

# Doğal salamura sularda mineral çökeltim ve çözünümü için termodinamik değerlendirimi için bilgisayar programı

M. Zeki Çamur

ODTÜ, Jeoloji Müh. Bol., Ankara

*Çalışma nehir, göl, deniz ve yeraltı salamura sularından alınmış kimyasal verilerin yorumlanmasına katkıda bulunmak amacıyla yazılmış bilgisayar programı ve kullanımını açıklamaktadır. Bayie bir programın gerekliliğinin arkasında yatan sebeplerden biri,, su kimyası analizlerinin minerallerin termodinamik durumlarına (doygunluk durumlarına) ilişkin bilgiyi doğrudan yansıtmamasıdır. Buna ek olarak, standart kimyasal analizlerde suda mevcut her bir serbest iyona ait konsantrasyonların yerine genelde iyonların toplam konsantrasyonları ölçülmektedir.. Dolayısıyla,, bir su örneği içinde mevcut bütün kimyasal bileşiklere ait konsantrasyonların belirlenebilmesi ve suyun minerallere göre doygunluğunun testi için yoğun sayısal hesaplamaları kolaylaştıracak bir bilgisayar programına gereksinim vardır. Bu çalışma yer bilimlerinin pek çok disiplininde (jeokimya, sedimantoloji, mineraloji, maden y atakları, hidroloji) geniş uygulama alanlarına sahip bu konudaki boşluğu doldurmak amacıyla yapılmıştır. Çalışmada önce<sup>1</sup> teorik bilgilerle ilgili denklemlerle anlatılmış ve daha sonra serbest iyon konsantrasyonu, iyon aktivite katsayısı, aktivite ve 51 mineralin doygunluk durumunu hesaplayan program listelenmiştir.*

## Giriş

Mineral çökeltim ve çözünümünün doğal sularda değişik konsantrasyon, sıcaklık ve basınç koşulları altında belirlenmesine yönelik çalışmalar uzun yıllardır jeokimyacıların ana araştırma alanlarından birini oluşturmaktadır (özet için Helgeson ve diğ., 1974, 1976,

1978, 1981 ve Whitfield, 1979\*a bakınız). Çözeltilerin termodinamik metodlarla mineral doygunluğunu belirleyebilmek için çözelti içindeki iyon ve minerallerin Gibbs serbest enerjilerinin ve serbest - iyon aktivite katsayılarının bilinmesi gerektiğinden, araştırmalar daha çok bu konularda yürütülmektedir.

Sulu çözeltilerde herhangi bir bileşiğin aktivite katsayısı içinde bulunduğu çözeltinin toplam konsantrasyon yükü ile yakından ilişkilidir. Çok seyreltik çözeltilerde aktivite katsayıları Debye - Hückel denklemi ile kolayca hesaplanabilir (Debye ve Hückel, 1923). iyon konsantrasyonu yüksek, sulu çözeltilerde (doğal salamura sularda) aktivite katsayılarını laboratuvar metodları ile doğrudan belirleyebilmek mümkün olmadığından, kono teorik bazda, ele alınmış ve çeşitli denklemler geliştirilmiştir (özet için Whitfield, 1979\*3 bakınız). Bunlardan Pitzer (1973, 1979)'in "iyonlar - iyon etkileşim" denklemleri, 25°C ve bir atm, de serbest - iyon aktivite katsayılarının doğal salamura, sularda hesaplanması ve dolayısıyla, minerallerin bu ortamlardaki doygunluklarının belirlenmesi amacıyla Na - K - Mg - Ca - H - Cl - SO<sub>4</sub> - OH: - HCO<sub>3</sub> - CO<sub>3</sub> - CO<sub>2</sub> - H<sub>2</sub>O sisteminde modellenmiş, bir başka ifade ile denklemlerde mevcut değişkenlerin, katsayıları deneysel veriler kullanılarak kalibre edilmiştir (Harvie ve diğ., 1984; Weare, 1987). Değişik, doğal, koşullara uygulanarak bu modelin mineral çökeltim ve çözünüm, belirleme kapasitesi test edilmiş, ve başarılı sonuçlar elde edilmiştir (Guèddari ve diğ., 1983; Harvie ve diğ., 1984; Nordstrom ve Munoz, 1986; Weare, 1987; Çamur ve Mutlu, 1995,1996)...

Uygulanabilirliği gösterilmiş tek fakat karmaşık denklemler<sup>1</sup> grubundan oluşan Pitzer- aktivite katsayısı formülasyonunun mineral çökeltim ve çözünümü belirlemede kullanılabilmesi ancak bir bilgisayar programı yardımı ile mümkündür. Doygunluk hesaplamalarına yönelik mevcut programlar<sup>2</sup> daha çok seyreltik sulara ilişkindir (Truesdell and Jones, 1974; Plummer ve diğ., 1976; Wigley, 1977)... Bu programlardan bazılarının sadece sodyumca zengin doğal salamura sularına da uygula-

nabileceği gösterilmiştir (Çamur ve Mutlu» 1995). Ancak her tür doğal salamura, sulara uygulanabilir herkesin kullanımına açık kapsamlı bir bilgisayar programı çalışması yoktur. Doğal salamura sulara yönelik He ve Morse (1993)'un programı., ise sadece, halit, jips ve anhidrit doygunluk, hesaplamalarını kapsamaktadır. Bu çalışmanın amacı, doğal salamura sularındaki mineral çökelim ve çözünümünün 25°C ve 1 atm. de belirlenebilmesi için, Pitzer aktivite katsayısı formülasyonunu esas alan. bir bilgisayar programı geliştirmektir.

## Mineral doygunluğu hesaplamalarında kullanılan termodinamik ve kütle korunum denklemleri

Denge (de) halindeki herhangi bir kimyasal tepkimenin (t) standart durum Gibbs serbest enerjisi ( $AG^{\circ}$ ) ile tepkimeye giren bileşiklerin konsantrasyonları arasındaki ilişki termodinamik olarak şöyle ifade edilebilir;

$$(1) \quad -A O R T I B K \wedge$$

Denklemden; R, gaz sabiti (0.0011987 kel / mol), T, sıcaklık (Kelvin cinsinden)' ve  $K_{\text{g}}$ , tepkimenin, denge sabitidir., Denge sabiti ile tepkimedeki, bileşiklerin, konsantrasyonları arasındaki ilişki:

$$(2) \quad K^{\wedge} F L a / n a$$

denklemleri tanımlanmıştır., Denklemden, g tepkimeye giren ve ç de tepkimedeki çıkan bileşiklerin tamamını temsil etmektedir, a^ tepkimedeki "T" bileşiğinin aktivitesidir (etkili konsantrasyonudur) ve şöyle tanımlanır:

$$(3) \quad \wedge = j m$$

Denklemden;  $j_b$  tepkimedeki "i" bileşiğinin aktivite katsayısı ve  $m_j$  de molalitesidir. Denklemler (2) ve (3) denklem (1) de yerine konulduğunda, herhangi bir tepkimedeki enerji, ve konsantrasyonlar arasındaki ilişki:

$$(4) \quad -A G^{\circ} / R T = \ln \left( \prod Y_m / \prod F_{i,m} \right)$$

denklemleri ifade edilebilir.

Tepkimeye giren ve çıkan bileşiklerin termodinamik denge halinde olması durumunda denklem (4) ün tier iki taraflı birbirine eşittir. Denge halinin değişmesi durumunda ise, tepkimeye giren veya çıkan bileşiklerin lehinde veya aleyhinde tepkime bir yöne doğru hareket edecek ve denklem (4) deki eşitlik bozulacaktır. İşte, mineral doygunluğu hesaplamalarının temelinde yatan ilke bu yönün bulunmasıdır. Bu yönün bulunması amacıyla yukarıda ifade edilen termodinamik denklemlere

bağlı olarak, doygunluk indeksi (Dİ) kavramı geliştirilmiştir.

$$(5) \quad D_i = \ln \left( \frac{\prod Y_{j,n} / E J M}{(-A G^{\circ}_i / R T)} \right),$$

Tepkimedeki mineral tepkimeye giren bileşik olarak yazıldığında (tepkime ifadesinin solunda)'» Di kavramına göre;;

Eğer  $\log (D_i) = 0$  Su mineral ile denge halindedir (denge - doygunluğu),.

Eğer  $\log (D_i) > 0$  Su minerale aşırı doymuştur (doygunluk. - üstü durum),.

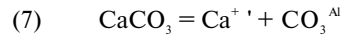
Eğer  $\log (D_i) < 0$  Su minerale doymamıştır (doygunluk - altı durum).

Denklemler (5) de. tepkimenin standart durum Gibbs serbest; enerjisi;

$$(6) \quad A G^{\circ} E G^{\circ} - Z G^{\circ} i$$

formüllerini kullanılarak deneysel olarak belirlenmiş kaynaklarda çizelgeler halinde üsteli (örneğin Helgeson ve diğ., 1978; Harvie ve diğ., 1984; Johnson ve diğ., 1991), tepkimedeki bileşiklerin (mineral ve iyonların) standart durum Gibbs serbest, enerjilerinden (G) hesaplanabilir. Bu yayında diğer verilerle uyumluluğu esas alınarak, Harvie ve diğ. (1984) tarafından belirlenmiş 25°C ve 1 atm. standard. Gibbs serbest enerjisi değerleri kullanılmıştır. (Çizelge 1). Katı saf maddelerin (minerallerin) aktiviteleri. benimsenecek, standart, durum tanımlama göre bire- eşitlenebilir (ayrıntılı, bilgi için Helgeson ve diğ.» 1978; Nordstorm ve Munoz, 1986'ya bakınız),. Böylece, suyun kimyasının bilinmesi durumunda,, denklem. (5) de bilinmeyen değişkenler tepkimedeki iyonların aktivite katsayılarına indirgenir.

Örnek olarak kalsit, doygunluk hesabını ele alırsak: Kalsit minerali ile içinde bulunduğu suyun iyonları, arasındaki muhtemel tepkime.:



„şeklinde yazılabilir, bu tepkimenin denklem (5) deki ifadesi;

$$\ln \left( \frac{\prod Y_{j,n} / E J M}{(-A G^{\circ}_i / R T)} \right) \text{dir...}$$

Tepkime (7) nin 25°C ve 1 atm. deki standart durum Gibbs serbest: enerjisi denklem (6) ya göre;

$$(9) \quad A G^{\circ}_i = (G^{\circ} a + G^{\circ} \text{CO}_3 - 2) - (G^{\circ} \text{CaCO}_3)$$

$$G^{\circ} \text{CaCO}_3 = -132.3, G^{\circ} \text{CO}_3 - 2 = -126.17 \text{ ve } G^{\circ} \text{CaCO}_3 = -$$

**Çizelge 1. Bilgisayar programında kullanılan iyon ve minerallerin 25°C ve 1 atm. deki Gibbs serbest enerjisi değerleri (kcaVmol). Harvie ve diğ., 1984'den hesaplanmıştır.,**

İYON/MİNERAL	KİMYASAL FORMÜL	- G°
Su	H <sub>2</sub> O	56.679
Sodyum iyonu	Na <sup>+</sup>	62.596
Potasyum iyonu	K <sup>+</sup>	67.518
Kalsiyum iyonu	Ca <sup>2+</sup>	132.301
Magnezyum iyonu	Mg <sup>2+</sup>	108.702
Magnezyum hidroksit iyonu	MgOH <sup>+</sup>	149.270
Hidrojen iyonu	H <sup>+</sup>	0.0
Klorit iyonu	Cl <sup>-</sup>	31.375
Sülfat iyonu	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	177.974
Bisülfat iyonu	HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	180.673
Hidroksit iyonu	OH <sup>-</sup>	37.584
Bikarbonat iyonu	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	140.271
Karbonat iyonu	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	126.166
Kalsiyumkarbonat iyonu	CaCO <sub>3</sub> <sup>o</sup>	262.767
Magnezyumkarbonat iyonu	MgCO <sub>3</sub> <sup>o</sup>	238.863
Carbondiyoksit iyonu	CO <sub>2</sub> <sup>o</sup>	92.238
Anhidrit	CaSO <sub>4</sub>	316.226
Apitait	NaK <sub>3</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	626.285
Antarkit	CaCl <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	529.473
Aragonit	CaCO <sub>3</sub>	269.681
Arkanit	K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	313.432
Bisikovit	MgCl <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	505.448
Bloedit	Na <sub>2</sub> Mg(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O	819.760
Brusit	Mg(OH) <sub>2</sub>	198.719
Burkelt	Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	858.746
Kalsit	CaCO <sub>3</sub>	269.936
Kalsiyum Klorit Tetrahidrat	CaCl <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O	413.968
Kalsiyum Oksi Klorit A	Ca <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub> (OH) <sub>6</sub> ·13H <sub>2</sub> O	1575.088
Kalsiyum Oksi Klorit B	Ca <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> ·H <sub>2</sub> O	461.195
Karnalit	KMgCl <sub>3</sub> ·6H <sub>2</sub> O	604.511
Dolomit	CaMg(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	516.640
Epsomit	MgSO <sub>4</sub> ·7H <sub>2</sub> O	685.995
Gayusit	CaNa <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·5H <sub>2</sub> O	806.074
Glauberit	Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	620.597
Jips	CaSO <sub>4</sub> ·2H <sub>2</sub> O	429.882
Halit	NaCl	91.829
Heizahidrat	MgSO <sub>4</sub> ·6H <sub>2</sub> O	628.981
Kainit	KMgClSO <sub>4</sub> ·3H <sub>2</sub> O	555.868
Kalsinit	KHCO <sub>3</sub>	207.405
Kiyesit	MgSO <sub>4</sub> ·H <sub>2</sub> O	343.522
Labil Tuz	Na <sub>4</sub> Ca(SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> ·2H <sub>2</sub> O	1037.706
Leonit	K <sub>2</sub> Mg(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O	831.829
Maryesit	MgCO <sub>3</sub>	245.555
Magnezyum Oksi Klorit	Mg <sub>2</sub> Cl(OH) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O	610.021
Merkanit	KHSO <sub>4</sub>	247.403
Mirabilit	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·10H <sub>2</sub> O	871.632
Misenit	K <sub>6</sub> H <sub>4</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>7</sub>	1800.700
Nahkolit	NaHCO <sub>3</sub>	203.417
Natron	Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> ·10H <sub>2</sub> O	819.275
Neskuhonit	MgCO <sub>3</sub> ·3H <sub>2</sub> O	411.954
Pikromerit	K <sub>2</sub> Mg(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O	945.663
Pitsonit	Na <sub>2</sub> Ca(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·2H <sub>2</sub> O	635.794
Polihalit	K <sub>2</sub> MgCa <sub>2</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>4</sub> ·2H <sub>2</sub> O	1352.344
Portlandit	Ca(OH) <sub>2</sub>	214.550
Potasyum Karbonat	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> ·3/2H <sub>2</sub> O	342.082
Potasyum Seskuikarbonat	K <sub>2</sub> H(CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> ·3H <sub>2</sub> O	1514.033
Potasyum Sodyum Karbonat	KNaCO <sub>3</sub> ·6H <sub>2</sub> O	596.513
Potasyum Trona	K <sub>2</sub> NaH(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·2H <sub>2</sub> O	575.740
Seskuipotasyum Sülfat	K <sub>3</sub> H(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	563.333
Seskuisodyum Sülfat	Na <sub>3</sub> H(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	544.948
Sodyum Karbonat Hefhidrat	Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> ·7H <sub>2</sub> O	648.740
Silit	KCl	97.665
Silenit	K <sub>2</sub> Ca(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·H <sub>2</sub> O	690.125
Talkhidrat	Mg <sub>2</sub> CaCl <sub>2</sub> ·2H <sub>2</sub> O	1194.388
Tenandit	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	303.559
Termonatrit	Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> ·H <sub>2</sub> O	307.381
Trona	Na <sub>3</sub> H(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·2H <sub>2</sub> O	569.010

269,9kcal/mol değerleri, kullanıldığında:  $AG_{\text{v}} = IIA3$  kcal/moldiff. Saf minerallerin aktiviteleri bire eşittir, standart durumunu benimsediğimizde, kalsitle .aktives! bire eşittir:

$$^{\circ}\text{CaOCB}^{\circ} \text{ Te}^{\circ}\text{CaCO}_3^{\circ}\text{CaCO}_3^{\circ} \text{ }^{\circ}\text{ }^{\circ}$$

]Bo değerleri denklem. (8) de yerine koyarsak ve kalsitin doyunluğunu 25°C (298.15°K)de hesaplırsak;

$$(10) \quad Dt = \ln (7c_{\text{Ca}}2m_{\text{Ca}}2Tc_{\text{CO}_3}...2m_{\text{CO}_3-2}) / (-19.29).$$

Kalsit doyunluğu belirlenecek suyun kimyasal kompozisyonu bilindiğinde, denklemde bilinmeyen iyonların aktivite-katsayıları da hesaplanarak doyunluk indeksi belirlenebilir.

Salamura suların iyon aktivitelerini belirlemek için Pitzer deoklemleri ile ifade edilen osmotik katsayı (<math>\langle\langle\rangle\rangle</math>), kation,, anyon ve yüksüz bileşiklerin aktivite katsayıları (Oy), kullaılmıştır (Çizelge, 2 ve 3), Pitzer (1.973, 1979, 1987) konsantre elektrolit çözeltilerde gözlenen kararsızlığı ifade etmek için istatistiksel - mekanik bir yaklaşım kullanmıştır. Bu formülasyon, iyonlar - .arası etkileşimleri gözönüne alan denklem, çeşitlendirmelerine dayanmaktadır. Pitzer denklemlerinin ilke ve gelişimleri ayrıntılı olarak Pitzer (1979,, 1987), Harvie ve (fig. (1984) ve Weare (1987)'de verilmiştir.,

Serbest iyon konsantrasyonlarını toplam konsantrasyondan hesaplama, tepkimeye giren ve çıkan bileşikler arasında, daha. önce ifade edilen, termodinamik denge kavramı ve kütle (konsantrasyon) korunumu prensiplerine dayanır. Bu çalışmadaki, serbest iyon bileşiklerin. sayısı aktivite katsayılarına ait parametreleri belirlenmiş bileşiklerle (Çizelge 1) sınırlanmıştır. Bu: bileşikler arasındaki konsantrasyon dağılımını belirleyen termodinamik ifadelerin tepkimeleri ve her bir toplam (T) konsantrasyonu esas. alan kütle korunumuna dayalı denklemler Çizelge 4'de verilmiştir.,

Doğal salamura, sulardaki mineral çökelim ve çözünümünü belirleyebilmek için verilen denklemleri esas alan PITDI kodlu bir bilgisayar programı yazılmıştır. Programda denklemler Weare (1987) 'in iyonlar - .arası, etkileşim verileri ve Havle ve 'dig. (1984)'nin standart Gibbs serbest, enerjisi verileri ile birleştirilerek devamlı .fraksiyon, (continued fraction) sayısal metodu kullanılmak suretiyle iterasyon yöntemi ile- bir set halinde hesaplanmakta, ve sonuçta konsantrasyon dağılımları, aktivite katsayıları,, aktiviteler ve doyunluk indeksleri belirlenmektedir. Aktivite katsayıları denklem setinde mevcut elektrostatik simetri dışı karşım, denidemlerindeki Integraller' Chebyshev polinomial yaklaşımları kollarılarak çözülmektedir (Pitzer,, 1987).

## Uygulamalar

Programın sonuçlarını göstermek amacıyla Çamur ve Mutlu (1995) 'tarafından rapor edilen Tuz Gölü'nün ana. bölgesine ait. ortalama mayıs, ayı analizinin (mg/l): • K (944), Na (101980), Ca (925), Mg (2860), HCO<sub>3</sub>. (173), SO<sub>4</sub> (7371.), Cl (167438),, pH (7.34), TC (25) ve p(1.15; gr/l) hesaplamaları yapılmış ve sonuçlar Çizelge 5'de verilmiştir.

Çıktıda, ilk satır problemin başlığını, ikinci satır sonuçları elde- edebilmek için gereken iterasyon. sayısını,

Çizelge 2. Pitzer denklemlerine göre osmotik katsayı ( $\phi$ ), katyon aktivite katsayısı ( $\gamma_M$ ), anyon aktivite katsayısı ( $\gamma_X$ ), ve yüksüz iyon aktivite katsayılarının (%) tanımı. Denklemlerdeki M, c ve c' katyonları, X, a veya a' anyonları ve N ve o. yüksüz bileşikler temsil etmektedir, m ve z sırasıyla belirtilen bileşiklere ait molalite ve yük değerlikleridir. I, molal ölçekte iyonik güç ( $I=0.5\sum m_i z_i^2$ ) ve  $A^* \approx 25^\circ\text{C}$  deki Debye-Hückel parametresidir ( $=0.39$ ).  $B^* = B^* M^* B^* M^* \% 4\gamma^* V Q \ll$ ,  $\Psi^* = \Psi^* i$  değişken, katsayıları olup Pitzer'in iyonlar - arası etkileşim parametrelerinin fonksiyonudur (Çizelge 3'e bak).

**Aktivite Katsayılarının Salamura Sularında Belirlenmesine İlişkin Pitzer Denklemleri**

$$m_i(\phi-1) = 2 \left( -A^* \phi^{1/2} / (1+1.2I^{1/2}) + \sum_{c=1}^{N_c} \sum_{a=1}^{N_a} m_c m_a (B_{ca}^* + ZC_{ca}) \right)$$

$$+ \sum_{c=1}^{N_c} \sum_{c'=1}^{N_c} m_c m_{c'} (\Phi_{cc'}^* + \sum_{a=1}^{N_a} m_a \Psi_{cc'a}^*) + \sum_{a=1}^{N_a} \sum_{a'=1}^{N_a} m_a m_{a'} (\Phi_{aa'}^* + \sum_{c=1}^{N_c} m_c \Psi_{aa'c}^*)$$

$$+ \sum_{a=1}^{N_a} \sum_{a'=1}^{N_a} m_a m_{a'} \lambda_{aa'} + \sum_{c=1}^{N_c} \sum_{c'=1}^{N_c} m_c m_{c'} \lambda_{cc'}$$

Suyun aktivitesi:  $\ln(a_{H_2O}) = (-18.016/1000)(\sum m_i) \phi$

$$\ln \gamma_M = z^2 M^* F + \sum_{a=1}^{N_a} m_a (2B_{Ma}^* + ZC_{Ma}^*) + \sum_{c=1}^{N_c} m_c (2\Phi_{Mc}^* + \sum_{a=1}^{N_a} m_a \Psi_{Mca}^*)$$

$$+ \sum_{a=1}^{N_a} \sum_{a'=1}^{N_a} m_a m_{a'} \Psi_{aa'M}^* + k_M \left( \sum_{c=1}^{N_c} m_c m_a C_{ca} + \sum_{n=1}^{N_n} m_n (2\lambda_{nM}) \right)$$

$$\ln \gamma_X = z^2 X^* F + \sum_{c=1}^{N_c} m_c (2B_{cX}^* + ZC_{cX}^*) + \sum_{a=1}^{N_a} m_a (2\Phi_{Xa}^* + \sum_{c=1}^{N_c} m_c \Psi_{Xac}^*)$$

$$+ \sum_{c=1}^{N_c} \sum_{c'=1}^{N_c} m_c m_{c'} \Psi_{cc'X}^* + k_X \left( \sum_{a=1}^{N_a} m_a \sum_{c=1}^{N_c} m_c m_a C_{ca} + \sum_{n=1}^{N_n} m_n (2\lambda_{nX}) \right)$$

$$\ln \gamma_N = \sum_{c=1}^{N_c} m_c (2\lambda_{nc}) + \sum_{a=1}^{N_a} m_a (2\lambda_{na})$$

F ve Z nin tanımı:

$$F = -A^* \phi^{1/2} (1 + 1.2I^{1/2}) + (2/1.2) \ln(1 + 1.2I^{1/2}) + \sum_{c=1}^{N_c} \sum_{a=1}^{N_a} m_c m_a B_{ca}^*$$

$$+ \sum_{c=1}^{N_c} \sum_{c'=1}^{N_c} m_c m_{c'} \Phi_{cc'}^* + \sum_{a=1}^{N_a} \sum_{a'=1}^{N_a} m_a m_{a'} \Phi_{aa'}^*$$

$$Z = \sum k_j m_j$$

üçüncü satır soyun iyonik gücünü ( $I = 0.5 \sum m_i z_i^2$ ) ve dördüncü, satır da yüzde yük dengesi hatasını göstermektedir. Yük dengesi hatasını hesaplamada kullanılan formül şöyledir:

$$\text{Yük dengesi hatası} = 10Q^* \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^a \sum_{l=1}^k \sum_{m=1}^a \frac{z_i z_j z_l z_m}{V_i^{1/2} V_j^{1/2} V_l^{1/2} V_m^{1/2}}$$

Formülde k ve a sırasıyla toplam katyon ve anyon, sayılarıdır.  $m_i$  ve  $z_i$  sırasıyla bu iyonların molalite ve mutlak yük değerliklerini temsil etmektedir. Suyun pH değeri ve  $\text{CO}_2$  gazının logaritmik kısmî, basıncından sonra, hesaplanan serbest iyon molalite (MOLALİTE S), serbest, iyon aktivite katsayıları (GAMA S) ve serbest iyon aktiviteleri listelenmektedir. Bu değerlerden sonra son olarak da minerallerin, suya göre logaritmik doygunluk indeksleri sıralanmıştır.

Hesaplanan, indekser daha sonra çok değişik şekillerde amaca yönelik olarak değerlendirilebilir. Örneğin,, Tuz Gölü'ne ait be. ve diğer analizlere ait program çıktılan daha. sonra. Çamur ve Mutlu (1995) tarafından şe-

Çizelge 3. Pitzer denklemlerindeki  $B_{ij}^*$ ,  $B_{ij}^*$ ,  $B_{ij}^*$ ,  $c_j^*$ ,  $\Psi_{ij}^*$  ve  $\Psi_{ij}^*$  değişken katsayılarının tanımı, Katsayılara ilişkin  $B^* M^* B^* W^* B^* B^* \% C \setminus IX$ , \*  $\Psi$  ve  $K$ , değerleri Çizelge 1. 2 de listelenmiştir.

**TEK ELEKTROTTLAR İÇİN İKİNCİL DEĞİŞKEN KATSAYILAR**

$$B_{MX}^* = \beta_{MX}^0 + \beta_{MX}^1 \exp(-\alpha_{MX} I^{1/2}) + \beta_{MX}^2 \exp(-12 I^{1/2})$$

$$B_{MX} = \beta_{MX}^0 + \beta_{MX}^1 (\alpha_{MX} I^{1/2}) + \beta_{MX}^2 \exp(-12 I^{1/2})$$

$$B_{MX}^1 = \beta_{MX}^1 \exp(-\alpha_{MX} I^{1/2}) / I + \beta_{MX}^2 \exp(-12 I^{1/2}) / I$$

g ve g' fonksiyonları aşağıda verilen denklemlerle çözülmüştür:

$$g(x) = 2(1-(1+x)e^{-x}) / x^2$$

$$g'(x) = -2(1-(1+x+5x^2)e^{-x}) / x^2$$

Fonksiyonlarda,  $x = \alpha_{MX} I^{1/2}$  veya  $12 I^{1/2}$  şeklindedir. Tek yükü elektrodlar için,  $\alpha_{MX}$  2 ye, daha yüksek yükü çiftler için ise 1.4 e eşittir.

**KARŞILIK ELEKTROTTLAR İÇİN İKİNCİL DEĞİŞKEN KATSAYILAR:**

$$\Phi_{ij} = \theta_{ij} + E_{ij}(I) + E_{ij}'(I)$$

$$\Phi_{ij} = \theta_{ij} + E_{ij}(I)$$

$$\Phi_{ij} = E_{ij}'(I)$$

i ve j katyon ve anyon çiftlerine karşılık gelmektedir. Elektrostatik simetri dışı karışım terimleri,  $E_{ij}(I)$  ve  $E_{ij}'(I)$ , aşağıdaki şekildedir:

$$E_{ij}(I) = (z_i z_j / 4^* I) (J(x_{ij}) - 0.5^* J(x_{ij}) - 5^* J(x_{ij}))$$

$$E_{ij}'(I) = (z_i z_j / 8^* I^2) (X_{ij} J(x_{ij}) - 0.5^* J(x_{ij}) - 5^* J(x_{ij})) - (E_{ij}(I) / I)$$

Denklemlerde,

$$J(x) = (x/4) - 1 + (1/x) \int (1 - \exp(-xy)) e^{-y} y^2 dy$$

$$J'(x) = 0.25 - (1/x^2) \int (1 - (1+(xy)e^{-y}) \exp(-xy) e^{-y}) y^2 dy$$

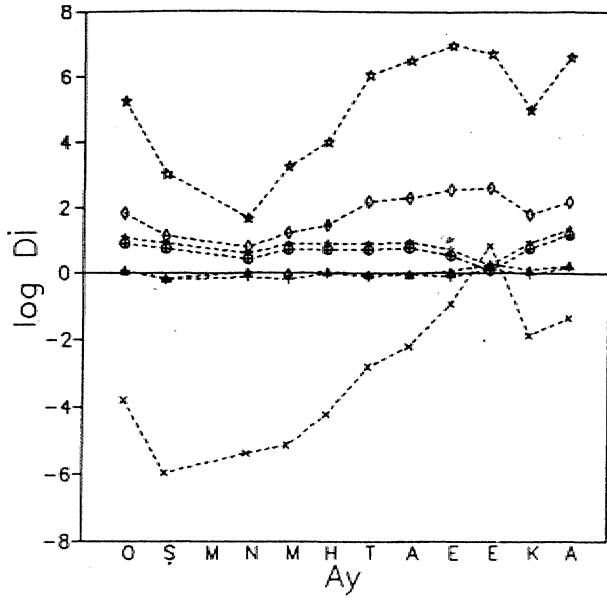
$$x_{ij} = 6 z_i z_j A \phi^{1/2}$$

**ÜÇÜNCÜL DEĞİŞKEN KATSAYI:**

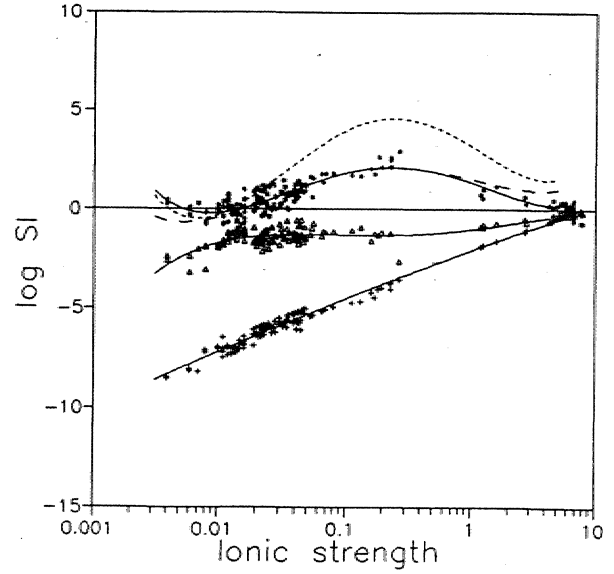
$$C_{MX} = C_{MX}^0 / 2 k_M^* x^{1/2}$$

killere' aktarılarak,, Tuz Gölü suyunun değişik mioerallene göre her aya, ait doygunluğu ortaya konmuş (Şekil 1) ve sonuçların gölden alınan çökel ömekleri ile pozitif korelasyon gösterdiği rapor<sup>1</sup> edilmiştir. Sonuçlar nihai olarak göl çökellerinde bulunan minerallerin kökenini araştırmada değerlendirilmiştir. Göl basenindeki bütün yüzey suları esas alan çalışmalarında ise, Çamur ve Mutlu (1996) göl suları Eio basenindeki sularla ilişkisini 'mineralojik açıdan ortaya koymak amacıyla yine doygunluk indeksi hesaplamaları sonuçlarını kullanmışlardır (Şekil 2), Program sonuçlarında verilen aktivite değerleri çözelti ortamındaki mineraller arası tepkimelerin değerlendirilmesi amacıyla da kullanılabilir. Bu ve benzeri uygulamalar konu ile ilgili çok çok makale ve kitap yayınlarında bulunabilir (örneğin; Noidstorm ve Munoz, 1986; Plummer ve diğ., 1994),,

Uygulamalarda PITDI programı sonuçlarının  $25^\circ\text{C}$  ve bir atmosfer termodinamik, denge durumunu esas aldığı unutulmamalıdır. PITDI sonuçlarının değerlendirilmesinden önce Mdrojeokimyasal sistemdeki denge durumunun geçerliliği, araştırılmalı ve sonuçlar ona göre yorumlanmalıdır.



Şekil 1. 7tfz Göl'ün yüzey sularının 25 V ve 1 atm. de halâ (ar-n), jips (üçgen), kalsit (altı - köşeli yıldız), haniit (beş - köşeli yıldız), polihalit (çarpım), aragonit (daire içi artı) ve manyezit (baklava dilimi) doygunluk indeksleri (Çamur ve Mutlu, 1995)



Şekil 2. Tuz Gölü basenindeki yüzey suların 25 °C ve 1 atm. de halâ (ar-n), jips (üçgen), kalsit (altı - köşeli yıldız), dolomit (kısa kesik çizgiler) ve manyezit (uzun kesik çizgiler) doygunluk indeksleri (Çamur ve Mutlu, 1996).

Çizelge 4. Serbest iyon konsantrasyon hesaplamalarında kullanılan tepkime ve kütle korunum denklemleri. Denklemlerde K..... harfi ile başlayan değişkenler, o bileşiğe ait tepkimenin  $\exp(-\Delta G^{\circ}_i / RT)$  değeridir.

Serbest bileşikler arasındaki konsantrasyon dağılımını belirleyen termodinamik ifadelerin tepkimleri:	
$H_2O = OH^- + H^+$	$Mg^{2+} + OH^- = MgOH^+$
$H^+ + SO_4^{2-} = HSO_4^-$	$Ca^{2+} + CO_3^{2-} = CaCO_3^0$
$Mg^{2+} + CO_3^{2-} = MgCO_3^0$	$CO_2^0 + H_2O = CO_3^{2-} + 2H^+$
$CO_3^{2-} + H^+ = HCO_3^-$	

Her bir toplam (T) konsantrasyonu esas alan kütle korunumuna dayalı denklemler:

$$m_{Ca}^T = m_{Ca^{2+}} + m_{CaCO_3^0}$$

$$m_{Mg}^T = m_{Mg^{2+}} + m_{MgOH^+} + m_{MgCO_3^0}$$

$$m_{Na}^T = m_{Na^+}$$

$$m_{K}^T = m_{K^+}$$

$$m_{SO_4}^T = m_{SO_4^{2-}} + m_{HSO_4^-}$$

$$m_{Cl}^T = m_{Cl^-}$$

$$\text{Alkalinite} = 2m_{CO_3^{2-}} + m_{HCO_3^-} + 2m_{CaCO_3^0} + 2m_{MgCO_3^0} + m_{OH^-} + m_{MgOH^+} - m_{H^+} - m_{HSO_4^-}$$

Tepkimelerin termodinamik ifadesi ve kütle korunum denklemleri sayısal bir çözüm için yeniden düzenlendiğinde:

$$m_{Na^+} = m_{Na}^T$$

$$m_{K^+} = m_{K}^T$$

$$m_{Cl^-} = m_{Cl}^T$$

$$m_{H^+} = a_{H^+} / \gamma_{H^+}$$

$$m_{OH^-} = (KH_2O \cdot a_{H_2O}) / (a_{H^+} \cdot \gamma_{OH^-})$$

$$m_{SO_4^{2-}} = m_{SO_4}^T / (1 + (KHSO_4 \cdot a_{H^+} \cdot \gamma_{SO_4^{2-}}) / (\gamma_{HSO_4^-}))$$

$$m_{HSO_4^-} = (KHSO_4 \cdot a_{H^+} \cdot \gamma_{SO_4^{2-}} \cdot \gamma_{SO_4^{2-}}) / (\gamma_{HSO_4^-})$$

$$m_{CO_3^{2-}} = (\text{Alkalinite} - 2m_{CaCO_3^0} - 2m_{MgCO_3^0} + m_{OH^-} + m_{MgOH^+} - m_{H^+} - m_{HSO_4^-}) / (2 + (KHCO_3 \cdot a_{H^+} \cdot \gamma_{CO_3^{2-}}) / (\gamma_{HCO_3^-}))$$

$$m_{HCO_3^-} = (KHCO_3 \cdot m_{CO_3^{2-}} \cdot \gamma_{CO_3^{2-}} \cdot a_{H^+}) / (\gamma_{HCO_3^-})$$

$$m_{Ca^{2+}} = m_{Ca}^T / (1 + (KCaCO_3 \cdot \gamma_{Ca^{2+}} \cdot m_{CO_3^{2-}} \cdot \gamma_{CO_3^{2-}}) / (\gamma_{CaCO_3^0}))$$

$$m_{Mg^{2+}} = m_{Mg}^T / (1 + ((KMgCO_3 \cdot \gamma_{Mg^{2+}} \cdot m_{CO_3^{2-}} \cdot \gamma_{CO_3^{2-}}) / (\gamma_{MgCO_3^0})) + ((KMgOH \cdot m_{Mg^{2+}} \cdot \gamma_{Mg^{2+}} \cdot m_{OH^-} \cdot \gamma_{OH^-}) / (\gamma_{MgOH^+})))$$

$$m_{MgOH^+} = (KMgOH \cdot m_{Mg^{2+}} \cdot \gamma_{Mg^{2+}} \cdot m_{OH^-} \cdot \gamma_{OH^-}) / (\gamma_{MgOH^+})$$

$$m_{CO_2^0} = (m_{CO_3^{2-}} \cdot \gamma_{CO_3^{2-}} \cdot a_{H^+}^2) / (KCO_2 \cdot a_{H_2O} \cdot \gamma_{CO_2^0})$$

$$m_{CaCO_3^0} = (KCaCO_3 \cdot m_{Ca^{2+}} \cdot \gamma_{Ca^{2+}} \cdot m_{CO_3^{2-}} \cdot \gamma_{CO_3^{2-}}) / (\gamma_{CaCO_3^0})$$

$$m_{MgCO_3^0} = (KMgCO_3 \cdot m_{Mg^{2+}} \cdot \gamma_{Mg^{2+}} \cdot m_{CO_3^{2-}} \cdot \gamma_{CO_3^{2-}}) / (\gamma_{MgCO_3^0})$$

Çizelge 5. Programın ekrana yansıyan çıktısı.

Tuz Gölü Mayıs İTERASYON 9					
İyonik güc= 5.790204					
Yük dengesi= 1.434361					
Suyun aktivitesi = .7845429					
pH= 7.34					
log pCO <sub>2</sub> =-2.405316					
	MOLALİTE S	GAMA S	AKTİVİTE		
Na+	5.108929	.9051347	4.624269		
K+	2.780982E-02	.4841076	1.346295E-02		
Ca++	2.654263E-02	.909281	2.413471E-02		
Mg++	.1353137	1.473225	.1993474		
MgOH+	1.202175E-05	.4387932	5.275061E-06		
H+	1.275607E-08	3.583298	4.57088E-08		
Cl-	5.439828	.966167	5.255783		
SO4-	8.836965E-02	2.017942E-02	1.783248E-03		
HSO4-	1.251992E-08	.6188855	7.748396E-09		
OH-	3.579113E-07	.4795583	1.716393E-07		
HCO3-	2.717661E-03	.3903254	1.060772E-03		
CO3--	5.184486E-05	2.050796E-02	1.063232E-06		
CO2o	4.725977E-05	2.847972	1.345945E-04		
CaCO3o	3.633041E-05	1	3.633041E-05		
MgCO3o	1.795721E-04	1	1.795721E-04		
DEVAM ETMEK İÇİN HERHANGİ BİR TUSA BASINIZ					
Log doygunluk indeksi					
ANHİDRİT	-4.096011E-03	APTİTALİT	-6.642399	ANTARKTİKİ	-4.951973
ARAGONİT	.6287317	ARKANİT	-4.714232	BİSKOVİT	-4.346849
BLOEDİT	-2.942482	BRİLSİTE	-3.346873	BURKEİTE	-203.616
KALSİT	.8154754	CaCİTETHİD	-6.314663	CaOKSİCİ A	-31.74477
CaOKSİCİ B	-211.1582	KARNALİT	-5.371991	DOLOMİT	2.818042
EPSOMİT	-2.305722	GAYLUSİT	-3.339996	GLAUBERİT	-5403192
JİPS	3.596465E-03	HALİT	-1.847271	HEKZAHİDRA	-2.446359
KAINİT	-4.722929	KALİSİNİT	-39.87804	KİYESERİT	-3.431872
LABİL TUZ	-1.742001	LEONİT	-6.382211	MANYEZİT	1.160047
MgOKSİCİ	-5.437513	MERKALİT	-4.415664	MİRABİLİT	-1.24476
MİSENİT	-67.44225	NAHKOLİT	-1.906319	NATRON	-4.872373
NESKLİHONİT-1	8.22896	PIKROMERİT	-6.244236	PIRSONİT	-3.201704
POLİHALİT	-5.138606	PORTLANDİT	-9.95831	K CO3	-12.90596
KESKİKİCO3	-46.13517	K Na CO3	-7.695533	K TRONA	-13.47138
SESKLİKİSO4	-14.90761	SESKLİNaSO4	-10.02814	NaCO3HEPİHİ	-4.92085
SİLVİT	-2.050083	SİNJENİT	-3.513638	TAKHİDRAT	-17.34284
TENARİT	-1.131204	TERMONATRİ	-5.230524	TRONA	-6.118652

## DEĞİNİLEN BELGELER

- Çamnr, M.Z. ve Mutlu, H., 1995., Tuz Gölü'ndeki mine rai çökeliiminin ternodinamik değeriendüümü: Türkiye Jeoloji Bülteni, 38,67-73.
- Çamur, MZ ve Mutlu, H., 1996. Major ion geochemistry and mineralogy of the Salt Lake (Tuz Gölü) Basin, Turkey: Chemical Geology, (basımda).
- Debye, P. ve Hückel, E., 1923» On the theory of electrolytes: Physik. Z., 24, 185 - 208.
- Gu.edd.ri, M., Monnin, C, Perret, D., Frilz, B., and Tardy, Y., 1983» Geochemistry of brines of the Chott el lend In southern Tunisia - Application of Pitzer's equations: Chemical Geology, 39» 165-178.
- Harvie, CE» Möller, N, and Weaie, JLL, 1984, The prediction, of mineral sotafoilit.les in natural waters: The Na - K - Mg - Ca - H - Cl - SO<sub>4</sub> - OH - HCQj - CÖ3 - CO<sub>2</sub> - H2O system to high ionic strength.» at 25°C: Geochim. Cosmochim. Acta, 48, 723 - 751.
- He, S. and Morse:, J.W., 1993., Prediction of halite, gypsum and anhydrite solubility In natural brines under subsurface conditions.: Computers. .and Geoscl» 19, 1 - 22.
- Heigeson, H.C, and David, H.K., 1974a., Therotical prediction of the- thermodynamic behaviour of aqueous, electrolytes at high pressures and temperatures: I. Summary of the thermodynamic / electrostatic properties of the solvent: Amer., Jour. Sei., 274,1089 - 1198.
- Heigeson, H.C. and David,, H.K., 1974b, Therotical prediction of the thermodynamic behaviour of aqueous electrolytes at high, pressures and. temperatures: II. Debye - Huckel parameters for activity coefficients and relative partial molal properties: Amer. Jour. Sei., 274, 1199 -1261.
- Heigeson, H.C. aed David, H.K., 1976,, Therotical prediction, of the tfaermodynamic behaviour of aqueous electrolytes, at high press.su.res and. temperatures: III. Equation of state for aqueous species at. infinite: dilution.: Amer. Jour» Sei.» 276,, 97 - 240.
- Heigeson, H.C, Delany, J.M., Nesbitt, H.W. and Dennis, K.B., 1978, Summary and. critique of the thermodynamic «properties of rock. - forming minerals: Amer., Jour. Sei., 278 - A,, 1-119.
- Heigeson,, H.C., Kirkham, D.H. aed Flowers,, G.C., 1981, Therotical prediction of the thermodynamic behaviour of aqueous, electrolytes at high pressures and temperatures: IV. Calculation of activity coefficients, osmotic coefficients,» and apparent molal .and standard, and relative partial molal properties to 600°C and. 5 kb: Amer., Jour. Sei., 281, 1249 - 1516.
- Johnson, I.W., Oelkers, E.H., and Heigeson, H.C.» 1991, SUPCRT 92: A. software package for' calculating the standard molal thermodynamic properties of minerals, gases, .aqueous species, and reactions from 1 to 5000 bars and 0° to 1000°C: Geological Society of America Short Course Manual, 50 s.
- Nordstorni» D.K. and Munoz, J.L., 1986, Geoch.enii.cal Thermodynamics: Blackwell Sei. Pub., 477 s.
- Pitzer, K.S.» 1973, Thermodynamics of Electrolytes: L 'Theoretical, basis, and general equations: Jour. Phys. Chem., 77,, 268-277.
- Pitzer, K.S., 1979, Theory: Ion Interaction, approach; R.D. Pytkowitcz (ed).. Activity coefficients, in electrolyte solutions, CRC Press»-» 157 - 208.
- Pitzer,, K.S., 1987, Thermodynamic model for aqueous, solutions of liquid - like density: I. S.E.. Carmichael and H.P. Engster (eels)» Tliernodynamic modelling of geological materials: Minerals, fluids and melts: Reviews in Mineralogy» 17, 97 - 142.
- Pitzer, K.S. and Moyarga, G., 1974,, Thennodynamics of electrolytes.. III. Activity and osmotic coefficients for 2:2 ekcuicytes: J. Solution. Chem., 3,539 - 546.,
- Pitzer, K.S. and Kim, J.J., 1974, Thennodynamics of electrolytes.. IV. Activity and. osmotic coefficients for mixed electrolytes: J. Am. Chem. Soc., v. 96,5701 - 5707.
- .Plummer» L.M., Jones, B.F. and Troesdell, A.H.,, 1976» WATEQF - A FORTRAN IV version of WATEQ a computer program, for calculating chemical equilibria, of natural aters: U.S.G.S. Water - .Resources Investigations Report, 76 - 13.
- Plummer,, L.N.. Prestemon, E.G. and Farkhrst, D.L., 1994» An inlcractice code (NETPATH) for modeling net geochemical reactions along a flow path: U.S.G.S. Water - Resources Investigations Report, 91 - 4078»
- Tmesdell, A.H., and Jones, B.F., 1974,, WATEQ: A computer program for calculating chemical, equilibria of natural waters: Journal of Research U.S.G.S., 2» 23.3 - 248.
- Weare, I.H., 1987, Models of mineral solubility in concentrated brines with application to field observations: I. S.E. Cam.Ich.ael and. H.P. Eugster (eds), Thermodynamic modeling; of geological materials: Minerals., Quids and melts: Reviews in Mineralogy, 17, 42 - 97.
- Whitfield, M., 1979, Activity coefficients In natural waters: In. R.D, Pytkowitcz (ed): Activiy coefficients In electrolyte solutions,, 2, 154 - 299.
- Wigley, T.M.L., 1977, WATSPEC: A computer program for determining the equilibrium, speciation of aqaoeous solutions,; Brit. Geomorph. Res. Group Tech. Bull., 20., 3 - 39.

## EKLER

## EK-I Program Hafckmda Bilgiler

Program QUICK BASIC'n microsoft versiyonu kullanılarak yazılmış hir -ana onüç alt-programdan oluşturmaktadır. Ana program termodinamik veriler ve model parametrelerini sırasıyla TERMODAT (Çizelge 1.1) ve PIT.DAT (Çizelge 1.2) dış ASCII dosyalarından okur. Dosyaların okunması komutunda dosyaların \*A\*\* sürücüsünde olduğu esas alınmıştır. Başka sürücüler için bu komutta ilgili değişiklikler yapılmalıdır. Toplam konsantrasyon değerleri Na, K, Ca, Mg, Cl, SO<sub>4</sub>, HCO<sub>3</sub>, COS .sırasıyla ana programda, ekrana nıg/1 veya mola-lite biriminden yazılmaktadır., Yazılan konsantrasyonların toplam değilde serbest iyon konsantrasyonları temsil ettiği düşünülüyorsa "Serbest iyon hesaplaması istiyormusunuz?" sorusuna "TT"veya "h" cevabını veriniz. Aksi takdirde "E" veya "e" yazınız.. Ana program ayrıca alt - programların ve iteras-yonların kontrolünü de yapmaktadır. Alt - programlar<sup>1</sup> ve işlevleri şöyledir:

ANYON; Anyonların aktif itelerini hesaplar.

ÇIKTI; Hesaplanan değerleri, belirli bir format içerisinde ekrana yansıtır.

Dİ; Doygunluk indeksini hesaplar.

FE; Elektrostatik simetri dışı karışım terimlerindeki "j"<sup>m</sup> fonks.ionla.nını hesaplar.

FFÜN; F fonksiyonunu hesaplar.

FLAP; Karışık anyonlar için .ikincil, değişken katsayılarını hesaplar.

FICP: Karışık, katyonlar için ikincil değişken katsayılarını hesaplar.

GFUN: Tek elektrotlar için ikincil değişken katsayılarla mevcut "g" fonksiyonlarını hesaplar.,

INTEG: Elektrostatik simetri dışı karışım, denklemlerindeki integralen Chebyshev polinomial yaklaşımları kullanılarak çözer.

KATYON: Katyonların aktivitelelerini hesaplar.

ÖSMD: Osmotik katsayı ve suyun, aklivitesini hesaplar.,

NÖTR: Yüksüz iyonların, aktivitelelerini hesaplar.

ZFE: Elektrostatik, simetri dışı kaosun terimlerini hesaplar.,

Program çalışırken her bir iterasyon sonucuna ait bilgiler ekrana yansır, Bir önceki iterasyon sonuçları ile takip eden iterasyon. sonuçları arasındaki farkların toplamı tolerans- değerinden (TOLER = 1E-08) az ise istenilen değerler hesaplanmıştır, nihai sonuçlar ekranda gözükür. Ekrana yansıyan sonuçlar uygulama, bölümünde açıklanmıştır. Eğer iterasyon sayısı ITMAX da belirtilen limiti geçerse ".iterasyon sayısı ITMAX ı geçti, çözüm yok" yazısı ekrana gelecektir. ÇIKTI alt-programındaki PRINT komutlarının başına L harfi eklenmek suretiyle (IPRJNT) çıktılar bir yazıcıya aktarılabilir. Eğer arzu edilirse sonuçları bir dosyaya, aktarmak için; ÇIKTI alt-programının başına OPEN "A:PITDLOUT" FOR OUTPUT ACCESS WRITE AS #3 Ye sonuna CLOSE #3 yazarak bu alt-programdaki her bir PRINT komutunun önüne #3, (PRINT #3) eklemek yeterlidir., Bu durumda PRINT "DEVAM ETMEK İÇİN HERHANGİ BİR TUŞA BASINIZ" ve DO LOOP WHILE INKEY\$="" komutlarını, iptal ediniz.. Daha sonra. "A" sürücüsünde oluşturulan, çıktı dosyası(PITDI.OUT) herhangi bir yazılım programı ile ekrana yansıtılabilir veya yazıcıya, aktarılabilir.

Çizelge 1.1. PITDI programı tarafından kullanılan TERMO.DAT dis dosyası.

```
*a\TW4-,"HSO4-","OH-","HC03-","HX>3-"  
*co^;oco3o";rwi@a33o"  
10S.6S 1,113.957,2233.183,468,25 ! .94,0  
ã2.9553Q0.306.,3Q4.942,63.435,236.75 ! .2t 2.944  
! 55.63.443;5.403;155  
"/MmKr/AFmALr/AMTARKT^ ARAGONIT,"ARKANIT,"BISKOVIT"  
* BLOEDr3RII5IE**BUiUCE*re**ICALSr,CaaIETH10**CaOKSlaA","CaOKS5Q B*  
"KaiwALrrrDOLoiVrrEPSQMr."CANiustCwYiBERi;itP*THA  
14EKZAHIDI"ICAINn\I(A)JSINnr/  
"MAiWzrr;"%OKSra"MirKALr,"MIRABILn","MISENr,TSIAMK^  
IT,"NATRON"  
"NESKyHONr,TiKiewEiOT","TisoNrr,"poLiHAir;roiATANDr,ittco3"  
"KSESKUCO3","K Na CO3"R TRDNA","SES;CUIKS04","SESKyNaS04","NaCO3HEPHr  
ILVr/Sr"ENr.TAKHIDRAr.TiNARDn".TERMONATRr.TRDNA"  
533.73.1057.05.893.65^455.17.53239.853; i; 1383.6.335.4;1449.4.455.6  
698.7.2658.45.778.4! .1020.3.871.99,1157.83.1360.5,1047.45.725.56,154.99  
ICi61.6.938.2.350.06.579.8.1751.45.1403.97.414.45.1029.6.417.57.147*.15  
3039.24.343.33.1382.78.095.3;1596.1,1073.1.2282.5;362.S2.577.37,2555.4  
1006.8.971.74^950.6.919.6.1094.95.164.84.1164.8.2015^9.312.35.518.8.9^60.38
```

Çizelge 1.2. PITDI programı tarafından kullanılan PITDAT dış dosyası.

```
*ETEÁ VERILER*  
01.925154014S14667.0628023320530852  
1.,-0.0600764777531,19,0462762985338493  
2.-0.029779077456514.O150044637187895  
3.-0.007299499690937,-0.028796057604906  
4.0.0C103B8a6f16a6404,-0XB655Z7459103f1  
5.0000636874599598^0001668087945272  
6.0.000036583601,823, 0006519840398744  
7.-0.00004503697S2O4.0.00! 130378079086  
8^00000453789571 0,-0.000687171310131  
9,0.000002937706971,-0.000242107641309  
10.O.OQCXM0396566462,OJ00Q87294451594  
t f^00000202099617,OJ0000346BZ12275!  
12.-QJ00C100H2SM7764H1-000004583768938  
13O.O000001.3S22ã10,-O.O00003548684306  
14.0.00000001 229405.^000000250453080 !  
15.-0.00000000821969,0.000000216991779  
16.^00000000030847,O0000000B0779570  
17.0.00000000046333,0X00000004558555  
TB.0^0000000001943^000000006944757  
19.-000Q0Q0a000)02563^J0Q0a000028492S7  
20.^100000000010991,0J000000000237S16  
TKL.ELEmOLII COZEHIT PARAM. DEGER"  
0J0765^2644AO00127  
0L0195B,1.113AA00497  
0.0454.0.398v0  
0J0664J0.2S3,0A0044  
  
0.0399,1.389,0.0.0044  
0.04835J0^112.0,-0^00084  
0.8499510.770310^  
-0.0003,0.1735,0,0  
0L1298j032j0j0.0041  
0.02.96,-0.01.3,0,-0.00e  
Q.1488.1>43A-O^0015  
0.3159,1.614A-O.00034  
Q.EJL1973^54.24b0  
0.2145.2J53A10  
-0.1747,-0.2303,-5.72,0  
0.4.2.977,0,0  
0J0AO  
0J6235..1.6815,0.,0.00519^  
0.221.3343,-37.23,0.025  
0.4746,t.729,0,0  
00QJO  
0J29.J0.6072AO  
a.o.0^  
-0.10J1.85a.,0;0  
0.0,00  
0.0,0,0  
0A0J0  
0J0J0J0  
0.0,0,0  
0.1775,0.2945,0.0.0008  
0.02.98.,0,0;0438  
0.2065,0J556J0g0  
0J0J0  
0.0,0,0  
0.0,0,0  
-KATK3N-NON KK ELEKTROHIT PARAM. DEGER"  
-0.012,-0.a01,-0.Q1,0,0,-0^003^O.O03  
0.07,-0.007,-0.055,0,0,0  
0.07,-0.012,-0.015,0,0,0  
0;0,0.,0,0,0  
0.036,-0.004,0,-0.0^129.OA0  
0.032,-0.025,0,0,0,-0  
0,-0.022,-0.O48.OA0,0  
0,0,0,0,0,0  
0.OOSv-0:€^1.0.,197.-0.0265,0,0.,0  
0.007,-0.012,0.024,0,0,-0  
0;a0,0,0,0i  
0.092v0.01 S.OA0,0,0  
0.D.O28,0v0A0  
0.10-O.OI/A-0.0178,0,,0,0  
0.O.O.O.O.O  
ANVOHIVON iki ELEKTROLIT PARAM. DEGER!  
0.02.0.00J4A-0.018>-Q.004,0,0  
-0.008,-0.006,0A0.O.O<0.1,3  
-0.05,-0.006,-0j0a6,-€0.025A0,0  
0.03,-a01 5.0v0,-0.096,0  
-0.OX0.0085:0:004.a.6,0y0  
0./0.094,-0.0617,-Q.-0M25 AO  
j.0.013,-0.009,-0.05AO,0,0  
0.01,-0.O05,0,0,-0J6Sj0j0  
0.02,-0v005,-0.009,0,0,0v0  
0.€0,0,0,0,0  
0,0,0,0,0,0  
0A0J0.OJ0J0  
0J0J0J0J0J0  
j0.10.-0.017,-0J0 10AO,0  
j-O.a4.,0.002,0,0-2.Q^0,0,0  
"N0mKATYDnN PAMMETRE DEGERLER!"  
0.1,0.051 Aia3Aia3,0^0  
0J0Mj0J0J0  
0.,0A0,0,0  
"NDir-ANYON PARAMETRE DEGERLER!"  
-0.005,0.097,-0.003,0,0,0  
0,0,0,0,0,0  
0.O.OAQJ0
```

```

EK-İL Pimi İügisasyaj Prıpgpm!
DIM BEHX6, 6), BETİ (6, 6), BET2{6, 6}, C0(6, 6)
. DIM THECCFC6, 6), HX1{6, 6, 6), İHEAAPfē» 6), FIM{6, 6, 6)
DIM NOTC(3, 6» NOTA{3, 6). AMI (21), AM2(21), KK{21)
DIM MAT(6), MCn6), MA(6), MC{6), MN(3), ZW6), ZX(6). WM(6), WX{6)
DM, CATK6). ANSC6), NOTS{3}» «23). W23). TEMA{6), TEMC{6)
DIM AMF(6), AXFC6), GMF(6)» OCF(6), ANF{3), GNF(3), NG{3)
DIM SK51), MINS{51). MG{6}» XG(6), MINGfSI), DGR(51). LOGK{51)
DIM .IAPf51) AS DOUBLE
SVA * 6: NC - 6: IW » 3: MM « Si
PRINT —●●—●●
PRINF -          FİTDİ
PRIOT *●
TONT ""* Dr. ML Zdkl Camur          Mayb. 1995
PRINT *● M.T.A. Gen. AAnd» Ankara
PRINT ●●—«●●.....●.....●.....●.....●.....●.....*—
' PIT DAT clW verileri oku
OPEN "A:PT.,Dar FOR INPUT ACCESS READ AS # İ
INPUT #1,DUMMYS
FORj«fTO21
    INPUT #1, KK@, AMI g), ,AM2f))
NEXT
INPUT ft. DUMMYS
FORC» 1 TONC
    FORA=1TONA
        INPUT #1, İETOFC, A), BETHfC, A), BET2fC, A), C0{C, A)
    NEXT
NEXT
INPUr#1,DJMMYS
FORC» 1TONC- 1
    FORCP-C+ İTO'NC
        INPUT # 1. THECCPC, CP)
        FORX»1TONC
            INPOT #1,. FDCKCCP.X)
    NEXT
NEXT
NEXT
INPUTf).DUMMYS
FORA«1TONA-1
    FOR AP « A + 1 TO MA
        INPUT # İ, TOEAAPCA, AP)
        FORM»1TONC
            INPUT #1,fİM(A,AP.M)
    NEXT
NEXT
NEXT
INPUT #1, DOMMYI
FORN»1TONN
    ,FORC=1TO'NC
        INPUT' #!,NOİC{RC)
    NOCT
NEXT
INPUT ft. DUMMV$
FORN- 1 .TO İW
    FORA« 1TONC
        INPUT f1. NOTA.(H.A)
    :NEXF
NEXT
CLC^E#1
' TERMO.DAT clW verileri oto
OPEN *A:İEİMO...DAT' FOR INPUT .ACCESS READ .AS #2
FORC» 1TONC
NEXT
FORA» İ TO MA
    INPUT #2. ANSCA)

```



```

NEXT
FORM« 1TONN
  INPUT *2,N0T$(N)
NEXT
JFORC- 1 TÖNC
  INPUT n, MGCQ
NEXT
FORA- I TONA,
  INPUT #2, XGCA) •
NEXT
FORN« 1TDNN
  INPUT#2,NG(N)
NEXT
FOR1« İ TO.MIN
  INPUT #2. MINS{D}
NEXT
FOR!«! TO MW
  INPUT #2» MIMÜÖ)
NEXT
CLOSE #2
FORC-» J.TONC
  :READZM<:Q,/WM{Q
NEXT
DATA 1,22.98851 » 1,39d9304J^40.Ce016.2,24.30724,l*4t 3 Î 42,1,1.OOB
FORA« f TONA
  İEAD* ZX(A). WXF A)
NEXT
DATA -135,4*23^2,96,0614,-1 SISMa Å 7.008,-1,61 -012&-2,60.024
PRINT : INPUT Tinten \*&&â 3»Wx ~>», ITHEI'
PP-0
FRİNF: İNPOT *mg/l tçp CD veyarımtiüe Uı ß)yttinfe->»; PP
FORC- 1TONC-2
  FEİNT
  PRINT CATSfQ: * :konsatÄasycm»y: ,glıttıfçf; "«->»: INPUT ; MCT(Q:
NEXT
FORA« 1TONA
  il A o 3 AND A <> 4 THEN
  PRINT
  PRINT ANKA); " kansantaayonmuu ^rinte"; "=>": İWOT ; MAT(A)İ
  END IF
NEXT
IF PP = 1 THEN:
  PRINT İ INPUT "5disyonun yogpuralngü {gfac veya kg/l) =>="; DENS
  IF DEMS: <- 0 THEN DENS '-1
  GMSOL - 1000 * DEİNS
  TDS « 0
  FORJ-tTONC
    TDS - IDS •+ CMCIç) / 1000): TOS - TOS + CMATç) / 1000)
  NEXT
  GMH2O « GMSOL -TOS
  FORJ-1T0NC
    MCİç) « MOTç) / WMfı / GMH2O
    MAİfı * MATç) / WXç) / OVtmO;
  NEXT
END IF
PRINT : INPUT "pH »<>"; PH; OLS
PRINT : INPUT "Serfaest fyon 'lesaplaması; isâyomusunuz? (E/H)«>"; DUMAS
IF DUMAS « •£' OR DUMAS « V İKEM DUMAS - "E"
IF DUMAS « "H" OR DUMAS * V THEN DUMAS « W
UMAX * 25; TOLER » 1E-0B
BGİ * 1.2: AG • .391: AH: « 10 ^ (-PH)
KW * 1E-14: KMGOH - 1S4.1700S«: KHS^O4 - 95.0605: JCHCO3 - 2.1.B27E+10
.KCACO3 * 141S..7938#: XMG003 « 847.22741*: ICCO3 » Z.1Q37E-17
Sayısai metod idn ilk tahminler
FORJ- İTO.NC
  GXFQ)* 1:<3MF(9* 1

```

```

NEXT
FORN * I TO MM
  GNKN > « İ
NEXT
FORJ » ! TO NC
  MAC « MAT@: MC(J) « M O ! )
NEXT
ACWAT « 1
TCAR - MAT{5} + 2 * MAT{6} 'alkaHnfte
FOR IHR « İTOTIJWVX
  PKINT "mMSYOU; İTER
  IF DUMAS « 'H * THEN
    MQ{t} « MCT{f}: MC{2} » MGT{2}: MC{3} « MCT{3}: MQ{4} » MO{y}Qa MC{5} * 0
    MC{6} » AH / GMF{6}: MA{1} » MAT{1}: MAB « MAT«: ,MA{3} « 0
    MA{4} « KW * ACWAT / AH / GXF{4}:MA{6} » TCAR - MA{4} + MC{6}
    MA{6} « MA{6} / (2 + {&HCÖ3 * GXFC6} * AH / GKF{5}))
    MA{5} » KHCO3 * MA{6} * GXF{6} * AH / OCRS)
    MN{1} - MA{6} * GXF{6} * AH * AH / KCO3 / ACWAT / GNF{1}: MN{2} = 0: MN{3} « 0
  ELSEIF DUMAS « "E" THEN
    MC{t} » MCT{1}: MQ{2} - MCT{2}:MC{6} * AH / CMF{6}: MA{!} « MAT{f}
    MAC2) - MATC2) / (I + (İCHSO4 * AH * QGR2) / GXR3»)
    MAB « KHSO4 * AH " MA{2} » GXF{2} / GXF{3}:MA{4} « KW * ACWAI / AH / GXf (4)
    MA{6} * TCAR - 2 * MN{2} - 2 * MN{3} - MA{4} - MC{5} + MQ{6} + MA{3}
    MA{6} m MA{6} / {2 + «KHCO3 * GXF{6} * AH / GXF{5}»)
    MA{5} » KHCO3 * MA{6} * GXF{6} * AH / GXF{5}
    MC{3} « MCK3) / {I + (KCACO3 * GMF{3} * MA{6} * QCFC6) / GNF{f}»)
    MC{4} « İ + (KMGOH * GMF{4} * MA{4} * GXF{4} / GMF{5})
    MC{4} - N1Q4) + (KMGCO3 * GMF{4} * MA{6} * OCF{6} / C3NF0»: MQ{4} « MCT{4} / MQ4J
    MCC5) » KMGOH * MC{4} * GİWC4) * MAC4» * QCR4) / GMF{S}
    MN{1} « MA{6} * GXF{6} * AH * AH / KCO3 / ACWKT / CNF1)
    MN{2} - KCACO3 * MC{3} * GMF{3} * MA{6} * Q0F{6} / GNF{2}
    MN{3} - KMQCO3 * MC{4} * GMF{4} * MA{6} * GXF{6} / GNF{3}
  END IF
SUMDIF - 0
FORJ « 1 TO 6
  DIFA » ABS(1EMA(J) - MA{f}): DIFC - ABSdEMCQ) » MCCJ): SIIMDIF « S'OMDIF + DIFA + DIFC
NEXT
PRINT "İterasyon toplam Farkı: SUMDf"
SUM » 0
FORJ « İ TONC
  d I - MC{f} * (ZM{J} ^ 2) 'I besapla
  Q2 « MAO) * (ZX{D} ^ » SUM « SUM + a t + C12
NEXT
I - .5 * SUM: SQİ « SQR{f}
PEINT *lyofilkgiic=";I
TOİ = 0; TO2 * 0 *yuk dengesini hesapla
FORJ « 1 TONC
  fit = MC{f} * ABCSZMP: TOI - TOI t BI : B2 « MA«) * ABSfZX{f}); TO2 » TO2 + B2
NEXT
CBE » CABS{f}TOI - TO2) / (TOt + TO2J) * 100
PRINT "Yuk dengesi"; CBE
GOSOBFFUN
GOSUB OSMO
.. IF DUMAS » "H" THEN
  PRINT ; TAB{20}; " GAMA T; TAB{35}; 'MOLALİİET
ELSEIF DUMAS « "E" THEN
  PRINT ; TAB{20}; " GAMA S"; TAB{35}; "MOLALİTE S"
END IF
GOSOB KATYON
GOSUB Am'ON
GOSUB NOTR
IF SUMDIF < TOLER THEN 'GOSUB DI
IF SUMDİF < TOLER THEN GOSUB CIKTİ
FORJ - 1 TO 6
  TEMACJ) = MA{f}: TEMC{J} * MC{J}
NEXT

```

```

NEXT
IF ITER>* UMAX THEN PRINT "Maximum terasın sayısl.geçi cazum yok*
END

FFUN:
PRINT T fonksiyonunu hesapByor..."
"Z denfctemi
SUMZ « 0
FOR)* 1 TO 6
  Zİ * JVSC0) * ABS(ZM(D) + MA© * ABSfZX(J): SUMZ. « SUMZ + ZI
NEXT
Z « SUMZ
'D-H
y = SQ1 / (1 + BG * SQ1):DD « (2 / BG) * LOGJI + EG # SQ1):FF « -AG * (y + DD)
T
FSUM1 = 0
FORC= I TO MC
  FORA= ITONA.
  KAT - C; ANİ « A
  GOSUB GFUN
  BCAP « CBETICC A) * GP1 / D + CBEXZCC, A) * GP2 / D)
  F5UM1 » FSUMf + (MA(A) * MCFQ • BCAP)
NEXT
NEXT
NEXT
FSUM2 « 0
FORC » ITONC - 1
  FORCP = C * ITONC
  ZFE1 « ZM(Q): ZFE2 « IM(CP)
  GOSUB ZFE
  ETHEPR « M(CQ * MQCP) * EIHEFR:FSUM2 - FSUM2 + ETHEPR
NEXT
NEXT
FSOWB « 0
FOR A « I TO NA - 1
  FORAP « A+- ITONA
  ZFEt « ZXCÁ): ZFE2 « ZX(AP)
  GOSUB ZFE
  ETHEPR » JVSA(A) * MAfAF) * ETHEPR:FSIIM3 = FSUM3 + ETHEPR
NEXT
NEXT
F » FF + FSUM1 • ¥ F5UM2 + FSUM3
:RETU:RN
END

OSMO:
PRINT "Suyun aklMteslnl hesapılıyor ...,*
OS1 - »AG / (1 + TC • SQ1)::OS1 « OS1 * IA /3 / 2):CE2 « 0
FORC= ITONC
  FORA- ITONA
  ALPH* 1.4'SQİ
  IF ABSZMCO) « İ ORABS(ZX(A)) » t THEN ALPU « 2 • SQİ
'BOCA = BETÖCC A) + BETKC A) * EXPt-ALPH) + BETZtC. A) * EXPC-12 * SQf)
  COCA * CÖCC, A) / (2 * SQR(ABS(ZM(Q * ZX(A))»
  OS2 - OS2 + .MACA) * MCCQ * (BOCA + (Z * COCA))
NEXT
NEXT
OS3 « 0
FORC » ITONC - 1.
  FORCP = C • ! TO MC
  ZFE1 - ZMCC): ZFE2 * ZMfCP)
  GOSUB ZFE
  DUM « C: JS - C: C « CPO531 * 0
  FORA « ITONA
  GOSUB HCP
  OS3! « OS31. +T3İ
NEXT

```

```

      IKAPO « THECC + ÖHE • I * EIHEİR
      C « DUM: OS3 « OS3 • MC « * MQCF) • {FICAP0 + QS3İ}
    NEXT
  NEXI
  ÖS4 = 0
  FORA« t TONA- t
    FORAP - A + 17ONA
    ZFE1 « ZX(A); ZFE2 « ZX(AP)
    GOSİBZFE
    DUM « A: X « A; A » AP: OS4İ « 0
    IORC - İTONC
    GOSUB İİAP
    OS4İ « OS4İ * T3!
    NEXT
    SCAFO - THEAA + EIHE + I * EIHEİR: A » DIM
    054 * OS4 + MA(A) * MA(AF) * (HCÄPO + OS4İ)
  NEXT
NEXT
055 « 0
FORN~tTONN
  FORC - İTONC
  055 « OS5 + MNKN) * MQCI * NOTQM, Q
  NEXT
ÄXT
056 « 0
FORN - İTONN
  FORA* İTONÄ
  056 « OS6 + MN(N) * MACA) * NOT AIM, A)
  NEXI
NEXT
OSSUM = 0
FORC» İTONC
  O55UM « OSSUM + MC(Q + MA(Q)
NEXT
OSMO - (2 / OSSUM) * (OS1 + OS2 + OS3 •+ OS4 • OS5 + OS6)
OSMO » I + OSMO; LNWAT * -OSMO * 18.0152 * O5SUM / 1000
ACWAT - EXP(LNWAT)
PRINT "Suyun akövitesî «» ACWAT
RETURN
END

KATYON:
FORM« İTONC
  IF DUMAS- « *WAM) M « 5 THEN 43
  SUM1 » 0
  FORA«* İTONA
    KAT » M: ANI * A
    GOSUB GRIN
    BMA - BOO(M, A) * BEİİ CM, A) * G1 + BEİ2(M, A) • G2
    CMA - CÖCM, A) / (2 * SQRIABSCZMCM) * ZX(A)»}
    T21 = MA(A) * (2 * BMA + (Z * CMA))
    SUM! - SUM1 + 121
  NEXT
  SUMS « 0
  FORC» İTONC
    SUM2 « 0
    FORA» İTONA
      ^GOSUB FKP
      SUM! « SUM2 + 131
    NEXİ
  : ZFEİ « ZMCM); ZFE2 « ZMİQ
  GOSUBZFE
  FICAPİ « MİHCİG + EİHEİ132 - MİQQ * B * HCAP + SÖM2):: SUM3 » SUM3 + T32
:NEXT
SUM4 - 0
FORA- İTONA- İ

```

```

FORAP* A + İTO-MA
14 İ » MA{A} • MA(AP) * FIMfA» AP, M):SÜM4 - SUM4 + T4I
NEXT
NEXT
SUMS « 0
FORC* HO MC.
FORA- İTO MA
CCA » aXC, A) / <2 * SCP{ABS{ZM{Q * ZX(A)}})
T5İ « MC(Q * MA(A) * CCA: SUIV3 - SUMS + T5İ
NEXT
.NEXT
SUM6 « 0
FORMAI TONN
SUM6 - SUM6 • MN(N) • 2 • MOIQN, M)
NEXT
LIMACC « C2MM)^ 2 • F) + SUM1 • SUM3 + SIM4 + CABSIZMOVI) * SUMS) + SUM6
GMF(M) - EXP&NACQ: AMFİM) * GMF{MJ+ MQM>
PRINT ; CATSCM; TAB(20); GMFFİM; IAB(35); MCCM)
•43 NEXT
RETÖIN
END

hmoH:
FGRX * İTÖ NC
İF DUMIAS - "H* AND X » 3 THEM .44
SUMf « 0
FORC* İIONC
KAT » C: AM « X
GÖSUB- C3FÜN
BXC « BEKXC X) + BETKC, X) * G1 + K12fC. X) * G2
OCC « aXC X) / £2 • SQİHAKCİXCX»- • ZM{Q»
T21 « M Q Q * (2 * BXC + • (1 * CXC)]; SUM1 « SUM1 + T2İ
NEXT
SUM3 « 0
FORA* 1 TONA
SUM2. = 0
FORC« 1 TONC
GOSUB FIAP
SUM2 »SUM2 t! 3 1
NEXT
ZFE1 » İXQih » E 2 « ZX.fA)
GOSUB ZFE
FICAP « TH;EAA + EİHE; T32 * MA(A) * (2 * FICAP + SUM2)
SUM3 - SUMS + 132
WOO"
SUM4 « Ü
FORC« 1 TONC - !
FORCP:«C+ 1 TONC
T41 » MC{Q * JVS,QCP) * FIXİfQ CP, X)
SÜM4 - SUM4 +141
NEXT
NEXT
SUMS » 0
FORC« 11 ONC
FORA« t TONA
CAC - OXe A) / (2 • SQKCASSCZXCA) • ZM(Q»)
T51 * MA(A) * MCCC) * CAC: SUMS « SUMS + 151
NEXT
NEXT
SUJVS6*0
FORN« 1 TONN
5UM6 - SUM6 + Pmm * 2 * NOTAK, X)
NEXT
LNACC = (ZXCX1 ^ 2 * F) + SÜM1 + SUIV3 + SUM4 + {ABSİZX(X)) * SUMS) ^ SUM6
GXFCX) « £XP(LNACQ : AXFQQ « GXFTO * MAPQ
PRINT ; AN$PC); TAB(20); GXF(X); TAB<3S)» MA(X)

```

```
44 NEXT
RETURN
END
```

NOIR:

```
FORM« tiONN
  IF PUMAS « Tf .AND' N o İ THEN RETURN
  SUM1 - 0
  FORC« 1TONC
    SUM! « SUM* + MCfQ • 2 * NÖTC« Q
  NEXT
  SÜVİ2 - 0
  FORA.« 1İÖNA
    SUM2 « SUMZ + MAf A) * 2 * NOTA(N. A)
  NEXT
  GNfM) - eceCSUMt + SUM2): ANf(N) - MN(M) • GNfM)
  PRINT ; NOTS(İS); TAB(2Q); GNfCW; TÄBC3S); MN(N)
NEXT
RETURN
END
```

ZFE:

```
XJ| = 6 • ZFE1 • ZFE2 * AG • SQI : XX = XJ: GOSIIB FE: FÜ - FE: FÜPR « FEPR
XII = 6 * (ZFE1 ^ 2) * AG * SQI : XX « XM: GÜ5UB FE: Fi « FE: FIFR » FEPR
X| « 6 * (ZFE2 ^ 2) * AG * SQI : XX - XJ: GOSUB FE: If * IE: FIPR - FEPR
EIHE » (ZFE1 * ZFE2 / (4 * Q) * (F| - .5 • HI - .5 * F|)
ETHEP1 - XII * HJPR - .5 * XII " FIPR - .5 * XJ| * EUPR
ETHEPR - f ETHE / 1) + (ZFE1 * ZFE2 / {8 * I* i} * EIHEPt
KETIIRN
.END
```

FE:

```
IF XX < 1 • THEN
  ZF - 4 * (XX * (1 / 5) - 2 : DZ « (4 / 5) * (XX ^ (-4 / 5)»
  COS«! 1NİİG
  FE * (XX / 4) - İ t .5 * « 1) - BOB 'JX
  FEPR - ,25 + .5 * DZ * « 1) « D«3» 'JXP
E.NDİF
JFXX>« 11HEN
  ZF - (4a/9) * (XX ^ C-1 / 10) - C22 / 9) : DZ « (-40 / 90) * (XX ^ (-1 / 10)»
  GÖSUB İMEG
  FE » (XX / 4) - 1 ÷ .5 • (B{t) - E{3} : FEPR - .25 + .5 • DZ * (D(t) - D(3)»
END IF
RETURN
END
```

İNİ1,G:

```
BC22 « 0: BC23) - 0: D(22) « 0; 0(23) « 0
FOR K* 23 TO 3 STEP -1
  IF XX < İ THEN
    İCK - 2) » ZF * BİC - 1) - BİC) + AMI « - 2): D(K - 2) - B{K - 1) + • ZF * D(K - 1) - D(K)
  END IF
  IFXX>»11HEN
    BCK - 2) » ZF * B(K - t) - BOO +.ÄM2CK - 2);DİK - 2) » B(R - 1) + ZF * DJK - 1) - D{K)
  END IF
NEXT
RETURN
END
```

GFUN;

```
XI « 1.4 * SQ!
IF ABSCZMOKAT) » İ OR ABSCZxfAM)) » 11HEN XI « 2 • SQI
X2 « 12 • SQJ:G1 » 2 • (İ - (1 + XI) * EXP(-XI)) / XI / XI
G2 « 2 * (1 - (İ + X2) * EXPC-X2) / X2 / X2
GP! » -2 * (1 - (1 + XI + • (XI * XI / 2) * EXPfXI)) / XI / XI
GP2 » -2 * (1 - (1 + X2 + GC2 * X2 / 2)) * EXP(-X2)) / X2 / X2
```

REIHEN  
END

IF M » t THEN  
  T31 - MA{A} • FIXUM, C, A) : THECC « THEOdHM. Q  
  RETURN  
END IF  
IFM»2THEN11                            \*  
  IF N<sub>i</sub> \* 3 THEN 12  
  1FM-4THEN13  
  1FM-5THEN14  
  1FM = 6THEN15  
11 IFC« 1THEN  
  T31 - MAIA) • FDCK1. 2, A): THECC « 1HECOY1. 2}  
  RETURN  
  ENDIF  
  T31 « MACA) • FIXUM. C, A): TKEOC = THECCF(M. C)  
  RETURN  
12 IFC<31HEN  
  T31 \* MACA) \* FIX t CC M» A): THECC - THECCP(C, M)  
  RETURN  
  ENDIF  
  T31 « MACA) • FDCKM, C A): THECC « THEGGP(M, C)  
  RETURN  
13 IFC<4THEN  
  T31 » MACA) • FIXifC., M. A): THECC « THECCP(C. M)  
  RETURN  
  ENDIF  
  T31 « MACA) \* FIX 1: CM, C A): THECC « THECCW1 Q  
  RETURN  
14 IFC<5THEN  
  T31 - MA(A) • HXtCC M, A): THECC - THECCP(C M)  
  RETURN  
  ENDIF  
  T31 « MACA) \* FIX! «M» C A): THECC « THEGCP(M, Q  
  RETURN  
15 IFC<6THEN  
  T31 \* MACA) \* FIXf (C M, A): THECC - THECCP(C, M)  
  RETURN  
  ENDIF  
  T31 « MACA) \* FDCtCM, C, A): THECC \* 1HEGCP(M\* Q  
  RETURN  
END

FIAP:

IFX» 1THEN  
  T31 - MC(C) \* FIM(X, A. Q : THEAA « IHtAAP(X\* A)  
  ICt1JRN  
ENDIF  
IFX-2THEN21  
IFX<31HEN22  
IFX = 4THEN23  
IFX-51HEN24  
IFX-6THEN2S  
21 IF A- 1 THEN  
  T31 » MQQ<sup>m</sup> HM(1. 2» C): THEAA - IHEAAPd. 2)  
  RETURN  
  ENDIF  
  T31 \* MCCC) \* FIMPC» A, O: THEAA. « THEAÄPCX, A)  
  RETURN  
22 IFA<3THEN  
  T31 « MCCC) \* FIMfA» X, C): THEAA - THEAAP{A, X)  
  RETURN  
  ENDIF  
  T31 - MQC) \* FMCX, A, Q: TOEAA. »THEAAPQC. A.)

```

RETURN
23 IFA<4THEN
  131 « MCCQ * HM(A, X, C); THEAA « THEAAPfA» X)
  RETURN
  END If
  131 - MOQ * FIM(X, A, C): ÎHEAA « THEAAPOC, A)
  RETURN
24 IFA<51H£N
  131: * MCCQ • HM(A, X, C): IHEAA, « THEAAP(A, X)
  RETURN
  END IF
  131 « MCCQ * FMCK. A. Q: TOEAA « IHEAAItX. A)
  REIUIN
25 IFA<61HEN
  T3I - MC(Q * İMIK X, Q: THEAA » IHEAAFfA, X)
  RETURN
  END IF
  İ3! = MC(Q * FIM{X, A, Q; IHEAA - THEAAPpC A)
  METURM
  END'

```

.Di:

WAT » 95,6635

```

DGR(1) « MG{3} + XG{2} - MING(1): DGi|2) « MG(1) + 3 * MCK2) + 2 • XG{2} - MiNG{2)
DGR(3) - MGC3) + 2 * XG{!} + 6 * WAT - MEMG(3):DGR£4) = Mû(3) + XGf{6} - MING{4)
DGEI5) « 2 * MG{2} + XG(2) - MING{5):DG&{6} - MG(4) + 2 • XGf f) + 6 * WAT - MING(6)
DGR(7) « 2 * MG(1) * MG{4} + 2 * XG(2) + 4 * WAT - MIWG{7)
DGR(8) - MGC4) + 2 * XG{4} - MINGC8):DGR(9) « 6 * MG(t) + 3 * XGC6) + • 2 * XQ(2) - MING(9)
DGİI10) * MG(3) + XGC6) - MSNG|IO):DGR(11 ) « MG(3) + 2 * XG{J) * 4 * WAT - MIWGfi 1)
DGRİ12) - 4 • MGC3) + 2 • XG{İ} + 6 * XG(4) + 13 • WAT - MING(12)
DGR(13) = 4 * MG(3) + 2 * XG(1) + 2 * XG{4) + WAT - MING«3)
DGEI14) « MG(2) + MQ4) + 3 * XG(1) + 6 * WAT - MİMG{14)
DGR(15) - MG(3) + MGC4) + 2 * XQ6) - MINGtl5):DGfi16) « MG{4) • XG(2) + 7 * WAT - MINQI6)
DGK17) « MG(3) + 2 * MG(1) + 2 * XG{6} + 5 ' WAT - MNG{17)
DGRC18) » 2 * MG(1) + MG<3) + 2 * XGf2) - I»İG{18>
DGK19) - MQ3) + XGC2) + 2 * WAT - MENG{19):DQR(2(n - MQ1) + XG(1) - MJNG{20)
DGR(2İ) = MG{4) + XG{2) + 6 * WAT - MING(2İ)
DGR(22) - MG(2) + MG{4) + XG(t) + XG(2) + 3 * WAT - MNG{22)
DGW23) » MQ2) + XG(3) - MING(23):DGRC24) = MG{4) 4 XG{2) + WAT - MING(24)
DGR(25) « 4 * Mat) + MG{3) + 3 * XG(2) + 2 * WAT - MING{25)
DGR(26) - 2 * MG{2) + MG{4) + 2 * XG{2) + 4 * WAT - JVUNG(26):DGR£27) » MG(4) + XG{6) - MINGC27)
DGI128) - 2 • MG{4} + XG{1) + 3£ XG(4) + 4 * WAT - JWWGC28)
DGRİ29) - MG(1) + XG{3) - MINQ(29):DGR(30) - 2 * MG(1) 4- XG{2) * 10' * WAT « MING(30)
DGR(31) - 8 • MGC2) + 6 ' MG{6) + 7 * XG(2) - İWİMG(31):DGR£32) « MG(1) + XG{5) - MNG(32)
SXiR33) - 2 * MG(1) + XG(6) + 10 * WAT - MINGC33):DGE£34) » MG(4) + • XG(6) + 3 ^ WAT - MIMGC34)
DGR(3S) « 2 * MG{2) + MG{4) + 2 * XGR) + 6 * WAT - MING{3S)
DGW36) - 2 * MGCl) + MG{3) + 2 * XG(6) + 2 * WAT - MNa36)
DGK137) « 2 * MGC2) + MQ4) + 2 * MG«3) + 4 * XQ2) + 2 * WAT - MJNG{37)
DGR(38) « MQ3) + 2 * XG(4) - JvİWG38):DGRB9) « 2 * MG(2) + XGC6) + 1.5 * WAT - MING{39)
DGRİ40) - 8 * JSGC2) + 4 * MG(6) + 6 * XG{6) + 3 ^ WAT - MİNG(40)
DGR(41) = MQ2) + MG(1) + XG(6) + 6" WAT - MING(41 )
DGRİ42) - 2 * MGC2) + MG{1) + MQf6) + 2 * XG{6) + 2 * WAT - MINGC42)
DGK(43) « 3 • MG{2) + MQ6) + 2 * XG{2) - MINa43):DGR44) « 3 * MG(1) + MG(6) + 2 * XGC2) -
MINGI44)
DGRC45) « 2 • JMGCl) + XG{6) + 7 * WAT - MING(45):DC»(46) » MG(2) + XG(1) - .MİNG(«)
DG:R47) « 2 * MG{2) + MG(3) + 2 ^ XG(2) + WAT-MINGC47)
DGR(4B) - 2 * MG(4) + MG(3) • 6 * XCKD + 12 * WAT- MING(4Q)
DGR(49) » 2 * MG{1} + XG(2) - MtNGf49)::DGR50) « 2 * MG{1) + XG(6) + WAT - İVUMG(5Q)
• DGRW51) » 3 * JVSai] • Mû(6) + 2 • XG(6) • + 2 * WAT - MING£5İJ
FORJ » !1İOMIN
LOG:K© » DGRİJ) / LOG(10)
NEXT
İAPC1) = AMFP) * AXF(2):İAP(2)- » AMF(1) * AMF{2) ^ 3 * AXF{2) ^ 2
İAP0) « AMFC3) * AXRt) ^ 2 * ACW.AT ^ 6:İAP(4) « AMFC3) * AXF(6)
İAPC5) * AMF(2) ^ 2 * ÄXF{2):İAF(6) « AAAF{4) * AXF(i) ^ 2 * ACWAT ^ 6
İAP{?) - AMF(1) ^ 2 * AMF(4) * AXF(2) ^ 2 * ACWAT ^ 4:İAPC8) - AMF(4) * AXF<4) ^ 2

```



```

IAP(9) • AMF(1) ^ 6 • AXF(6) ^ 3 • AXF(2) ^ 2 : IAP(10J) « AMF(3) * AXF(6)
IAP(t 1) » AMF(3) • AXR1 ^ 2 * ACWAT ^ 4 : IAP(1Z) « AMF(0) ^ 4 * AXF(1) ^ 2 * AXF(4) ^ 6 * ACWAT
^ 13
-IAP(13) « AMF(3) ^ 4 * AXF(t) ^ 2 * AXF(4) ^ 2 * ACWAT
IAPC141 » AMF(2) * AMF(4) ' AXF(1) ^ 3 * ACWAT ^ 6 : IAPf5) « AMF(3) * AMF(4) ' AXF(6) ^ 2
IAP(16) « AMF(4) * AXF(2) * ACWAT ^ 7 : IAPfT) « AMF(3) * AMF(1) ^ 2 * AXF(6) ^ 2 * ACWAT ^ 5
IAPff8) » AMF(1) ^ 2 * AMF(3) * AXF(2) ^ 2 : IAPf9) « AMF(3) * AXF(2) * ACWAT ^ 2
IAP(2G) « AMF(1) • AXF(1) : IAP(21) = AMF(4) • AXR2İ * ACWAT ^ 6
İAP(22) - AMF(2) • AMf(4) * AXF(1) * AXF(2) * ACWAT ^ 3 : IAP(23) « AMF(2) * AXF(3)
IAP(24) « AMF(4) * AXF(2) * ACWAT : MK25) - AMRt) ^ 4 * AJVS(3) * AXF(2) ^ 3 * ACWAT ^ 2
IAP(26) = AMF(2) ^ 2 * AMF(4) * AXF(2) ^ 2 * ACWAT ^ 4 : IAP(27) = AMF(4) * AXF(6)
IAPC28) » AMF(4) ^ 2 * AXF(1) ' AXF(4) ^ 3 * ACWAT ^ 4 : IAP(29) - AMF(1) * AXF(3)
IAP00) » AMFCi, ^ 2 * AXF12) * ACWAT ^ 10 : IAP(31) « AMF(2) ^ 8 # AMF(6) ^ 6 • AXF(2) ^ 7
IAP(32) » AMR1) * AXfC5) : IAP(33) « AMF(1) ^ 2 * AXF(6) * ACWAT ^ 10
IAP(34) « AMF(4) * AXFC6) • ACWAT ^ 3 : WF(35) - AMF(2) ^ 2 • AMF(4) * AXF(2) ^ 2 * ACWAT ^ 6
IAF(36) » AMF(!) ^ 2 * AMR3) * AXFC6) ^ 2 * ACWAT ^ 2
IAP07) « AMF(2) ^ 2 * AMF(4) * AMF(3) ^ 2 ' AXR2) ^ 4 * ACWAT ^ 2
MPC38) m AMF(3) * AXF(4) ^ 2 : IAP(39) = • AMF(2) ^ 2 • AXR6) # ACWAT ^ 1.5
IAFC4Ö) m AMF(2) ^ 8 * AMF(6) ^ 4 * AXF(6) ^ 6 * ACWAT ^ 3
IAP(41) - AMF(2) • AMF(1) * AXF(6) * ACWAT ^ 6
: IAP(42) « AMF(2) ^ 2 * AMF(1) * AMF(6) * AXF(6) ^ 2 * ACWAT ^ 2
IAPC43) m AMF(2) ^ 3 * AMF(6) * AXF(2) ^ 2 : IAP(44) « AiW(1) ^ 3 • AMF(0) • AXF(2) ^ 2
IAP(45) « AMF(1) ^ 2 * AXF(6) * ACWAT ^ 7 : IAP(46) » AMF(2) • AXF(1)
IAP(47) « AMF(2) ^ 2 • AMF(3) * AXF(2) ^ 2 • ACWAT
IAP(48) = AMF(4) ^ 2 • AMF(3) # AXF(1) ^ 6 • ACWAT ^ 12 : IAP(49) » AMF(f) ^ 2 * AXF(2)
IAP(50) = AMF(1) ^ 2 * AXF(6) * ACWAT : IAPfSI) « AMF(1) ^ 3 * AMF(6) * AXF(6) ^ 2 * ACWAT ^ 2
TORJ» 1 TO MOM

```

```

iAP(P « LOGOAPI) / LQGC1Ö); SİfJ) » IAPQ) - LOGKQ)

```

```

NEXJ
RETURN
END

```

CIKH:

'Sonudaii ekrana aktar

PCO2 = LOG(MN(1) \* GNF(1) / .0,34225) / LOQIOJ^iINT TILLES

PMNT TCRASYON\*; fTER:PMNT "İyonik gpc="; I

PUNT "Yük dengesi^"; CBE:PfINT "Suyun akEMted-"; ACWAT

PRINT "pH<"; PH;PRIMI log pCO2<; PCO2

IF DUMAS • "E" THEN

PRINT ; TAB(7); •MOLALTIE S"; TAB(22); "GAMA S"; TAB(36); "AKTMİF

ELSöf DUMAS = "H" İHEN

PMNT ; TAB(7); \*MOLALTIİ T; TAB(22); "GAMATs TAB(36); "AKİMİE"

END IF

FORM » 1TDNC

IF DUMAS « "H" .AND M » 5 THEN 33

PRİMT ; CATKM); TAB(7>); MC(M); TABf.22); CMF(Mk TAB<3e>; AMKM)

33 NEXT

FORX\* 1TONA

If DUMAS- «= "H" AND X = 3 THEN 34

PMNT ; AMSCX); TAB(7); ,MA(X); TAB(22); GXF(X); TAB(36); AXF(X)

,34 .recr

FORN- 1TONN

IF DUMAS \* "H" AND N <> 1 THEN 35

PRINT ; MOTs<; TAE(7); MN(N); TAB(22); CMFOT; TAB(36); ANF(N)

35 NEXT

PRINT "DEVAM ETMEK İON HERHANGİ BJRTUSA BASINIZ"

DO: LOOP WHILE INKEYS - ^CLS

PUNT "Log doygunluk IndeksT

RDRI-1TOMDM

PİİMT MOMSO); TAB» I); Sİ(I); TABOO); MIMSİ + 1); TAB(36); Sİ(I + 1);

PRINT TAB(49); MINSd + 2); TAB(60); Sİ(I + 2); I « İ + 2

NEXT

END