

NN31545.1929

ICW Nota 1929  
januari 1989

A



nota

instituut voor cultuurtechniek en waterhuishouding, wageningen

EEN LOTUS-123 PROGRAMMA VOOR DE CONTROLE VAN DE ANALYSES  
VAN MACRO-COMPONENTEN IN WATER M.B.V. DE IONENBALANS EN  
HET ELECTRISCH GELEIDINGSVERMOGEN

P. Bakkers

**WAARSCHUWING !**

Net als in de meeste software, zullen in dit programma veranderingen worden doorgevoerd. Het is daarom alleen toegestaan dit programma te gebruiken nadat U zich op de hoogte heeft gesteld van eventuele wijzigingen. De meest recente versie van de handleiding is verkrijgbaar bij de auteur.

Nota's van het Instituut zijn in principe interne communicatiemiddelen, dus geen officiële publikaties.

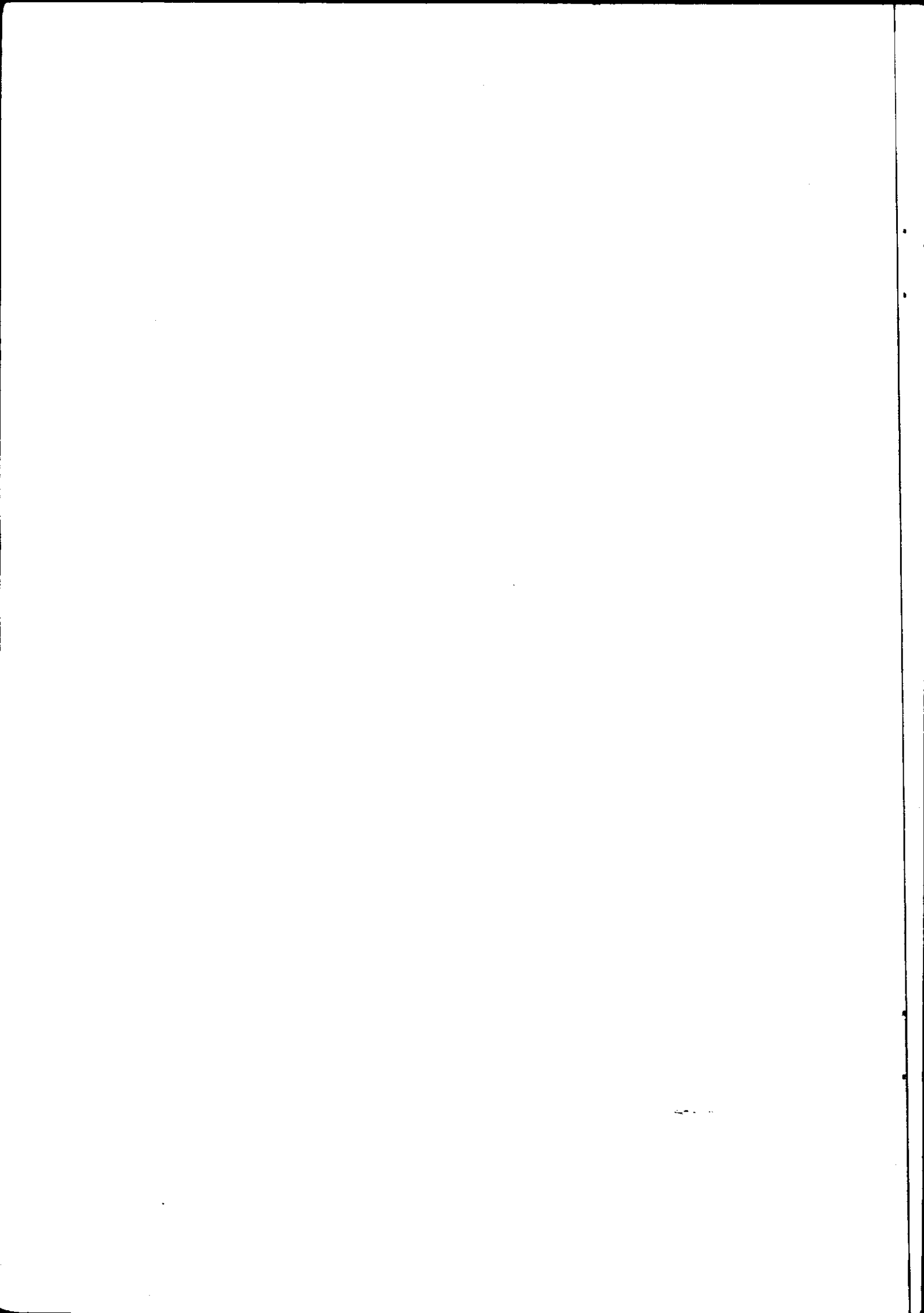
Hun inhoud varieert sterk en kan zowel betrekking hebben op een eenvoudige weergave van cijferreeksen, als op een concluderende discussie van onderzoeksresultaten. In de meeste gevallen zullen de conclusies echter van voorlopige aard zijn omdat het onderzoek nog niet is afgesloten.

Bepaalde nota's komen niet voor verspreiding buiten het Instituut in aanmerking

1 JUNI 1989

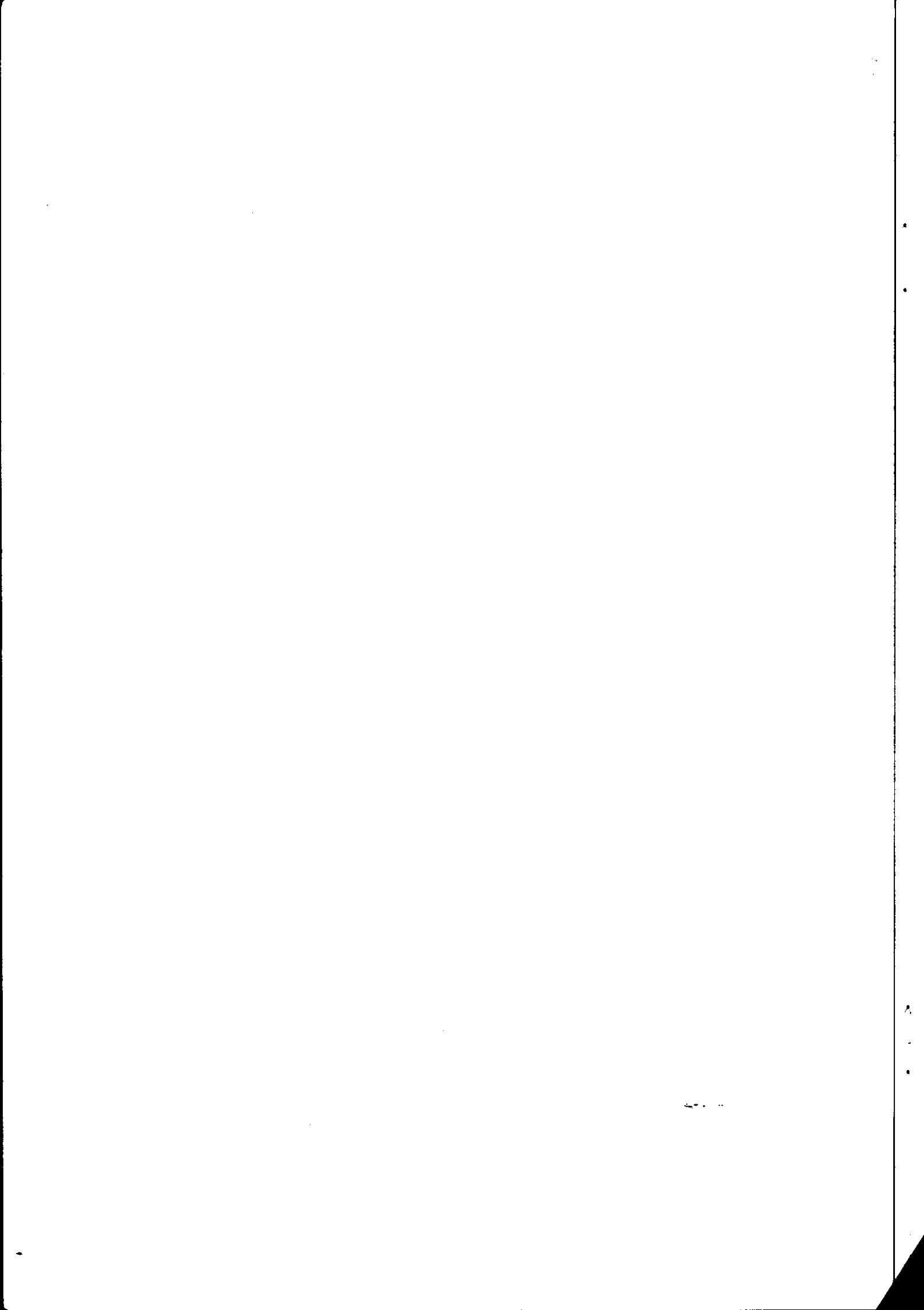


JSH 276 342 \*



## I N H O U D

	pag.
INLEIDING	1
1. INVOERFILE	2
2. BEREKENINGEN	3
2.1. Omrekenen van mg/l naar meq/l	3
2.2. Ionsterkte	4
2.3. Activiteitscoëfficiënt	5
2.4. Bicarbonaat en carbonaat	6
2.4.1. Berekenen richtwaarde	6
2.4.2. Berekening dissociatieconstanten	8
2.4.3. Berekening bicarbonaat en carbonaat	9
2.5. Berekening anionenbalans	10
2.6. Berekening kationenbalans	10
2.7. Verhouding anionen gedeeld door kationen	10
2.8. Berekening van de Ec	11
3. INDELING WORKSHEET LOTUS-123	13
3.1. Invoerfile	13
3.2. Berekeningfile	14
4. INVOER EN BEREKENINGEN	18
5. MACRO	19
5.1. Macro in LOTUS-123	19
5.2. Verklaring van macro in LOTUS-123	20
6. LITERATUUR	23
7. BIJLAGEN	24



## INLEIDING

Voor het Waterkwaliteitsonderzoek worden diverse parameters gemeten. Het is van belang dat deze parameters juist worden gemeten. Dit wordt gehouden. Als het gaat om de macroparameters  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$  en  $\text{Al}^{3+}$  zijn er nog 2 extra controlemogelijkheden. De eerste is de ionenbalans, hetgeen betekent dat de som van de kationen (in meq/l) en de som van de anionen (in meq/l) gelijk moeten zijn. Bij de tweede controlemogelijkheid wordt vanuit de metingen de geleidbaarheid berekend en vergeleken met de gemeten geleidbaarheid. Indien beide controles voldoen aan de vereiste criteria, dan is er een grote zekerheid dat de analyses juist zijn verricht. Voldoet een van de beide controles niet aan de criteria dan kan er een fout zitten in een of meer van de metingen, of is er iets aan de hand met het monster.

De ionenbalans is gemaakt in Lotus-123 omdat dit gemakkelijk te bedienen is voor iedereen. Tevens is in Lotus-123 het gebruik van Macro's mogelijk, deze macro's vereenvoudigen het werken met Lotus-123. Er zijn twee file's gemaakt omdat het invoeren van gegevens in een file waarin nogal wat formules staan en berekeningen uitgevoerd moeten worden veel te veel tijd vergen (nutteloze tijd). Het maken van een file dat hetzelfde is als het eerste gedeelte van het berekeningen file is dit probleem opgelost. De twee file's zijn:

1. Een berekeningen file (Berekening.wk1)

In het berekeningen file staan diverse formules voor de diverse berekeningen, bv. Ec, Bicarbonaat etc. Tevens bevinden zich hier de formules voor diverse omrekeningen. (van mg/l naar meq/l)

2- Een invoerfile (Invoer.wk1)

In dit file worden de gemeten resultaten ingevoerd in mg/l, behalve pH en Ec.

De nota is zodanig opgezet dat in elk hoofdstuk eerst de achtergrond wordt beschreven en welke berekeningsformules worden gebruikt. Het tweede deel van het hoofdstuk geeft weer hoe de formules in het LOTUS programma staan.

## 1. INVOERFILE

De invoerfile is een standaardfile waar de volgende gegevens ingevoerd moeten worden. Dit kan in een keer maar mag ook in gedeelten gebeuren (zie bijlage 1 en 2). Dit invoeren in gedeelten gaat als volgt: Na iedere metingen kunnen de gegevens ingevoerd worden in het worksheet invoer.wk1. Na iedere invoer van aanvullende gegevens wordt het worksheet "gesaved" (bewaard) onder dezelfde naam bv. juli.wk1. Als dit wordt gedaan vraagt LOTUS-123 Cancel/Replace met Cancel wordt het commando "save" teniet gedaan. Met het Replace wordt datgene wat er het laatst is ingevoerd opgeslagen bij datgene wat al in het worksheet aanwezig was.

---

1-Monsternummer	9-IC (Inorganic Carbon)
2-Datum	10-Fosfaat ( $\text{PO}_4^{3-}$ )
3-TOC(Total Organic Carbon)	11-Natrium ( $\text{Na}^+$ )
4-pH	12-Kalium ( $\text{K}^+$ )
5-Ec	13-Calcium ( $\text{Ca}^{2+}$ )
6-Chloride ( $\text{Cl}^-$ )	14-Magnesium ( $\text{Mg}^{2+}$ )
7-Nitraat ( $\text{NO}_3^-$ )	15-IJzer ( $\text{Fe}^{3+}$ )
8-Sulfaat ( $\text{SO}_4^{2-}$ )	16-Mangaan ( $\text{Mn}^{2+}$ )

---

Alle concentraties vanaf bovenvermeld nummer 6 plus nummer 3 worden gevraagd in mg/l (ppm). De Ec wordt gevraagd in  $\mu\text{s}/\text{m}$  bij 20°C.

Het invoeren gaat in 3 gedeelten, namelijk:

Algemeen: hieronder wordt verstaan monsternummer, datum, TOC, pH, en Ec.

Anionen : hieronder wordt verstaan alle anionen die gemeten zijn.

Kationen: hieronder wordt verstaan alle kationen die gemeten zijn.

Dit invoerfile is hetzelfde als het begin van de berekenfile.

Zodoende kunnen deze twee zonder moeite over elkaar heen geschreven worden.

## 2. BEREKENINGEN

### 2.1. HET OMREKENEN VAN MG/L NAAR MEQ/L

Voor de ionenbalans en de berekende Ec waarde moeten de waarden worden omgezet in mili equivalenten.

bv.  $[x]/10$  is de concentratie van element/stof x in mg/l gedeeld door 10 (dit is de molmassa van element/stof x). En dat geeft de concentratie van element/stof x in meq/l.

$$[\text{NH}_4^+] / 18 \quad (1)$$

$$[\text{Na}^+] / 23 \quad (2)$$

$$[\text{Ca}^{2+}] / 20 \quad (3)$$

$$[\text{Mg}^{2+}] / 12.15 \quad (4)$$

$$[\text{Cl}^-] / 35.45 \quad (5)$$

$$[\text{NO}_3^-] / 62 \quad (6)$$

$$[\text{SO}_4^{2-}] / 48 \quad (7)$$

$$[\text{PO}_4^{3-}] / 31.67 \quad (8)$$

$$[\text{Fe}^{3+}] / 18.62 \quad (9)$$

$$[\text{HCO}_3^-] / 61 \quad (10)$$

$$[\text{CO}_3^{2-}] / 30$$

Hoe  $[\text{HCO}_3^-]$  en  $[\text{CO}_3^{2-}]$  zijn berekend met behulp van de ionengegevens IC en pH staat beschreven in hoofdstuk 2.4. (11)

$$[\text{H}^+] = 10 \text{ tot de macht } - \text{pH} \quad (10^{-\text{pH}}) \quad (12)$$

$$[\text{Mn}^{2+}] / 27.48 \quad (13)$$

## HET OMREKENEN VAN MG/L NAAR MEQ/L IN LOTUS-123.

[T..] / 18	(1A)
[N..] / 23	(2A)
[P..] / 20	(3A)
[Q..] / 12.15	(4A)
[H..] / 35.45	(5A)
[I..] / 62	(6A)
[L..] / 48	(7A)
[K..] / 31.67	(8A)
[R..] / 18.62	(9A)
[X..] / 61	(10A)
[Z..] / 30	

Hoe  $[\text{HCO}_3^-]$  en  $[\text{CO}_3^{2-}]$  zijn berekend met behulp van de ionengegevens IC en pH staat beschreven in hoofdstuk 2.4. (11A)

[BK..] = 10 tot de macht - pH ( $10^{-\text{pH}}$ ) (12A)

[U..] / 27.48 (13A)

## 2.2. IONSTERKTE

De ionsterkte is een gegeven dat voor diverse berekeningen nodig is. Met name is de ionsterkte van belang voor de activiteitscoëfficiënt en voor het uitrekenen van twee constanten (voor het berekenen van de concentratie  $\text{HCO}_3^-$  en  $\text{CO}_3^{2-}$ . Zie ook bijlage 4, tabel 6.

De concentraties van de betreffende stoffen/ionen moet in mmol/l gegeven worden.

De algemene formule luidt als volgt:

$$I = 0.5 * \Sigma * X_i * Z_i^2 \quad (14)$$

[x] = concentratie van element/stof x in meq/l

$L^2$  = lading in het kwadraat.



$$\begin{aligned}
 & ([\text{Na}^+] * L^2 + [\text{K}^+] * L^2 + [\text{Ca}^{2+}] * L^2 + [\text{Mg}^{2+}] * L^2 + \\
 & [\text{Fe}^{3+}] * L^2 + [\text{Al}^{3+}] * L^2 + [\text{NH}_4^+] * L^2 + [\text{Cl}^-] * \\
 & L^2 + [\text{NO}_3^-] * L^2 + [\text{SO}_4^{2-}] * L^2 + [\text{HCO}_3^-] * L^2 + \\
 & [\text{CO}_3^{2-}] * L^2) \text{ en het geheel maal } 0.5 \qquad (15)
 \end{aligned}$$

Een probleem bij het berekenen van de ionsterkte is dat de concentraties van  $[\text{HCO}_3^-]$  en  $[\text{CO}_3^{2-}]$  eerst nog moeten worden berekend. Voor het berekenen hiervan is echter weer de ionsterkte nodig. Hoe dit is opgelost is beschreven in hoofdstuk 2.4.

#### IONSTERKTE IN LOTUS-123

$$\begin{aligned}
 @SUM( & ([\text{AF}..] * 1) + ([\text{AG}..] * 1) + ([\text{AH}..] * 4) + \\
 & ([\text{AI}..] * 4) + ([\text{AJ}..] * 9) + ([\text{AK}..] * 9) \\
 & + ([\text{AL}..] * 1) + ([\text{AB}..] * 1) + ([\text{AC}..] * 1) \\
 & + ([\text{AD}..] * 4) + ([\text{AU}..] * 1) + ([\text{AX}..] * 4) ) * 0.5 \qquad (15A)
 \end{aligned}$$

#### 2.3. ACTIVITEITSCOËFFICIËNT

Afhankelijk van de waardigheid van het ion speelt er ook nog een activiteitscoëfficiënt mee, dit in verband met het berekenen van de Ec. (zie punt 1) Voor een duidelijk overzicht zie bijlage 4, tabel 6.

$$A = 10^{-\frac{0.5 * L^2 * \sqrt{(I/1000)^1}}{1 + \sqrt{(I/1000)^1}}} \qquad (16)$$

A = activiteitscoëfficiënt.

$L^2$  = lading van het ion in het kwadraat.

I = ionsterkte (staat in hfdst. 2.4 beschreven)

## ACTIVITEITSCOËFFICIËNT IN LOTUS-123

Voor A1 (lading = 1) ziet het er als volgt uit:

$$\frac{\textcircled{S}UM(10^{-((0.5 * 1 * (AY.. /1000) ^ 0.5 ))})}{(1 + ((AY.. /1000) ^ 0.5))} \quad (16A)$$

Voor A2 (lading = 2) ziet het er als volgt uit:

$$\frac{\textcircled{S}UM(10^{-((0.5 * 4 * (AY.. /1000) ^ 0.5 ))})}{(1 + ((AY.. /1000) ^ 0.5))} \quad (16B)$$

Voor A3 (lading = 3) ziet het er als volgt uit:

$$\frac{\textcircled{S}UM(10^{-((0.5 * 9 * (AY.. /1000) ^ 0.5 ))})}{(1 + ((AY.. /1000) ^ 0.5))} \quad (16C)$$

## 2.4. BICARBONAAT EN CARBONAAT

Daar de ionenbalans nog niet compleet is, moeten  $\text{HCO}_3^-$  en  $\text{CO}_3^{2-}$  nog worden uitgerekend. (zie bijlage 4, tabel 6) Deze berekening is, zoals vermeld, ook nodig omdat de ionsterkte uitgerekend moet worden. Voor het uitrekenen van de de ionsterkte moeten alle concentraties van alle ionen bekend zijn. Maar daar voor het uitrekenen  $\text{HCO}_3^-$  en  $\text{CO}_3^{2-}$  ook de ionsterkte nodig is, moet in eerste instantie een richtwaarde voor deze beide concentraties berekend worden. En dit gaat als volgt:

## 2.4.1. Berekening richtwaarde

Er zijn 2 constanten die tellen in de berekingsformule van beide stoffen namelijk K1 en K2. Voor het berekenen van de richtconcentratie van  $\text{HCO}_3^-$  en  $\text{CO}_3^{2-}$  stellen we deze constanten:

$$K_1 = 4.15 * 10^{-7}$$

$$K_2 = 4.2 * 10^{-11}$$

Deze 2 waarden worden dan ingevuld in de volgende formules:

$$[\text{HCO}_3^-] = \frac{K_1 * 10^{-\text{pH}}}{K_1 * K_2 + K_1 * 10^{-\text{pH}} + (10^{-\text{pH}})^2} * ([\text{IC}] * 61/12) \quad (17)$$

$$[\text{CO}_3^{2-}] = \frac{K_1 * K_2}{K_1 * K_2 + K_1 * 10^{-\text{pH}} + (10^{-\text{pH}})^2} * ([\text{IC}] * 61/12) \quad (18)$$

Deze twee formules zijn afkomstig uit NEN 6532.

De richtwaarden zijn gebruikt voor de berekening van de ionsterkte. Aangezien de uiteindelijke waarden van de bicarbonaat en carbonaat concentraties niet meer dan enkele procenten kan afwijken, is de fout in de aldus berekende ionsterkte verwaarloosbaar. Er is daarom ook niet voor een iteratief proces gekozen.

#### BICARBONAAT EN CARBONAAT IN LOTUS-123.

Voor  $\text{HCO}_3^-$  ziet de formule in LOTUS-123 er als volgt uit:

$$\text{@SUM}((( 4.15 * (10 ^ -7)) * \text{BK..} ) /$$

$$((( 4.15 * (10 ^ -7)) * ( 4.2 * ( 10 ^ -11))) +$$

$$(( 4.15 * ( 10 ^ -7)) * \text{BK..} ) +$$

$$((\text{BK..} ) ^ 2 ))) * ( \text{J..} * ( 61 / 12 ) \quad (17A)$$

Voor  $\text{CO}_3^{2-}$  ziet de formule er zo uit:

$$\begin{aligned} & @SUM((( 4.15 * (10 ^ -7)) * ( 4.2 * ( 10 ^ -11)))/ \\ & ((( 4.15 * (10 ^ -7)) * ( 4.2 * ( 10 ^ -11)) + \\ & (( 4.15 * (10 ^ -7)) * BK.. ) + \\ & (( BK.. ) ^ 2 ))) * ( J.. * ( 61 / 12 ) \end{aligned} \quad (18A)$$

#### 2.4.2. Berekening dissociatieconstanten

Met behulp van de tabellen in NEN 6532 Waarden van  $K_1$  en  $K_2$  bij verschillende temperaturen en ionsterkte is een functie berekend voor de waarden van  $K_1$  en  $K_2$  bij verschillende ionsterkte en een temperatuur van  $20^\circ\text{C}$  (zie bijlage 5, tabel 7). De functies gelden voor ionsterkten van 0 tot 20 mmol/l.

[I] = ionsterkte

$$K_1 = 3.768 * 10^{-6} * [I]^3 - 7.053 * 10^{-4} * [I]^2 + 3.85 * 10^{-2} * [I] + 4.251 \quad (19)$$

$$K_2 = 1.935 * 10^{-5} * [I]^3 - 3.297 * 10^{-3} * [I]^2 + 1.534 * 10^{-1} * [I] + 4.424 \quad (20)$$

#### FUNCTIE K1 EN K2 IN LOTUS-123

$K_1$

$$@SUM(((3.768 * (10 ^ -6)) * ((AX..) ^ 3)) - (( 7.053 * (10 ^ -4) * ((AX..) ^ 2)) + (((3.85 * (10 ^ -2)) * AX..) + 4.251) \quad (19A)$$

$K_2$

$$@SUM(((1.935 * (10 ^ -5)) * ((AX..) ^ 3)) - (( 3.297 * (10 ^ -3) * ((AX..) ^ 2)) + (((1.534 * (10 ^ -1)) * AX..) + 4.424) \quad (20A)$$

## 2.4.3. Berekening bicarbonaat en carbonaat

Met behulp van de richtwaarde voor de bicarbonaat en carbonaat kan er dus de ionsterkte uitgerekend worden. Met behulp van deze ionsterkte kunnen de dissociatieconstanten uitgerekend worden. Deze 2 waarden worden dan ingevuld in de volgende formules:

$$[\text{HCO}_3^-] = \frac{K_1 * 10^{-\text{pH}}}{K_1 * K_2 + K_1 * 10^{-\text{pH}} + (10^{-\text{pH}})^2} * ([\text{IC}] * 61/12) \quad (21)$$

$$[\text{CO}_3^{2-}] = \frac{K_1 * K_2}{K_1 * K_2 + K_1 * 10^{-\text{pH}} + (10^{-\text{pH}})^2} * ([\text{IC}] * 61/12) \quad (22)$$

Deze twee formules zijn afkomstig uit NEN 6532.

## BICARBONAAT EN CARBONAAT IN LOTUS-123

Voor  $\text{HCO}_3^-$  ziet de formule in LOTUS-123 er als volgt uit:

$$\begin{aligned} & @SUM((( BC.. * (10 ^ -7)) * BK.. ) / \\ & ((( BC.. * (10 ^ -7)) * ( BG.. * (10 ^ -11))) + \\ & (( BC.. * (10 ^ -7)) * BK.. ) + \\ & ((BK.. ) ^ 2 ))) * ( J.. * ( 61 / 12 ) \end{aligned} \quad (21A)$$

Voor  $\text{CO}_3^{2-}$  ziet de formule er zo uit:

$$\begin{aligned} & @SUM((( BC.. * (10 ^ -7)) * ( BG.. * (10 ^ -11))) / \\ & ((( BC.. * (10 ^ -7)) * ( BG.. * (10 ^ -11)) + \\ & (( BC.. * (10 ^ -7)) * BK.. ) + \\ & (( BK.. ) ^ 2 ))) * ( J.. * ( 61 / 12 ) \end{aligned} \quad (22A)$$

## 2.5. BEREKEN ANIONENBALANS

De anionenbalans wordt berekend in meq/l en gaat als volgt:

[x] is concentratie element/stof x in meq/l.

$$[\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}] + [\text{Cl}^-] + [\text{NO}_3^-] + [\text{SO}_4^{2-}] =$$

totale hoeveelheid anionen in meq/l (23)

Zie bijlage 5, tabel 8.

## BEREKEN ANIONENBALANS IN LOTUS-123

$$\textcircled{\text{S}}\text{UM}(\text{AU}.. + \text{AW}.. + \text{AB}.. + \text{AC}.. + \text{AD}..) \quad (23\text{A})$$

## 2.6. BEREKENEN KATIONENBALANS

De kationenbalans wordt berekend in meq/l en gaat als volgt:

[x] is concentratie element/stof x in meq/l.

$$[\text{Na}^+] + [\text{K}^+] + [\text{Ca}^+] + [\text{Mg}^{2+}] + [\text{Fe}^{3+}] + [\text{Al}^{3+}] + [\text{NH}_4^+] + [\text{Mn}^+] =$$

totale hoeveelheid kationen in meq/l (24)

Zie bijlage 5, tabel 8.

## BEREKENEN KATIONENBALANS IN LOTUS-123

$$\textcircled{\text{S}}\text{UM}(\text{AF}.. + \text{AG}.. + \text{AH}.. + \text{AI}.. + \text{AJ}.. + \text{AK}.. + \text{AL}.. + \text{AM}..) \quad (24\text{A})$$

## 2.7. VERHOUDING ANIONEN GEDEELD DOOR KATIONEN

De totale hoeveelheid gevonden anionen (bij punt 2.7) in meq/l wordt gedeeld door de totale hoeveelheid kationen (bij punt 2.8) in meq/l.

Zie bijlage 5, tabel 8.

## VERHOUDING ANIONEN GEDEELD DOOR KATIONEN IN LOTUS-123

$$\text{@SUM(BT.. / BU.. )} \quad (25)$$

## 2.8. HET BEREKENEN VAN DE Ec

De Ec berekend om te kijken of de gemeten Ec en de berekende Ec met elkaar overeenkomen. En als dit niet het geval is, waar dan de fout ligt (bij de anionen of bij de kationen).

De basisformule voor de berekening van de Ec is:

$$\lambda = \sum c_i \lambda_i \quad (26)$$

$c_i$  = conc. in meq/l

$\lambda_i$  = specifiek geleidingsvermogen

$\lambda$  = ms/cm

$c_i$  = meq/l

De uitwerking van de basisformule levert formule (27).

$$Ec = \dots A(1,2 \text{ of } 3) * [x] * \text{constante} \quad (27)$$

[x] is concentratie van element(stof) x in meq/l.

A1, A2 of A3 zijn drie activiteitscoëfficiënten die verderop in dit verhaal worden behandeld. Het cijfer achter de A geeft aan of het element 1, 2 of 3 waardig is. Want voor de verschillende waardigheden is een verschillende activiteitscoëfficiënt vereist (is het specifieke geleidingsvermogen van x).

De specifieke geleidingsvermogen bij 20°C zijn gebaseerd op gegevens bij 25°C van REIJNDERS en NEELE (1980).

$$\begin{aligned} & (315 * [H^+] + 66.06 * A1 * [NH_4^+] + 27.1 * A1 * [Na^+] + \\ & 107.1 * A2 * [Ca^{2+}] + 96.6 * A2 * [Mg^{2+}] + \\ & 76.4 * A1 * [Cl^-] + 64.26 * A1 * [NO_3^-] + \\ & 144 * A2 * [SO_4^{2-}] + 83.6 * A3 * [Fe^{3+}] + \\ & 40.5 * A1 * [HCO_3^-] + 126 * A2 * [CO_3^{2-}]) / 10 \end{aligned} \quad (28)$$

## HET BEREKENEN VAN DE Ec IN LOTUS-123

In LOTUS-123 staat in alle formules in welke kolom en op welke regel gezocht moet worden. Bv. AA1 dit is kolom AA en regel 1. In de onderstaande formules wordt alleen de kolom vermeld zonder regelnummer, omdat het regelnummer bij elk volgend monster oploopt. Datgene wat tussen de vierkanten haken staat ([ ]) is de kolom waar het LOTUS-123 berekeningenfile gebruik van maakt.

$$\begin{aligned} & @SUM(315 * [BK..] + 66.06 * AZ.. * [AL..] + 27.1 * AZ.. * [AF..]+ \\ & 107.1 * BA.. * [AH..] + 96.6 * BA.. * [AI..] + \\ & 76.4 * AZ.. * [AB..] + 64.26 * AZ.. * [AC..] + \\ & 144 * BA.. * [AD..] + 83.6 * BB.. * [AJ..] + \\ & 40.5 * AZ.. * [AU..] + 126 * BA.. * [AX..] ) / 10 \end{aligned} \quad (28A)$$



### 3. INDELING WORKSHEET LOTUS-123

#### 3.1. INVOERFILE

Het invoer file is in vier invoerblokken verdeeld (zie ook bijlage 1 en 2):

##### Koptekst

Hier kan een omschrijving van het monster gegeven worden. Tevens kan aangegeven worden welk van de gemeten monster het controlemonster is (GLP). Ook kunnen de de data van ijking van de pH-meter en de Ec-meter ingevoerd worden (zie bijlage 1, figuur 1).

##### Eerste blok algemeen (I)

In dit blok worden de meer algemene analyses ingevoerd, zoals pH, Ec, TOC en P totaal (zie bijlage 1, tabel 1).

##### Tweede blok anionen (II)

In dit blok worden alle gemeten anionen concentratie's ingevoerd in mg/l. Dit blok wordt later in het berekeningen file gebruikt voor de diverse berekeningen (zie bijlage 2, tabel 2).

##### Derde blok kationen (III)

In dit blok worden alle gemeten kationen concentratie's ingevoerd in mg/l. Dit blok wordt later in het berekeningen file gebruikt voor de diverse berekeningen (zie bijlage 2, tabel 3).

Kolom	Omschrijving
-I-	
A	Monster nummer
B	Datum (ddmmjj)
C	pH
D	Ec
E	TOC in ppm.
F	P. totaal

Kolom	Omschrijving
-II-	
H	Chloride ( $\text{Cl}^-$ )
I	Nitraat ( $\text{NO}_3^-$ )
J	Inorganic Carbon (IC)
K	Fosfaat ( $\text{PO}_4^{3-}$ )
L	Sulfaat ( $\text{SO}_4^{2-}$ )
-III-	
N	Natrium ( $\text{Na}^+$ )
O	Kalium ( $\text{K}^+$ )
P	Calcium ( $\text{Ca}^{2+}$ )
Q	Magnesium ( $\text{Mg}^{2+}$ )
R	IJzer ( $\text{Fe}^{3+}$ )
S	Aluminium ( $\text{Al}^{3+}$ )
T	Ammonium ( $\text{NH}_4^+$ )
U	Mangaan ( $\text{Mn}^{2+}$ )

### 3.2. BEREKENINGFILE

Het berekeningfile is onderverdeeld in 8 blokken. De eerste drie (plus de koptekst) blokken zijn precies hetzelfde als die van het invoerfile. Daarnaast zijn er nog drie extra blokken bij gekomen voor berekening naar meq/l (zie bijlage).

#### Koptekst

Dit is hetzelfde als diegene van het invoerfile.

Eerste blok algemeen in mg/l (I):

Zie invoerfile.

Tweede blok anionen in mg/l (II):

Zie invoerfile.

Derde blok kationen in mg/l (III):

Zie invoerfile.

Vierde blok anionen in meq/l (IV):

In dit blok wordt de omrekening uitgevoerd van mg/l naar meq/l voor alle anionen die in dit blok staan (zie bijlage 3, tabel 4).

Vijfde blok kationen in meq/l (V):

In dit blok wordt de omrekening uitgevoerd van mg/l naar meq/l voor alle kationen die in dit blok staan (zie bijlage 3, tabel 5).

Zesde blok ionenbalans (VI):

In dit blok wordt de ionenbalans en de verhouding van anionen gedeeld door kationen uitgerekend en ook wordt hier de Ec-gemeten vergeleken met de Ec-berekend (zie bijlage 5, tabel 8).

Zevende blok allerlei functies en constantes (VII):

In dit blok worden de diverse formule's en constantes uitgerekend ten behoeve van het uitrekenen van de ionenbalans (zie bijlage 4, tabel 6 en 7).

Kolom	Omschrijving
-I-	
A	Monster nummer
B	Datum (ddmmjj)
C	pH
D	Ec
E	TOC in ppm.
F	P. totaal
-II-	
	In mg/l
H	Chloride ( $\text{Cl}^-$ )
I	Nitraat ( $\text{NO}_3^-$ )
J	Inorganic Carbon (IC)
K	Fosfaat ( $\text{PO}_4^{3-}$ )
L	Sulfaat ( $\text{SO}_4^{2-}$ )

Kolom	Omschrijving
-III-	
	In mg/l
N	Natrium ( $\text{Na}^+$ )
O	Kalium ( $\text{K}^+$ )
P	Calcium ( $\text{Ca}^{2+}$ )
Q	Magnesium ( $\text{Mg}^{2+}$ )
R	IJzer ( $\text{Fe}^{3+}$ )
S	Aluminium ( $\text{Al}^{3+}$ )
T	Ammonium ( $\text{NH}_4^+$ )
U	Mangaan ( $\text{Mn}^{2+}$ )

Tevens staan blok IV en blok V ook nog een keer vermeld met de concentraties als mg/l. Deze twee extra blokken worden voor het maken van de printfiles gebruikt (en voor het overzicht).

In deze twee extra blokken staan tevens de datums en de monsternummers dit in verband met de betere leesbaarheid van de diverse printfiles. Deze twee extra blokken staan achter blok VI in het berekenfile (d.w.z. in kolom BY t/m CG staan de anionen en in kolom CJ t/m CS staan de kationen vermeld).

-IV-	
	In meq/l
X	Bicarbonaat ( $\text{HCO}_3^-$ )
Y	Kooldioxide ( $\text{CO}_2^{2-}$ )
Z	Carbonaat ( $\text{CO}_3^{2-}$ )
AB	Chloride ( $\text{Cl}^-$ )
AC	Nitraat ( $\text{NO}_3^-$ )
AD	Sulfaat ( $\text{SO}_4^{2-}$ )

-V-	
	In meq/l
AF	Natrium ( $\text{Na}^+$ )
AG	Kalium ( $\text{K}^+$ )
AH	Calcium ( $\text{Ca}^{2+}$ )
AI	Magnesium ( $\text{Mg}^{2+}$ )
AJ	IJzer ( $\text{Fe}^{3+}$ )
AK	Aluminium ( $\text{Al}^{3+}$ )
AL	Ammonium ( $\text{NH}_4^+$ )
AM	Mangaan ( $\text{Mn}^{2+}$ )

## -VI-

BM	Monster nummer
BN	Datum
BO	TOC (Total Organic Carbon)
BP	pH
BQ	Ec gemeten
BR	Ec berekend
BT	Anionenbalans
BU	Kationenbalans
BW	Anionen / Kationen

## -VII-

AU	Bicarbonaat in meq/l
AS	Bicarbonaat m.b.v. $K_1$ en $K_2$ berekend
AW	Carbonaat m.b.v. $K_1$ en $K_2$ berekend
AX	Carbonaat in meq/l
AY	Ionsterkte berekend

#### 4. INVOER EN BEREKENINGEN

De invoer en de berekeningen staan in twee afzonderlijke file's. De invoer is in en apart file ondergebracht omdat voor de berekeningen nogal wat formules en tevens een macro gebruikt worden. En al deze formules en de macro vergen nogal wat tijd voor de berekening.

Het invoer file kan met behulp van de macro in het berekeningen file ingevoerd worden. Dit gaat met het (combine) commando. De computer voert dan alle berekeningen tegelijkertijd uit, en dit vergt veel minder tijd dan alle berekeningen apart uit te voeren.

Bij de berekening wordt gebruik gemaakt van de macro, omdat dit het geheel ook gebruikersvriendelijk maakt. Door het commando [Alt] M te geven wordt de gehele verwerking verder een interactief proces.

De computer vraagt dan automatisch naar de naam van de invoerfile. Het printgedeelte bestaat uit 5 printfile de namen worden al in de invoerfile gevraagd en ingevuld door de gebruiker. Het printgedeelte bestaat uit 5 files omdat het hele "worksheet", alle gegevens, te breed is om naast elkaar uitgeprint te worden. De print files zijn als volgt ingedeeld:

- 
1. Anionen in mg/l
  2. Anionen in meq/l
  3. Kationen in mg/l
  4. Kationen in meq/l
  5. Kationen / Anionenbalans
  6. Koptekst.
- 

De resultaten kunnen in de LOTUS file worden bekeken. Voor de duidelijkheid zijn alle tussenresultaten "verstopt" (hidden). Indien het noodzakelijk is om de tussenresultaten te zien is dit verstoppen ongedaan te maken met behulp van het commando DISPLAY. Dit commando is te vinden onder WORKSHEET daarna COLUMN. Als de resultaten op papier worden bekeken kan er een keuze worden gemaakt. Het is mogelijk de LOTUS-printfiles over te halen naar de VAX. Deze printfiles (\*.prn) staan in ASCII.

## 5. MACRO

Een macro is een programma binnen LOTUS-123 dat de diverse commando's achter elkaar uitvoerd (een soort batch file in msdos). Een macro heeft als voordeel dat als er nogal veel berekeningen en formules in een file voorkomen de macro zorgt dat deze zo snel mogelijk en in de juiste volgorde uitgevoerd worden. De macro wordt dan opgeslagen onder een bepaalde naam, de naam van deze macro is \M.

De Macro wordt dan opgeroepen d.m.v. de Alt toets en de M toets gelijktijdig in te drukken.

### 5.1. MACRO IN LOTUS-123

```
ee1 /xmee2~
ee2 Verwerking
ee3 Invoer naam invoerfile en verwerking.
ee4 goto a1~
ee5 /xl Geef naam invoerfile (max. 8 tekens:)-ee7~
ee6 /fcce
ee7 (dit is ee7, hier komt de naam van het invoerfile te staan)
ee8 ~/ca14..a66~bm14..bm66~/ca14..a66~by15..by66~
ee9 /ca14..a66~cj14..cj66~/ca12..a66~w12..w66~
ee10 goto k1~
ee11 /ck1..k1~ee13..ee13~
ee12 /pf
ee13 (naam printfile1)
ee14 ~rby6..cg66~gq
ee15 (goto)k2~
ee16 /ck2..k2~ee18..ee18~
ee17 /pf
ee18 (naam printfile2)
ee19 ~rw6..ad66~gq
ee20 (goto)k3~
ee21 /ck3..k3~ee23..ee23~
ee22 /pf
```

ee23 (naam printfile3)  
ee24 ~rcj6..cs66~gq  
ee25 {goto}k4~  
ee26 /ck4..k4~ee28..ee28~  
ee27 /pf  
ee28 (naam printfile4)  
ee29 ~raf6..am66~gq  
ee30 {goto}k5~  
ee31 /ck5..k5~ee33..ee33~  
ee32 /pf  
ee33 (naam printfile5)  
ee34 ~rbm6..bw66~gq  
ee35 {goto}k6~  
ee36 /ck6..k6~ee38..ee38~  
ee37 /pf  
ee38 (naam printfile 6)  
ee39 ~ra1..g6~gq

## 5.2. VERKLARING VAN MACRO IN LOTUS-123

ee1 /xm

Met dit commando wordt een menu binnen het lotus-menu opgeroepen

ee2~

Met ee2 wordt aangegeven dat het betreffende menu begint bij kolom EE regel 2. De ~ geeft een return aan. In principe is dit het activeren van het menu.

ee2 Dit is de bovenste regel van het menu.

ee3 Dit is de verklaring bij de bovenste regel, en dit staat op de tweede regel.

ee4 Verplaats de cursor naar kolom A en regel 1.



- ee5     /xl  
Dit is het oproepen van weer een andere menu binnen LOTUS-123.  
De tekst die daarna komt wordt ook zo op scherm afgedrukt.  
ee7~  
De ingevoerde naam wordt in kolom EE regel 7 geplaatst.
- ee6     /f(ile) c(ombine) c(opy) e(ntire file)  
Met dit commando worden 2 files gecombineerd. En het  
combineren begint op positie A1.
- ee7     Hier komt de naam van het invoerfile te staan, deze naam  
wordt met het commando uit ee5 hierheen gestuurd.
- ee8     /c(opy)a14..a66~bm14..bm66~  
Hier wordt de kolom met monsternummers vanaf regel 14 t/m  
regel 66 gecopieerd naar een andere kolom. Dit om het over-  
zicht op de monsters te bewaren.
- ee9     Als boven.
- ee10    (goto)  
Met dit commando verplaatst de cursor zich naar kolom K regel 1.
- ee11    /c(opy)k1..k1~ee13..ee13~  
Hier wordt de tekst (naam van printfile) gecopieerd van kolom  
K regel 1 naar kolom EE regel 13.
- ee12    /p(rint)f(ile)  
Met deze commando's wordt aangegeven dat er een printfile  
gemaakt moet worden.
- ee13    Op deze plaats staat de naam van het printfile (zie ee11).
- ee14    ~r(ange)by6..cg66~g(o)q(uit)  
Hier wordt de range (wat in printfile komt) aangegeven  
en vervolgens en vervolgens uitgevoerd (g(o)) en daarna  
wordt de bewerking beëindigd (q(uit))

ee15 t/m ee19 als ee10 t/m ee14

ee20 t/m ee24 idem.

ee25 t/m ee29 idem.

ee30 t/m ee34 idem.

ee35 t/m ee39 idem.

## 6. LITERATUUR

NEN 6523 (1987)

Een methode voor de berekening van het gehalte aan bicarbonaat, carbonaat en koolstofdioxide uit het gehalte aan totaal koolstofdioxide en de pH. N.N.I. (Nederlands Normalisatie Instituut)

Hulpboek LOTUS-123.

Ing. C. Casander.

## 7. BIJLAGEN

Grafieken  $K_1$  en  $K_2$ .

(RRGRAPH)

Printfiles van de verschillende blokken.

## BIJLAGE 1

---

DATUM	pH DATUM	Ec DATUM
METING:	IJKING:	IJKING:
	VELD/LAB.	VELD/LAB.

CONTROLE:  
MONSTER

---

Figuur 1. Koptekst

Tabel 1. Invoer algemene gegevens

---

INVOER	MONSTERS					
MONSTER	DATUM	pH	Ec	TOC	Ptot.	
NUMMER	ddmmjj	GEMETEN	GEMETEN			
I 5	60988	0	0	0	0	0
I 25	60988	0	0	0	0	0
I 45	60988	0	0	0	0	0
I 65	60988	0	0	0	0	0
I 85	60988	0	0	0	0	0
II 5	60988	0	0	0	0	0
II 25	60988	0	0	0	0	0
II 45	60988	0	0	0	0	0
II 65	60988	0	0	0	0	0
II 85	60988	0	0	0	0	0
III 5	60988	0	0	0	0	0
III 25	60988	0	0	0	0	0





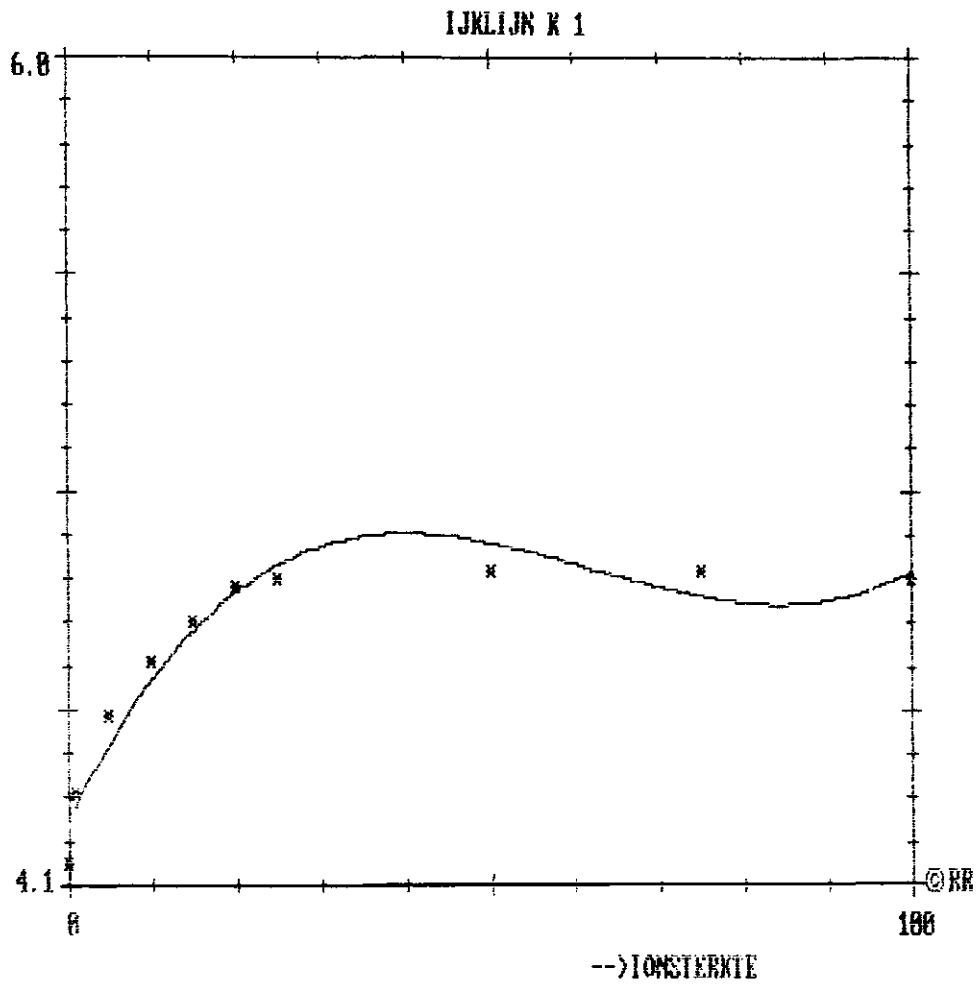








BIJLAGE 7



IJKLIJN K 1

Comment X-axis : IJKLIJN K 1

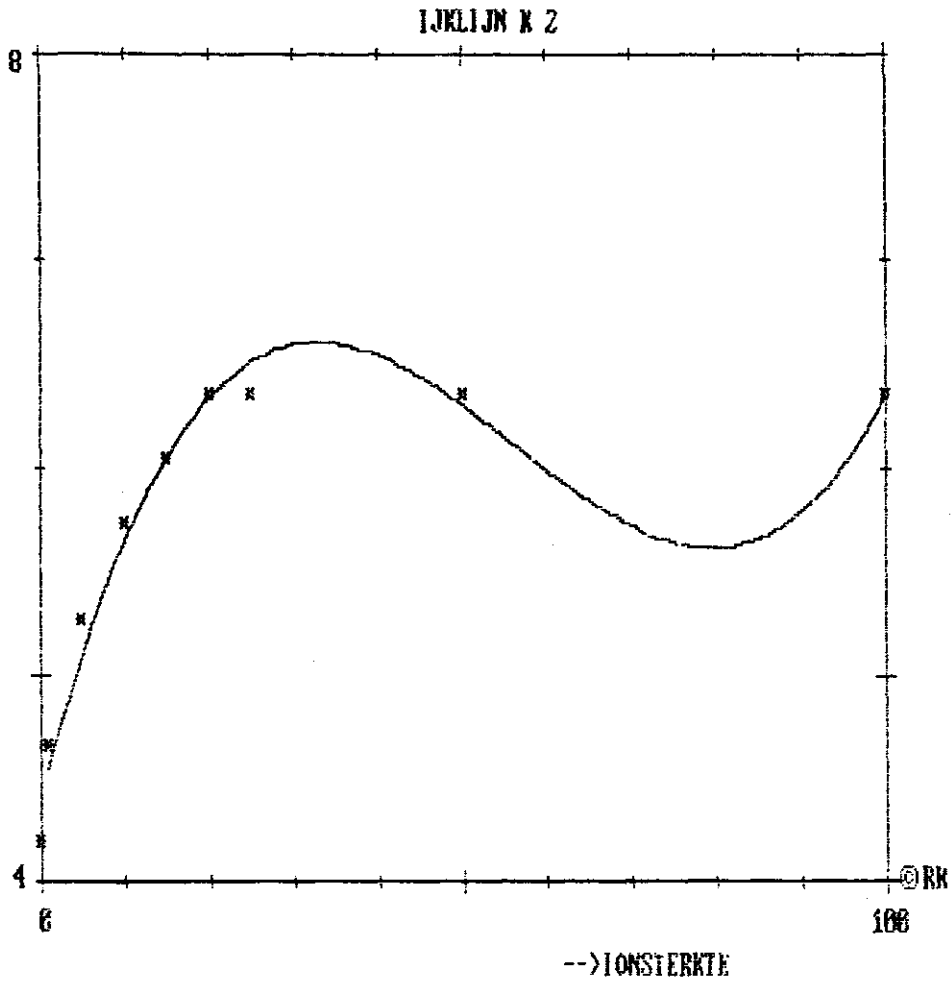
Comment Y-axis :

Function obtained :

$$\begin{aligned}
 Y = & + 3.7677890972E-06*(X^3) \\
 & - 7.0526148539E-04*(X^2) \\
 & + 3.8504194903E-02*(X) \\
 & + 4.2509269947E+00*(1)
 \end{aligned}$$

Figuur 2. IJKlijjn K<sub>1</sub>

BIJLAGE 8



IJKLIJN K 2

Comment X-axis : IJSSTERKTE  
 Comment Y-axis :

Function obtained :  
 $Y = + 1.9537650267E-05*(X^3)$   
 $- 3.2965628658E-03*(X^2)$   
 $+ 1.5357586816E-01*(X)$   
 $+ 4.4239541803E+00*(1)$

Figuur 3. IJklijn K<sub>2</sub>