

NN31545.1612



nota

— instituut voor cultuurtechniek en waterhuishouding, wageningen —

ICW nota 1612

april 1984

**BIBLIOTHECA
STARRINGGEBOUW**

GEBRUIKERSHANDLEIDING VOOR HET MODEL COMPLEX

ir. F. Blömer

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



10 JULI 1985

JEN 222313-01

I N H O U D

	blz.
1. INLEIDING	1
2. COMPLEX VERSIE 1	1
3. COMPLEX VERSIE 2	2
4. COMPLEX VERSIE 3	2
5. COMPLEX VERSIE 4	2
6. DATAFILES	3
6.1. Inputfile	3
6.2. Indexfile	4
6.3. Outputfile	4
7. WERKVOLGORDE	5
8. LITERATUUR	5

1. INLEIDING

Complex is een model dat op basis van de wateranalyse de ionenverdeling over de verschillende complexen berekent. Dit gebeurt op basis van activiteiten en temperatuur.

Bij de berekeningen is er van uitgegaan dat de gemeten gehalten aan ionen totaalgehalten zijn. Dit betekent dat de som van de massabalansen voor de verschillende ionen gelijk is aan de gemeten hoeveelheid. Er zijn enkele uitzonderingen en daarom zijn er 4 complexversies beschikbaar. (zie hoofdstuk 2 t/m 5).

Het model is ontwikkeld voor een temperatuur van 25°C, maar omdat de werkelijke omstandigheden meestal bij een andere temperatuur liggen zijn de berekeningen temperatuur afhankelijk gemaakt. Voor de ionpaar evenwichten is echter geen informatie beschikbaar over temperatuur afhankelijkheid, daarom wordt voor deze evenwichten met een constante K-waarde gerekend.

Voor alle theorie en verdere achtergrond informatie wordt de lezer verwezen naar Report 2 van het Reuse of Drainage Water Project (zie hoofdstuk 8).

2. COMPLEX VERSIE 1

Deze subroutine zal in de praktijk het meest gebruikt worden. Er zijn in deze routine twee afwijkingen verwerkt van het in de inleiding genoemde totaalgehalte.

- De gemeten pH van een watermonster neemt in de praktijk de plaats in van de totaal H-analyse. De pH is in feite de vrije activiteit van het waterstofion. Hiermee is 1 onbekende uit het stelselvergelijkingen bekend geworden en kan dus ingevuld worden. Het gevolg is dan dat er 1 vergelijking verdwijnt. In de uitvoer wordt het berekende

$H_{\text{totaal}} - OH_{\text{totaal}}$ gegeven. Dit gehalte kan bij de eventuele verdere berekeningen gebruikt worden.

- Voor de meting van het HCO_3 totaal gehalte wordt vaak een titratie gebruikt. Het gehalte dat uit deze bepaling komt is $[HCO_3^-] + [CO_3^{2-}]$, niet meegemeten is het $[H_2CO_3^*]$. In complex versie 1 wordt hiermee rekening gehouden, en verschijnt in de uitvoer een gecorrigeerde HCO_3 totaal concentratie. Dit is $[HCO_3^-] + [CO_3^{2-}] + [H_2CO_3^*]$.

3. COMPLEX VERSIE 2

Deze subroutine rekent met totaalgehalten voor ieder ion. Meestal moet eerst het $H_{\text{totaal}} - OH_{\text{totaal}}$ en het HCO_3 totaal berekend worden met complex 1. Daarna kan met complex 2 verder gerekend worden. Er kan bijvoorbeeld gekeken worden wat het effect is van een toevoeging van bijvoorbeeld HCl of NaOH of naar het effect van de temperatuur op de pH of op de $CaCO_3$ oververzadiging. Voor iedere berekening moet dan een regel worden toegevoegd in de datafile waarin de veranderingen zijn verwerkt in de betreffende massabalansen. Dit is dan een zelfverzonnen analyse.

4. COMPLEX VERSIE 3

Dit is een subroutine die uitrekent hoe de samenstelling van het watermonster wordt als er evenwicht is met de atmosfeer. Dus met andere woorden als de $pCO_2 \approx 10^{-3,5}$ mol/liter. Deze subroutine kan gebruikt worden na een berekening met complex versie 1, complex versie 2 of complex versie 4.

5. COMPLEX VERSIE 4

Deze subroutine is bijna identiek aan complex versie 1. Het enige verschil is dat het HCO_3 totaal gehalten nu bestaat uit $[H_2CO_3^*] + [HCO_3^-] + [CO_3^{2-}]$. In de uitvoer verschijnt nu dus geen gecorrigeerd HCO_3 totaal gehalte.

6. DATAFILES

6.1. Inputfile

Voor ieder monster wordt in de uitvoer 1 pagina gebruikt waarop ook de gebiedsgegevens vermeld staan. Daarom moet er voor ieder gebied of voor monsters met een andere bijbehorende tekst een nieuwe inputfile gemaakt worden. Al deze inputfiles kunnen in 1 run worden verwerkt door de namen van de inputfiles in de indexfile te plaatsen (zie 6.2). Hieronder volgt de beschrijving van 1 inputfile waarbij per regel tussen haakjes het format vermeld staat.

Regel 1. Regionaam (format A40)

Regel 2. Gebiedsnaam (format A40)

Regel 3. Locatiennaam (format A40)

Regel 4. Monstercode (format A40)

Regel 5. Itype, Temp, Date, pH, Na, Ca, Mg, Cl, SO_4 , HCO_3 , $\text{H}_{\text{tot}}^+ - \text{OH}_{\text{tot}}^-$
(format I2, F8.3, A10, 7F8.3, G10.3)

Regel 6. en volgende als regel 5.

De file mag niet afgesloten worden met een lege regel!

Itype is het complex versienummer. De volgende codes zijn mogelijk:

1: complex versie 1

13: complex versie 1 + complex versie 3

2: complex versie 2

23: complex versie 2 + complex versie 3

4: complex versie 4

43: complex versie 4 + complex versie 4

Temp is de temperatuur in graden Celsius.

Date is de datum waarop het monster is genomen. Deze kan geschreven worden in de vorm: dd-mm-yyyy waarbij dd voor het dagnummer staat, mm voor het maandnummer en yyyy voor het jaartal.

De pH wordt als $-\log(\text{H}^+)$ gegeven waarbij (H^+) in mol/liter is uitgedrukt. Na, Ca, Mg, Cl, SO_4 , HCO_3 zijn de analyseresultaten.

Deze resultaten moeten in mmol/liter worden opgegeven. Alleen als met versie 2 wordt gerekend moet ook de $\text{H}_{\text{tot}}^+ - \text{OH}_{\text{tot}}^-$ worden opgegeven.

Wanneer er veel meetgegevens zijn, voor veel monsterpunten en geen tijdreeksen dan kan op de plaats van Date de monstercode ingevuld worden en op de derde regel tekst.

6.2. Indexfile

In de indexfile met de naam 'COMPLEX.NDX' staan onder elkaar de namen van de inputfiles met analysegegevens. Het format per naam is A40. Deze file mag eveneens niet afgesloten worden met een lege regel.

6.3. Outputfile

De resultaten van de berekeningen worden naar 1 file geschreven, deze heet 'COMPLEX.RES'.

De uitvoer bestaat per monster 1 pagina die ingedeeld is in 5 gedeelten.

Deel 1. Heading

Deel 2. Monstergegevens als plaats, datum, code, temperatuur en het versienummer van de betreffende complex versie.

Deel 3. Een tabel met 4 regels.

Regel 1 bevat de totaalgehalten van de analyse.

Regel 2 bevat de berekende concentratie verdeling over de species.

Regel 3 bevat de activiteitscoëfficiënten.

Regel 4 bevat de activiteiten, dit is het produkt van regel 2 en 3.

Deel 4. Bevat informatie over de berekening en vermeldt de elektronenbalans en oververzadigingsindexen voor verschillende stoffen.

Deel 5. Geeft de verdeling over de complexen in procenten.

7. WERKVOLGORDE

De werkvolgorde is als volgt:

- maak de inputfiles op de aangegeven manier aan;
- maak de indexfile op de aangegeven manier aan;
- run het programma Complex;
Dit kan gedaan worden met volgende commando
RUN [CBLR.21201900.COMPLEX]COMPLEX
- men kan de uitvoer vinden in de file 'COMPLEX.RES'.

8. LITERATUUR

ABDEL KHALIK, M.A. en F. BLÖMER, 1984. Complex, A chemical equilibria
computermodel. Report 2. Reuse of Drainage Water Project. Insti-
tute for Land and Water Management Research, Wageningen.