

Univerza v Ljubljani
Naravoslovnotehniška fakulteta
Oddelek za geologijo



doc. dr. Timotej Verbovšek

MODELIRANJE GEOKEMIČNIH PROCESOV V OKOLJU S PROGRAMOMA AQUACHEM IN PHREEQC FOR WINDOWS

ŠTUDIJSKO GRADIVO ZA VAJE IZ PREDMETA
GEOKEMIJA

nosilca predmeta: izr. prof. dr. Nina Zupančič in
doc. dr. Timotej Verbovšek



Dostopno tudi na spletu v PDF obliki:
<http://www.geo.ntf.uni-lj.si/tverbovsek/material.html>

Ljubljana, januar 2012

1. Uvod

Za geokemično modeliranje obstaja več programov, ki so si med seboj precej podobni. To so programi PHREEQE, PHREEQC, PHREEQC-I in PHREEQC for Windows. Razlikujejo se predvsem v načinu podajanja podatkov, vsi pa delujejo po bolj ali manj enakih principih.

V nadaljevanju so na kratko opisane glavne lastnosti omenjenih programov, v časovnem zaporedju od najstarejšega do najmlajšega. Vsi temeljijo na programu PHREEQE, ki je bil namenjen računanju pH ter redoks in ravnotežnih reakcij. Sčasoma so ga nadomestili s programom PHREEQC, kateremu so dodali možnosti modeliranja ionske izmenjave, reakcij na površini mineralov, masnega transferja, inverznega modeliranja itd. Trenutno predstavljata AquaChem in PHREEQC najboljšo programsko opremo za računalniško modeliranje geokemičnih reakcij. Vse programe je mogoče dobiti na internetu, pri čemer so vsi razen AquaChem brezplačni (glej seznam povezav v literaturi!).

PHREEQE je program, namenjen modeliranju geokemičnih reakcij, kot je razvidno iz imena: **pH**, **RE**dox reactions, **E**quilibrium **E**quations. Napisan je v jeziku Fortran, deluje pa le v DOS in UNIX okolju. Natančneje je uporaba programa opisana v originalnih navodilih (Parkhurst et al., 1980) ter v zadnjem poglavju učbenika o izotopih in geokemijskih procesih (Pezdič, 1999). Program so večinoma nadomestile spodaj opisane različice.

Program **PHREEQC** je novejša verzija programa PHREEQE in je v celoti napisan v programskem jeziku C. Tudi ta je primeren za okolje DOS in UNIX. Pomembno je vedeti, da zapis programa PHREEQE ni združljiv z nobenim drugim zapisom (npr. PHREEQC ali AquaChem)! Iz programa PHREEQC sta se razvila dva grafična programa, namenjena delu v okolju Windows.

Programa **PHREEQC-I** (PHREEQC Interactive, verzija 2.8) in **PHREEQC for Windows** sta tako kot prejšnja dva brezplačna. Podobno kot AquaChem omogočata delo v okolju Windows, le da je AquaChem v primerjavi s PHREEQC-I verjetno bolj pregleden, velja pa opozoriti, da podpira PHREEQC-I več možnosti modeliranja.

PHREEQC for Windows je najbolj razvita verzija PHREEQCja in omogoča tudi izdelavo tabel ter grafov, v zadnjem času pa je bilo za to verzijo razvito tudi veliko podpore in primerov (Appelo & Postma, 2005; Merkel et al., 2005)

Druga nadgradnja programa PHREEQC je program **AquaChem**. Tako kot PHREEQC-I je namenjen delu v Windows okolju in je od vseh programov uporabniku najbolj »prijazen«. Le v AquaChemu je rezultate mogoče predstaviti analitično in grafično v obliki tabel in številnih diagramov, vanj pa je vgrajen tudi interni program PHREEQC, s pomočjo katerega modeliramo geokemične reakcije. V nekaterih primerih je analize bolje opraviti direktno v programu PHREEQC ali PHREEQC for Windows, če dovolj dobro poznamo način vnosa podatkov. PHREEQC je torej računsko jedro, AquaChem pa nam služi za predstavitev rezultatov analiz in izračunanih podatkov (ter seveda še veliko več). V nadaljevanju je opisano delo z zadnjo verzijo 2011.

2. Opis programa AquaChem

2.1 Grafično okolje

Podatki se v AquaChemu najahajo v bazi (database), ki je zapisana v datotekah s končnico *.aqc*. V bazi (gre za MS Accessovo relacijsko podatkovno bazo) so shranjeni vsi vzorci, ki smo jih vnesli ali modelirali s programom PHREEQC. Za vaje v programu AquaChem je pripravljena baza *vaje.aqc*.

Ko odpremo bazo, lahko prikazujemo podatke v več oknih (sl.1). Večinoma je prisotno **okno z zapisi oz. okno vzorcev** (*Sample List*), kjer so prikazani vsi zapisi, ki smo jih vnesli v bazo. Gledamo lahko tudi **lokacije** (*Stations*), na katerih smo odvzemali te vzorce (*Station List*). Podatke lahko prikazujemo v številnih grafičnih (*Plot*) ter v tekstovnih oknih, vnašamo pa jih v vnosna okna.

id	Station	Date	Code	WATERTYPE	GEOLOGY	SYMBOL	REP
79	307		307	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
80	308		308	C, P		1	<input type="checkbox"/>
81	310		310	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
82	311		311	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
83	313		313	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
84	314		314	1 T3 1 ms		1	<input type="checkbox"/>
85	315		315	T1		98	<input type="checkbox"/>
86	318		318	J3 1,2 ms		1	<input type="checkbox"/>
87	319		319	1 T3 1		97	<input type="checkbox"/>
88	320		320	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
89	321		321	T2 1		95	<input type="checkbox"/>
90	337		337	J1, T3 2+3 ?		1	<input type="checkbox"/>
91	338		338	1 T3 1		97	<input type="checkbox"/>
92	340		340	J3 1,2 ms		1	<input type="checkbox"/>
93	342		342	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
94	346		346	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
95	347		347	T2 2 ms		1	<input type="checkbox"/>
96	351		351a	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
97	351		351b	T3 2+3 M		94	<input checked="" type="checkbox"/>
98	351		351c	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
99	352		352a	1 T3 1		97	<input type="checkbox"/>
100	352		352b	1 T3 1		97	<input type="checkbox"/>
101	353		353	K1,2 ms		1	<input type="checkbox"/>
102	356		356	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
103	358		358	1 T3 1		97	<input type="checkbox"/>
104	359		359	1 T3 1		97	<input type="checkbox"/>
105	360		360	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
106	364		364	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
107	365		365	T2 1		95	<input type="checkbox"/>
108	366		366a	1 T3 1		97	<input type="checkbox"/>
109	366		366b	1 T3 1		97	<input type="checkbox"/>
110	367		367	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
111	387		387	T1		98	<input type="checkbox"/>
112	388		388	T1		98	<input type="checkbox"/>
113	390		390	T1		98	<input type="checkbox"/>
114	392		392	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
115	396		396	K1 4+5 ms		100	<input type="checkbox"/>
13	51		51	T2 1		95	<input type="checkbox"/>
14	54		54	1 T3 1		97	<input type="checkbox"/>
15	59		59	1 T3 1		97	<input type="checkbox"/>
16	63		63	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
17	69		69	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
18	70		070a	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
19	70		070b	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
20	73		73	1 T3 1		97	<input type="checkbox"/>
21	82		82	1 T3 1		97	<input type="checkbox"/>
22	89		89	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>
4	9		9	T3 2+3 M		94	<input type="checkbox"/>

Sl. 1. Delovno okolje programa AquaChem. Levo: baza podatkov (okno z zapisi), desno: grafični prikaz rezultatov (primer Durov-ega diagrama).

Zapise v oknu vzorcev lahko prikažemo tudi v obliki tabele (kot v Excel-u), tako da v meniju *View* izberemo možnost *Table View* in nato *Default*.

2.2 Vnos in popravljanje podatkov

Vsi zapisi se nahajajo v določeni bazi (datoteki). Ker je izdelava baze za vaje preobsežen postopek, se z njo ne bomo ukvarjali, temveč bomo uporabili obstoječo bazo *vaje.aqc*. Postopek izdelave je seveda opisan v priloženem priložniku.

Seznam obstoječih vzorcev (zapisov) lahko vidimo v oknu zapisov. Spreminjamo jih lahko, če na njih dvakrat kliknemo, ali pa v meniju *Samples* izberemo možnost *Edit*.

Nov vzorec dodamo tako, da v meniju *Stations* izberemo prvo možnost – *New*. Ob tem se odpre vnosno okno. Vnesemo ime lokacije, njene koordinate, kratek geološki opis in druge parametre. Šele nato lahko vnesemo geokemične analize, tako da preklopimo iz *Stations* na *Samples* in v meniju *Samples* izberemo možnost *New*. Po želji nato vnašamo pH, temperaturo, koncentracije kationov, anionov ipd. Paziti moramo na enote, ki jih spremenimo v meniju *Unit*. Ko končamo vnos, shranimo podatke z gumbom *Save* (levo spodaj) in nato pritismo gumb *Close*.

Analize vnašamo v zavihku *Measured*. Če želimo pogledati avtomatsko izračunane parametre (kvaliteta analize oz. napaka elektronegativnosti, vsota kationov in anionov, trdota vode ipd), to pogledamo v zavihku *Calculated*. Tretji zavihku (*Modeled*) shranjuje vrednosti, ki jih izračunamo z zagonom internega programa PHREEQC.

2.3 Prikaz podatkov

Sestavo izbranih raztopin najlažje pogledamo v vnosnem oknu, lahko pa jo prikažemo tudi v tekstovni obliki, tako da v meniju *Reports* izberemo možnost *Sample Summary*.

Grafično prikažemo sestavo naših raztopin tako, da si izberemo željen diagram. To naredimo v glavnem oknu v meniju *Plots*, kjer izberemo ukaz *New*. Odpre se meni z izbiro možnosti prikaza podatkov na geokemičnih diagramih. V večini primerov nastavimo glavne ione, ki jih želimo prikazati in ne vseh, saj so diagrami namenjeni prikazu glavnih parametrov.

Če želimo prikazovati podatke v skupinah, moramo vsaki skupini prirediti svoj grafični simbol, da jo lahko razlikujemo od ostalih. To naredimo tako, da v meniju *Samples* izberemo možnost *Assign Symbol* in določimo tip, velikosti in barvi simbola. Po enakem načinu lahko prikažemo s simboli združene skupine posameznih lokacij (*Stations*).

2.4 Dodatne možnosti

Vse dodatne možnosti lahko izberemo, če v glavnem oknu programa izberemo menija *Tools* ali *Reports*. V njem nato poiščemo zeleno možnost (naštete so le izbrane možnosti):

- **sestavo izbrane raztopine** lahko pogledamo in natisnemo, če v meniju *Reports* izberemo *Sample Summary*,
- **periodni sistem** - v programu si je možno pogledati tudi enostaven periodni sistem, (*Tools* --> *Lookup Tables* --> *Periodic table*),
- **statistika** – enostavne statistične izračune lahko zelo hitro pridobimo, če izberemo *Reports* --> *Statistics*,

V programu se nahajajo številni **geokemični kalkulatorji**, ki omogočajo preračune molskih mas spojin (npr. če je vrednost fosfatnega iona podana kot PO_4 v mg/l, mi pa jo moramo vnesti kot P v mg/l). Te kalkulatorje najdemo v meniju *Tools* in nato *Calculators*.

Poleg glavnih omenjenih možnosti ponuja program še veliko več (možnost mešanja vod brez programa PHREEQC, izračun temperature z geotermometri, delo z izotopi, korelacijske matrike, itd).

Iz geokemične sestave vode lahko tudi ocenimo njen izvor oz. procese, ki so vplivali na to, da je voda dobila svojo končno sestavo. To lahko storimo z ukazom *Rock Source Deduction* v meniju *Reports* (teoretične osnove s vzete iz literature Hounslow, 1995). Opozoriti pa je treba, da je tovrstna ocena le informativna, saj je bolj pravilno modeliranje možno izvesti z inverznim modeliranjem direktno v programu PHREEQC, ki pa zahteva več podatkov in predvsem znanja za interpretacijo vplivov.

3. Modeliranje s programom PHREEQC

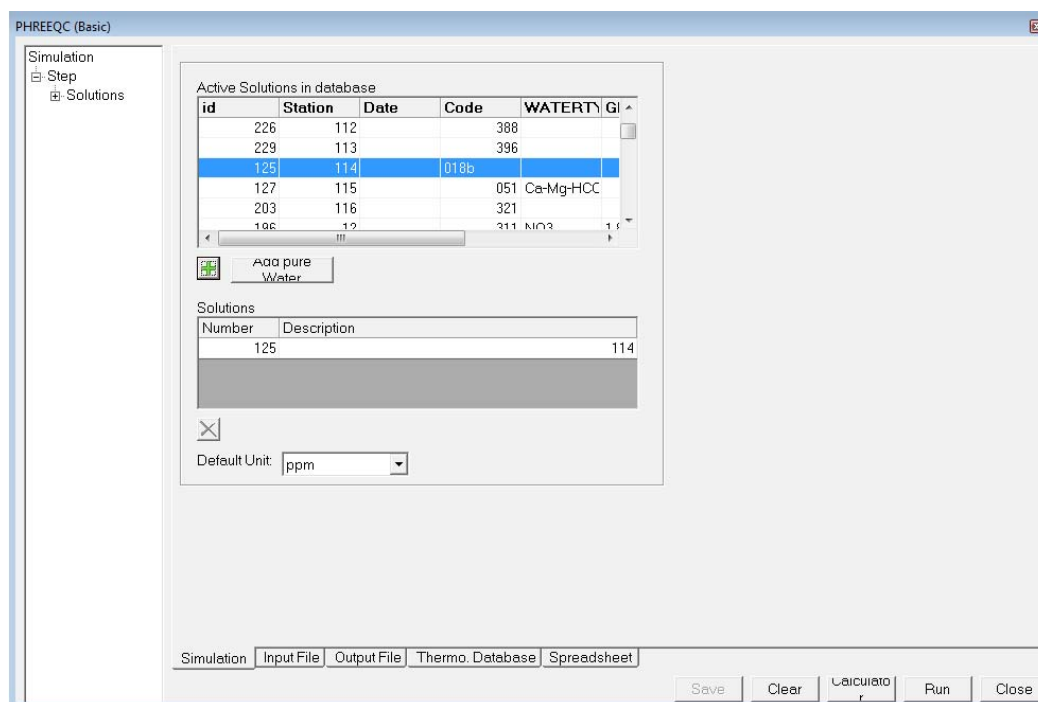
Simuliramo lahko mnogo reakcij, ki potekajo v naravi ali pa umetno. Tako lahko npr. izračunamo, ali se bodo določeni minerali izločali oz. raztapljali, če spremenimo fizikalne pogoje (temperaturo ali pH), ali bodo določene reakcije potekle ali ne, kakšna bo sestava mešanice, če zmešamo dve različni vodi, računamo lahko količino tudi adsorpcije na površino mineralov, kakšni so bili faktorji, ki so vplivali na končno sestavo vode in še mnogo več. Možnosti modeliranja je zelo veliko, vendar moramo dobro vedeti, kaj počnemo. Geokemično modeliranje vsekakor ni enostavno, kljub temu pa ustrezni programi in pripadajoča navodila precej olajšajo delo.

3.1 Delo s programom PHREEQC znotraj AquaChem-a

Do neke mere lahko uporabimo enostavno geokemično modeliranje tudi v samem programu AquaChem (npr. izračune indeksov nasičenja). Vse možnosti so dostopne v meniju *Tools* in nato *Modeling*. Poleg indeksov nasičenja lahko določimo tudi pH, Eh, iz alkalnosti preračunamo manjkajoče vrednosti HCO₃ ali uporabimo modeliranje. Obstajata dve možnosti - enostavni izračuni z osnovno verzijo *PHREEQC (Basic)* ali bolj napredno (*PHREEQC Advanced*). Prva možnost je program PHREEQC, ki deluje znotraj AquaChem-a, druga opcija pa požene samostojni zunanji program.

3.2 Vnosno okno PHREEQC (Basic)

Ko izberemo zgoraj omenjeno možnost osnovne verzije *PHREEQC (Basic)*, se odpre vnosno okno (sl. 2). Modeliranje izvedemo tako, da najprej določimo raztopine (*Solutions*), ki bodo "udeležene" v reakcijah, nato pa se glede na želene rezultate odločimo, kakšno modeliranje bomo izbrali. Na koncu poženemo program z gumbom *Run*.



Sl. 2. Vnosno okno internega programa PHREEQC v AquaChem-u.

Vnosno okno je sestavljeno iz številnih manjših oken, ki jih izbiramo v meniju levo in z desnim klikom miške na posamezno ključno besedo. V oknih lahko spreminjamo marsikaj (opisano spodaj). Najprej nastavimo osnovne lastnosti raztopine (desni klik na *Step* in nato *Add Initial Conditions*):

- **Add Equilibrium Phase:** dodajamo minerale ali pline oz. z njimi uravnatežimo raztopine. Količino mineralov vnašamo v enotah SI (saturation index, opisan spodaj) in v molih.
- **Add Exchange Assemblage:** modeliramo ionsko izmenjavo med minerali.
- **Add Gas Phase Assemblage:** vnašamo točno določene količine plinov.
- **Add Solution:** tu vnašamo sestavo raztopin. Lahko se odločimo za čisto vodo (*Pure water*) ali pa izberemo že vnešeno raztopino iz AquaChema.
- **Add Surface:** za razliko od prejšnje možnosti modeliramo v tem oknu adsorbcijo na površino mineralov.

Nato lahko modeliranje zaženemo na dva načina (desni klik na *Step* in nato *Add Forward Model*):

- **Add Mix:** določamo razmerje mešanic, če želimo zmešati dve ali več raztopin.
- **Add Reaction:** dodajamo kemične reakcije, s katerimi lahko tudi natančno nadzorujemo raztapljanje ali izločanje mineralov.

Ostalih možnosti (transportno in inverzno modeliranje) osnovna verzija PHREEQC ne podpira in je potrebno tovrstno modeliranje opraviti v napredni verziji (Advanced).

3.3 Rezultati

Ko program poženemo, dobimo izpis v tekstovni obliki. V izpisu je precej podatkov, izmed katerih za nas vsi niso zanimivi, zato si izberemo le določene. Zapis je sicer dokaj urejen, vendar pa moramo vseeno vedeti, kaj pomenijo določene oznake, saj se lahko v tabelah hitro izgubimo. Natančna razlaga vseh simbolov in vrednosti je podana v priložnih programov, tu pa so podani bistveni zapisi – najprej glava izpisa, pod njo pa razlaga posameznih polj.

-----Phase assemblage-----

Tu najdemo podatke o fazah (plinih in mineralih), zraven njih pa so podane naslednje vrednosti:

- *SI* (*saturation index* oz. indeks nasičenja, ki predstavlja razliko vrednosti $\log IAP$ in $\log KT$)

$$SI = \log IAP - \log KT = \log \left(\frac{IAP}{KT} \right)$$

Iz vrednosti *SI* lahko ocenimo, ali se minerali ali plini raztapljajo ali ne:

Če je $SI > 0$, je raztopina prenasočena z določenim mineralom in ta naj bi se iz nje izločal

Če je $SI = 0$, je raztopina v ravnotežju z določenim mineralom, ta naj se ne bi ne izločal ne raztapljal

Če je $SI < 0$, je raztopina nenasičena z določenim mineralom in ta naj bi se raztapljal

Opomba: *SI* plinov predstavlja logaritem parcialnega tlaka plina ($SI = \log P_i$)

- $\log IAP$ (logaritem produkta ionskih aktivnosti oz. angleško *ion activity product*, IAP)
- $\log KT$ (logaritem ravnotežne konstante *K* pri določeni temperaturi *T*)
- *Initial moles* (začetna koncentracija v molih)
- *Final moles* (končna koncentracija v molih)
- *Delta moles* (razlika med končno in začetno koncentracijo v molih)

Če je vrednost *Delta moles* pozitivna, se je mineral izločil, saj je končna koncentracija večja od začetne.

Če pa je ta vrednost negativna, lahko sklepamo, da se je mineral raztopil.

-----Solution composition-----

Tu je podana sestava vode, oz. koncentracije elementov. Ločiti je treba polji `Molality` in `Moles`, saj predstavlja prvi podatek koncentracijo (molalnost), drugi pa dejansko število molov v raztopini. Večinoma sta podatka enaka, saj uporabljamo 1 kg vode. Če pa je količina vode drugačna, se koncentracija in št. molov seveda razlikujeta.

-----Description of solution-----

V tem polju so zapisane glavne značilnosti raztopine (pH, aktivnost in masa vode, njena temperatura itd.). Predvsem sta pomembna podatka iz tega polja pH in temperatura.

-----Distribution of species-----

Tu najdemo podatke o koncentracijah (molalnostih) in aktivnostih določenih ionov in spojin:

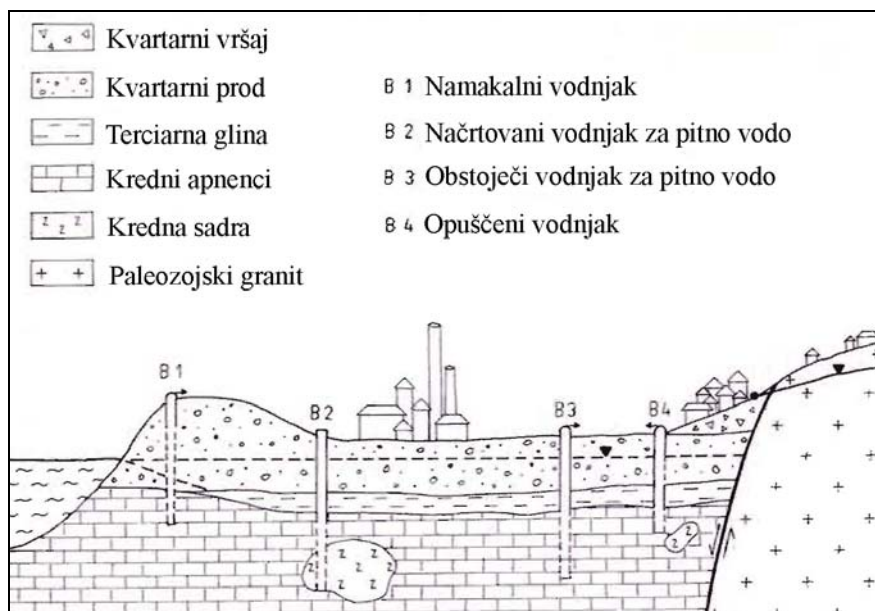
- `Molality` (kot prej, koncentracija v molih)
- `Activity` (aktivnost, ki je s koncentracijo povezana po enačbi $a_i = \gamma_i \cdot m_i$)
(a_i = aktivnost, γ_i = koeficient aktivnosti (gamma), m_i = molalnost)
- `log Molality` (logaritem molalnosti m_i)
- `log Activity` (logaritem aktivnosti a_i)
- `log Gamma` (logaritem aktivnostnega koeficienta γ)

-----Saturation indices-----

Oznake so v tem polju enake kot že opisane v polju `Phase Assemblage`.

4.1 VAJA št. 1 – Načrtovanje lokacije vodnjaka z ustrezno kvaliteto pitne vode

Na sliki 3 je prikazano območje, kjer nameravamo v bližini mesta proti zahodu izvrtati vodnjak B2 za pitno vodo. Podzemna voda teče proti morju, torej od vzhoda proti zahodu.



Sl. 3. Obravnavano področje z obstoječim vodnjakom B2 in načrtovanim vodnjakom B3.

V vodnjaku B3, vzhodno od mesta, smo odvzeli analizo in določili naslednjo sestavo vode:

Parameter	Vrednost	Enota
temperatura	21.1	°C
pH	6.7	-
pE	6.9	-
Ca	77	mg/l
Mg	40	mg/l
K	3	mg/l
Na	19	mg/l
HCO ₃	240	mg/l
SO ₄	200	mg/l
Cl	6	mg/l
NO ₃	1.5	mg/l
NO ₂	0.05	mg/l
PO ₄	0.6	mg/l
SiO ₂	21.59	mg/l
F	1.3	mg/l

Parameter	Vrednost	Enota
Li	0.03	mg/l
B	0.03	mg/l
Al	0.056	mg/l
Mn	0.014	mg/l
Fe	0.067	mg/l
Ni	0.026	mg/l
Cu	0.078	mg/l
Zn	0.168	mg/l
Cd	0.0004	mg/l
As	0.005	mg/l
Se	0.006	mg/l
Sr	2.979	mg/l
Ba	0.065	mg/l
Pb	0.009	mg/l
U	0.003	mg/l

* To vajo je zaradi vnosa lažje izvesti direktno v programu PHREEQC for Windows in ne preko AquaChema. Za vnos te analize potrebujemo bazo WATEQ4F.DAT, ne privzete PHREEQC.DAT. To v programu PHREEQC for Windows nastavimo v meniju Calculations / Files / Database file.

Najprej poimenujemo vajo, definiramo sestavo raztopine s ključno besedo SOLUTION 1, definiramo enote v mg/l in nato vnesemo koncentracije. Uravnoteženje z minerali dosežemo z uporabo ključne besede EQUILIBRIUM_PHASES. Začetek vnosa je tako npr:

```
TITLE Naslov vaje
SOLUTION 1
  units  mg/l
  temp   21.1
  pH     6.7
  pe     6.9
  Ca     75.0
  Mg     40.0
```

Nekatere ione moramo vnesti kot elemente v valenčni obliki, npr. ion SO_4^{2-} kot S(6). Karbonatni ion HCO_3^- dodamo v raztopino kot alkalnost (Alkalinity). Nekaj primerov je nakazano spodaj:

```
Alkalinity  240.0      as HCO3
S(6)        200.0      as SO4
N(5)        1.5        as NO3
N(+3)       0.05       as NO2
P           0.60       as PO4
Si          21.59      as SiO2
```

VPRAŠANJA:

1. Ali bi glede na hidrogeokemično stanje vode, določene z modeliranjem, svetovali, da se vodnjak locira na predvideno mesto ali ne? Zakaj?

Po Pravilniku o pitni vodi (Uradni list RS 19/2004) so mejne vrednosti parametrov za pitno vodo določene kot:

Kemični parameter		Mejna vrednost	Enota
Arzen	As	10	µg/l
Baker	Cu	2,0	µg/l
Bor	B	1,0	mg/l
Fluorid	F	1,5	mg/l
Kadmij	Cd	5,0	µg/l
Nikelj	Ni	20	µg/l
Nitrat	NO ₃	50	mg/l
Nitrit	NO ₂	0,50	mg/l
Selen	Se	10	µg/l
Svinec	Pb	10	µg/l

Indikatorski parameter		Mejna vrednost	Enota
pH		≥ 6,5 in ≤ 9,5	
Aluminij	Al	200	µg/l
Amonij	NH ₄	0,50	mg/l
Klorid	Cl	250	mg/l
Mangan	Mn	50	µg/l
Natrij	Na	200	mg/l
Sulfat	SO ₄	250	mg/l
Železo	Fe	200	µg/l

2. Ali lahko pričakujemo, da se bo kateri izmed naslednjih mineralov – kalcit, dolomit, sadra, kremen, hematit – izločil?

4.2 VAJA št. 2 – Delo in grafični prikaz v programu AquaChem

Za vajo 2 uporabimo podatke iz datoteke *vaje.aqc*, kjer so vnesene nekatere analize podzemnih vod iz dolomitnih vodonosnikov v Sloveniji. Na terenu smo na lokaciji št. 230 odvzeli novo analizo vod z naslednjimi podatki, ki jo vnesemo v našo bazo analiz:

Parameter	Vrednost	Enota
temperatura	11,4	°C
pH	7,35	-
Ca	93	mg/l
Mg	40	mg/l
K	0,5	mg/l
Na	5,1	mg/l
HCO ₃	325	mg/l
SO ₄	120	mg/l
Cl	7	mg/l
NO ₃	0,6	mg/l
SiO ₂	6,6	mg/l
F	0,1	mg/l
Al	0.02	µg/l
Mn	0	mg/l
Fe	0	mg/l
Cu	0.02	µg/l
Zn	0.168	µg/l

Zanima nas naslednje:

1. Kakšna je natančnost analize (podana kot napaka v odstotkih) za vse vnesene vzorce (stare analize in nova)?
2. Kolikšna je skupna količina raztopljenih snovi (*Total Dissolved Solids - TDS*) v vodi nove analize?
3. Ali bi iz razmerja HCO₃/SiO₂ sklepali, da je prišlo do vode s tako sestavo z raztapljanjem oz. preperevanjem (*Weathering*) karbonatov ali silikatov? (Odgovor na je mogoče najti tudi v meniju *Rock Source Deduction*).
4. Prikažite grafično sestavo vode z naslednjimi diagrami: Piper, Durov, Schoeller in radialni.
5. Ali glede na grafični prikaz sklepate, da pripada voda isti skupini (faciesu) vod kot ostale analize?

5. Literatura

1. **Appelo, C.A.J. & Postma, D.**, 2005: Groundwater, Geochemistry and Pollution. *Taylor & Francis*, 649 str.
2. **Calmbach, L.**, 1998-1999: AquaChem, User's Manual, Aqueous Geochemical Analysis, Plotting and Modelling.- *Waterloo Hydrogeologic, Inc.*
3. **Hounslow, A.W.** 1995: Water Quality Data - Analysis and Interpretation. *CRC Press LLC.*
4. **Merkel, B.J., Planer-Friedrich, B., Nordstrom, D.K.**, 2005: Groundwater geochemistry: A practical guide to modeling of natural and contaminated aquatic systems. *Springer Verlag*, 200 str.
5. **Parkhurst, D. L.**, 1995: User's Guide to PHREEQC – A Computer Program for Speciation, Reaction-path, Advective-transport, and Inverse Geochemical Calculations.- *Water-Resources Investigations Report 95-4227, U. S. Geological Survey*
6. **Parkhurst, D. L., Thorstenson, D. C., Plummer, L. N.**, 1980: PHREEQE – A Computer Program for Geochemical Calculations.- *Water-Resources Investigations 80-96, U. S. Geological Survey*
7. **Pezdich, J.**, 1999: Izotopi in geokemijski procesi.- *Univerzitetni učbenik, Naravoslovnotehniška fakulteta, Oddelek za geologijo, Ljubljana*

6. Naslovi programov na internetu

1. **PHREEQC in PHREEQC-I**
http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/index.html
2. **PHREEQC for Windows**
<http://pfw.antipodes.nl/>
3. **AquaChem**
<http://www.swstechnology.com/groundwater-software/groundwater-data-management/aquachem>