of hoger en met minimaal een geheugen van 640 kb. Om de rektijden aanvaardbaar te houden wordt echter minimaal een computer met een 80486DX-33 processor aanbevolen. Het programma ondersteunt alle soorten beeldschermen. Het besturingssysteem waarop dit programma werkt kan DOS 3.3 of hoger zijn of een ander besturingssysteem dat een DOS toepassing kan starten.

2.2 Installatie van AQUACALC

Voor installatie van het programma AQUACALC op de harde schijf kan het programma INSTALL.EXE worden gebruikt. Dit programma staat op de diskette in de subdirectory AQUACALC.

Ga eerst naar het disktestation, bijvoorbeeld door **a:** in te typen. Ga daarna naar de subdirectory AQUACALC door **cd\aquacalc** in te typen. Start het installatieprogramma door achter de DOS-prompt **install** in te typen. Hierna wordt een menu zichtbaar met twee opties: Installeer en Einde. Om AQUACALC te installeren moet de optie Installeer gekozen worden, dit kan door de optie Installeer aan te klikken met de muis of met Alt-I. Na keuze van deze optie verschijnt het scherm van figuur 1.



Figuur 1: Installatiescherm van het programma INSTALL met de voorgestelde standaardinstellingen.

Wanneer AQUACALC in de directory C:\AQUACALC geïnstalleerd dient te worden dan volstaat het de optie Installeer te kiezen.

Wanneer AQUACALC in een andere directory geïnstalleerd dient te worden dan dient bij Schijf de letter van het station en bij Directory de naam van de subdirectory waarin het programma geïnstalleerd moet worden ingetypt te worden. De invulvelden Schijf en Directory zijn bereikbaar met de Tab-toets of kunnen met de muis worden aangeklikt. Selecteer de toets Installeer zodra de invulvelden juist zijn ingevuld, en activeer deze door <Enter> of <Spatie> te drukken of door er met de muis op te klikken. De installatie wordt nu gestart.

2.3 Starten van het programma

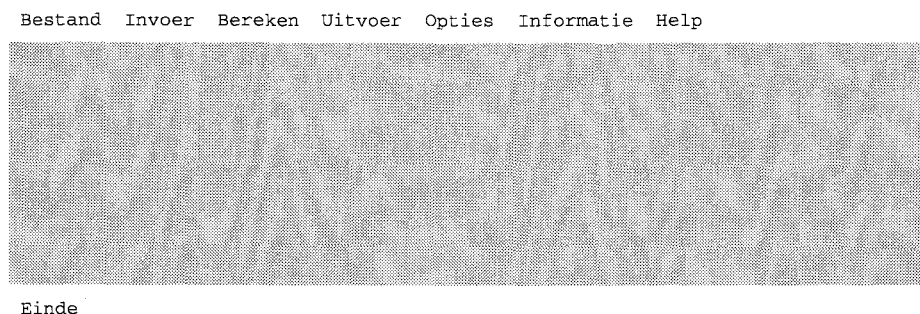
Ga naar de directory waarin het programma is geïnstalleerd, bijvoorbeeld door in te typen: **cd \aquacalc** en door op <Enter> te drukken. Het programma wordt gestart door achter de DOS-prompt **aquacalc** in te typen. AQUACALC kan overigens op deze wijze ook direct worden gestart vanaf de geleverde diskette (starten vanaf a:).

Het programma start met een beginscherm met informatie (figuur 2).



Figuur 2: Beginscherm

Door op een willekeurige toets te drukken wordt het beginscherm verlaten en wordt het hoofdmenu van het programma zichtbaar (figuur 3). Het hoofdmenu en de menu-opties worden in hoofdstuk 3 toegelicht. Zie ook bijlage 1.



Figuur 3: Het hoofdmenu van het programma AQUACALC.

2.4 Bediening van het programma

Het programma AQUACALC kan op twee manieren worden bediend, te weten:

- met behulp van het toetsenbord;
- met behulp van de muis.

De bediening van het programma wordt hieronder verder toegelicht. Hierbij wordt ingegaan op de bediening van het menu en van gebruikersschermen. Deze gebruikersschermen zijn schermen waarmee uitwisseling van gegevens plaatsvindt. Het gaat hierbij om invoer van gegevens door de gebruiker (invoeren van een watersamenstelling bijvoorbeeld) maar ook de presentatie van berekeningsresultaten door het programma aan de gebruiker.

Wanneer wordt verwezen naar een kleur in het programma wordt altijd eerst de kleur in het kleurenscherm genoemd. Daarna volgt tussen haakjes de kleur bij gebruik van een zwart-wit scherm.

Menu-opties die licht grijs gekleurd zijn kunnen niet worden geselecteerd.

2.4.1 Bediening van het menu met het toetsenbord

Bij gebruik van het toetsenbord kunnen 'hotkeys' worden gebruikt. Deze 'hotkeys' bestaan uit de ALT-toets te samen met een van de lichtgekleurde letters van de opties van het menu. Beide toetsen dienen gelijktijdig ingedrukt te worden. Het programma kan bijvoorbeeld worden beëindigd met de hotkey <ALT>+<E> (maar ook met de toetsencombinatie <ALT>+<X>).

Het hoofdmenu kan geactiveerd worden door op functietoets <F10> te drukken. In het hoofdmenu wordt dan een groen (zwart) vlak zichtbaar: de cursor. Met <Esc> wordt deze activering weer ongedaan gemaakt. Met de cursor toetsen <←> en <→> kan in het hoofdmenu een optie worden geselecteerd. Door <Enter> te geven wordt de betreffende optie in het hoofdmenu geactiveerd. Hierbij verschijnt over het algemeen een submenu, dat op het beeldscherm wordt weergegeven.

In de submenu's kan weer met de cursor toetsen <↓> en <↑> een optie worden geselecteerd. Door <Enter> te geven wordt een optie geactiveerd. Wanneer een submenu is geactiveerd, en <←> of <→> wordt gedrukt, verschijnt het submenu van de links respectievelijk rechts gelegen hoofdmenu-optie. Wanneer deze naastliggende hoofdmenu-optie geen submenu heeft, wordt de cursor op de naastliggende hoofdmenu-optie geplaatst zonder deze te activeren.

2.4.2 Bediening van het menu met de muis

Een optie in het hoofdmenu kan tevens geactiveerd worden door met de muis een optie aan te wijzen en een willekeurige muis-toets aan te klikken. De onderliggende (submenu-)optie wordt dan geselecteerd. Wanneer onder de optie een submenu is geplaatst verschijnt dit op het beeldscherm. Uit dit submenu kan dan weer een optie worden gekozen door een optie aan te wijzen en erop te klikken.

2.4.3 Bediening van gebruikersschermen

De gebruikersschermen zijn schermen waar gegevens ingevoerd of uitgelezen kunnen worden. Hieronder vallen ook de schermen voor bestandsbeheer en schermen die te maken hebben met programma-instellingen.

Een gebruikersscherm heeft altijd één of meerdere knoppen, die zijn te beschouwen als schakelaars. Zodra de knop wordt geactiveerd wordt het commando dat op deze knop staat weergegeven uitgevoerd. De knop kan geactiveerd worden door deze met de <Tab> toets te selecteren en vervolgens <Enter> of <Spatie> te drukken. De knop kan ook geactiveerd worden door er met de muis op te klikken.

Een zogenaamde radioknop geeft een keuze uit twee of meerdere opties. De opties worden weergegeven door middel van een beschrijving en twee haakjes (). Bij deze radioknoppen kan met de pijltjestoetsen een keuze worden gemaakt. Bij de gekozen optie verschijnt een • tussen de haakjes.

Met de muis kan rechtstreeks op de optie in een radioknop worden geklikt om deze te selecteren.

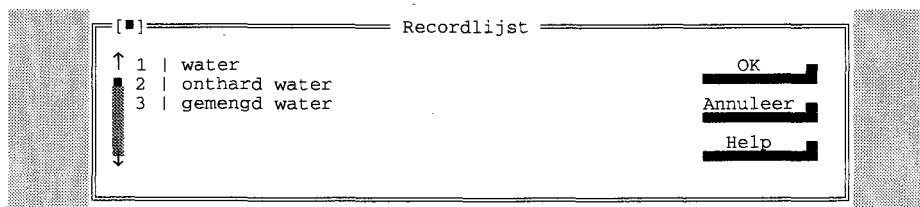
De gebruikersschermen hebben allemaal één of meerdere velden waarmee interactie met de gebruiker mogelijk is. De velden kunnen met de <Tab> toets worden geselecteerd of door er met de muis op te klikken. Met de toetscombinatie <Shift> + <Tab> wordt in de richting tegengesteld aan de <Tab> richting bewogen.

Invoervelden dienen voor de invoer van gegevens. Deze velden worden aangegeven met een naam en een blauw (zwart) gekleurde vlak. In dit vlak staat veelal een voorgestelde (standaard) waarde.

Een invoerveld kan met de <Tab> toets geselecteerd worden. De waarde in het veld staat dan in een groen (lichtgrijs) vlak. Zodra op een andere toets dan de cursortoetsen <←> en <→> gedrukt wordt, verdwijnt de standaardwaarde in het invoerveld en kan een nieuwe waarde worden ingegeven. Wanneer de genoemde cursortoetsen worden gebruikt kan de waarde in het veld worden aangepast. Met de toetsen <Delete> en <Backspace> kan een gedeelte van de waarde in een invoerveld worden verwijderd.

Zodra met de muis op de naam van een invoerveld wordt geklikt, bevindt de waarde zich in een groen (lichtgrijs) vlak. Deze waarde kan op de hierboven beschreven wijze worden verwijderd of aangepast. Na aanklikken van een invoerveld met de muis ontstaat dezelfde situatie als bij selectie van het invoerveld met de <Tab> toets en het indrukken van de cursortoetsen <←> en <→>.

Lijsten zijn rijen met een aantal verschillende voorwerpen waaruit een keuze gemaakt kan worden. Een voorbeeld hiervan is de recordlijst (lijst van watersamenstellingen: records). Een dergelijke lijst is in figuur 4 weergegeven. Deze recordlijst verschijnt na Selecteer record bij bijvoorbeeld de optie Bereken\Ontharden. Deze optie wordt in hoofdstuk 3 toegelicht.



Figuur 4: Het gebruikersscherm Recordlijst (voorbeeld).

Een keuze uit de lijst kan worden gemaakt door met de pijltjestoetsen de cursor op het voorwerp, in dit voorbeeld een record, te plaatsen en <Enter> te geven of door een OK knop te activeren. Met de muis kan op het voorwerp in de lijst worden geklikt om dit te selecteren. Met de muis kan ook gebruik gemaakt worden van de geleider aan de zijkant van de lijst. Door op een van de pijlen te drukken wordt er door de lijst heen bewogen, dit kan ook door onder of boven het indicator blokje te klikken. De geleider komt zowel horizontaal als verticaal voor. De werking ervan blijft echter hetzelfde. Door op OK te klikken wordt het geselecteerde voorwerp gekozen.

De records worden aangegeven met een recordnummer en de naam, die door de gebruiker aan het record is toegekend, onderling gescheiden door een l.

Het gebruikersscherm verdwijnt zodra een voorwerp uit de lijst is geselecteerd. Met <Esc> of Annuleer kan het gebruikersscherm ook worden verlaten, er wordt dan geen voorwerp (record) geselecteerd.

Een gebruikersscherm kan altijd verlaten worden door met de muis op het icoontje linksboven in het gebruikersscherm te klikken of door <Esc> te drukken.

Een gebruikersscherm kan worden verplaatst door de toetscombinatie <Ctrl> + <F5> te drukken. Het gebruikersscherm krijgt een enkellijnige omranding. Met de cursortoetsen kan het gebruikersscherm naar de gewenste plaats worden gebracht. Door <Enter> te drukken wordt het scherm op deze plaats neer gezet, het scherm heeft nu weer een dubbellijnige omranding. Zolang het scherm een enkellijnige omranding heeft reageren de invoervelden in het scherm niet op de acties van de gebruiker.

2.4.4 Overzicht van functionele toetscombinaties

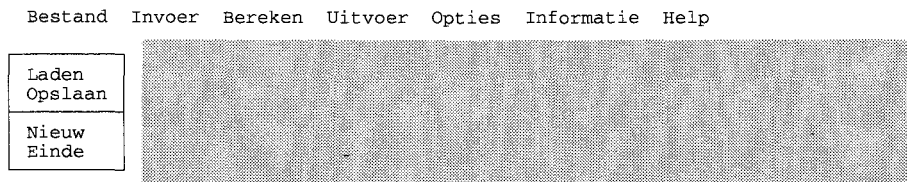
In de onderstaande tabel wordt een overzicht gegeven van geldige toetsen en toetscombinaties. Achter de toets(combinatie) is de functie aangegeven

Toets(combinatie)	Functie
TAB	Naar volgende invoerveld
SHIFT-TAB	Naar vorige invoerveld
ALT-(letter)	Activeert een optie waarvan de opgelichte letter gelijk is aan de letter die in combinatie met de ALT-toets wordt gebruikt
ENTER	Activeert een geselecteerde optie
→	Verplaatst de cursor naar links in het invoerveld
←	Verplaatst de cursor naar rechts in het invoerveld
↑	Verplaatst de cursor naar boven in het invoerveld
↓	Verplaatst de cursor naar beneden in het invoerveld
DELETE	Wist het karakter op de plaats van de cursor
BACKSPACE	Wist het karakter voor de cursor
CTRL-F5	Verplaatst het gebruikersscherm
ESC	Verlaat een gebruikersscherm zonder wijzigingen Maakt de selectie van een menu-optie ongedaan

3 WERKEN MET AQUACALC: DE MENU-OPTIES

3.1 Bestand

Na selectie van de optie Bestand in het hoofdmenu verschijnt het submenu dat in figuur 5 is weergegeven.

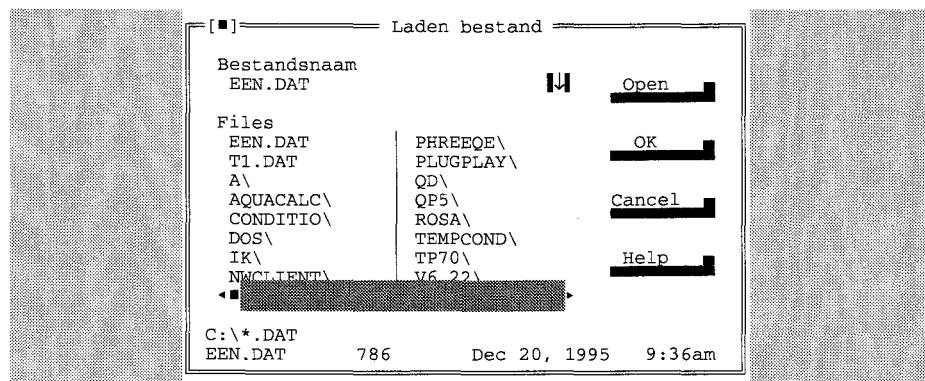


Figuur 5: Het submenu van de optie Bestand in het hoofdmenu.

De submenu-opties worden hieronder toegelicht.

3.1.1 Laden

Hiermee kan een bestand worden ingeladen waarin gegevens van een eerder uitgevoerde berekening zijn opgeslagen. Bij keuze van deze submenu-optie verschijnt het gebruikersscherm dat in figuur 6 is weergegeven.



Figuur 6: Gebruikersscherm voor het laden van een bestand.

Door een naam in te geven onder *Bestandsnaam* wordt het bestand, wanneer hierna *Open*, *OK* of <Enter> wordt gegeven, geladen.

Standaard worden de bestanden met de extensie DAT geladen, tenzij de gebruiker een andere extensie meegeeft.

De bestanden die getoond worden in de *bestandslijst* hebben ook de standaard extensie DAT.

Wanneer men wil dat alle bestanden worden getoond, moet er onder de *bestandsnaam* *.* worden ingetypt, gevolgd door *Open*, *OK* of <Enter>.

Op deze manier kunnen ook bestanden worden getoond met een andere extensie.

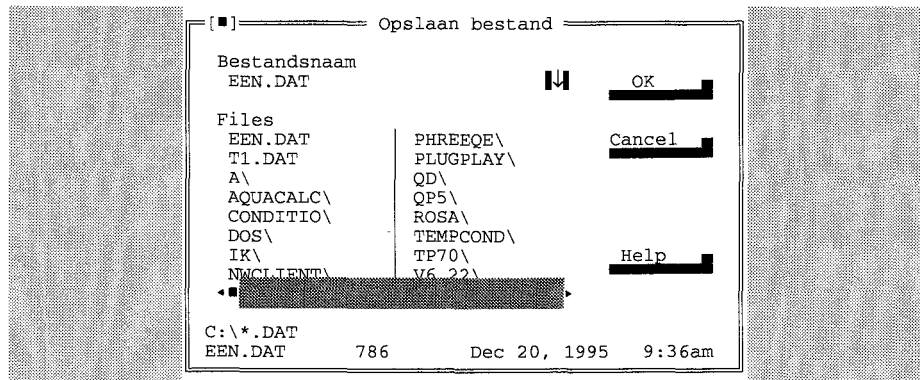
De gebruiker kan een bestand of een directory uit de *bestandenlijst* kiezen door de cursor op het betreffende bestand of directory te plaatsen en vervolgens *Open*, *OK* of <Enter> te geven.

Als een bestand is geladen wordt het gebruikersscherm verwijderd en is het hoofdmenu weer bereikbaar. Met <Esc> of *Cancel* kan het scherm worden verlaten zonder een bestand te laden.

Onder de toets *Help* staat de helptekst bij dit programma onderdeel.

3.1.2 Opslaan

Slaat de huidige gegevens op in een bestand op schijf. Keuze van deze submenu-optie geeft het gebruikersscherm van figuur 7.



Figuur 7: Gebruikersscherm voor het opslaan van gegevens.

Door een naam in te geven onder *Bestandsnaam* worden de gegevens, wanneer hierna *OK* of <Enter> wordt gegeven, onder de opgegeven bestandsnaam opgeslagen.

De bestanden worden standaard opgeslagen met de extensie DAT, tenzij de gebruiker een andere extensie meegeeft.

De bestanden die getoond worden in de bestandslijst hebben ook de standaard extensie DAT.

Wanneer men wil dat alle bestanden worden getoond moet er onder de *bestandsnaam* *.* worden ingetypt gevolgd door *OK* of <Enter>. Op deze manier kunnen ook bestanden worden getoond met een andere extensie.

De gebruiker kan een bestand of een directory uit de bestandslijst kiezen door de cursor op het betreffende bestand of directory te plaatsen en vervolgens *OK* of <Enter> te geven.

Als de gegevens zijn opgeslagen wordt het gebruikersscherm verwijderd en is het hoofdmenu weer bereikbaar. Met <Esc> of *Cancel* kan het scherm worden verlaten zonder de gegevens op te slaan.

Onder de toets *Help* staat de helptekst bij dit programma onderdeel.

3.1.3 Nieuw

Met deze submenu-optie worden alle huidige gegevens (de gegevens die in het werkgeheugen aanwezig zijn) gewist.

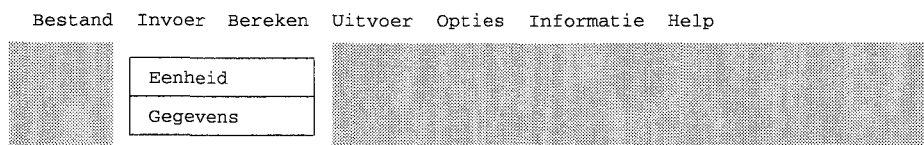
De standaardgegevens waar de gebruikersschermen mee werken worden weer ingesteld.

3.1.4 Einde

Beëindigt het programma. AQUACALC vraagt om bevestiging voor beëindiging van het programma indien er nog gegevens in het werkgeheugen aanwezig zijn, die nog niet zijn opgeslagen.

3.2 Invoer

Na selectie van de optie *Invoer* in het hoofdmenu verschijnt het submenu dat in figuur 8 is weergegeven.

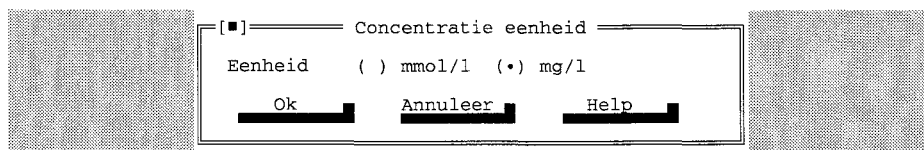


Figuur 8: Het submenu van de optie Invoer in het hoofdmenu.

De submenu-opties worden hieronder toegelicht.

3.2.1 Eenheid

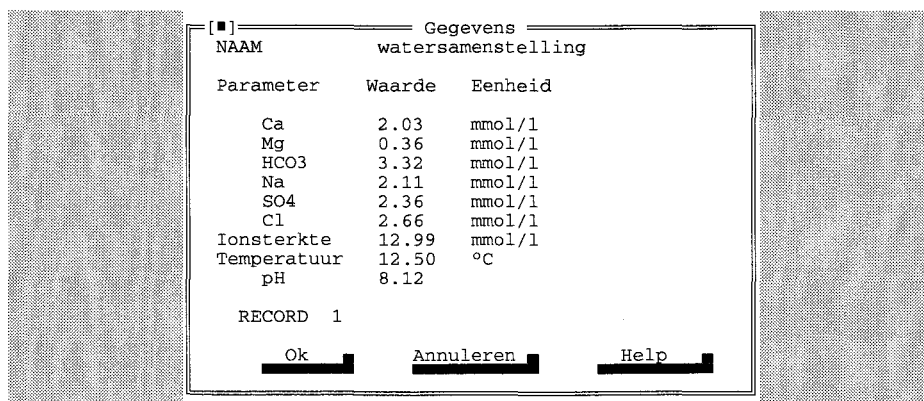
Bij deze submenu-optie is de eenheid te kiezen voor de parameters waarvoor het programma concentraties aan de gebruiker presenteert en vraagt. De eenheid staat standaard op mg/l (figuur 9).



Figuur 9: Gebruikersscherf voor keuze van de eenheid.

3.2.2 Gegevens

Met deze optie wordt het gebruikersscherf (figuur 10) voor de invoer van gegevens over de watersamenstelling geopend.



Figuur 10: Gebruikersscherf voor het invoeren van een watersamenstelling.

Met de <Tab> toets wordt, nadat een waarde is ingevuld in een invoerveld, afgesloten en naar het volgende veld gegaan. Het is ook mogelijk om met de muis op een volgende veld te klikken.

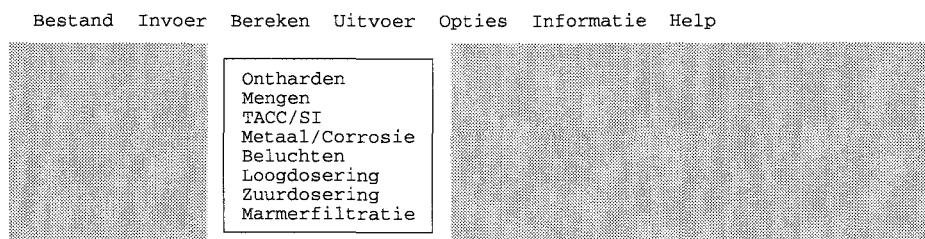
Achter *NAAM* kan een willekeurige naam (max. 30 tekens) aan de ingevoerde watersamenstelling worden meegegeven.

Door *OK* te drukken wordt de watersamenstelling opgeslagen. Met *Annuleren* wordt het scherm verlaten zonder dat de watersamenstelling wordt opgeslagen. Onder de toets *Help* vindt men de helptekst bij dit programmagedeelte.

Wanneer een ionsterkte wordt ingevoerd, die te laag is voor de gegeven watersamenstelling, wordt een foutmelding gegeven zodra weer wordt teruggekeerd naar het invoerscherm.

3.3 Bereken

Na selectie van de optie *Bereken* in het hoofdmenu verschijnt het submenu dat in figuur 11 is weergegeven.



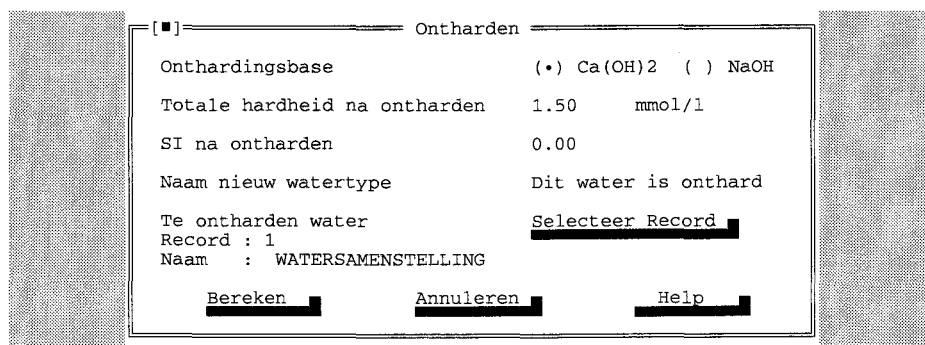
Figuur 11: Het submenu van de optie Bereken in het hoofdmenu.

De submenu-opties worden hieronder toegelicht.

3.3.1 Ontharden

Bij keuze van deze optie is de watersamenstelling na ontharding te berekenen. Hierbij dienen zowel de *totale hardheid na ontharden* als de *SI na ontharden* als de *onthardingsbase* (kalkmelk of natronloog) opgegeven te worden in een gebruikersscherm (figuur 12).

De *totale hardheid na ontharden* dient kleiner te zijn dan de totale hardheid van de te ontharden watersamenstelling.



Figuur 12: Gebruikersscherm voor invoer van gegevens voor berekening van de watersamenstelling na ontharden.

Bij het veld *Naam nieuw watertype* kan een willekeurige naam (max 30 tekens) voor de samenstelling van het ontharde water worden ingegeven. De watersamenstelling waarvan de ontharding berekend moet worden, kan geselecteerd worden met *Selecteer Record*. Door *Bereken* te drukken wordt de berekening gestart. Met *Annuleren* wordt het scherm verlaten zonder dat de berekening wordt uitgevoerd. Onder de toets *Help* staat de helptekst bij dit programmeerdeelte.

3.3.2

Mengen

Berekent de watersamenstelling na menging van twee watertypen. Hierbij dient de watersamenstelling van beide watertypen en de verhouding van de watertypen bij het mengen te worden opgegeven in een gebruikersscherm (figuur 13). De verhouding (*Fractie van watertype 1*) dient tussen de 0 en 1 te liggen.

```
[■]----- Mengen -----
Fractie van watertype 1  0.50
Naam nieuw watertype    Dit is een mengwater
Watertype 1              Selecteer Record
Record : 1
Naam : WATERSAMENSTELLING
watertype 2              Selecteer Record
Record : 2
Naam : Dit water is onthard
Bereken  Annuleren  Help
```

Figuur 13: Gebruikersscherm voor invoer van gegevens voor de berekening van de watersamenstelling na mengen van twee watertypen.

Achter het veld *Fractie van watertype 1* kan de fractie van het eerste watertype ingegeven worden. Het mengwater wordt dan gevormd door watertype 1 met watertype 2 te mengen in de verhouding:

$$(\text{watertype 1} / \text{watertype 2}) = \text{fractie van watertype 1} / (1 - \text{fractie van watertype 1})$$

Met *Selecteer Record* kunnen de records worden gekozen die gemengd moeten worden. Door *Bereken* te selecteren wordt de berekening gestart. Met *Annuleren* wordt het scherm verlaten zonder dat de berekening wordt uitgevoerd. Onder de toets *Help* staat de helptekst bij dit programmagedeelte. Voor het mengen van meer dan twee watertypes, bijvoorbeeld vier, kan de bovenstaande procedure herhaald worden. De menging kan worden uitgevoerd door de eerste twee watertypes te mengen en vervolgens de andere twee watertypes te mengen. Het resultaat van de menging van de vier watertypes kan dan bepaald worden door de twee mengwaters met elkaar te mengen.

3.3.3

TACC/SI

Met deze optie kan de TACC en de SI van een watertype worden berekend. Bij keuze van deze optie verschijnt het gebruikersscherm van figuur 14.

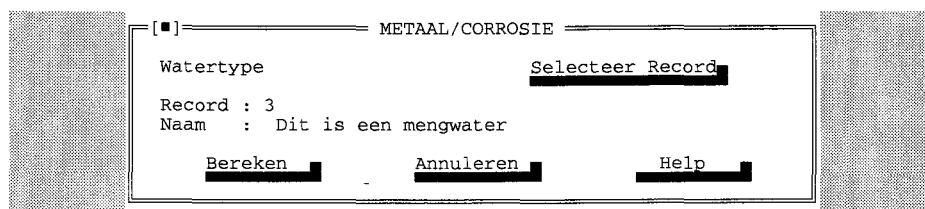
```
[■]----- TACC/SI -----
Gewenste Temperatuur    90 °C
Watertype                Selecteer Record
Record : 3
Naam : Dit is een mengwater
Bereken  Annuleren  Help
```

Figuur 14: Gebruikersscherm voor invoer van gegevens voor de berekening van de TACC en de SI van een watertype bij een bepaalde temperatuur.

Bij *Selecteer Record* dient het watertype opgegeven te worden, waarvan de TACC en de SI moeten worden berekend, en bij *Gewenste Temperatuur* de temperatuur waarbij de berekening moet worden uitgevoerd. De *Gewenste Temperatuur* kan variëren van 0 tot 90° C. Door *Bereken* te selecteren wordt de berekening gestart. Met *Annuleren* wordt het scherm verlaten zonder dat de berekening wordt uitgevoerd. Onder de toets *Help* staat de helptekst bij dit programmagedeelte.

3.3.4 Metaal/Corrosie

Deze optie kan worden gebruikt voor het berekenen van het koper- en loodoplossend vermogen en de corrosie index van een bepaald watertype. Het watertype waarvoor de berekening moet worden uitgevoerd, wordt geselecteerd met behulp van het gebruikersscherm (figuur 15) bij deze optie.

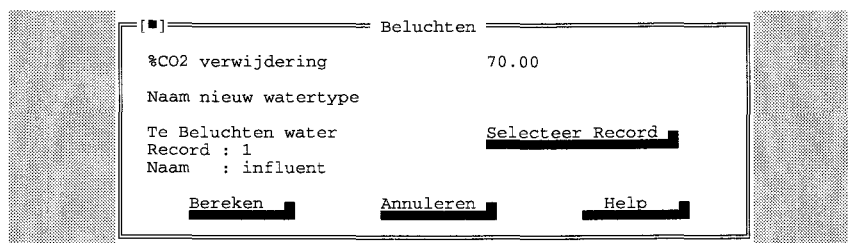


Figuur 15: Gebruikersscherm voor selectie van het watertype voor berekening van het koper- en loodoplossend vermogen en van de corrosie index.

Bij *Selecteer Record* dient het watertype ingegeven te worden. Door *Bereken* te drukken wordt de berekening gestart. Met *Annuleren* wordt het scherm verlaten zonder dat de berekening wordt uitgevoerd. Onder de toets *Help* staat de helptekst bij dit programmagedeelte.

3.3.5 Beluchten

Met deze optie kan de watersamenstelling van een watertype na beluchting worden berekend. Bij de beluchting wordt een bepaald percentage CO₂ verwijderd. Dit percentage kan worden opgegeven bij het veld *%CO₂ verwijdering*. De waarde die hier wordt ingevuld dient kan een waarde van 0 tot en met 100 zijn.



Bij het veld *Naam nieuw watertype* kan een willekeurige naam (max 30 tekens) voor de samenstelling van het beluchte water worden ingegeven. De watersamenstelling waarvan de beluchting berekend moet worden, kan geselecteerd worden met *Selecteer Record*. Door *Bereken* te drukken wordt de berekening gestart. Met *Annuleren* wordt het scherm verlaten zonder dat de berekening wordt uitgevoerd. Onder de toets *Help* staat de helptekst bij dit programmagedeelte.

3.3.6

Loogdosering

Met deze optie kan een watersamenstelling worden berekend nadat deze een loogdosering heeft ondergaan. De loogdosering kan worden uitgevoerd door een dosering op te geven in mmol/l en mg/l. Tevens is er de optie om een dosering door te voeren tot een bepaalde SI of een bepaalde pH. Dit is in te geven bij het veld *Sturen op*. De base die gedoseerd wordt kan gekozen worden bij het veld *Toe te voegen base*. Hoeveel base of tot welke de pH of SI gedoseerd wordt kan worden ingegeven bij het veld *Dosering* respectievelijk *pH na dosering* of *SI na dosering*. Dit veld verandert in een van de boven genoemde namen door het veranderen van de keuze in het veld *Sturen op*.

```
[■] Loogdosering
Sturen op
( ) pH
(•) SI
( ) Dosering (mmol/l)
( ) Dosering (mg/l)

Toe te voegen base
(•) Ca(OH)2
( ) Mg(OH)2
( ) NaOH
( ) Na2CO3

SI na dosering 0

Naam nieuw watertype water met een SI=0

Te Bewerken water Selecteer Record
Record : 1
Naam : influent

Bereken Annuleren Help
```

Bij het veld *Naam nieuw watertype* kan een willekeurige naam (max 30 tekens) voor de samenstelling van het water worden ingegeven waarop de loogdosering is uitgevoerd. De watersamenstelling waarvan de loogdosering berekend moet worden, kan geselecteerd worden met *Selecteer Record*. Door *Bereken* te drukken wordt de berekening gestart. Met *Annuleren* wordt het scherm verlaten zonder dat de berekening wordt uitgevoerd. Onder de toets *Help* staat de helptekst bij dit programmagedeelte.

3.3.7

Zuurdosering

Met deze optie kan een watersamenstelling worden berekend nadat deze een zuurdosering heeft ondergaan. De zuurdosering kan worden uitgevoerd door een dosering op te geven in mmol/l en mg/l. Tevens is er de optie om een dosering door te voeren tot een bepaalde SI of een bepaalde pH. Dit is in te geven bij het veld *Sturen op*. Het zuur dat gedoseerd wordt kan gekozen worden bij het veld *Toe te voegen zuur*. Hoeveel zuur of tot welke de pH of SI gedoseerd wordt kan worden ingegeven bij het veld *Dosering* respectievelijk *pH na dosering* of *SI na dosering*. Dit veld verandert in een van de boven genoemde namen door het veranderen van de keuze in het veld *Sturen op*.

```
[■] Zuurdosering
Sturen op
(•) pH
( ) SI
( ) Dosering (mmol/l)
( ) Dosering (mg/l)

Toe te voegen zuur
(•) H2SO4
( ) HCl
( ) CO2

pH na dosering 7.8

Naam nieuw watertype Water met pH=7.8

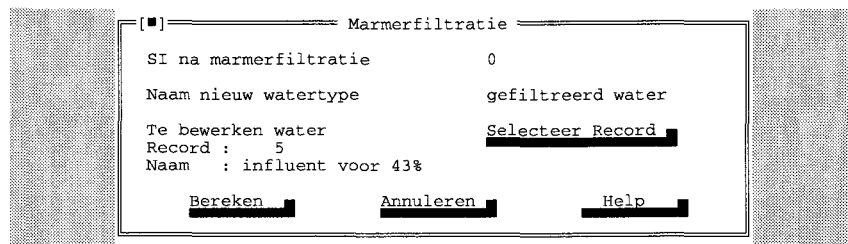
Te Bewerken water Selecteer Record
Record : 1
Naam : influent

Bereken Annuleren Help
```


Bij het veld *Naam nieuw watertype* kan een willekeurige naam (max 30 tekens) voor de samenstelling van het water worden ingegeven waarop de zuurdosering is uitgevoerd. De watersamenstelling waarvan de zuurdosering berekend moet worden, kan geselecteerd worden met *Selecteer Record*. Door *Bereken* te drukken wordt de berekening gestart. Met *Annuleren* wordt het scherm verlaten zonder dat de berekening wordt uitgevoerd. Onder de toets *Help* staat de helptekst bij dit programmagedeelte.

3.3.8 Marmerfiltratie

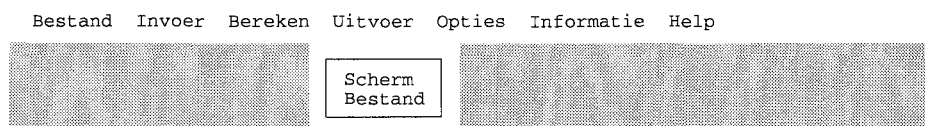
Met deze optie kan de watersamenstelling van een watertype na marmerfiltratie worden berekend. De marmerfiltratie wordt doorgevoerd totdat een bepaalde SI is bereikt. Deze SI zal kleiner of gelijk zijn aan nul. De SI is in te geven bij het veld *SI na marmerfiltratie*. De marmerfiltratie kan alleen worden berekend van watersamenstellingen waarvan de SI kleiner dan nul is. Is er geen watersamenstelling met een SI kleiner dan nul dan zal er een hiervan een melding worden gemaakt. De marmerfiltratie berekening is dan niet mogelijk. Ook wanneer een watersamenstelling wordt gekozen met de knop *Selecteer Record* die een SI groter of gelijk aan nul heeft dan zal het programma een melding hierop geven.



Bij het veld *Naam nieuw watertype* kan een willekeurige naam (max 30 tekens) voor de samenstelling van het water worden ingegeven waarop de marmerfiltratie is uitgevoerd. De watersamenstelling waarvan de marmerfiltratie berekend moet worden, kan geselecteerd worden met *Selecteer Record*. Door *Bereken* te drukken wordt de berekening gestart. Met *Annuleren* wordt het scherm verlaten zonder dat de berekening wordt uitgevoerd. Onder de toets *Help* staat de helptekst bij dit programmagedeelte.

3.4 Uitvoer

Na selectie van de optie *Uitvoer* in het hoofdmenu verschijnt het submenu dat in figuur 16 is weergegeven.

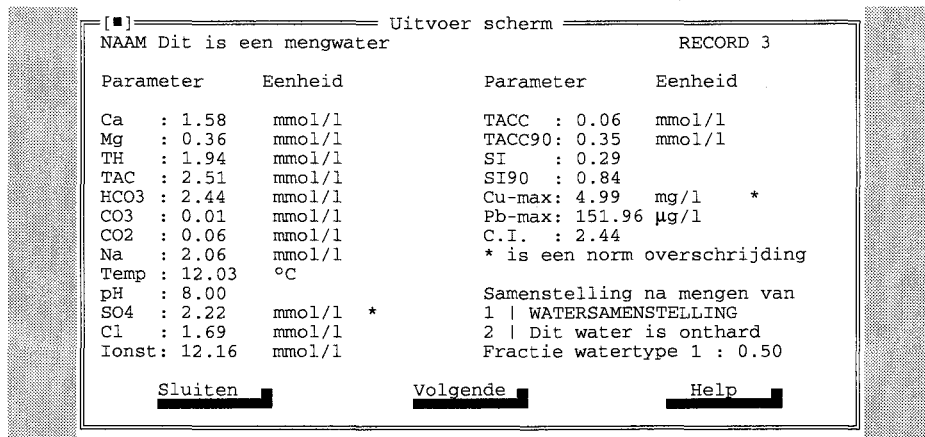


Figuur 16: Het submenu van de optie *Uitvoer* in het hoofdmenu.

De submenu-opties worden hieronder toegelicht.

3.4.1 Scherm

Met deze optie kunnen de ingevoerde gegevens en/of resultaten van berekeningen op het scherm worden getoond. Het scherm is weergegeven in figuur 17.



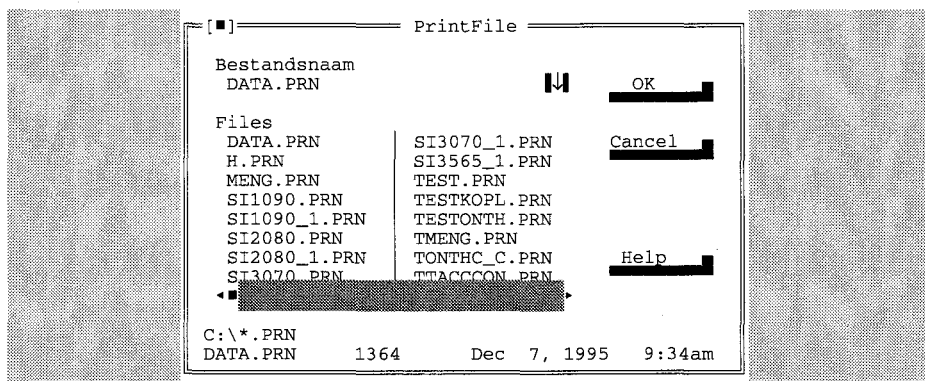
Figuur 17: Het uitvoerscherm van AQUACALC.

In het eerste scherm dat zichtbaar wordt staat altijd de watersamenstelling met het nummer 1. Met *Volgende* kan de volgende watersamenstelling worden bekeken. Als na de laatste ingevoerde/berekende watersamenstelling weer op *Volgende* wordt gedrukt, wordt watersamenstelling nummer 1 weer getoond.

Met *Sluiten* of <Esc> wordt het scherm verlaten. Met *Help* wordt de helptekst voor dit programma-onderdeel afgebeeld. Een '*' achter een parameter wil zeggen dat voor deze parameter de gestelde normwaarde wordt overschreden.

3.4.2 Bestand

Slaat de huidige gegevens (alle gegevens in het werkgeheugen) op in een ASCII-bestand. Een ASCII-bestand is een DOS-tekst bestand, dat zonder problemen in iedere tekstverwerker of editor kan worden ingelezen. Het gebruikersscherm bij deze optie is weergegeven in figuur 18.



Figuur 18: Gebruikersscherm voor uitvoer van de gegevens in een ASCII-bestand.

Na invoer van een naam onder *Bestandsnaam* worden de gegevens weggeschreven in het ASCII-bestand zodra *OK* of <Enter> wordt gegeven. De bestanden worden standaard opgeslagen met de extensie PRN, tenzij de gebruiker een andere extensie meegeeft. De bestanden die getoond worden in de *bestandslijst* hebben ook de standaard extensie PRN.

Wanneer men wil dat alle bestanden worden getoond, moet er onder de bestandsnaam *.* worden ingetypt gevolgd door *OK* of <Enter>. Op deze manier kunnen ook bestanden worden getoond met een andere extensie.

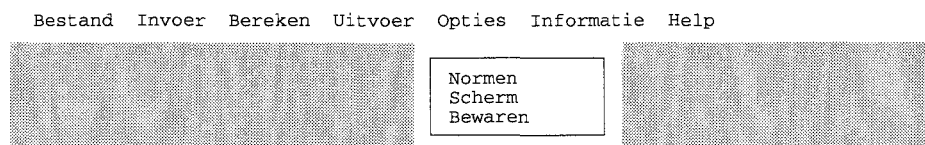
De gebruiker kan een bestand of een directory uit de *bestandenlijst* kiezen door de cursor op het betreffende bestand of directory te plaatsen en vervolgens *OK* of <Enter> te geven.

Als de gegevens zijn weggeschreven wordt het gebruikersscherm verwijderd en is het hoofdmenu weer bereikbaar. Met <Esc> of *Cancel* kan het scherm worden verlaten zonder de gegevens weg te schrijven

Onder de toets *Help* staat de helptekst bij dit programma-onderdeel.

3.5 Opties

Na selectie van de optie *Opties* in het hoofdmenu verschijnt het submenu dat in figuur 19 is weergegeven.

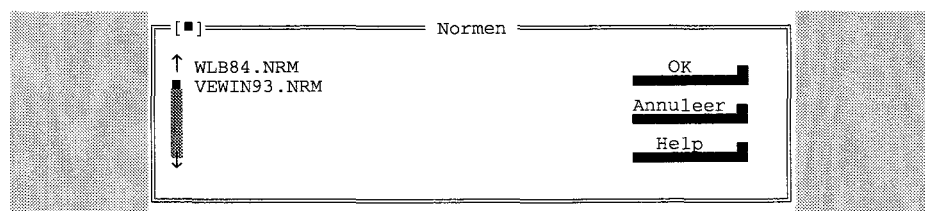


Figuur 19: Het submenu van de optie *Opties* in het hoofdmenu.

De submenu-opties worden hieronder toegelicht.

3.5.1 Normen

Met de optie *Normen* kunnen de normen, waaraan de betreffende parameters worden getoetst, worden ingesteld. Standaard worden de normen van het waterleidingbesluit uit 1984 gehanteerd. Als extra mogelijkheid zijn de normen van de VEWIN-aanbevelingen uit 1993 bijgeleverd. Wanneer het gebruikersscherm voor deze optie zichtbaar is (door selectie van de optie *Opties*/*Normen*) wordt aangegeven dat er twee bestanden zijn waarin normen zijn opgenomen: WLB84.NRM en VEWIN93.NRM (figuur 20).



Figuur 20: Gebruikersscherm voor de submenu-optie *Normen*.

Door de cursor in de lijst op een van de namen van de normenbestanden te plaatsen en op <Enter> of *OK* te drukken wordt dit normenbestand geladen. Met *Annuleer* of <Esc> wordt het scherm verlaten, en blijven de normen gelden die voor de aanroep van deze optie geldig waren.

Met *Help* wordt de helptekst bij dit programmagedeelte getoond.

Zodra nieuwe normen zijn geladen, worden alle reeds bestaande en nieuw in te voeren watersamenstellingen aan deze normen getoetst.

Het is ook mogelijk om zelf een bestand te maken met een aantal normen waarop getoetst moet worden. Er moet dan een ASCII-bestand worden gemaakt zoals opgenomen is in bijlage 2. De normwaarden moeten in exact dezelfde volgorde worden ingegeven als in de bijlage is vermeld. De naam het van bestand mag 8 tekens lang zijn, en moet als extensie NRM hebben. Een geldige naam is bijvoorbeeld MIJNNORM.NRM. Dit bestand moet dan in de directory worden geplaatst waar het bestand AQUACALC.EXE staat. Een ASCII-bestand kan met een DOS-editor of met een tekstverwerker, die een DOS-tekst kan opslaan, worden gemaakt.

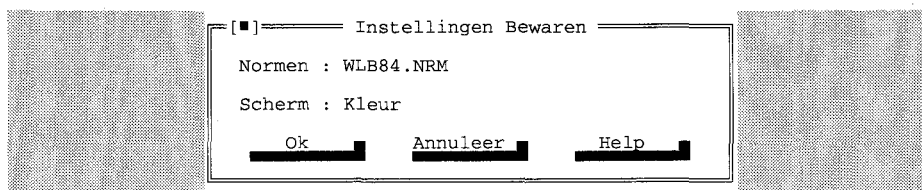
3.5.2 Scherm

Met deze optie kan de scherminstelling worden gekozen. Het scherm kan in een monochrome en kleuren-mode worden gezet. Tevens is het mogelijk om de schermgrootte te wisselen van 80*25 naar 80*50 en omgekeerd. Met *OK* worden de instellingen aanvaard en wordt het gebruikersscherm verlaten. Met *Annuleer* of <Esc> wordt het scherm verlaten zonder de instellingen te veranderen. Met *Help* wordt de helptekst bij dit programmagedeelte getoond.

Indien gebruik wordt gemaakt van een monochroom beeldscherm is de optie *Scher*m niet toegankelijk. Dit heeft als reden dat bij een monochroom beeldscherm het veranderen van de kleuren en de grootte van het lettertype (in tekstmode althans) niet mogelijk is.

3.5.3 Bewaren

Met de optie *Bewaren* worden de instellingen betreffende de scherminstellingen en het gekozen normenbestand opgeslagen in het bestand AQUACALC.INI. De volgende keer dat AQUACALC wordt opgestart, worden de instellingen in het bestand AQUACALC.INI gebruikt.

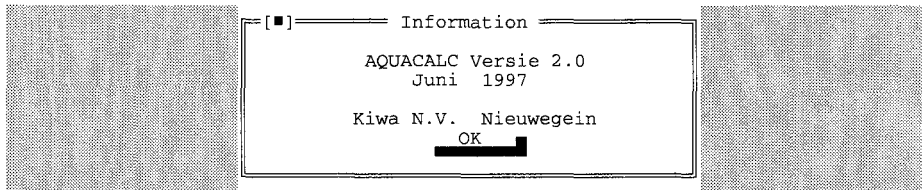


Figuur 21: Gebruikersscherm voor het bewaren van de instellingen.

Met *OK* worden de gegevens opgeslagen en wordt het scherm verlaten. Met *Annuleer* of <Esc> worden de gegevens niet opgeslagen en wordt het scherm verlaten. Onder de *Help* toets staat de helptekst bij dit programma-onderdeel.

3.6 Informatie

Met de optie *Informatie* wordt informatie over AQUACALC op het scherm getoond. Door op *OK* of <Esc> te drukken wordt dit scherm (figuur 22) verlaten.



Figuur 22: Het informatiescherm van AQUACALC.

3.7 Help

De optie *Help* geeft hulp bij het programma. De tekst geeft informatie over het programma en een omschrijving van de opties van het programma. Met <Esc> wordt *Help* verlaten.

3.8 Einde

Beëindigt het programma. AQUACALC vraagt om bevestiging voor beëindiging van het programma indien er nog gegevens in het werkgeheugen aanwezig zijn, die nog niet zijn opgeslagen.

De optie *Einde* komt op twee plaatsen in het programma voor. Eén maal onder de hoofdmenu-optie *Bestand*, en één maal in de statusbalk, onderaan in het scherm.

4 VOORBEELDEN

In dit hoofdstuk wordt het gebruik van AQUACALC aan de hand van drie voorbeelden toegelicht. In deze drie voorbeelden wordt het gebruik van alle berekeningstappen binnen AQUACALC getoond. Het eerste voorbeeld zal iets uitvoeriger zijn omschreven dan de laatste twee.

In de voorbeelden komen de volgende stappen aan de orde:

- het invoeren van de gegevens;
- het uitvoeren van de berekeningen;
- het tonen van de berekende gegevens op het scherm.

In de praktijk zal de laatste stap van de berekeningen een interpretatie van de uitvoer zijn. In dit voorbeeld is deze stap beperkt tot toetsing aan de normen uit het waterleidingbesluit 1984.

4.1 Voorbeeld 1 : Deelstroom ontharding

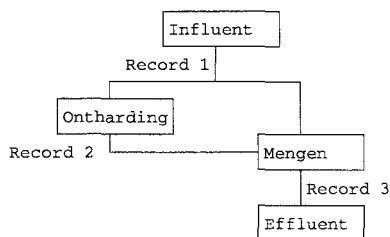
In het eerste voorbeeld wordt gewerkt met de onderstaande watersamenstelling.

calcium (Ca)	2.03 mmol/l
magnesium (Mg)	0.36 mmol/l
waterstofcarbonaat (HCO ₃)	3.63 mmol/l
natrium (Na)	2.06 mmol/l
sulfaat (SO ₄)	1.03 mmol/l
chloride (Cl)	1.69 mmol/l
ionsterkte	13.50 mmol/l
temperatuur	12.03 °C
pH	7.98

Een deelstroom van 50% wordt met kalkmelk onthard tot een totale hardheid van 1 mmol/l. Daarna wordt het ontharde water gemengd met de 50% niet-onthard water (mengverhouding 1:1). Van dit mengwater worden de parameters TACC, SI, TACC₉₀, SI₉₀, het koper- en loodoplossend vermogen en de corrosie index berekend.

4.1.1 Aanpak

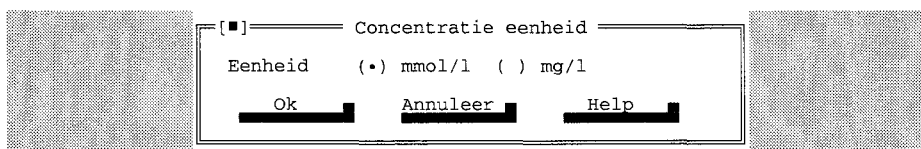
Voor elke ingevoerde of berekende watersamenstelling genereert AQUACALC een record. Een record is een opslagplaats voor de watersamenstellinggegevens. Bij het uitvoeren van een berekening met AQUACALC is het aan te bevelen als eerste handeling een overzicht te maken van het scenario dat doorgerekend dient te worden. Hierbij wordt het influent en de watersamenstellingen na elke zuiveringsstap aangegeven. In de onderstaande figuur is een overzicht van het scenario gegeven dat in het voorbeeld wordt uitgewerkt.



In dit scenario is aangegeven in welk record welke waterkwaliteit wordt opgeslagen. In record 1 wordt de waterkwaliteit opgeslagen die wordt ingevoerd. Wanneer vervolgens de processtap ontharding wordt uitgevoerd zal in record 2 de waterkwaliteit na ontharding worden opgeslagen. De waterkwaliteit na de ontharding in deelstroom kan verkregen worden door de waterkwaliteit na de ontharding (record 2) in de juiste verhouding te mengen met het influent (record 1). Dit levert dan de waterkwaliteit na de ontharding in deelstroom (record 3).

4.1.2 Invoeren van de gegevens

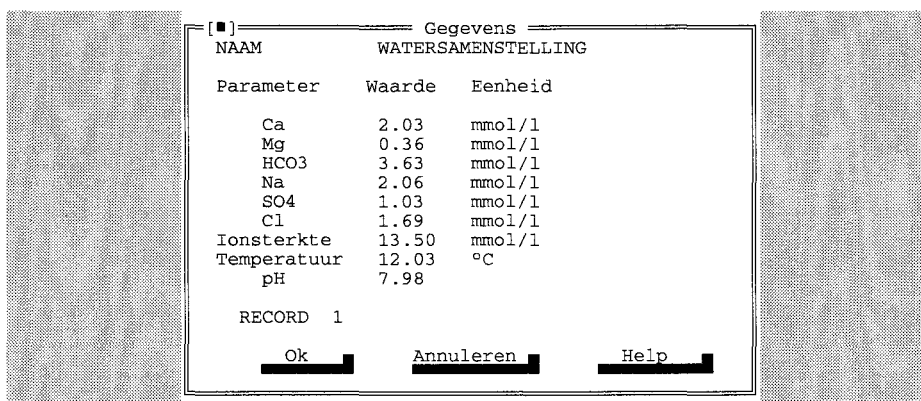
Omdat de watersamenstelling in mmol/l is opgegeven moet aan het programma kenbaar worden gemaakt dat er in mmol/l wordt gerekend. Dit kan worden gedaan door de optie *Invoer|Eenheid* te selecteren.



Met de cursortoetsen <←> en <→> kan de punt bij de gewenste eenheid worden gezet. Daarna kan door de <Tab> toets te drukken verder worden gegaan naar de *Ok* knop. Deze is nu lichtgekleurd.

Door <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de eenheid ingesteld en wordt teruggekeerd in het hoofdmenu.

Nadat de eenheid is ingesteld kan de watersamenstelling worden ingevoerd bij de optie *Invoer|Gegevens*.



Als dit scherm is aangeroepen staat de cursor in het invoerveld achter *NAAM*. Er kan nu een naam worden ingegeven voor de watersamenstelling. Met <Tab> wordt de invoer afgesloten en wordt naar het volgende invoerveld gegaan. Het volgende invoerveld draagt het label *Ca*. Dit label is nu ook licht van kleur. Wanneer hierachter de waarde van de Ca^{2+} concentratie is ingeven kan verder gegaan worden naar het volgende veld door <Tab> te drukken waarmee de zojuist ingegeven waarde wordt afgesloten.

Het bovenstaande wordt herhaald totdat alle parameters zijn ingevuld. Wanneer <Shift>+<Tab> ingedrukt wordt, wordt in de tegengestelde richting bewogen dan wanneer <Tab> wordt gedrukt. Wanneer een waarde foutief is ingevoerd, kan het invoerveld waar deze waarde staat bereikt worden door <Shift>+<Tab> in te drukken of door op <Tab> te blijven drukken totdat de cursor weer op dit invoerveld staat.

Nadat de laatste parameter, *pH*, is ingevuld moet weer <Tab> worden gedrukt. De knop *Ok* is nu licht van kleur. Door op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de watersamenstelling opgeslagen in het geheugen.

4.1.3 Uitvoeren van de berekeningen

Ontharden

Na deze watersamenstelling te hebben ingevoerd wordt de samenstelling van het water berekend, dat met kalkmelk is onthard tot een totale hardheid van 1 mmol/l. Hiervoor is de optie *Bereken/Ontharden* geselecteerd.

[■] Ontharden

Onthardingsbase (•) Ca(OH)₂ () NaOH

Totale hardheid na ontharden 1.00 mmol/l

SI na ontharden 0.00

Naam nieuw watertype Dit water is onthard

Te ontharden water **Selecteer Record**

Record : 1

Naam : WATERSAMENSTELLING

Bereken Annuleren Help

Met de cursortoetsen <←> en <→> kan de base worden gekozen waarmee de berekening wordt uitgevoerd door het • voor de base te plaatsen, die geselecteerd dient te worden.

Daarna kan met de <Tab> toets verder worden gegaan naar het veld waar de *Totale hardheid na ontharden* moet worden ingevuld. Vervolgens kan door weer <Tab> te drukken naar het veld *SI na ontharden* worden gegaan.

Nadat deze is ingevuld wordt door <Tab> te drukken naar het veld *Naam nieuw watertype* gegaan. In dit invoerveld kan de naam worden ingegeven voor de samenstelling van het ontharde water. Door weer <Tab> te drukken wordt de knop *Selecteer Record* licht van kleur. Door op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de recordlijst zichtbaar. Hieruit kan met de cursortoetsen <↑> en <↓> gevolgd door <Enter> de watersamenstelling worden geselecteerd, die volgens de hierboven ingestelde waarden onthard moet worden. Wanneer onder het label reeds de goede watersamenstelling staat dan kan het selecteren van de watersamenstelling worden overgeslagen.

Nadat de te ontharden watersamenstelling is gekozen, kan de berekening worden gestart. Hiertoe moet weer <Tab> worden gedrukt, waardoor de knop *Bereken* licht van kleur wordt. Door nu op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de berekening gestart.

Mengen

Na ontharding wordt het ontharde water gemengd met de ingegeven watersamenstelling in de verhouding 1:1. Hiertoe selecteren we de optie *Bereken|Mengen*.

```
[■] Mengen
Fractie van watertype 1  0.50
Naam nieuw watertype    Dit is een mengwater
Watertype 1             Selecteer Record
Record : 1
Naam : WATERSAMENSTELLING
watertype 2             Selecteer Record
Record : 2
Naam : Dit water is onthard
Bereken  Annuleren  Help
```

Achter het label *Fractie van watertype 1* moet de fractie van de eerste watersamenstelling worden ingevuld. Door <Tab> te drukken kan achter het label *Naam nieuw watertype* de naam worden ingegeven van het mengwater. Door weer <Tab> te drukken wordt de knop *Selecteer Record* geselecteerd. Het selecteren van een watersamenstelling is hierboven reeds omschreven. Hierna wordt het tweede watertype geselecteerd. Dit gebeurt op dezelfde manier als de selectie van het eerste watertype. Nadat het tweede watertype geselecteerd is wordt door <Tab> te drukken de knop *Bereken* licht van kleur. Door nu op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de berekening voor de menging gestart.

TACC/SI

Na het mengen worden de parameters TACC en SI van het mengwater berekend, bij de ingevoerde temperatuur en bij 90°C. Hiertoe wordt de optie *Bereken|TACC/SI* geselecteerd.

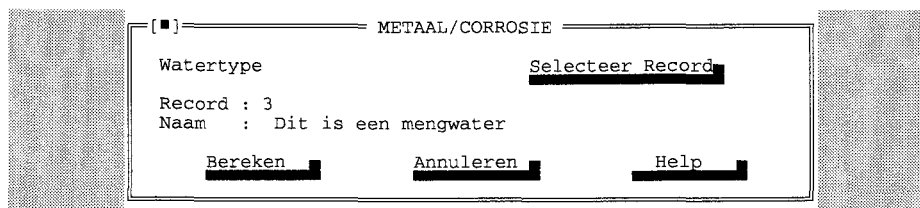
```
[■] TACC/SI
Gewenste Temperatuur  90 °C
Watertype              Selecteer Record
Record : 3
Naam : Dit is een mengwater
Bereken  Annuleren  Help
```

De cursor staat op het moment in het invoerveld voor de gewenste temperatuur. In dit veld kan de temperatuur worden ingegeven waarbij de TACC en SI berekend moeten worden. Standaard wordt de TACC en SI ook berekend bij de actuele (ingevoerde) watertemperatuur.

Door hierna <Tab> te drukken wordt de knop *Selecteer Record* licht van kleur. Door op <Enter> of <Spatie> te drukken kan de watersamenstelling worden geselecteerd waarvan de TACC en SI berekend moeten worden. Door vervolgens weer <Tab> te drukken wordt de knop *Bereken* licht van kleur. Door <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de berekening gestart.

Corrosieparameters

Hierna worden het koper- en loodoplossend vermogen en de corrosie index berekend. Hiervoor moet de optie *Bereken\Metaal\Corrosie* worden geselecteerd.



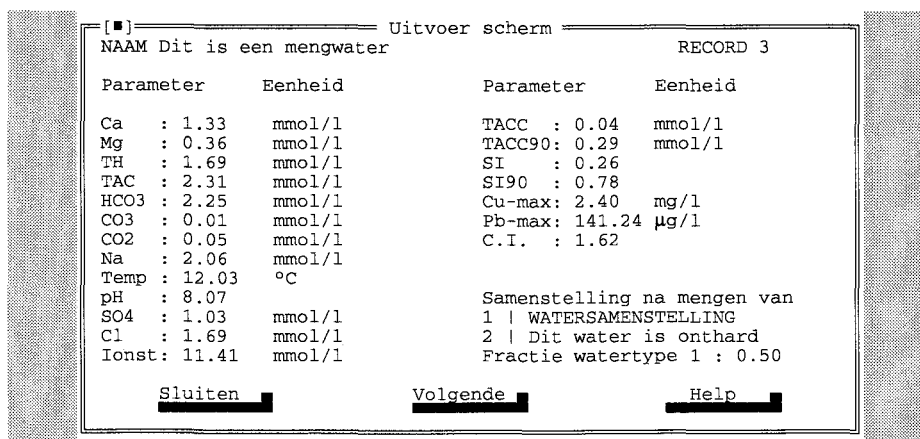
Door <Enter> of <Spatie> te drukken kan uit de recordlijst de watersamenstelling worden geselecteerd waarvan de corrosieparameters moeten worden berekend. Door weer <Tab> te drukken wordt de knop *Bereken* licht van kleur. Door <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de berekening gestart.

4.1.4 De berekende gegevens op het scherm tonen

De resultaten van de berekeningen met het mengwater kunnen worden getoond met de optie *Uitvoer\Scherm*. Als eerste record wordt de ingeven watersamenstelling getoond, als tweede de samenstelling van het ontharde water en als derde de watersamenstelling van het mengwater. Deze laatste watersamenstelling wordt hieronder getoond.

De parameters TACC, SI, koper- en loodoplossend vermogen en de corrosie index worden hierbij ook getoond.

Eventuele normoverschrijdingen worden aangegeven met een * achter de parameter in het uitvoerscherm.



De watersamenstelling van het mengwater is getoetst aan normen uit het waterleidingbesluit van 1984 (WLB84 in de normenlijst). Wanneer het uitvoerscherm is aangeroepen is de knop *Sluiten* licht gekleurd. Door op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt teruggekeerd naar het hoofdmenu. Dit kan ook door <Esc> te drukken. Door op <Tab> te drukken wordt de knop *Volgende* licht gekleurd. Door nu op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de volgende watersamenstelling getoond.

Wanneer de laatste watersamenstelling (de samenstelling met het hoogste recordnummer) getoond wordt, en de knop *Volgende* wordt weer geactiveerd, dan wordt opnieuw de eerste watersamenstelling getoond.

Het uitvoerscherm kan worden verlaten door <Esc> te drukken of door *Sluiten* te activeren.

4.2 Voorbeeld 2 : Zuurdosering, beluchting en loogdosering

In het tweede voorbeeld wordt gewerkt met de volgende watersamenstelling.

calcium (Ca)	2.03 mmol/l
magnesium (Mg)	0.36 mmol/l
waterstofcarbonaat (HCO ₃)	5.36 mmol/l
natrium (Na)	2.06 mmol/l
sulfaat (SO ₄)	1.03 mmol/l
chloride (Cl)	1.69 mmol/l
ionsterkte	13.50 mmol/l
temperatuur	12.03 °C
pH	7.98

Aan deze watersamenstelling zal HCl worden gedoseerd tot een pH van 6.0. Daarna wordt het water belucht waarbij 85% CO₂ zal worden verwijderd. Aan dit water zal loog worden gedoseerd tot een pH van 7.90.

4.2.1 Invoeren van gegevens

Hoe de bovenstaande watersamenstelling ingevoerd dient te worden is omschreven in paragraaf 4.1.1.

4.2.2 Uitvoeren van de berekeningen

Zuurdosering

Aan de ingevoerde watersamenstelling wordt een hoeveelheid HCl toegevoegd totdat een pH van 6.0 wordt bereikt. De berekening van de zuurdosering is vastgelegd onder de optie *Bereken\Zuurdosering*.

```
[■] ————— Zuurdosering —————  
Sturen op                               Toe te voegen zuur  
(*) pH                                  ( ) H2SO4  
( ) SI                                  (*) HCl  
( ) Dosering (mmol/l)                   ( ) CO2  
( ) Dosering (mg/l)  
  
pH na dosering                           6.0  
Naam nieuw watertype                       HCl gedoseerd tot pH=6  
  
Te Bewerken water                          Selecteer Record  
Record : 1  
Naam : Invoer  
  
Bereken      Annuleren      Help
```

Met de cursortoetsen <↓> en <↑> kan in het veld *Sturen* op de parameter worden bepaald waarop de zuurdosering wordt gestuurd. Als *pH* wordt gekozen wordt de watersamenstelling berekend waaraan een hoeveelheid zuur is gedoseerd tot een opgegeven pH. Als *SI* wordt gekozen wordt de watersamenstelling berekend waaraan een hoeveelheid zuur is gedoseerd tot een opgegeven SI. En verder is het nog mogelijk om aan te geven hoeveel zuur er gedoseerd dient te worden. Deze zuurdosering kan worden opgegeven in mg/l en mmol/l.

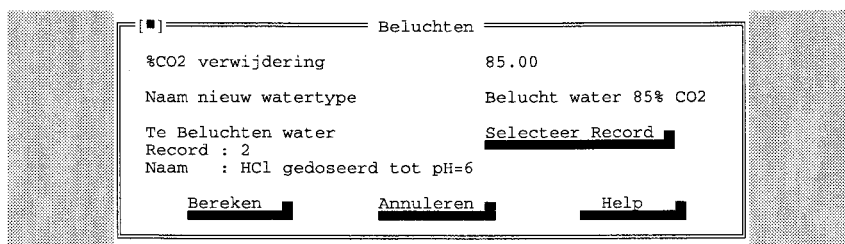
Met <Tab> wordt verder gegaan naar het veld *Toe te voegen zuur*. Met de cursortoetsen <↓> en <↑> kan hier het zuur worden uitgekozen dat wordt toegevoegd. Wanneer nu weer <Tab> wordt gedrukt wordt naar het volgende veld gesprongen. De naam van dit veld is afhankelijk van de keuze in het veld *Sturen op*. Het veld zal echter nu de naam *pH na dosering* hebben. Hier kan de pH worden ingevuld die door de zuurdosering bereikt dient te worden.

Nadat deze is ingevuld wordt door <Tab> te drukken naar het veld *Naam nieuw watertype* gegaan. In dit invoerveld kan de naam worden ingegeven voor de samenstelling van water waaraan zuur is toegevoegd. Door weer <Tab> te drukken wordt de knop *Selecteer Record* licht van kleur. Door op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de recordlijst zichtbaar. Hieruit kan met de cursortoetsen <↑> en <↓> gevolgd door <Enter> de watersamenstelling worden geselecteerd, waarop volgens de hierboven ingestelde waarden een zuurdosering wordt uitgevoerd. Wanneer onder het label reeds de goede watersamenstelling staat dan kan het selecteren van de watersamenstelling worden overgeslagen.

Nadat de watersamenstelling waarvan de dosering berekend dient te worden gekozen is, kan de berekening worden gestart. Hiertoe moet weer <Tab> worden gedrukt, waardoor de knop *Bereken* licht van kleur wordt. Door nu op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de berekening gestart.

Beluchten

Nadat de zuurdosering is uitgevoerd wordt het verkregen water belucht. Hierbij wordt 85% van de actuele CO₂ concentratie verwijderd. Om de beluchttingsberekening uit te voeren dient de optie *Bereken\Beluchten* te worden gekozen.



Beluchten		
%CO2 verwijdering	85.00	
Naam nieuw watertype	Belucht water 85% CO2	
Te Beluchten water		
Record :	2	
Naam :	HCl gedoseerd tot pH=6	
Bereken	Annuleren	Help

Achter het label *% CO₂ verwijdering* moet het percentage CO₂ worden ingevuld dat moet worden verwijderd. Dit percentage CO₂ wordt van de actuele CO₂ concentratie verwijderd als zijnde een hoeveelheid TAC.

Nadat deze is ingevuld wordt door <Tab> te drukken naar het veld *Naam nieuw watertype* gegaan. In dit invoerveld kan de naam worden ingegeven voor de samenstelling van het beluchte water. Door weer <Tab> te drukken wordt de knop *Selecteer Record* licht van kleur. Door op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de recordlijst zichtbaar. Hieruit kan met de cursortoetsen <↑> en <↓> gevolgd door <Enter> de watersamenstelling worden geselecteerd, die volgens de hierboven ingestelde waarden belucht moet worden.

Wanneer onder het label reeds de goede watersamenstelling staat dan kan het selecteren van de watersamenstelling worden overgeslagen.

Nadat de watersamenstelling waarvan de beluchting berekend dient te worden gekozen is, kan de berekening worden gestart. Hiertoe moet weer <Tab> worden gedrukt, waardoor de knop *Bereken* licht van kleur wordt. Door nu op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de berekening gestart.

Loogdosering

Op de zojuist verkregen watersamenstelling wordt een nu een loogdosering uitgevoerd tot een pH van 7.90. De berekening van de loogdosering is vastgelegd onder de optie *Bereken\Loogdosering*.

LoogDosering	
Sturen op	Toe te voegen base
(*) pH	(*) Ca(OH)2
() SI	() Mg(OH)2
() Dosering (mmol/l)	() NaOH
() Dosering (mg/l)	() Na2CO3
pH na dosering	7.90
Naam nieuw watertype	Ca(OH)2 gedoseerd tot pH
Te Bewerken water	Selecteer Record
Record : 3	
Naam : Belucht water 85% CO2 verwijd	
Bereken	Annuleren Help

Met de cursortoetsen <↓> en <↑> kan in het veld *Sturen op* de parameter worden bepaald waarop de loogdosering wordt gestuurd. Als *pH* wordt gekozen wordt de watersamenstelling berekend waaraan een hoeveelheid loog is gedoseerd tot een opgegeven pH. Als *SI* wordt gekozen wordt de watersamenstelling berekend waaraan een hoeveelheid loog is gedoseerd tot een opgegeven SI. En verder is het nog mogelijk om aan te geven hoeveel loog er gedoseerd dient te worden. Deze zuurdosering kan worden opgegeven in mg/l en mmol/l.

Met <Tab> wordt verder gegaan naar het veld *Toe te voegen base*. Met de cursortoetsen <↓> en <↑> kan hier het zuur worden uitgekozen dat wordt toegevoegd. Wanneer nu weer <Tab> wordt gedrukt wordt naar het volgende veld gesprongen. De naam van dit veld is afhankelijk van de keuze in het veld *Sturen op*. Het veld zal echter nu de naam *pH na dosering* hebben. Hier kan de pH worden ingevuld die door de loogdosering bereikt dient te worden.

Nadat deze is ingevuld wordt door <Tab> te drukken naar het veld *Naam nieuw watertype* gegaan. In dit invoerveld kan de naam worden ingegeven voor de samenstelling van het water waarop loog gedoseerd is. Door weer <Tab> te drukken wordt de knop *Selecteer Record* licht van kleur. Door op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de recordlijst zichtbaar. Hieruit kan met de cursortoetsen <↑> en <↓> gevolgd door <Enter> de watersamenstelling worden geselecteerd, waarop volgens de hierboven ingestelde waarden een loogdosering wordt uitgevoerd. Wanneer onder het label reeds de goede watersamenstelling staat dan kan het selecteren van de watersamenstelling worden overgeslagen.

Nadat de watersamenstelling waarvan de dosering berekend dient te worden gekozen is, kan de berekening worden gestart. Hiertoe moet weer <Tab> worden gedrukt, waardoor de knop *Bereken* licht van kleur wordt. Door nu op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de berekening gestart.

4.2.3 De berekende gegevens op het scherm tonen

De berekende gegevens kunnen nu weer op het scherm worden getoond.
De wijze waarop dit kan staat reeds omschreven in paragraaf 4.1.3.

4.3 Voorbeeld 3 : Marmerfiltratie

In het derde voorbeeld wordt gewerkt met de volgende watersamenstelling.

calcium (Ca)	0.56 mmol/l
magnesium (Mg)	0.23 mmol/l
waterstofcarbonaat (HCO ₃)	1.50 mmol/l
natrium (Na)	1.06 mmol/l
sulfaat (SO ₄)	1.09 mmol/l
chloride (Cl)	1.36 mmol/l
ionsterkte	12.00 mmol/l
temperatuur	8.00 °C
pH	7.00

Deze watersamenstelling zal een marmerfiltratie ondergaan totdat de watersamenstelling een SI van nul zal hebben.

4.3.1 Invoeren van gegevens

Hoe de bovenstaande watersamenstelling ingevoerd dient te worden is omschreven in paragraaf 4.1.2.

4.3.2 Uitvoeren van de berekeningen

Marmerfiltratie

Nadat de watersamenstelling is ingevoerd zal de watersamenstelling worden berekend nadat deze een marmerfiltratie heeft doorlopen. De berekening voor een marmerfiltratie is te vinden onder de optie *Bereken\Marmerfiltratie*.

Marmerfiltratie

SI na marmerfiltratie 0

Naam nieuw watertype merfiltratie tot SI=0

Te bewerken water Selecteer Record

Record : 1

Naam : 1

Bereken Annuleren Help

Bij het veld *SI na marmerfiltratie* kan de SI worden ingevuld de watersamenstelling na het doorlopen van de marmerfiltratie. Deze kan niet hoger dan nul zijn en niet kleiner dan de SI van de ingevoerde watersamenstelling waarvoor de marmerfiltratie berekend dient te worden.

Nadat deze is ingevuld wordt door <Tab> te drukken naar het veld *Naam nieuw watertype* gegaan. In dit invoerveld kan de naam worden ingegeven voor de samenstelling van het water dat de marmerfiltratie heeft doorlopen. Door weer <Tab> te drukken wordt de knop *Selecteer Record* licht van kleur. Door op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de recordlijst zichtbaar.

Hieruit kan met de cursortoetsen <↑> en <↓> gevolgd door <Enter> de watersamenstelling worden geselecteerd, die volgens de hierboven ingestelde waarden door de marmerfiltratie moet worden behandeld. Wanneer onder het label reeds de goede watersamenstelling staat dan kan het selecteren van de watersamenstelling worden overgeslagen.

Nadat de watersamenstelling waarvan marmerfiltratie berekend dient te worden gekozen is, kan de berekening worden gestart. Hiertoe moet weer <Tab> worden gedrukt, waardoor de knop *Bereken* licht van kleur wordt. Door nu op <Enter> of <Spatie> te drukken wordt de berekening gestart.

4.3.3 De berekende gegevens op het scherm tonen

De berekende gegevens kunnen nu weer op het scherm worden getoond. De wijze waarop dit kan staat reeds omschreven in paragraaf 4.1.3.

LITERATUUR

Brink, H. en G.H. Ekkers (1995) '*Handleiding TACC90 versie 1.2*'. Rapport SWS 95.505 Kiwa Onderzoek en Advies, Nieuwegein, mei 1995.

Eggen, G.J.P.M. (1997) '*AQUACALC VERSIE 2.0, SYSTEEMDOCUMENTATIE*'. Rapport SWS 97.509 Kiwa Onderzoek en Advies, Nieuwegein, juli 1997.

Hoven, Th.J.J. van den en M.W.M. van Eekeren (1988) '*Optimale samenstelling van drinkwater*'. Mededeling 100 Kiwa Onderzoek en Advies, oktober 1988.

Oosterhof, H. (1993) '*Modellering van ontharding in korrelreactoren*'. Rapport SWI 93.158 Kiwa Onderzoek en Advies, Nieuwegein, 1993.

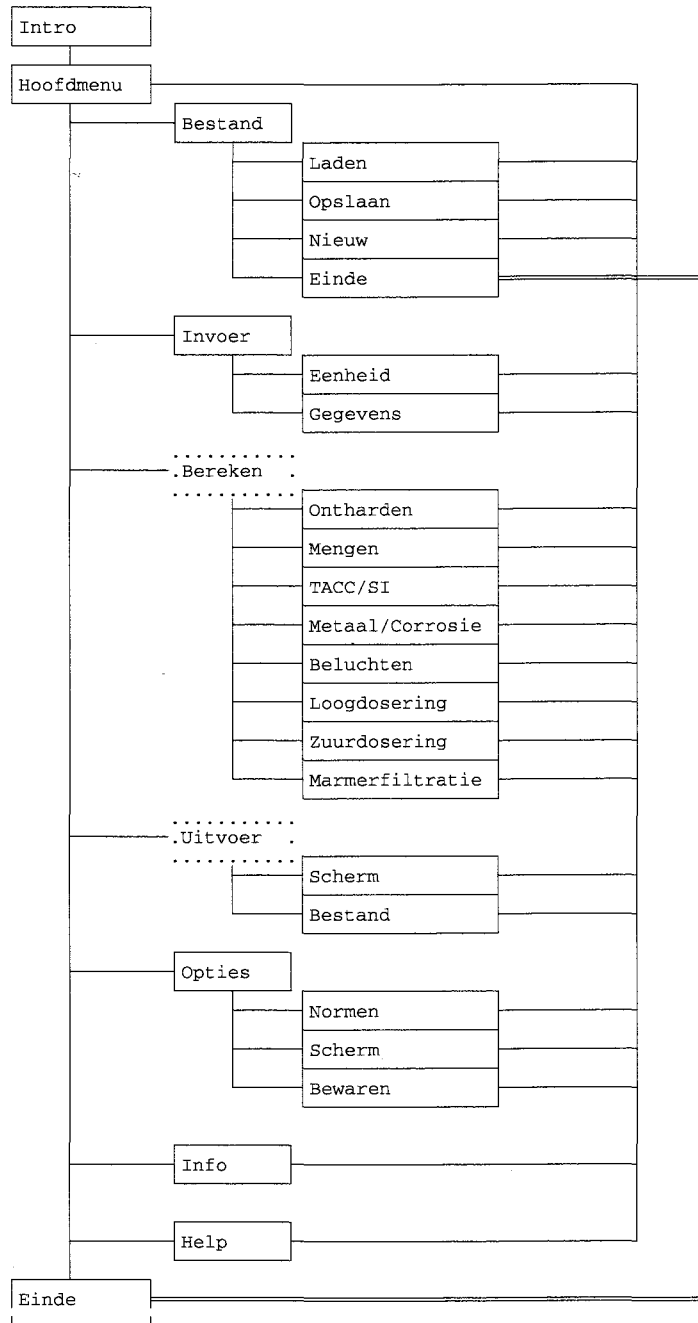
Press W.H., B.P. Flannery, S.A. Teukolsky en W.T. Vetterling (1986) '*Numerical Recipes*'.

BIJLAGE 1

De menustructuur van AQUACALC

Uit de menustructuur blijkt welke opties er in het programma AQUACALC mogelijk zijn, en vanuit het hoofdmenu geselecteerd kunnen worden. Hieronder staat de menustructuur afgebeeld.

Figuur 1 : menu-structuur



... = onmogelijk wanneer de optie *Invoer|Gegevens* of *Bestand|Laden* nog niet is gebruikt of wanneer de optie *Bestand|Nieuw* de laatst aangeroepen optie is.

De optie *Opties | Scherm* is ontoegankelijk wanneer een monochroom video-kaart wordt gebruikt

BIJLAGE 2

Bestandsformaten

Het formaat van het normenbestand

Het normenbestand is een ASCII-bestand. Hierdoor heeft de gebruiker de mogelijkheid zelf normenbestanden te maken. Het vereiste formaat staat hieronder vermeld. De eenheid voor de normen is mmol/l.

Ca	bovengrens
Ca	ondergrens
Mg	bovengrens
Mg	ondergrens
HCO3	bovengrens
HCO3	ondergrens
CO3	bovengrens
CO3	ondergrens
CO2	bovengrens
CO2	ondergrens
SO4	bovengrens
SO4	ondergrens
Na	bovengrens
Na	ondergrens
Cl	bovengrens
Cl	ondergrens
TAC	bovengrens
TAC	ondergrens
TH	bovengrens
TH	ondergrens
TACC	bovengrens
TACC	ondergrens
SI	bovengrens
SI	ondergrens
Ionsterkte	bovengrens
Ionsterkte	ondergrens
pH	bovengrens
pH	ondergrens
T	bovengrens
T	ondergrens
CuMax	bovengrens
CuMax	ondergrens
PbMax	bovengrens
PbMax	ondergrens
Cl	bovengrens
Cl	ondergrens

Bij Ca bovengrens wordt de waarde voor de bovengrens voor calcium ingevuld gevolgd door <Enter>. Bij Ca ondergrens wordt de ondergrens voor calcium ingevuld gevolgd door <Enter> etcetera. Wanneer een normwaarde onbekend is wordt aanbevolen om een hoge bovengrens en een lage ondergrens in te geven. Hierdoor wordt voor deze parameter geen normoverschrijding aangemerkt bij de uitvoer van een watersamenstelling. De extensie van de normbestanden is NRM. Het zelf gemaakte normenbestand moet in de directory worden geplaatst waar AQUACALC.EXE staat.

Het bestandsformaat van de gegevensbestanden

De gegevensbestanden zijn de bestanden waarin de watersamenstellingen worden opgeslagen. Deze bestanden zijn binaire bestanden, en dus voor de gebruiker buiten het programma om niet leesbaar in tegenstelling tot de normenbestanden en de uitvoerbestanden (printfiles).

De gegevensbestanden kunnen alleen met het programma AQUACALC worden gelezen of geschreven. De extensie van de gegevens bestanden is doorgaans DAT.

Het bestandsformaat van de uitvoerbestanden

De uitvoerbestanden zijn ASCII-bestanden. Het zijn de zogenaamde printfiles van het programma. In de printfiles kunnen één of meerdere records zijn opgeslagen. Hieronder staat een printfile waar één record in staat.

De printfiles zijn dus wel te lezen buiten het programma. De extensie van de printfiles is doorgaans PRN.

```

RECORD >1
TITEL >watertype
-----
PARAMETER    WAARDE    EENHEID    NORMOVERSCHRIJDING
-----
Ca            2.30      mmol/l     Nee
Mg            0.30      mmol/l     Nee
TH            2.60      mmol/l     Ja
TAC           3.73      mmol/l     Nee
HCO3          3.60      mmol/l     Nee
CO3           0.01      mmol/l     Nee
CO2           0.12      mmol/l     Nee
SO4           1.22      mmol/l     Nee
Na            2.30      mmol/l     Nee
Cl            2.11      mmol/l     Nee
Ionsterkte   10.36     mmol/l     Nee
pH            7.90      ---        Nee
Temperatuur  11.20     °C         Nee
=====

```

BIJLAGE 3

Foutmeldingen van het Kiwa-computerprogramma AQUACALC

In deze bijlage zijn de foutmeldingen opgenomen die het programma AQUACALC kan genereren. Onder elke foutmelding staat kort omschreven wat een mogelijke oorzaak van de foutmelding kan zijn. De foutmeldingen zijn opgedeeld in drie categorieën:

- **Input/Output foutmeldingen**
Onder de Input/Output foutmeldingen vallen alle foutmeldingen van handelingen die te maken hebben met het lezen en schrijven van gegevens naar schijf of randapparatuur.
- **Invoer restricties**
De foutmeldingen van de Invoer restricties zijn meldingen die gegeven worden wanneer de gebruiker ongeldige invoer geeft.
- **Chemische restricties**
De foutmeldingen met betrekking tot chemische restricties zijn meldingen die gegeven worden wanneer de gebruiker een chemisch onmogelijke situatie verlangt, of wanneer een chemisch onmogelijke situatie tijdens een berekening optreedt. Wanneer een foutmelding wordt gegeven bij een berekening dan worden de gegevens die berekend moeten worden niet toegevoegd aan de huidige gegevens.

De foutmeldingen worden omschreven voor elke menu-optie waarbij ze kunnen voorkomen.

3.1 Input/Output foutmeldingen

Submenu-optie Bestand|Laden

Onjuist bestand

Er is geprobeerd een verkeerd type bestand in te laden.

Disk in drive .. not ready Enter RETRY Esc CANCEL

De diskette in station .. (afhankelijk van het station) kan niet worden gelezen. Met <Enter> wordt nogmaals geprobeerd om van het station te lezen, met <Esc> wordt de bewerking geannuleerd.

Submenu-optie Bestand|Opslaan

Disk is write-protected in drive .. Enter RETRY Esc CANCEL

De diskette in drive .. (afhankelijk van het station) is beschermd tegen overschrijving. Met <Enter> wordt nogmaals geprobeerd om naar het station te schrijven, met <Esc> wordt de bewerking geannuleerd.

Kan niet naar bestand schrijven

Deze melding wordt gegeneerd wanneer geprobeerd is een bestand te overschrijven dat beschermd is tegen overschrijving. Kies een ander bestand of maakt het betreffende bestand overschrijfbaar (bijvoorbeeld met het DOS-commando ATTRIB: attrib BESTANDSNAAM.EXT -r).

Disk in drive .. not ready Enter RETRY Esc CANCEL

Naar de diskette in station .. (afhankelijk van het station) kan niet geschreven worden. Met <Enter> wordt nogmaals geprobeerd om naar het station te schrijven, met <Esc> wordt de bewerking geannuleerd.

Invalid file name

Deze melding verschijnt wanneer een station wordt aangesproken dat niet bestaat.

Submenu-optie Uitvoer\Bestand

Disk is write-protected in drive .. Enter RETRY Esc CANCEL

De diskette in drive .. (afhankelijk van het station) is beschermd tegen overschrijving. Met <Enter> wordt nogmaals geprobeerd om naar het station te schrijven, met <Esc> wordt de bewerking geannuleerd.

Fout bij maken uitvoerfile

Deze foutmelding treedt op wanneer er al een bestand met dezelfde naam bestaat en dit bestand beschermd is tegen overschrijven en er bovendien al een bestand met de extensie BK met dezelfde bestandsnaam bestaat. Kies een ander bestand of maakt het betreffende bestand overschrijfbaar.

Disk in drive .. not ready Enter RETRY Esc CANCEL

Naar de diskette in station .. (afhankelijk van het station) kan niet worden geschreven. Met <Enter> wordt nogmaals geprobeerd om naar het station te schrijven en met <Esc> wordt de bewerking geannuleerd.

Invalid file name

Deze melding verschijnt wanneer een station wordt aangesproken dat niet bestaat.

Menu-optie Help

De hier omschreven foutmeldingen gelden voor alle help-opties.

In het scherm voor de helptekst verschijnt de melding:

*****Fout*** : helpbestand niet gevonden**

Het help bestand kan niet worden geopend. Controleer of de helpbestanden staan in de directory waar AQUACALC.EXE staat.

Disk in drive .. not ready Enter RETRY Esc CANCEL

De diskette in station .. (afhankelijk van het station) kan niet worden gelezen. Met <Enter> wordt nogmaals geprobeerd om van het station te lezen, met <Esc> wordt de bewerking geannuleerd.

Submenu-optie Opties|Bewaren

Fout bij schrijven naar initialisatie bestand

Deze foutmelding verschijnt wanneer ervoor gekozen is de instellingen op te slaan. Het programma is niet in staat te schrijven naar het initialisatie bestand. Controleer of de diskette waar AQUACALC.EXE op staat beschermd tegen schrijven is. Als dit het geval is maak deze dan onbeschermd tegen schrijven. Controleer ook of het initialisatie bestand (AQUACALC.INI) geen schrijfbeveiliging heeft, bijvoorbeeld met het DOS-commando ATTRIB. Met attrib BESTANDSNAAM.EXT -r wordt de schrijfbeveiliging verwijderd.

Disk in drive .. not ready Enter RETRY Esc CANCEL

De diskette in station .. (afhankelijk van het station) kan niet worden gelezen. Met <Enter> wordt nogmaals geprobeerd om van het station te lezen, met <Esc> wordt de bewerking geannuleerd.

3.2 Invoer restricties

Het maximaal aantal records is bereikt, invoer onmogelijk

Het maximaal aantal records (100) is reeds gevuld met watersamenstellingen. Sla de gegevens op en wis met de optie Bestand\Nieuw de gegevens in de records.

Parameter niet goed ingevoerd of parameter niet tussen ...(min) en ...(max)

Deze foutmelding treedt op wanneer een parameter niet goed is ingevoerd, bijvoorbeeld 0..3, of wanneer een parameter buiten de invoergrenzen (min, max) voor de parameter valt. De invoergrenzen zijn hieronder opgesomd.

Tabel 2 Grenzen waaraan de parameters moeten voldoen

parameter	ondergrens		bovengrens	
Ca ²⁺	0.25	mmol/l	100	mmol/l
Mg ²⁺	0.0	mmol/l	100	mmol/l
HCO ₃ ⁻	0.25	mmol/l	1000	mmol/l
Na ⁺	0	mmol/l	1000	mmol/l
SO ₄ ²⁻	0	mmol/l	1000	mmol/l
Cl ⁻	0	mmol/l	1000	mmol/l
Ionsterkte	0.25	mmol/l	200	mmol/l
Temperatuur	0	°C	90	°C
pH	0		14	
Eisen aan de parameters voor de berekening van de TACC en SI en voor de marmerfiltratie. De onderstaande eisen gelden ook voor de bewerkingen loog- en zuurdsoering wanneer bij het veld sturen op SI is gekozen.				
Ca ²⁺	0.25	mmol/l	10	mmol/l
HCO ₃ ⁻	0.25	mmol/l	15	mmol/l
Ionsterkte	1.65	mmol/l	145	mmol/l
Temperatuur	0	°C	90	°C
pH	7		11	

Wanneer een parameter buiten de invoergrenzen ligt wordt aangegeven om welke parameter het gaat doordat de cursor op de waarde van deze parameter staat.

3.3 Chemische restricties

Submenu-optie Invoer\Gegevens

Ionsterkte komt niet overeen met de ingegeven watersamenstelling

De ionsterkte die is ingegeven is te klein om bij de ingegeven watersamenstelling te horen.

Submenu-optie Bereken\Ontharden

Totale hardheid na ontharden ongeldig, controleer invoer

De ingegeven totale hardheid na ontharden is groter dan de totale hardheid voor ontharden, of de totale hardheidsverandering is groter dan de totale hoeveelheid TAC aanwezig in het water of de totale hardheidsverandering is groter dan de totale hoeveelheid Ca^{2+} in het water.

Er is een rekenfout opgetreden

De berekening voor de ontharding convergeerde niet.

Submenu-optie Bereken\Mengen

Er is een rekenfout opgetreden, gegevens van de berekening zijn ongeldig

De berekening van de menging van twee watertypes convergeerde niet.

Submenu-optie Bereken\TACC/SI

Ca concentratie buiten het bereik voor de TACC berekening

De concentratie Ca^{2+} in de watersamenstelling waarvan de TACC en SI moet worden berekend valt niet binnen de grenzen voor de TACC en SI berekening (zie tabel 1).

HCO₃ concentratie buiten het bereik voor de TACC berekening

De concentratie HCO_3^- in de watersamenstelling waarvan de TACC en SI moet worden berekend valt niet binnen de grenzen voor de TACC en SI berekening (zie tabel 1).

Ionsterkte buiten het bereik voor de TACC berekening

De ionsterkte van de watersamenstelling waarvan de TACC en SI moet worden berekend valt niet binnen de grenzen voor de TACC en SI berekening (zie tabel 1).

Temperatuur buiten het bereik voor de TACC berekening

De temperatuur van de watersamenstelling waarvan de TACC en SI moet worden berekend valt niet binnen de grenzen voor de TACC en SI berekening (zie tabel 1).

pH buiten het bereik voor de TACC berekening

De pH van de watersamenstelling waarvan de TACC en SI moet worden berekend valt niet binnen de grenzen voor de TACC en SI berekening (zie tabel 1).

Er is een rekenfout opgetreden

De berekening van de TACC en SI convergeerde niet.

Submenu-optie Bereken/Beluchten

Er is een rekenfout opgetreden, gegevens van de berekening zijn ongeldig

De berekening van de beluchting convergeerde niet.

Submenu-optie Bereken/Loogdosering

Er is een rekenfout opgetreden, gegevens van de berekening zijn ongeldig

De berekening van de loogdosering convergeerde niet.

Wanneer bij het veld sturen op SI is gekozen SI kunnen dezelfde foutmeldingen optreden als vermeld onder TACC/SI.

Submenu-optie Bereken/Zuurdosering

Er is een rekenfout opgetreden, gegevens van de berekening zijn ongeldig

De berekening van de zuurdosering convergeerde niet.

Wanneer bij het veld sturen op SI is gekozen SI kunnen dezelfde foutmeldingen optreden als vermeld onder TACC/SI.

Submenu-optie Bereken/Marmerfiltratie

Er is een rekenfout opgetreden, gegevens van de berekening zijn ongeldig

De berekening van de marmerfiltratie convergeerde niet.

Bij deze bewerking kunnen dezelfde foutmeldingen optreden als vermeld onder TACC/SI.

BIJLAGE 4

Theoretische achtergronden

4.1 Inleiding

Alle berekeningen die in het programma zijn opgenomen, zijn gebaseerd op het kalk-koolzuurevenwicht. In deze bijlage wordt een beknopte toelichting bij deze berekeningen gegeven.

Voor de theorie achter de berekening van de TACC en SI wordt verwezen naar de gebruikershandleiding van TACC90 : Brink, H. en G.H. Ekkers (1995) '*Handleiding TACC90 versie 1.2*', Rapport SWS 95.505 Kiwa Onderzoek en Advies, Nieuwegein, mei 1995.

Voor de theorie achter de berekening van het koper- en loodoplossend vermogen evenals voor de berekening van de corrosie index wordt verwezen naar Kiwa mededeling 100 : Hoven, Th.J.J. van den en M.W.M. van Eekeren(1988), '*Optimale samenstelling van drinkwater*', Mededeling 100 Kiwa Onderzoek en Advies, Nieuwegein, oktober 1988.

4.2 Het kalk-koolzuurevenwicht

Het kalk-koolzuurevenwicht wordt in het programma omschreven middels de onderstaande parameters.

Ionsterkte
 Ca^{2+}
 CO_3^{2-}
 HCO_3^-
 CO_2
pH

De reactie-vergelijkingen waarop de berekeningen in het programma gebaseerd zijn staan vermeld in het onderstaande deel.

De reacties die het kalk-koolzuurevenwicht beschrijven zijn :

Reactie	Evenwichtsconstante
$\text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HCO}_3^- + \text{H}_3\text{O}^+$	K1
$\text{HCO}_3^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO}_3^{2-} + \text{H}_3\text{O}^+$	K2
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} \rightleftharpoons \text{CaCO}_3(s)$	Ks
$2\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{H}_3\text{O}^+$	Kw

De evenwichtsconstanten zijn als volgt gedefinieerd.

$$K1 = \frac{(\text{HCO}_3^-) * (\text{H}_3\text{O}^+)}{(\text{CO}_2)}$$

$$K2 = \frac{(\text{CO}_3^{2-}) * (\text{H}_3\text{O}^+)}{(\text{HCO}_3^-)}$$

$$Ks = (\text{Ca}^{2+}) * (\text{CO}_3^{2-})$$

$$Kw = (\text{OH}^-) * (\text{H}_3\text{O}^+)$$

In de bovengenoemde definities van de evenwichtsconstanten worden activiteiten gebruikt. De omrekening van concentraties naar activiteiten vindt plaats door de concentraties te vermenigvuldigen met de activiteitscoëfficiënt.

De activiteitscoëfficiënt is vastgelegd door de formule :

$$\log (f_i) = -0.5 * z_i^2 * \left(\frac{\sqrt{I}}{1 + \sqrt{I}} - 0.3 I \right)$$

hierin is :

z_i = valentie van het ion

I = ionsterkte [mol/l]

Deze formule is de Davies uitgebreide vorm van de uitgebreide Debye-Hückel vergelijking. Deze formule is geldig voor kleine ionen tot een ionsterkte van 500 mmol/l.

De ionsterkte in deze formule wordt berekend met de :

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

hierin is :

I = ionsterkte [mol/l]

$[i]$ = concentratie van het ion [mol/l]

z_i = de valentie van het ion

De waarden van de evenwichtsconstanten die worden gebruikt, worden berekend volgens de relaties die vastgelegd zijn door Plummer en Busenberg (1982).

$$\log K1 = -356.3094 - 0.06091964 * T + 21834.37 / T + 126.8339 * \text{LOG}(T) - 1684915 / (T * T)$$

$$\log K2 = -107.8871 - 0.03252849 * T + 5151.79 / T + 38.92561 * \text{LOG}(T) - 563713.9 / (T * T)$$

$$\log Kw = 22.801 - 0.010365 * T - 4787.3 / T - 7.1321 * \text{LOG}(T)$$

$$\log Ks = -171.9065 - 0.077993 * T + 2839.319 / T + 71.595 * \text{LOG}(T)$$

Bij de berekeningen worden verder nog twee massabalansen gebruikt, te weten voor het totaal anorgansich koolstof gehalte (TAC) en voor de alkaliniteit (m-getal).

$$\text{TAC} = [\text{CO}_2] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}]$$

$$\text{m-getal} = 2 * [\text{CO}_3^{2-}] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{OH}^-] - [\text{H}_3\text{O}^+]$$

4.3 Berekeningssystematiek

Het kalk-koolzuureveniwcht, zoals omschreven, kent 8 componenten, te weten H_2O , H_3O^+ , OH^- , CO_2 , HCO_3^- , CO_3^{2-} , Ca^{2+} en $\text{CaCO}_3(s)$.

De activiteit van water is in verdunde waterige oplossingen per definitie 1 zodat 7 onbekenden overblijven. Er zijn 4 evenwichtsvergelijkingen zodat 3 (7-4) componenten gegeven dienen te worden om het systeem te beschrijven. Daarnaast moeten de temperatuur en de ionsterkte gegeven worden.

In het programma is ervoor gekozen om de volgende drie componenten te gebruiken als invoer :

- het totale calcium gehalte
- het totale HCO_3^- gehalte
- de pH

Er is gekozen om deze gegevens als invoer te gebruiken omdat deze veelvuldig en door veel waterleiding bedrijven worden gemeten.

Zijn deze gegevens bekend dan kan elke andere component berekend worden. In de berekeningen staan de massabalansen centraal.

Uit de ingevoerde gegevens worden het m-getal en het TAC berekend. De invloed van een processtap op het kalk-koolzuureveniwcht wordt beschreven door de invloed van deze processtap op het m-getal en op het TAC en het totaal calcium gehalte. Als de invloed op deze drie parameters bekend is dan kunnen de andere componenten, en daarmee de ligging van het kalk-koolzuureveniwcht, worden bepaald.