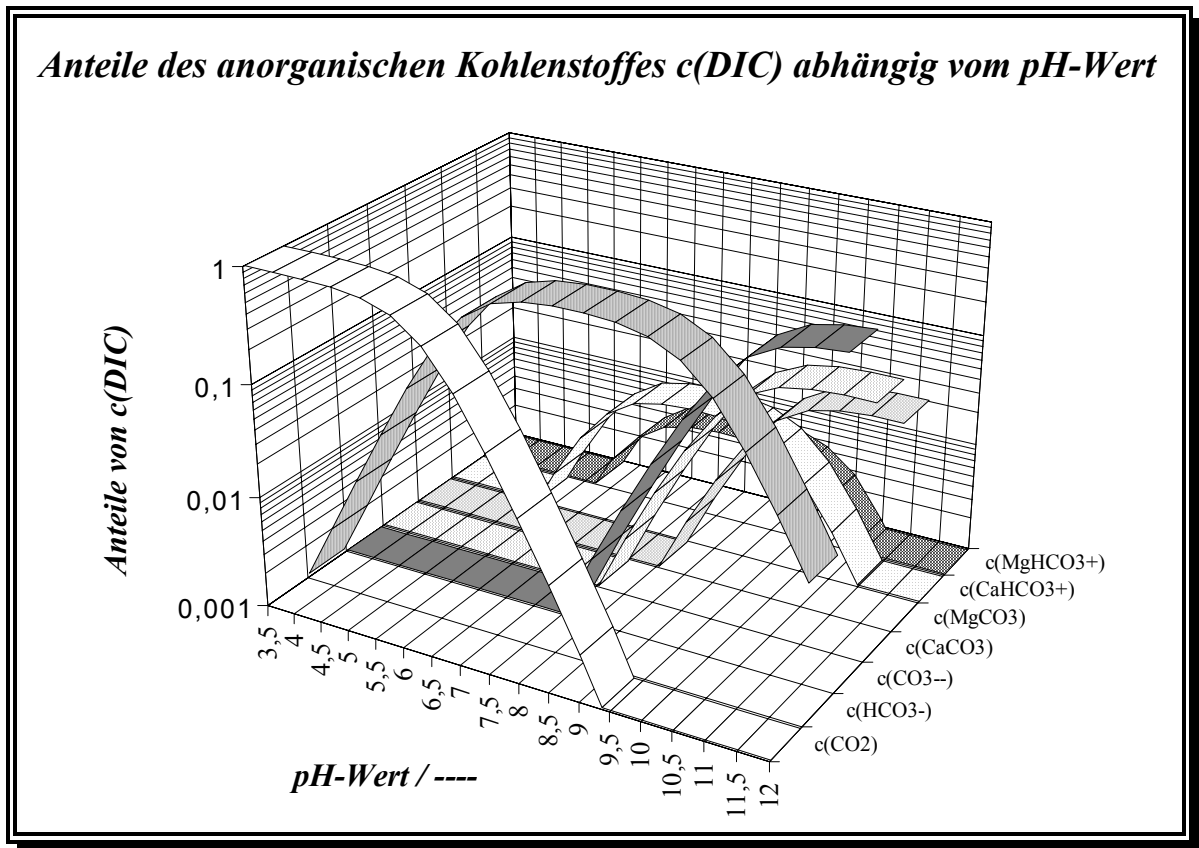


Kalk - Kohlensäure Gleichgewicht



Vertrag zur Nutzung des Computerprogrammes WASSER2000 und zur Haftung

1 Nutzung

1.1 Hard- und Softwarevoraussetzungen

Das Computerprogramm WASSER2000 läuft unter den Betriebssystemen Windows 95/98/NT und Windows 2000. Zur korrekten Installation und zum Betrieb des Programmes sind ein 3 ½“ Diskettenlaufwerk und ein CD-Rom Laufwerk erforderlich. Der Festplattenspeicher muss für eine vollständige Installation wenigstens 20 MB betragen.

1.2 Voraussetzung theoretischer Kenntnisse

Zur Benutzung des Programmes werden theoretische Kenntnisse in der chemischen Wasseraufbereitung vorausgesetzt. Dies gilt insbesondere für die Anwendung der Berechnungsprogramme zur Dimensionierung von Aufbereitungsanlagen. Die variablen Parameter bei Anlagen zur Entsäuerung, Entcarbonisierung, Enthärtung, Sandfiltration, Enteisung und Aktivkohlefiltration müssen anhand von eigenen Erfahrungswerten oder Versuchsergebnissen festgelegt werden. Das Programm unterbreitet hierzu lediglich Vorschläge.

1.3 Nutzungsrecht

Die nachfolgend aufgeführten Nutzungsbedingungen erkennen Sie mit dem Erwerb des Programmes an.

- Die Installation des Software-Programmes darf nur auf einem Arbeitsplatz vorgenommen werden.
- Die vollständige oder teilweise Vervielfältigung und der Verkauf des Programmes sind untersagt.
- Diskettenkopien sind aufgrund eines Kopierschutzes nicht möglich.
Bewahren Sie die Originaldiskette deshalb sorgfältig auf.

2 Mitgelieferte Softwareprodukte Dritter

Windows, Windows 98, Windows NT, Windows 2000 und Internet Explorer sind Warenzeichen oder eingetragene Warenzeichen der Microsoft Corporation.

Adobe, Acrobat und das Acrobat-Logo sind Warenzeichen der Adobe Systems Incorporated.

Netscape, Netscape Communicator und das Netscape-Logo sind Warenzeichen oder eingetragene Warenzeichen der Netscape-Communications Corporation.

Bitte beachten Sie die Lizenzbedingungen der jeweiligen Produkte. Andere hier genannte Produkte können Warenzeichen der jeweiligen Hersteller sein.

Für die Funktionsfähigkeit der auf dem Installationsmedium mitgelieferten Software Dritter oder ihre Eignung für einen bestimmten Anwendungszweck sowie für durch sie entstandene unmittelbare und mittelbare Schäden, Folgeschäden und Drittschäden kann keine Haftung übernommen werden.

3 Mitgelieferte CD-Rom-Fassung des Buches „Wasseraufbereitung“

Das zur theoretischen Hilfestellung mitgelieferte elektronische Buch „Wasseraufbereitung“ ist nach dem Urheberrechtsgesetz der Bundesrepublik Deutschland geschützt. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtsgesetzes.

Das Copyright liegt beim Springer-Verlag.

4 Haftung

Trotz grösster Sorgfalt beim Erarbeiten der technischen Grundlagen und dem Bemühen, Ihnen eine einwandfreie Software zu liefern, kann keine Gewähr übernommen werden, dass das Programm in allen Kombinationen und Anwendungen fehlerfrei arbeitet. Unter Hinweis auf den gegenwärtigen Stand der Technik und der komplexen Thematik kann, soweit gesetzlich zulässig, keine Haftung für unmittelbare und mittelbare Schäden, Folgeschäden und Drittschäden übernommen werden. Bei grober Fahrlässigkeit und Vorsatz beschränkt sich die Haftung auf den Kaufpreis.

Sollten Sie mit den Vertragsbedingungen nicht einverstanden sein, sind Sie zur umgehenden Zurücksendung des Programmes verpflichtet. Haben Sie nach Ablauf einer Frist von 2 Wochen das Programm nicht zurückgesandt, gilt der Vertrag als anerkannt.

5 Gerichtsstand

Gerichtsstand für alle eventuellen, sich aus dem Vertragsverhältnis ergebenden, Streitigkeiten ist Trier.

Vorwort

In der Wasserversorgung spielt die Bestimmung des Kalk-Kohlensäuregleichgewichts eine wichtige Rolle. Die Novellierung der Trinkwasserverordnung vom Dezember 1990 schreibt die rechnerische Ermittlung des Calcitsättigungsindex vor. Während frühere Berechnungsverfahren noch mit Hilfe von Tabellen und Taschenrechner durchgeführt werden konnten, ist bei den neueren Berechnungsansätzen, welche die Komplexbildung von Calcium und Magnesium berücksichtigen, ohne programmierbare Rechner kein Auskommen. Das Programm WASSER2000 richtet sich vor allem an Wasserversorgungsunternehmen, Analysebüros und jene Gewerbe, deren Aufgabe in der Beurteilung von Trinkwasser besteht.

Die theoretischen Grundlagen zur Berechnung des Calcitsättigungsindex basieren auf der DIN 38404 Teil 10 Ausgabe April 1995 und werden im **Kapitel 1** eingehend erläutert.

Eine Anleitung zur ordnungsgemäßen Installation des Programms finden Sie in **Kapitel 2**, die Struktur, Handhabung und die Berechnungsmöglichkeiten des Programms sind in **Kapitel 3** erläutert.

Anhand ausführlicher Beispielrechnungen werden in den **Kapiteln 4 bis 6** die Vorgehensweisen zur Berechnung der Calcitsättigung eines Wassers und deren Temperaturabhängigkeit, zur Mischwasserberechnung, Entcarbonisierung, zum Ionenaustausch, zur Korrosion und zur Filterdimensionierung beschrieben.

Die Dokumentation zum Programm WASSER2000 will und kann kein Lehrbuch sein. Demzufolge wird vom Anwender die Kenntnis der jeweiligen wasserchemischen Grundlagen ebenso wie Grundkenntnisse im Umgang mit dem Computer vorausgesetzt. Die Wasserchemischen Grundlagen sind ausführlich beschrieben im Buch:

Wasseraufbereitung – Chemie und Verfahrenstechnik

Prof. Dr. K. Hancke, 5. Auflage, Springer –Verlag Berlin Heidelberg New York

In diesem Handbuch sind eingetragene Warenzeichen und Patente nicht als solche gekennzeichnet. Vervielfältigungen des Programms und der Dokumentation sind nur mit der ausdrücklichen Genehmigung des Verfassers erlaubt. Mit der Benutzung des Programms erkennen Sie die Vertragsbedingungen auf der vorhergehenden Seite verbindlich an.

Bedanken möchte ich mich an dieser Stelle recht herzlich bei Herrn Prof. Dr. K. Hancke, Dozent für Chemie und Wasserversorgung im Fachbereich Versorgungstechnik der FH Trier, für die freundliche Unterstützung und Beratung.

Inhaltsverzeichnis

1. Berechnungsgrundlagen zum Programm	7
1.1. Verwendete Formelzeichen	7
1.2. Allgemeine Theorie	8
1.3. Spezielle Theorie	9
1.3.1. Bilanzen zur Ermittlung der Basisgleichung.....	11
1.3.1.1. Massenbilanz.....	11
1.3.1.2. Elektroneutralitätsbedingung	13
1.3.1.3. Basisgleichung zur Best. des Gleichgewichtssystems.....	15
1.3.1.4. Anwendung der Basisgleichung.....	16
2. Installation des Programms.....	18
3. Handhabung des Programms.....	20
3.1. Die beiden Varianten	20
3.1.1. Funktionsumfang der Variante 1	20
3.1.2. Funktionsumfang der Variante 2	20
3.2. Die Benutzeroberfläche	21
3.2.1. Die Menüleiste.....	22
3.2.1.1. Datei.....	22
3.2.1.2. Projekt.....	23
3.2.1.3. Bearbeiten	23
3.2.1.4. Berechnen.....	24
3.2.1.5. Aufbereitung	24
3.2.1.6. Graphik.....	25
3.2.1.7. Extras	25
3.2.1.8. Fenster.....	25
3.2.1.9. Hilfe	25
3.2.2. Die Direktzugriffsleiste.....	26
3.3. Die Projekt- und Dateiverwaltung.....	26
3.3.1. Die Projektverwaltung	27
3.3.2. Die Dateiverwaltung.....	28
3.4. Der Formulardesigner	30
3.5. Die Fensterarten.....	38
3.5.1. Das Wasserfenster.....	39
3.5.2. Das Temperaturfenster.....	40
3.5.3. Das Mischwasserfenster.....	41
3.5.4. Das Korrosionsfenster.....	42

4.	Berechnungsbeispiel zur Calcitsättigung	43
4.1.	Ausgangsdaten	43
4.2.	Berechnung des pH-Wertes bei Calcitsättigung	43
4.3.	Mischwasserberechnung	46
4.3.1.	Festes Mischungsverhältnis	47
4.3.2.	Variables Mischungsverhältnis	48
4.4.	Berechnung der Temperaturabhängigkeit	51
4.5.	Zugabe Säure / Lauge	55
4.5.1.	Für einen bestimmten pH-Wert	56
4.5.2.	Eine bestimmte Menge	58
5.	Aufbereitung	60
5.1.	Entsäuerung	60
5.2.	Entcarbonisierung	63
5.2.1.	Entcarbonisierung durch Säureimpfung	63
5.2.2.	Entcarbonisierung mit Calciumhydroxid	64
5.3.	Schnellentcarbonisierung	66
5.4.	Ionenaustausch	70
5.4.1.	H-Entcarbonisierung	70
5.4.2.	Enthärtung	73
5.5.	Filterberechnungen	78
5.5.1.	Aktivkohlefiltration	78
5.5.2.	Chemische Enteisung nach Velten und Holluta	78
5.5.3.	Sandfilter	79
5.5.4.	Beispiele zur Filterberechnung	79
5.5.4.1.	Aktivkohlefilter	79
5.5.4.2.	EnteisungsfILTER	86
5.5.4.3.	Sandfilter	88
6.	Korrosionsbetrachtung	92

1. Berechnungsgrundlagen zum Programm

1.1. Verwendete Formelzeichen

Symbol	Bezeichnung	Einheit
K	Massenwirkungsgesetzkonstante	mol/l
K*	Thermodynamische Konstante	mol/l
c	Stoffmengenkonzentration	mol/l
ρ^*	Massenkonzentration	mg/l
a	Ionenaktivität	mol/l
f	Individueller Aktivitätskoeffizient	-----
f₁	Aktivitätskoeffizient für einwertige Ionen	-----
z	Ladungszahl	-----
I	Ionenstärke	mol/l
FC₁	Komplexbildungsfaktor-Hydrogencarbonate	-----
FC₂	Komplexbildungsfaktor-Carbonate	-----
m	m-Wert	mol/l
c(DIC)	Summe gel. anorg. Kohlenstoff	mol/l
Φ	$c(\text{OH}^-) - c(\text{H}^+)$	mol/l
ϕ	Ladungsbilanzfaktor	-----
Q	Volumenstrom	m ³ /h
d	Durchmesser	mm
h	Schichthöhe	m
q_A	Filtergeschwindigkeit	m/h
Q_B	Spez. Aktivkohlebelastung	m ³ /(h*m)

1.2. Allgemeine Theorie

Das Massenwirkungsgesetz kann in der einfachen Form der Stoffmengenkonzentrationen nur auf homogene Systeme in unendlich verdünnter Lösung angewendet werden.



Die Massenwirkungsgesetzkonstante K (im Beispiel identisch mit der Dissoziationskonstante) ist abhängig vom Druck, von der Temperatur und von der Gesamtionenstärke (Fremdioneneinfluß) der Lösung.

Natürliche Wässer und die Wässer der meisten technischen Wasserkreisläufe sind endlich verdünnte Lösungen. Deshalb müssen die Stoffmengenkonzentrationen $c(X)$ durch die Ionenaktivitäten $a(X)$ ersetzt werden.

$$K^* = \frac{a(D^+) * a(E^-)}{a(DE)}$$

Die Ionenaktivität $a(X)$ ist das Produkt aus der Stoffmengenkonzentration $c(X)$ und einem individuellen Aktivitätskoeffizienten $f(X)$.

$$K^* = \frac{c(D^+) * f(D^+) * c(E^-) * f(E^-)}{c(DE) * f(DE)} \qquad K^* = \frac{c(D^+) * c(E^-)}{c(DE)} * \frac{f(D^+) * f(E^-)}{f(DE)}$$

$$K^* = K * \frac{f(D^+) * f(E^-)}{f(DE)} \qquad K = \frac{K^*}{\frac{f(D^+) * f(E^-)}{f(DE)}}$$

Der Aktivitätskoeffizient $f(X)$ ist immer kleiner als 1. Er drückt aus, daß ein Teil der gelösten Teilchen mit anderen gelösten Teilchen Wechselbeziehungen eingeht und deswegen nicht für die Gleichgewichtseinstellung zur Verfügung steht.

Die Massenwirkungsgesetzkonstante K ist ausgedrückt als der Quotient aus einer nur von Druck und Temperatur abhängigen thermodynamischen Konstanten K^* und den Aktivitätskoeffizienten.

Der Aktivitätskoeffizient für einwertige Ionen läßt sich nach folgender Gleichung errechnen:

$$\log f_1 = \frac{-0,5 * \sqrt{I}}{1 + 1,4 * \sqrt{I}}$$

Die Aktivitätskoeffizienten für mehrwertige Ionen errechnen sich nach folgender Gleichung:

$$f(X) = (f_1)^{z^2}$$

Da bei der *pH*-Messung mit einer Glaselektrode unmittelbar die Aktivitäten $a(H^+)$ gemessen werden, entfallen bei Gleichungen, in denen die Stoffmengenkonzentrationen von $c(H^+)$ und $c(OH^-)$ vorkommen, die Aktivitätskoeffizienten $f(H^+)$ und $f(OH^-)$.

Die allgemeine Formulierung für die Massenwirkungsgesetzkonstante K lautet daher:

$$K = \frac{K^*}{(f_1)^{z^2}}$$

Lösbar sind thermodynamische Gleichungen in wässrigen Lösungen nur, wenn entweder der Druck oder die Temperatur konstant gehalten werden. Deshalb werden bei den Betrachtungen Druckänderungen vernachlässigt. Temperaturänderungen werden durch das Van't-Hoff-Gesetz berücksichtigt.

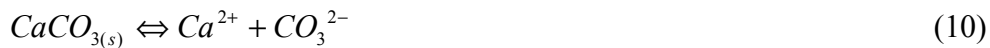
$$\log K^* = \log K_0^* + A * \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) + B * \left(\ln \left(\frac{T}{T_0} \right) + \frac{T_0}{T} - 1 \right)$$

1.3. *Spezielle Theorie*

In früheren Berechnungsverfahren wurden lediglich die beiden Dissoziationsgleichungen der Kohlensäure und das Löslichkeitsprodukt von Calciumcarbonat in die Gleichgewichtsbetrachtungen einbezogen. Unberücksichtigt blieben alle anderen schwach dissoziierten Salze im Wasser.

In die nachfolgenden Betrachtungen werden alle schwach dissoziierten Salze der Metalle Calcium und Magnesium einbezogen. Die stark dissoziierten Natrium- und Kaliumsalze und die ebenfalls stark dissoziierten Chloride und Nitrate der Metalle Calcium und Magnesium bleiben bei den Gleichgewichtsbetrachtungen unberücksichtigt. Es wird angenommen, daß die genannten Salze vollständig dissoziiert sind.

Folgende Gleichgewichte werden betrachtet:



Die Gleichungen (1) und (2) betreffen das Gleichgewicht des Gases CO₂ in Wasser in einem abgeschlossenen System.

Die Gleichungen (3) bis (9) betreffen das Gleichgewicht komplexer Verbindungen und Ionen in echter wässriger Lösung. Komplexverbindungen sind Verbindungen oder Ionen, die aus mehr als 2 Atomarten bestehen.

Gleichung (10) beschreibt das Gleichgewicht eines ungelösten Bodenkörpers aus Calciumcarbonat mit der wässrigen Lösung.

Die Herleitung der Gleichungen für die Dissoziationskonstanten K_1 bis K_{10} wird nachfolgend anhand der Gleichung (1) demonstriert.

$$K_1^* = \frac{a(\text{HCO}_3^-) * a(\text{H}^+)}{a(\text{CO}_2)} = \frac{c(\text{HCO}_3^-) * f(\text{HCO}_3^-) * c(\text{H}^+) * f(\text{H}^+)}{c(\text{CO}_2) * f(\text{CO}_2)}$$

$$K_1^* = \frac{c(\text{HCO}_3^-) * c(\text{H}^+)}{c(\text{CO}_2)} * \frac{f(\text{HCO}_3^-) * f(\text{H}^+)}{f(\text{CO}_2)}$$

$$K_1^* = K_1 * f_{K_1} \quad \Rightarrow \quad K_1 = \frac{K_1^*}{f_{K_1}}$$

Auf die gleiche Art lassen sich aus den Gleichungen (2) bis (10) die nachfolgenden Beziehungen ableiten:

$$K_2 = \frac{K_2^*}{f_{K_2}}; K_3 = \frac{K_3^*}{f_{K_3}}; K_4 = \frac{K_4^*}{f_{K_4}}; \dots; K_{10} = \frac{K_{10}^*}{f_{K_{10}}}$$

Mittels dieser Gleichungen und der in Tab.1 angegebenen Konstanten zur Beschreibung der Gleichgewichte der Gleichungen (1) bis (10) können die Massenwirkungsgesetzkonstanten K_1 bis K_{10} errechnet werden.

Konstante	$\log K_0^*$	A	B	Σz^2
K_1^*	-6,356	483,20	-17,20	1
K_2^*	-10,329	780,90	15,10	3
K_3^*	-1,212	-415,20	0,00	4
K_4^*	-3,200	-835,70	0,00	8
K_5^*	-2,310	-397,00	-8,90	8
K_6^*	-1,068	-378,70	0,00	4
K_7^*	-2,947	-679,00	-3,70	8
K_8^*	-2,265	-1071,00	-6,30	8
K_9^*	-13,996	2954,00	-10,40	0
K_{10}^*	-8,481	-522,30	-14,10	8

Thermodynamische Konstanten zur Beschreibung des Gleichgewichts.

1.3.1. Bilanzen zur Ermittlung der Basisgleichung

In der chemischen Verfahrenstechnik löst man Stoffumsatzprobleme häufig durch den Ansatz einer Massenbilanz in einem geschlossenen System und durch einen kinetischen Ansatz. Nachfolgend wird durch eine Massenbilanz und durch die Elektroneutralitätsbedingung eine Gleichung entwickelt, mit deren Hilfe aus einfach und sicher zu analysierenden Wasseranalysenwerten die Calciumcarbonatsättigung errechnet werden kann.

1.3.1.1. Massenbilanz

Die Massenbilanz setzt ein geschlossenes System voraus. In einem geschlossenen System ist z.B. die Summe der Calciummasse aller Calciumverbindungen konstant, obwohl sich die Einzelmassenanteile an verschiedenen Verbindungen in Abhängigkeit von der Temperatur und der Gesamtionenstärke verändern. Z.B. werden in den Gleichgewichtsbeziehungen folgende Verbindungen des Calciums berücksichtigt: Ca^{2+} , $CaHCO_3^+$, $CaCO_3$, $CaSO_4$.

Die Gesamtmasse an Calcium im System $m(Ca)$ errechnet sich aus folgender Gleichung:

$$m(Ca) = m(Ca^{2+}) + m(CaHCO_3^+) * \frac{M(Ca)}{M(CaHCO_3^+)} + m(CaCO_3) * \frac{M(Ca)}{M(CaCO_3)} + m(CaSO_4) * \frac{M(Ca)}{M(CaSO_4)}$$

Bezieht man die Massenbilanz auf ein bestimmtes Probenvolumen, so ergibt sich:

$$\rho^*(Ca) = \rho^*(Ca^{2+}) + \rho^*(CaHCO_3^+) * \frac{M(Ca)}{M(CaHCO_3^+)} + \rho^*(CaCO_3) * \frac{M(Ca)}{M(CaCO_3)} + \rho^*(CaSO_4) * \frac{M(Ca)}{M(CaSO_4)}$$

Dividiert man diese Gleichung durch $M(Ca)$, so entsteht folgende Beziehung:

$$\frac{\rho^*(Ca)}{M(Ca)} = \frac{\rho^*(Ca^{2+})}{M(Ca^{2+})} + \frac{\rho^*(CaHCO_3^+)}{M(CaHCO_3^+)} + \frac{\rho^*(CaCO_3)}{M(CaCO_3)} + \frac{\rho^*(CaSO_4)}{M(CaSO_4)}$$

Da der Quotient $\frac{\rho^*(Ca)}{M(Ca)}$ die Stoffmengenkonzentration $c(X)$ ergibt, ergeben sich insgesamt folgende Gleichungen:

$$c(Ca) = c(Ca^{2+}) + c(CaHCO_3^+) + c(CaCO_3) + c(CaSO_4) \quad (11)$$

$$c(Mg) = c(Mg^{2+}) + c(MgHCO_3^+) + c(MgCO_3) + c(MgSO_4) \quad (12)$$

$$c(SO_4) = c(SO_4^{2-}) + c(CaSO_4) + c(MgSO_4) \quad (13)$$

$$c(CO_3) = c(DIC) = c(CO_2) + c(HCO_3^-) * FC_1 + c(CO_3^{2-}) * FC_2 \quad (14)$$

Die Komplexbildungsfaktoren FC_1 und FC_2 errechnen sich nach folgenden Gleichungen.

$$FC_1 = 1 + \frac{c(CaHCO_3^+) + c(MgHCO_3^+)}{c(HCO_3^-)} \quad (15)$$

$$FC_2 = 1 + \frac{c(CaCO_3) + c(MgCO_3)}{c(CO_3^{2-})} \quad (16)$$

Führt man in die Massenbilanzgleichungen die Gleichgewichtsbeziehungen ein, erhält man die weiter unten angegebenen Basisgleichungen. Die Umformung ist beispielhaft an der Massenbilanzgleichung für Calcium durchgeführt.

$$c(Ca) = c(Ca^{2+}) + c(CaHCO_3^+) + c(CaCO_3) + c(CaSO_4) \quad (11)$$

Aus Gleichung (3) ergibt sich: $c(CaHCO_3^+) = \frac{c(Ca^{2+}) * c(HCO_3^-)}{K_3}$

Aus Gleichung (2) ergibt sich: $c(HCO_3^-) = \frac{c(CO_3^{2-}) * c(H^+)}{K_2}$

Setzt man beide Gleichungen ineinander ein, dann erhält man für das Glied $c(CaHCO_3^+)$ der Gleichung (11):

$$c(CaHCO_3^+) = \frac{c(Ca^{2+}) * c(CO_3^{2-}) * c(H^+)}{K_2 * K_3}$$

Aus Gleichung (4) erhält man für das Glied $c(\text{CaCO}_3)$ in Gleichung (11):

$$c(\text{CaCO}_3) = \frac{c(\text{Ca}^{2+}) * c(\text{CO}_3^{2-})}{K_4}$$

Aus Gleichung (5) erhält man für das Glied $c(\text{CaSO}_4)$ in Gleichung (11):

$$c(\text{CaSO}_4) = \frac{c(\text{Ca}^{2+}) * c(\text{SO}_4^{2-})}{K_5}$$

Diese Gleichungen für die einzelnen Glieder der Gleichung (11) in Gleichung (11) eingesetzt ergibt:

$$c(\text{Ca}) = c(\text{Ca}^{2+}) * \left(1 + \frac{c(\text{CO}_3^{2-}) * c(\text{H}^+)}{K_2 * K_3} + \frac{c(\text{CO}_3^{2-})}{K_4} + \frac{c(\text{SO}_4^{2-})}{K_5} \right) \quad (17)$$

In ähnlicher Weise werden aus den Gleichungen (12) bis (16) die Gleichungen (18) bis (22) entwickelt.

$$c(\text{Mg}) = c(\text{Mg}^{2+}) * \left(1 + \frac{c(\text{CO}_3^{2-}) * c(\text{H}^+)}{K_2 * K_6} + \frac{c(\text{CO}_3^{2-})}{K_7} + \frac{c(\text{SO}_4^{2-})}{K_8} \right) \quad (18)$$

$$c(\text{SO}_4) = c(\text{SO}_4^{2-}) * \left(1 + \frac{c(\text{Ca}^{2+})}{K_5} + \frac{c(\text{Mg}^{2+})}{K_8} \right) \quad (19)$$

$$c(\text{CO}_3) = c(\text{DIC}) = c(\text{CO}_3^{2-}) * \left(\frac{c^2(\text{H}^+)}{K_1 * K_2} + \frac{c(\text{H}^+) * FC_1}{K_2} + FC_2 \right) \quad (20)$$

$$FC_1 = 1 + \frac{c(\text{Ca}^{2+})}{K_3} + \frac{c(\text{Mg}^{2+})}{K_6} \quad (21)$$

$$FC_2 = 1 + \frac{c(\text{Ca}^{2+})}{K_4} + \frac{c(\text{Mg}^{2+})}{K_7} \quad (22)$$

1.3.1.2. Elektroneutralitätsbedingung

Die Elektroneutralitätsbedingung sagt aus, daß die Summe aller Kationenequivalente bzw. Kationenequivalentkonzentrationen in allen Wässern genau so groß sein muß, wie die Summe aller Anionenequivalente bzw. Anionenequivalentkonzentrationen. Das bedeutet, daß alle Wässer sich elektrisch neutral verhalten.

Berücksichtigt man, daß die Äquivalentkonzentration eines Stoffes $c(1/2 X)$ gleich dem Produkt aus der Wertigkeit z und der Stoffmengenkonzentration $c(X)$ ist, ergibt sich für übliche Wässer (für Meerwasser müßten auch noch andere Ionen berücksichtigt werden) folgende Gleichung:

$$2c(\text{Ca}^{2+}) + 2c(\text{Mg}^{2+}) + c(\text{Na}^+) + c(\text{K}^+) + c(\text{H}^+) + c(\text{CaHCO}_3^+) + c(\text{MgHCO}_3^+) = \\ 2c(\text{SO}_4^{2-}) + c(\text{NO}_3^-) + c(\text{Cl}^-) + c(\text{OH}^-) + 2c(\text{CO}_3^{2-}) + c(\text{HCO}_3^-)$$

Werden die Stoffmengenkonzentrationen der Ionen der starken Elektrolyte durch Ihre Gesamtkonzentration (Gleichungen (11) bis (14)) ersetzt, erhält man folgende Gleichung:

$$2[c(\text{Ca}) - c(\text{CaHCO}_3^+) - c(\text{CaCO}_3) - c(\text{CaSO}_4)] + 2[c(\text{Mg}) - c(\text{MgHCO}_3^+) - c(\text{MgCO}_3) - c(\text{MgSO}_4)] + \\ c(\text{Na}) + c(\text{K}) + c(\text{H}^+) + c(\text{CaHCO}_3^+) + c(\text{MgHCO}_3^+) = \\ 2[c(\text{SO}_4) - c(\text{CaSO}_4) - c(\text{MgSO}_4)] + c(\text{NO}_3) + c(\text{Cl}) + c(\text{OH}^-) + 2c(\text{CO}_3^{2-}) + c(\text{HCO}_3^-)$$

Sortiert man die Gleichung nach schwachen und starken Elektrolyten, erhält man eine weitere von Temperatur und Gesamtionenstärke unabhängige Größe, den sogenannten *m-Wert*.

$$2c(\text{Ca}) + 2c(\text{Mg}) + c(\text{Na}) + c(\text{K}) - 2c(\text{SO}_4) - c(\text{NO}_3) - c(\text{Cl}) = \\ 2c(\text{CO}_3^{2-}) + 2c(\text{CaCO}_3) + 2c(\text{MgCO}_3) + c(\text{HCO}_3^-) + c(\text{CaHCO}_3^+) + c(\text{MgHCO}_3^+) + c(\text{OH}^-) - c(\text{H}^+)$$

Diese Gleichung kann mittels der Gleichungen (15) und (16) für die Komplexbildungsfaktoren noch umformuliert werden:

$$FC_1 = 1 + \frac{c(\text{CaHCO}_3^+) + c(\text{MgHCO}_3^+)}{c(\text{HCO}_3^-)} \quad (15)$$

$$FC_2 = 1 + \frac{c(\text{CaCO}_3) + c(\text{MgCO}_3)}{c(\text{CO}_3^{2-})} \quad (16)$$

$$FC_2 * c(\text{CO}_3^{2-}) = c(\text{CO}_3^{2-}) + c(\text{CaCO}_3) + c(\text{MgCO}_3) \\ 2c(\text{Ca}) + 2c(\text{Mg}) + c(\text{Na}) + c(\text{K}) - 2c(\text{SO}_4) - c(\text{NO}_3) - c(\text{Cl}) = \\ 2c(\text{CO}_3^{2-}) * FC_2 + c(\text{HCO}_3^-) * FC_1 + c(\text{OH}^-) - c(\text{H}^+) \quad (23)$$

Die Summe der Gesamtkonzentrationen der starken Elektrolyte (obere Zeile der Gleichung) wird als *m(stark)*, die der schwachen Elektrolyte (untere Zeile der Gleichung) als *m(schwach)* bezeichnet. *m(schwach)* kann für verschiedene Temperaturen und *pH-Werte* berechnet werden. Er wird im weiteren Text nur noch als *m-Wert* angesprochen werden.

$$m = 2c(\text{CO}_3^{2-}) * FC_2 + c(\text{HCO}_3^-) * FC_1 + c(\text{OH}^-) - c(\text{H}^+) \quad (24)$$

1.3.1.3. Basisgleichung zur Best. des Gleichgewichtssystems

$c(DIC)$ und m -Wert sind zwei wassercharakteristische Größen, welche von Druck, Temperatur und Gesamtionenstärke unabhängig sind. In einem geschlossenen System sind demzufolge diese beiden Größen konstant. Aus den beiden Größen läßt sich die Gleichgewichtslage der Lösung für jede Temperatur und jeden pH -Wert berechnen.

Ziel der folgenden Ableitung ist das Formulieren einer Basisgleichung, welche das Wasser in Abhängigkeit vom pH -Wert eindeutig beschreibt. Verwendung finden die Gleichungen für die Konstanten $c(DIC)$ (Gleichung (20)) und m -Wert (Gleichung (24)).

$$\text{aus Gleichung (20) folgt: } c(CO_3^{2-}) = \frac{c(DIC)}{\frac{c^2(H^+)}{K_1 * K_2} + \frac{c(H^+) * FC_1}{K_2} + FC_2}$$

$$m = 2c(CO_3^{2-}) * FC_2 + \frac{c(CO_3^{2-}) * c(H^+) * FC_1}{K_2} + c(OH^-) - c(H^+)$$

Setzt man diese beiden Gleichungen ineinander ein, so ergibt sich:

$$m = \frac{2 * c(DIC) * FC_2 * K_2}{\left(\frac{c^2(H^+)}{K_1 * K_2} + \frac{c(H^+) * FC_1}{K_2} + FC_2\right) * K_2} + \frac{c(DIC) * c(H^+) * FC_1}{\left(\frac{c^2(H^+)}{K_1 * K_2} + \frac{c(H^+) * FC_1}{K_2} + FC_2\right) * K_2} + c(OH^-) - c(H^+)$$

$$m = c(DIC) * \frac{2 * FC_2 * K_2 + c(H^+) * FC_1 * \frac{K_2}{K_2}}{\left(\frac{c^2(H^+)}{K_1 * K_2} + \frac{c(H^+) * FC_1}{K_2} + FC_2\right) * K_2} + c(OH^-) - c(H^+)$$

$$m = c(DIC) * \frac{2 * FC_2 + c(H^+) * \frac{FC_1}{K_2}}{\left(\frac{c^2(H^+)}{K_1 * K_2} + \frac{c(H^+) * FC_1}{K_2} + FC_2\right)} + c(OH^-) - c(H^+)$$

Wird der Quotient im Zähler und im Nenner mit $K_1 * K_2$ erweitert, dann ergibt sich folgender Ausdruck:

$$m = c(DIC) * \frac{2 * FC_2 * K_1 * K_2 + c(H^+) * FC_1 * K_1}{c^2(H^+) + c(H^+) * K_1 * FC_1 + FC_2 * K_1 * K_2} + c(OH^-) - c(H^+)$$

Für den Quotienten wird ϕ und für die Differenz der Stoffmengenkonzentrationen an Hydroxid- und Wasserstoffionen Φ gesetzt.

$$\phi = \frac{2 * FC_2 * K_1 * K_2 + c(H^+) * FC_1 * K_1}{c^2(H^+) + c(H^+) * K_1 * FC_1 + FC_2 * K_1 * K_2}$$

ϕ wird als Ladungsbilanzfaktor bezeichnet.

$$\Phi = c(OH^-) - c(H^+) = \frac{K_9}{c(H^+)} - c(H^+)$$

Die endgültige Basisgleichung lautet also:

$$\boxed{m = \phi * c(DIC) + \Phi} \quad (25)$$

1.3.1.4. Anwendung der Basisgleichung

Zur Ermittlung der Gleichgewichtslage des Wassers müssen die Gesamtkonzentrationen $c(Ca)$, $c(Mg)$, $c(Na)$, $c(K)$, $c(SO_4)$, $c(NO_3)$ und $c(Cl)$ bekannt sein. Außerdem müssen 2 der 4 analytischen Größen pH , $K_S(4,3)$, $K_B(8,2)$ und $c(DIC)$ gegeben sein. Mit diesen Angaben lassen sich aus der Basisgleichung der m -Wert und - falls nicht bekannt - $c(DIC)$ im Gleichgewicht ermitteln.

Für die Berechnung sind, je nachdem welche beiden der 4 analytischen Größen gegeben sind, 6 Fälle zu unterscheiden:

Bekannt sind:

- pH und $K_S(4,3)$ oder
- pH und $K_B(8,2)$ oder
- $K_S(4,3)$ und $K_B(8,2)$ oder
- $c(DIC)$ und pH oder
- $c(DIC)$ und $K_S(4,3)$ oder
- $c(DIC)$ und $K_B(8,2)$.

Einfacher ist die Berechnung, wenn der pH -Wert oder $c(DIC)$ bekannt sind. Am aufwendigsten ist die Berechnung, wenn der m -Wert und $c(DIC)$ aus $K_S(4,3)$ und $K_B(8,2)$ errechnet werden müssen. Anhand dieses Beispiels soll der Berechnungsgang erläutert werden.

In der Ausgangslage gilt für das Wasser die Basisgleichung (25). Wird durch Zugabe von Salzsäure bestimmter Konzentration zum Wasser der $K_S(4,3)$ -Wert bestimmt, so wird der m -Wert reduziert, da dem Wasser Chloridionen zugeführt werden (siehe Gleichung 23). Der Zahlenwert für $c(DIC)$ bleibt jedoch unverändert. Im Gleichgewicht beim pH -Wert 4,3 verändert sich die Basisgleichung also wie folgt:

$$m - K_S(4,3) = \phi(4,3) * c(DIC) + \Phi(4,3) \quad (26)$$

Wird durch die Zugabe von Natronlauge bestimmter Konzentration zum Wasser der $K_B(8,2)$ -Wert bestimmt, so wird der m -Wert erhöht, da dem Wasser Natriumionen zugeführt werden (siehe Gleichung 23). Der Zahlenwert für $c(DIC)$ bleibt jedoch unverändert. Im Gleichgewicht beim pH -Wert 8,2 verändert sich die Basisgleichung also wie folgt:

$$m + K_B(8,2) = \phi(8,2) * c(DIC) + \Phi(8,2) \quad (27)$$

Setzt man Gleichung (27) in Gleichung (26) ein, erhält man für $c(DIC)$:

$$c(DIC) = \frac{\Phi(4,3) - \Phi(8,2) + K_B(8,2) + K_S(4,3)}{\phi(8,2) - \phi(4,3)} \quad (28)$$

Formt man Gleichung (27) durch Auflösen nach m um, erhält man:

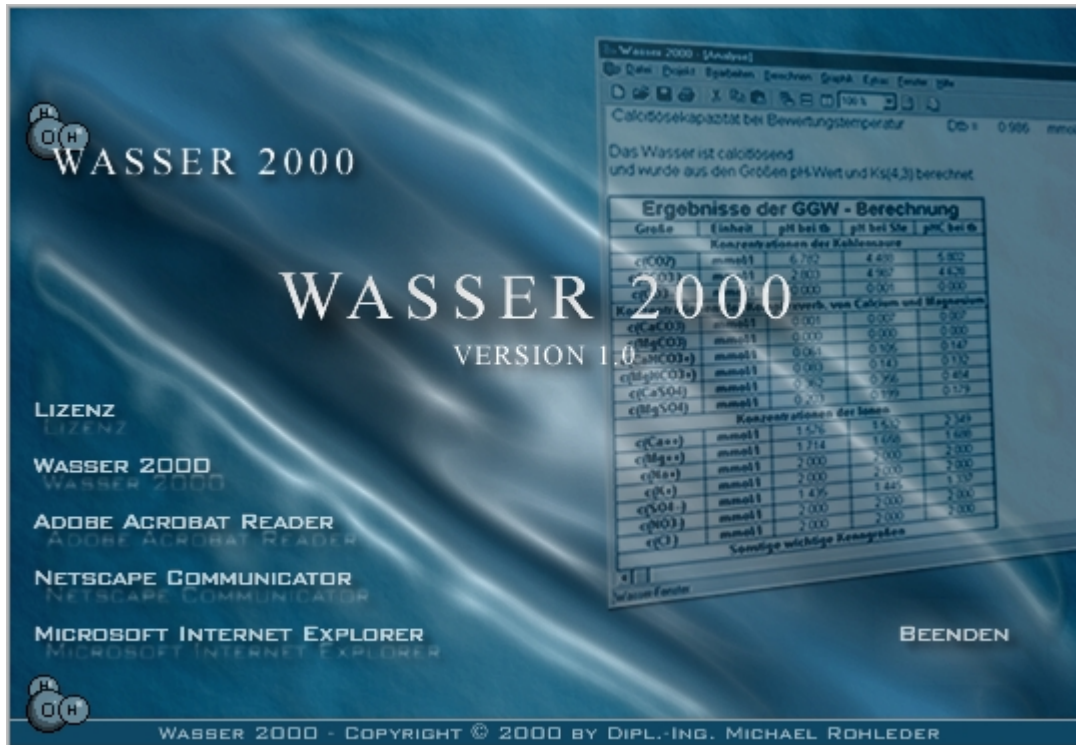
$$m = \phi(8,2) * c(DIC) + \Phi(8,2) - K_B(8,2) \quad (29)$$

Die Ermittlung des m -wertes nach Gleichung (29) und von $c(DIC)$ nach Gleichung (28) erfolgt mittels eines Näherungsverfahrens, da die Ladungsbilanzfaktoren ϕ nicht nur eine Funktion der Stoffmengenkonzentration an Wasserstoffionen sind, sondern zusätzlich noch die Komplexbildungsfaktoren FC_1 und FC_2 beinhalten.

Die Ausführung der Berechnung erfolgt also sinnvoll mit Hilfe eines Computerprogramms.

2. Installation des Programms

Wird die WASSER2000 CD in das CD-Laufwerk eingelegt, so startet automatisch das Auswahlprogramm „*Install.exe*“. Sollte bei Ihrem Betriebssystem die Autostart Funktion des CD-Laufwerkes deaktiviert sein, muss das Programm manuell gestartet werden.



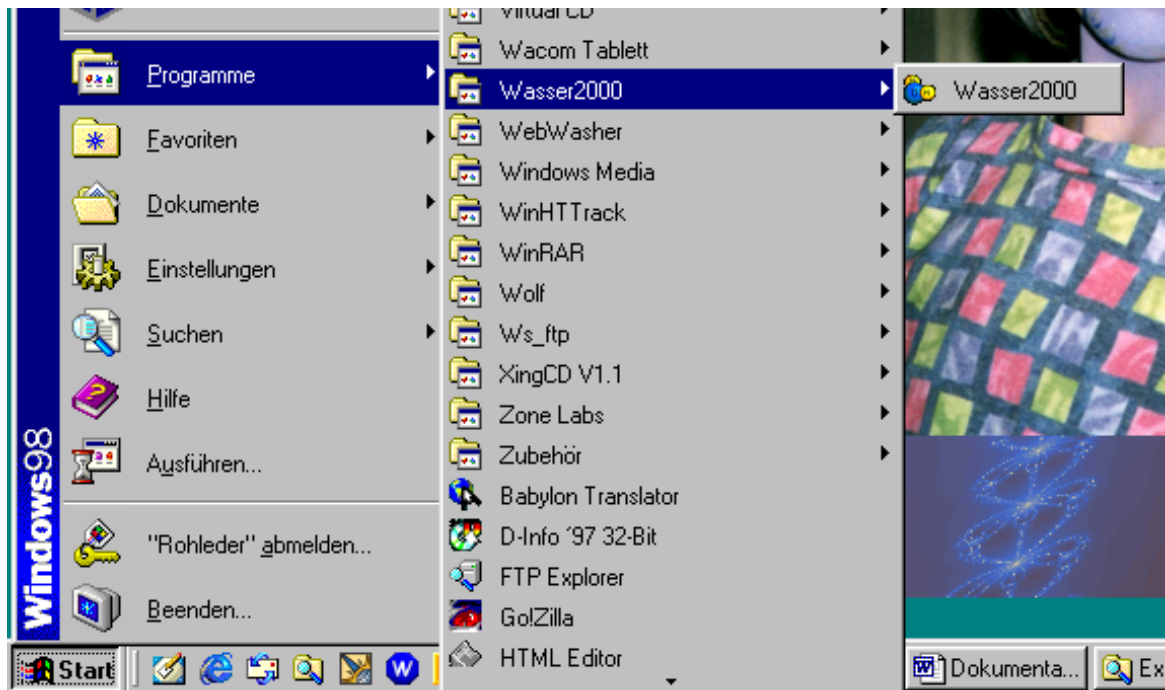
Das Auswahlprogramm bietet nun folgende Möglichkeiten:

- **Lizenz:** Die Vertragsbedingungen von WASSER2000 lesen
- **WASSER2000:** Das Programm WASSER2000 auf die Festplatte installieren
- **Adobe Acrobat Reader:** Den Adobe Acrobat Reader installieren
- **Netscape Communicator:** Den Internetbrowser Netscape installieren
- **Microsoft Internet Explorer:** Den Internetbrowser von Microsoft installieren
- **Beenden:** Das Programm beenden

Auf der CD befinden sich folgende Unterverzeichnis:

- **Vorlagen:** Die Originalvorlagen der verschiedenen Fenstertypen
- **Setup:** Beinhaltet wichtige Dateien zur Installation von WASSER2000
- **Browser:** Zur Verfügung stehen MSIE, Netscape, Acrobat

Wenn der Auswahlpunkt „**WASSER2000**“ mit der Maus angewählt wird, so startet das Programm zur Installation von WASSER2000. Das Programm heißt „**Setup.exe**“ und befindet sich auf der CD im Unterverzeichnis „**Setup**“. Das Installationsprogramm führt Sie durch die Installation und legt im Unterpunkt „**Programme**“ des „**Startordners**“ in der Taskleiste den Unterordner „**WASSER2000**“ an.



Wird das Programm WASSER2000 zum ersten mal gestartet, so werden Sie aufgefordert die Lizenzierungsdiskette einzulegen. Anhand der Diskette wird entschieden, ob die Variante 1, 2 oder eine Demoverision des Programms vorliegt.

Zur Darstellung der Hilfe im Programm WASSER2000 muss ein Internetbrowser auf Ihrem System installiert sein. In dem Betriebssystem Windows ist bereits der Internet Explorer von Microsoft installiert. Allerdings haben Sie die Möglichkeit unter dem Punkt „**Microsoft Internet Explorer**“ auf einen eventuell aktuelleren Internet Browser zu aktualisieren oder aber den Internet Browser der Firma Netscape unter dem Punkt „**Netscape Communicator**“ zu verwenden.

Um das Programmhandbuch zu lesen oder auszudrucken wird der Adobe Acrobat Reader benötigt. Sollte auf Ihrem System noch kein Acrobat Reader installiert sein, so kann dies unter dem Auswahlpunkt „**Adobe Acrobat Reader**“ geschehen.

3. Handhabung des Programms

Das Programm WASSER2000 wird in zwei verschiedenen Varianten angeboten. Während die Variante 1 Grundoperationen beinhaltet, baut die Variante 2 auf Variante 1 auf und bietet den vollen Funktionsumfang.

3.1. Die beiden Varianten

3.1.1. Funktionsumfang der Variante 1

- Die Berechnung des pH-Wertes bei Bewertungstemperatur und der Calcitsättigung nach DIN 38404 – C10 – R3. Die Ergebnisse sind in einem Wasserfenster dargestellt.
- Die Berechnung des Temperaturverhaltens (Temperaturfenster) und die graphische Darstellung von pH-Wert und Sättigungsindex in Abhängigkeit der Temperatur..
- Die Korrosionschemische Beurteilung des Wassers nach DIN 50930 (Korrosionsfenster).
- Mischwasserberechnung (Mischwasserfenster) und die graphische Darstellung von pH-Wert und Sättigungsindex in Abhängigkeit des Mischungsverhältnisses.
- Wasseraufbereitung durch Entsäuerung

3.1.2. Funktionsumfang der Variante 2

- Die Zugabe von Säuren oder Laugen
- Wasseraufbereitung durch Entcarbonisierung
- Dimensionierung von Reaktoren zur Schnellentcarbonisierung
- H-Entcarbonisierung durch Ionenaustausch
- Enthärtung durch Ionenaustausch
- Filterdimensionierung

Zur Berechnung des pH-Wertes bei Bewertungstemperatur sowie des pH-Wertes bei Calcitsättigung (Variante 1) müssen folgende Größen gegeben sein:

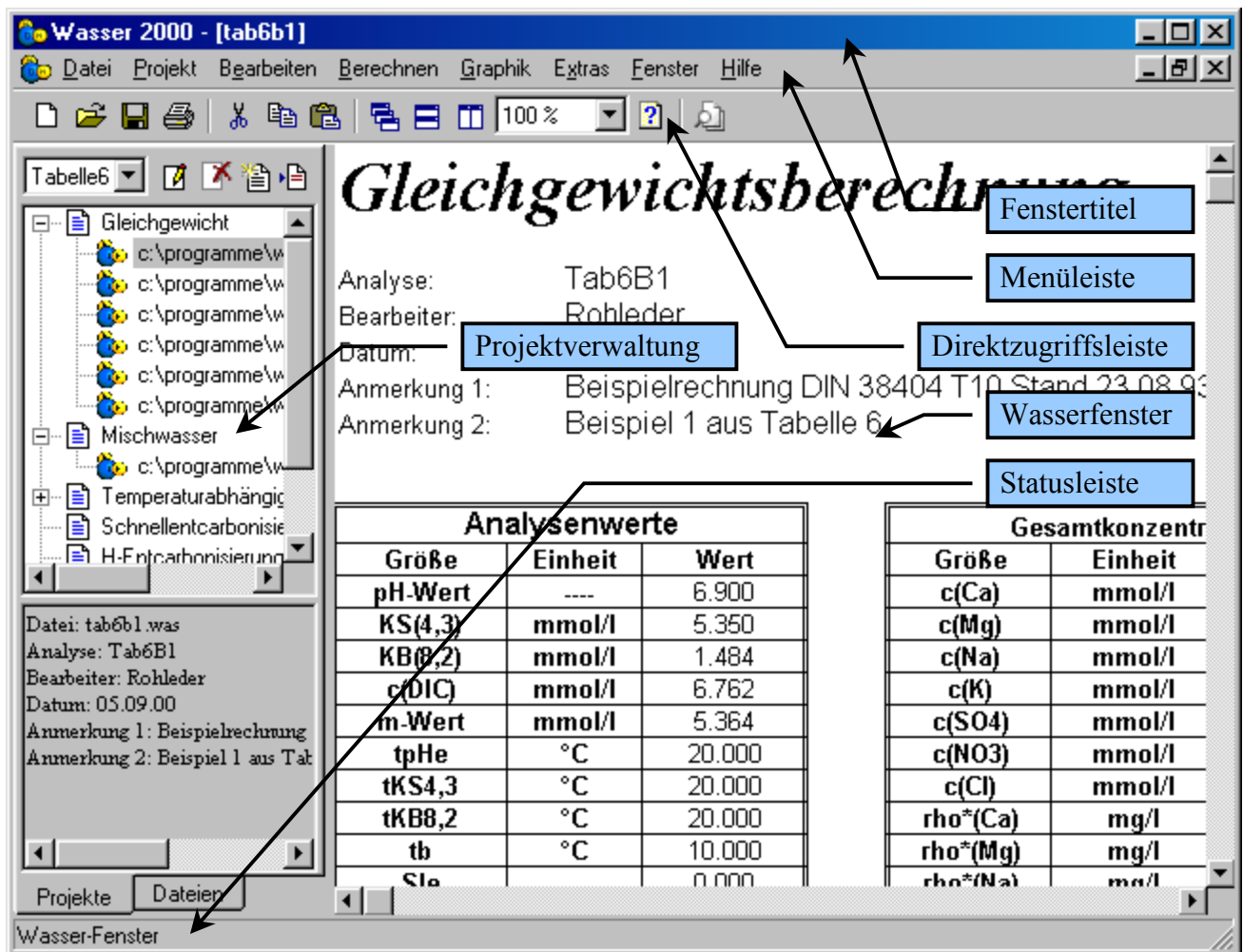
- Zwei der folgenden fünf Größen: p_{He} , $K_S(4,3)$, $K_B(8,2)$, $c(DIC)$ oder der m -Wert.
- Die Gesamtstoffmengen- oder massenkonzentrationen von: Calcium, Magnesium, Natrium, Kalium, Sulfat, Nitrat, Chlorid.

Sämtliche Berechnungen, mit Ausnahme der Filterdimensionierung, beziehen sich auf das aktive Wasserfenster, d.h. um weitere Berechnungen (z.B. Temperaturverhalten, Entsäuerung, Entcarbonisierung, usw.) durchführen zu können, muß zuvor ein Wasserfenster berechnet oder ein bereits berechnetes und gespeichertes Wasserfenster geladen werden. Erst wenn ein Wasserfenster das aktive Fenster ist, werden die entsprechenden Menüeinträge anwählbar.

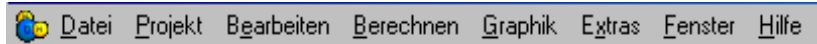
3.2. Die Benutzeroberfläche

Die Bedienung des Programms kann entweder durch die Tastatur oder mit Hilfe der Maus erfolgen. Die Benutzeroberfläche des Programms WASSER2000 ist durch vier Elemente gekennzeichnet:

- Die Menüleiste
- Die Direktzugriffsleiste
- Die Projektverwaltung
- Die verschiedenen Fensterarten




3.2.1. Die Menüleiste



Die Menüleiste des Programms befindet sich direkt unter dem Fenstertitel. Mit ihrer Hilfe lassen sich auf einfache Art und Weise Befehle absetzen und sich somit der Programmablauf steuern. Um das Menüsystem zu aktivieren haben Sie folgende Möglichkeiten:

 Mit der Maus:

Klicken Sie mit der linken Maustaste auf den entsprechenden Menüpunkt.

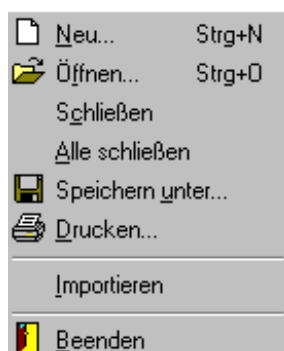
 Mit der Tastatur:

Drücken Sie die Alt-Taste und gleichzeitig den unterstrichenen Buchstaben des Menübefehls und bewegen Sie sich mit den Cursorstasten auf den entsprechenden Menüpunkt. Besonders schnell lassen einige Menübefehle über die Hotkeys absetzen (z.B. STRG+N um eine neue Wasserberechnung durchzuführen)

Das Hauptmenü von WASSER2000 ist in folgende Unterpunkte gegliedert:

- | | |
|---------------------------------------------|--------------------|
| ➤ Dateioperationen (z.B. laden, speichern) | <u>D</u> atei |
| ➤ Projektverwaltung | <u>P</u> rojekt |
| ➤ Datenaustausch über Zwischenablage | <u>B</u> earbeiten |
| ➤ Durchführen von Berechnungen | <u>B</u> erechnen |
| ➤ Grafische Ausgabe der Ergebnisse | <u>G</u> rafik |
| ➤ Programmoptionen und Desktop sichern | <u>E</u> xtras |
| ➤ Fensteroperationen (z.B. Anordnen, Liste) | <u>F</u> enster |
| ➤ Hilfesystem | <u>H</u> ilfe |

3.2.1.1. Datei



Mit dem Befehl „**Neu...**“ wird der Dialog „Eingabe der Wasserkenndaten“ aufgerufen, um eine neue Wasserberechnung durchzuführen. Die Ergebnisse der Gleichgewichtsberechnung werden in einem Wasserfenster dargestellt.

Bereits berechnete und gespeicherte Berechnungen können mit „**Öffnen...**“ wieder geladen und angezeigt werden.

„**Schließen**“ und „**Alle schließen**“ schließt das gegenwärtig aktive Fenster bzw. alle geöffneten Fenster. Dabei erfolgt eine Sicherheitsabfrage, falls das Fenster noch nicht gespeichert wurde.

Mit „**Speichern unter...**“ wird ein Dialogfenster aufgerufen, um das gegenwärtig aktive Fenster zu speichern. Dabei sind verschiedene Formate (Wasser, Text, Hypertext oder Excel) möglich.

Um das aktive Fenster über einen Drucker auszudrucken wird der Befehl „**Drucken...**“ verwendet.

Unter dem Menüpunkt „**Importieren**“ lassen sich aus Excel Tabellen die Analysewerte importieren. Die Werte werden automatisch in den Eingabedialog übernommen. Das genaue Vorgehen, um Excel Dateien zu importieren, wird im Kapitel „**Formulardesigner**“ beschrieben.

Der Menüpunkt „**Beenden**“ beendet das Programm.

3.2.1.2. Projekt

Projektverwaltung	Strg+E
alle Dateien öffnen	Strg+A
neues Projekt	Umsch+Strg+N
Projekt umbenennen	Strg+R
Projekt löschen	Strg+D

Mit dem Unterpunkt „**Projektverwaltung**“ lässt sich das Projektverwaltungsfenster ein- bzw. ausblenden.

„**alle Dateien öffnen**“ öffnet alle Dateien des derzeit angewählten Projektes. Ist kein Projekt angewählt, wird auch keine Datei geöffnet.




Um ein neues Projekt anzulegen, wird der Menüpunkt „**neues Projekt**“ verwendet.

Dem derzeit angewählten Projekt kann mit dem Unterpunkt „**Projekt umbenennen**“ ein neuer Name gegeben werden.

Wird ein Projekt nicht mehr benötigt, so kann das derzeit angewählte Projekt unter dem Punkt „**Projekt löschen**“ gelöscht werden. Es erfolgt eine Sicherheitsabfrage und es wird auch nur das Projekt gelöscht, nicht aber die dazugehörigen Dateien.

Eine nähere Erklärung zur Projektverwaltung finden Sie unter dem Kapitel 3.3.

3.2.1.3. Bearbeiten

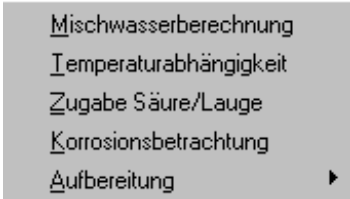
 Ausschneiden	Strg+X
 Kopieren	Strg+C
 Einfügen	Strg+V

Wie bei Windows Programmen üblich, dient der Punkt „**Ausschneiden**“ die markierten Zellen zu löschen.

„**Kopieren**“ überträgt die markierten Zellen in die Windows Zwischenablage.

Mit dem Unterpunkt „**Einfügen**“ können die Daten aus der Zwischenablage in das derzeit aktive Fenster eingefügt werden.

3.2.1.4. Berechnen



Mischwasserberechnung
Temperaturabhängigkeit
Zugabe Säure/Lauge
Korrosionsbetrachtung
Aufbereitung

Sind mindestens zwei Wasserfenster geöffnet, so lassen sich diese mit dem Punkt „**Mischwasserberechnung**“ entweder mit einem festen oder einem variablen Mischungsverhältnis mischen.

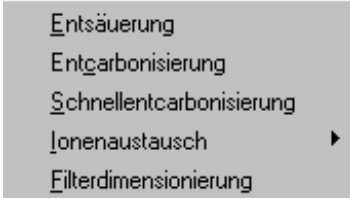
Der Menüunterpunkt „**Temperaturabhängigkeit**“ ermöglicht das Temperaturverhalten eines Wassers zu untersuchen.

Die Zugabemengen verschiedener Säuren oder Laugen für einen bestimmten pH-Wert, oder die Zugabe bestimmter Mengen lässt sich unter dem Punkt „**Zugabe Säure/Lauge**“ berechnen.

Die korrosionschemische Beurteilung nach DIN 50930 ermöglicht der Punkt „**Korrosionsbetrachtung**“

Um verschieden Aufbereitungsverfahren und Dimensionierungsvorschläge auszuwählen (z.B. Entsäuerung, Filterdimensionierung, Schnellentcarbonisierung u.s.w.) dient der Punkt „**Aufbereitung**“.

3.2.1.5. Aufbereitung



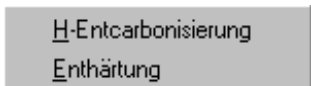
Entsäuerung
Entcarbonisierung
Schnellentcarbonisierung
Ionenaustausch
Filterdimensionierung

Ist der Sättigungsindex des aktuellen Wasser negativ, so lassen sich unter dem Punkt „**Entsäuerung**“ verschiedene Entsäuerungsverfahren anwählen.

Zur Reduzierung der Hydrogencarbonate dient der Punkt „**Entcarbonisierung**“.

Die Dimensionierung von Reaktoren zur Schnellentcarbonisierung wird mit dem Punkt „**Schnellentcarbonisierung**“ angewählt.

„**Ionenaustausch**“ zeigt ein Untermenü zur H-Entcarbonisierung und Enthärtung.



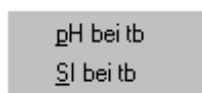
H-Entcarbonisierung
Enthärtung

Die Reaktorauslegung zur Reduzierung der Hydrogencarbonate durch Ionenaustausch wird mit dem Punkt „**H-Entcarbonisierung**“ angewählt.

Der Punkt „**Enthärtung**“ bietet Dimensionierungsvorschläge zur Reduzierung der Gesamthärte durch Ionenaustausch.

Der Unterpunkt „**Filterdimensionierung**“ dient zur Auslegung von Filteranlagen.

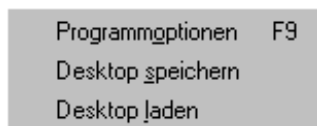
3.2.1.6. Graphik



Ist das momentan aktive Fenster ein Mischwasserfenster, so lässt sich mit „**pH bei tb**“ der pH-Wert bei Bewertungstemperatur in Abhängigkeit des Mischungsverhältnisse graphisch darstellen.

„**SI bei tb**“ zeigt die Graphik für den Sättigungsindex bei Bewertungstemperatur in Abhängigkeit des Mischungsverhältnisses.

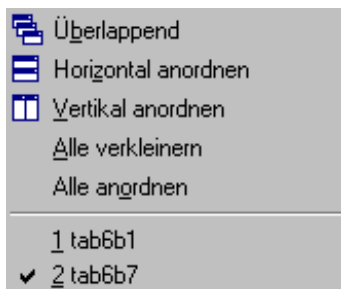
3.2.1.7. Extras



Unter dem Punkt „**Programmoptionen**“ lassen sich wichtige Einstellungen zum Programmablauf festlegen.

Der gesamte Desktop (Position der geöffneten Fenster) kann unter „**Desktop speichern**“ gesichert und mit „**Desktop laden**“ wieder hergestellt werden.

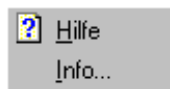
3.2.1.8. Fenster



Mit den Befehlen „**Überlappend**“, „**Horizontal anordnen**“, „**Vertikal anordnen**“, „**Alle verkleinern**“ und „**Alle anordnen**“ lassen sich die Fenster entsprechend anordnen.

Mit der Liste aller geöffneten Fenster am Ende des Menüs lassen sich die entsprechenden Fenster in den Vordergrund darstellen.

3.2.1.9. Hilfe

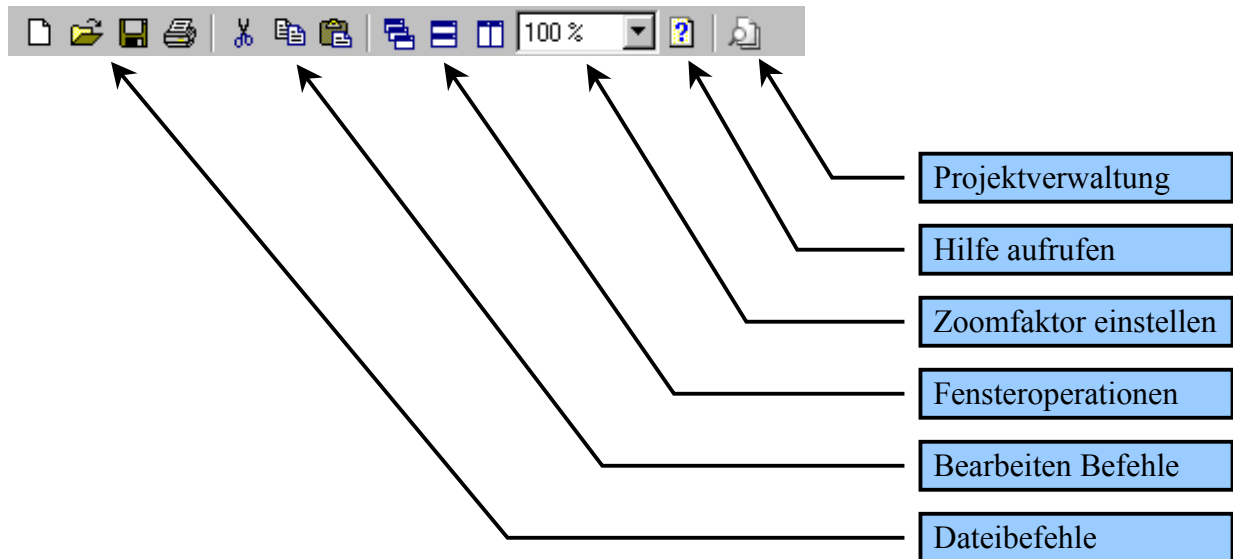


Der Unterpunkt „**Hilfe**“ ruft das Hilfesystem des Programms auf.

Informationen zum Programm werden in einem Informationsfenster unter dem Menüpunkt „**Info**“ angezeigt.

3.2.2. Die Direktzugriffsleiste

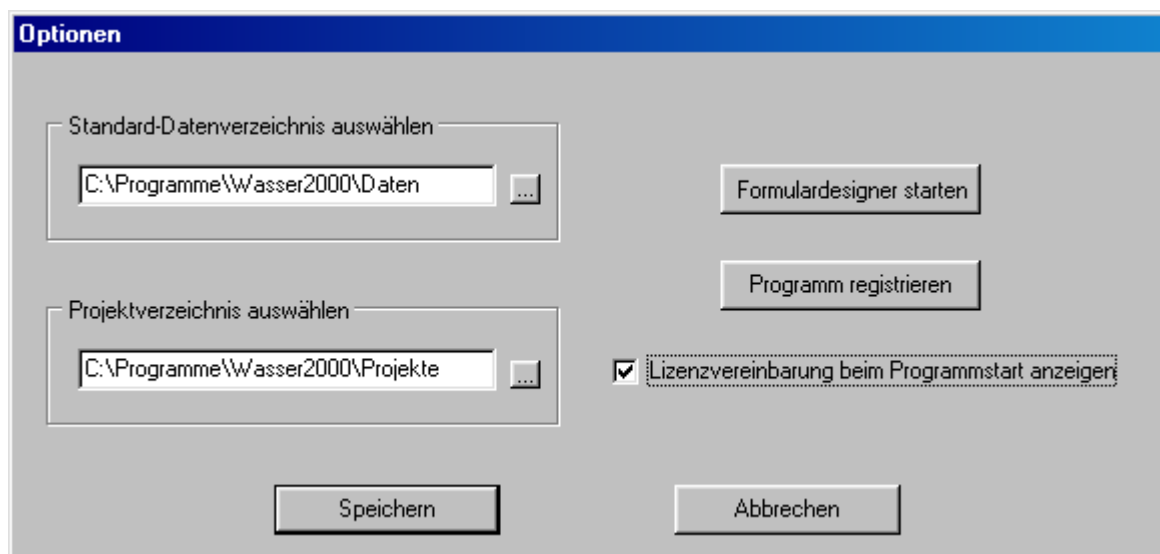
Mit der Direktzugriffsleiste lassen sich häufig gebrauchte Befehle direkt ansprechen. Dies erspart den Umweg über das Menü.



3.3. Die Projekt- und Dateiverwaltung

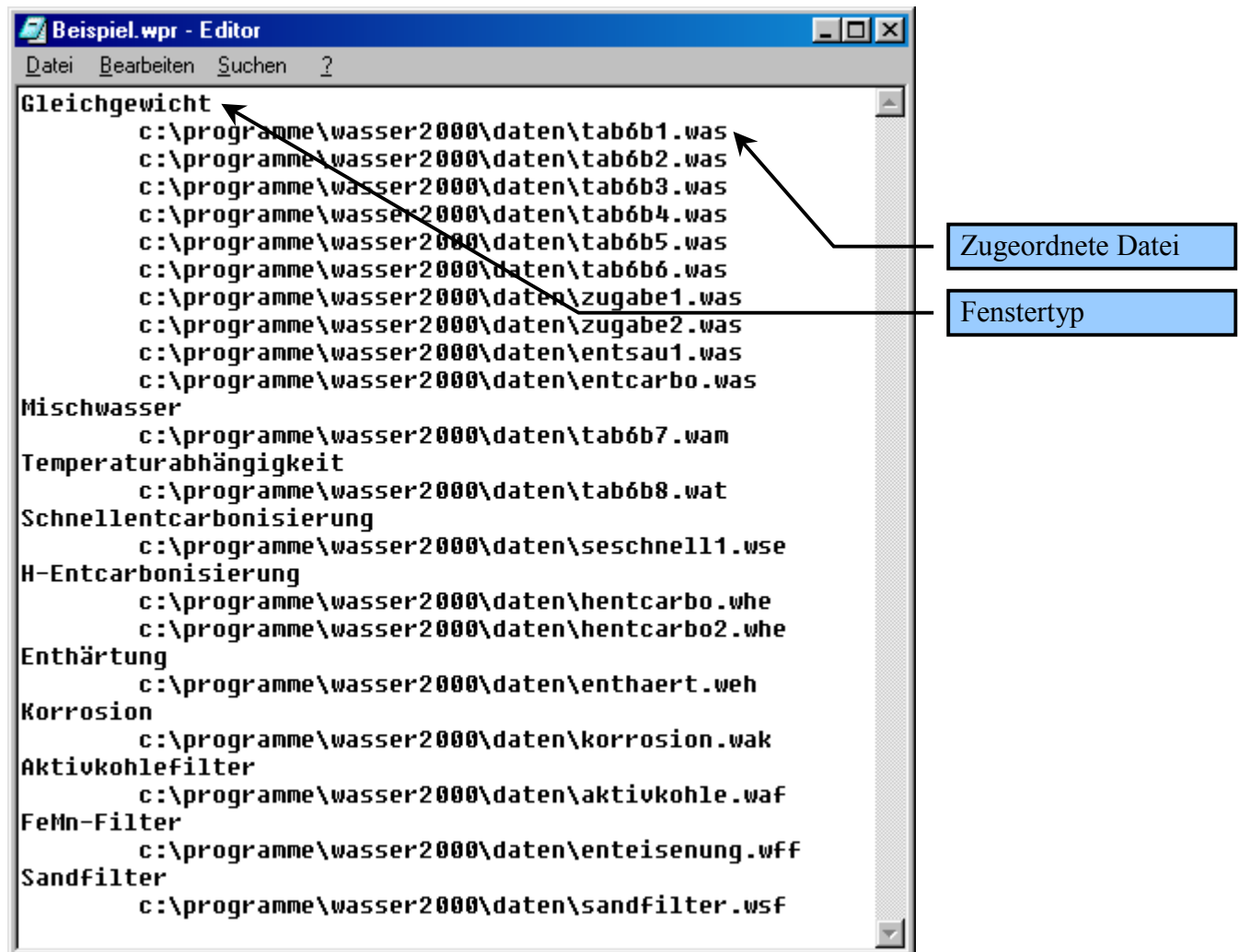
Die Projektverwaltung ist ein wichtiges Hilfsmittel, um die verschiedensten Berechnungsergebnisse in Form eines Projektes abzulegen. So finden sie z.B. in dem Projektverzeichnis ein Projekt Namens „Beispiel“ in dem sämtliche Beispielberechnungen des Handbuches zusammengestellt sind.


Die beiden Ordner zur Daten- und Projektablage werden unter dem Menüpunkt „*Extras*“ und „*Programmoptionen*“ eingestellt.

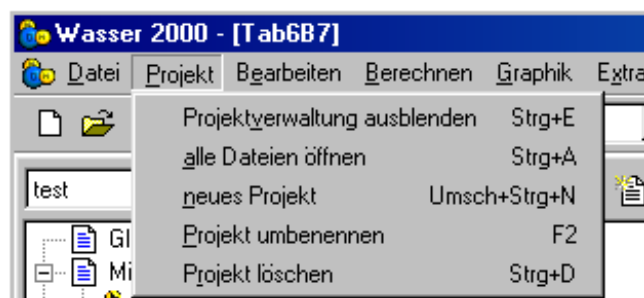


3.3.1. Die Projektverwaltung

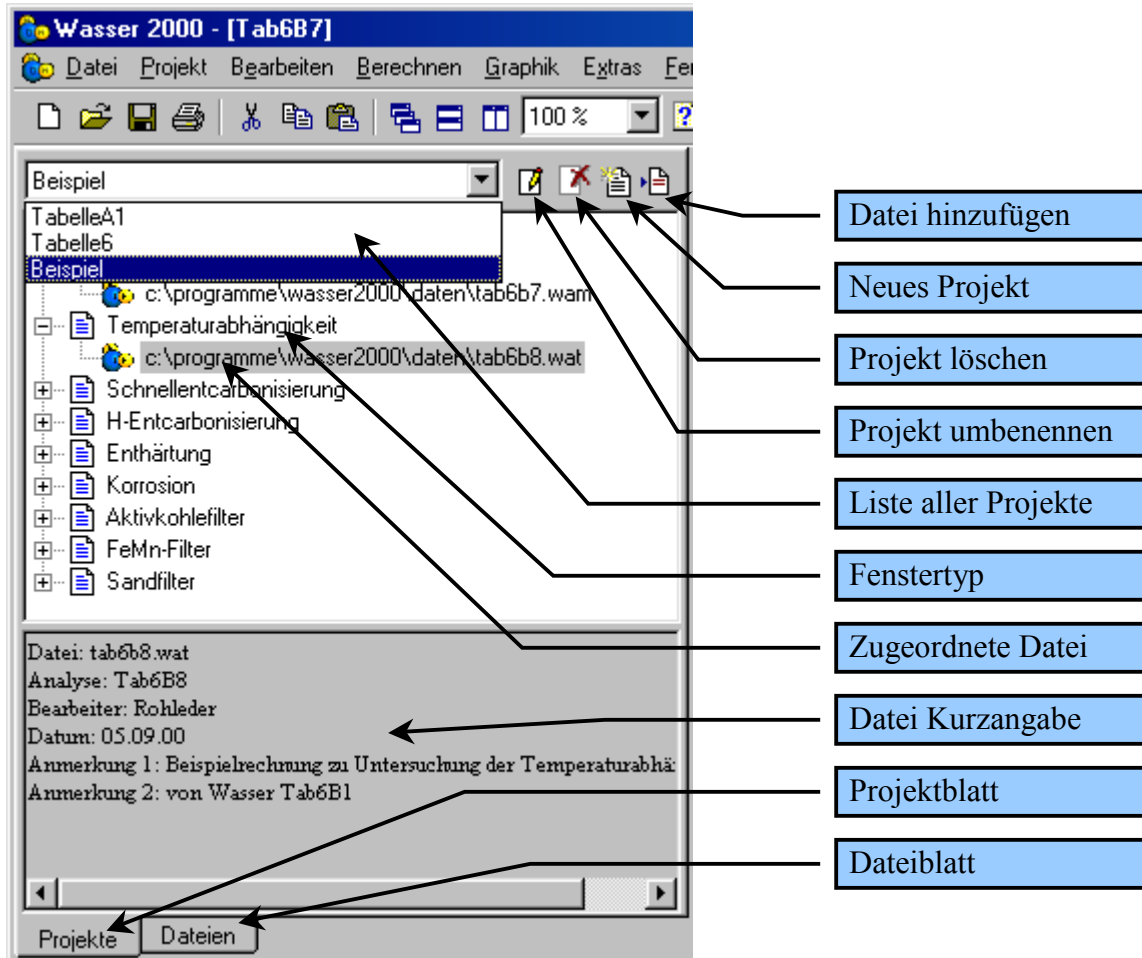
Eine Projektdatei besitzt die Dateinamenerweiterung „*wpr*“ und ist eine reine Textdatei mit speziellem Aufbau. Jedem Fenstertyp können mehrere Dateien zugeordnet werden. So hat beispielsweise die Datei „*Beispiel.wpr*“ folgenden Inhalt.



Mit dem Menüpunkt „*Projekt*“ und „*Projektverwaltung einblenden*“ bzw. „*Projektverwaltung ausblenden*“ lässt sich die Projektverwaltung ein- bzw. ausblenden. Schneller geht es mit dem Hotkey „*Strg+E*“ oder mit dem Symbol  in der Direktzugriffsleiste.

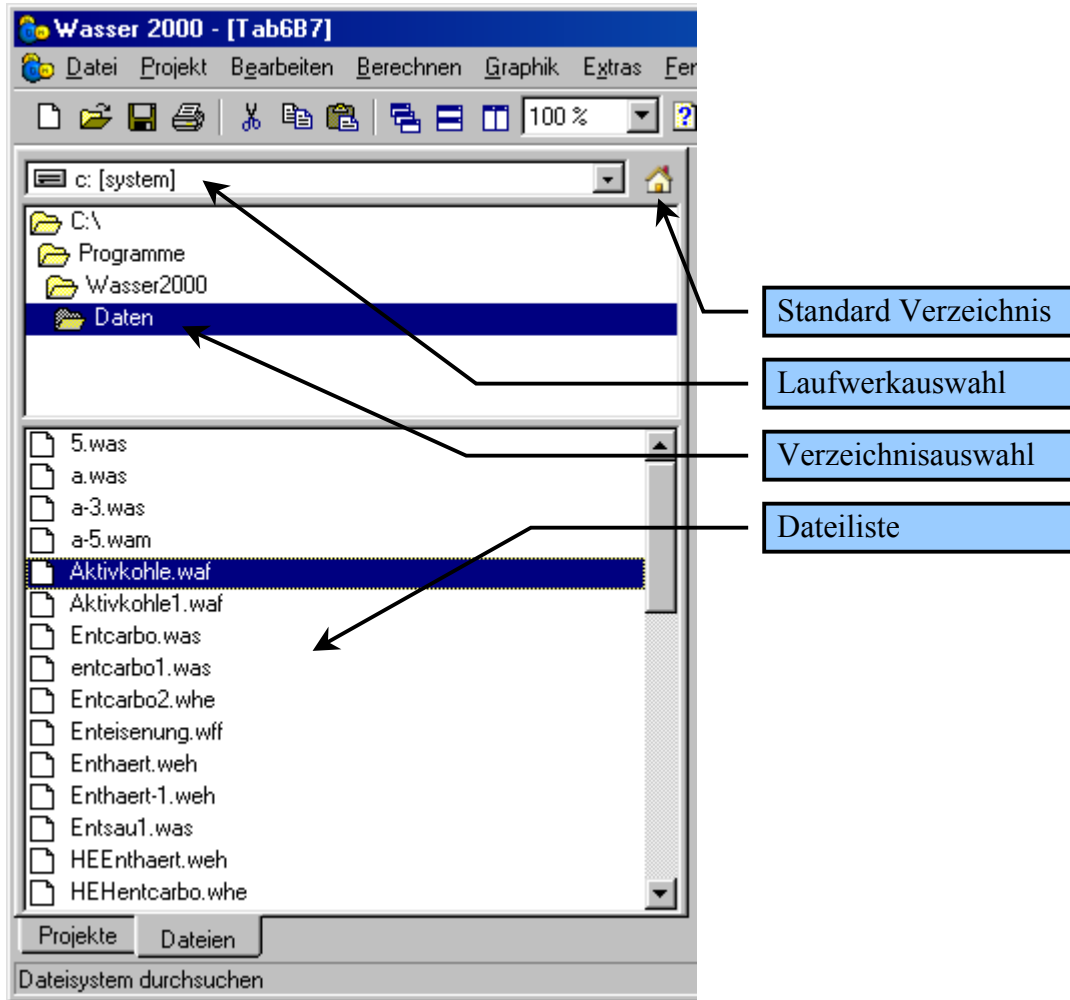


Ist die Projektverwaltung eingeblendet, so lassen sich z.B. neue Projekte anlegen, bereits existierende Projekte auswählen, Dateien den Projekten zufügen usw. So öffnet beispielsweise ein Doppelklick mit der linken Maustaste auf „c:\programme\WASSER2000\daten\tab6b8.wat“ das Temperaturfenster „*Tab6B8*“.

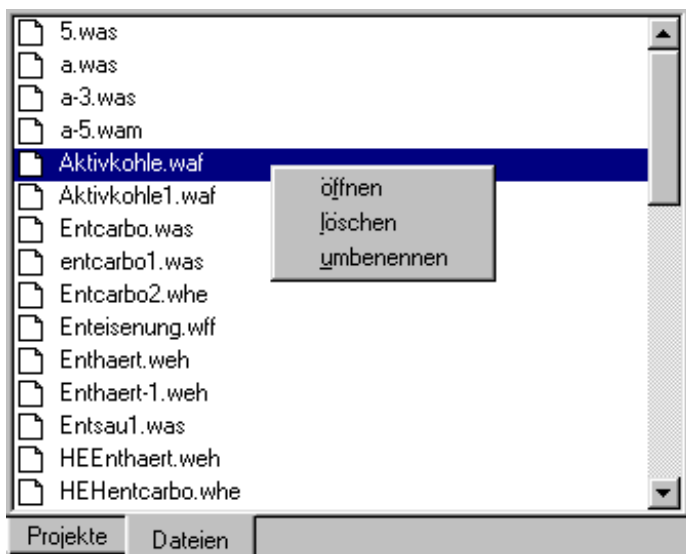


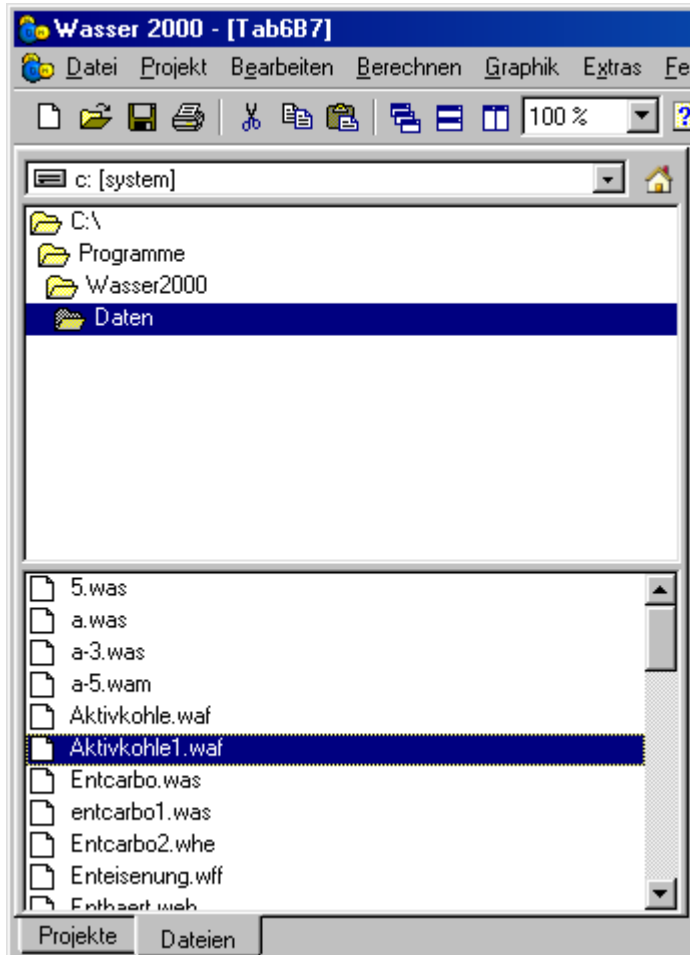
3.3.2. Die Dateiverwaltung

Wird im Projektextplorer das Register „*Dateien*“ angewählt, so wird eine Liste aller gespeicherten Wasserdateien angezeigt. Das Standard Datenverzeichnis wird unter dem Menüpunkt „*Extras*“ und „*Programmoptionen*“ ausgewählt.



Wird eine Datei in der Dateiliste mit der linken Maustaste doppelt angeklickt, so wird das entsprechende Fenster geladen. Wird eine markierte Datei in der Dateiliste mit der rechten Maustaste angeklickt, so erscheint ein PopUp Menü, indem die die Dateibefehle „*öffnen*“, „*löschen*“ und „*umbenennen*“ angewählt werden können.





Mit der Dropdown-Liste im oberen Fensterbereich kann auf alle beliebigen Laufwerke (auch Netzwerkverbindungen) gewechselt werden. Das entsprechende Verzeichnis kann durch das darunter liegende Fenster angewählt werden.

3.4. Der Formulardesigner

Der Formulardesigner ist ein wichtiges Hilfsmittel zur Gestaltung der eigenen Ausgabefenster (Wasserfenster, Temperaturfenster, Mischwasserfenster,...). Da es sich bei dem Formulardesigner um ein Programm mit sehr vielen Funktionen handelt, würde eine Beschreibung aller Details den Rahmen dieser Dokumentation sprengen.

Im folgenden Beispiel wird der Umgang mit dem Formulardesigner anhand des Aufbaus eines individuellen Ausgabeformulars für des Wasserfenster erklärt. Im neuen Wasserfenster sollen die Gesamtkonzentrationen neben den Analysewerten angezeigt werden. Das neue Wasserfenster soll folgende Ausgabe anzeigen:

Gleichgewichtsberechnung

Analyse: Tab6B3
 Bearbeiter: Rohleder
 Datum: 25.09.00
 Anmerkung 1: Beispielrechnung DIN 38404 T10 Stand 23.08.93
 Anmerkung 2: Beispiel 3 aus Tabelle 6

Analysewerte		
Größe	Einheit	Wert
pH-Wert	----	7.000
KS(4,3)	mmol/l	3.000
KB(8,2)	mmol/l	0.652
c(DIC)	mmol/l	3.601
m-Wert	mmol/l	2.984
tpHe	°C	20.000
tKS4,3	°C	20.000
tKB8,2	°C	20.000
tb	°C	10.000
Sle	----	0.000
k25	µS/cm	300.000
tk25	°C	25.000

Gesamtkonzentrationen		
Größe	Einheit	Wert
c(Ca)	mmol/l	2.000
c(Mg)	mmol/l	2.000
c(Na)	mmol/l	2.000
c(K)	mmol/l	2.000
c(SO4)	mmol/l	2.000
c(NO3)	mmol/l	2.000
c(Cl)	mmol/l	2.000
rho*(Ca)	mg/l	80.160
rho*(Mg)	mg/l	48.620
rho*(Na)	mg/l	45.980
rho*(K)	mg/l	78.200
rho*(SO4)	mg/l	192.120
rho*(NO3)	mg/l	124.140
rho*(Cl)	mg/l	70.900

Unter dem Menüpunkt „*Extras*“ befindet sich der Unterpunkt „*Programmoptionen*“.

Optionen

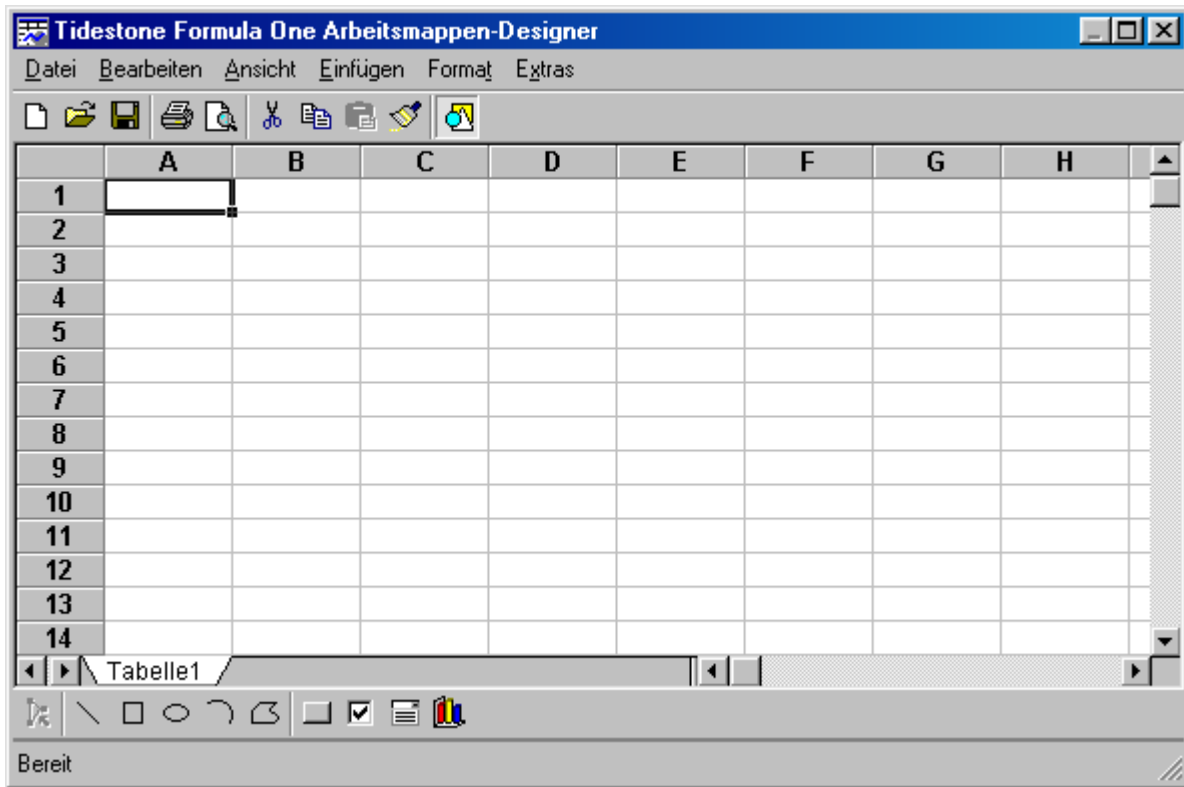
Standard-Datenverzeichnis auswählen
 C:\Programme\Wasser2000\Daten

Projektverzeichnis auswählen
 C:\Programme\Wasser2000\Projekte

Lizenzvereinbarung beim Programmstart anzeigen

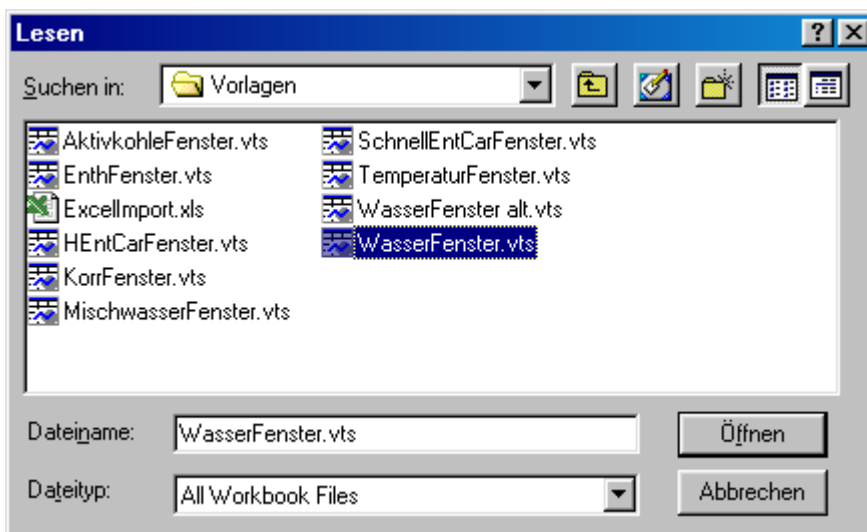
Formulardesigner starten
 Programm registrieren
 Speichern
 Abbrechen

Mit der Schaltfläche „*Formulardesigner starten*“ wird der Formulardesigner aufgerufen.

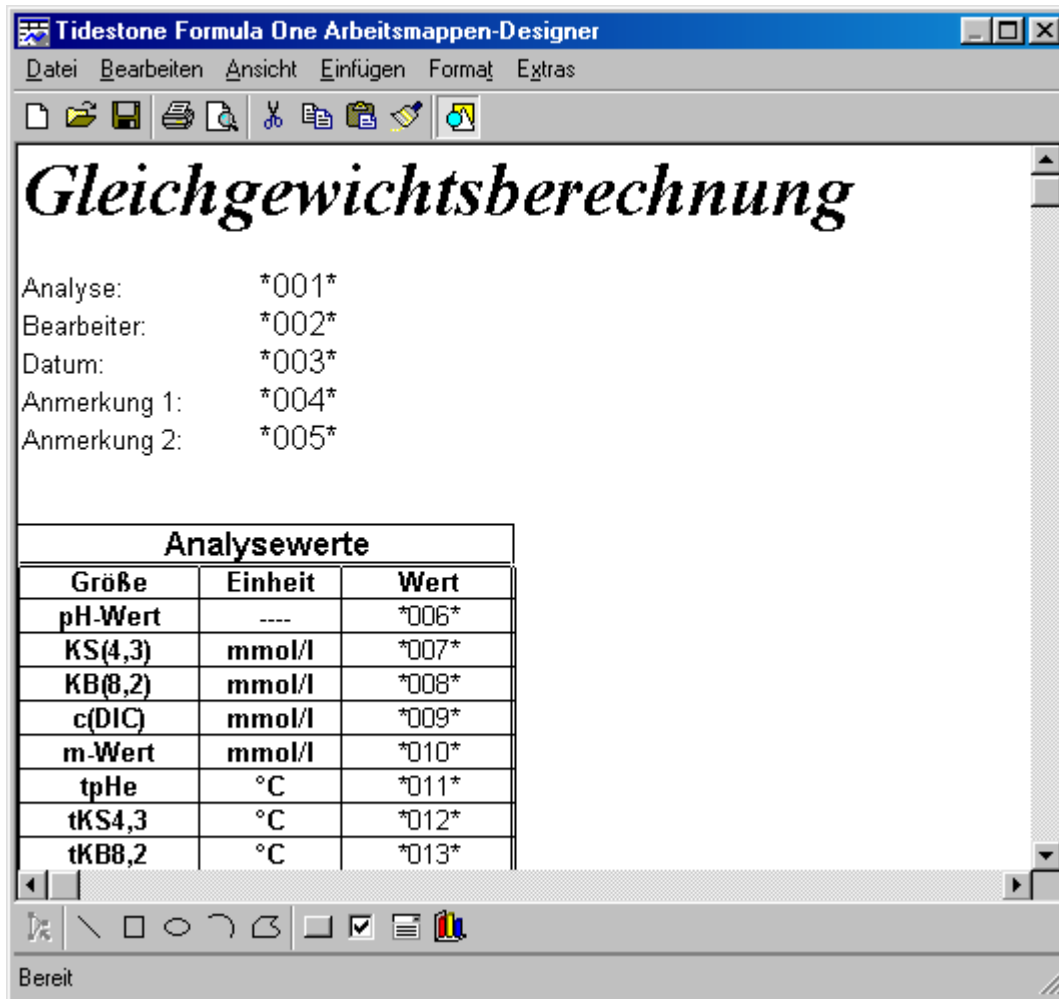


Um kleine Änderungen im Aufbau des Ausgabefensters durchzuführen, empfiehlt es sich, eine vorhandene Datei zu öffnen, diese zu verändern und wieder abzuspeichern. Soll, wie in diesem Beispiel, der Aufbau des Wasserfensters geändert werden, so muss die Vorlage „*Wasserfenster.vts*“ entsprechend angepasst werden.

Mit dem Menübefehl „*Datei*“ und dem Unterpunkt „*lesen*“ wird ein Dialogfenster zum Öffnen einer bestehenden Datei angezeigt.



Da sich alle Vorlagen in dem Programm Unterverzeichnis „*Vorlagen*“ befinden muss zuerst in dieses Verzeichnis gewechselt, die Vorlage „*Wasserfenster.vts*“ angewählt und durch die Schaltfläche „*Öffnen*“ geöffnet werden.



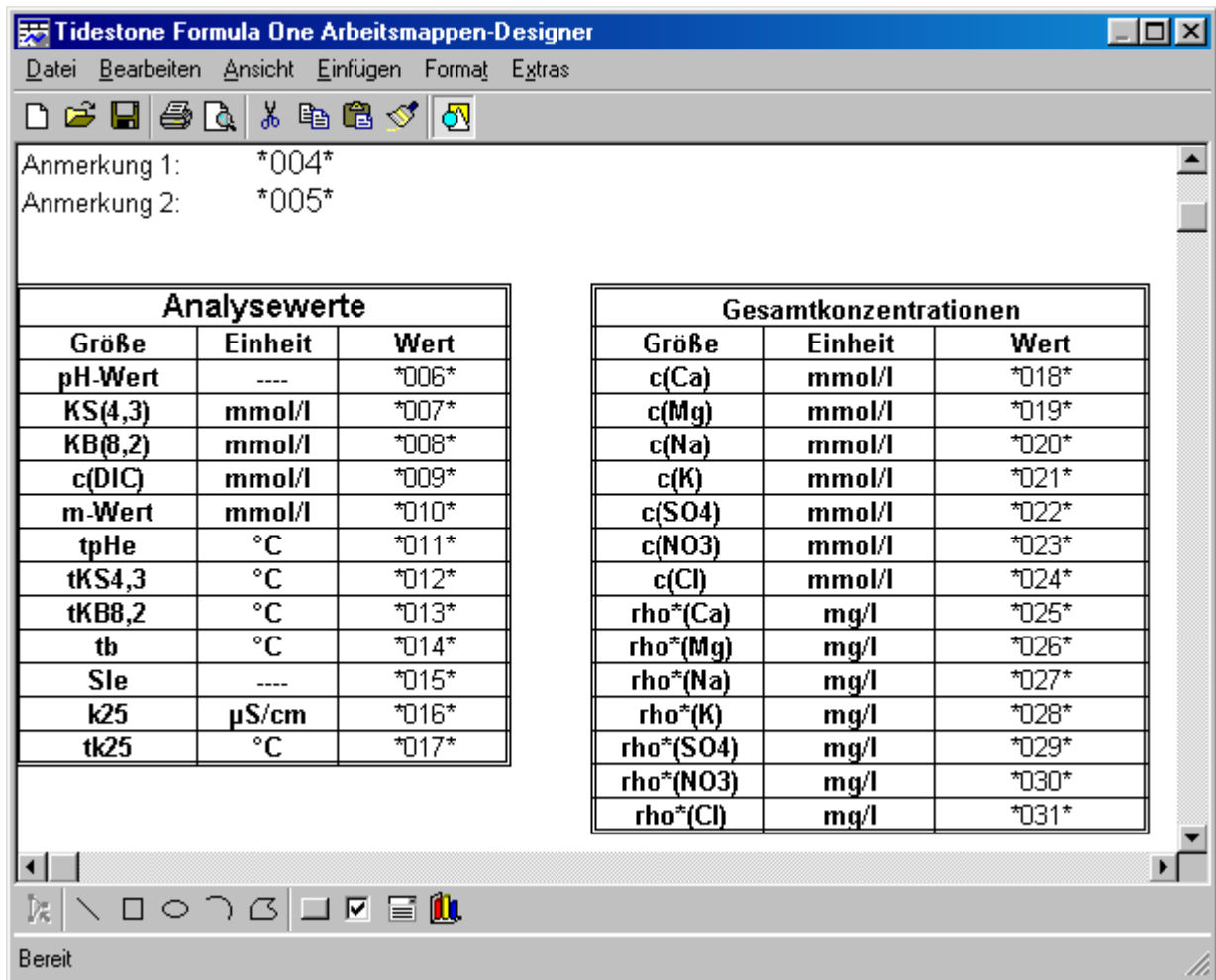
Die Vorlage „*Wasserfenster.vts*“ enthält Zellen, deren Inhalt mit einem „*“ beginnen und enden. Zwischen den beiden Multiplikationszeichen befindet sich eine 3-stellige Ziffernkombination. Der Wert dieser Ziffernkombination bestimmt die darzustellende Größe. Die Position an der die Größe dargestellt wird, ist identisch mit der Position der Ziffernkombination.

So steht beispielsweise die Zelle „*006*“ für den Wert des pH-Wertes und die Zelle „*011*“ für den Wert der Messtemperatur des pH-Wertes tpHe.

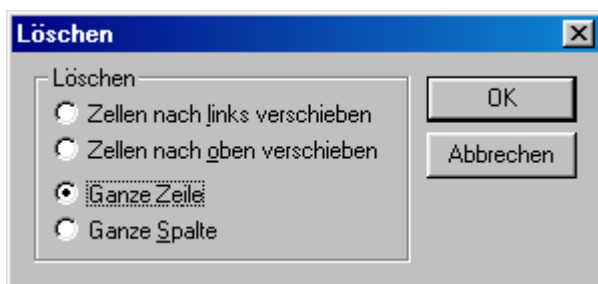
Um nun die Gesamtkonzentrationen neben den Analysewerten anzuordnen wird der Bereich „*Gesamtkonzentrationen*“ mit der Maus markiert, mit dem Menübefehl „*Bearbeiten*“ und „*Ausschneiden*“ entfernt, mit der Maus die Zelle der neuen Anfangsposition markiert und mit dem Menübefehl „*Bearbeiten*“ und „*Einfügen*“ an der neuen Position wieder eingefügt.

Gesamtkonzentrationen		
Größe	Einheit	Wert
c(Ca)	mmol/l	*018*
c(Mg)	mmol/l	*019*
c(Na)	mmol/l	*020*
c(K)	mmol/l	*021*
c(SO4)	mmol/l	*022*
c(NO3)	mmol/l	*023*
c(Cl)	mmol/l	*024*
rho*(Ca)	mg/l	*025*
rho*(Mg)	mg/l	*026*
rho*(Na)	mg/l	*027*
rho*(K)	mg/l	*028*
rho*(SO4)	mg/l	*029*
rho*(NO3)	mg/l	*030*
rho*(Cl)	mg/l	*031*

Nachdem die Operationen „*Ausschneiden*“ und „*Einfügen*“ vollzogen wurden, sollte der Aufbau folgendem Bild entsprechen.



Der ehemalige Bereich der Gesamtkonzentrationen beinhaltet nun Leerzeilen. Diese können entfernt werden, indem die zu löschenden Zeilen mit der Maus angewählt werden und anschließend der Menübefehl „*Bearbeiten*“ und „*Zellen löschen...*“ ausgeführt wird.



In dem „*Löschen*“ Dialogfeld wird der Punkt „Ganze Zeile“ angewählt und mit der Befehlsschaltfläche „*OK*“ bestätigt.

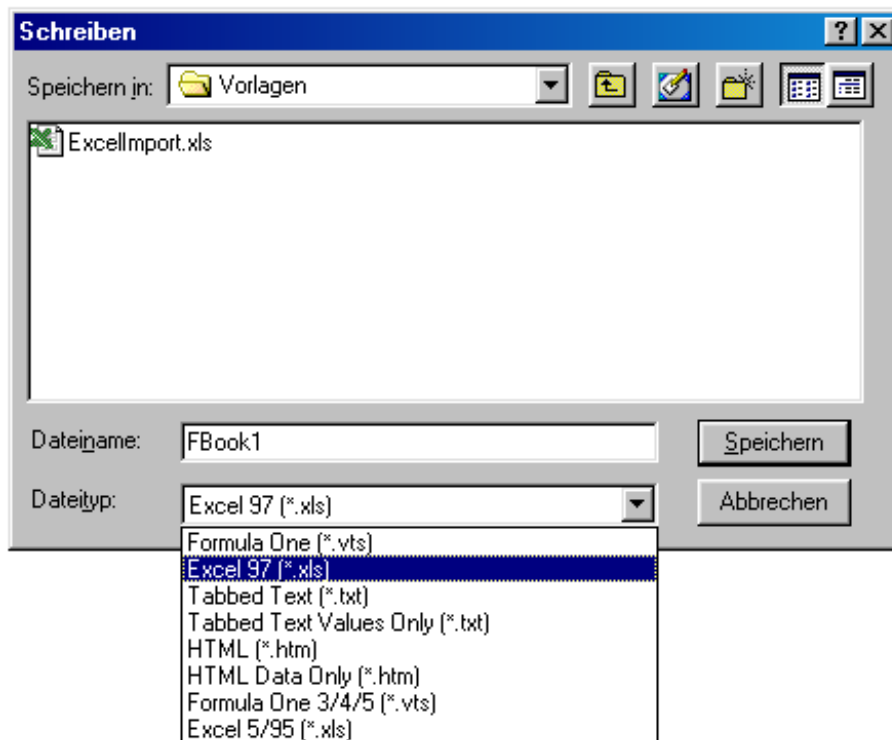
Letztendlich wird die neue Vorlage wieder in das Vorlagenverzeichnis unter dem Namen „*Wasserfenster.vts*“ abgespeichert. Zuvor empfiehlt es sich von den Originalvorlagen eine Sicherungskopie anzufertigen.

Durch die Befehlsschaltfläche „**Abbrechen**“ oder „**Speichern**“ wird das Dialogfenster „Optionen“ wieder geschlossen. Wird nun eine neue Wasseranalyse berechnet, oder eine bereits berechnete Analyse geladen, so besitzt das neue Ausgabefenster den neuen Aufbau.

Auf einige Besonderheiten und spezielle Möglichkeiten soll im Folgenden noch hingewiesen werden.

Arbeiten Sie gerne mit Excel ?

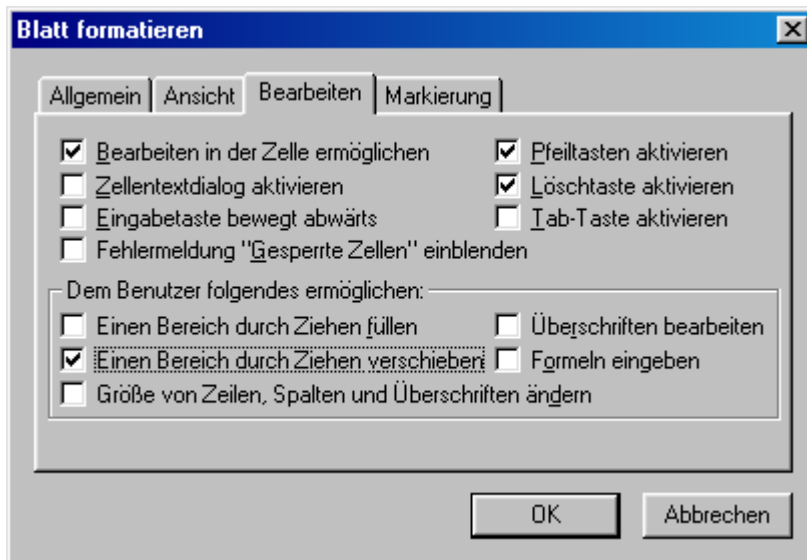
Der Formulardesigner ist mit Excel kompatibel. Das bedeutet, dass die Formularvorlagen als Excel-dateien gespeichert und in Excel bearbeitet werden können. Ebenso funktioniert der Weg zurück. Grafiken, sehr spezielle Excelbefehle und auch Excelmakros gehen bei Import- und Exportfunktionen allerdings verloren.



Sollen die Blatteigenschaften geändert werden ?

Die Vorlagen für die jeweiligen Fenstertypen sind mit einem Schutz ausgestattet, so dass nicht wesentlich Werte verschoben, gelöscht oder gar verändert werden.

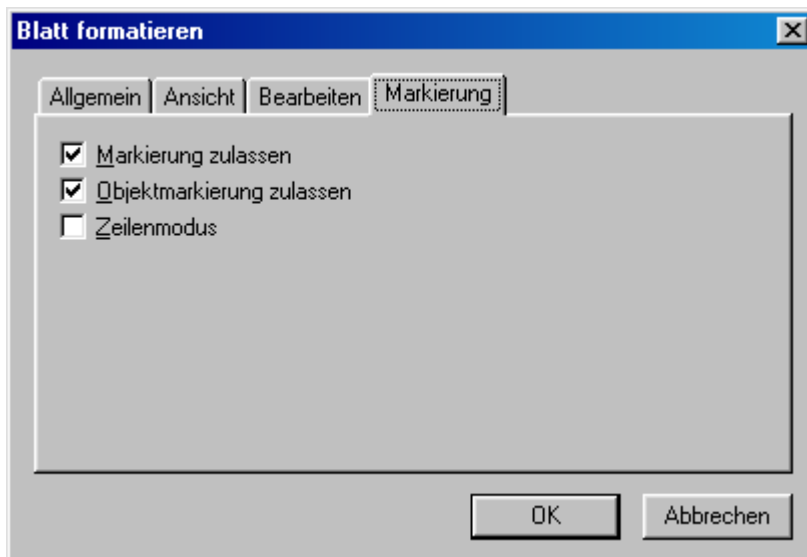
Möchten Sie den Schutz deaktivieren, so finden Sie unter dem Menüpunkt „**Format**“, „**Blatt**“ und „**Eigenschaften**“ eine Vielzahl von Einstellmöglichkeiten.



Sollen Graphiken eingebunden werden ?

Graphiken (z.B. das Firmeneigene Logo) können problemlos über die Zwischenablage von Windows in die Vorlage importiert werden. Dazu starten Sie das entsprechende Windows Programm, welches die Graphik enthält, markieren die Graphik, wählen den Menüpunkt „**Bearbeiten**“ und „**Kopieren**“, wechseln dann in den Formulardesigner und wählen den Menüpunkt „**Bearbeiten**“ und „**Einfügen**“.

Um das Graphikobjekt auch an die entsprechende Stelle zu schieben, sollten auch die Blatteigenschaften verändert werden.



Gleichgewichtsberechnung

Analyse: Tab6B3
 Bearbeiter: Rohleder
 Datum: 27.09.00
 Anmerkung 1: Beispielrechnung DIN 38404 T10 Stand 23.08.93
 Anmerkung 2: Entcarb. mit Ca(OH)₂; theor. Zugabe: 6.389 mmol/l

Analysewerte		
Größe	Einheit	Wert
pH-Wert	----	7.537
KS(4,3)	mmol/l	6.103
KB(8,2)	mmol/l	2.721
c(DIC)	mmol/l	9.679
m-Wert	mmol/l	6.051
tpHe	°C	20.000
tKS4,3	°C	20.000
tKB8,2	°C	20.000
tb	°C	10.000
Slc	----	0.000
k25	µS/cm	286.154
tk25	°C	25.000

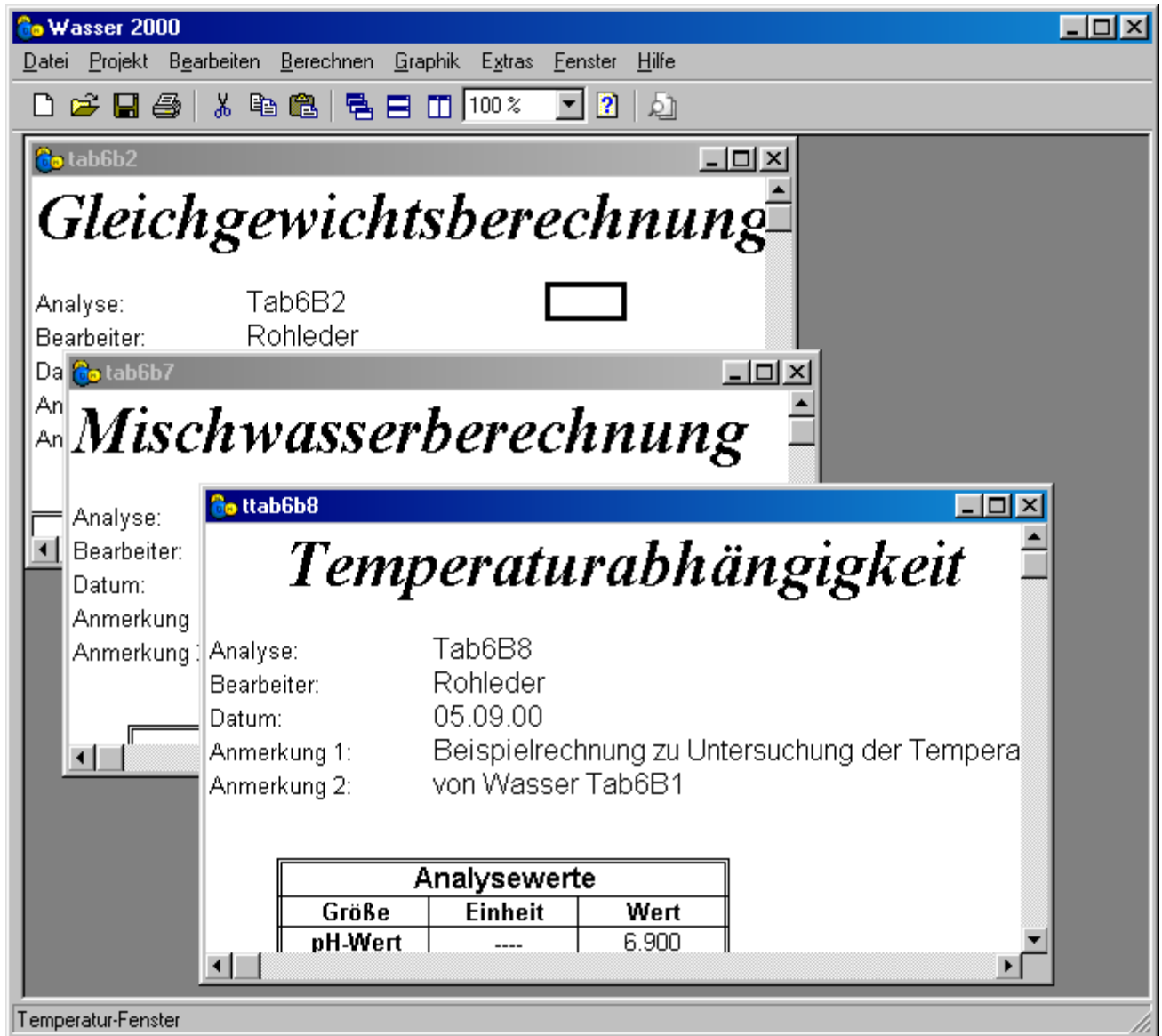
Gesamtkonzentrationen		
Größe	Einheit	Wert
c(Ca)	mmol/l	6.000
c(Mg)	mmol/l	6.000
c(Na)	mmol/l	2.000
c(K)	mmol/l	2.000
c(SO ₄)	mmol/l	2.000
c(NO ₃)	mmol/l	2.000
c(Cl)	mmol/l	2.000
rho*(Ca)	mg/l	240.480
rho*(Mg)	mg/l	145.860
rho*(Na)	mg/l	45.980
rho*(K)	mg/l	78.200
rho*(SO ₄)	mg/l	192.120
rho*(NO ₃)	mg/l	124.140
rho*(Cl)	mg/l	70.900

3.5. Die Fensterarten

Die meisten Arbeiten im Programm WASSER2000 werden in Fenstern durchgeführt. Die Dialogfenster dienen dazu, Eingaben vom Anwender entgegenzunehmen. Die Ergebnisse von Berechnungen werden in Ergebnisfenstern dargestellt. Es gibt mehrere Arten von Ergebnisfenstern und jedes Ergebnisfenster besitzt seine eigen Vorlage. Einen Überblick über die verschiedenen Fenstertypen und Vorlagen bietet folgende Tabelle:

Fenstertyp	Vorlagendatei
Wasserfenster	WasserFenster.vts
Mischwasserfenster	MischwasserFenster.vts
Temperaturfenster	TemperaturFenster.vts
Korrosionsfenster	KorrFenster.vts
Enthärtungsfenster	EnthFenster.vts
H-Entcarbonisierungsfenster	HentCarFenster.vts
Schnellentcarbonisierung	SchnellEntCarFenster.vts
Aktivkohlefilterfenster	AktivkohleFenster.vts
Sandfilter	SandFenster.vts
Enteisenungsfenster	FeFenster.vts

Ein Ergebnisfenster ist ein Teil des Bildschirms, den Sie verschieben, vergrößern, verkleinern, teilen, ablegen, öffnen und schließen können. Im Programm WASSER2000 können Sie sehr viele Fenster öffnen, aber nur jeweils eines davon, nämlich das mit der aktiven Titelzeile ist das aktive Fenster. Alle Operationen (z.B. speichern, drucken) beziehen sich auf dieses Fenster. Es verfügt über Felder zum Vergrößern/Verkleinern, zum Schließen, zum Positionieren und einen Rollbalken. Überlappen sich die Fenster, so befindet sich das aktive Fenster immer im Vordergrund.



3.5.1. Das Wasserfenster

Wird unter dem Menüpunkt „Datei“ und „New“ eine neue Wasseranalyse eingegeben und die Berechnung des Gleichgewichts gestartet, so erscheint nach der Berechnung ein Wasserfenster. Dieses Fenster enthält mit der Originalvorlage „Wasserfenster.vts“ folgende Angaben:

- Die Wasserkenndaten: (Analyse, Bearbeiter, Datum, Anmerkung 1, Anmerkung 2)

- Die Analysenwerte: pH-Wert bei t_{pHe} , $K_S(4,3)$ bei $t_{KS(4,3)}$, $K_B(8,2)$ bei $t_{KB(8,2)}$, $c(\text{DIC})$, m-Wert, t_b , SI_e und k_{25} bei t_{k25}
- Die Gesamtkonzentrationen: Calcium, Magnesium, Natrium, Kalium, Sulfat, Nitrat, Chlorid
- Eine Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse: SI , pH_{tb} , pH_{SIe} , pH_{Ctb} , D_{tb} , calcitlösend oder -abscheidend
- Eine ausführliche Darstellung der Ergebnisse für drei Zustände des Wassers bei der Bewertungstemperatur: Wasser bei Bewertungstemperatur t_b (pH_{tb}); Wasser bei dem vorgegebenen SI_e (ist $SI_e=0$, so ist der pH-Wert gleichzusetzen mit pH_l); Wasser im Zustand der Calcitsättigung (pH_c)

Die Darstellung der Rechenergebnisse ist gegliedert in:

- Konzentrationen der Kohlensäure: $c(\text{CO}_2)$, $c(\text{HCO}_3^-)$, $c(\text{CO}_3^{2-})$
- Konzentrationen der Verbindungen: $c(\text{CaCO}_3)$, $c(\text{MgCO}_3)$, $c(\text{CaHCO}_3^+)$, $c(\text{MgHCO}_3^+)$, $c(\text{CaSO}_4)$, $c(\text{MgSO}_4)$
- Konzentrationen der Ionen: $c(\text{Ca}^{2+})$, $c(\text{Mg}^{2+})$, $c(\text{Na}^+)$, $c(\text{K}^+)$, $c(\text{SO}_4^{2-})$, $c(\text{NO}_3^-)$ und $c(\text{Cl}^-)$
- sonstige wichtige Kenngrößen: Ionenstärke, SI , pH , $c(\text{DIC})$, m , ϕ_i , d , Kationen, Anionen, f_x , t_b

Ist das aktive Fenster ein Wasserfenster, so können mit diesem Wasser weiterführende Berechnungen durchgeführt werden (z.B. Korrosion, Temperaturabhängigkeit, Aufbereitung ...). Wasserfenster tragen die Dateiendung „*was*“ und verwenden die Vorlage „*WasserFenster.vts*“.

3.5.2. Das Temperaturfenster

Ist das aktive Fenster ein Wasserfenster, dann kann für dieses Wasser unter dem Menüpunkt „*Berechnen*“ und „*Temperaturabhängigkeit*“ das Temperaturverhalten ermittelt werden. Das neue Temperaturfenster enthält folgende Angaben:

- Die Wasserkenndaten: Analyse, Bearbeiter, Datum, Anmerkung 1, Anmerkung 2
- Eingegebene Analysenwerte: pH-Wert bei t_{pHe} , $K_S(4,3)$ bei $t_{KS4,3}$, $K_B(8,2)$ bei $t_{KB8,2}$, $c(\text{DIC})$, m-Wert, t_b , SI_e und k_{25} bei t_{k25}
- Eingegebene Gesamtkonzentrationen: Calcium, Magnesium, Natrium, Kalium, Sulfat, Nitrat, Chlorid
- Ausführliche Darstellung der Ergebnisse für die 11 Bewertungstemperaturen:

Die Darstellung der Rechenergebnisse ist gegliedert in:

- Konzentrationen der Kohlensäure: $c(\text{CO}_2)$, $c(\text{HCO}_3^-)$, $c(\text{CO}_3^{2-})$
- Konzentrationen der Verbindungen: $c(\text{CaCO}_3)$, $c(\text{MgCO}_3)$, $c(\text{CaHCO}_3^+)$, $c(\text{MgHCO}_3^+)$, $c(\text{CaSO}_4)$, $c(\text{MgSO}_4)$
- Konzentrationen der Ionen: $c(\text{Ca}^{2+})$, $c(\text{Mg}^{2+})$, $c(\text{Na}^+)$, $c(\text{K}^+)$, $c(\text{SO}_4^{2-})$, $c(\text{NO}_3^-)$ und $c(\text{Cl}^-)$
- sonstige wichtige Kenngrößen: Ionenstärke, SI, pH, $c(\text{DIC})$, m, phi, d, Kationen, Anionen, f_x , t_b

Ist das aktive Fenster ein Temperaturfenster, so können der pH-Wert und der Sättigungsindex unter dem Menüpunkt „**Graphik**“ auch graphisch dargestellt werden. Temperaturfenster tragen die Dateierendung „**wat**“ und verwenden die Vorlage „**TemperaturFenster.vts**“.

3.5.3. Das Mischwasserfenster

Sind mindestens zwei Wasserfenster geöffnet, dann können diese beiden Wässer unter dem Menüpunkt „**Berechnung**“ und „**Mischwasserberechnung**“ Register „**Mischen von/bis**“ miteinander gemischt werden. Das Ergebnis dieser Berechnungen ist ein Mischwasserfenster. Das neue Mischwasserfenster enthält folgende Angaben:

- Die Wasserkenndaten (Analyse, Bearbeiter, Datum, Anmerkung 1, Anmerkung 2)
- Die Analysenwerte der Wässer A und B (pH-Wert bei t_{pHe} , $K_S(4,3)$ bei $t_{\text{KS4,3}}$, $K_B(8,2)$ bei $t_{\text{KB8,2}}$, $c(\text{DIC})$, m-Wert, t_b , SI_e und k_{25} bei t_{k25})
- Die Gesamtkonzentrationen: der Wässer A und B (Calcium, Magnesium, Natrium, Kalium, Sulfat, Nitrat, Chlorid)
- Ausführliche Darstellung der Ergebnisse für die 11 Mischungsverhältnisse:

Die Darstellung der Rechenergebnisse ist gegliedert in:

- Konzentrationen der Kohlensäure: $c(\text{CO}_2)$, $c(\text{HCO}_3^-)$, $c(\text{CO}_3^{2-})$
- Konzentrationen der Verbindungen: $c(\text{CaCO}_3)$, $c(\text{MgCO}_3)$, $c(\text{CaHCO}_3^+)$, $c(\text{MgHCO}_3^+)$, $c(\text{CaSO}_4)$, $c(\text{MgSO}_4)$
- Konzentrationen der Ionen: $c(\text{Ca}^{2+})$, $c(\text{Mg}^{2+})$, $c(\text{Na}^+)$, $c(\text{K}^+)$, $c(\text{SO}_4^{2-})$, $c(\text{NO}_3^-)$ und $c(\text{Cl}^-)$
- sonstige wichtige Kenngrößen: Ionenstärke, SI, pH, $c(\text{DIC})$, m, phi, d, Kationen, Anionen, f_x , t_b

Ist das aktive Fenster ein Mischwasserfenster, so können der pH-Wert und der Sättigungsindex unter dem Menüpunkt „**Graphik**“ auch graphisch dargestellt werden. Mischwasserfenster tragen die Dateiendung „**wam**“ und verwenden die Vorlage „**MischwasserFenster.vts**“.

3.5.4. Das Korrosionsfenster

Ist das aktive Fenster ein Wasserfenster, dann kann für dieses Wasser unter dem Menüpunkt „**Berechnen**“ und „**Korrosionsbetrachtung**“ das Korrosionsverhalten nach DIN 50930 ermittelt werden. Das neue Korrosionsfenster enthält folgende Angaben:

- Die Wasserkenndaten (Analyse, Bearbeiter, Datum, Anmerkung 1, Anmerkung 2)
- Die Analysewerte des Wassers (pH-Wert bei t_{pHe} , $K_S(4,3)$ bei $t_{KS4,3}$, $K_B(8,2)$ bei $t_{KB8,2}$, $c(DIC)$, m-Wert, t_b , SI_e und k_{25} bei t_{k25})
- Die Gesamtkonzentrationen: des Wassers (Calcium, Magnesium, Natrium, Kalium, Sulfat, Nitrat, Chlorid)
- Aussagen über das Korrosionsverhalten für die eingegebenen Parameter. Korrosionsbegünstigende Parameter sind dabei durch einen Pfeil gekennzeichnet.

Korrosionsfenster tragen die Dateiendung "**wak**" und verwenden die Vorlage „**KorrFenster.vts**“.

4. Berechnungsbeispiel zur Calcitsättigung

Als Ausgangsdaten der folgenden Beispielrechnungen zum pH-Wert der Calcitsättigung dienen die Beispiele 1 bis 5 der Tabelle 6 der DIN 38404 Teil 10 Stand April 1995.

4.1. Ausgangsdaten

Die folgende Tabelle enthält die Ausgangsdaten, welche für eine Berechnung des pH-Wertes bei Calcitsättigung nötig sind:

		Beispiel				
Größe	Einheit	1	2	3	4	5
PH _e	----	6,90	8,20	7,90	8,40	8,90
t	°C	20	15	20	17	20
t _b	°C	10	11	5,5	12	10
k ₂₅	mS/m	96,0	45,0	32,0	17,1	14,0
KS(4,3)	mmol/l	5,35	1,71	2,46	0,99	0,40
c(Ca)	mmol/l	3,50	1,24	1,22	0,57	0,30
c(Mg)	mmol/l	0,75	0,41	0,35	0,10	0,15
c(Na)	mmol/l	2,05	0,90	0,15	0,21	0,30
c(K)	mmol/l	0,15	0,07	0,05	0,02	0,05
c(Cl)	mmol/l	2,50	0,90	0,16	0,34	0,30
c(NO ₃)	mmol/l	0,50	0,55	0,07	0,08	0,20
c(SO ₄)	mmol/l	1,20	0,58	0,35	0,10	0,20

4.2. Berechnung des pH-Wertes bei Calcitsättigung

Nach dem Start des Programms WASSER2000 wird der Menüpunkt „Datei“ und „Neu...“ ausgewählt.

In das folgende Dialogfenster „Eingabe der Wasserkenndaten“ werden nun die entsprechenden Analysewerte für Beispiel 1 eingetragen. Sind alle Daten eingegeben, sollte das Dialogfenster folgender Graphik gleichen:

Eingabe der Wasserkenndaten
X

Allgemein

Analyse:

Bearbeiter:

Datum: ▾

Anmerkung 1:

Anmerkung 2:

Wird berechnet mit

pH-Wert und KS(4,3)

pH-Wert und KB(8,2)

KS(4,3) und KB(8,2)

c(DIC) und KS(4,3)

c(DIC) und KB(8,2)

pH-Wert und c(DIC)

m-Wert und c(DIC)

Analysenwerte

pH-Wert	<input type="text" value="6.900"/>	---	t (pH)	<input type="text" value="20.000"/>	° C
KS(4,3)	<input type="text" value="5.350"/>	mmol/l	t (KS(4,3))	<input type="text" value="20.000"/>	° C
			t (KB(8,2))	<input type="text" value="20.000"/>	° C
			t (b)	<input type="text" value="10.000"/>	° C
			k (25)	<input type="text" value="960.000"/>	µS/cm

Gesamtkonzentrationen

c(Ca)	<input type="text" value="3.500"/>	mmol/l	rho(Ca)	<input type="text" value="140.280"/>	mg/l
c(Mg)	<input type="text" value="0.750"/>	mmol/l	rho(Mg)	<input type="text" value="18.232"/>	mg/l
c(Na)	<input type="text" value="2.050"/>	mmol/l	rho(Na)	<input type="text" value="47.129"/>	mg/l
c(K)	<input type="text" value="0.150"/>	mmol/l	rho(K)	<input type="text" value="5.865"/>	mg/l
c(SO4)	<input type="text" value="1.200"/>	mmol/l	rho(SO4)	<input type="text" value="115.272"/>	mg/l
c(NO3)	<input type="text" value="0.500"/>	mmol/l	rho(NO3)	<input type="text" value="31.035"/>	mg/l
c(Cl)	<input type="text" value="2.500"/>	mmol/l	rho(Cl)	<input type="text" value="88.625"/>	mg/l

Wählen Sie die Berechnungsmethode

Durch Auswahl der Befehlsschaltfläche „**Berechnen**“ wird die Berechnung gestartet und die Ergebnisse werden in Form eines Wasserfensters angezeigt. Wurde die Standard Vorlage für Wasserfenster nicht verändert, so werden die Ergebnisse der Berechnung wie folgt dargestellt:

Wasser 2000 - [Tab6B1-1]

Datei Projekt Bearbeiten Berechnen Graphik Extras Fenster Hilfe

70 %

Gleichgewichtsberechnung

Analyse: Tab6B1
 Bearbeiter: Rohleder
 Datum: 05.09.00
 Anmerkung 1: Beispielrechnung DIN 38404 T10 Stand 23.08.93
 Anmerkung 2: Beispiel 1 aus Tabelle 6

Analysewerte		
Größe	Einheit	Wert
pH-Wert	----	6.900
Ks(4,3)	mmol/l	5.350
KB(8,2)	mmol/l	1.484
c(DIC)	mmol/l	6.782
m-Wert	mmol/l	5.364
tpHe	°C	20.000
tKS4,3	°C	20.000
tKB8,2	°C	20.000
tb	°C	10.000
Sle	----	0.000
k25	µS/cm	960.000
tk25	°C	25.000

Gesamtkonzentrationen		
Größe	Einheit	Wert
c(Ca)	mmol/l	3.500
c(Mg)	mmol/l	0.750
c(Na)	mmol/l	2.050
c(K)	mmol/l	0.150
c(SO4)	mmol/l	1.200
c(NO3)	mmol/l	0.500
c(Cl)	mmol/l	2.500
rho*(Ca)	mg/l	140.280
rho*(Mg)	mg/l	18.233
rho*(Na)	mg/l	47.129
rho*(K)	mg/l	5.865
rho*(SO4)	mg/l	115.272
rho*(NO3)	mg/l	31.035
rho*(Cl)	mg/l	88.625

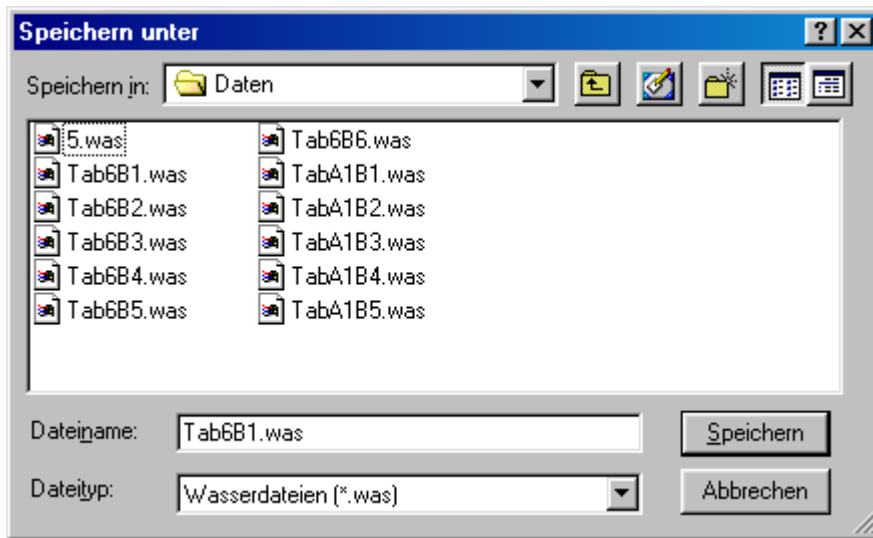
Sättigungsindex bei Bewertungstemperatur	SI =	-0.147	----
Delta pH-Wert des Wassers bei tb	dpHtb =	-0.097	----
pH-Wert des Wassers bei tb	pHtb =	6.981	----
pH-Wert für Sle bei Bewertungstemperatur	pHSle =	7.108	----
pH-Wert nach Sättigung mit Calcit bei tb	pHCtb =	7.078	----
Calcitlösekapazität bei Bewertungstemperatur	Dtb =	0.202	mmol/l

Das Wasser ist calcitlösend
 und wurde aus den Größen pH-Wert und Ks(4,3) berechnet.

Ergebnisse der GGW - Berechnung				
Größe	Einheit	pH bei tb	pH bei Sle	pHC bei tb
Konzentrationen der Kohlensäure				
c(CO2)	mmol/l	1.404	1.105	1.204

Wasser-Fenster

Um auf die Daten zu einem späteren Zeitpunkt wieder zugreifen zu können, sollte das aktive Wasserfenster nun gespeichert werden. Der Menüpunkt „Datei“ und „Speichern unter“ ruft ein Dialogfenster auf, welches zu Eingabe des Namens auffordert.



In das Eingabefeld Dateiname wird automatisch der Name des aktiven Fensters eingetragen. Die Dateiendung „.was“ wird dabei automatisch angehängt.

Nun kann die Berechnung der Beispiele 2 bis 5 erfolgen. Wurden alle Analysewerte richtig eingegeben und die Beispiele 2 bis 5 berechnet, so sind die Ergebnisse gleich der in folgender Tabelle:

		Ergebnisse der Berechnungen für die Beispiele				
Größe	Einheit	1	2	3	4	5
SI_{tb}	----	-0,15	0,28	0,17	0,01	-0,15
pH_{tb}	----	6,98	8,25	8,05	8,47	9,08
pH_{Ltb}	----	7,11	7,97	7,89	8,46	9,24
pH_{Ctb}	----	7,08	7,99	7,90	8,46	9,22
D_{tb}	mmol/l	0,20	-0,03	-0,03	-0,00	0,01
Ionenst.	mmol/l	14,9	6,2	5,0	2,3	1,9

4.3. Mischwasserberechnung

Für die Wässer der Beispiele 1 bis 5 können nun zwei verschiedene Mischwasserberechnungen durchgeführt werden. Um die Vorgehensweise für beide Mischwasserberechnungen zu demonstrieren dienen folgende Annahmen:

- Die Mischwasserberechnung für ein *festes Mischungsverhältnis* der Beispiele 1 bis 5: Es sollen Beispiel 1 mit 45 m³/h, Beispiel 2 mit 65 m³/h, Beispiel 3 mit 15 m³/h, Beispiel 4 mit 105 m³/h und Beispiel 5 mit 35 m³/h gemischt werden.
- Die Mischwasserberechnung zweier Wässer für ein *variables Mischungsverhältnis*: Beispiel 1 soll mit Beispiel 2 im Bereich von 0% bis 100% gemischt werden.

4.3.1. Festes Mischungsverhältnis

Sind alle fünf Beispiele als Fenster geöffnet, so kann unter dem Punkt „**Berechnen**“ und „**Mischwasserberechnung**“ die Mischwasserberechnung eingeleitet werden. Es erscheint das Dialogfenster Mischwasserberechnung. In diesem Dialogfenster werden unter dem Blatt „**festes Mischungsverhältnis**“ alle zur Verfügung stehenden Wasserfenster in einer Liste angezeigt. Indem die Spalte Mischungsanteil mit der linken Maustaste angeklickt wird, kann der entsprechende Anteil des jeweiligen Wassers eingegeben werden.

Mischwasserberechnung

Analyse: tab6b6

Bearbeiter: Rohleder

Datum: 28.09.00

Anmerkung 1: Beispielrechnung DIN 38404 T10 Stand April 1995

Anmerkung 2: Mischwasserberechnung für die Beispiele 1 bis 5

festes Mischungsverhältnis | Mischen von/bis

Mischungsanteil	Wasser
45	Tab6B1
65	tab6b2
15	tab6b3
105	tab6b4
35	tab6b5

OK Abbrechen Hilfe

Die Befehlsschaltfläche „**OK**“ startet die Berechnung. Das Ergebnis wird in einem neuen Wasserfenster dargestellt.

4.3.2. Variables Mischungsverhältnis

Unter dem Menüpunkt „**Berechnen**“ und „**Mischwasserberechnung**“ lassen sich auch zwei Wasserfenster in zwei frei wählbaren Mischungsgrenzen mischen. In dem Blatt „**Mischen von/bis**“ des Dialogfensters „**Mischwasserberechnung**“ lassen sich beide Wässer anwählen und der Start und Endwert des Mischungsverhältnisses festlegen.

Die Darstellung der Ergebnisse erfolgt nun in einem Mischwasserfenster.

Wasser 2000 - [tab6b7]

Datei Projekt Bearbeiten Berechnen Graphik Extras Fenster Hilfe

70 %

Mischwasserberechnung

Analyse: Tab6B7
 Bearbeiter: Rohleder
 Datum: 05.09.00
 Anmerkung 1: Tab6B1 und Tab6B2
 Anmerkung 2: Mischen von tab6b1 und tab6b2

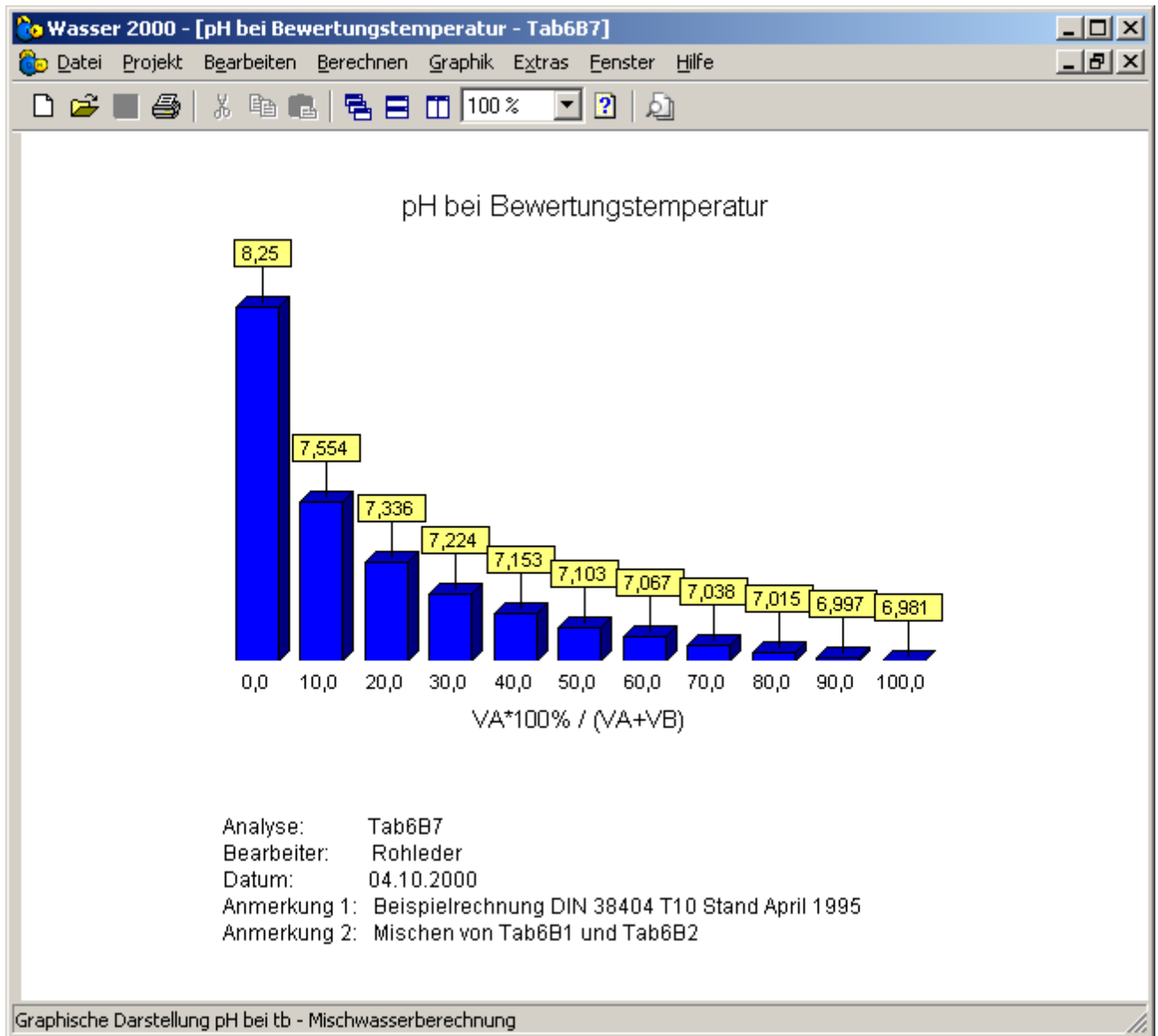
Größe	Einheit	Wasser A	Wasser B
pH-Wert	----	6.900	8.200
KS(4,3)	mmol/l	5.350	1.710
KB(8,2)	mmol/l	1.484	0.000
c(DIC)	mmol/l	6.762	1.675
m-Wert	mmol/l	5.364	1.674
tpHe	°C	20.000	15.000
tKS4,3	°C	20.000	15.000
tKB8,2	°C	20.000	15.000
tb	°C	10.000	11.000
Ste	----	0.000	0.000
k25	µS/cm	960.000	450.000
tk25	°C	25.000	25.000

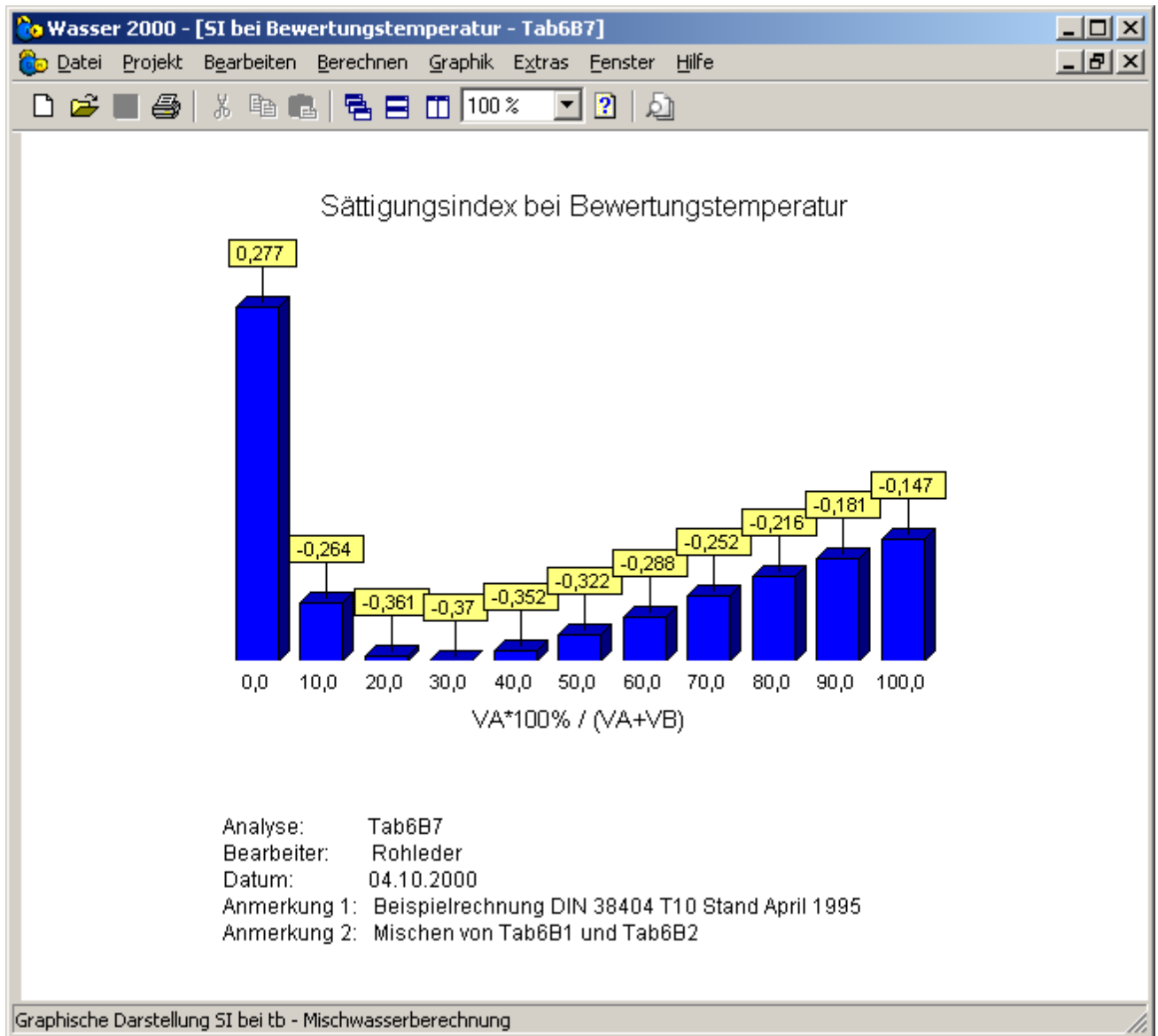
Größe	Einheit	Wasser A	Wasser B
c(Ca)	mmol/l	3.500	1.240
c(Mg)	mmol/l	0.750	0.410
c(Na)	mmol/l	2.050	0.900
c(K)	mmol/l	0.150	0.070
c(SO4)	mmol/l	1.200	0.580
c(NO3)	mmol/l	0.500	0.550
c(Cl)	mmol/l	2.500	0.900
rho*(Ca)	mg/l	140.280	49.699
rho*(Mg)	mg/l	18.233	9.967
rho*(Na)	mg/l	47.129	20.691
rho*(K)	mg/l	5.865	2.737
rho*(SO4)	mg/l	115.272	55.715
rho*(NO3)	mg/l	31.035	34.139
rho*(Cl)	mg/l	88.625	31.905

Größe	Einheit	Anteil Wasser A										
		0.0	10.0	20.0	30.0	40.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0	100.0
Anteil Wasser A		0.0	10.0	20.0	30.0	40.0	50.0	60.0	70.0	80.0	90.0	100.0
Anteil Wasser B		100.0	90.0	80.0	70.0	60.0	50.0	40.0	30.0	20.0	10.0	0.0
Größe	Einheit	Konzentrationen der Kohlensäure										
c(CO2)	mmol/l	0.024	0.147	0.285	0.424	0.564	0.704	0.844	0.984	1.124	1.264	1.404
c(HCO3-)	mmol/l	1.605	1.998	2.392	2.718	3.074	3.430	3.784	4.137	4.489	4.841	5.191
c(CO3-)	mmol/l	0.012	0.003	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002

Mischwasser-Fenster

Ist das Mischwasserfenster das aktive Fenster, so lässt sich unter dem Menüpunkt „**Graphik**“ und „**pH bei tb**“ oder „**SI bei tb**“ der pH-Wert oder der Sättigungsindex graphisch darstellen.





4.4. Berechnung der Temperaturabhängigkeit

Ist ein Wasserfenster das aktive Fenster, so läßt sich für dieses Wasser eine Temperaturbetrachtung durchführen. Im folgenden Beispiel soll für das Wasser Tab6B1 das Temperaturverhalten von pH-Wert und Sättigungsindex SI untersucht werden. Hierfür muß das Fenster Tab6B1 zum aktiven Fenster gemacht werden.

Ist das Wasserfenster Tab6B1 das aktive Fenster, so kann nun der Menüpunkt „**Berechnen**“ und „**Temperaturabhängigkeit**“ angewählt werden. Es erscheint ein Dialogfenster, welches zur Eingabe der Wasserkenndaten und des zu Untersuchenden Temperaturbereiches auffordert.

The screenshot shows a dialog box titled "Berechnung der Temperaturabhängigkeit". It contains the following fields and controls:

- Analyse: Tab6B1
- Bearbeiter: Rohleder
- Datum: 28.09.00
- Anmerkung 1: Beispielrechnung zu Untersuchung der Temperaturabhängigkeit
- Anmerkung 2: von Wasser Tab6B1
- Temperatur von: 0 °C bis: 70 °C
- Buttons: OK, Abbrechen, Hilfe

Nach Wahl der Schaltfläche „**OK**“ startet die Berechnung und die Ergebnisse werden in einem Temperaturfenster dargestellt.

Wasser 2000 - [ttab6b8]

Datei Projekt Bearbeiten Berechnen Graphik Extras Fenster Hilfe

70 %

Temperaturabhängigkeit

Analyse: Tab6B8
 Bearbeiter: Rohleder
 Datum: 05.09.00
 Anmerkung 1: Beispielrechnung zu Untersuchung der Temperaturabhängigkeit
 Anmerkung 2: von Wasser Tab6B1

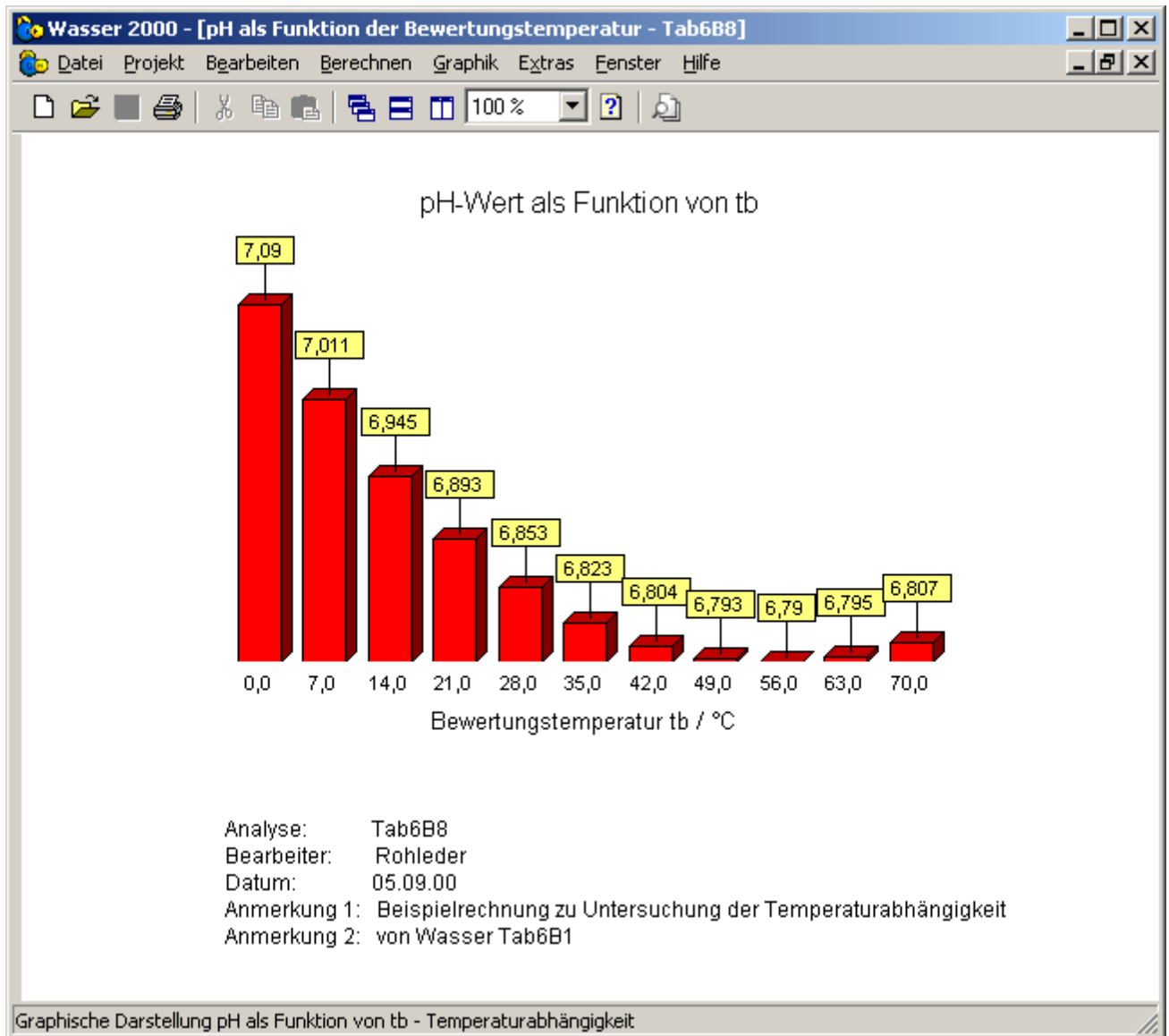
Analysewerte		
Größe	Einheit	Wert
pH-Wert	----	6.900
K _S (4,3)	mmol/l	5.350
K _B (8,2)	mmol/l	1.484
c(DIC)	mmol/l	6.762
m-Wert	mmol/l	5.364
tpHe	°C	20.000
tK _S 4,3	°C	20.000
tK _B 8,2	°C	20.000
tb	°C	10.000
SIe	----	0.000
k ₂₅	µS/cm	960.000
tk ₂₅	°C	25.000

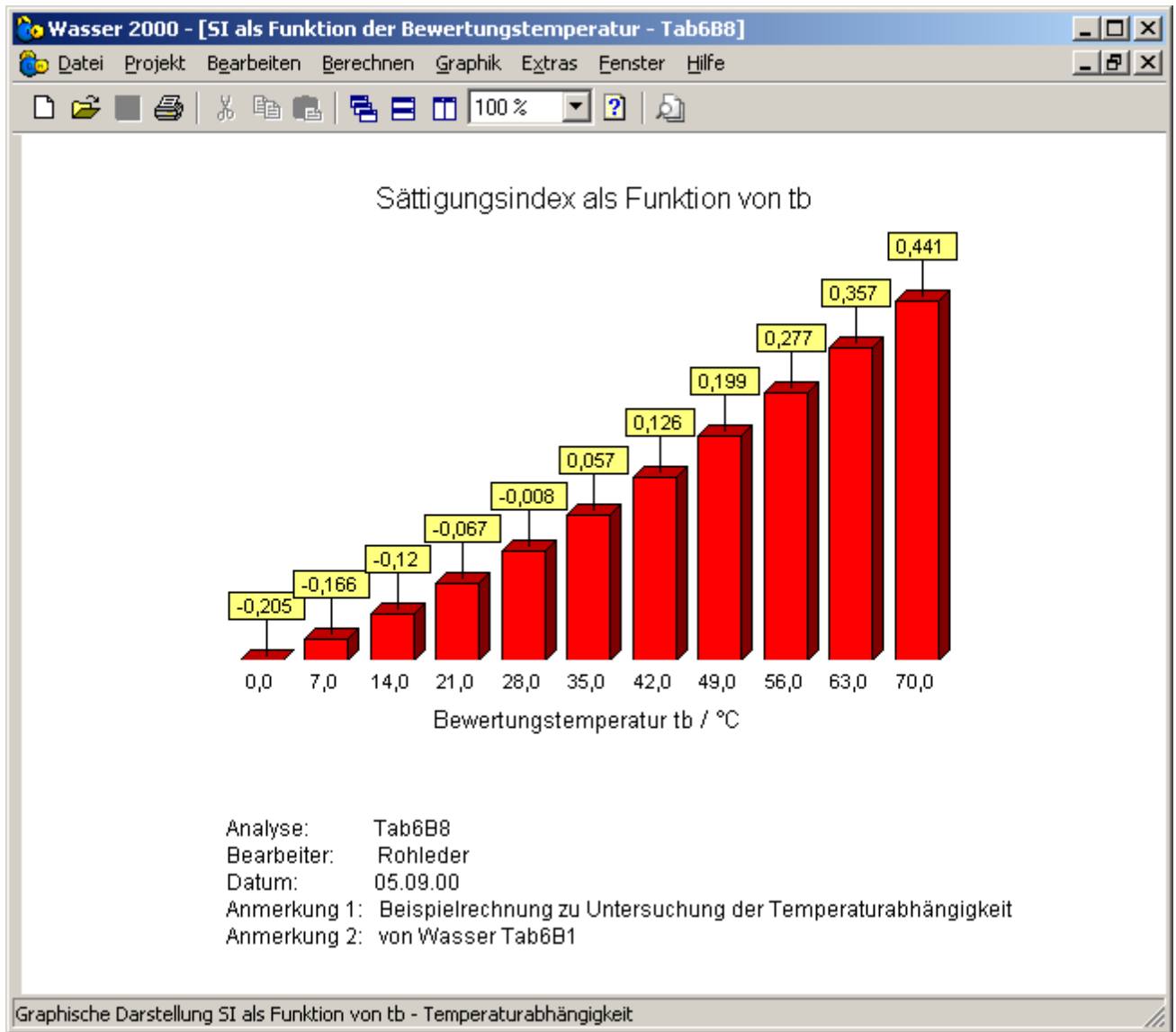
Gesamtkonzentrationen		
Größe	Einheit	Wert
c(Ca)	mmol/l	3.500
c(Mg)	mmol/l	0.750
c(Na)	mmol/l	2.050
c(K)	mmol/l	0.150
c(SO ₄)	mmol/l	1.200
c(NO ₃)	mmol/l	0.500
c(Cl)	mmol/l	2.500
rho*(Ca)	mg/l	140.280
rho*(Mg)	mg/l	18.233
rho*(Na)	mg/l	47.129
rho*(K)	mg/l	5.865
rho*(SO ₄)	mg/l	115.272
rho*(NO ₃)	mg/l	31.035
rho*(Cl)	mg/l	88.625

Ergebnisse der GGW-Berechnung bei verschiedenen Bezugstemperaturen tb												
Größe	Einheit	0.0	7.0	14.0	21.0	28.0	35.0	42.0	49.0	56.0	63.0	70.0
Konzentrationen der Kohlensäure												
c(CO ₂)	mmol/l	1.403	1.404	1.404	1.405	1.407	1.408	1.410	1.411	1.413	1.416	1.418
c(HCO ₃ ⁻)	mmol/l	5.210	5.197	5.183	5.169	5.155	5.140	5.125	5.109	5.093	5.077	5.060
c(CO ₃ ⁻)	mmol/l	0.002	0.002	0.002	0.002	0.003	0.003	0.003	0.003	0.003	0.003	0.003
Konzentrationen der Komplexbild. von Calcium und Magnesium												
c(CaCO ₃)	mmol/l	0.002	0.003	0.004	0.004	0.005	0.006	0.008	0.009	0.011	0.013	0.015

Temperatur-Fenster

Ist das aktive Fenster das Temperaturfenster so lassen sich auch der pH-Wert und der Sättigungsindex SI als Funktion der Temperatur unter dem Menüpunkt „*Graphik*“ und „*pH = F(tb)*“ oder „*SI = F(tb)*“ graphisch darstellen





4.5. Zugabe Säure / Lauge

Häufig ist es in der Wassertechnik nötig den pH-Wert durch Zugabe von Säuren oder Laugen zu verändern. Hierfür dient der Menüpunkt „**Berechnen**“ und „**Zugabe Säure/Lauge**“. Insgesamt stehen drei Säuren und drei Laugen zur Auswahl:

- Säuren: HCl, H₂SO₄ und CO₂
- Laugen: NaOH, KOH und Ca(OH)₂

Im folgenden soll für das Beispiel Tab6B2 eine pH-Wert Senkung durch Dosierung von CO₂ berechnet werden.

4.5.1. Für einen bestimmten pH-Wert

Im folgenden sind noch einmal die wichtigsten Daten für das Wasser Tab6B2 aufgeführt:

Sättigungsindex bei Bewertungstemperatur	SI	= 0.277 ----
pH-Wert des Wassers bei Bewertungstemperatur	pH _{tb}	= 8.250 ----
pH-Wert für SI _e bei Bewertungstemperatur	pH _{SIe}	= 7.974 ----
pH-Wert nach Sättigung mit Calcit bei t _b	pH _{Ctb}	= 7.991 ----
Calcitabscheidekapazität bei Bewertungstemperatur	D _{tb}	= -0.029 mmol/l

Das Wasser ist calcitabscheidend und soll durch die Zugabe von CO₂ annähernd ins Gleichgewicht überführt werden. Als anzustrebender pH-Wert kann in erster Näherung der pH-Wert der Calcit-sättigung herangezogen werden.

Bevor der Menüpunkt „**Berechnen**“ und „**Zugabe Säure/Lauge**“ angewählt wird, muß das Wasser Tab6B2 aktiviert oder geladen werden. Nach Anwahl des o.g. Menüpunktes ist wieder die Eingabe der Wasserkenndaten erforderlich:

Unter dem Register „**für einen bestimmten pH-Wert**“ wird CO₂ angewählt und der gesuchte pH-Wert mit 7,991 eingetragen. Die Stoffmengenkonzentration an CO₂ beträgt 1 mol/l. Nur für die Dosierung von CO₂ ist die Stoffmengenkonzentration ohne Bedeutung, da das Ergebnis der Be-

rechnung in mmol/l und nicht wie bei den anderen Stoffen in ml/l angegeben wird. Die Befehls-schaltfläche „OK“ startet die Berechnung.

Wasser 2000 - [Zugabe1]

Datei Projekt Bearbeiten Berechnen Graphik Extras Fenster Hilfe

100 %

Gleichgewichtsberechnung

Analyse: Zugabe1
 Bearbeiter: Rohleder
 Datum: 29.09.00
 Anmerkung 1: Tab6B2 nach Zugabe von CO2
 Anmerkung 2: 0.030 mmol/l CO2-Zugabe

Analysewerte		
Größe	Einheit	Wert
pH-Wert	----	7.950
KS(4,3)	mmol/l	1.710
KB(8,2)	mmol/l	0.030
c(DIC)	mmol/l	1.705
m-Wert	mmol/l	1.674
tpHe	°C	15.000
tKS4,3	°C	15.000
tKB8,2	°C	15.000
tb	°C	11.000
Sle	----	0.000
k25	µS/cm	383.280
tk25	°C	25.000

Gesamtkonzentrationen		
Größe	Einheit	Wert
c(Ca)	mmol/l	1.240
c(Mg)	mmol/l	0.410
c(Na)	mmol/l	0.900
c(K)	mmol/l	0.070

Wasser-Fenster

Dieses Beispiel zeigt deutlich, daß der pH-Wert der Calcitsättigung von dem jeweiligen Aufberei-tungsverfahren abhängt. So ist in diesem Fall nach der Zugabe von 0,03 mmol/l CO₂ der ange-strebte pH-Wert von 7.991 erreicht, aber der Sättigungsindex ist noch 0,025. Um den Sättigungsindex von nahezu 0 zu erzielen, soll in der nächsten Beispielrechnung die CO₂-Dosierung geringfügig erhöht werden.

4.5.2. Eine bestimmte Menge

Dem Wasser Tab6B2 soll im folgenden 0,033 mmol/l CO₂ zudosiert werden. Bevor der Menüpunkt „**Berechnen**“ und „**Zugabe Säure/Lauge**“ angewählt wird, muß das Wasser Tab6B2 aktiviert oder geladen werden. Nach Anwahl des o.g. Menüpunktes ist wieder die Eingabe der Wasserkennndaten erforderlich:

The screenshot shows a dialog box titled "Zugabe Säure/Lauge". It contains the following fields and controls:

- Analyse:
- Bearbeiter:
- Datum:
- Anmerkung 1:
- Two tabs: "für einen bestimmten pH-Wert" and "für eine bestimmte Menge" (selected).
- A group box "Zuzugeben" with radio buttons for:
 - HCl
 - H2SO4
 - CO2
 - NaOH
 - KOH
 - Ca(OH)2
- Input field "c(x) in mol/l:" with value "1".
- Input field "Menge in ml/l:" with value "0,033".
- Buttons: "OK", "Abbrechen", "Hilfe".

Die Befehlsschaltfläche „**OK**“ startet die Berechnung.

In dem obigen Dialogfenster werden alle Stoffe in ml/l mit einer bestimmten Stoff-mengenkonzentration $c(x)$ in mmol/l zugegeben. Eine Ausnahme ist die Dosierung von CO₂. Da CO₂ im gasförmigen Zustand dosiert wird ist die Bezeichnung *Menge in ml/l* und die Stoffmengenkonzentration $c(x)$ in mol/l falsch. D.h. sollen z.B. 2 mmol/l CO₂ zudosiert werden, dann muß dieser Wert in die Zeile *Menge in ml/l* eingetragen werden. Welcher Wert in der Zeile $c(x)$ in mol/l steht, ist für die folgende Berechnung nicht von Bedeutung. Diese Ausnahme gilt jedoch nur für die Zugabe von CO₂. Das Ergebnis der Berechnung zeigt folgendes Bild:

Gleichgewichtsberechnung

Analyse: Zugabe2
 Bearbeiter: Rohleder
 Datum: 29.09.00
 Anmerkung 1: Tab6B2 nach Zugabe von 0,033 mmol/l CO2
 Anmerkung 2: 0.033 mmol/l CO2-Zugabe

Analysewerte		
Größe	Einheit	Wert
pH-Wert	----	7.928
KS(4,3)	mmol/l	1.710
KB(8,2)	mmol/l	0.033
c(DIC)	mmol/l	1.708
m-Wert	mmol/l	1.674
tpHe	°C	15.000
tKS4,3	°C	15.000
tKB8,2	°C	15.000
tb	°C	11.000
Sle	----	0.000
k25	µS/cm	383.307
tk25	°C	25.000

Gesamtkonzentrationen		
Größe	Einheit	Wert
c(Ca)	mmol/l	1.240
c(Mg)	mmol/l	0.410
c(Na)	mmol/l	0.900
c(K)	mmol/l	0.070

Sättigungsindex bei Bewertungstemperatur	SI	= 0.003 -----
Delta pH-Wert des Wassers bei tb	dpHtb	= 0.003 -----
pH-Wert des Wassers bei tb	pHtb	= 7.969 -----
pH-Wert für Sle bei Bewertungstemperatur	pHSle	= 7.966 -----
pH-Wert nach Sättigung mit Calcit bei tb	pHCtb	= 7.966 -----
Calcitlösekapazität bei Bewertungstemperatur	Dtb	= -0.000 mmol/l

5. Aufbereitung

Folgende Aufbereitungsverfahren werden vom Programm WASSER2000 unterstützt:

- Entsäuerung
- Entcarbonisierung
- Schnellentcarbonisierung
- Ionenaustausch
- Filtration

5.1. Entsäuerung

Die Entsäuerung eines Wassers ist nur möglich, wenn der Sättigungsindex negativ ist. Im folgenden wird die Entsäuerung für das Wasser Tab6B6 (siehe Kapitel 4) durchgeführt. Die wichtigsten Daten von Tab6B6 sind:

Sättigungsindex bei Bewertungstemperatur	SI	= -0,587 ---
Delta pH-Wert des Wassers bei Bewertungstemperatur	$\Delta\text{pH}_{\text{tb}}$	= -0,481 ---
pH-Wert des Wassers bei Bewertungstemperatur	pH_{tb}	= 7,317 ---
pH-Wert für $\text{SI}=0$ bei Bewertungstemperatur	pHSI_0	= 7,872 ---
pH-Wert nach Sättigung mit Calcit bei tb	pHC_{tb}	= 7,797 ---
Calcitlösekapazität bei Bewertungstemperatur	D_{tb}	= 0,155 mmol/l

Die Entsäuerung soll mit halbgebrannten Dolomit ($\text{CaCO}_3 \times \text{MgO}$) bis zu einem Sättigungsindex von $\text{SI}=0$ erfolgen. Wurde das Wasser Tab6B6 noch nicht berechnet, so muß zuerst der pH-Wert bei Calcitsättigung ermittelt werden (Menüpunkt „*Datei*“ und „*Neu...*“ die nötigen Eingabedaten stehen in Kapitel 4). Ist das Wasserfenster Tab6B6 das aktive Fenster, so wird der Menüpunkt „*Berechnen*“, „*Aufbereitung*“ und „*Entsäuerung*“ angewählt. Es erscheint das Dialogfenster „*Entsäuerung*“.

Entsäuerung

Analyse: Entsau1

Bearbeiter: Rohleder

Datum: 04.10.2000

Anmerkung 1: Entsäuerung des Wassers Tab6B6

Entsäuerungsverfahren

- Weißkalkhydrat $\text{Ca}(\text{OH})_2$
- Natronlauge NaOH
- Calciumcarbonat CaCO_3
- Dolom. Filtermat. $\text{CaCO}_3 \cdot \text{MgO}$
- Magnesit $\text{MgO} + \text{Mg}(\text{OH})_2$
- Verriesesung in Luft

gewünschter Sättigungsindex: 0

OK Abbrechen Hilfe

Nach Eingabe der entsprechenden Daten und durch Anwahl der Befehlsschaltfläche „**OK**“ wird die Berechnung gestartet. In diesem speziellen Fall erscheint eine Warnung.

Bestätigung

Das zu entsäuernde Wasser entspricht nicht den Empfehlungen nach DVGW W214. Abschnitt 3.2 - Kriterien zur Überprüfung der Anwendbarkeit - empfiehlt bei Filtration über halbgebrannten Dolomit, daß $K_{s4,3} + 2 K_{b8,2} \leq 2,5 \text{ mmol/l}$ ist.

Soll die Berechnung fortgesetzt werden?

Ja Nein

Durch Auswahl der Befehlsschaltfläche „Ja“ wird die Berechnung fortgesetzt. Die Ausgabe der Ergebnisse erfolgt in einem Wasserfenster.

Gleichgewichtsberechnung

Analyse: Entsau1
 Bearbeiter: Rohleder
 Datum: 04.10.2000
 Anmerkung 1: Entsäuerung des Wassers Tab6B6
 Anmerkung 2: Ents. mit Dolom. Filtermat CaCO₃*MgO, theor. Verbrauch: 0.028 mmol/l

Analysewerte		
Größe	Einheit	Wert
pH-Wert	----	7.781
KS(4,3)	mmol/l	2.136
KB(8,2)	mmol/l	0.070
c(DIC)	mmol/l	2.171
m-Wert	mmol/l	2.105
tpHe	°C	17.585
tKS4,3	°C	17.585
tKB8,2	°C	17.585
tb	°C	10.783
Sle	----	0.000
k25	µS/cm	364.776
tk25	°C	25.000

Gesamtkonzentrationen		
Größe	Einheit	Wert
c(Ca)	mmol/l	1.289
c(Mg)	mmol/l	0.363
c(Na)	mmol/l	0.700

Interessant ist eine Gegenüberstellung der wichtigsten Werte der Wässer Tab6B6 und Entsau1. Dabei ist deutlich zu erkennen, dass der pH-Wert der Calcitsättigung vom jeweiligen Aufbereitungsverfahren abhängig ist. So ist dieser 7,797 bei der Entsäuerung mit CaCO₃ (siehe pH_C von Tab6B6) und 7,845 für die Entsäuerung mit halbgebrannten Dolomit.

Größe	Einheit	Tab6B6	Entsau1	Differenz
c(CO ₂)	mmol/l	0,237	0,078	-0,159
c(HCO ₃ ⁻)	mmol/l	1,849	2,052	0,203
c(CO ₃ ²⁻)	mmol/l	0,002	0,006	0,004
c(CaCO ₃)	mmol/l	0,001	0,004	0,003
c(MgCO ₃)	mmol/l	0,000	0,001	0,001
c(CaHCO ₃ ⁺)	mmol/l	0,022	0,025	0,003
c(MgHCO ₃ ⁺)	mmol/l	0,004	0,005	0,001
c(CaSO ₄)	mmol/l	0,043	0,044	0,001
c(MgSO ₄)	mmol/l	0,007	0,009	0,002
c(Ca ²⁺)	mmol/l	1,167	1,216	0,049
c(Mg ²⁺)	mmol/l	0,295	0,348	0,053
c(SO ₄ ²⁻)	mmol/l	0,382	0,380	-0,002
Ionenstärke ber.	mmol/l	5,572	5,883	0,311
Gesamthärte	°dH	8,625	9,250	0,625
Carbonathärte	°dH	5,178	5,744	0,566
SI	----	-0,587	0,000	0,587
pH	----	7.797	7,845	0,048
c(DIC)	mmol/l	2,115	2,171	0,056
m-Wert	mmol/l	1,881	2,105	0,224

Vergleich Rohwasser Tab6B6 und entsäuertes Wasser Entsau1

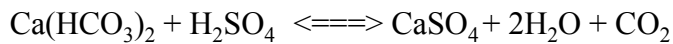
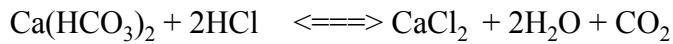
5.2. Entcarbonisierung

Der Begriff Entcarbonisierung steht für eine Reduktion der Stoffmengenkonzentration an Hydrogencarbonationen $c(\text{HCO}_3^-)$. Drei Verfahren zur Entcarbonisierung werden vom Programm WASSER2000 unterstützt:

- Entcarbonisierung durch Säuredosierung (HCl / H₂SO₄)
- Entcarbonisierung mit Calciumhydroxid (Ca(OH)₂ , in Form von Kalkmilch oder -wasser)
- Entcarbonisierung durch Ionenaustausch

5.2.1. Entcarbonisierung durch Säureimpfung

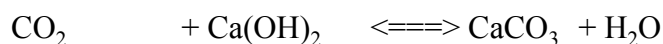
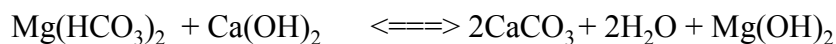
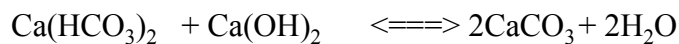
Eine schwache Säure wird aus ihrem Salz durch die Zugabe einer stärkeren Mineralsäure verdrängt. So zeigen sich für die Kohlensäure unter Zugabe von Salz- oder Schwefelsäure folgende Reaktionen:



Wie die obigen Reaktionsgleichungen zeigen, hat eine Entcarbonisierung durch Säureimpfung eine Konzentrationszunahme der Anionen ($\text{Cl}^- / \text{SO}_4^{2-}$) und der Kohlensäure zur Folge. Je nach Bedarf folgen deshalb nach einer Säureentcarbonisierung verschiedene Aufbereitungsverfahren (Ionenaustausch zur Anionenreduktion, Entsäuerung zum Entfernen der umgesetzten Kohlensäure).

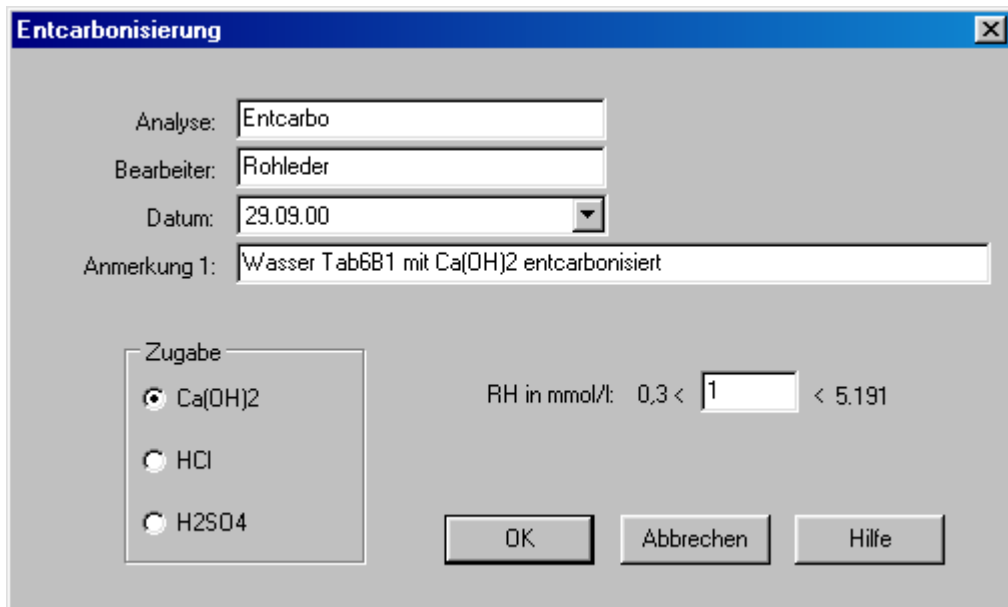
5.2.2. Entcarbonisierung mit Calciumhydroxid

Eine andere Methode der gezielten Reduktion der Stoffmengenkonzentration an Hydrogencarbonaten stellt die Entcarbonisierung mittels Calciumhydroxid (in Form von Kalkmilch oder Kalkwasser) dar. Bei diesem in der Praxis sehr bedeutendem Verfahren sind folgende chemische Reaktionen anzutreffen:

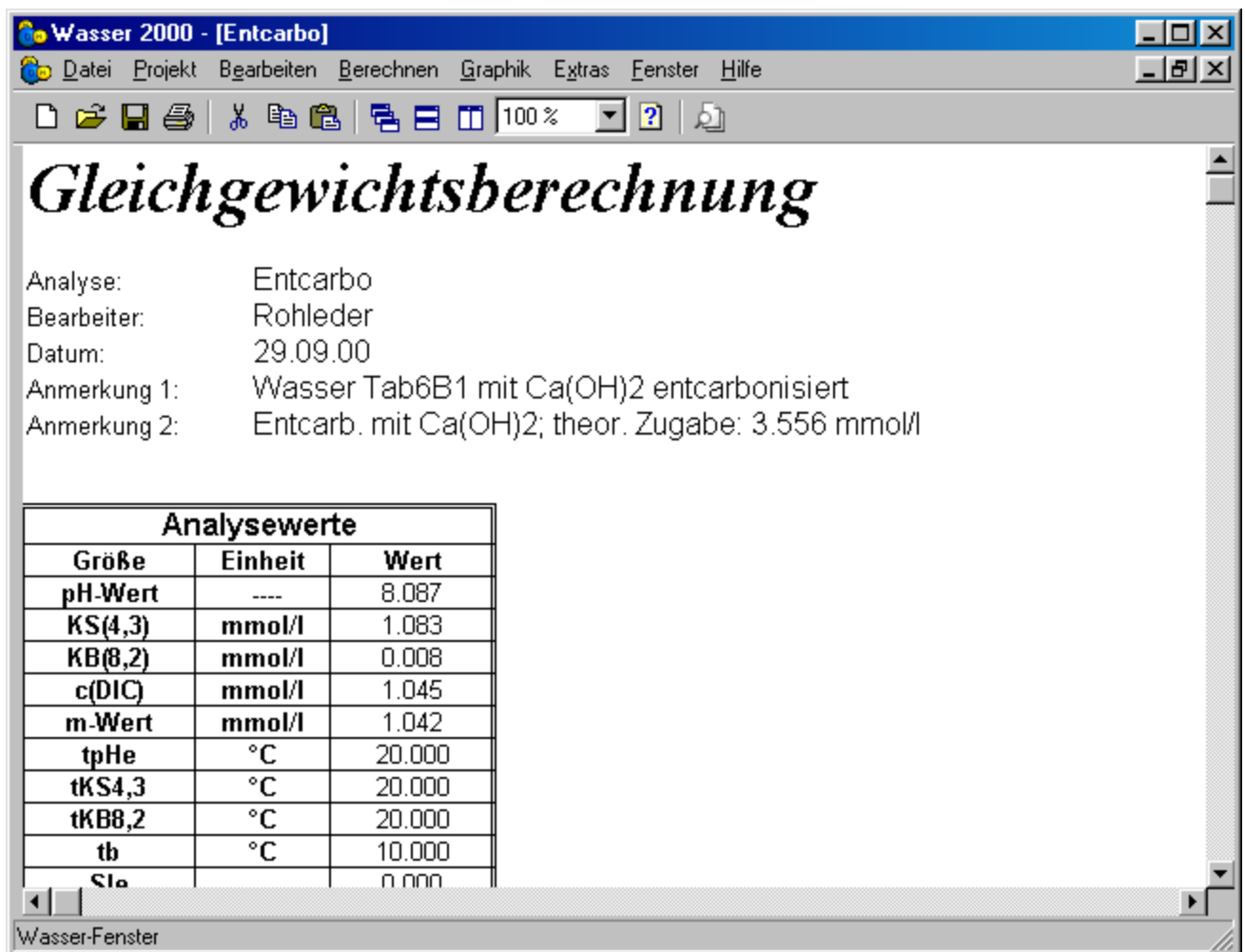


Anhand der Reaktionsgleichung läßt sich erkennen, daß gleichzeitig zur Entcarbonisierung eine Teilenthärtung stattfindet (Bildung und Ausfällung von CaCO_3). Zudem wirkt sich die Anwesenheit größerer Mengen an Magnesiumionen auf die Ausfällung von CaCO_3 störend aus (Bildung von $\text{Mg}(\text{OH})_2$). Eine eventuelle Magnesiumhydroxidbildung wird vom Programm erkannt und durch eine Warnung angezeigt. Über eine (u.U. sinnlose) Fortsetzung der Berechnung soll der Anwender selbst entscheiden. Sind in dem Wasser Hydrogencarbonate an das Natriumion gebunden, so ist eine Entcarbonisierung unwirtschaftlich. Eine Recarbonisierung durch Anwesenheit von Natriumhydrogencarbonaten wird vom Programm nicht erkannt.

Im folgenden Beispiel soll das Wasser Tab6B1 (siehe Kapitel 4) durch Zugabe von Kalkmilch bis auf eine Resthärte von 1,0 mmol/l entcarbonisiert werden. Ist Das Wasser Tab6B1 noch nicht berechnet worden, so muß zuerst unter dem Menüpunkt „Datei“ und „Neu...“ der pH-Wert bei Calcitsättigung ermittelt werden (siehe Kapitel 4). Ist das Wasserfenster Tab6B1 das aktive Fenster, so wird der Menüpunkt „Berechnen“, „Aufbereitung“ und „Entcarbonisierung“ angewählt. Es erscheint das Dialogfenster „Entcarbonisierung“



Durch Anwahl der Befehlsschaltfläche „**OK**“ wird die Berechnung gestartet. Die Ausgabe der Ergebnisse erfolgt in einem Wasserfenster.



Dabei ist der errechnete Verbrauch an Ca(OH)_2 in dem Feld „**Anmerkung 2**“ eingetragen worden. Dieser berechnete Kalkverbrauch von $c(\text{Ca(OH)}_2) = 3,556 \text{ mmol/l}$ ist der theoretische Verbrauch,

der sich bei einer 100%-igen Umsetzung ergäbe. Desweiteren ist der Kalkverbrauch auch u.a. abhängig von den Aufenthaltszeiten, den Reaktorabmessungen und der Qualität des verwendeten Kalkes. In der Praxis kann eine Überdosierung von 20% durchaus notwendig sein.

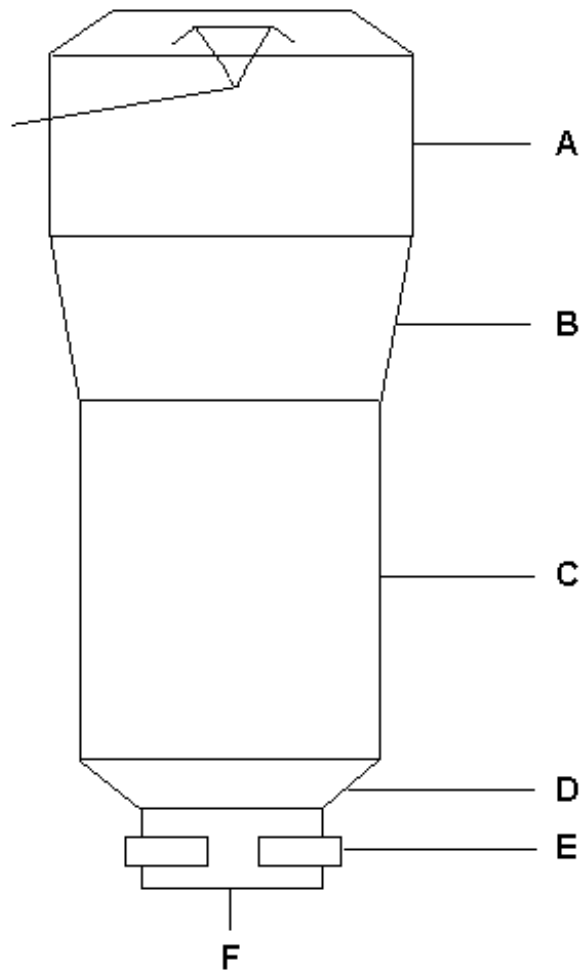
Eine Zusammenstellung der Wasserparameter vor und nach der Entcarbonisierung zeigt die folgende Tabelle:

Größe	Einheit	Tab6B1	Entcarbo	Differenz
c(CO ₂)	mmol/l	1,404	0,016	-1,388
c(HCO ₃ ⁻)	mmol/l	5,191	1,000	-4,191
c(CO ₃ ²⁻)	mmol/l	0,002	0,007	0,005
c(CaCO ₃)	mmol/l	0,003	0,004	0,001
c(MgCO ₃)	mmol/l	0,000	0,002	0,002
c(CaHCO ₃ ⁺)	mmol/l	0,139	0,011	-0,128
c(MgHCO ₃ ⁺)	mmol/l	0,022	0,005	-0,017
c(CaSO ₄)	mmol/l	0,207	0,105	-0,102
c(MgSO ₄)	mmol/l	0,031	0,041	0,010
c(Ca ²⁺)	mmol/l	3,151	1,218	-1,933
c(Mg ²⁺)	mmol/l	0,696	0,702	0,006
c(SO ₄ ²⁻)	mmol/l	0,962	1,053	0,091
Ionenstärke ber.	mmol/l	14,931	9,101	-5,830
Gesamthärte	°dH	23,800	11,698	-12,102
Carbonathärte	°dH	14,535	2,799	-11,736
SI	----	-0,147	-0,000	0,147
pH	----	6,981	8,206	1,225
c(DIC)	mmol/l	6,762	1,045	-5,717
m-Wert	mmol/l	5,364	1,042	-4,322

5.3. Schnellentcarbonisierung

Die beiden unter Kapitel 5.2 behandelten Entcarbonisierungsverfahren hatten die Berechnung der Wasserzusammensetzung nach der Dosierung von Lauge oder Säure zum Inhalt (wasserchemische Betrachtung). Die Schnellentcarbonisierung dagegen zielt auf die Dimensionierung von Schnellreaktoren ab.

Vom Programm wird die Dimensionierung von zylindrischen Reaktoren unterstützt. Diese Reaktoren bestehen aus zwei Zylindern mit unterschiedlichen Durchmessern, welche durch Kegelstümpfe miteinander verbunden sind.



Für die Dimensionierung des Reaktors sind bestimmte Kriterien für die Strömungsgeschwindigkeit (v in m/h) und Mindestabmessungen der Mantelhöhen h (in mm) einzuhalten:

- unterer Schuß (Teil C) : $60 \text{ m/h} < v < (85 \text{ m/h}) < 100 \text{ m/h}$ und $h = 4000 \text{ mm}$
- oberer Schuß (Teil A) : $10 \text{ m/h} < v < (30 \text{ m/h}) < 40 \text{ m/h}$ und $h = 1500 \text{ mm}$ für $d < 4000 \text{ mm}$ oder $h = 2500 \text{ mm}$ für $d > 4000 \text{ mm}$
- Mischkammer (Teil F) : $700 \text{ m/h} < v < (900 \text{ m/h}) < 1000 \text{ m/h}$ und $h = 500 \text{ mm}$
- Mischblende (Teil E) : $v = 2700 \text{ m/h}$
- Winkel der Kegelstümpfe $\alpha = 40^\circ$

Weiterhin ist zu beachten:

- Die Mindestaufenthaltszeit t sollte größer 10 min betragen
- $c(\text{Ca}^{2+}) > (c(\text{HCO}_3^-) - c(\text{HCO}_3^-)_{\text{Rest}})$
- $c(\text{Mg}^{2+}) < 2 \text{ mmol/l}$
- $\rho^*_{\text{Schwebstoffe}} < 30 \text{ mg/l}$
- $\rho^*_{\text{KMnO}_4} < 20 \text{ mg/l}$
- $\rho^*_{\text{PO}_4^{3-}} < 1 \text{ mg/l}$

- Betriebstemperatur $8\text{ °C} < \vartheta < 30\text{ °C}$

Sind nicht alle Bedingungen erfüllt, so kann u.U. die Schnellentcarbonisierung scheitern. Für ein Beispielwasser ($c(\text{HCO}_3^-) = 6,245\text{ mmol/l}$, $c(1/2\text{ Ca}^{2+}) = 6,507\text{ mmol/l}$) soll ein Schnellreaktor dimensioniert werden. Dabei ist eine Mindestaufenthaltszeit von 20 min und eine Durchsatzleistung von 100 m³/h anzusetzen.

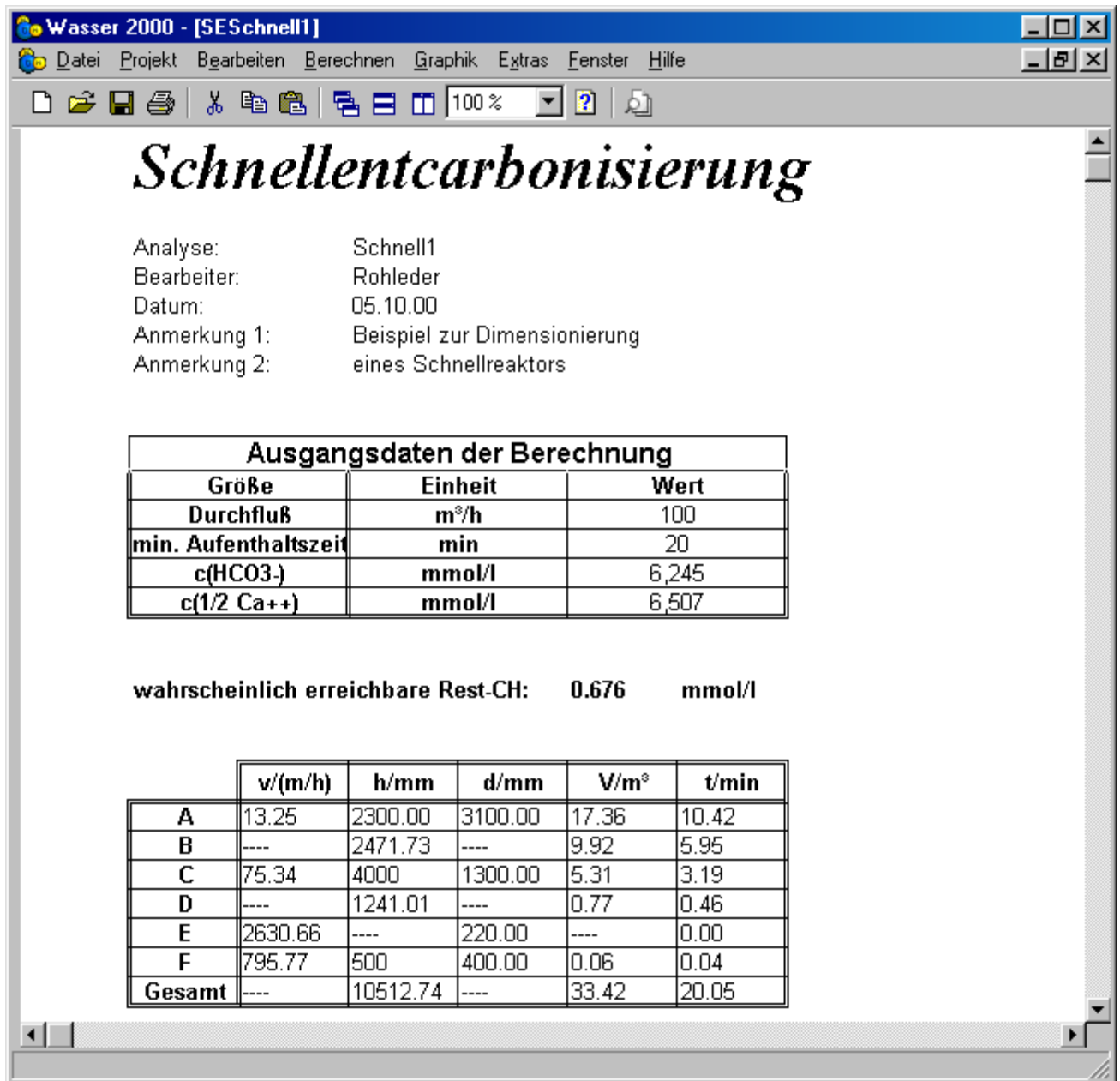
Zur Durchführung der Schnellentcarbonisierung muß nicht zuerst das Gleichgewicht des Wassers berechnet werden. Liegt aber eine Berechnung vor, so werden die equivalent- Stoffmengenkonzentrationen an Hydrogencarbonaten und Calciumionen übernommen. Wird der Menüpunkt „**Berechnen**“, „**Aufbereitung**“ und „**Schnellentcarbonisierung**“ angewählt, so erscheint das Dialogfenster „**Schnellentcarbonisierung**“.

The screenshot shows a dialog box titled "Schnellentcarbonisierung" with the following fields and values:

- Analyse: Schnell1
- Bearbeiter: Rohleder
- Datum: 05.10.00
- Anmerkung 1: Beispiel zur Dimensionierung
- Anmerkung 2: eines Schnellreaktors
- Durchfluß Q: 100 m³/h
- min. Aufenthaltszeit: 20 min
- Hydrogencarbonat: 6,245 mmol/l
- Equivalentkonz. Calcium: 6,507 mmol/l

Buttons at the bottom: OK, Abbrechen, Hilfe.

Sind alle Werte entsprechend dem obigen Bild eingegeben worden, so kann die Berechnung durch Anwahl der Befehlsschaltfläche „**OK**“ berechnet werden. Die Ergebnisse werden in einem Schnellentcarbonisierungsfenster dargestellt.

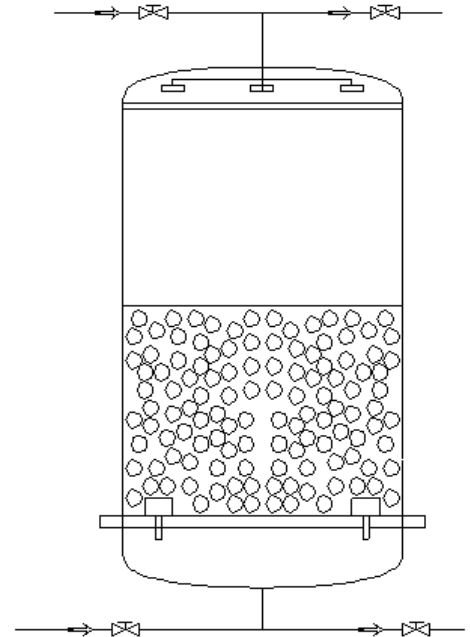


Die Tabelle der Ergebnisse beinhaltet folgende Größen für die jeweiligen Teile des Reaktors:

- Die Strömungsgeschwindigkeit v in m/h
- Die Höhen h in mm, sowie die Gesamthöhe des Reaktors
- Die Durchmesser d in mm der zylindrischen Reaktorteile
- Die jeweiligen Volumen V in m³, sowie das Gesamtvolumen
- Die jeweiligen Aufenthaltszeiten t in min, sowie die Gesamtaufenthaltszeit

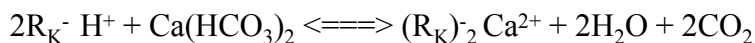
5.4. Ionenaustausch

Der Menüpunkt **Ionenaustausch** beinhaltet die Entcarbonisierung mit schwach sauren Kationenaustauscherharzen (**H-Entcarbonisierung**), sowie die Enthärtung mit stark sauren Kationenaustauscherharzen (**Enthärtung**). Beide Unterpunkte dienen der Dimensionierung von Ionenaustauschern für das jeweilige Verfahren, wobei es sich in beiden Fällen um zylindrische Austauscherbehälter handelt. Als Ergebnisse werden zum einen die Behälterabmessungen (w.z.B. Durchmesser, Querschnittsfläche, zylindrische Mantelhöhe, Harzschichthöhe) und zum anderen die hydraulischen und chemischen Werte angegeben (Durchsatz, Filtergeschwindigkeit, Gesamtbeladung, nutzbare Kapazität,...). In der links abgebildeten Zeichnung sind nur zwei Düsen eingezeichnet. Bei der Anordnung der Düsen im Düsenboden wird häufig von sog. Standardverteilungen von 80 Düsen pro m² ausgegangen, wobei die einzelnen Düsen einen definierten Druckverlust aufweisen sollten.



5.4.1. H-Entcarbonisierung

Bei der Entcarbonisierung mit schwach sauren Kationenaustauscherharzen läuft folgende Reaktion ab:



Als Grenzwerte für die Dimensionierung sind angesetzt:

- spezifische Harzbelastung $Q_B < 30 \text{ h}^{-1}$
- Behälterdurchmesser $d < 3,6 \text{ m}$
- Filtergeschwindigkeit $q_A < 40 \text{ m/h}$

Für die folgende Dimensionierung eines schwach sauren Kationenaustauschers soll die Durchsatzleistung 200 m³/h, die Betriebsspieldauer 48 h und die relevante Ionenbeladung $c(HCO_3^-) = 6.35 \text{ mmol/l}$ betragen.

Wird der Menüpunkt „**Berechnen**“, „**Aufbereitung**“, „**Ionenaustausch**“ und „**H-Entcarbonisierung**“ angewählt, so zeigen sich das Dialogfenster „**Entcarbonisierung durch Ionenaustausch**“. Die Werte für $c(HCO_3^-)$, Q und t müssen nun nacheinander eingegeben werden.

Entcarbonisierung durch Ionenaustausch

Analyse: Hentcarbo

Bearbeiter: Rohleder

Datum: 11.10.00

Anmerkung 1: Beispiel zu H-Entcarbonisierung

Anmerkung 2: normale Berechnung

Durchfluß Q: 200 m³/h

Betriebsspieldauer: 48 h

Hydrogencarbonat: 6.35 mmol/l

normale Berechnung optimierte Berechnung Abbrechen Hilfe

Durch Anwahl der Befehlschaltfläche „normale Berechnung“ wird die Berechnung gestartet und die Ergebnisse in einem H-Entcarbonisierungsfenster dargestellt.

Wasser 2000 - [HEHentcarbo]

Datei Projekt Bearbeiten Berechnen Graphik Extras Fenster Hilfe

100 %

Entcarbonisierung durch Ionenaustausch

Analyse: Hentcarbo
 Bearbeiter: Rohleder
 Datum: 05.10.00
 Anmerkung 1: Beispiel zur H-Entcarbonisierung
 Anmerkung 2:

Ausgangsdaten der Berechnung		
Größe	Einheit	Wert
Ionenbeladung:	mmol/l	6.350
Durchsatzleistung:	m ³ /h	200.000
Laufzeit bis Regeneration:	h	48.000

Ergebnisse der Berechnung		
Größe	Einheit	Wert
Durchsatz:	m ³	9600.000
Gesamtbeladung:	mol	60960.000
nutzbare Kapazität:	mol/l	2.075
Harzvolumen:	m ³	29.378
spezifische Harzbelastung:	l/h	6.808
Iontentransportgeschwindigkeit:	mol/(l*h)	0.043
Behälterdurchmesser:	m	5.000
Querschnittsfläche:	m ²	19.635
Filtergeschwindigkeit:	m/h	10.186
Harzschichthöhe:	m	1.496
zylindrische Mantelhöhe:	m	3.000

Die Ergebnisse zeigen, daß der errechnete Durchmesser von 5,0 m den Grenzwert von 3,6 m übertrifft. Um den Durchmesser zu reduzieren muß, die Durchsatzleistung aufgeteilt werden. Doch ob eine Leistungsaufteilung von 3 mal 50 % (einer in Reserve) erfolgen kann, zeigt sich, indem im Dialogfenster „Entcarbonisierung durch Ionenaustausch“ die Befehlsschaltfläche „Optimierte Berechnung“ angewählt wird. In diesem Fall vergleicht das Programm die Ergebnisse mit den vorgegebenen Grenzwerten und sollte eine Grenzwertüberschreitung vorliegen, so wird der Durchsatz (oder die Laufzeit wenn nötig) schrittweise erhöht, bis die Ergebnisse in den zulässigen Bereichen liegen. Eine Optimierung zeigt, daß der Durchsatz maximal 103 m³/h betragen darf, wenn der Grenzwert für den Durchmesser von 3,6m eingehalten werden soll. Demnach ist eine Leistungs-

aufteilung von 3 mal 50 % zulässig. Die Ergebnisse für einen Durchsatz von 100 m³/h sind im folgenden Bild zu sehen.

The screenshot shows the 'Wasser 2000' software window with the title '[HEHentcarbo2]'. The menu bar includes 'Datei', 'Projekt', 'Bearbeiten', 'Berechnen', 'Graphik', 'Extras', 'Fenster', and 'Hilfe'. The toolbar contains various icons for file operations and a zoom level of 100%. The main window title is 'Entcarbonisierung durch Ionenaustausch'. Below this, there is a text area with the following information:

Analyse: Hentcarbo2
 Bearbeiter: Rohleder
 Datum: 05.10.00
 Anmerkung 1: Beispiel zur H-Entcarbonisierung
 Anmerkung 2: Optimierte Berechnunh

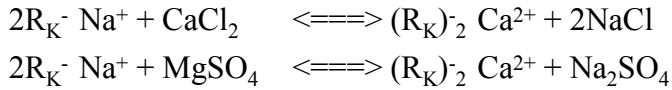
Below the text area are two tables. The first table is titled 'Ausgangsdaten der Berechnung' and the second is titled 'Ergebnisse der Berechnung'.

Ausgangsdaten der Berechnung		
Größe	Einheit	Wert
Ionenbeladung:	mmol/l	6.350
Durchsatzleistung:	m ³ /h	103.000
Laufzeit bis Regeneration:	h	48.000

Ergebnisse der Berechnung		
Größe	Einheit	Wert
Durchsatz:	m ³	4944.000
Gesamtbeladung:	mol	31394.400
nutzbare Kapazität:	mol/l	2.075
Harzvolumen:	m ³	15.130
spezifische Harzbelastung:	l/h	6.808
Ionentransportgeschwindigkeit:	mol/(l*h)	0.043
Behälterdurchmesser:	m	3.600
Querschnittsfläche:	m ²	10.179
Filtergeschwindigkeit:	m/h	10.119
Harzschichthöhe:	m	1.486
zylindrische Mantelhöhe:	m	3.000

5.4.2. Enthärtung

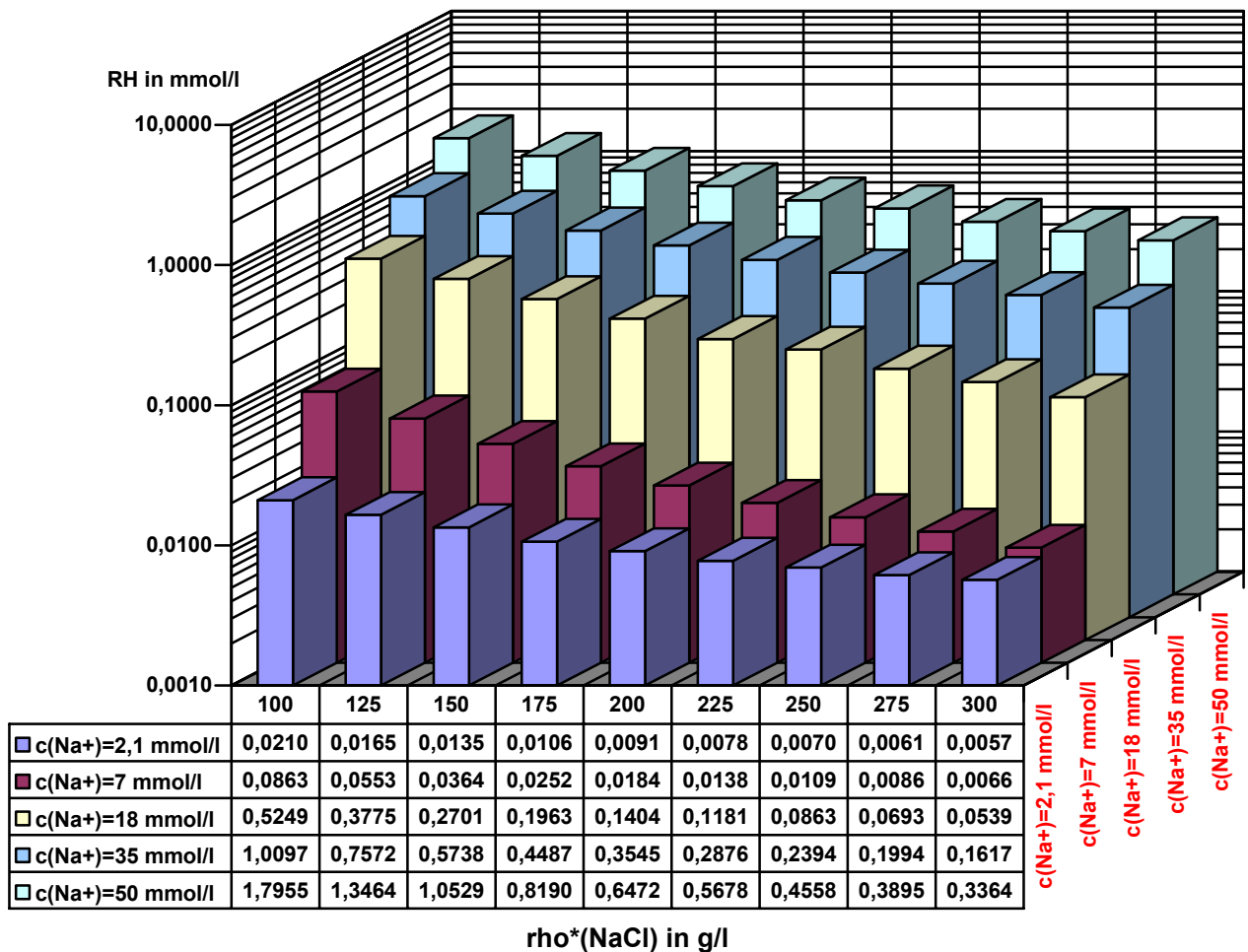
Ebenso wie bei der Entcarbonisierung durch Ionenaustausch beinhalten die Menüpunkte „*Berechnen*“, „*Aufbereitung*“, „*Ionenaustausch*“ und „*Enthärtung*“ die Dimensionierung eines Ionenaustauschbehälters. Während bei der Entcarbonisierung schwach saure Kationenaustauscherharze zum Einsatz kommen, sind bei der Enthärtung stark saure Kationenaustauscherharze in der Natriumionenform erforderlich. Die dabei auftretenden chemischen Reaktionen lauten:



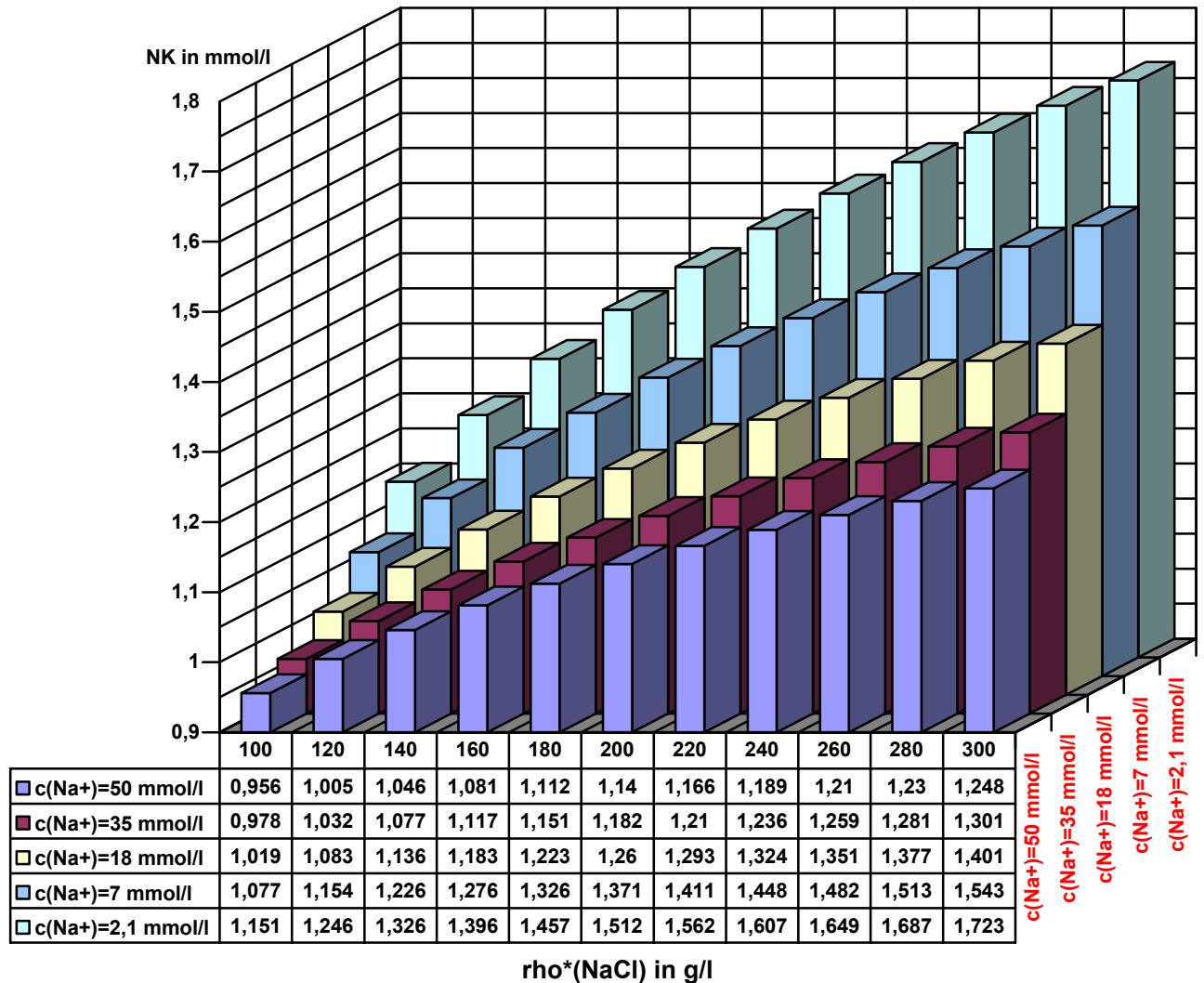
Zur Festlegung der nutzbaren Kapazität dienen die beiden folgenden Grafiken. Dabei bestimmen die Resthärte und die Stoffmengenkonzentration an Natriumionen den zur Regeneration erforderlichen NaCl-Aufwand (siehe Bild: Resthärte und Regenerierchemikalienaufwand). Aus dem Regenerierchemikalienaufwand kann in Abhängigkeit der Stoffmengenkonzentration der Natriumionen auf die nutzbare Kapazität geschlossen werden. Im Programm sind die beiden Bilder als Kurvenscharen enthalten, so dass eine Berechnung für die Grenzwerte folgende möglich ist.

$$2,1 \text{ mmol/l} < c(\text{Na}^+) < 50 \text{ mmol/l} \text{ und } 100 \text{ g/l} < \rho^*(\text{NaCl}) < 300 \text{ g/l} (Q_B < 40 \text{ h}^{-1}).$$

Resthärte und Regenerierchemikalienaufwand



NK und Regenerierchemikalienaufwand



Als Grundlage der anschließenden Beispielrechnung dienen folgende Vorgaben:

- gewünschte Resthärte $c(\frac{1}{2} \text{Ca}^{2+} + \frac{1}{2} \text{Mg}^{2+})_{\text{Rest}}$ = 0,01 mmol/l
- Stoffmengenkonzentration an Natriumionen $c(\text{Na}^+)$ = 2,1 mmol/l
- relevante Ionenbeladung $c(\frac{1}{2} \text{Ca}^{2+} + \frac{1}{2} \text{Mg}^{2+})$ = 7,0 mmol/l

Die Betriebsspieldauer soll 8h und der erforderliche Volumenstrom 30 m³/h betragen.

Werden die Menüpunkte „*Berechnen*“, „*Aufbereitung*“, „*Ionenaustausch*“ und „*Enthärtung*“ angewählt, so wird das Dialogfenster „*Enthärtung*“ angezeigt.

The screenshot shows a dialog box titled "Enthärtung" with the following fields and values:

Analyse:	Enthaert				
Bearbeiter:	Rohleder				
Datum:	05.10.00				
Anmerkung 1:	Beispiel zur Enthärtung				
Anmerkung 2:					
Durchfluß Q:	30	m³/h	c(1/2Ca+1/2Mg)rest	0,01	mmol/l
Betriebsspieldauer:	8	h	c(1/2Ca+1/2Mg)	7	mmol/l
				c(Na)	2,1 mmol/l

Buttons: OK, Abbrechen, Hilfe

Nachdem alle Werte eingegeben wurden, wird die Befehlsschaltfläche „*OK*“ angewählt und somit die Berechnung gestartet. Die Ergebnisse der Berechnung werden in einem Enthärtungsfenster dargestellt.

Wasser 2000 - [HEEnthaert]

Datei Projekt Bearbeiten Berechnen Graphik Extras Fenster Hilfe

100%

Enthärtung durch Ionenaustausch

Analyse: Enthaert
 Bearbeiter: Rohleder
 Datum: 05.10.00
 Anmerkung 1: Beispiel zur Enthärtung
 Anmerkung 2:

Ausgangsdaten der Berechnung		
Größe	Einheit	Wert
c(1/2 Ca + 1/2 Mg)rest:	mmol/l	0.010
c(1/2 Ca + 1/2 Mg):	mmol/l	7.000
c(Na):	mmol/l	2.100
Durchsatzleistung:	m ³ /h	30.000
Laufzeit bis Regeneration:	h	8.000

Ergebnisse der Berechnung		
Größe	Einheit	Wert
Regenerierchemikalienaufwand rho(NaCl):	g/l	179.782
Durchsatz:	m ³	240.000
Gesamtbeladung:	mol	1680.000
nutzbare Kapazität:	mol/l	1.457
Harzvolumen:	m ³	1.153
spezifische Harzbelastung:	l/h	26.009
Behälterdurchmesser:	m	1.000
Querschnittsfläche:	m ²	0.785
Filtergeschwindigkeit:	m/h	38.197
Harzschichthöhe:	m	1.469
zylindrische Mantelhöhe:	m	2.900

Enthärtungsfenster

5.5. Filterberechnungen

Die Filtration spielt bei der Wasseraufbereitung eine zentrale Rolle. Nachfolgend werden Hinweise zur Dimensionierung von Aktivkohlefiltern, Filtern zur Enteisung und Sandfiltern gegeben. Vor der Ausführungsplanung müssen die variablen Parameter anhand eigener Erfahrungen oder Versuchsergebnissen überprüft und festgelegt werden. Das Programm unterbreitet lediglich Dimensionierungsvorschläge.

5.5.1. Aktivkohlefiltration

Die Aktivkohlefiltration hat in der Trinkwasseraufbereitung in den letzten Jahren erheblich an Bedeutung gewonnen. Sie wird häufig zum Erreichen folgender Aufbereitungsziele eingesetzt.

- Adsorption einzelner Störstoffe (z.B. bestimmter Pflanzenschutzmittel) aus Grundwasser.
- Reduktion der Gesamtkonzentration organischer Substanz in Oberflächenwässern durch Adsorption, meistens kombiniert mit vollständigem oder teilweise biologischen Abbau der bereits auf der Aktivkohle adsorbierten Substanzen.
- Reduktion von Desinfektionsmitteln.

Das Programm bietet deshalb zu diesen Aufbereitungszielen erste Dimensionierungshinweise. Es handelt sich um eine abschätzende Dimensionierung. Vor der endgültigen Dimensionierung müssen die variablen Parameter durch das Erstellen von Adsorptionsanalysen festgelegt werden.

Die Theorie der Adsorptionsverfahren in der Wasseraufbereitung ist sehr komplex und sprengt den Rahmen der Informationsmöglichkeit in diesem Handbuch. Es wird folgender Literaturhinweis gegeben:

- H. Sontheimer, B.R. Frick, J. Fettig, G. Hörner, C. Hubele, G. Zimmer
- Adsorptionsverfahren zur Wasserreinigung
- DVGW-Forschungsstelle am Engler-Bunte-Institut der Universität Karlsruhe, 1985.

5.5.2. Chemische Enteisung nach Velten und Holluta

Enteisungsanlagen müssen in der Lage sein, echt gelöstes zweiwertiges Eisen in die schlecht wasserlösliche dreiwertige Form zu oxidieren und abzuscheiden. Velten und Holluta haben im Auftrag des DVGW die chemische Enteisung untersucht. Das Programm basiert auf den veröffentlichten Untersuchungen und bietet Dimensionierungshilfen an. Vor der endgültigen Dimensionierung müssen die variablen Parameter anhand eigener Erfahrungswerte oder anhand von Ver-

suchsergebnissen festgelegt werden. Theoretische Hinweise finden Sie im Kapitel 12.1 des Buches „Wasseraufbereitung“.

5.5.3. Sandfilter

Sandfilter (Kiesfilter) werden in der Wasseraufbereitung zur Abscheidung von Feststoffen aus wässrigen Suspensionen eingesetzt. Zum Erreichen des Aufbereitungszieles stehen folgende Filtrationsarten zur Verfügung:

- Direktfiltration
- Flockungsfiltration und
- Filtration eines bereits der Flockung und Sedimentation unterworfenen Wassers.

Das Programm bietet Dimensionierungshilfen an. Vor der endgültigen Dimensionierung müssen die variablen Parameter anhand eigener Erfahrungswerte oder anhand von Versuchsergebnissen festgelegt werden. Theoretische Hinweise finden Sie im Kapitel 11.1 des Buches „Wasseraufbereitung“.

5.5.4. Beispiele zur Filterberechnung

5.5.4.1. Aktivkohlefilter

Bei der Filtration über Aktivkohle werden drei verschiedene Anwendungsfälle unterschieden:

- Adsorption organischer Stoffe
- Biologischer Abbauvorgang
- Reduktion von Desinfektionsmittel

Im folgenden Beispiel wird ein Aktivkohlefilter für die Adsorption organischer Stoffe dimensioniert. Dabei sollen folgende Parameter berücksichtigt werden:

- Aufzubereitender Volumenstrom = 65 m³/h
- Spezifische Filterbelastung = 1,2 m³/(m³*h)
- Filtergeschwindigkeit = 4,0 m/h

Unter dem Menüpunkt „**Berechnen**“, „**Aufbereitung**“ und „**Filterdimensionierung**“ wird der Unterpunkt „**Aktivkohlefilter**“ angewählt. Es erscheint das Fenster „**Aktivkohle**“ und es können alle Daten eingegeben werden. Nach Eingabe aller Daten sollte das Fenster wie folgt aussehen.

Aktivkohle

Adsorption organischer Stoffe | Biologischer Abbauvorgang | Reduktion von Desinfektionsmitteln

Allgemein
 Analyse: Bearbeiter: Datum:
 Anmerkung 1:
 Anmerkung 2:

Eingabewerte
 aufzubereitender Volumenstrom: m³ / h
 spezifische Filterbelastung: m³ / (m² * h)
 Filtergeschwindigkeit: m / h

Ergebnis
 Filtervolumen: m³
 Filterfläche: m²
 Filterschichthöhe: mm
 Filterschichthöhe gerundet: mm

Die Filterschichthöhe sollte eine Höhe h von 5000mm nicht überschreiten.

Auslegung der Komponente(n)
 Leistungsaufteilung: x 100% Leistung Querschnittsfläche gesamt: m²
 Querschnittsfläche pro Filter: m²

Auslegung der Querschnittsfläche
 Gesamtzahl der Filter:
 je 1 Filter als Reserve, wenn ein anderer Filter regeneriert oder erneuert wird.

Kreis
 Rechteck

Kreis
 Durchmesser: mm
 Durchmesser gerundet: mm

Folgende Werte haben sich geändert!
 Neue Querschnittsfläche: m²
 Neues Filtervolumen: m³

Berechnen
 OK
 Beenden
 Hilfe

Nach Anwahl der Befehlsschaltfläche „**Berechnen**“ erscheint in diesem Fall ein Informationsfenster, welches darauf hinweist, dass wegen des zu großen Durchmessers eine andere Leistungsaufteilung gewählt werden sollte.

Information

 Der Durchmesser sollte weniger als 3600 mm betragen. Ist dieser größer, empfiehlt sich eine Leistungsaufteilung. Weitere Informationen erhalten Sie in der Hilfe.

OK

Diese Informationsfenster wird mit der „**OK**“ Schaltfläche bestätigt. Und die Ergebnisse werden angezeigt.

Aktivkohle
✕

Adsorption organischer Stoffe
Biologischer Abbauvorgang
Reduktion von Desinfektionsmitteln

Allgemein

Analyse: Bearbeiter: Datum:

Anmerkung 1:

Anmerkung 2:

Eingabewerte

aufzubereitender Volumenstrom: m³ / h

spezifische Filterbelastung: m³ / (m² * h)

Filtergeschwindigkeit: m / h

Die Filterschichthöhe sollte eine Höhe h von 5000mm nicht überschreiten.

Ergebnis

Filtervolumen: m³

Filterfläche: m²

Filterschichthöhe: mm

Filterschichthöhe gerundet: mm

Auslegung der Komponente(n)

Leistungsaufteilung: x 100% Leistung Querschnittsfläche gesamt: m²

!! Bitte ändern Sie die Leistungsaufteilung !!

Querschnittsfläche pro Filter: m²

Auslegung der Querschnittsfläche

Gesamtzahl der Filter:

je 1 Filter als Reserve, wenn ein anderer Filter regeneriert oder erneuert wird.

Kreis

Rechteck

Kreis

Durchmesser: mm

Durchmesser gerundet: mm

Folgende Werte haben sich geändert!

Neue Querschnittsfläche: m²

Neues Filtervolumen: m³

Nun wird die Leistungsaufteilung auf 3 x 50% geändert. Dabei wird auch gleichzeitig eine neue Berechnung durchgeführt und die Ergebnisse aktualisiert.

Aktivkohle

Adsorption organischer Stoffe | Biologischer Abbauvorgang | Reduktion von Desinfektionsmitteln

Allgemein

Analyse: Bearbeiter: Datum:

Anmerkung 1:

Anmerkung 2:

Eingabewerte

aufzubereitender Volumenstrom: m³ / h

spezifische Filterbelastung: m³ / (m² * h)

Filtergeschwindigkeit: m / h

Die Filterschichthöhe sollte eine Höhe h von 5000mm nicht überschreiten.

Ergebnis

Filtervolumen: m³

Filterfläche: m²

Filterschichthöhe: mm

Filterschichthöhe gerundet: mm

Auslegung der Komponente(n)

Leistungsaufteilung: x 50% Leistung

Querschnittsfläche gesamt: m²

Querschnittsfläche pro Filter: m²

Auslegung der Querschnittsfläche

Gesamtzahl der Filter:

je 1 Filter als Reserve, wenn ein anderer Filter regeneriert oder erneuert wird.

Kreis

Rechteck

Kreis

Durchmesser: mm

Durchmesser gerundet: mm

Folgende Werte haben sich geändert!

Neue Querschnittsfläche: m²

Neues Filtervolumen: m³

Berechnen

OK

Beenden

Hilfe

Diese Ergebnisse könnten nun durch die Befehlsschaltfläche „OK“ in einem „Aktivkohlefenster“ dargestellt werden. In diesem Fall aber, soll noch eine Berechnung für einen rechteckigen Filter durchgeführt werden. Deswegen wird der Auswahlknopf Rechteck angewählt.

Die Ergebnisse zeigt das folgende Bild.

Aktivkohle
✕

Adsorption organischer Stoffe
Biologischer Abbauvorgang
Reduktion von Desinfektionsmitteln

Allgemein

Analyse: Bearbeiter: Datum:

Anmerkung 1:

Anmerkung 2:

Eingabewerte

aufzubereitender Volumenstrom: m³ / h

spezifische Filterbelastung: m³ / (m³ * h)

Filtergeschwindigkeit: m / h

Die Filterschichthöhe sollte eine Höhe h von 5000mm nicht überschreiten.

Ergebnis

Filtervolumen: m³

Filterfläche: m²

Filterschichthöhe: mm

Filterschichthöhe gerundet: mm

Auslegung der Komponente(n)

Leistungsaufteilung: x 50% Leistung Querschnittsfläche gesamt: m²

Querschnittsfläche pro Filter: m²

Auslegung der Querschnittsfläche

Gesamtzahl der Filter:

je 1 Filter als Reserve, wenn ein anderer Filter regeneriert oder erneuert wird.

Kreis
 Rechteck

Rechteck

Länge: mm

Länge gerundet: mm

Breite: mm

Breite gerundet: mm

Verhältnis Breite/Länge: 1:

Folgende Werte haben sich geändert!

Neue Querschnittsfläche: m²

Neues Filtervolumen: m³

Da bei dem rechteckigen Querschnitt der Durchmesser nicht auf 3600 mm zu begrenzen ist, kann auch die Leistungsaufteilung 2 x 100% beibehalten werden.

Aktivkohle
✕

Adsorption organischer Stoffe
Biologischer Abbauvorgang
Reduktion von Desinfektionsmitteln

Allgemein

Analyse: Bearbeiter: Datum:

Anmerkung 1:

Anmerkung 2:

Eingabewerte

aufzubereitender Volumenstrom: m³ / h

spezifische Filterbelastung: m³ / (m² * h)

Filtergeschwindigkeit: m / h

Die Filterschichthöhe sollte eine Höhe h von 5000mm nicht überschreiten.

Ergebnis

Filtervolumen: m³

Filterfläche: m²

Filterschichthöhe: mm

Filterschichthöhe gerundet: mm

Auslegung der Komponente(n)

Leistungsaufteilung: x 100% Leistung Querschnittsfläche gesamt: m²

Querschnittsfläche pro Filter: m²

Auslegung der Querschnittsfläche

Gesamtzahl der Filter:

je 1 Filter als Reserve, wenn ein anderer Filter regeneriert oder erneuert wird.

Rechteck

Länge: mm

Länge gerundet: mm

Breite: mm

Breite gerundet: mm

Verhältnis Breite/Länge: 1:

Folgende Werte haben sich geändert!

Neue Querschnittsfläche: m²

Neues Filtervolumen: m³

Kreis
 Rechteck

Sind die Berechnungen beendet, so wird die Befehlsschaltfläche „**OK**“ angewählt und die Eingabewerte sowie die Ergebnisse in einem „**Aktivkohlefenster**“ dargestellt.

Wasser 2000 - [Aktivkohle]

File Projekt Bearbeiten Berechnen Graphik Extras Fenster Hilfe

80 %

Aktivkohlefilter

Adsorption organischer Stoffe

Analyse: Aktivkohle
Bearbeiter: Rohleder
Datum: 11.10.00
Anmerkung 1: Beispielrechnung zur Filterdimensionierung
Anmerkung 2: Aktivkohle - Adsorption organischer Stoffe

Berechnungen

Eingabewerte		
Größe	Einheit	Wert
Volumenstrom	m ³ /h	65,0
Belastung	m ³ /(m ² *h)	1,2
Geschwindigkeit	m/h	4,0

Ergebnisse		
Größe	Einheit	Wert
Filtervolumen	m ³	54,167
Filterfläche	m ²	16,250
Filterschichthöhe	mm	3400

Anzahl der Filter: 2 Stück mit je **100,0 % Leistungsaufteilung**

Querschnittsfläche je Filter: 16,250 m²

Auslegung der Filterquerschnittsflächen

Querschnittsfläche als Kreis		
Größe	Einheit	Wert
Durchmesser	mm	4549
Durchmesser ger.	mm	4600
Neue Fläche	m ²	16,619
Neues Volumen	m ³	56,505

Querschnittsfläche als Rechteck		
Größe	Einheit	Wert
Breite	mm	2327
Breite ger.	mm	2400
Länge	mm	6982
Länge ger.	mm	7000
Verh. Länge/Breite	-	1: 3,0
Neue Fläche	m ²	16,800
Neues Volumen	m ³	57,120

Dieses Fenster kann gespeichert und gegebenenfalls in ein Projekt integriert werden.

5.5.4.2. Enteisungsfilter

Im folgenden Beispiel wird ein Filter für die Enteisung dimensioniert. Dabei sollen folgende Parameter berücksichtigt werden:

- Aufzubereitender Volumenstrom = 65 m³/h
- Massenkonzentration an Fe²⁺ Ionen = 3,5 mg/l
- Massenkonzentration an O₂ = 5 mg/l
- pH-Wert des Rohwassers = 7,4
- Wassertemperatur = 11,3 °C
- Mittlerer Korndurchmesser = 1,5 mm
- Höhe der Filterschicht = 2,0 m

Unter dem Menüpunkt „**Berechnen**“, „**Aufbereitung**“ und „**Filterdimensionierung**“ wird der Unterpunkt „**Enteisungsfilter**“ angewählt. Es erscheint das Fenster „**Enteisung**“ und es können alle Daten eingegeben werden. Nach Eingabe aller Daten sollte das Fenster wie folgt aussehen.

The screenshot shows the 'Enteisung' window with the following data:

Allgemein	
Analyse:	Enteisung
Bearbeiter:	Rohleder
Datum:	04.10.2000
Anmerkung 1:	Beispierechnung zur Filterdimensionierung
Anmerkung 2:	Filter für die Enteisung

Eingabewerte	
Massenkonzentration an Fe(2+)-Ionen	3,5 mg / l
Massenkonzentration an Sauerstoff im belüfteten Wasser	5 mg / l
pH-Wert des Rohwassers	7,4
Wassertemperatur	11,3 °C
mittlerer Filterkorndurchmesser	1,5 mm
Höhe der Filterschicht	2 m
Aufzubereitender Volumenstrom	65 m ³ / h

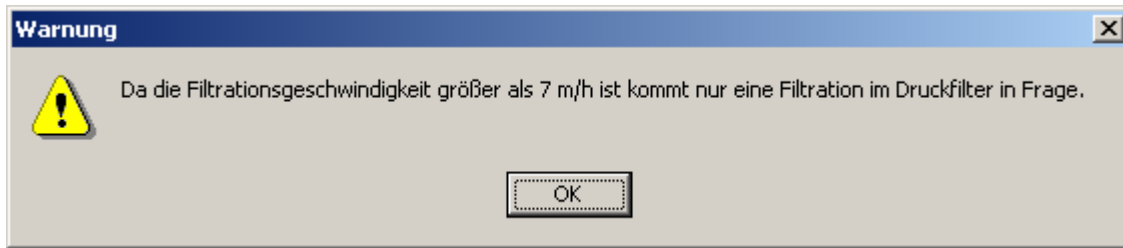
C-Wert und Filtergeschwindigkeit	
Parameter C in Abhängigkeit der Massenkonzentration an Fe(2+)-Ionen und dem pH-Wert des Rohwassers	
0	<input type="button" value="Berechnen"/>
Filtrationsgeschwindigkeit	<input type="button" value="OK"/>
0 m/h	<input type="button" value="Beenden"/>
gewählte Filtrationsgeschwindigkeit	<input type="button" value="Hilfe"/>
0 m/h	

Querschnittsfläche	
Bauform:	<input checked="" type="radio"/> Kreis <input type="radio"/> Rechteck
Querschnittsfläche pro Filter:	0 m ²

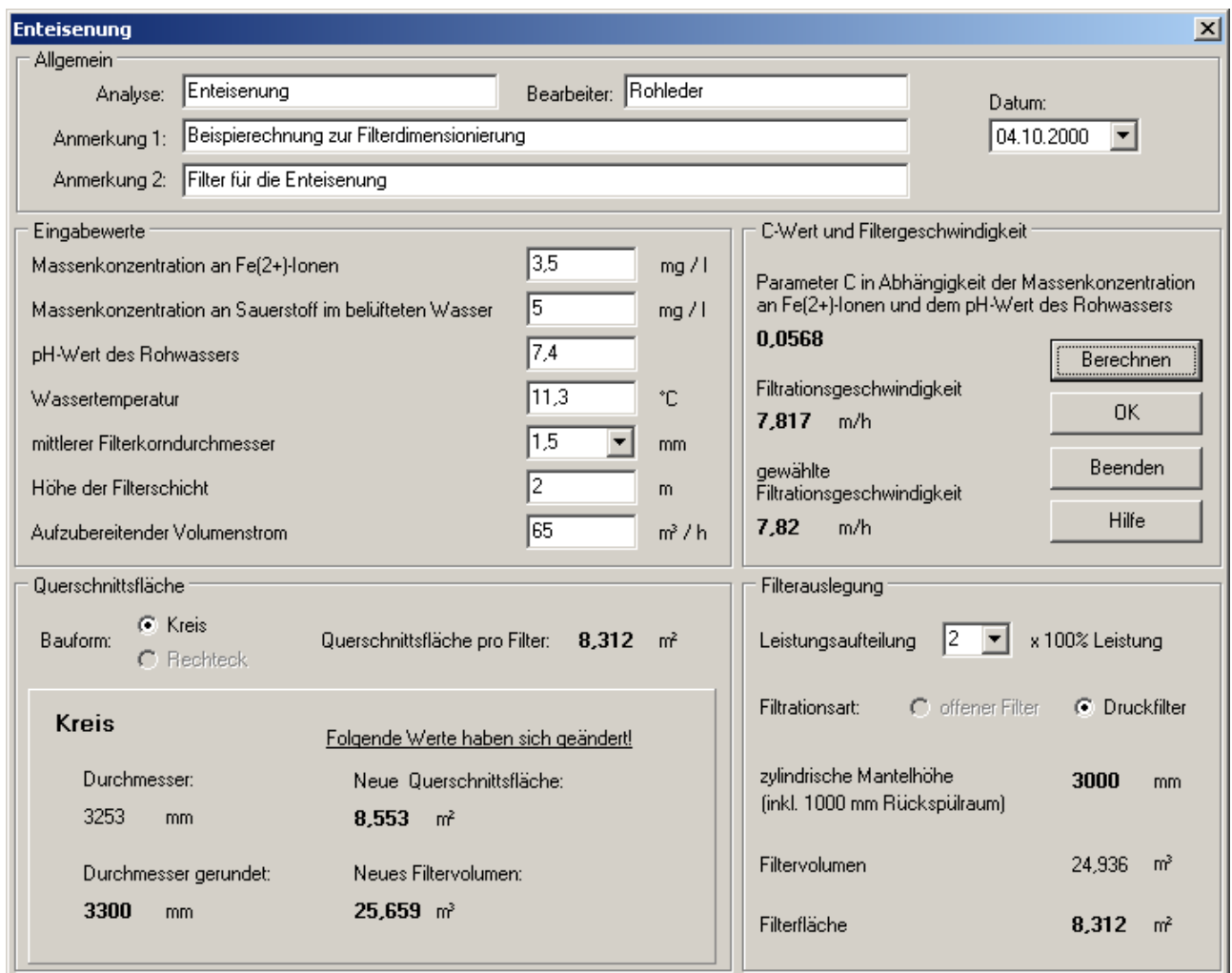
Kreis	
Folgende Werte haben sich geändert!	
Durchmesser:	Neue Querschnittsfläche:
0 mm	0 m ²
Durchmesser gerundet:	Neues Filtervolumen:
0 mm	0 m ³

Filterauslegung	
Leistungsaufteilung	2 x 100% Leistung
Filtrationsart:	<input checked="" type="radio"/> offener Filter <input type="radio"/> Druckfilter
zylindrische Mantelhöhe (inkl. 1000 mm Rückspülraum)	0 mm
Filtervolumen	0 m ³
Filterfläche	0 m ²

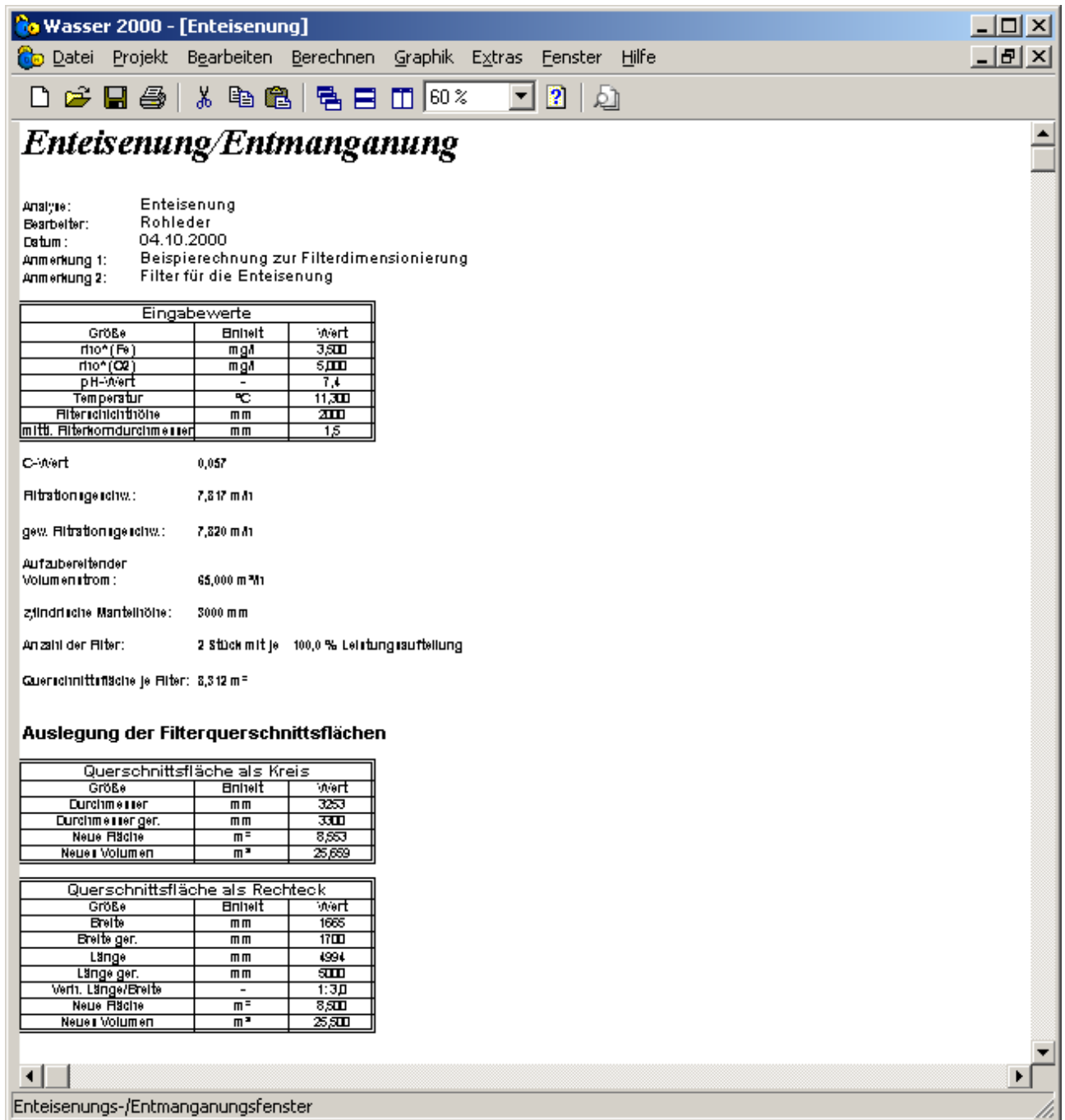
Durch Anwahl der Befehlsschaltfläche „**Berechnen**“ wird die Berechnung gestartet. Da die Filtrationsgeschwindigkeit in diesem Fall über 7 m/h liegt, erscheint eine Warnung, dass nur eine Filtration über einen Druckfilter möglich ist.



Diese Warnung ist mit „**OK**“ zu bestätigen und die Ergebnisse werden angezeigt.



Sind sie mit den Berechnungen zufrieden, so wird die Befehlsschaltfläche „**OK**“ angewählt und die Eingabewerte sowie die Ergebnisse in einem „**Enteisungsfenster**“ dargestellt.



Dieses Fenster kann gespeichert und gegebenenfalls in ein Projekt integriert werden.

5.5.4.3. Sandfilter

Im folgenden Beispiel wird ein Sandfilter für die Flockungsfiltration dimensioniert. Dabei sollen folgende Parameter berücksichtigt werden:

- Aufzubereitender Volumenstrom = 150 m³/h
- Filtrationsgeschwindigkeit = 9,5 m/h
- Höhe der Filterschicht = 2500 mm
- Filtertyp = Druckfilter
- Filtrationsart = Mehrschichtfiltration

- Leistungsaufteilung = 3 x 50 %

Unter dem Menüpunkt „**Berechnen**“, „**Aufbereitung**“ und „**Filterdimensionierung**“ wird der Unterpunkt „**Sandfilter**“ angewählt. Es erscheint das Fenster „**Sandfilter**“ und es können alle Daten in das Blatt „**Flockungsfiltration**“ eingegeben werden. Nach Eingabe aller Daten sollte das Fenster wie folgt aussehen.

The screenshot shows the 'Sandfilter' window with the following details:

- Navigation:** 'Direktfiltration', 'Flockungsfiltration', 'Filtration geflockten und sedimentierten Wassers' (selected).
- Allgemein:**
 - Analyse: Sandfilter
 - Bearbeiter: Rohleder
 - Datum: 11.10.00
 - Anmerkung 1: Beispielrechnung zur Filterdimensionierung
 - Anmerkung 2: Sandfilter - Flockungsfiltration
- Filtertyp:**
 - Offener Filter
 - Druckfilter
- Filtrationsart:**
 - Einschichtfiltration
 - Mehrschichtfiltration
- Leistungsaufteilung der Filter:**
 - Text: Es werden mindestens 2 x 100 % als Leistungsaufteilung der Filter dimensioniert. Dies geschieht zur Aufrechterhaltung des Betriebes, während ein anderer Filter rückgespült und in Bereitschaft gehalten wird.
 - Text: Eine andere Leistungsaufteilung ist jederzeit möglich.
 - Leistungsaufteilung: 3 x 50 %
 - Buttons: Berechnen, OK, Beenden, Hilfe
- Auslegungsdaten:**
 - Volumenstrom in m³/h: 150
 - Filtrationsgeschwindigkeit in m/h: 9,5
 - Höhe in mm: 2500
- Daten des einzelnen Filters:**
 - Fläche des Filters in m²: 0
 - Zylindrische Mantelhöhe in mm: 0
 - Durchmesser des Filters in mm: 0
 - Gewählter Durchmesser in mm: 0
 - Note: Bei der Mehrschichtfiltration wird die Filtrationsgeschwindigkeit um ca. 30% erhöht !!

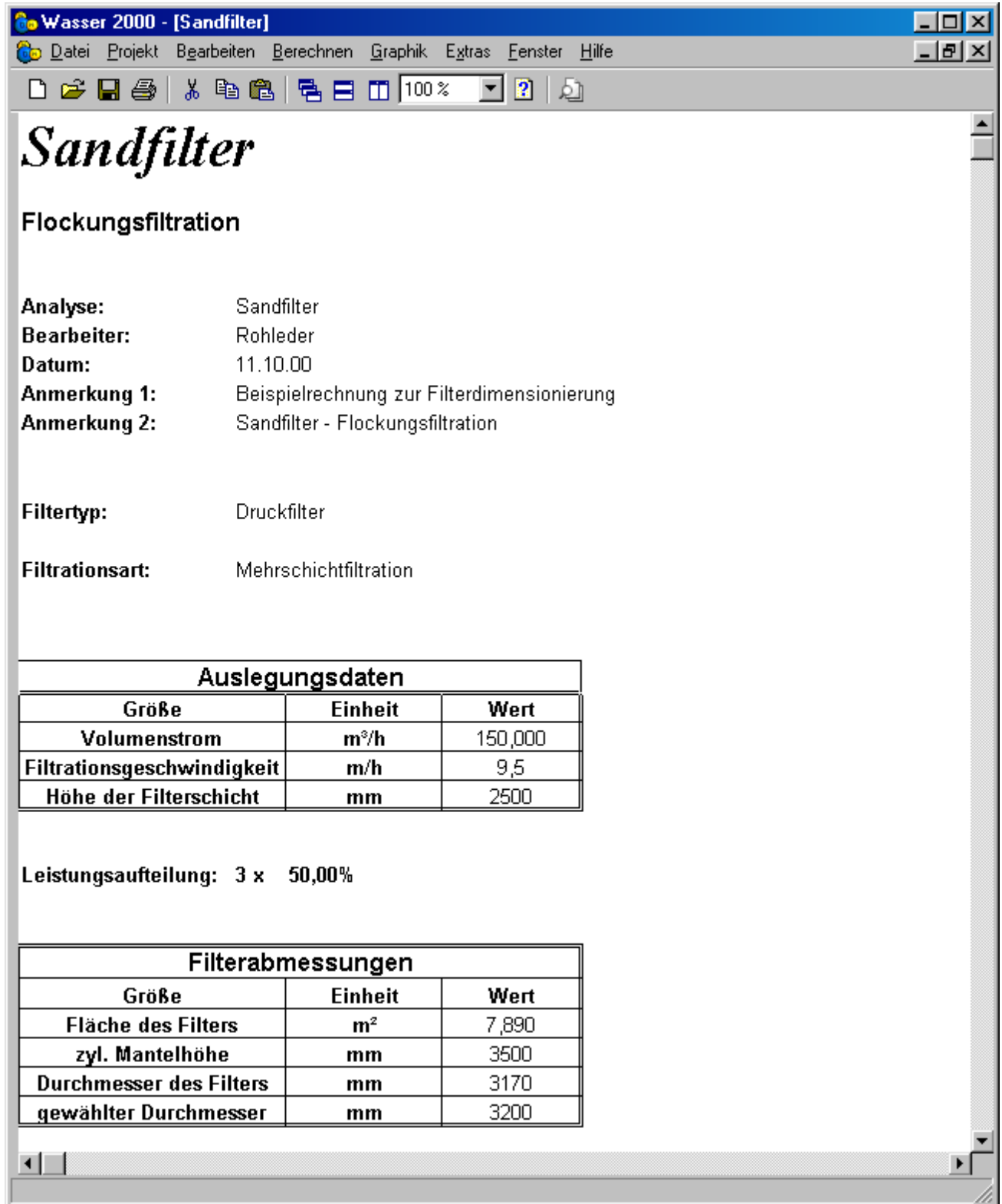
Durch Auswahl der Befehlsschaltfläche „**Berechnen**“ wird die Berechnung gestartet und die Ergebnisse werden angezeigt.

The screenshot shows the 'Sandfilter' window with the following data:

Parameter	Value
Analyse	Sandfilter
Bearbeiter	Rohleder
Datum	11.10.00
Anmerkung 1	Beispielrechnung zur Filterdimensionierung
Anmerkung 2	Sandfilter - Flockungsfiltration
Filtertyp	Druckfilter
Filtrationsart	Mehrschichtfiltration
Leistungsaufteilung	3 x 50 %
Volumenstrom in m³/h	150
Filtrationsgeschwindigkeit in m/h	9,5
Höhe in mm	2500
Fläche des Filters in m²	7,89
Zylindrische Mantelhöhe in mm	3500
Durchmesser des Filters in mm	3170
Gewählter Durchmesser in mm	3200

Additional text in the window: 'Es werden mindestens 2 x 100 % als Leistungsaufteilung der Filter dimensioniert. Dies geschieht zur Aufrechterhaltung des Betriebes, während ein anderer Filter rückgespült und in Bereitschaft gehalten wird.' and 'Eine andere Leistungsaufteilung ist jederzeit möglich.'

Sind sie mit den Berechnungen zufrieden, so wird die Befehlsschaltfläche „**OK**“ angewählt und die Eingabewerte sowie die Ergebnisse in einem „**Sandfilterfenster**“ dargestellt.



Dieses Fenster kann gespeichert werden und gegebenenfalls in ein Projekt integriert werden.

6. Korrosionsbetrachtung

Dieser Menüpunkt dient zur Beurteilung des Korrosionsverhaltens von metallischen Werkstoffen gegenüber Trinkwasser und Wässern, die in der chemischen Zusammensetzung Trinkwasser entsprechen. Die Beurteilungen beziehen sich auf die Innenkorrosion von Installationsbauteilen und stützen sich auf die DIN 50930 Teil 1 bis Teil 5 Februar 1993.

Die Werkstoffe, für die eine Beurteilung erfolgen kann, sind:

- Un- und niedriglegierte Eisenwerkstoffe
- Feuerverzinkte Eisenwerkstoffe
- Kupfer und -Legierungen

Vom Programm berücksichtigte Korrosionsarten:

- Gleichmäßige Flächenkorrosion
- Mulden- und Lochkorrosion
- Selektive Korrosion

Als Parameter zur Beurteilung des Korrosionsverhaltens dienen:

- der pH-Wert
- die Säurekapazität $K_S(4,3)$
- $c(\text{Ca}^{2+})$
- $\frac{c(\text{Cl}^-) + c(\frac{1}{2}\text{SO}_4^{2-})}{K_S(4,3)}$
- $\frac{c(\text{Cl}^-) + c(\frac{1}{2}\text{SO}_4^{2-})}{c(\text{NO}_3^-)}$
- $\rho^*(\text{O}_2)$

Die Korrosionsbetrachtung kann nur für ein aktives Wasserfenster erfolgen. Im folgenden wird eine Korrosionsbetrachtung für das Beispielswasser Tab6B1 (siehe Kapitel 4) durchgeführt. Ist das Wasserfenster Tab6B1 aktiv, so wird der Menüpunkt „**Berechnen**“ und „**Korrosionsbetrachtung**“ angewählt und es erscheint das Dialogfenster „**Korrosionsbetrachtung**“.

The screenshot shows a dialog box titled "Korrosionsbetrachtung" with a close button (X) in the top right corner. The dialog contains the following fields and buttons:

- Analyse:
- Bearbeiter:
- Datum: (with a dropdown arrow)
- Anmerkung 1:
- Anmerkung 2:
- Sauerstoff rho(O2):
- Buttons: OK, Abbrechen, Hilfe

Nach Eingabe der entsprechenden Daten, wird die Berechnung durch den Befehlsschalter „**OK**“ gestartet und die Ergebnisse in einem Korrosionsfenster dargestellt.

Wasser 2000 - [Korrosion]

Datei Projekt Bearbeiten Berechnen Graphik Extras Fenster Hilfe

80 %

Korrosionsbetrachtung

Analyse: Korrosion
 Bearbeiter: Rohleder
 Datum: 05.10.00
 Anmerkung 1: Korrosionsbetrachtung von
 Anmerkung 2: Beispiel 1 aus Tabelle 6

Analysewerte		
Größe	Einheit	Wert
pH-Wert	----	6.900
KS(4,3)	mmol/l	5.350
KB(8,2)	mmol/l	1.484
c(DIC)	mmol/l	6.762
m-Wert	mmol/l	5.364
tpHe	°C	20.000
tKS4,3	°C	20.000
tKB8,2	°C	20.000
tb	°C	10.000
rho(O2)	mg/l	2.000
Sle	----	0.000
k25	µS/cm	960.000
tk25	°C	25.000

Gesamtkonzentrationen		
Größe	Einheit	Wert
c(Ca)	mmol/l	3.500
c(Mg)	mmol/l	0.750
c(Na)	mmol/l	2.050
c(K)	mmol/l	0.150
c(SO4)	mmol/l	1.200
c(NO3)	mmol/l	0.500
c(Cl)	mmol/l	2.500
rho*(Ca)	mg/l	140.280
rho*(Mg)	mg/l	18.233
rho*(Na)	mg/l	47.129
rho*(K)	mg/l	5.865
rho*(SO4)	mg/l	115.272
rho*(NO3)	mg/l	31.035
rho*(Cl)	mg/l	88.625

Korrosions-Fenster

Wasser 2000 - [Korrosion]

Datei Projekt Bearbeiten Berechnen Graphik Extras Fenster Hilfe

80 %

Un- und niedriglegierte Eisenwerkstoffe

Beurteilung der gleichmäßigen Flächenkorrosion:

$\rho(\text{O}_2) = 2.000 \text{ mg/l} \implies \rho(\text{O}_2) < 3 \text{ mg/l}$
 $\text{pH-Wert} = 6.981 \text{ bei } t_b = 10.000 \text{ °C} \implies \text{pH} < 7$
 $K_{s(4,3)} = 5.350 \text{ mmol/l bei } t_{Ks(4,3)} = 20.000 \text{ °C}$
 $c(\text{Ca}^{2+}) = 3.151 \text{ mmol/l}$

Unter Berücksichtigung der oben aufgeführten Parameter ist die Ausbildung der Kalk-Rostschuttschicht gefährdet.

Beurteilung der Mulden- und Lochkorrosion:

$[c(\text{Cl}^-) + c(1/2 \text{SO}_4^{--})] / K_{s(4,3)} = 0.827$
 $\rho(\text{O}_2) = 2.000 \text{ mg/l} \implies \rho(\text{O}_2) > 0.1 \text{ mg/l}$

Die örtliche Korrosion wird begünstigt.

Feuerverzinkte Eisenwerkstoffe

Beurteilung der gleichmäßigen Flächenkorrosion:

$K_{s(4,3)} = 5.350 \text{ mmol/l bei } t_{Ks(4,3)} = 20.000 \text{ °C}$
 $K_{b(8,2)} = 1.484 \text{ mmol/l bei } t_{Kb(8,2)} = 20.000 \text{ °C} \implies K_{b(8,2)} > 0.7 \text{ mmol/l}$

Unter Berücksichtigung der oben aufgeführten Parameter ist die Ausbildung der Schuttschicht gefährdet.

Beurteilung der Mulden-, Loch- und selektiven Korrosion:

$K_{s(4,3)} = 5.350 \text{ mmol/l bei } t_{Ks(4,3)} = 20.000 \text{ °C}$
 $[c(\text{Cl}^-) + c(1/2 \text{SO}_4^{--})] / K_{s(4,3)} = 0.827$
 $c(\text{Ca}^{2+}) = 3.151 \text{ mmol/l}$
 $\rho(\text{O}_2) = 2.000 \text{ mg/l} \implies \rho(\text{O}_2) > 0.1$

Schäden durch Muldenkorrosion sind möglich.

$[c(\text{Cl}^-) + c(1/2 \text{SO}_4^{--})] / c(\text{NO}_3^-) = 8.848$

Schäden durch selektive Korrosion sind nicht zu erwarten.

Kupfer und Kupferlegierungen

Beurteilung der Lochkorrosion:

$c(\text{HCO}_3^-) / c(\text{SO}_4^{--}) = 5.396$
 $\rho(\text{O}_2) = 2.000 \text{ mg/l} \implies 0.1 \text{ mg/l}$

Korrosions-Fenster

In diesem Korrosionsfenster sind die Korrosionsbegünstigenden Parameter durch einen Pfeil gekennzeichnet.