

# **Carbonic Acid System CAS**

**Handbuch**

**Version 4.1**

**Januar 2014**

Priv.-Doz. Dr.-Ing. habil. Klaus Johannsen



<b>Inhaltsverzeichnis</b>	<b>Seite</b>
<b>1</b>	<b>Allgemeines.....1</b>
<b>2</b>	<b>Systemvoraussetzung / Installation .....2</b>
<b>3</b>	<b>Lizenzvereinbarung .....3</b>
<b>4</b>	<b>Bedienung von CAS.....4</b>
<b>4.2</b>	<b>Datei .....4</b>
4.2.1	Neu (F2) .....4
4.2.2	Öffnen... (F3).....4
4.2.3	Speichern... (Ctrl+S).....4
4.2.4	Speichern unter ... (F4) .....4
4.2.5	Exit .....4
<b>4.3</b>	<b>Eingabe.....5</b>
4.3.1	Analysendaten A, B, C (Ctrl+A, Ctrl+B, Ctrl+C) .....5
4.3.1	Analysenkontrolle .....7
4.3.2	Mischungsanteile (Ctrl+M).....8
<b>4.4</b>	<b>Berechnen .....9</b>
4.4.1	Calcitsättigung A, B, C, Mischung (Ctrl+Alt+A, Ctrl+Alt+B, Ctrl+Alt+C, Ctrl+Alt+M) .....9
4.4.2	Mischung A-B, A-C, B-C (Shift+F2, Shift+F3, Shift+F4).....11
4.4.3	Konzentrationen der Ionenpaare A, B, C (Ctrl+F2, Ctrl+F3, Ctrl+F4)12
<b>4.5</b>	<b>Extras.....13</b>

---

4.5.1	Kohlensäureformen (F5) .....	13
4.5.2	Zusätze (F6) .....	14
4.5.3	W 216 (F7) .....	15
4.5.4	Konstanten (F8) .....	17
4.5.5	Datenzusammenfügen (Ctrl-D) .....	17
4.5.6	Optionen (F9) .....	18
<b>4.6</b>	<b>? .....</b>	<b>18</b>



# 1 Allgemeines

CAS (**C**arbonic**A**cid**S**ystem) ist ein Programm für wasserchemische Berechnungen. CAS ermöglicht die Eingabe von drei unterschiedlichen Analysen (A, B, C). Für jede Analyse können Analysenkontrollen durchgeführt werden. Weiterhin können beliebige Mischungsverhältnisse für die drei Analysen vorgegeben werden.

Für jedes Wasser (Analyse A, B, C) bzw. für jede beliebige Mischung können Berechnungen zur Calcitsättigung durchgeführt werden. Hierbei wird neben den verschiedenen SättigungspH-Werten auch die Calcitlösekapazität berechnet. Die Berechnungen werden auf voneinander unabhängigen Wegen ausgehend von der Säure- und Basekapazität sowie dem pH-Wert durchgeführt. Darüber hinaus berechnet CAS den erforderlichen Chemikalienbedarf bis zum Erreichen des pH-Wertes von 7,8 sowie bis zum Erreichen des Gleichgewichts ( $SI=0$ ).

CAS führt Mischungsrechnungen für die Mischungen der Wässer A-B, A-C und B-C durch. Die Anteile werden zwischen 0 und 100 % in 10 %-Schritten variiert. Dabei werden der pH-Wert und die Calcitlösekapazität in der Mischung berechnet.

Für jedes Wasser (Analyse A, B, C) können die Konzentrationen aller Ionenpaare (Aquokomplexe) berechnet werden. CAS stellt ein Formular zur Berechnung des Kohlensäure-Gleichgewichts sowie zur Durchführung von Dosierungsrechnungen zur Verfügung. Weiterhin können Berechnungen nach dem Arbeitsblatt W 216 *“Versorgung mit unterschiedlichen Trinkwässern”* durchgeführt werden.

Alle berechneten Werte können ausgedruckt und gespeichert werden.

CAS ist ein ShareWare Programm, das in der DemoVersion nicht alle Funktionen zur Verfügung stellt. **Bei der DemoVersion bleiben die Aquokomplexe von Calcium, Magnesium und Phosphat unberücksichtigt.** Weiterhin erlaubt die DemoVersion lediglich die Eingabe von zwei Analysen (A, B). Es kann lediglich der erforderliche Chemikalienbedarf bis zum Erreichen des Kalk-Kohlensäure-Gleichgewichts ( $SI=0$ ) berechnet werden. Das Speichern und Drucken der berechneten Werte ist in der DemoVersion nicht möglich.

Die **VollVersion** von CAS führt die Berechnungen nach der DIN 38404-10 „Berechnung der Calcitsättigung eines Wassers“ (2012) durch und erfordert ein Passwort. Zum Bestellen der VollVersion von CAS benutzen Sie bitte das beiliegende Bestellformular BESTELL.TXT oder wenden Sie sich direkt an:

DVGW-Forschungsstelle TUHH  
Priv.-Doz. Dr.-Ing. habil. Klaus Johannsen  
Schwarzenbergstr. 95  
21071 Hamburg  
Tel.: 040/42878 3452  
Fax.: 040/42878 2999  
email: k.johannsen@tuhh.de

## 2 Systemvoraussetzung / Installation

CAS erfordert das Betriebssystem Windows 95 oder höher.

Das Programmpaket enthält die folgenden Dateien:

- CAS40.exe	CAS-Programm
- CAS_D.hlp	CAS-Hilfe (Deutsch)
- CAS_E.hlp	CAS-Hilfe (Englisch)
- Bestell.txt	Bestellformular (Deutsch)
- Order.txt	Bestellformular (English)
- DIN Tab 4_1,2,3.cas	Datensätze aus Tabelle 4 DIN 38404-10
- DIN Tab 4_4,5,6.cas	
- DIN Tab 4_7,8,9.cas	
- DIN Tab 4_10.cas	
- DIN Tab 5.cas	Datensatz aus Tabelle 5 DIN 38404-10
- DIN_CAS 4.0.pdf	Vergleich der von CAS berechneten Daten mit Tabelle 4 DIN 38404-10

Zur **Installation** müssen diese Dateien in ein gemeinsames Verzeichnis kopiert werden (z.B. C:\Programme\CAS). Nach dem ersten Ausführen von CAS wird eine Initialisierungsdatei (CAS.INI) erzeugt, in der die vom Benutzer einstellbaren Daten gespeichert werden. Es erfolgt kein Eingriff in die Windows-Registry.

Zur **Deinstallation** von CAS werden die Programmdateien gelöscht.

Die Eingabe des **Benutzernamens** und des **Passwortes** für die Vollversion von CAS erfolgt unter dem Menüpunkt Extras/Optionen/Passwort - User ID.

### 3 Lizenzvereinbarung

Die **DemoVersion** von CAS ist ein ShareWare Programm, das zeitlich unbegrenzt benutzt und weitergegeben werden kann. Die **VollVersion** von CAS erfordert eine Registrierung, durch die der Benutzer ein Passwort erhält.

1. Alle Rechte an CAS liegen ausschließlich beim Autor Klaus Johannsen.
2. Die unregistrierte **DemoVersion** von CAS darf ohne Einschränkungen verteilt werden. Umfang und Inhalt des Originalpakets dürfen nicht verändert werden. Niemand darf für die Weitergabe von CAS eine Gebühr erheben.
3. Die registrierte **VollVersion** von CAS darf von einem Benutzer auf einem Computer benutzt werden. Weder die Benutzung von CAS auf zwei oder mehreren Computern gleichzeitig oder in einem lokalen oder anderen Netzwerk ist gestattet.
4. Außer den Registrierungsgebühren werden keine weiteren Gebühren fällig.
5. **DER AUTOR ÜBERNIMMT KEINERLEI GARANTIEN UND KEINE VERANTWORTUNG FÜR DATENVERLUSTE, ENTGANGENE GEWINNE ODER SONSTIGE SCHÄDEN, DIE BEIM GEBRAUCH VON CAS ENTSTEHEN KÖNNTEN. SIE BENUTZEN CAS AUF EIGENE GEFAHR!**
6. Jeder Gebrauch von CAS (kopieren, klonen, emulieren, vermieten, Leasing, verändern, dekompileieren, disassemblieren) oder eines Teils von CAS, der über die Lizenzbestimmungen hinaus geht, ist untersagt und führt zum sofortigen automatischen Erlöschen der Lizenz. Der Autor behält sich eine straf- und / oder zivilrechtliche Verfolgung vor.
7. Die Installation und der Gebrauch von CAS bedeutet ein Akzeptieren der Lizenzbestimmungen.
8. Sollten Sie die Lizenzbestimmungen nicht akzeptieren, müssen Sie CAS von Ihrer Festplatte löschen. Sie dürfen CAS nicht länger benutzen.

## 4 Bedienung von CAS

### 4.2 Datei

#### 4.2.1 Neu (F2)

Alle Formulare werden initialisiert. Der Dateiname wird auf Untitled.cas gesetzt.

#### 4.2.2 Öffnen... (F3)

Unter diesem Menüpunkt werden CAS Dateien geöffnet. Die empfohlene Dateierweiterung ist „cas“. Beim Versuch eine nicht von CAS erzeugte Datei zu öffnen erscheint die Fehlermeldung „... konnte nicht gelesen werden“. Falls noch nicht gespeicherte Daten vorliegen, erfolgt zunächst die Abfrage *“Änderungen speichern in ...”*.

Es ist auch möglich eine CAS Datei durch Doppelklicken zu öffnen. Dazu ist es erforderlich die Dateierweiterung „cas“ unter Dateieigenschaften („Öffnen mit:“) mit CAS40.exe zu verknüpfen.

#### 4.2.3 Speichern... (Ctrl+S)

Unter diesem Menüpunkt werden die Eingabedaten der Formulare **Analyse***daten A, B, C, Mischungsanteile, Zusätze* und **W 216** unter dem bestehenden Dateinamen gespeichert.

#### 4.2.4 Speichern unter ... (F4)

Unter diesem Menüpunkt werden die Eingabedaten der Formulare **Analyse***daten A, B, C, Mischungsanteile, Zusätze* und **W 216** unter einem anderen Dateinamen gespeichert.

#### 4.2.5 Exit

Beendet CAS. Falls noch nicht gespeicherte Daten vorliegen, erfolgt zunächst die Abfrage *“Änderungen speichern in ...”*.

## 4.3 Eingabe

### 4.3.1 Analysendaten A, B, C (Ctrl+A, Ctrl+B, Ctrl+C)

Eingabeformulare für die Analysen A, B und C. Die elektrische Leitfähigkeit kann wahlweise für die Temperaturen 20 oder 25°C eingegeben werden. Die Umrechnung erfolgt durch den Faktor 1,116. Es ist die Eingabe der Temperaturen bei den Titrationsen erforderlich. Die Werte für KB 8.2 und KS 8.2 schließen sich gegenseitig aus. Die Eingabe des einen Wertes setzt den jeweils anderen auf 0. Die Säurekapazität KS 4.3 darf 0,05 mmol/L nicht unterschreiten. Der gemessene pH-Wert darf 4,3 nicht unterschreiten. Die Temperaturen müssen zwischen 0 und 90°C liegen.

Die Berechnungen werden auf drei unterschiedlichen Wegen basierend auf den Parametern  $K_{B\ 8,2}$ ,  $K_{S\ 4,3}$  und pH-Wert durchgeführt. Ist das Kästchen „Berechnungen mit c(DIC) durchführen“ geklickt, werden die Berechnungen basierend auf den Gehalt an gelöstem anorganischem Kohlenstoff c(DIC) durchgeführt.

Ist das Kästchen „**Ionenstärke von CAS berechnen lassen**“ geklickt, wird die Ionenstärke zur Berechnung vom Programm für alle Rechenwege ermittelt. Dies ist die normale Einstellung von CAS.

Alternativ kann die **Ionenstärke IOS** manuell eingegeben und in dem Formular **Test** mit der berechneten verglichen werden. In dem Formular **Test** kann dann ein neuer verbesserter Wert für die Ionenstärke eingegeben werden. Wird die Ionenstärke manuell eingegeben, werden alle Berechnungen mit diesem Wert durchgeführt. Die manuelle Eingabe der Ionenstärke kann sich auch anbieten, wenn beispielsweise keine vollständige Analyse vorliegt und näherungsweise die Ionenstärke aus der elektrischen Leitfähigkeit abgeschätzt wird.

**Die Temperatur für die Berechnung, Tbew, ist die Bewertungstemperatur. Für diese Temperatur wird die Berechnung der Calcitsättigung durchgeführt. Beim Verlassen des Formulars erfolgt eine Warnung, wenn dieser Wert auf 0 steht.**

Liegt die Temperatur außerhalb des Bereiches 0..90 °C erfolgt eine Warnung. Liegt die Ionenstärke außerhalb des Bereiches 0..50 mmol/L erfolgt eine Warnung.

Die Konzentrationen an Sauerstoff (O<sub>2</sub>) und gelöstem organischen Kohlenstoff (TOC) werden nur für die Berechnung nach W 216 benötigt.

Die Parameter Ammonium, Eisen und Mangan werden nur für die Berechnung der positiven Ladungen und des Sauerstoffbedarfs benötigt. Der Sauerstoffbedarf ist die Sauerstoffmenge, die für die vollständige Oxidation von Eisen (II) zu Eisen(III), Mangan(II) zu Mangan(IV) und NH<sub>4</sub> zu NO<sub>3</sub> erforderlich ist.

Die Härte wird aus den Konzentrationen an Calcium und Magnesium berechnet.

**OK**

Schließt das Formular.

**Abbrechen**

Schließt das Formular. Änderungen bleiben unberücksichtigt.

**Test**

Öffnet das Formular Analysenkontrolle

### 4.3.1 Analysenkontrolle

#### 1. Ladungsbilanz (ohne Ionenpaare)

Summe der positiven Ladungen:  $S^+ = 2c[(Ca)+c(Mg)+c(Fe)+c(Mn)]+c(Na)+c(K)+c(NH_4)$

Summe der negativen Ladungen:  $S^- = 2c(SO_4)+c(Cl)+c(NO_3)+K_{s\ 4.3} - 0,05$   
mmol/L+f<sub>PO4</sub>\*c(PO<sub>4</sub>)

f<sub>PO4</sub> ist der Anteil der Ladungen aus der Dissoziation der Phosphorsäure

$f_{PO_4} = [c(H_2PO_4^-)+2c(HPO_4^{2-})+3c(PO_4^{3-})]/c(PO_4)$

#### 2. Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit (ohne Ionenpaare)

Die Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit erfolgt nach Rossum (1975) aus den Konzentrationen an Ca, Mg, Na, K, H, SO<sub>4</sub>, Cl, NO<sub>3</sub>, HCO<sub>3</sub>, CO<sub>3</sub> und OH.

#### 3. Berechnung der Ionenstärke (ohne Ionenpaare)

Die Berechnung der Ionenstärke aus der elektrischen Leitfähigkeit erfolgt nach einer Formel von Maier und Grohmann (1977).

$IOS = LF_{mess}/5,45$  (IOS in mmol/L, LF<sub>mess</sub> in mS/m bei 20 °C)

Die berechnete Ionenstärke für die Bewertungstemperatur T<sub>bew</sub> unter Berücksichtigung der Komplexbildung findet sich unter "4. Kohlensäuregleichgewicht" für unterschiedliche Rechenwege.

Wenn die Ionenstärke nicht von CAS berechnet wird, kann unter „IOS für Berechnung“ ein Wert eingegeben werden. Diese Eingabemöglichkeit erscheint nur, wenn die Ionenstärke nicht von CAS berechnet wird.

#### 4. Kohlensäuregleichgewicht

<b>Ks 4.3/KB 8.2</b>	Berechnung mit Säure- und Basekapazität
<b>Ks 4.3/DIC</b>	Berechnung mit Säurekapazität und DIC-Wert
<b>Ks 4.3/pH(T)</b>	Berechnung mit Säurekapazität und pH-Wert
<b>DIC/pH(T)</b>	Berechnung mit DIC-Wert und pH-Wert
<b>K<sub>B 8.2</sub>/pH(T)</b>	Berechnung mit Basekapazität und pH-Wert
<b>K<sub>B 8.2</sub>/DIC</b>	Berechnung mit Basekapazität und DIC-Wert

#### OK

Schließt das Formular.

#### 4.3.2 Mischungsanteile (Ctrl+M)

Eingabeformular für die Mischungsanteile der Wässer A, B und C. Der Anteil des Wassers C wird berechnet. Ist die Summe der Anteile der Wässer A und B größer als 100 %, wird der Anteil eines Wassers auf 100 % und die der jeweils anderen Wässer auf 0 % gesetzt.

##### **Abbrechen**

Schließt das Formular. Änderungen gehen verloren.

##### **Run**

Führt die Berechnung des Mischungsanteils des Wassers C durch.

##### **OK**

Führt die Berechnung des Mischungsanteils des Wassers C durch und schließt das Formular.

## 4.4 Berechnen

### 4.4.1 Calcitsättigung A, B, C, Mischung (Ctrl+Alt+A, Ctrl+Alt+B, Ctrl+Alt+C, Ctrl+Alt+M)

Ergebnisformulare für die Calcitsättigung der Analysen A, B und C.

**KS 4.3/KB 8.2** Berechnung mit Säure- und Basekapazität

**KS 4.3/DIC** Berechnung mit Säurekapazität und DIC-Wert

**KS 4.3/pH(T)** Berechnung mit Säurekapazität und pH-Wert

**DIC/pH(T)** Berechnung mit DIC-Wert und pH-Wert

**K<sub>B 8.2</sub>/pH(T)** Berechnung mit Basekapazität und pH-Wert

**K<sub>B 8.2</sub>/DIC** Berechnung mit Basekapazität und DIC-Wert

pH(Tbew) Berechneter pH-Wert bei Bewertungstemperatur (Tbew).

pH A Berechneter Gleichgewichts-pH-Wert nach Gleichgewichtseinstellung durch Austausch von Kohlenstoffdioxid.

SI(CaCO<sub>3</sub>) Sättigungsindex

pHC(CaCO<sub>3</sub>) Berechneter Gleichgewichts-pH-Wert nach Gleichgewichtseinstellung durch Reaktion

mit Calcit.

IOS, berechnet Ionenstärke unter Berücksichtigung der Ionenpaare.

DC Calcitlösekapazität. Ein negativer Wert weist auf eine Abscheidekapazität hin.

### pH=7.8

Öffnet das Formular mit dem berechneten Chemikalienbedarf bis zum Erreichen des pH-Wertes 7.8.

**Im Formular pH=7.8:**

<b>IOS</b>	Ionenstärke nach Einstellung von pH=7.8
<b>m-Wert</b>	m-Wert nach Einstellung von pH=7.8
<b>p-Wert</b>	p-Wert nach Einstellung von pH=7.8
<b>c(Na)</b>	Natrium-Konzentration nach Einstellung von pH=7.8

### SI=0

Öffnet das Formular mit dem berechneten Chemikalienbedarf bis zum Erreichen des Kalk-Kohlensäuregleichgewichts (SI=0).

**Im Formular SI=0:**

<b>IOS</b>	Ionenstärke nach Einstellung von SI=0
<b>m-Wert</b>	m-Wert nach Einstellung von SI=0
<b>p-Wert</b>	p-Wert nach Einstellung von SI=0
<b>c(Na)</b>	Natrium-Konzentration nach Einstellung von SI=0
<b>pH</b>	pH-Wert nach Dosierung bis SI=0

### Speichern

Speichert die berechneten Daten des Formulars Calcitsättigung sowie die berechneten Daten aller Formulare zur Ermittlung des Chemikalienbedarfs.

**Drucken**

Druckt die berechneten Daten des Formulars Calcitsättigung sowie die berechneten Daten aller Formulare zur Ermittlung des Chemikalienbedarfs.

**Quit**

Schließt das Formular.

#### 4.4.2 Mischung A-B, A-C, B-C (Shift+F2, Shift+F3, Shift+F4)

Ergebnisformulare für die Berechnung der Mischungen A-B, B-C und A-C.

Tbew	Bewertungstemperatur
Härte	Berechnete Härte, mmol/L
c(SO <sub>4</sub> )	Konzentration der Sulfationen, mg/L
c(NO <sub>3</sub> )	Konzentration der Nitrationen, mg/L
Dc	Calcitlösekapazität. Ein negativer Wert weist auf eine Abscheidekapazität hin.

**KS 4.3/KB 8.2** Berechnung mit Säure- und Basekapazität

**KS 4.3/DIC** Berechnung mit Säurekapazität und DIC-Wert

**KS 4.3/pH(T)** Berechnung mit Säurekapazität und pH-Wert

**DIC/pH(T)** Berechnung mit DIC-Wert und pH-Wert

**K<sub>B 8.2</sub>/pH(T)** Berechnung mit Basekapazität und pH-Wert

**K<sub>B 8.2</sub>/DIC** Berechnung mit Basekapazität und DIC-Wert

#### **Speichern**

Speichert die berechneten Daten des Formulars.

#### **Drucken**

Druckt die berechneten Daten des Formulars.

#### **Quit**

Schließt das Formular.

#### 4.4.3 Konzentrationen der Ionenpaare A, B, C (Ctrl+F2, Ctrl+F3, Ctrl+F4)

Ergebnisformulare für die Berechnung der Konzentrationen der Ionenpaare für die Analysen A, B und C.

c(DIC)            Kohlensäuresumme  
Tbew             Bewertungstemperatur  
pH(Tbew)       Berechneter pH-Wert bei Bewertungstemperatur (Tbew)

**KS 4.3/KB 8.2**        Berechnung mit Säure- und Basekapazität

**KS 4.3/DIC**        Berechnung mit Säurekapazität und DIC-Wert

**KS 4.3/pH(T)**      Berechnung mit Säurekapazität und pH-Wert

**DIC/pH(T)**        Berechnung mit DIC-Wert und pH-Wert

**K<sub>B 8.2</sub>/pH(T)**     Berechnung mit Basekapazität und pH-Wert

**K<sub>B 8.2</sub>/DIC**        Berechnung mit Basekapazität und DIC-Wert

#### **Speichern**

Speichert die berechneten Daten des Formulars Konzentrationen.

#### **Drucken**

Druckt die berechneten Daten des Formulars Konzentrationen.

#### **Quit**

Schließt das Formular.

## 4.5 Extras

### 4.5.1 Kohlensäureformen (F5)

Formular für die Berechnung der Anteile der Kohlensäureformen.

$$\text{Äquivalenzfaktor} = [c(\text{HCO}_3) + 2c(\text{CO}_3)] / c(\text{DIC})$$

$$c(\text{DIC}) = c(\text{CO}_2) + c(\text{HCO}_3) + c(\text{CO}_3)$$

$$\text{Anteil an CO}_2 = c(\text{CO}_2) / c(\text{DIC})$$

$$\text{Anteil an HCO}_3 = c(\text{HCO}_3) / c(\text{DIC})$$

$$\text{Anteil an CO}_3 = c(\text{CO}_3) / c(\text{DIC})$$

#### **Run**

Startet die Berechnung.

#### **Quit**

Schließt das Formular.

#### 4.5.2 Zusätze (F6)

Formular zur Durchführung von Dosierungsrechnungen.

##### **Berechnung ohne Verdünnung:**

$c(x)$  Dosiermenge = Menge des Zusatzes in mmol/Volumen des Wassers in L

##### **Berechnung mit Verdünnung:**

$c(x)$  Konzentration der Dosierlösung in mmol/L

$V(x)$  Dosiervolumen in Volumen der Dosierlösung in L/Volumen des Wassers in  $m^3$

##### **Data A, B, C**

Ermöglicht das Übernehmen der Daten der Analysen A, B bzw. C. Für den m-Wert und die Kohlensäuresumme  $c(\text{DIC})$  gelten dabei folgende Annahmen:

$m = \text{KS } 4,3 - 0,05 \text{ mmol/L}$

$c(\text{DIC}) = \text{KS } 4,3 - 0,05 \text{ mmol/L} + \text{KB } 8,2 - \text{KS } 8,2$

##### **Run**

Startet die Berechnung.

##### **Speichern**

Speichert die berechneten Daten des Formulars Zusätze.

##### **Drucken**

Druckt die berechneten Daten des Formulars Zusätze.

##### **Abbrechen**

Schließt das Formular. Änderungen gehen verloren.

##### **OK**

Schließt das Formular.

## 4.5.3 W 216 (F7)

Formular zur Durchführung von Berechnungen nach W 216.

c(O <sub>2</sub> )	Sauerstoffkonzentration
KS 4.3	Säurekapazität bis pH 4.3
c(Cl)	Konzentration an Chlorid
c(SO <sub>4</sub> )	Konzentration an Sulfat
c(PO <sub>4</sub> )	Konzentration an Phosphat
TOC	Konzentration an organischen Wasserinhaltsstoffen
q <sub>A</sub>	Anionenquotient= $[c(\text{Cl})+2*c(\text{SO}_4)]/\text{KS } 4.3$

**Berechnung mit den Analysendaten A, B und C (Data A, B und C)**

**Die Berechnungen werden für die Mischung 1 und die Mischung 2 durchgeführt. Diese bestehen aus Anteilen der Wässer I und II.**

Soll beispielsweise eine Berechnung für die Analysendaten A und B durchgeführt werden, wird für Wasser I Data A (100 % Anteil in Mischung 1) und für Wasser II Data B (100 % in Mischung 2) ausgewählt. Dazwischen kann die Berechnung für jeweils zwei beliebige Mischungen (1 und 2) durchgeführt werden.

<b>c1, c2</b>	<b>Konzentrationsmaße für die Mischungen 1 und 2</b>
<b>P1, P2</b>	<b>Berechnete Parameterwerte</b>
<b> P1 - P2 </b>	<b>Bewertungsmaß (erfüllt für Werte <math>\leq 1</math>)</b>

**Berechnung mit minimalen und maximalen Werten (min - max)**

**Die Berechnungen werden für die minimalen und die maximalen Werte der einzelnen Parameter aus mehreren Analysen durchgeführt. Dies ist die übliche Art der Anwendung des Arbeitsblattes W 216.**

<b>P1, P2</b>	<b>Berechnete Parameterwerte</b>
<b> P1 - P2 </b>	<b>Bewertungsmaß (erfüllt für Werte <math>\leq 1</math>)</b>

Ist das Bewertungsmaß **nicht** für alle Parameter erfüllt liegt ein Wasser zeitlich wechselnder bzw. liegen Wässer unterschiedlicher Beschaffenheit vor.

Grundsätzlich müssen die Parameter zur Beurteilung nach W 216 über einen längeren Zeitraum vorliegen, um Schwankungen der Trinkwasserbeschaffenheit erkennen zu können. Die Qualität der Analysen muss den Anforderungen von DIN 50930-6 entsprechen.

Zusätzlich sind u.a. die Calcitlösekapazität, korrosionschemische Aspekte und die Härte zu beachten.

**A, B, C**

Übernehmen der Daten der Analysen A, B bzw. C.

**I min – max II**

Aktivieren der Eingabe für andere Werte als die Analysendaten A, B und C.

**Run**

Startet die Berechnung.

**Speichern**

Speichert die berechneten Daten des Formulars W 216.

**Drucken**

Druckt die berechneten Daten des Formulars W 216.

**Abbrechen**

Schließt das Formular. Änderungen gehen verloren.

**OK**

Schließt das Formular.

#### 4.5.4 Konstanten (F8)

Eingabeformular für die Berechnung der Gleichgewichtskonstanten, die in CAS verwendet werden. Angezeigt werden die auf Konzentrationen (Abhängig von der Ionenstärke) basierenden Konstanten.

##### **Run**

Startet die Berechnung.

##### **Quit**

Schließt das Formular.

#### 4.5.5 Datenzusammenfügen (Ctrl-D)

Formular zum Zusammenfügen von Datensätzen aus verschiedenen Dateien.

##### **File 1, 2, 3**

Öffnet jeweils eine CAS-Datei.

##### **Data A, B, C**

Übernehmen der Daten der Analysen A, B bzw. C aus der ausgewählten CAS-Datei.

##### **Text**

Zeigt den jeweiligen Kommentar des ausgewählten Datensatzes an.

##### **Speichern unter**

Speichert die ausgewählten Datensätze in eine neue Datei.

##### **Quit**

Schließt das Formular.

#### 4.5.6 Optionen (F9)

Eingabeformular für Benutzerdefinierte Angaben. Die Einstellungen dieses Formulars können in der Datei CAS.INI gespeichert werden und sind bei jedem Neustart von CAS wirksam.

##### **Passwort / User ID**

Eingabe des Benutzernamens und des Passwortes für die Vollversion von CAS.

##### **Verzeichnis / Directory**

Einstellung des Arbeitsverzeichnisses.

##### **Sprache / Language**

Einstellung der Sprache.

##### **Cancel**

Schließt das Formular. Änderungen gehen verloren.

##### **OK**

Schließt das Formular.

#### 4.6 ?

##### **Info...**

Öffnet das Infoformular.

## Literatur

**DIN 38404-10:** Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung – Physikalische und physikalisch-chemische StoffkenngröÙe (Gruppe C) – Teil10: Berechnung der Calcitsättigung eines Wassers (C 10), Beuth Verlag, Berlin. 2012.

**DIN 50930-6:** DIN 50 930-6: Korrosion der Metalle, Korrosion metallischer Werkstoffe im Innern von Rohrleitungen, Behältern und Apparaten bei Korrosionsbelastung durch Wässer. Teil 6: Bewertungsverfahren und Anforderungen hinsichtlich der hygienischen Eignung in Kontakt mit Trinkwasser. Oktober 2013.

**DVGW:** DVGW-Arbeitsblatt W 216: Versorgung mit unterschiedlichen Trinkwässer. DVGW-Regelwerk, Wirtschaft- und Verlagsgesellschaft Gas und Wasser mbH, Bonn. August 2004.

**Eberle, S. H.:** A correctness test of the computation of chemical speciation for the main constituents of natural waters. *Wat. Res.* 23, 11, 1373 - 1382, 1989.

**Eberle, S. H.:** Die wasserchemische Berechnung der Kohlensäuregleichgewichte unter Berücksichtigung der Komplexbildung von Calcium und Magnesium sowie der Anwesenheit von Phosphat, Ammonium und Borsäure. Kernforschungszentrum, Institut für Radiochemie, KfK-3930 UF, 1986.

**Eberle, S. H., Donnert, D.:** Die Berechnung des pH-Wertes der Calcitsättigung eines Trinkwassers unter Berücksichtigung der Komplexbildung. *Z. Wasser- und Abwasser-Forsch.* 24, 258 - 268, 1991.

**Maier, D., Grohmann, A.:** Bestimmung der Ionenstärke natürlicher Wässer aus deren elektrischer Leitfähigkeit. *Z. Wasser- und Abwasser-Forsch.* 10, 1, 9 - 13, 1977.

**Plummer, L. N., Busenberg, E.:** The solubilities of calcite, aragonite and vaterite in CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O solutions between 0 and 90°C, and an evaluation of the aqueous model for the system CaCO<sub>3</sub>-CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O. *Geochim. Cosmochim. Acta.* 46, 1011 - 1040, 1982.

**Rossum, J. R.:** Checking the accuracy of water analyses through the use of conductivity. *Am. J. Water Works Assoc.* 67, 4, 204 - 205, 1975.

**Sontheimer, H., Spindler, P., Rohmann, U.:** Wasserchemie für Ingenieure. ZfGW-Verlag, Frankfurt/Main, 1980.

**Stumm, W., Morgan, J.J.:** Aquatic Chemistry. John Wiley & Sons, New York, 1996