ORKUSTOFNUN

Forritið "KALTVA": til könnunar á gæðum efnagreininga á köldu vatni

Hörður Svavarsson

Greinargerð HS-81/05

FORRITIÐ "KALTVA": TIL KÖNNUNAR Á GÆÐUM EFNAGREININGA Á KÖLDU VATNI.

Forrit þetta er aðallega gert til könnunar á gæðum efnagreininga á köldu vatni. Upprunaleg gerð þess er fengin frá Einari Gunnlaugssyni 1978. Ég hef aðallega breytt inntaki og úttaki þess og aðlagað það tölvu Orkustofnunar.

Dæmi um hvernig þýða má forritið:

```
>F4P KALTVA,KALTVA.DMP/LI:1=KALTVA/TR<RET>
>TKB<RET>
TKB>KALTVA=KALTVA<RET>
TKB>/<RET>
ENTER OPTIONS
TKB>LIBR=OSRES2:RO<RET>
TKB>//<RET>
>
```

INNLESTUR

Forritið les af inntaksskrá sem gerð er með "EDITOR". Hafa má fleiri en eina efnagreiningu í sömu skrá. Lesið er inn texti, sem má vera allt að 80 stafir, ásamt heildar efnagreiningu (ppm) á köldu vatni. Ef pH hefur ekki verið mælt setur forritið það jafnt og 9,99. Ef kísill og kolsýra hafa ekki verið efnagreind þá eru þessi efni sett jöfn og 0,001. Þetta er gert svo að vinnsla forritsins stöðvist ekki.

Dæmi um inntaksskrá.

```
LIND 1.  (KALT VATN HUSIN)
6.9,7.55,25,117,27,7,0.66
7.6,3.6,33.2,8.2,0.0,8.5,0,0
LIND 2.  (UPPI A HASLETTUNNI)
3.7,7.25,25,107,18,7.8,0.48
7.6,2.4,28.9,7.2,0.0,9.3,0,0
LJOSAFOSS.
0,7.6,25,76,13,8.1,0.48
3.9,1.3,23.6,7.2,0.0,6.3,0,0
SIGGUVIK 4.
0,7.65,25,85,13.5,9,0.72
3.8,1.4,24.2,3.1,0.0,7.5,0,0
LÆKUR VIÐ RAFSTÖÐ.
12.6,8.1,25,249,57,15.1,1.26
20.8,6.4,58.6,14.6,0.0,8.2,0,0
```

ÚTSKRIFT

Niðurstöður eru settar á skrá sem heitir "KALTVA.DMP".

Dæmi um úttaksskrá.

ORKUSTOFNUN VOD HITAVEITA REYKJAVIKUR NESJAVOLLUM. KALT VATN.
1981-12-23 Hördur

LIND 1. (KALT VATN HUSIN)

PH	PHHITI	SIO2	NA	K	CA	MG	CO2	SO4	H2S	CL	F	HCO3	CO3	UPPL.E
7,55	25,00	27,00	7,00	0,66	7,60	3,60	33,20	8,20	0,00	8,50	0,00	43,67	0,08	0,00
MILLIMOL		0,4494	0,3045	0,0169	0,1896	0,1481	0,7544	0,0854	0,0000	0,2398	0,0000	0,7157	0,0013	

MÆLDUR HITI = 6,9 EDLISVIDNAM = 117,0 OHMM.
MILLIEQV KATJONA = 0,9968 MILLIEQV ANJONA = 1,1287 MISMUNUR =-0,1320 -12,4 %
C CACO3 = 116,7 HÖRKUGRADA = 1,9 MOL NA/CA = 1,61 MOL HCO3/SIO2 = 1,59

LIND 2. (UPPI A HASLETTUNNI)

PH	PHHITI	SIO2	NA	K	CA	MG	CO2	SO4	H2S	CL	F	HCO3	CO3	UPPL.E
7,25	25,00	18,00	7,80	0,48	7,60	2,40	28,90	7,20	0,00	9,30	0,00	36,17	0,03	0,00
MILLIMOL		0,2996	0,3393	0,0123	0,1896	0,0987	0,6567	0,0750	0,0000	0,2623	0,0000	0,5928	0,0005	

MÆLDUR HITI = 3,7 EDLISVIDNAM = 107,0 OHMM.
MILLIEQV KATJONA = 0,9282 MILLIEQV ANJONA = 1,0061 MISMUNUR =-0,0778 -8,0 %
C CACO3 = 147,9 HÖRKUGRADA = 1,6 MOL NA/CA = 1,79 MOL HCO3/SIO2 = 1,98

LJOSAFOSS.

PH	PHHITI	SIO2	NA	K	CA	MG	CO2	SO4	H2S	CL	F	HCO3	CO3	UPPL.E
7,60	25,00	13,00	8,10	0,48	3,90	1,30	23,60	7,20	0,00	6,30	0,00	31,16	0,06	0,00
MILLIMOL		0,2164	0,3523	0,0123	0,0973	0,0535	0,5362	0,0750	0,0000	0,1777	0,0000	0,5107	0,0010	

MÆLDUR HITI = 0,0 EDLISVIDNAM = 76,0 OHMM.
MILLIEQV KATJONA = 0,6662 MILLIEQV ANJONA = 0,8402 MISMUNUR =-0,1741 -23,1 %
C CACO3 = 149,6 HÖRKUGRADA = 0,8 MOL NA/CA = 3,62 MOL HCO3/SIO2 = 2,36

SIGGUVIK 4.

PH	PHHITI	SIO2	NA	K	CA	MG	CO2	SO4	H2S	CL	F	HCO3	CO3	UPPL.E
7,65	25,00	13,50	9,00	0,72	3,80	1,40	24,20	3,10	0,00	7,50	0,00	32,11	0,07	0,00
MILLIMOL		0,2247	0,3915	0,0184	0,0948	0,0576	0,5499	0,0323	0,0000	0,2115	0,0000	0,5264	0,0011	

MÆLDUR HITI = 0,0 EDLISVIDNAM = 85,0 OHMM.
MILLIEQV KATJONA = 0,7147 MILLIEQV ANJONA = 0,8047 MISMUNUR =-0,0900 -11,9 %
C CACO3 = 144,6 HÖRKUGRADA = 0,9 MOL NA/CA = 4,13 MOL HCO3/SIO2 = 2,34

LÆKUR VID RAFSTÖD.

PH	PHHITI	SIO2	NA	K	CA	MG	CO2	SO4	H2S	CL	F	HCO3	CO3	UPPL.E
8,10	25,00	57,00	15,10	1,26	20,80	6,40	58,60	14,60	0,00	8,20	0,00	80,78	0,54	0,00
MILLIMOL		0,9487	0,6568	0,0322	0,5190	0,2632	1,3315	0,1520	0,0000	0,2313	0,0000	1,3241	0,0090	

MÆLDUR HITI = 12,6 EDLISVIDNAM = 249,0 OHMM.
MILLIEQV KATJONA = 2,2534 MILLIEQV ANJONA = 1,8773 MISMUNUR = 0,3761 18,2 %
C CACO3 = 21,6 HÖRKUGRADA = 4,4 MOL NA/CA = 1,27 MOL HCO3/SIO2 = 1,40

```
0001            PROGRAM KALTVA
                C-----------------------------------------------------------------------
                C       ORKUSTOFNUN Vatnsorkudeild,
                C       EFNAGREININGAR A KÖLDU VATNI,
                C
                C       FORRITIÐ LES AF SKRA SEM GERÐ ER MEÐ 'EDITOR', HAFA MA
                C       MÖRG SYNI I SÖMU INNLESTRARSKRA,
                C       GÖGN SEM LESIN ERU INN:
                C       ALLT AÐ 80 STAFA TEXTI,
                C       HITI,PH,PHHITI,EDLISVIÐNAM,SIO2,NA,K
                C       CA,MG,CO2,SO4,H2S,CL,F,UPPL,EFNI
                C
                C       Einar Gunnlaugsson 1978
                C       Hördur Svavarsson, desember 1981,
                C
                C-----------------------------------------------------------------------
                C        EF PH HEFUR EKKI VERIÐ MÆLT ÞA ER ÞAÐ SETT = 9,99
                C        EF SIO2 OG CO2 HAFA EKKI VERIÐ MÆLD ERU ÞAU SETT = 0,001
                C-----------------------------------------------------------------------
0002            DIMENSION TITLE(20),WMO(9),AN(9),AMOL(9)
0003            BYTE FNAME(32),ESC,DAGS(18),HAUS(70),CHARO
0004            DATA CHARO /'0'/
0005            DATA ESC /'33/
                C-----------------------------------------------------------------------
0006            CALL ASSIGN (3,'KALTVA,DMP')
0007            TYPE 1200
0008    1200    FORMAT (' HVER ERT THU ? !',$)
0009            ACCEPT 1201,(DAGS(K),K=13,18)
0010    1201    FORMAT (80A1)
0011            CALL IDATE (MON,IDY,IYR)
0012            ENCODE (12,1202,DAGS) IYR,MON,IDY
0013    1202    FORMAT ('19',I2,'-',I2,'-',I2,'  ')
0014            IF (MON,LT,10) DAGS(6)=CHARO
0015            IF (IDY,LT,10) DAGS(9)=CHARO
0016            TYPE 1204
0017    1204    FORMAT (' FYRIRSOGN ? !',$)
0018            ACCEPT 1201,HAUS
0019    1205    FORMAT('1',A1,'Þ4w',5X,'ORKUSTOFNUN  VOD',19X,70A1,'KALT VATN,',
                1 /6X,18A1,/6X,115('='))
0020            TYPE 1206
0021    1206    FORMAT (' INNLESTRARSKRA : ',$)
0022            ACCEPT 1199,IQ,FNAME
0023    1199    FORMAT (Q,80A1)
0024            CALL ASSIGN (1,FNAME,IQ)
0025            CALL FDBSET (1,'READONLY')
                C-----------------------------------------------------------------------
                C
0026            J = 0
0027            WRITE(3,1205) ESC,HAUS,DAGS
0028    1       CONTINUE
0029            IF (J,NE,6) GO TO 9
0030            J = 0
0031            WRITE(3,1205) ESC,HAUS,DAGS
0032    9       READ (1,8,END=99) TITLE
0033    8       FORMAT(20A4)
0034            READ (1,10) HITI,PH,PHHITI,VIDN,SIO2,AN(1),AN(2)
```

```
0035            READ (1,10) AN(3),AN(4),CO2,AN(5),H2S,AN(6),AN(7),UPPL
0036    10      FORMAT (10F7.0)
0037            WMO(1)=22.990           !  NA
0038            WMO(2)=39.102           !  K
0039            WMO(3)=40.080           !  CA
0040            WMO(4)=24.312           !  MG
0041            WMO(5)=96.062           !  SO4
0042            WMO(6)=35.453           !  CL
0043            WMO(7)=18.998           !  F
0044            WMO(8)=60.009           !  CO3
0045            WMO(9)=61.009           !  HCO3
        C       *
0046            IF (PH.GT.0.) GO TO 81
0047            PH = 9.99
0048    81      IF (SIO2.GT.0.) GO TO 82
0049            SIO2 = 0.001
0050    82      IF (CO2.GT.0.) GO TO 83
0051            CO2 = 0.001
0052    83      CONTINUE
0053            CO2M = CO2/44.01
0054            H2SM = H2S/34.08
0055            DO 13 I=1,7
0056            AMOL(I)=AN(I)/WMO(I)
0057    13      CONTINUE
0058            AI=(AMOL(1)+AMOL(2)+4.*AMOL(3)+4.*AMOL(4))*10.**(-3)
0059            X=(0.5042*SQRT(AI)/(1.+4.3*0.3273*SQRT(AI)))
0060            Z=(0.5042*SQRT(AI)/(1.+9.0*0.3273*SQRT(AI)))
0061            Y=(0.5042*SQRT(AI)*4./(1.+4.5*0.3273*SQRT(AI)))
0062            GAMHCO=10.**(-X)
0063            GAMCO=10.**(-Y)
0064            GAMH=10.**(-Z)
0065            GAMMA=GAMH*GAMCO/GAMHCO
0066            IF (PH.LE.8.0) GO TO 14
0067            A=10.38-PH
0068            ZZ=CO2
0069            HCO3=10.**(+A)*GAMMA*ZZ/(1.+10.**(+A)*GAMMA)
0070            HCO3=HCO3+0.05
0071            CO3=ZZ-HCO3
0072            HCO3=HCO3*WMO(9)/43.9945
0073            CO3=(CO3+0.05)*WMO(8)/43.9945
0074            GO TO 16
0075    14      GAMMAA=GAMH*GAMCO
0076            A=10.38-PH
0077            B=6.38-PH
0078            H2CO3=10.**(+B)*GAMMAA*CO2/(1.+10.**(+B)*GAMMAA)
0079            XHCO3=CO2-H2CO3
0080            HCO3=10.**(+A)*GAMMA*XHCO3/(1.+10.**(+A)*GAMMA)
0081            HCO3=HCO3+0.05
0082            CO3=XHCO3-HCO3
0083            HCO3=HCO3*WMO(9)/43.9945
0084            CO3=(CO3+0.05)*WMO(8)/43.9945
0085    16      AMOL(8)=CO3/WMO(8)
0086            AMOL(9)=HCO3/WMO(9)
0087            SUMOK=AMOL(1)+AMOL(2)+AMOL(3)*2.+AMOL(4)*2.    ! KATJONIR.
0088            SUMOA= AMOL(5)*2.+AMOL(6)+AMOL(7)+AMOL(8)*2.+AMOL(9) ! ANJONIR.
0089            AMISMO=SUMOK-SUMOA
```

```
0090            PR=AMISMO*100./((SUMOK+SUMOA)/2.)
0091            BCACO3=AMOL(3)*10.**(-6)*AMOL(8)
0092            B = -ALOG10(BCACO3)
0093            T = (-172.00304+54.86250*B-5.86360*B*B+0.21121*B*B*B)*100.
0094            AMOSI=SIO2/60.0848
0095            ANAVCA=AMOL(1)/AMOL(3)          !  MOL (NA/CA).
0096            HCVSI=AMOL(9)/AMOSI             !  MOL (HCO3/SIO2).
0097            HARKA=0.14*AN(3)+0.23*AN(4)     !  HÖRKUGRAÐA.
0098            WRITE(3,18) TITLE                  .
0099    18      FORMAT (/1H0,5X,20A4)
0100            WRITE(3,19)
0101    19      FORMAT (1H0,6X,2HPH,2X,6HPHHITI,4X,4HSIO2,6X,2HNA,7X,
                1 1HK,6X,2HCA,6X,2HMG,5X,3HCO2,5X,3HSO4,5X,3HH2S,6X,2HCL,7X,
                2 1HF,4X,4HHCO3,5X,3HCO3,2X,6HUPPL.E)
0102            WRITE(3,20) PH,PHHITI,SIO2,AN(1),AN(2),AN(3),AN(4),CO2,
                2 AN(5),H2S,AN(6),AN(7),HCO3,CO3,UPPL
0103    20      FORMAT (1H ,15F8.2)
0104            WRITE(3,21) AMOSI,AMOL(1),AMOL(2),AMOL(3),AMOL(4),CO2M,
                1 AMOL(5),H2SM,AMOL(6),AMOL(7),AMOL(9),AMOL(8)
0105    21      FORMAT (1H ,5X,8HMILLIMOL,5X,12F8.4)
0106            WRITE(3,22) HITI,VIDN
0107    22      FORMAT (1H ,5X,'MÆLDUR HITI =',F6.1,5X,'EÐLISVIÐNAM =',
                1 F7.1,' OHMM.')
0108            WRITE(3,23) SUMOK,SUMOA,AMISMO,PR
0109    23      FORMAT (1H ,5X,18HMILLIEQV KATJONA =,F7.4,5X,
                117HMILLIEQV ANJONA =,F7.4,5X,10HMISMUNUR =,F7.4,1X,
                1F6.1,' %')
0110            WRITE(3,24) T,HARKA,ANAVCA,HCVSI
0111    24      FORMAT (1H ,5X,9HC CACO3 =,F7.1,5X,12HHÖRKUGRAÐA =,
                1F5.1,5X,11HMOL NA/CA =,F7.2,5X,15HMOL HCO3/SIO2 =,F7.2)
0112            J = J+1
0113            GO TO 1
0114    99      CALL EXIT
0115            END
```