

STUDIE VAN DE INVLOEDEN VAN
EEN GIPSLOZING OP HET
SCHELDE-ESTUARISYSTEEM



1000 - BRUSSEL, 1 december 1978

Rijksadministratief Centrum
Vesaliusgebouw 2/3, lok. 32

247033

Waterbouwkundig Laboratorium
Borgerhout

BIBLIOTHEEK

STUDIE VAN DE INVLOEDEN VAN EEN GIPSLOZING

OP HET SCHELDE-ESTUARIUMSYSTEEM.

Jan de Schutter

1. Inleiding

De algemene invloed die een gipslozing op de normale funktionering van een ecosysteem uitoefent, is voornamelijk het gevolg van twee fenomenen die in het milieu plaatsgrijpen : enerzijds bestaat het risico van precipitatie en sedimentatie zowel van gips, gezien de relatief kleine oplosbaarheid ervan, als van andere, weinig oplosbare verbindingen gevormd door de ionen aanwezig in gips, met de overige konstituenten van het milieu, en anderzijds perturbeert de lozing van fosfaten, één der voornaamste fytoplanktonnutriënten, het bestaande evenwicht tussen de opeenvolgende trofische schakels.

In het bijzonder bevat de BASF-lozing een belangrijke hoeveelheid aan fluoriden.

Omdat het Schelde-estuarium een sterk gëeutrofieerd en gepollueerd milieu is en elke lozing van nutriënten (fosfaat) of pollutanten (fluoriden) deze aberante toestand nog amplifieert, werd in deze studie vooral de nadruk gelegd op mogelijke sedimentatieverschijnselen te wijten aan het geloosde gips.

De lozing van BASF heeft plaats op 55 km van de monding en het lozingswater bezit de volgende karakteristieken : lozingsdebiet = $1000 \text{ m}^3/\text{h}$, massadebiet der voornaamste konstituenten : $\text{Ca}^{2+} = 9.68 \text{ ton/h}$, $\text{SO}_4^{2-} = 23.3 \text{ ton/h}$, $\text{PO}_4^{3-} = 0.31 \text{ ton/h}$, $\text{F}^- = 0.5 \text{ ton/h}$.

2. Simulaties van de lozing

Met behulp van een eenvoudig, één dimensionaal stationnair dispersie-model, wordt de toename van de konstituentconcentratie door de lozing, in functie van het bovendebiet, op de volgende manier gesimuleerd :

Voor een punt op een afstand x van de monding gelegen, kan de volgende bilan geschreven worden (Wollast, 1973) :

$$VS - AK \frac{dS}{dx} = R \quad (1)$$

met : V = netto debiet
 S = konstituentconcentratie in het punt $\bar{x}$
 A = dwarse doorsnede
 K = turbulente diffusiecoëfficiënt ($150 \text{ m}^2/\text{s}$)
 R = het resulterend konstituenttransport

De verandering van de dwarse doorsnede in funktie van de afstand, is gegeven door de volgende empirische relatie :

$$\log A(x) = 5.2 - 2.1 \cdot 10^{-5} x \quad (x \text{ in m, } A \text{ in m}^2) \quad (2)$$

en deze van het debiet door :

$$V = V_0(1 - 5.28 \cdot 10^{-6} x) \quad (x \text{ in m, } V \text{ in m}^3/\text{s}) \quad (3)$$

met V_0 = bovendebiet (dit kan variëren tussen 0 en $\sim 300 \text{ m}^3/\text{s}$)

Het resulterend konstituenttransport is gelijk aan :

$$R = VS_{\infty} \quad (4)$$

stroomopwaarts van het lozingspunt, met S_{∞} het Konstituentgehalte van het zoetwater en

$$R = VS_{\infty} - q \quad (5)$$

stroomafwaarts van het lozingspunt, met q het massadebiet van de geloosde konstituent

De randvoorwaarden waaraan (1) voldoet zijn :

plaats	Ca^{2+} (mg/l)	SO_4^{2-} (g/l)	PO_4^{3-} (mg/l)	F^- (mg/l)
zee (S_0)	400	2.5	0.55	1
landinwaarts (S_{∞})	125	0.25	4.5	2.25

Het massadebiet q , in vergelijking (5), bedraagt :

massadebiet	Ca^{2+}	SO_4^{2-}	PO_4^{3-}	F^-
$q(\text{ton/h})$	9.68	23.3	0.31	0.5

3. Resultaten

De resultaten van de simulaties werden grafisch voorgesteld. De figuren 1 tot 8 tonen de normale en geperturbeerde concentratieprofielen voor achtereenvolgens, Ca^{2+} , SO_4^{2-} , PO_4^{3-} en F^- voor bovendebieten variërend respectievelijk tussen 20 en 80 m^3/s en tussen 80 en 140 m^3/s . De ordinaat stelt de concentratie van de konstituent voor, uitgedrukt in mg/l en de abscis de afstand tot de zee in km (Vlissingen = 0 km , lozingspunt = 55 km en Rupelmonde = 92 km).

De maximale toename van de concentraties situeert zich steeds ter hoogte van het lozingspunt. De normale en geperturbeerde konstituentconcentraties op dat punt, zijn voor verschillende bovendebieten in de respectievelijke tabellen I (Ca^{2+}), II (SO_4^{2-}), III (PO_4^{3-}) en IV (F^-) weergegeven.

Anderzijds omdat ter hoogte van $\text{km } 70$, de lozingsplaats van de kollektor werd gepland, en calcium en sulfaten in de lozing voorkomen (massadebiet q van $\text{Ca}^{2+} = 19 \text{ ton/h}$, van $\text{SO}_4^{2-} = 0.63 \text{ ton/h}$), schijnt het ons nuttig - ten titel van informatie - het gezamenlijk effect van de BASF-lozing, onderwerp van deze studie, en de kollektor, voor de konstituenten Ca^{2+} en SO_4^{2-} te simuleren.

De figuren 9 tot 12 tonen de normale en geperturbeerde concentratieprofielen, achtereenvolgens voor Ca^{2+} en SO_4^{2-} voor bovendebieten variërend respectievelijk tussen 20 en 80 m^3/s en tussen 80 en 140 m^3/s , tengevolge van de gezamenlijke BASF en kollektor lozing.

De geperturbeerde concentraties op het BASF-lozingspunt, zijn voor verschillende bovendebieten, in de hogergenoemde tabellen I (Ca^{2+}) en II (SO_4^{2-}) eveneens weergegeven.

Tabel I : Calciumconcentraties aan km 55

bovendebiet (m^3/s)	[Ca^{2+}] : zonder lozing		[Ca^{2+}] : BASF lozing		[Ca^{2+}] : BASF + kollektor	
	(mg/l)	(mol/l)	(mg/l)	(mol/l)	(mg/l)	(mol/l)
20	390	$9.74 \cdot 10^{-3}$	433	$10.83 \cdot 10^{-3}$	525	$13.13 \cdot 10^{-3}$
40	333	$8.34 \cdot 10^{-3}$	370	$9.25 \cdot 10^{-3}$	451	$11.28 \cdot 10^{-3}$
60	292	$7.29 \cdot 10^{-3}$	325	$8.13 \cdot 10^{-3}$	389	$9.73 \cdot 10^{-3}$
80	253	$6.33 \cdot 10^{-3}$	283	$7.08 \cdot 10^{-3}$	344	$8.60 \cdot 10^{-3}$

Tabel II : Sulfaatconcentraties aan km 55

bovendebiet (m^3/s)	[SO_4^{2-}] : zonder lozing		[SO_4^{2-}] : BASF lozing		[SO_4^{2-}] : BASF + kollektor	
	(mg/l)	(mol/l)	(mg/l)	(mol/l)	(mg/l)	(mol/l)
20	2470	$25.7 \cdot 10^{-3}$	2570	$26.8 \cdot 10^{-3}$	2570	$26.8 \cdot 10^{-3}$
40	1980	$20.6 \cdot 10^{-3}$	2080	$21.7 \cdot 10^{-3}$	2080	$21.7 \cdot 10^{-3}$
60	1600	$16.7 \cdot 10^{-3}$	1680	$17.5 \cdot 10^{-3}$	1680	$17.5 \cdot 10^{-3}$
80	1300	$13.5 \cdot 10^{-3}$	1370	$14.3 \cdot 10^{-3}$	1370	$14.3 \cdot 10^{-3}$

Tabel III : Fosfaatkonzentraties aan km. 55.

bovendebiet (m ³ /s)	[PO ₄ ³⁻] : zonder lozing		[PO ₄ ³⁻] : BASF lozing	
	(mg/l)	(mol/l)	(mg/l)	(mol/l)
20	0.6	0.610 ⁻⁵	2.0	2.110 ⁻⁵
40	1.4	1.510 ⁻⁵	2.68	2.810 ⁻⁵
60	2.12	2.210 ⁻⁵	3.24	3.410 ⁻⁵
80	2.64	2.810 ⁻⁵	3.64	3.810 ⁻⁵

Tabel IV : Fluoridekonzentraties aan km 55.

bovendebiet (m ³ /s)	[F ⁻] : zonder lozing		[F ⁻] : BASF lozing	
	(mg/l)	(mol/l)	(mg/l)	(mol/l)
20	1.02	510 ⁻⁵	3.24	1710 ⁻⁵
40	1.27	710 ⁻⁵	3.24	1710 ⁻⁵
60	1.49	810 ⁻⁵	3.24	1710 ⁻⁵
80	1.64	910 ⁻⁵	3.24	1710 ⁻⁵

Alhoewel de keuze van een stationnair model impliceert dat de simulaties slechts een gemiddelde toestand voorstellen, zodat gedurende bepaalde perioden van het getij grotere perturbaties voor de hand liggen, tonen de bekomen resultaten dat voor bovendebietsen van 20 tot 80 m³/s, de relatieve toename van de fosfaatkonzentraties ter hoogte van het lozingspunt, 230 tot 38 % bedraagt en voor de fluoridekonzentraties 220 tot 100 %.

Voor calcium en sulfaat zijn de relatieve concentratietoename minder uitgesproken, maar belangrijk in het licht van precipitatie- en sedimentatieverschijnselen.

4. Precipitatiefenomenen

De precipitatie ter hoogte van het lozingspunt werd bestudeerd voor twee representatieve verbindingen namelijk calciumsulfaat en calciumcarbonaat. Vergelijkingen tussen de normale en de geperturbeerde concentraties en de theoretische oplosbaarheid van de gekozen verbindingen werden uitgevoerd. Als werkhypothese wordt aanvaard dat de componenten in oplossing geen nevenreacties ondergaan en dat er geen competitie bestaat voor precipitatie, tussen de gekozen vaste verbindingen of tussen deze en eventuele andere die hier niet zijn beschouwd geworden.

Vermits de oplosbaarheidskoncentratie van vaste stoffen afhankelijk is van de ionische sterkte van het milieu, werd als referentiewaarde de saliniteit ter hoogte van het lozingspunt gebruikt. Met het model beschreven in paragraaf 2, werden de longitudinale chloriniteitsprofielen, in functie van het bovendebiet (variërend tussen 1 en 80 m³/s) gesimuleerd. De resultaten van deze simulatie zijn weergegeven door figuur 13. De ordinaat stelt de chloriniteit voor (g Cl⁻/l) en de abscisde afstand, in km, tot de zee.

De ionische sterkte wordt als volgt berekend :

$$I = 1/2 \sum_i C_i Z_i^2 \quad (6)$$

.C_i : concentratie van het ion i.

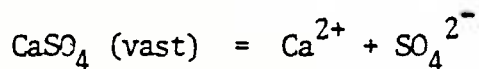
.Z_i : lading van het ion i.

De resultaten bekomen in functie van het bovendebiet zijn voorgesteld in tabel V.

Tabel V : Ionische sterkte aan km 55.

bovendebiet (m ³ /s)	[Cl ⁻] (g/l)	[NaCl] (mol/l)	Ionische sterkte I
20	17.2	0.5	0.5
40	13.5	0.4	0.4
60	10.5	0.3	0.3
80	8.5	0.2	0.2

4.1. Calciumsulfaat



$$K_s = 10^{-4.6} = [\text{Ca}^{2+}][\text{SO}_4^{2-}] f_{\text{Ca}^{2+}} \cdot f_{\text{SO}_4^{2-}} \quad (7)$$

. K_s : activiteitsoplosbaarheidsprodukt

. f_i : aktiviteitscoëfficiënt van het ion i.

. [X_i] : analytische evenwichtsconcentratie van het ion i (mol/l)

Vergelijking (7) kan met de verbeterde Davies vergelijking, als volgt herschreven worden :

$$- \log ([\text{Ca}^{2+}] [\text{SO}_4^{2-}]) = pK_s - (Z_{\text{Ca}^{2+}}^2 + Z_{\text{SO}_4^{2-}}^2) \left(\frac{0.5\sqrt{I}}{1 + \sqrt{I}} - 0.3 I \right) \quad (8)$$

Met deze vergelijking werden, voor verschillende bovendebieten de evenwichtskoncentratieprodukten, $[\text{Ca}^{2+}] [\text{SO}_4^{2-}]$, berekend. Deze waarden worden in tabel VI vergeleken met de gevonden concentratieprodukten aan km 55, met en zonder lozingen.

Tabel VI : $[Ca^{2+}] [SO_4^{2-}]$

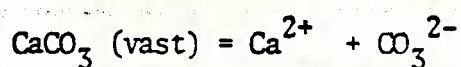
Produkt der concentraties aan Ca^{2+} en SO_4^{2-} in oplossing (km = 55)

bovendebiet (m ³ /s)	evenwichts- produkt	produkt zonder lozing	produkt met BASF lozing	produkt met BASF en kollektor lozingen
20	10 ^{-4.15}	10 ^{-3.60}	10 ^{-3.54}	10 ^{-3.45}
40	10 ^{-4.01}	10 ^{-3.76}	10 ^{-3.70}	10 ^{-3.61}
60	10 ^{-3.91}	10 ^{-3.91}	10 ^{-3.85}	10 ^{-3.77}
80	10 ^{-3.85}	10 ^{-4.07}	10 ^{-3.99}	10 ^{-3.91}

Afgezien van het feit, dat het stationnaire dispersiemodel slechts een gemiddelde toestand weerspiegelt, zodat de bekomen resultaten op een relatieve manier moeten geïnterpreteerd worden, tonen de waarden in tabel VI duidelijk aan in welke mate de precipitatie of de kans op precipitatie toeneemt als gevolg van de lozingen.

Bekijkt men als voorbeeld de toestand voor een bovendebiet van 60 m³/s. Zonder lozing wordt in dat geval de oplosbaarheidsgrens van calciumsulfaat juist bereikt. In het geval van de BASF-lozing zal er echter 104.7 mg CaSO₄/l precipiteren en voor de gezamenlijke lozing BASF en kollektor zelfs 253 mg CaSO₄/l. Vergelijken we deze cijfers met de turbiditeitswaarden (hoeveelheid gesuspendeerde materie groter dan 0.8 μm) in deze zone gemeten, namelijk 50 à 150 mg/l, dan blijkt dat, zelfs indien een zeer grote fraktie van de CaSO₄ neerslag kleiner zou zijn dan 0.8 μm, de bestudeerde lozing lokaal de hoeveelheid suspensie, en dus onrechtstreeks de sedimentatie gevoelig zal doen toenemen.

4.2. Calciumcarbonaat



$$K_s = 10^{-6.73} \text{ (1)} = [\text{Ca}^{2+}] [\text{CO}_3^{2-}] \cdot f_{\text{CO}_3^{2-}} \cdot f_{\text{Ca}^{2+}} \quad (9)$$

In de veronderstelling dat het systeem in evenwicht is met de atmosfeer, kan volgens de procedure beschreven in bijlage, de carbonaat-activiteit in functie van de pH, berekend worden. De relatie tussen activiteit en concentratie luidt :

$$a_{\text{CO}_3^{2-}} = [\text{CO}_3^{2-}] \cdot f_{\text{CO}_3^{2-}} \quad (10)$$

a_i : activiteit van het ion i.

Daar de carbonaataktiviteit en de aktiviteitscoëfficiënt van calcium bekend zijn ($f_{\text{Ca}^{2+}} = 0.5$), kunnen met vergelijking (9) de overeenstemmende evenwichtskoncentraties van Ca^{2+} worden bekomen. Deze waarden zijn in tabel VII, in functie van de pH, voorgesteld.

Tabel VII : Evenwichtskoncentraties van Ca^{2+} en CO_3^{2-} in oplossing (km 55).

pH	carbonaataktiviteit $a_{\text{CO}_3^{2-}}$ - (mol/l)	calciumconcentratie (mol/l)
6	$10^{-8.35}$	$\sqrt{83}$
7	$10^{-6.35}$	0.83
8	$10^{-4.35}$	$8.3 \cdot 10^{-3}$

(1) Deze konstante is rekening houdend met de saliniteit aan km 55, geïnterpoleerd tussen de konstanten in zoet en in zeewater.

Vergelijkt men deze evenwichtskoncentraties met de gevonden waarden, voorgesteld in tabel I, dan blijkt dat er alleen bij pH 8 of meer precipitatie van calciumcarbonaat zou kunnen optreden. Dit is trouwens duidelijk merkbaar op figuur 14, die de evenwichtsaktiviteiten van H_2CO_3^* , HCO_3^- , CO_3^{2-} en Ca^{2+} in funktie van de pH voorstelt. De gevonden calciumaktiviteit voor een bovendebiet van $20 \text{ m}^3/\text{s}$ aan het lozingspunt tengevolge van de BASF lozing is eveneens weergegeven.

Onderzoekt men als voorbeeld de precipitatie bij pH = 8 en een bovendebiet van $20 \text{ m}^3/\text{s}$. In dit geval zal er zonder lozing $2.6 \text{ mg CaCO}_3/\text{l}$, met de BASF-lozing $2.8 \text{ mg CaCO}_3/\text{l}$ en met de gezamenlijke lozing (BASF en kollektor) $3.1 \text{ mg CaCO}_3/\text{l}$ precipiteren.

Alhoewel de precipitatie van carbonaten ogenschijnlijk minder belangrijk is dan deze van calciumsulfaat, mag men niet vergeten, dat tengevolge van de hoge organische belastingsgraad van het Scheldewater en de daarmee verbonden bacteriële aktiviteit, de carbonaatkoncentraties een faktor 10 en meer kunnen bedragen dan de waarden bekomen voor een systeem in evenwicht met de atmosfeer. Dat calciumcarbonaat in het gehele estuarium een veel voorkomende component in suspensie en in het sediment is, werd trouwens door Wollast (Wollast, 1973) en Laurent (Laurent, 1974) aangetoond.

Konklusies

1. Zowel de fosfaten als de fluoriden dragen in niet geringe mate bij tot het hoge eutrofikatie- en pollutieniveau dat in de Schelde wordt bereikt.
2. De precipitatie- en sedimentatieverschijnselen werden bestudeerd uitgaande van de veronderstelling dat de totale hoeveelheid gips zich in oplossing bevindt. Het is evident dat deze veronderstelling het bestudeerde verschijnsel minimaliseert. Nochtans werd in deze omstandigheden aangetoond dat niet geringe hoeveelheden calciumsulfaat en carbonaat in toenemende mate zullen precipiteren met een afname van het bovendebiet.

Aanbevelingen.

1. Om de hoeveelheid stoffen die in de lozingszone sedimenteren te minimaliseren, is het noodzakelijk dat :
 - enerzijds er over gewaakt wordt dat de initiële diffusie van de lozing in het milieu maximaal is. Daarvoor is een zeer degelijk diffusie-systeem op het einde van de lozingspijp noodzakelijk.
 - anderzijds vermeden wordt dat de lozing zich voordoet in het half uur voor en na de waterkentering.
 2. Om de hoeveelheid gesedimenteerde stoffen te kunnen definiëren en de uitgestrektheid van de zone waar de sedimentatie zich voordoet te kunnen beschrijven, is het noodzakelijk een monitoring uit te voeren in drie kompartimenten (opgeloste fase, suspensie en sediment), in de omgeving van de lozingsplaats, voor de volgende parameters :
 - calcium, sulfaat, carbonaat, fosfaat
 - fluor (alleen in de opgeloste fase)
- Dit zou het voorwerp moeten uitmaken van een samenwerking tussen de Beheerseenheid van het Model Zee en het Instituut voor Hygiëne en Epidemiologie.
3. Kontakten moeten worden genomen met BASF, opdat in de kortste termijn, de concentraties in de lozing in overeenstemming zijn met de sectoriële normen, wat betreft fluoriden en eventueel fosfaten.
 4. Gezien de verschillende problemen gesteld door deze lozing is het absoluut noodzakelijk dat een lozingsvergunning van beperkte duur wordt afgeleverd, te herzien in functie van de meetresultaten.

Referenties :

1. R. Wollast (1973), Origine et mécanismes de l'envasement de l'Estuaire de l'Escaut, 140 pg., Rapport de Synthèse, Université Libre de Bruxelles, Institut de Chimie Industrielle. Recherche dirigée par le laboratoire de Recherches Hydrauliques - Borgerhout - Ministère des Travaux Publics.
2. E. Laurent (1974), Etude Minéralogique de l'Envasement de l'Escaut, 41 pg., Rapport de Synthèse, Ecole Royale Militaire.

Legenden.

- Figuur 1 : Calciumlozing van BASF aan km 55
Bovendebiet varieert tussen 20 en 80 m³/s
- Figuur 2 : Calciumlozing van BASF aan km 55
Bovendebiet varieert tussen 80 en 140 m³/s
- Figuur 3 : Sulfaatlozing van BASF aan km 55
Bovendebiet varieert tussen 20 en 80 m³/s
- Figuur 4 : Sulfaatlozing van BASF aan km 55
Bovendebiet varieert tussen 80 en 140 m³/s
- Figuur 5 : Fosfaatlozing van BASF aan km 55
Bovendebiet varieert tussen 20 en 80 m³/s
- Figuur 6 : Fosfaatlozing van BASF aan km 55
Bovendebiet varieert tussen 80 en 140 m³/s
- Figuur 7 : Fluoridelozing van BASF aan km 55
Bovendebiet varieert tussen 20 en 80 m³/s
- Figuur 8 : Fluoridelozing van BASF aan km 55
Bovendebiet varieert tussen 80 en 140 m³/s
- Figuur 9 : Calciumlozing van BASF aan km 55 en van de kollektor aan km 70
Bovendebiet varieert tussen 20 en 80 m³/s
- Figuur 10 : Calciumlozing van BASF aan km 55 en van de kollektor aan km 70
Bovendebiet varieert tussen 80 en 140 m³/s.

Figuur 11 : Sulfaatlozing van BASF aan km 55 en van de kollektor aan km 70
Bovendebiet varieert tussen 20 en $80 \text{ m}^3/\text{s}$

Figuur 12 : Sulfaatlozing van BASF aan km 55 en van de kollektor aan km 70
Bovendebiet varieert tussen 80 en $140 \text{ m}^3/\text{s}$

Figuur 13 : Chloriniteitsprofielen
Bovendebiet varieert tussen 1 en $80 \text{ m}^3/\text{s}$

Figuur 14 : Carbonaat systeem in evenwicht met de atmosfeer.
Evenwichtsaktiviteiten van carbonaten en calcium

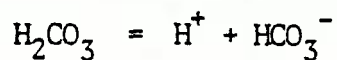
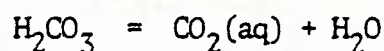
Legenden :

Indicatiesysteem van de krommen

- 1a : bovendebiet $20 \text{ m}^3/\text{s}$. Normale toestand
- 1b : bovendebiet $20 \text{ m}^3/\text{s}$. Geperturbeerde toestand
- 2a : bovendebiet $40 \text{ m}^3/\text{s}$. Normale toestand
- 2b : bovendebiet $40 \text{ m}^3/\text{s}$. Geperturbeerde toestand
- 3a : bovendebiet $60 \text{ m}^3/\text{s}$. Normale toestand
- 3b : bovendebiet $60 \text{ m}^3/\text{s}$. Geperturbeerde toestand
- 4a : bovendebiet $80 \text{ m}^3/\text{s}$. Normale toestand
- 4b : bovendebiet $80 \text{ m}^3/\text{s}$. Geperturbeerde toestand
- 5a : bovendebiet $100 \text{ m}^3/\text{s}$. Normale toestand
- 5b : bovendebiet $100 \text{ m}^3/\text{s}$. Geperturbeerde toestand
- 6a : bovendebiet $120 \text{ m}^3/\text{s}$. Normale toestand
- 6b : bovendebiet $120 \text{ m}^3/\text{s}$. Geperturbeerde toestand
- 7a : bovendebiet $140 \text{ m}^3/\text{s}$. Normale toestand
- 7b : bovendebiet $140 \text{ m}^3/\text{s}$. Geperturbeerde toestand

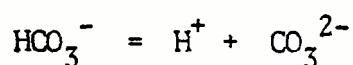
Bijlage

Het carbonaatstelsel wordt door de volgende evenwichten gekarakteriseerd :



$$\text{Stel : } [\text{H}_2\text{CO}_3^*] = [\text{CO}_2(\text{aq})] + [\text{H}_2\text{CO}_3]$$

$$K_1 = \frac{[\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]}{[\text{H}_2\text{CO}_3^*]} = 10^{-6.07} \quad (1)$$



$$K_2 = \frac{[\text{H}^+][\text{CO}_3^{2-}]}{[\text{HCO}_3^-]} = 10^{-9.28} \quad (2)$$

K_1 en K_2 zijn geïnterpoleerd, rekening houdend met de saliniteit aan $\text{km} = 55$, tussen de konstanten voor zoet en voor zeewater.

De concentraties van de verschillende componenten kunnen als volgt berekend worden :

$$\text{Stel : } C_T = [\text{H}_2\text{CO}_3^*] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}]$$

$$[\text{H}_2\text{CO}_3^*] = \alpha_0 C_T \quad (3)$$

$$\alpha_0 = \left(1 + \frac{K_1}{[\text{H}^+]} + \frac{K_1 K_2}{[\text{H}^+]^2} \right)^{-1}$$

$$[\text{HCO}_3^-] = \alpha_1 C_T \quad (4)$$

$$\alpha_1 = \left(\frac{[\text{H}^+]}{K_1} + 1 + \frac{K_2}{[\text{H}^+]} \right)^{-1}$$

$$[\text{CO}_3^{2-}] = \alpha_2 C_T \quad (5)$$

$$\alpha_2 = \left(\frac{[\text{H}^+]^2}{K_1 K_2} + \frac{[\text{H}^+]}{K_2} + 1 \right)^{-1}$$

Indien het systeem in evenwicht is met de atmosfeer,

$$[\text{H}_2\text{CO}_3^*] = K_H P_{\text{CO}_2} \quad (6)$$

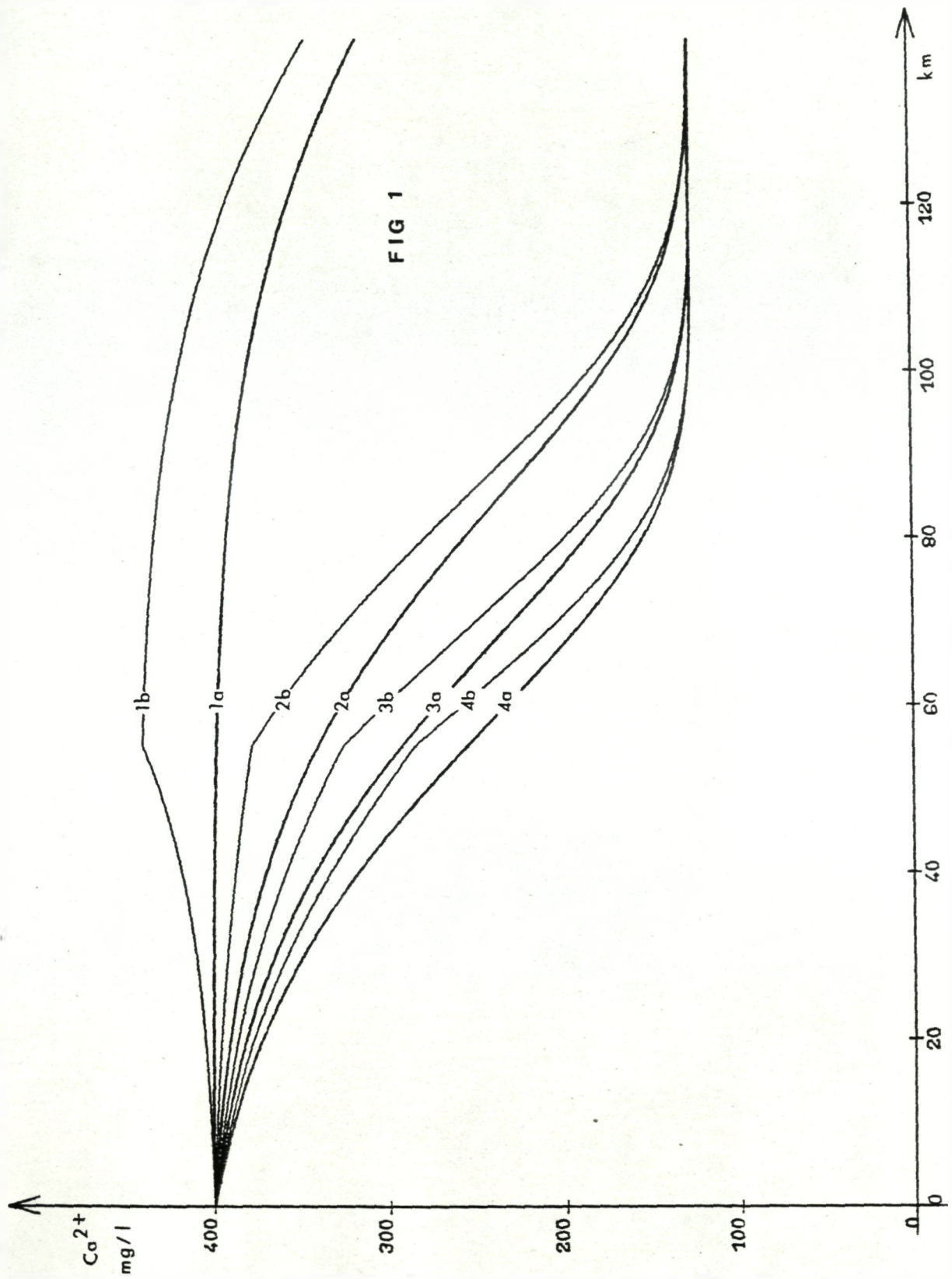
$$K_H = 10^{-1.5} ; P_{\text{CO}_2} = 10^{-3.5}$$

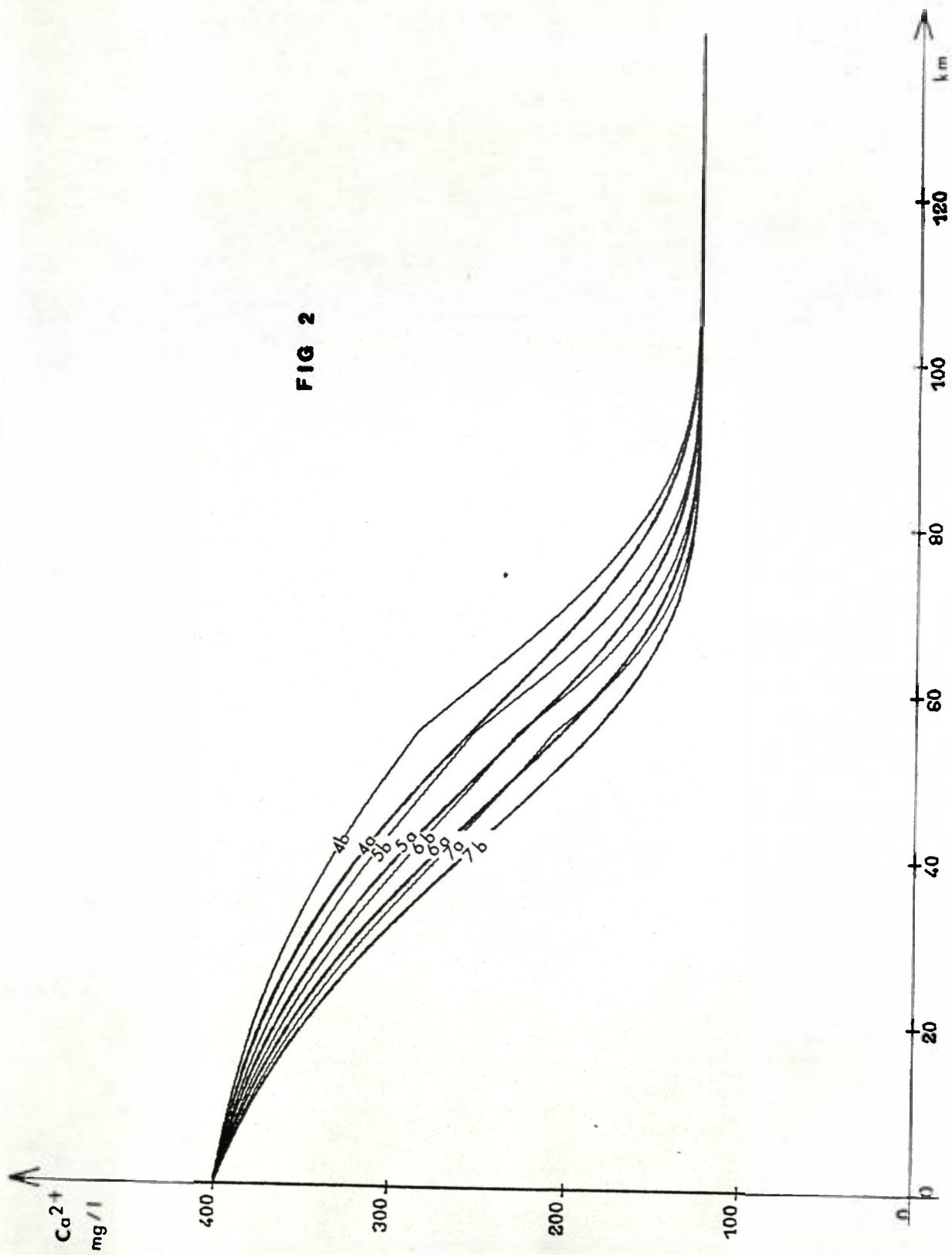
Uit (3) en (6) kan, in funktie van de pH, C_T berekend worden :

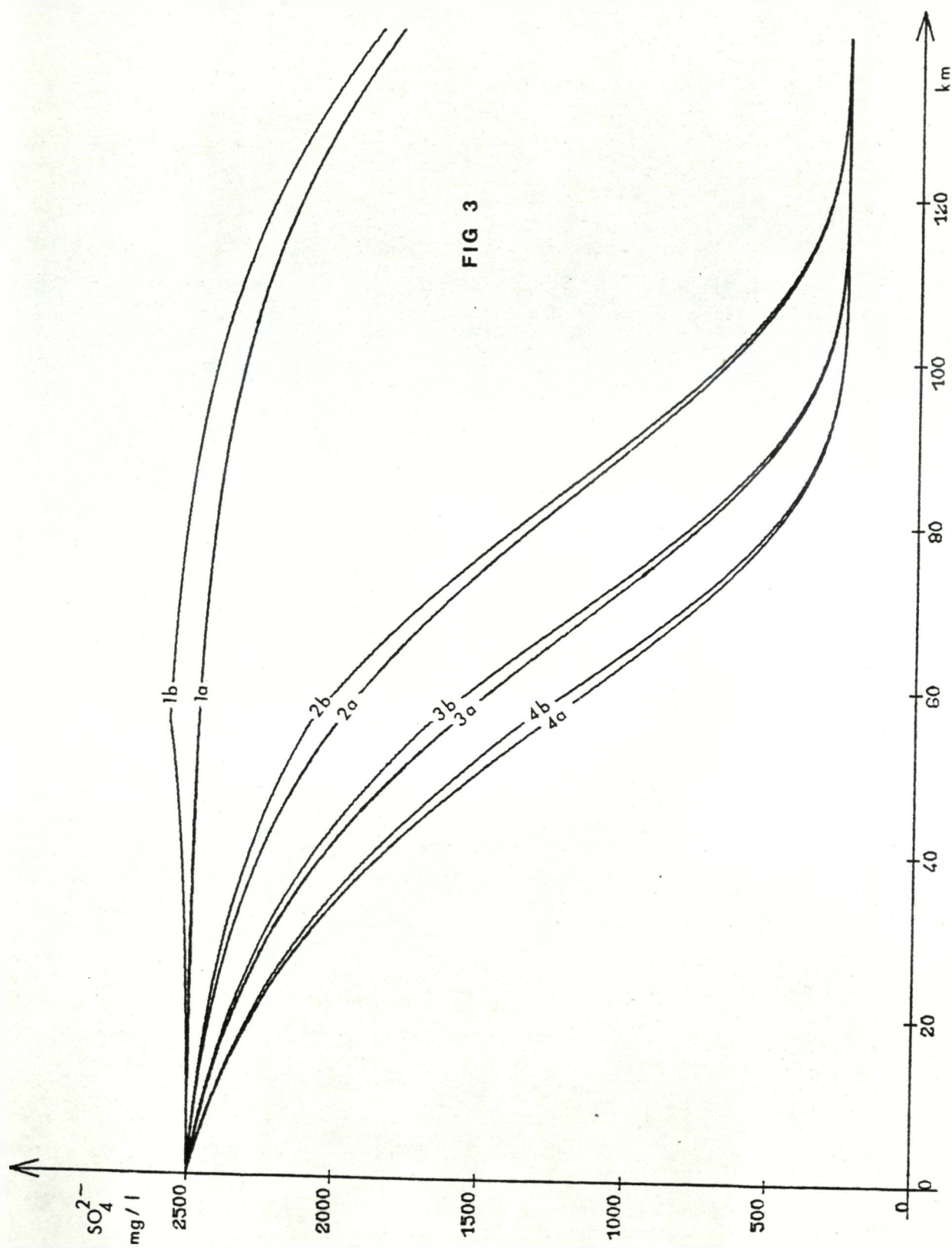
$$C_T = \frac{K_H P_{\text{CO}_2}}{\alpha_0} \quad (7)$$

Uit (5) en (7) kan, in funktie van de pH, de carbonaatconcentratie berekend worden :

$$[\text{CO}_3^{2-}] = \frac{\alpha_2 K_H P_{\text{CO}_2}}{\alpha_0} \quad (8)$$







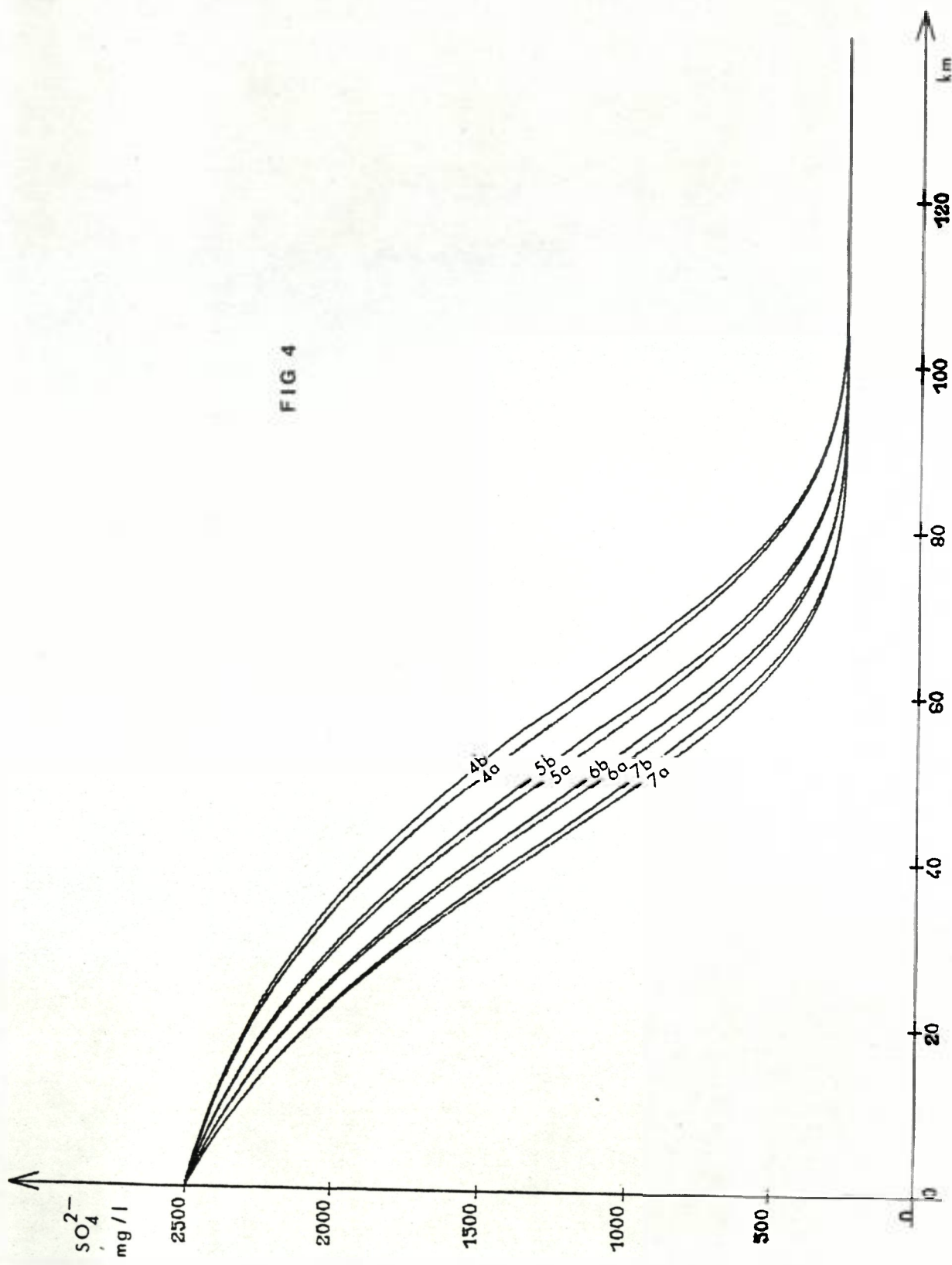
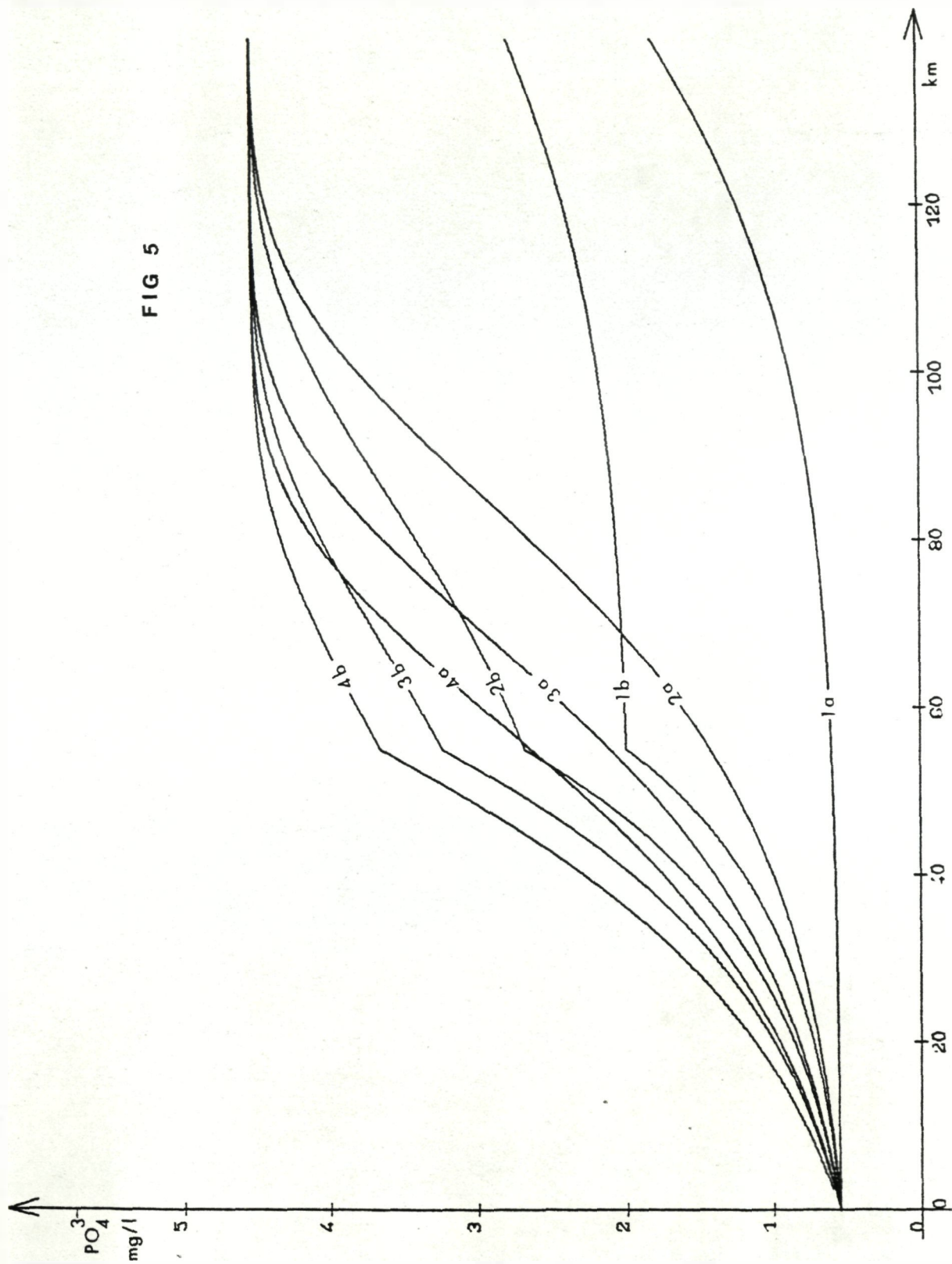


FIG 4



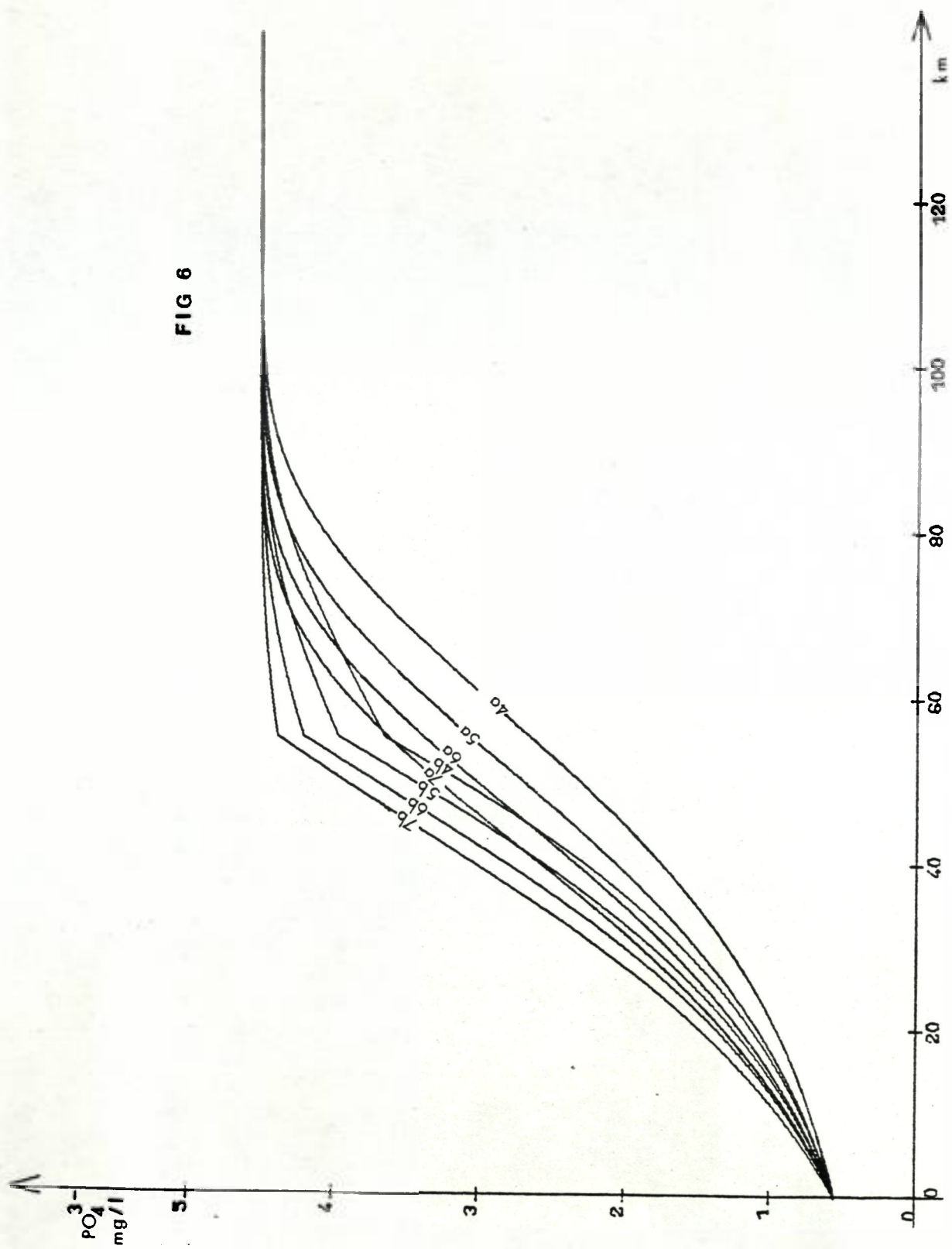
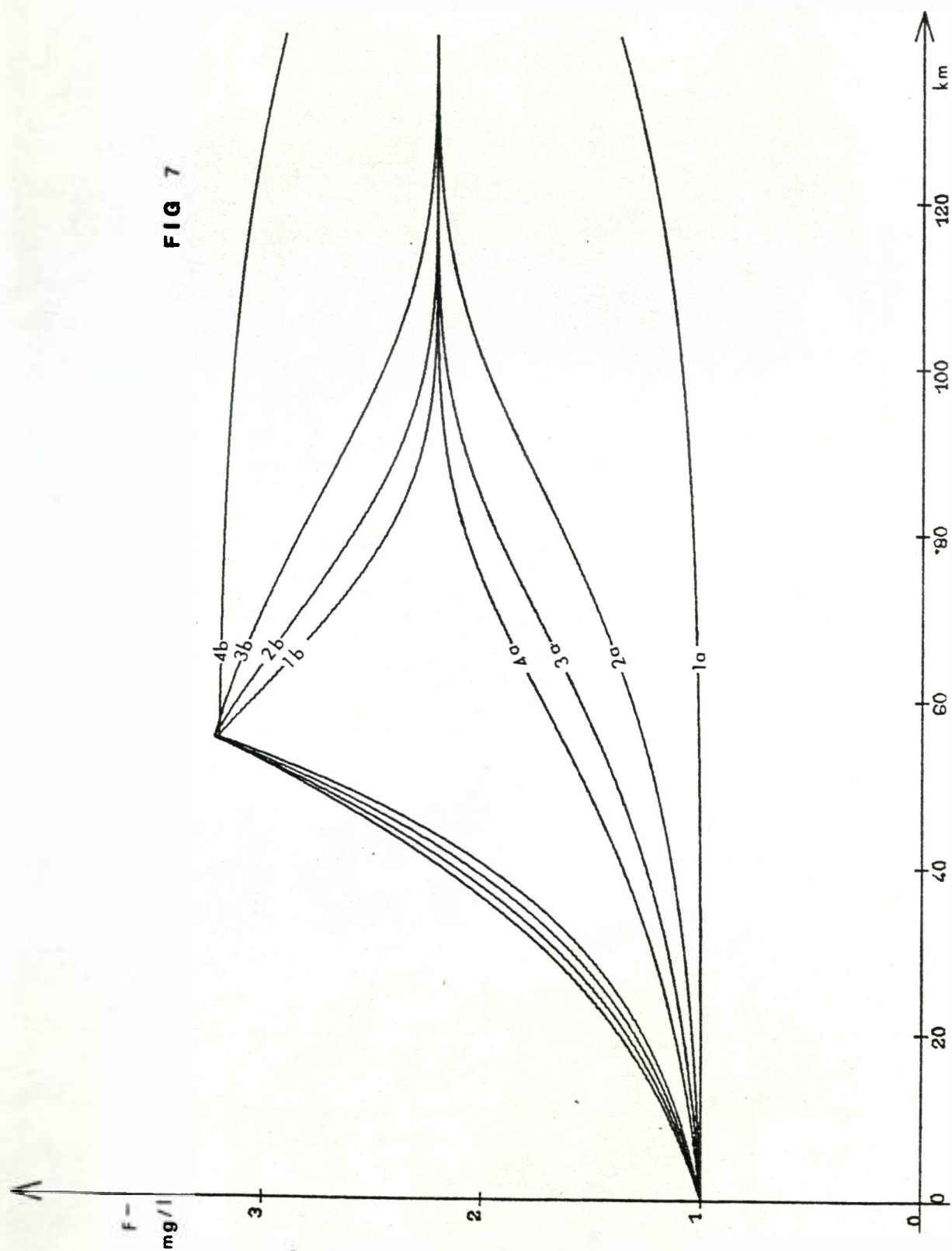


FIG 6



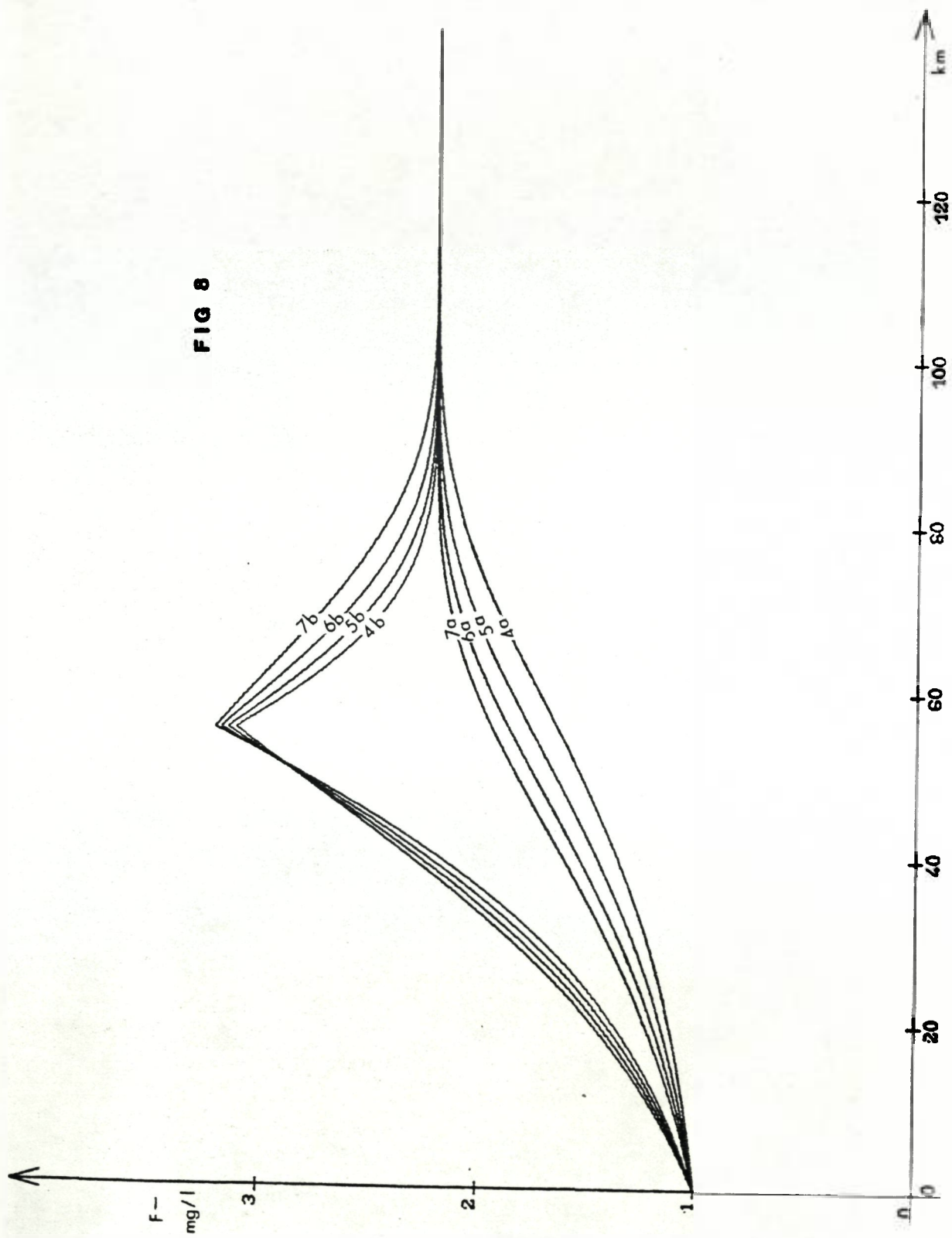


FIG 8

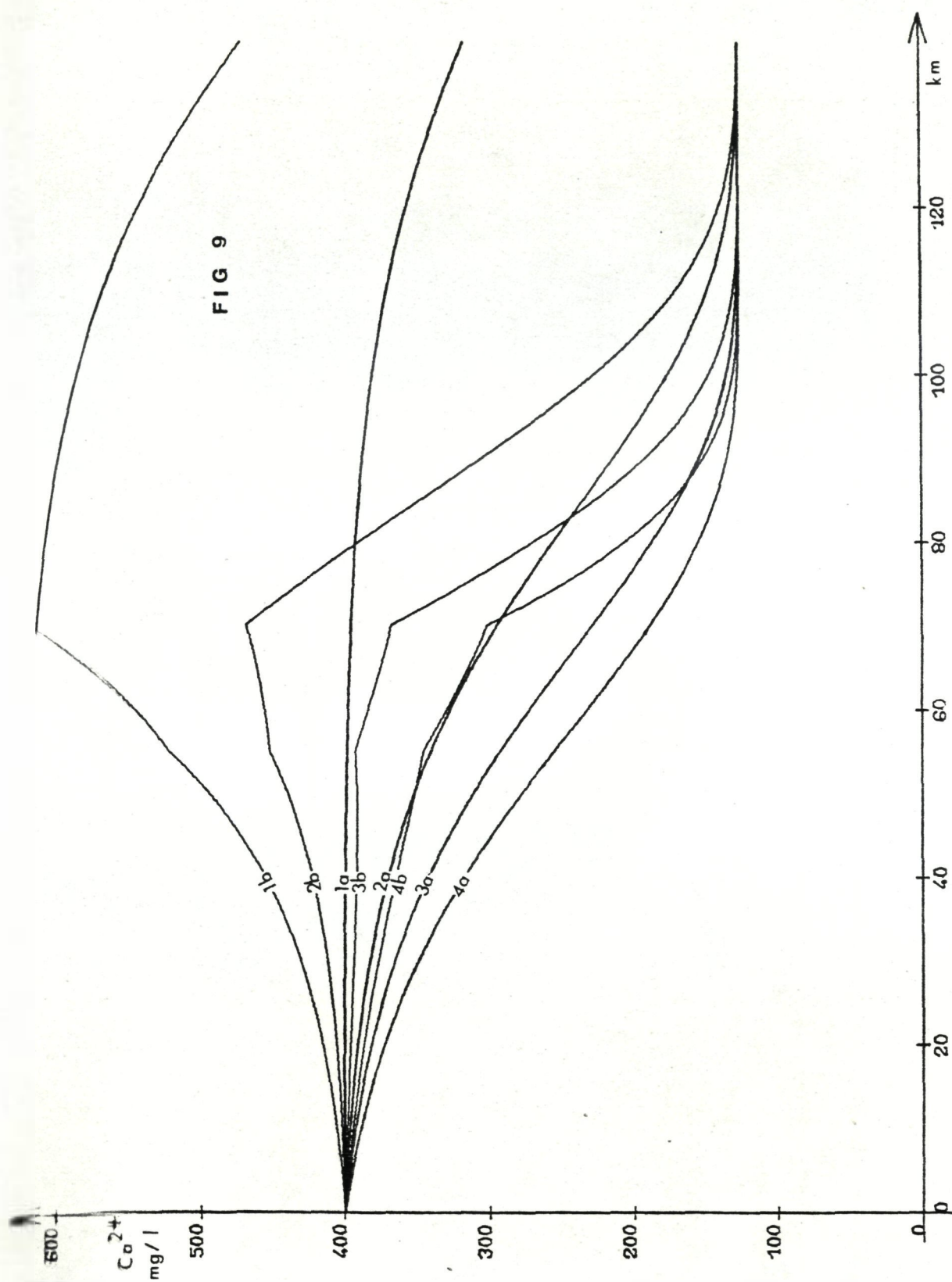


FIG 10

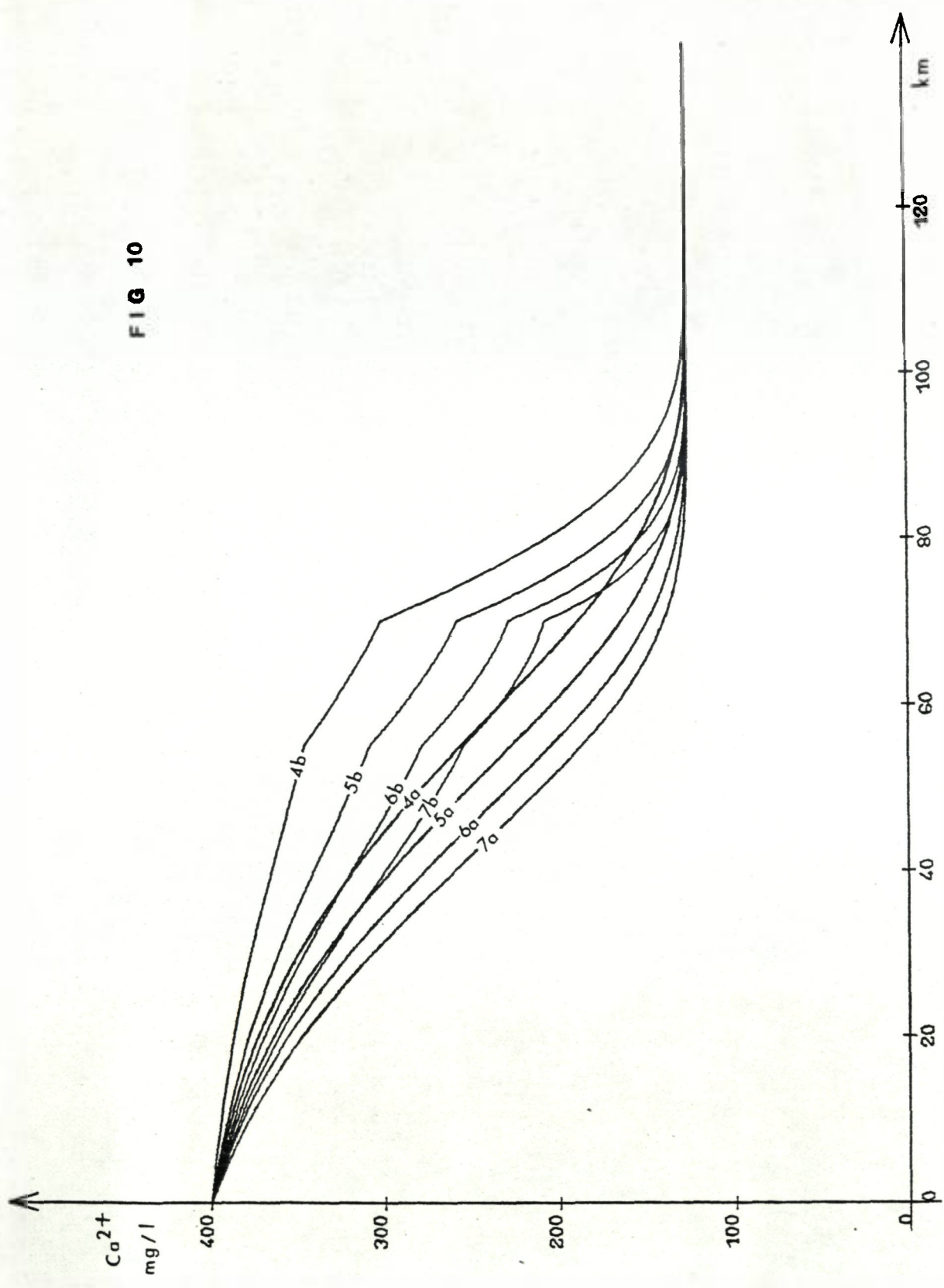
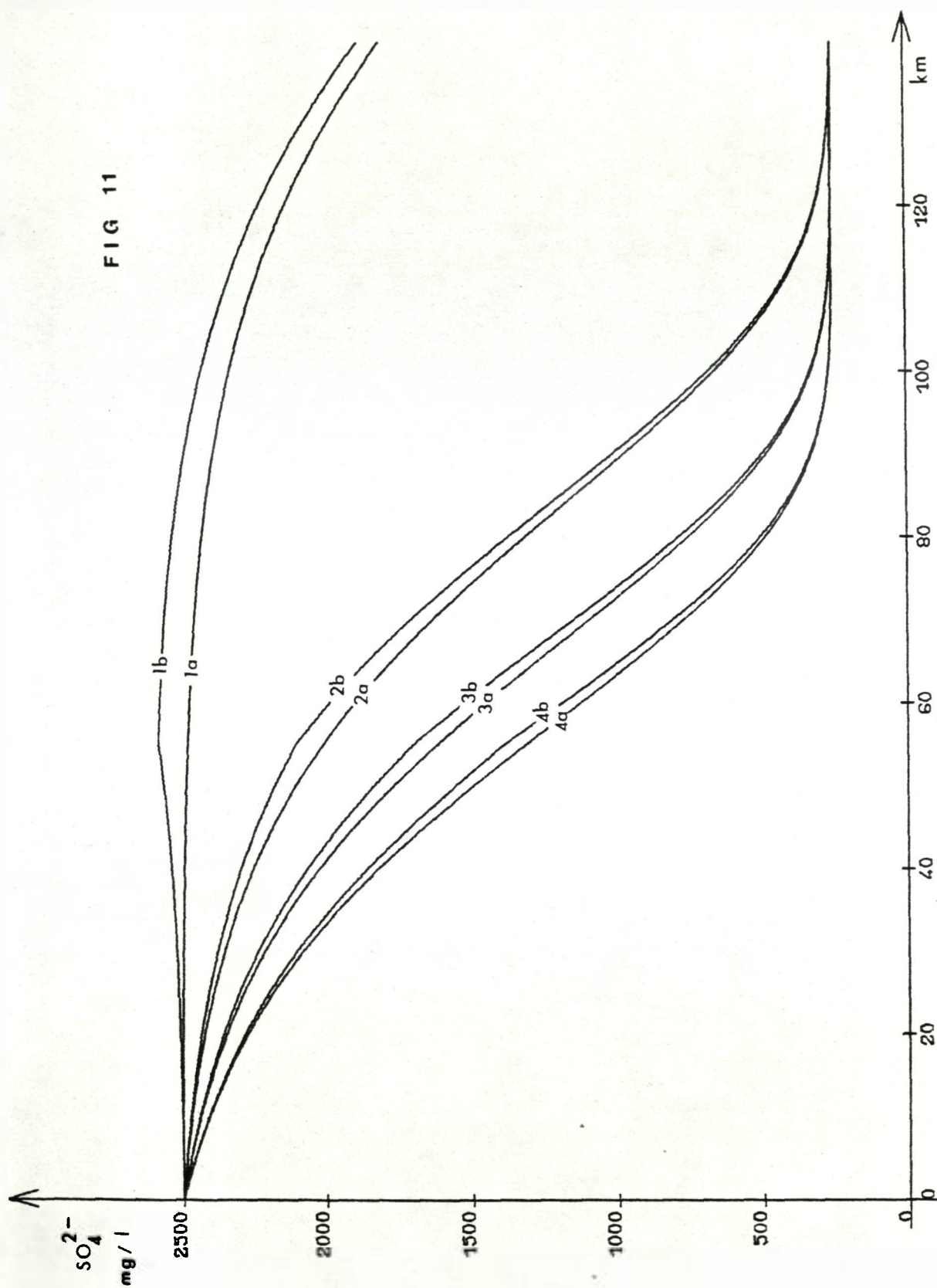
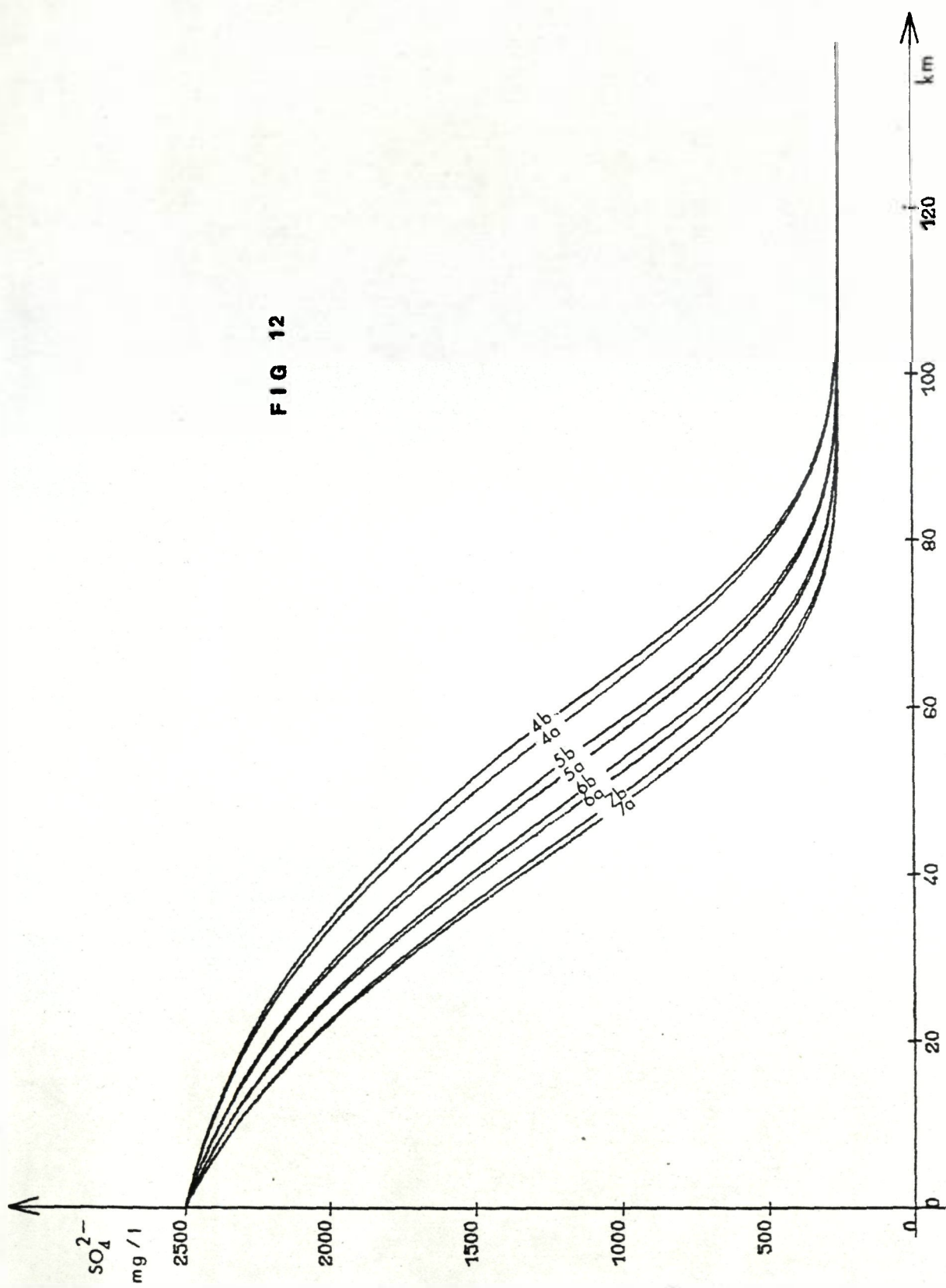


FIG 11





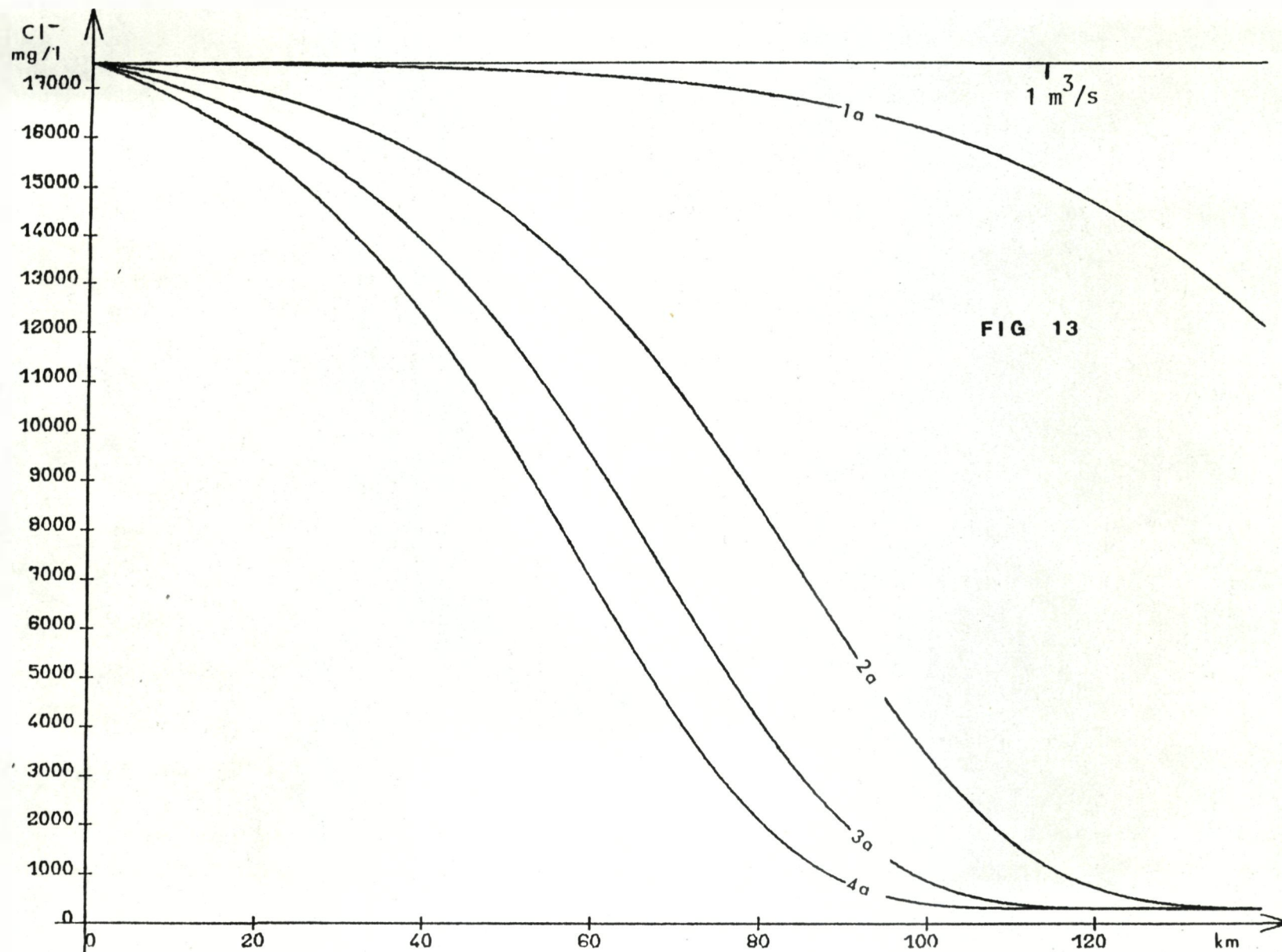
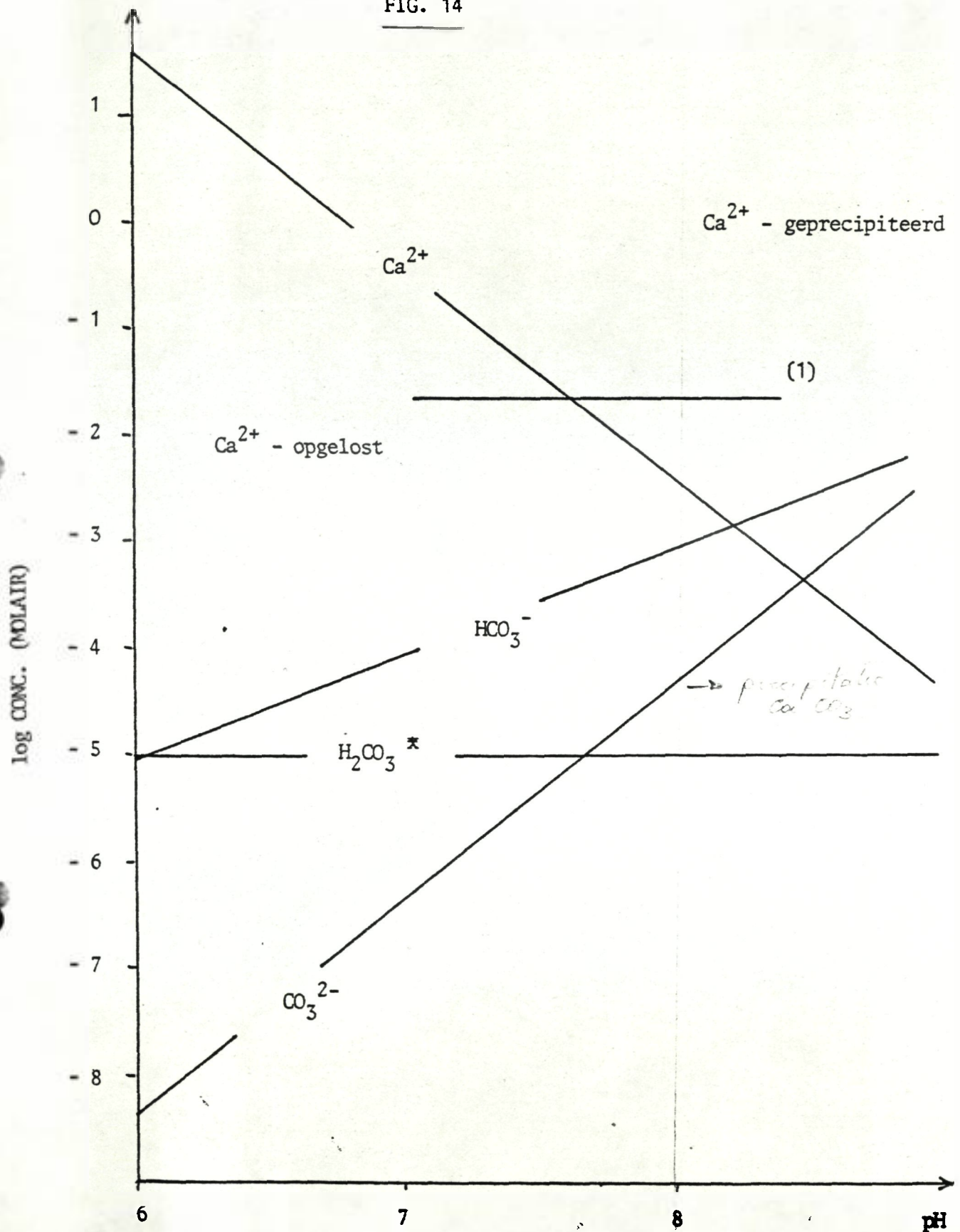


FIG. 14



(1) : Deze horizontale lijn stelt de calciumactiviteit van het milieu voor , na lozing door BASF, voor een bovendebiet = 20 m³/s

